

Структура основного состояния одномерного обобщенного вигнеровского кристалла на слабopазупорядоченной решетке-матрице

В.В. Славин, А.А. Кривчиков

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Науки, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: slavin@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 13 апреля 2016 г., опубликована онлайн 25 июля 2016 г.

Изучена структура основного состояния одномерной системы электронов на слабopазупорядоченной решетке-матрице (эпитаксиальной подложке). Показано, что при сколь угодно слабом беспорядке в позициях узлов решетки-матрицы дальние корреляции в электронной системе разрушаются. Получена аналитическая зависимость, связывающая величину разупорядочения решетки-матрицы и типичный размер электронной системы, на котором происходит разрушение дальнего порядка.

Досліджено структуру основного стану одновимірної системи електронів на слабконевпорядкованій ґратці-матриці (епітаксіальній підкладці). Показано, що при як завгодно малому безладді в позиціях вузлів ґратці-матриці далекі кореляції в електронній системі руйнуються. Встановлено аналітичну залежність, що зв'язує величину неупорядкованості ґратці-матриці і типовий розмір електронної системи, на якому відбувається руйнування далекого порядку.

PACS: **05.10.-a** Вычислительные методы в статистической физике и нелинейной динамике;
05.20.-y Классическая статистическая механика;
64.60.Cn Превращения порядок–беспорядок.

Ключевые слова: вигнеровский кристалл, решетка-матрица, неупорядоченные системы.

1. Введение

Последние десятилетия низкоразмерные и слоистые проводники вызывают значительный интерес исследователей благодаря ряду необычных транспортных и термодинамических свойств. Во многих таких проводниках электронная и дырочная подсистемы хорошо разделены в пространстве. В результате потенциал, обусловленный положительными ионами, в проводящих электронных слоях практически не зависит от координат, и транспортные свойства определяются исключительно межэлектронным взаимодействием.

Еще один интересный подкласс таких проводников составляют низкоразмерные решеточные системы, где туннелирование носителей заряда между узлами решетки-матрицы подавлено благодаря взаимному кулоновскому отталкиванию. В результате носители заряда оказываются локализованными на узлах решетки-матрицы, динамические эффекты в этом случае сильно подавлены, что позволяет с высокой степенью точно-

сти описывать свойства данных систем в рамках классических моделей [1]. К этому классу относятся, например, многие гетероструктуры типа MOSFET транзисторов (metal-oxide-semiconductor field-effect transistors).

Основное состояние одномерного (1D) ансамбля электронов на упорядоченной решетке-матрице впервые было изучено в работах [2–4]. Было показано, что для широкого класса потенциалов межчастичного отталкивания основное состояние имеет универсальную структуру и зависит лишь от концентрации электронов

$$c_e = \frac{N}{L}. \quad (1)$$

Здесь N и L — количество частиц (электронов) и узлов решетки-матрицы соответственно. В основном состоянии электрон с номером k имеет координату x_k , определяемую формулой

$$x_k = a_0 \left[\frac{k}{c_e} + \phi \right], \quad (2)$$

где a_0 — расстояние между узлами решетки-матрицы, [...] обозначает целую часть числа, а ϕ — произвольная постоянная, соответствующая выбору начала координат. Как следует из данной формулы, в основном состоянии межэлектронные расстояния могут принимать лишь два значения (в зависимости от ϕ и c_e):

$$x_{k+1} - x_k = \left[\frac{1}{c_e} \right], \left[\frac{1}{c_e} + 1 \right]. \quad (3)$$

Таким образом, основное состояние в общем случае не реализует минимум потенциальной энергии взаимодействия частиц. Это приводит, в частности, к довольно нетривиальной нуль-температурной зависимости концентрации частиц c_e от химического потенциала μ , которая представляет собой фрактальную структуру типа чертовой лестницы [4].

Низкотемпературная термодинамика одномерного обобщенного вигнеровского кристалла была рассмотрена в работе [5]. В [6] было показано, что двумерные системы характеризуются эффективным снижением размерности, что позволяет найти их основное состояние, обобщая описание одномерной модели Хаббарда [2].

Как было упомянуто выше, рассматриваемые системы интенсивно изучались как теоретически, так и экспериментально. В предыдущей работе [10] нами использовался достаточно эффективный численный метод анализа структуры основного состояния одномерного ансамбля электронов на неупорядоченной решетке-матрице. Данный метод позволяет изучать системы достаточно большого размера (вплоть до $N \sim 10^4 - 10^5$ частиц). Тем не менее использование численных методов имеет ряд ограничений. В частности, крайне сложно получить асимптотические зависимости в пределе малой разупорядоченности. Причина заключается в том, что при уменьшении параметра разупорядочения для получения адекватных результатов необходимо одновременно увеличивать размеры изучаемой системы. Это, в свою очередь, предъявляет все более жесткие требования к вычислительным ресурсам.

В этой работе предложен аналитический метод исследования 1D дискретных неупорядоченных систем, позволяющий изучать их свойства в пределе слабого разупорядочения решетки-матрицы.

2. Модель и гамильтониан

Рассмотрим 1D-систему отталкивающихся частиц (электронов) на неупорядоченной решетке-матрице. Гамильтониан такой системы может быть описан в рамках расширенной модели Хаббарда. В пределе малой концентрации электронов и слабого перекрытия волновых функций (интеграл перескока $t \ll 1$) можно пренебречь кинетической энергией частиц, а также эффектами, связанными с Ферми статистикой электронов. В этом классическом пределе гамильтониан системы

представляет собой сумму парных энергий взаимодействий электронов:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m}^L V(|r_n^h - r_m^h|) n_n n_m. \quad (4)$$

Здесь L — число узлов решетки-матрицы (размер системы), r_m^h — случайно расположенные узлы решетки-матрицы (множество координат $\{r_m^h\}_{m=1}^L$ определяется данной реализацией), $V(|r_n^h - r_m^h|) = V(r)$ — парный потенциал отталкивания частиц. Как было показано в работах [3,4], для термодинамической стабильности системы требуется, чтобы $V(r)$ убывал степенным образом при $r \gg 1$ так, что

$$V(r) \sim |r|^{-(1+\sigma)}, \quad \sigma > 0,$$

n_n, n_m — классические числа заполнения ($n_n, n_m = 0, 1$).

Поскольку электроны локализованы на узлах решетки-матрицы, с большой точностью можно считать, что их координаты совпадают с r_m^h . Как следствие, потенциал взаимодействия электронов с решеткой-матрицей выпадает из гамильтониана (4). Это означает, что при изучении равновесных (термодинамических) свойств таких систем конкретный вид данного потенциала не важен. Требуется лишь, чтобы он был не слишком мал (точный критерий локализации электронов приведен в [1]). С другой стороны, он должен быть конечен, поскольку в противном случае электроны будут «заморожены». При изучении же кинетических свойств форма данного потенциала важна, поскольку определяет масштаб времен релаксации.

Перейдем теперь от суммирования по узлам решетки-матрицы r_m^h к суммированию по координатам электронов r_m^e . В этом случае гамильтониан приобретает простой вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{m \neq n}^N V(|r_m^e - r_n^e|), \quad (5)$$

где N — количество электронов.

При изучении структуры основного состояния и спектра низкоэнергетических возбуждений удобно разложить (5) по малым смещениям частиц относительно положений, реализующих абсолютный минимум энергии в отсутствие решетки-матрицы (см., например, [9,10]). Очевидно, что абсолютному минимуму энергии соответствует эквидистантное распределение электронов — одномерный вигнеровский кристалл с той же концентрацией частиц c_e (1). Пусть a_0 — среднее расстояние между соседними узлами решетки-матрицы. Тогда период соответствующего вигнеровского кристалла равен $l_0 = a_0 / c_e$ и абсолютный минимум (5) реализуется при $\tilde{r}_m^e = l_0 m$. Введем относительные смещения s_m координат электронов r_m^e относительно \tilde{r}_m^e :

$$s_m = r_m^e - \tilde{r}_m^e.$$

Поскольку $|s_m| \sim a_0 \ll l_0$, можно разложить (5) по малому параметру s_m/l_0 , ограничившись квадратичными слагаемыми. Следует отметить, что в данном случае разложение производится по малым, но дискретным переменным:

$$H \approx H_{WC} + \frac{1}{2} \sum_{m \neq n}^N J_{m,n} (s_m - s_n)^2. \quad (6)$$

Константа H_{WC} равна энергии основного состояния вигнеровского кристалла с концентрацией электронов $c_e = N/L$:

$$J_{m,n} = J(|\tilde{r}_m^e - \tilde{r}_n^e|) = J(|(m-n)l_0|) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \Big|_{x=(m-n)l_0}.$$

В силу выпуклости $V(r)$ константы $J_{m,n} > 0$ при $m \neq n$. Опустив константу H_{WC} , в приближении ближайших соседей (6) приобретает вид

$$H = J_1 \sum_{m=1}^{N-1} (s_m - s_{m+1})^2. \quad (7)$$

Для удобства будем измерять энергию в единицах $J_1 a_0^2$. В этом случае

$$H = \sum_{m=1}^{N-1} (s_m - s_{m+1})^2, \quad (8)$$

где переменные s_m безразмерные.

В низкотемпературном пределе можно ограничиться случаем, когда электрон с номером m ($m = 1, 2, \dots, N$) может занимать один из двух узлов решетки-матрицы, прилегающих слева и справа к \tilde{r}_m^e [9,10]. Обозначим соответствующие смещения s_m как s_m^+ и s_m^- . В рамках изучаемой модели определим s_m следующим образом:

$$s_m = \begin{cases} s_m^+ = 1 - A\xi_m^+ \\ s_m^- = -(1 - A\xi_m^-). \end{cases} \quad (9)$$

Здесь ξ_m^\pm — случайные величины, равномерно распределенные в интервале $[0,1)$. Параметр A определяет степень разупорядоченности системы. При произвольном значении $0 < A \leq 1$ гамильтониан (8) может быть сведен к эффективному магнитному гамильтониану одномерного спинового стекла во внешнем случайном поле (см. [10]). Роль спиновых переменных играют s_m . Для этого перепишем s_m в виде

$$s_m = \frac{1}{2} \left[(2 + A\xi_m^+ + A\xi_m^-) \sigma_m + A(\xi_m^+ - \xi_m^-) \right],$$

где σ_m — стандартные изинговские переменные ($\sigma_m = \pm 1$). В результате (8) приобретает вид

$$H = \sum_{m=1}^{N-1} \tilde{J}_m \sigma_m \sigma_{m+1} - \sum_{m=1}^N h_m \sigma_m, \quad (10)$$

где \tilde{J}_m, h_m — случайные величины. Случай $A = 0$ соответствует отсутствию беспорядка. Легко заметить, что при этом значении параметра A переменные $s_m = \sigma_m$ и выражение (8) сводится к гамильтониану модели Изинга с ферромагнитным взаимодействием, при $A = 1$ имеет место полное разупорядочение узлов решетки-матрицы.

3. Структура основного состояния

Очевидно, что при $A = 0$ основное состояние системы с гамильтонианом (8) представляет собой монодомен, состоящий либо из s_m^+ , либо s_m^- (основное состояние двукратно вырождено). При $A \neq 0$ вырождение снимается: энергии доменов, состоящих из спинов, направленных вверх и вниз, становятся различными. Энергии доменов длины l равны

$$\varepsilon(l)^+ = \sum_{m=1}^l (s_m^+ - s_{m+1}^+)^2 \quad (11)$$

и

$$\varepsilon(l)^- = \sum_{m=1}^l (s_m^- - s_{m+1}^-)^2 \quad (12)$$

в зависимости от направления спинов. Их разность

$$\delta\varepsilon(l) = \varepsilon(l)^+ - \varepsilon(l)^- \quad (13)$$

является случайной (флуктуирующей) величиной. Предположим, что домен, составленный из спинов, направленных вверх, энергетически выгоден. В силу случайности $\delta\varepsilon$ при увеличении длины l рано или поздно такой домен неизбежно станет энергетически невыгодным. Следует заметить, что образование домена, составленного из спинов противоположного направления, сопряжено с проигрышем энергии из-за образования доменной стенки. Эта энергия также является случайной:

$$\varepsilon_{dw} = (s_l^\pm - s_{l+1}^\mp)^2. \quad (14)$$

Если же $\varepsilon^+ > \varepsilon^- + \varepsilon_{dw}$, то образуется доменная стенка и, следовательно, начинает формироваться домен, составленный из спинов, направленных вниз. Затем при некоторой длине домена выполняется неравенство $\varepsilon^- > \varepsilon^+ + \varepsilon_{dw}$, вновь образуется доменная стенка и вновь формируется домен, составленный из спинов, направленных вверх. Таким образом, условие образования доменной стенки

$$|\delta\varepsilon(l)| \geq \varepsilon_{dw}. \quad (15)$$

При $A \ll 1$ можно оценить среднюю длину домена \bar{l} . Флуктуация энергии парного взаимодействия равна (см. (9))

$$\delta_0 \approx (s_m^+ - s_{m+1}^+)^2 \approx (s_m^- - s_{m+1}^-)^2 \approx A^2.$$

Следовательно,

$$\delta\varepsilon(\bar{l}) \sim \delta_0 \sqrt{\bar{l}} = A^2 \sqrt{\bar{l}}. \quad (16)$$

Согласно (14),

$$\varepsilon_{dw} = \left(2 - A(\xi^+ + \xi^-)\right)^2, \quad (17)$$

тогда средняя энергия образования доменной стенки в пределе $A \ll 1$ по порядку величины равна

$$\langle \varepsilon_{dw} \rangle = 4 - 8A \langle \xi \rangle + 2A^2 (\langle \xi^2 \rangle + \langle \xi \rangle^2) \approx 4. \quad (18)$$

Подставляя (18) и (16) в (15), получаем

$$A^2 \sqrt{\bar{l}} \sim 4, \quad \bar{l} \sim A^{-4}.$$

Концентрация доменных стенок $c_{\text{dom}} \sim 1/\bar{l}$ может быть записана в виде [9,10]

$$c_{\text{dom}} = (A/A_0)^4. \quad (19)$$

Основное состояние при произвольном значении параметра A изучено численно в работах [9,10]. В результате был определен коэффициент пропорциональности A_0 . Было показано, что при сколь угодно слабом беспорядке ($A \neq 0$) дальний порядок в системе разрушается. Этот результат находится в полном согласии с критерием устойчивости, сформулированным в работах Ларкина [7], Имри и Ма [8].

4. Вычисление концентрации доменных стенок

В настоящей работе получена аналитическая зависимость $c_{\text{dom}}(A)$ в пределе слабого разупорядочения, т.е. при $A \ll 1$. Согласно (11)–(13),

$$\delta\varepsilon(l) = A^2 \sum_{m=1}^l s_m, \quad (20)$$

где

$$s_m = (\xi_m^+ - \xi_{m+1}^+)^2 - (\xi_m^- - \xi_{m+1}^-)^2. \quad (21)$$

В рассматриваемом пределе в (20) типичные значения $l \gg 1$ и, следовательно, можно воспользоваться центральной теоремой теории вероятности: при $l \rightarrow \infty$ функция распределения $\delta\varepsilon(l)$ стремится к нормальному распределению с математическим ожиданием M и дисперсией D . В силу симметрии s_m , $M = 0$. Поскольку слагаемые в (20) статистически зависимы (в каждое слагаемое входят ξ_m^\pm и ξ_{m+1}^\pm),

$$D[\delta\varepsilon(l)] = A^4 \{lD[s_m] + 2(l-1)K[s_m, s_{m+1}]\}, \quad (22)$$

где коррелятор

$$K[x, y] = \langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle.$$

Символом $\langle \dots \rangle$ обозначено усреднение по распределению ξ . Тогда

$$\begin{aligned} D[s_m] &= \left\langle \left[(\xi_m^+ - \xi_{m+1}^+)^2 - (\xi_m^- - \xi_{m+1}^-)^2 \right]^2 \right\rangle = \\ &= \left\langle (\xi_m^+ - \xi_{m+1}^+)^2 \right\rangle + \left\langle (\xi_m^- - \xi_{m+1}^-)^2 \right\rangle - \\ &- 2 \left\langle \left[(\xi_m^+ - \xi_{m+1}^+)(\xi_m^- - \xi_{m+1}^-) \right]^2 \right\rangle = 2(d_1 - d_2), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} d_1 &= \left\langle (\xi_m^+ - \xi_{m+1}^+)^2 \right\rangle = \left\langle (\xi_m^- - \xi_{m+1}^-)^2 \right\rangle = \\ &= 2\langle \xi^4 \rangle - 8\langle \xi \rangle \langle \xi^3 \rangle + 6\langle \xi^2 \rangle^2, \end{aligned}$$

$$d_2 = \left\langle \left[(\xi_m^+ - \xi_{m+1}^+)(\xi_m^- - \xi_{m+1}^-) \right]^2 \right\rangle = 4D^2[\xi].$$

В силу статистической независимости и эквивалентности распределений ξ_m^+ и ξ_m^-

$$\begin{aligned} \left\langle (\xi_k^+ - \xi_{k+1}^+)^2 - (\xi_k^- - \xi_{k+1}^-)^2 \right\rangle = \\ = \left\langle (\xi_{k+1}^+ - \xi_{k+2}^+)^2 - (\xi_{k+1}^- - \xi_{k+2}^-)^2 \right\rangle = 0. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} K[s_m, s_{m+1}] &= \left\langle \left[(\xi_k^+ - \xi_{k+1}^+)^2 - (\xi_k^- - \xi_{k+1}^-)^2 \right] \times \right. \\ &\times \left. \left[(\xi_{k+1}^+ - \xi_{k+2}^+)^2 - (\xi_{k+1}^- - \xi_{k+2}^-)^2 \right] \right\rangle = 2(k_1 - k_2), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} k_1 &= \left\langle \left[(\xi_k^+ - \xi_{k+1}^+)(\xi_{k+1}^+ - \xi_{k+2}^+) \right]^2 \right\rangle = \\ &= \left\langle \left[(\xi_k^- - \xi_{k+1}^-)(\xi_{k+1}^- - \xi_{k+2}^-) \right]^2 \right\rangle = \\ &= 3\langle \xi^2 \rangle^2 + \langle \xi^4 \rangle - 4\langle \xi^3 \rangle \langle \xi \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} k_2 &= \left\langle \left[(\xi_k^+ - \xi_{k+1}^+)(\xi_{k+1}^- - \xi_{k+2}^-) \right]^2 \right\rangle = \\ &= \left\langle \left[(\xi_k^- - \xi_{k+1}^-)(\xi_{k+1}^+ - \xi_{k+2}^+) \right]^2 \right\rangle = 4D^2[\xi]. \end{aligned}$$

В работах [9,10] рассматривался случай равномерно распределенных на интервале $[0,1]$ случайных переменных ξ . Здесь и далее также будем рассматривать этот случай. Тогда

$$\langle \xi^n \rangle = \int_0^1 \xi^n d\xi = (n+1)^{-1}. \quad (23)$$

Следовательно,

$$d_1 = \frac{1}{15}, \quad d_2 = \frac{1}{36}, \quad D[s_m] = 2\left(\frac{1}{15} - \frac{1}{36}\right) = \frac{7}{90},$$

$$k_1 = \frac{1}{30}, \quad k_2 = \frac{1}{36}, \quad K[s_m, s_{m+1}] = 2\left(\frac{1}{30} - \frac{1}{36}\right) = \frac{1}{90}.$$

Введем

$$D_0 = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{D[\delta\varepsilon(l)]}{l}.$$

Согласно (22),

$$D_0 = A^4 \{D[s_m] + 2K[s_m, s_{m+1}]\} = \frac{A^4}{10}. \quad (24)$$

Плотность вероятности для функции распределения $\delta\varepsilon(l)$ приобретает вид

$$f(\delta\varepsilon(l)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D_0 l}} \exp\left(-\frac{(\delta\varepsilon(l))^2}{2D_0 l}\right). \quad (25)$$

Для вычисления средней длины доменов необходимо вычислить совместную функцию распределения доменов по длинам l и энергиям доменных стенок ε_{dw} . Получить аналитическое выражение для такой функции возможно только в пределе $A \ll 1$. Обратим внимание на то, что слагаемые в (20) ограничены сверху: $|s_m| \leq 1$. Энергии образования доменных стенок ограничены снизу: согласно (17),

$$\varepsilon_{dw}^{\min} = 4(1-A)^2. \quad (26)$$

Из условия образования доменной стенки (15) следует ограничение снизу на число слагаемых в (20):

$$\varepsilon_{dw}^{\min} \leq \varepsilon_{dw} \leq |\delta\varepsilon| \leq A^2 \sum_{m=1}^l |s_m| \leq A^2 l.$$

Следовательно,

$$l \geq l_0 \sim \varepsilon_{dw}^{\min} / A^2 = 4(1-A)^2 / A^2.$$

Таким образом, при $l < l_0$ вероятность образования доменной стенки равна нулю. Иными словами, существует минимальная длина домена $\gtrsim l_0$. В пределе $A \ll 1$ величина $l_0 \gg 1$. Это означает, что распределение $\delta\varepsilon(l)$ можно считать нормальным.

Найдем теперь распределение длин доменов при фиксированной энергии образования доменной стенки ε_{dw} (так называемое условное распределение). При $l \geq l_0 \gg 1$ длину доменов можно считать непрерывной переменной. Согласно (15), вероятность образования домена длиной l равна

$$P(|\delta\varepsilon(l)| \geq \varepsilon_{dw}) = 1 - \Phi_0(|\delta\varepsilon(l)| < \varepsilon_{dw}).$$

Здесь $\Phi_0(|\delta\varepsilon(l)| < \varepsilon_{dw})$ — распределение модуля нормально распределенной величины (так называемое полунормальное распределение). Переход от нормально к полунормальному распределению в данном случае

возможен, поскольку для (25) $M = \langle \delta\varepsilon(l) \rangle = 0$. Подставив (25), запишем

$$\begin{aligned} \Phi_0(|\delta\varepsilon(l)| < \varepsilon_{dw}) &= \sqrt{\frac{2}{\pi D_0 l}} \int_0^{\varepsilon_{dw}} \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{2D_0 l}\right) d\varepsilon = \\ &= \left[\varepsilon^2 = \frac{l\varepsilon_{dw}^2}{x}\right] = \frac{\varepsilon_{dw}}{\sqrt{2\pi D_0}} \int_l^\infty \exp\left(-\frac{\varepsilon_{dw}^2}{2D_0 x}\right) \frac{1}{x^{3/2}} dx = 1 - G(\varepsilon_{dw}, l), \end{aligned}$$

где

$$G(\varepsilon_{dw}, l) = \frac{\varepsilon_{dw}}{\sqrt{2\pi D_0}} \int_0^l \exp\left(-\frac{\varepsilon_{dw}^2}{2D_0 x}\right) \frac{1}{x^{3/2}} dx$$

— распределение Леви (Lévy distribution), которое представляет собой устойчивое распределение с так называемым «тяжелым хвостом» (heavy tail). Напомним, что в данном случае ε_{dw} является параметром распределения. Таким образом,

$$P(|\delta\varepsilon(l)| \geq \varepsilon_{dw}) = G(\varepsilon_{dw}, l) = \int_0^l g(\varepsilon_{dw}, x) dx,$$

где

$$g(\varepsilon_{dw}, x) = \frac{\varepsilon_{dw}}{\sqrt{2\pi D_0}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{dw}^2}{2D_0 x}\right) \frac{1}{x^{3/2}}. \quad (27)$$

Для того, чтобы найти распределение доменов по длинам $w(l)$, необходимо усреднить (27) по распределению энергий доменных стенок $\rho_{dw}(\varepsilon)$:

$$w(l) = \int_0^\infty g(\varepsilon, l) \rho_{dw}(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Согласно (17), в пределе $A \ll 1$ функция $\rho_{dw}(\varepsilon)$ представляет собой распределение суммы двух независимых равномерно распределенных случайных чисел, т.е. треугольное распределение Симпсона (Simpson distribution):

$$\rho_{dw}(\varepsilon) = \frac{4}{(\varepsilon_{dw}^{\max} - \varepsilon_{dw}^{\min})^2} \begin{cases} 0 & \varepsilon \notin (\varepsilon_{dw}^{\min}, \varepsilon_{dw}^{\max}), \\ (\varepsilon - \varepsilon_{dw}^{\min}) & \varepsilon \in [\varepsilon_{dw}^{\min}, \varepsilon_{dw}^{\text{mid}}], \\ (\varepsilon_{dw}^{\max} - \varepsilon) & \varepsilon \in [\varepsilon_{dw}^{\text{mid}}, \varepsilon_{dw}^{\max}], \end{cases} \quad (28)$$

Здесь $\varepsilon_{dw}^{\max} = 4$ (см. (14)), $\varepsilon_{dw}^{\min} = \varepsilon_{dw}^{\max} (1-A)^2$ (см. (26)) и $\varepsilon_{dw}^{\text{mid}} = (\varepsilon_{dw}^{\max} + \varepsilon_{dw}^{\min}) / 2 = \varepsilon_{dw}^{\max} (1-A + A^2/2)$. Выполнив интегрирование, получаем

$$\begin{aligned} w(l) &= -2D_0 \frac{\text{Erf}\left(\frac{\varepsilon_{dw}^{\min}}{\sqrt{2D_0 l}}\right) + \text{Erf}\left(\frac{\varepsilon_{dw}^{\max}}{\sqrt{2D_0 l}}\right) - 2\text{Erf}\left(\frac{\varepsilon_{dw}^{\text{mid}}}{\sqrt{2D_0 l}}\right)}{(\varepsilon_{dw}^{\max} - \varepsilon_{dw}^{\min})^2} = \\ &\approx -\frac{D_0}{2} \text{Erf}'\left(\frac{x}{\sqrt{2D_0 l}}\right) \Big|_{x=\varepsilon_{dw}^{\text{mid}}}. \end{aligned}$$

Здесь $\text{Erf}(x)$ — функция ошибок. В результате

$$w(l) \approx \frac{\varepsilon_{dw}^{\text{mid}}}{\sqrt{2\pi D_0}} \exp\left(-\frac{(\varepsilon_{dw}^{\text{mid}})^2}{2D_0 l}\right) \frac{1}{l^{3/2}}. \quad (29)$$

Как указано выше, данное выражение формально справедливо лишь при $l > l_0$, но при интегрировании по (29) основной вклад дают области $l \gg 1$ (что типично для распределений с «тяжелым хвостом»), т.е. выбор нижнего предела интегрирования в большой степени произвольный. Более того, проведенное численное моделирование показало, что распределение (29) хорошо описывает вероятность образования доменных стенок во всем диапазоне l (см. рис. 1). Следовательно, нижний предел интегрирования по (29) можно положить равным нулю. Среднее по распределению отсутствует. В то же время среднее гармоническое конечно:

$$\bar{l} = \left\langle \frac{1}{l} \right\rangle^{-1} = \left(\int_0^{\infty} \frac{w(l)}{l} dl \right)^{-1} = \frac{(\varepsilon_{dw}^{\text{mid}})^2}{3D_0}.$$

Следуя [9,10], определим концентрацию доменных стенок следующим образом:

$$c_{\text{dom}} = \frac{2}{\bar{l} + 1}.$$

Здесь предполагается, что минимальная длина домена $\bar{l} = 1$, ширина доменной стенки, очевидно, также равна единице. Следовательно, максимальное значение $c_{\text{dom}} = 1$. При $\bar{l} \gg 1$

$$c_{\text{dom}} = \frac{2}{\bar{l} + 1} \approx \frac{6D_0}{(\varepsilon_{dw}^{\text{mid}})^2} \approx \frac{6D_0}{(\varepsilon_{dw}^{\text{max}})^2 [1 - 2A]} \approx \frac{3A^4}{80} [1 + 2A]. \quad (30)$$

Полученное выражение можно сравнить с (19), использованным для аппроксимации результатов чис-

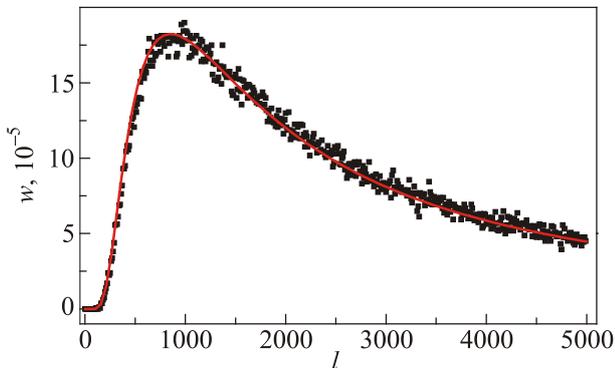


Рис. 1. Распределение доменов по длинам l . Точки — результат численного моделирования. Сплошная линия — распределение (29).

ленного моделирования. Для этого ограничимся первым слагаемым в квадратных скобках:

$$c_{\text{dom}} \approx \frac{3A^4}{80}. \quad (31)$$

Тогда

$$A_0 = 2^4 \sqrt[5]{\frac{5}{3}} \approx 2,272.$$

Величина A_0 находится в достаточно хорошем согласии со значениями, численно определенными в [9,10]. В работе [9] получено значение $A_0 = 1,82$. Заметим, что в [10] при параметре разупорядочения был введен множитель 2 (см. выражение (35) в указанной работе) и, следовательно, $A_0 = 2 \cdot 0,888 = 1,776$. Несколько завышенное значение A_0 и, следовательно, несколько заниженное значение концентрации доменных стенок связано с тем, что в (31) не учитываются флуктуации энергии образования доменных стенок.

5. Выводы

В работе предложена эффективная магнитная модель, описывающая низкотемпературное поведение ансамбля электронов на одномерной решетке-матрице. В рамках данной модели показано, что при сколь угодно слабом разупорядочении позиций узлов решетки-матрицы дальний порядок в основном состоянии разрушается: система разбивается на ферромагнитные домены случайной длины. Получена аналитическая зависимость, связывающая типичный размер этих доменов с параметром A , характеризующим разброс узлов решетки-матрицы. В терминах исходной (электронной) модели это означает, что основное состояние представляет собой фрагменты обобщенного вигнеровского кристалла, состыкованные друг с другом в позициях, где в рамках магнитной модели образуются доменные стенки. Каждый такой фрагмент описывается формулой (2) при некотором фиксированном значении фазы ϕ . В позициях, где образуются доменные стенки, ϕ скачком меняет свое значение. Иными словами, основное состояние одномерного ансамбля электронов на слабоупорядоченной решетке-матрице описывается формулой (2), в которой фаза ϕ представляет собой случайную ступенчатую функцию. Следовательно, типичная длина домена \bar{l} — среднее расстояние, на котором происходит «сбой фазы» ϕ .

Для проверки адекватности предложенной модели нами проведено сравнение аналитической зависимости (30) с результатами численного моделирования в [9,10]. Кроме того, было проведено дополнительное моделирование в области $A \leq 0,3$ методом, описанным в [10]. На вставке рис. 2 представлены результаты этого моделирования. Для наглядности данные приведены в переменных c_{dom} / A^4 как функция от A (т.е. зависи-

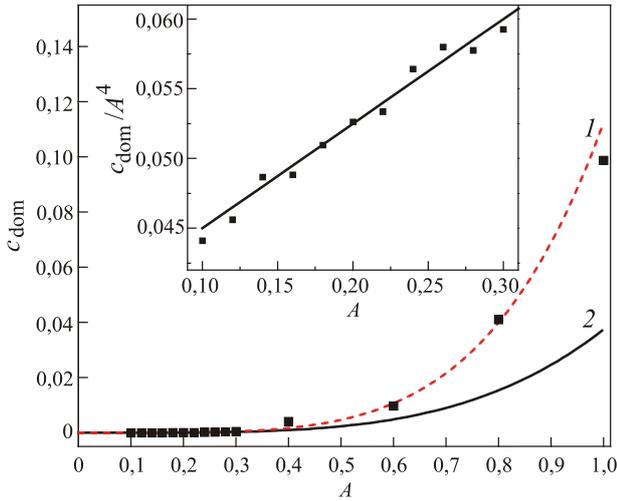


Рис. 2. Зависимость c_{dom} от A . Кривые 1 и 2 — зависимости $c_{\text{dom}} = (3A^4/80)(1+2A)$ и $c_{\text{dom}} = 3A^4/80$ (см. (30) и (31) соответственно). На вставке представлена зависимость c_{dom}/A^4 от A в области малого разупорядочения системы ($A \leq 0,3$). Сплошная линия — зависимость $c_{\text{dom}}/A^4 = (3/80)(1+2A)$ (см. (30)). Точки — результаты численного моделирования.

мости (31) соответствует горизонтальная линия). Как видно, с самого начала графика наблюдается отклонение от (31). Сплошная линия соответствует зависимости (30): $c_{\text{dom}}/A^4 = (3/80)(1+2A)$. Данная зависимость хорошо аппроксимирует результаты численного моделирования.

Как оказалось, выражение (30) достаточно хорошо описывает зависимость c_{dom} от A во всем интервале $0 < A < 1$ (см. рис. 2). Данные, соответствующие $A > 0,3$, взяты из работы [10]. Хорошее согласие результатов численного моделирования и полученной аналитической зависимости во всем диапазоне значений параметра разупорядочения A означает, что нормальное распределение длин доменов сохраняется вплоть до $A \sim 1$, т.е., согласно (30), вплоть до $\bar{l} \sim 10$.

Компьютерное моделирование проводилось на вычислительном кластере ФТИНТ им. Б.И. Веркина НАН Украины.

Работа выполнена в рамках проекта № 4/16-Н «Фундаментальные проблемы создания новых наноматериалов и нанотехнологий».

1. А.А. Слуткин, Л.Ю. Горелик, *ФНТ* **19**, 1199 (1993) [*Low Temp. Phys.* **19**, 852 (1993)].
2. J. Hubbard, *Phys. Rev. B* **17**, 494 (1978).
3. P. Bak and R. Bruinsma, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 249 (1982).
4. С.Е. Бурков, Я.Г. Синай, *Ученые Мат. Наук* **38**, 205 (1983).
5. V.V. Slavin and A.A. Slutskin, *Phys. Rev. B* **54**, 8095 (1996).
6. A.A. Slutskin, V.V. Slavin, and H.A. Kovtun, *Phys. Rev. B* **61**, 14184 (2000).
7. А.И. Ларкин, *ЖЭТФ* **58**, 1466 (1970).
8. Y. Imry and S.K. Ma, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1399 (1975).
9. V.V. Slavin, *Phys. Status Solidi (b)* **241**, 2928 (2004).
10. L.A. Pastur, V.V. Slavin, and A.A. Krivchikov, *Int. J. Mod. Phys. C* **25(8)** 1450028 (2014).

The ground-state structure of one-dimensional generalized Wigner crystal on weakly disordered host-lattice

V.V. Slavin and A.A. Krivchikov

The ground-state structure of one-dimensional electron system on weakly disordered host-lattice (epitaxial substrate) has been studied. It has been shown that long-range correlations in electron system becomes destroyed at arbitrary weak disorder in the positions of host-lattice nodes. We have obtained analytical dependency for typical length, where long-range correlations becomes destroyed, on disorder parameter.

PACS: **05.10.-a** Computational methods in statistical physics and nonlinear dynamics;
05.20.-y Classical statistical mechanics;
64.60.Cn Order-disorder transformations.

Keywords: Wigner crystal, host-lattice, disordered systems.