

МАСШТАБИРОВАНИЕ КВАДРАТНЫХ РЕШЕТОК С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНО ШИРОКИМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ КОНДАКТАНСОВ СВЯЗЕЙ

О. А. Ткаченко¹, В. А. Ткаченко^{1,2}

¹ *Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, 630090, Новосибирск*

² *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 004.942:537.311.322-0.22.532:537.29+538.911:530.145

Методом конечного скейлинга исследованы небольшие квадратные решетки случайных сопротивлений. Распределения кондактансов связей $g_i(x_i)$, где $x_i \in [0, 1]$ — случайные числа, i — номер связи, включают экспоненциально широкое $g_i = \exp(-kx_i)$ и комбинированное: в виде константы, переходящей в экспоненту при $x_i > x_0$. Наиболее интересные случаи относятся к $0.4 < x_0 < 0.5$, допускающие численные расчеты с $k = 100 - 200$. Комбинированные распределения возникают в полупроводниковых решетках антиточек, в которых часть связей открыта для прохождения электронов, а часть находится в туннельном режиме. Выяснено, что при $x_0 = 0$ средние по реализациям беспорядка проводимость и сопротивление квадратной решетки ведут себя при малых линейных размерах L пропорционально L^{-n} с разными показателями n . При $x_0 \neq 0$ эти зависимости становятся более сложными, как в случайных решетках с тремя типами локальных сопротивлений. Результаты объясняются в рамках концепции критических подсеток и критического элемента решетки.

Ключевые слова: квадратная решетка, экспоненциальное распределение, конечный скейлинг, законы Кирхгофа, метод Монте-Карло, перколяция, критический индекс проводимости, численное моделирование.

Введение

Решетки с экспоненциально широкими распределениями сопротивлений связей являются базовыми моделями многих разупорядоченных естественных [1, 2] и искусственных [3, 4, 5] систем, а конечный скейлинг (масштабирование) является одним из основных способов численного изучения беспорядка [6, 7, 8, 9, 10]. Этот метод подразумевает расчеты характеристик небольших систем с усреднением по реализациям беспорядка и изменением линейного размера систем L , например, зависимостей проводимости $\langle G \rangle(L)$. Решетки описываются распределениями кондактансов связей $g_i = F(x_i)$, где i — номер связи, $x_i \in [0, 1]$ — случайные равномерно распределенные числа.

Ранее данным методом исследовались системы на пороге перколяции для нахождения критических, в том числе неуниверсальных, индексов проводимости t , отвечающих масштабно-инвариантному поведению (скейлингу) $\langle G \rangle(L) \propto L^{-t/\nu}$ [6] при $L < R$, где $\nu = 4/3$ — универсальный критический индекс перколяционного радиуса корреляции R в 2D системах. Дополнительно к средней проводимости вычислялось среднее сопротивление $\langle 1/G \rangle(L)$ перколирующих систем [6, 10]. Для квадратных решеток с бинарным распределением связей было найдено, что среднее сопротивление ведет себя как $L^{t/\nu}$, $t = 1.3$, т.е. противоположно поведению средней проводимости. То же самое сообщалось о перколяции в случае степенного распределения кондактанса связей, когда критический индекс проводимости становился неуниверсальным ($t > 1.3$) [6]. Однако в [7] отмечено, что расчет $\langle 1/G \rangle(L)$ не надежен из-за наличия в степенном распределении сколь угодно малых кондактансов связей $g_i \neq 0$.

Хотя в решетках с экспоненциальным разбросом кондактансов $F(x) = \exp(-kx)$ с $x \in [0, 1]$ и $k \gg 1$ все связи являются проводящими, для вычисления проводимости использовалась теория перколяции. По этой теории для каждой реализации беспорядка, задаваемой вектором $\{x_i\}$, существует критический элемент i_c , отвечающий небольшому изменению кондактанса решетки при удалении связей с $x_i > x_c = x(i_c)$.

Но если удалить в том числе и критический элемент $x_i \geq x_c$, то кондактанс решетки обратится в ноль [1]. Таким образом, кондактанс всей решетки с точностью до коэффициента определяется кондактансом критической связи $g_c = g(x_c)$. Кроме того, было показано, что среда с экспоненциально широким разбросом характеризуется конечной длиной корреляции, которую мы будем называть по аналогии с работой [8] длиной беспорядка $L_D = bk^\nu$, $\nu = 4/3$. При $L \gg L_D$ флуктуации проводимости уменьшаются $k\delta x_c \ll 1$, и кондактанс решетки перестает зависеть от реализации беспорядка, приближаясь к макроскопической проводимости: $G \rightarrow G_e$. В настоящей работе мы рассматриваем только задачу связей на квадратной решетках, в этом случае $G_e = \exp(-0.5k)$. Выход на константу G_e аналогичен поведению кондактанса обычных решеток с бинарным распределением локальных кондактансов типа 0-1, когда концентрация проводящих связей p больше пороговой и радиус корреляции R имеет уже конечное значение: $R = l_0/|p - 0.5|^\nu$, $L \gg R$.

В работе [8], где исследовались квадратные решетки с экспоненциальным распределением кондактансов связей, было найдено, что при $L < L_D$ распределение сопротивления решеток похоже на лог-нормальное, и выписана простая формула для зависимости моментов этого распределения от (L, k) . Согласно этой формуле $\langle G(L/L_D) \rangle / G_e = G_e / \langle G(L/L_D) \rangle$, т.е. средняя проводимость и среднее сопротивление с изменением L ведут себя одинаково. Это предсказание не проверялось, и численно эти зависимости не сравнивались.

В настоящей работе методом конечного скейлинга мы ищем поведение $\langle G \rangle(L)$ и $\langle 1/G \rangle(L)$ в случае экспоненциальных и комбинированных распределений вида: $F = 1$ при $0 \leq x < x_0 < 0.5$ и $F = \exp(k(x_0 - x))$ при $x_0 < x < 1$. В случае $x_0 > 0$ часть связей $0 < x < x_0$ находится в открытом режиме, а остальные в туннельном. Такие распределения с $k \gg 1$ имитируют, например, квадратные решетки антиотчек в полупроводниковом двумерном электронном газе [4, 5]. Реализации беспорядка (вектор $\{x_i\}$) выбираются методом Монте-Карло, а значения G находятся решением уравнений Кирхгофа. Выясняется, что в случае экспоненциального распределения ($x_0 = 0$) $\langle G \rangle(L)$ и $\langle 1/G \rangle(L)$ при малых $L < L_0$ становятся степенными функциями, с показателями $-n$, где, соответственно, $n \approx k/5$ и $n \approx k/6$. Переход от $x_0 = 0$ к $x_0 \approx 0.4$ расширяет диапазон допустимых в численных расчетах значений k с 50 до 200. При больших k отрезок $L < L_D$ имеет два участка, на которых $\langle G \rangle(L)$ приближается степенными функциями с немного разными n . Найденное поведение при малых L проверяется модельным расчетом $\langle g(x_c) \rangle(L)$ и $\langle 1/g(x_c) \rangle(L)$, где x_c — критический элемент, отвечающий обращению кондактанса решетки G в ноль после разрыва всех связей с $x_i \geq x_c$. Для этой проверки используется распределение $P(x_c)$, одинаковое для всех распределений кондактансов связей. Расчет $\langle 1/g(x_c) \rangle(L)$ прогнозируется поведение среднего сопротивления решетки $\langle 1/G \rangle(L)$, когда последнее не удастся вычислить из-за сильных флуктуаций g_i и G при больших k .

1 Методы моделирования и тестовые расчеты

Основой универсального моделирования 2D решеток сопротивлений является использование законов Кирхгофа для расчета полного тока I , когда известны все кондактансы межузельных связей g_i (i — номер связи) и малое напряжение V , которое приложено к противоположным сторонам решетки. Наша решетка представляет собой матрицу из L строк и $L + 1$ столбцов. Потенциалы 0 и V задаются в узлах первого и последнего ($L + 1$ -ого) столбцах. Очевидно, при $g_i = g$ кондактанс (проводимость) решетки $G \equiv I/V$ совпадает с g при любом $L > 1$. Мы изменяем размер решетки, начиная с $L = 4$. Решетки со случайным разбросом g_i описываются распределениями $g_i = F(x_i)$, где $x_i \in [0, 1]$ — случайные равномерно распределенные числа, $F(x)$ — заданная функция. Мы считаем, что максимальные значения F порядка 1, минимальные значения локальных кондактансов ограничиваем снизу значением 10^{-15} (расчеты с двойной точностью), полагая, что все связи, хотя бы слабо, но проводят. Такой подход позволяет определять достаточно надежно среднюю проводимость решеток, поскольку самые низкие проводимости практически не дают вклада. Обратная ситуация возникает при определении среднего сопротивления, которое можно получить без обрезания связей лишь для $k \leq 35$.

Ясно, что при любых, но особенно при малых L , проводимость решетки $G = I/V$, найденная решением уравнений Кирхгофа, сильно зависит от реализаций беспорядка, задаваемых вектором случайных чисел $\{x_i\}$. Тем не менее, усредненная по множеству этих векторов проводимость $\langle G \rangle$ при фиксированном L становится закономерной величиной, ее можно считать средним свойством квадратных фрагментов одинакового размера макроскопически однородной бесконечной решетки. Это свойство уже не зависит от выбора случайных значений x_i , но зависит от L и вида функции $F(x)$. На практике перебор векторов $\{x_i\}$ методом Монте-Карло дает лишь репрезентативную выборку из бесконечного числа возможностей. «Непроводящие» конфигурации при нахождении $\langle G \rangle$ отбрасываются (для решеток на пороге перколяции доля таких конфигураций близка к половине).

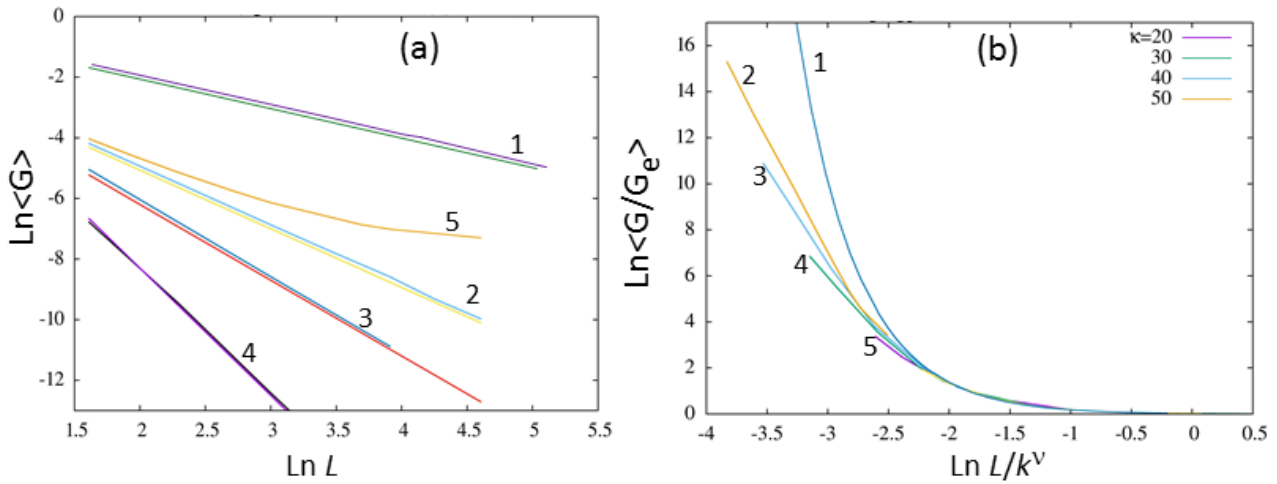


Рис. 1: (a) — Зависимости средней проводимости квадратных решеток при перколяции в случаях бинарного (линия 1) и степенных (линии 2–5) распределений кондактансов связей в решетках: линиям 2–4, отвечают $m = 2.5, 3.5$ и 6 . Для этих случаев рядом с вычисленными линиями даны прямые $\ln G = (-t/\nu) \ln L + \text{const}$. Линия 5 отвечает $R \approx 30$. (b) — Зависимости $\langle G/G_e \rangle (L/k^\nu)$ для квадратных решеток в случае экспоненциального распределения $F(x) = \exp(-kx)$. Линии 2–5 — расчет для указанных k , линия 1 — теоретическая кривая для лог-нормального распределения сопротивления решеток (см. текст).

1.1 Участки масштабнo-инвариантного поведения $\langle G \rangle(L)$ при $L < R$ и $L < L_D$

Мы тестируем наш подход и программы, моделируя перколяцию в решетках с бинарным, либо степенными распределениями ($F(x) = 1$, либо $F = [2(0.5 - x)]^m$ при $x < 0.5$, иначе $F(x) = 0$). Результат показан на рис. 1а. Из него видно, что вычисленные зависимости $\langle G \rangle(L)$ в двойном логарифмическом масштабе являются прямыми линиями с наклоном $-n = -t/\nu$. Для бинарного распределения $n = 0.98$ и $t = 1.3$ — универсальное значение критического индекса проводимости для перколирующих 2D систем. Для степенного распределения с $m = 2.5$ критический индекс проводимости имеет неуниверсальное значение: $n = 1.934$ и $t = 2.58$, что совпадает с результатом из [6]. Для $m = 3.5$ и для $m = 6$ мы получили значения $t = 2.5\nu = 3.3$ и $t = 4.2\nu = 5.6$, соответственно. Для сравнения показана кривая проводимости для $m = 2.5$ при отходе от порога перколяции, когда интервал $F(x) \neq 0$ расширен до 0.54 и радиус корреляции вместо $R = \infty$ по оценке стал $R \approx 30$. Видно, что при больших $L > R$ проводимость $\langle G \rangle$ выходит на постоянное значение, а при малых стремится к степенной функции с прежним показателем $n = 1.934$. Изгиб кривой в двойном логарифмическом масштабе наблюдается в переходной области, когда размер решетки становится близким к R .

На рис. 1b показан результат проверки формулы $\ln \langle G/G_e \rangle = \mu^2/2$, $\mu \equiv bk^\nu/L$, $b \approx 0.2$, полученной в [8] для экспоненциальных распределений $F(x) = \exp(-kx)$. Фактически, это формула для минус 1-го (и 1-го) моментов от $P(\rho)$ в предположении, что распределение удельного сопротивления решеток ρ по случайным реализациям беспорядка является при таких $F(x)$ лог-нормальным: $P(\rho) = (\sqrt{2\pi}\mu\rho)^{-1} \exp(-\ln^2(G_e\rho/2\mu^2))$. Интегрирование по ρ для простоты проводилось от 0 до ∞ [8]. Из рис. 1 видно, что эта формула (линия 1) хорошо работает, когда $\ln \langle G/G_e \rangle < 2$ и $L > L_D = bk^\nu$, но при малых L линия 1 отрывается вверх от численных расчетов, и лучше работает приближение степенными зависимостями $\langle G \rangle(L) \propto L^{-n}$, причем $n \approx k/5$. На интервале $k \in [20, 50]$ значение n меняется от 4 до 10. Мы усматриваем здесь аналогию с поведением линий на рис. 1а для степенного распределения, причем длина беспорядка L_D на рис. 1b играет такую же роль, как конечный радиус корреляции R в случае линии 5 на рис. 1а.

Заметим, что участки степенной зависимости на рис. 1b являются короткими и даже при $k = 50$ размеры решетки не превышают $L_D = 37$. При $k < 15$ этот участок пропадает из-за малости $L_D \approx 7$, а моделировать решетки с $F(x) = \exp(-kx)$ при $k > 50$ не удастся из-за слишком малых значений g_i и G , физически значимая часть которых обрывается.

Далее проверяется, насколько устойчивым и закономерным является обнаруженное нами степенное поведение $\langle G \rangle(L)$. Прежде всего, на рис. 2а мы показываем, что решетки с обрезанным при $x > 0.5$ экспоненциальным распределением (на пороге перколяции) ведут себя при малых L точно так же, как и необрезанные.

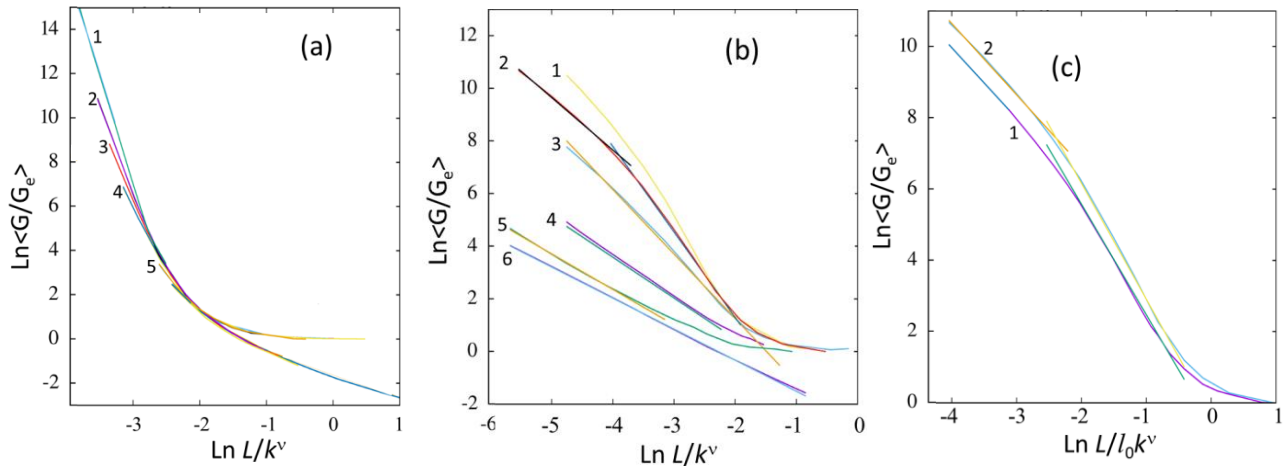


Рис. 2: (а) — Зависимости $\langle G/G_e \rangle (L/k^\nu)$ для квадратных решеток в случаях $F(x) = \exp(-kx)$, $x \in [0, 1]$ и обрезаемого ($F(x) = 0$ при $x > 0.5$) распределений. Номерам 1–5 отвечают, соответственно, $k=50, 40, 35, 30, 20$. Случай $k=35$ добавлен к тому, что было на рис. 1b. (b) — Зависимости $\langle G/G_e \rangle (L/k^\nu)$ для комбинированных распределений: $x_0 = 0.37$, $k = 100$ (линия 1), $x_0 = 0.43$, $k = 180$ (линия 2), $x_0 = 0.4$, $k = 100$ (линия 3), $x_0 = 0.43$, $k = 100$ (линия 4), $x_0 = 0.47$, $k = 200$ (линия 5), линия 6 отвечает обрезаемому распределению с $x_0 = 0.47$, $k = 200$. Рядом с линиями проведены подгоночные степенные зависимости. (с) — Зависимости $\langle G/G_e \rangle (L/L_D)$ для комбинированного (линия 2, $x_0 = 0.43$, $k = 180$) и одного из экспериментальных (линия 1) распределений контактансов связей, отвечающего подгонке к эксперименту [5]. В данном случае G_e есть усредненная по реализациям проводимость для наибольшего значения L . Подгоночные линии L^{-n} показывают скачок наклона в точке $L \approx 20$.

Видно, что линии в двойном логарифмическом масштабе при больших $L > L_D$ становятся прямыми и имеют одинаковый наклон, отвечающий $n \approx 1$. Эти линии были совмещены друг с другом простым вертикальным сдвигом. Наклон $n \approx 1$ типичен для решеток случайных сопротивлений с концентрацией проводящих связей 0.5, отвечающей порогу перколяции. При $L \leq L_D$ эти линии разошлись из-за различия k , но совпали с соответствующими линиями необрезанной решетки, выходящими на $\langle G/G_e \rangle = 1$ при $L \gg L_D$.

В случае обрезаемого распределения перколяционный радиус корреляции $R = \infty$ и в пределе больших $L > L_D$ выполняется $\langle G \rangle \propto L^{-t/\nu}$, где $t \approx \nu$, т.е. здесь критический индекс проводимости имеет почти универсальное значение, как при бинарном и некоторых степенных распределениях контактансов связей с $m < 2.5$. При малых $L < L_D$ наблюдается поведение $\langle G \rangle \propto L^{-n}$, где $n \approx k/5$, т.е. меняется от 4 до 10, но на кривых при $L \approx L_D$ есть изгиб, после которого $n \approx 1$. О похожем поведении $\langle G \rangle (L)$ сообщалось в работе [9], посвященной моделированию проводимости полимеров. Цепочки длиной $2 \leq n \leq 6$ размещались по связям квадратной решетки, причем их контактанс был равен 1. Часть связей между ними имели низкую проводимость $g_i = \alpha \ll 1$, например, $\alpha = 10^{-5}$. Остальные связи с $x_i > 0.5$ считались непроводящими. С изменением L на зависимости $\ln \langle G \rangle (\ln L)$ появлялся излом при $L \approx L_D$. Длина беспорядка L_D определялась долей связей с единичным контактансом. При $L > L_D$ значение $n \approx 1$ отвечало почти универсальному t . Более быстрому росту проводимости в области $L < L_D$ уделено мало внимания, но по нашей оценке наибольший показатель n в этой области был ~ 3 . Подобно нашему случаю, в такой перколирующей системе есть два характерных размера — радиус корреляции $R = \infty$, который определяется лишь геометрией кластеров из проводящих связей, и длина беспорядка L_D , определяемая видом распределения $F(x)$. Соответственно, для каждой кривой $\langle G \rangle (L)$ есть два значения критического индекса проводимости — универсальное и неуниверсальное.

На рис. 2b показан результат расчета для комбинированных распределений $F = 1$ при $0 \leq x < x_0 < 0.5$ и $F = \exp(k(x_0 - x))$ при $x_0 < x < 1$, $k \gg 1$. При $x_0 \geq 0.4$ показатель экспоненты k можно было увеличить до 200. При этом прогнозируемое $L_D \equiv 0.2k^\nu$ возрастало в несколько раз.

Реальность прогноза L_D на основе лишь значения k подтверждена тем, что переходное поведение на рис. 1b, 2a,b оказалось в одном и том же месте $\ln L/k^\nu \approx -2$. При этом на кривых 1, 2 из рис. 2b при $\ln L/k^\nu \approx -4$ замечен небольшой изгиб между двумя прямыми, приближающими ход $\ln \langle G \rangle (\ln L)$. Это связано с тем, что есть еще одна длина корреляции L_{D1} , связанная с долей единичных контактансов связей. Таким

образом, есть две длины беспорядка, которые могут либо сильно различаться, либо быть сопоставимыми. Изгиба нет для линий с номерами 3–6, участки степенного поведения являются достаточно длинными. По аналогии с поведением перколирующих систем на рис. 1а мы будем говорить о наблюдении в этих случаях неуниверсальных критических индексов проводимости. В целом на рис. 2b наклоны $-n$ приближающих прямых уменьшаются с 4 до 1.2 с ростом номера линии от 1 до 6. Последняя линия отвечает обрезанному распределению $F(x) = 0$ при $x > 0.5$. На ней не виден изгиб при $\ln L/k^\nu \approx -2$, который всегда был при обрезании чисто экспоненциальных распределений. Это объясняется близостью данного обрезанного комбинированного распределения к бинарному. Тем не менее, критический индекс проводимости 1.6 значительно отличается от универсального 1.3. Например, в [9] анализировался случай распределений, в котором проводящие связи имели два очень разных значения контактансов (1 и 10^{-5}). Когда доля высоких контактансов (аналог нашего x_0) увеличивалась, критический индекс проводимости менялся от 1.3 до 1.5 [9].

На рис. 2с мы сравниваем случай комбинированного распределения — кривая 2 с тем же номером, как на рис. 2b, и кривая 1, отвечающая реалистическому распределению кондактансов связей в системе антиточек, состоящему из двух экспонент — медленной и быстрой [5]. Видно, что ход зависимостей $\langle G \rangle(L)$ в этих случаях практически одинаковый. Интересно, что максимальное значение $n \approx 3$ для приближающей зависимости L^{-n} в этих случаях дает по формуле $n = t/\nu$ значение $t \approx 4$. Это близко к экспериментальному значению $\beta = 4$ при степенной подгонке затворной зависимости измеренной проводимости большой решетки антиточек 500×300 узлов [5]. Пока не ясно, насколько случайным или закономерным может быть это совпадение.

1.2 Конечный скейлинг сопротивления и распределение критических x_c

Как известно, картины тока в решетке с экспоненциально большим разбросом сопротивлений связей состоят, подобно решеткам на пороге перколяции, из хорошо выраженных одномерных путей [1, 8, 10, 11]. При небольших L для каждой реализации беспорядка такой путь единственный, хотя является извилистым в своей основной части и разветвленным на входе-выходе решетки. При большом разбросе кондактансов связей проводимость решетки, очевидно, определяется узким местом — элементом с наименьшим кондактансом g_c в неразветвленной части токового пути: $G \approx g_c$ [1]. Соответственно, удельное сопротивление есть $1/G \approx 1/g_c$. Совсем другая ситуация возникает в случае бинарного распределения связей с кондактансами 1, либо 0: сопротивление решетки определяется длиной l этой части извилистого пути (последовательное сопротивление связей, или $1/G \approx l$). Соответственно, проводимость есть $G \approx l^{-1}$. В данном случае методом конечного скейлинга с отбрасыванием непроводящих конфигураций $\{x_i\}$ легко находится $\langle 1/G \rangle \approx \langle l \rangle$. Очевидно, при перколяции $\langle l \rangle$ увеличивается с ростом L , и в расчетах получается поведение $\langle 1/G \rangle \propto L^{t/\nu}$, которое противоположно поведению $\langle G \rangle \propto L^{-t/\nu}$ [6]. Интересно сравнить средние кондактансы и сопротивление в решетках с экспоненциально широким распределением $F(x)$. Очевидно, что при расчете $\langle 1/G \rangle(L)$ доминирует вклад малых кондактансов, при этом выборка $\{x_i\}$, реализуемая методом Монте-Карло, может оказаться недостаточно репрезентативной, поскольку события получения очень больших $1/G$ следуют редко, но ведут к большим флуктуациям на зависимости $\langle 1/G \rangle(L)$. Данная трудность не возникает при расчете $\langle G \rangle(L)$ из-за малого вклада слабо проводящих решеток в среднюю проводимость. Мы проверили указанные факты, варьируя в расчетах по Кирхгофу число реализаций беспорядка и обрезающее значение проводимости связей в решетках в диапазоне $10^{-15} - 5 \cdot 10^{-13}$. В итоге было найдено, что расчет $\langle 1/G \rangle(L)$ является надежным, когда минимальные кондактансы связей в распределении $F(x)$ еще не достигают этих предельных значений. На рис. 1а сплошной и пунктирными линиями с общим номером 1 показан результат расчета $\langle G_e/G \rangle(L)$ и $\langle G/G_e \rangle(L)$ для $F(x) = \exp(-35x)$. Видно, что при малых L эти линии хорошо приближаются степенными зависимостями со слегка разными показателями степени. Меньший показатель получился для $\langle G_e/G \rangle(L)$. Мы проверили, что с ростом L эти линии переходят в общую асимптотику $\langle G_e/G \rangle = \ln \langle G/G_e \rangle = \mu^2/2$, $\mu \equiv bk^\nu/L$, $b \approx 0.2$, полученную в [8]. На рис. 3b сплошной линией 1 и пунктирной линией 2 показан результат расчета $\langle G_e/G \rangle(L)$ и $\langle G/G_e \rangle(L)$ для комбинированного распределения $F(x) = 1$ при $x_0 < 0.43$ и $F(x) = \exp(-40(x_0 - x))$. В данном случае G_e определялась как проводимость в пределе большого $L = 500$. Для указанных параметров сопротивление (линия 1) идет гораздо выше проводимости (линия 2), и среднее сопротивление ведет себя при малых L как степенная функция с большим показателем степени.

Чтобы выяснить, насколько закономерным является поведение, которое показано для двух конкретных пар x_0 и k , мы нашли для каждой реализации беспорядка, т.е. вектора $\{x_i\}$, критическую связь, которая определяет проводимость решетки. Напомним, что в теории перколяции поиск предусматривал упорядочение всех связей в порядке убыви ассоциированных с ними значений x_i , удаление всех связей, а затем последовательное восстановление в установленном порядке, начиная с самой проводящей и заканчивая той, при добавлении которой решетка впервые становится проводящей [1]. Завершающий элемент называется

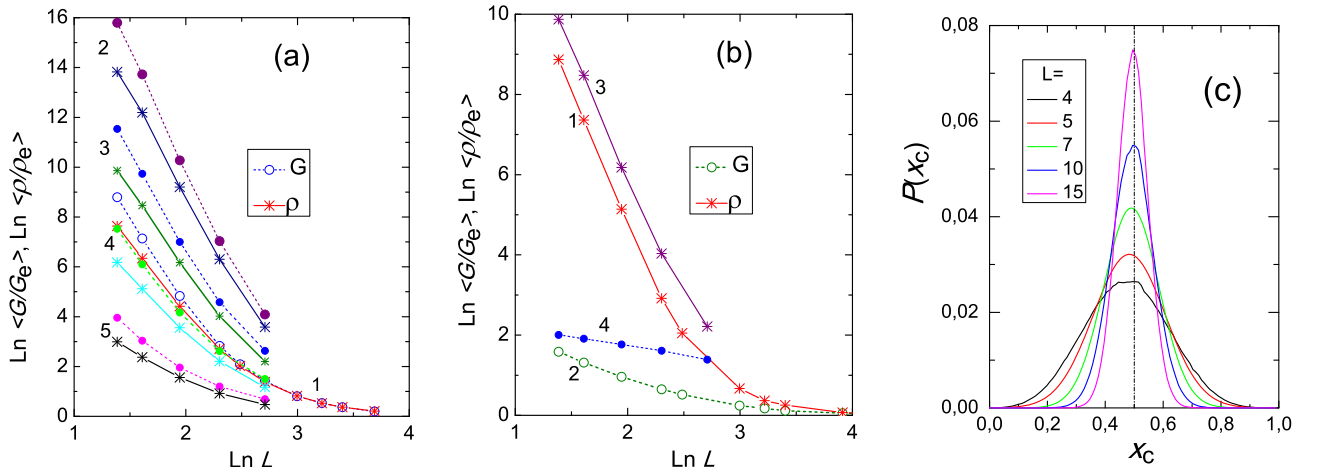


Рис. 3: (a,b) — Зависимости средних удельных сопротивлений (сплошные линии) и средних проводимостей (пунктир) для экспоненциального (a) и комбинированного (b) распределения $F(x)$. Длинные линии 1 в случае $x_0 = 0$, $k = 35$ (a) и 1,2 в случае $x_0 = 0.43$, $k = 40$ — расчет по Кирхгофу; короткие — результат усреднения по реализациям беспорядка проводимости и сопротивления критического элемента решеток. Линии 2–5 в (a) даны для $k = 50, 40, 30, 20$. (c) — Вычисленные универсальные распределения критических $P(x_c)$ для указанных L .

критическим, а отношение числа восстановленных связей к их полному числу в решетке называется критической долей проводящих связей p_c . Для поиска x_c мы реализовали альтернативный алгоритм на основе решения уравнений Кирхгофа и вычисления локального тепловыделения $Q_i \equiv I_i \cdot \Delta V_i$, например, в случае $F(x) = \exp(-kx)$ с умеренным $k = 30$. При этом проводилось упорядочение всех связей по убыли Q_i , т.е. связям присваивались дополнительные номера i_Q . Поскольку при экспоненциально большом разбросе g_i наблюдается точечное тепловыделение [11], довольно часто i_c соответствовал максимальному Q_i . Это проверялось тем, что при удалении всех связей с $x_i \geq x_{i_Q}$ решетка теряла проводимость, но при добавлении элемента с данным Q_i у нее появлялась проводимость соизмеримая с g_{i_Q} и с проводимостью полной решетки G . Если первый элемент из упорядоченного списка Q_i не выдерживал этой проверки, то таким же образом испытывался следующий, и т.д. В итоге находилось критическое значение x_c . Перебором реализаций беспорядка для данного $F(x)$ мы нашли распределение $P(x_c)$ для ряда значений L (рис. 3c) и проверили его универсальность на других распределениях контактанса связей с монотонно убывающими $F(x)$. Выяснено, что с хорошей точностью $P(x_c)$ является функцией Гаусса, среднеквадратичное отклонение $W \propto L^{-1/\nu}$ и $\langle x_c \rangle$ заметно меньше 0.5 при малых L . Похожим является поведение универсального распределения $P(p_c)$ в теории перколяции, $\langle p_c(L) \rangle > 0.5$ [1].

С помощью найденных $P(x_c)$ вычислены $\langle g(x_c)/G_e \rangle(L)$ и $\langle G_e/g(x_c) \rangle(L)$ для $F(x) = \exp(-kx)$ в случаях $k = 50, 40, 30, 20$. Они показаны на рис. 3а парами пунктирных и сплошных линий за номером от 2 до 5. Видно, что эти линии хорошо приближаются степенными функциями, и соответствующие показатели степени есть $k/5$ и $k/6$, что является проявлением слабой асимметрии $P(x_c)$. Наблюдается неплохое согласие этих показателей с теми, что демонстрирует поведение $\langle G/G_e \rangle(L)$ и $\langle G_e/G \rangle(L)$ при расчете по Кирхгофу (пара линий с общим номером 1 на рис. 3а). С помощью тех же $P(x_c)$ вычислены $\langle g(x_c)/G_e \rangle(L)$ и $\langle G_e/g(x_c) \rangle(L)$ в случае комбинированного распределения $F = 1$ при $x_0 = 0.43$ и $k = 40$. Видно, что результат для среднего сопротивления критических элементов (линия 3) хорошо согласуется с поведением $\langle G_e/G \rangle(L)$, и есть лишь согласие по порядку величины между $\langle g(x_c)/G_e \rangle(L)$ (линия 4) и $\langle G \rangle(L)$ (Рис. 3б). Это связано с тем, что вклад области $x < x_0$ в $\langle G_e/g(x_c) \rangle(L)$ пренебрежимо мал, и соответствующий показатель степени получился практически таким же $k/6$, который был в случае чисто экспоненциального распределения с тем же значением $k = 40$. Напротив, показатель степени для поведения $\langle g(x_c) \rangle(L)$ ниже, чем в случае $\langle G \rangle(L)$, поскольку при расчете этого поведения доминирует область $x < x_0$, где $F(x) = 1$, но контактанс полной решетки уже значительно меньше проводимости критического элемента. Данный пример показывает, что прогноз проводимости решетки с помощью $P(x_c)$ оправдан лишь при достаточной быстрой убыли $F(x)$, начиная с $x = 0$.

Отметим, что расчет $\langle g(x_c) \rangle(L)$ по $P(x_c)$ дает и для степенных распределений $F(x)$ с $m = 2.5, 3.5, 6$

зависимости L^{-n} с теми же значениями n , как для линий 2–4 на рис. 1а. Это еще раз подсказывает, что экспоненциальные и комбинированные $F(x)$ предлагают новые варианты неуниверсальности критического индекса проводимости.

Заключение

Методом конечного скейлинга исследовано поведение средних по реализациям беспорядка проводимости и удельного сопротивления квадратных решеток с экспоненциально большим разбросом кондактансов связей. Найдено, что при малых размерах решеток L это поведение хорошо приближается степенными зависимостями L^{-n} . Разными способами мы проследили связь обнаруженных зависимостей с явлением перколяции и неуниверсальностью критического индекса проводимости. Расчеты выполнялись с использованием ресурсов Сибирского суперкомпьютерного центра, что поддержано грантом Президента РФ (НШ-10211.2016.8). Мы благодарны А.А. Снарскому и И.В. Безсуднову за обсуждение, а также Д.Г. Бакшееву за помощь в решении задачи.

Список литературы

- [1] Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979.
- [2] Balberg I. Tunneling and Nonuniversal Conductivity in Composite Materials// Phys. Rev. Lett. 1987. V 59. P. 1305-1309; Toker D., Azulay D., Shimon N., Balberg I., Millo O. Tunneling and percolation in metal-insulator composite materials// Phys. Rev. B. 2003. V 68, P. 041403.
- [3] Yakimov A.I., Adkins C.J., Boucher R., Dvurechenskii A.V., Nikiforov A.I., Pchelyakov O.P., Biskupski G. Hopping conduction and field effect in Si modulation-doped structures with embedded Ge quantum dots // Phys. Rev. B. 1999. V 59, P. 12598–12603.
- [4] Квон З.Д. Квантовый транспорт в решетках связанных электронных биллиардов// Письма в ЖЭТФ. 2002. Т. 76, С. 619; Dorn A., Ihn T., Ensslin K., Wegscheider W., Bichler M. Electronic transport through a quantum dot network// Phys. Rev. B. 2004. V. 70, P. 205306.
- [5] Ткаченко В.А., Ткаченко О.А, Миньков Г.М., Шерстобитов А.А. Перколяция и электрон-электронное взаимодействие в решетке антиточек// Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 104, С. 501–506.
- [6] Sen P.N., Roberts J.N., Halperin B.I. Nonuniversal critical exponents for transport in percolating systems with a distribution of bond strengths// Phys. Rev. B. 1985. V. 32, P. 3306.
- [7] Octavio M., Lobb C.J. Nonuniversality in two-dimensional percolating systems with a broad distribution of bond conductances// Phys. Rev. B. 1991. V. 43, P. 8233.
- [8] Strelniker Y.M., Havlin S., Berkovits R., Frydman A. Resistance distribution in the hopping percolation model// Phys. Rev. E. 2005. V. 72, P. 016121.
- [9] Andrade J. S., Ito N., Shibusa Y. Percolation transition in conducting polymer networks// Phys. Rev. B. 1996. V. 54, P. 3910.
- [10] Снарский А.А., Безсуднов И.В., Севрюков В.А. Процессы переноса в макроскопических неупорядоченных средах: от теории среднего поля до перколяции: Москва: URSS, 2007.
- [11] Ткаченко О.А, Ткаченко В.А. Суперкомпьютерное моделирование полупроводниковых квантовых наносистем// Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13, С. 253–262.

Ольга Александровна Ткаченко — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института физики полупроводников СО РАН;
e-mail: otkach@isp.nsc.ru;

Виталий Анатольевич Ткаченко — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института физики полупроводников СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: vtkach@isp.nsc.ru.

Дата поступления — 31 мая 2017 г.