

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский физико-технический институт»
(Государственный университет)
Кафедра проблем теоретической физики

**Кулоновская блокада в одномерном полупроводниковом островке с
сильной локализацией электронных состояний**

Выпускная квалификационная работа на соискание степени магистра
по направлению 010600
«Прикладные математика и физика»

Студент 628 гр.
Светличный Павел Михайлович

Научный руководитель
Д.ф.-м.н.
Иоселевич Алексей Соломонович

Долгопрудный 2012

Содержание

1	Введение	2
2	Транспорт электрона через островок	4
2.1	Постановка задачи и описание модели	4
2.2	Выражения для полного действия, и активационного и туннельного вкладов в него.	6
2.2.1	Случай $\kappa \ll 1$	7
2.2.2	Случай $\kappa \gg 1$	11
3	Результаты моделирования	14
4	Заключение	24
5	Приложения	25
5.1	Алгоритм Tabu Search	25
5.2	Метод вычисления наименьшего туннельного действия	27
5.3	Теоретическое доказательство наличия универсальности	29

1 Введение

Кулоновская блокада проводящего островка и транспорт через него исследовались уже не раз. Отличие этой работы от предыдущих состоит в том, что островок в ней является диэлектриком, представленном легированным полупроводником, находящимся при температуре настолько низкой, что вся проводимость осуществляется только за счет прыжков между примесями.

Перед тем, как приступить к описанию нашей модели следует напомним результаты для простейшего случая проводящего островка, соединенного емкостями и туннельными сопротивлениями с двумя берегами.

При наличии на островке n избыточных электронов (при $n = 0$ островок электронейтрален) система имеет электростатическую энергию:

$$F = \frac{(C_g V_g + ne)^2}{2C_\Sigma} + \text{const} \quad (1)$$

где $C_\Sigma = C_1 + C_2$

Минимизируя свободную энергию, получаем, что: $-\frac{C_g V_g}{e} - \frac{1}{2} \leq n \leq -\frac{C_g V_g}{e} + \frac{1}{2}$

Эта формула описывает семейство парабол. Каждая из парабол описывает зависимость свободной энергии от наведенного на него заряда при заданном значении n . Система будет стремиться к минимуму свободной энергии и сама подстроит значение n , чтобы это выполнялось.

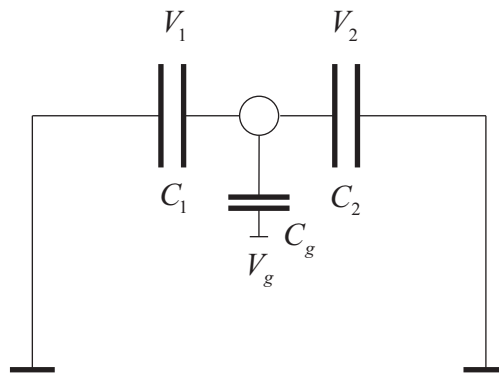


Рис. 1: Металлический островок между двумя контактами

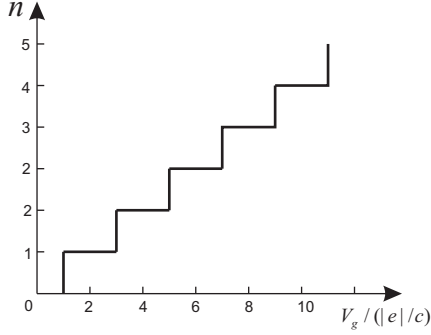


Рис. 2: Зависимость количества электронов на островке n от приложенного к нему напряжения V_g при отсутствии напряжения на контактах $V = 0$. Количество электронов меняется лишь при конкретных значениях напряжения $2V_g / (|e|/C_g) = 2m - 1$, $m \in \mathbb{Z}$.

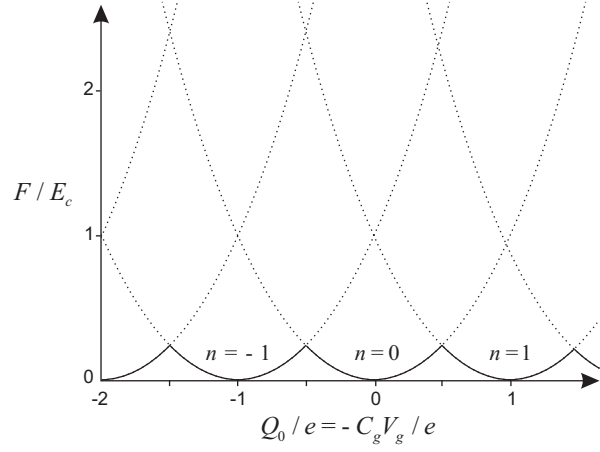


Рис. 3: Зависимость свободной энергии островка F от приложенного к нему напряжения V_g при отсутствии напряжения на контактах $V = 0$. Зависимость представляет собой часть семейства парабол.

При конечном приложенном напряжении, при температуре $T = 0$, транспорт электронов будет происходить, если он энергетически выгоден. Можно получить, что электронный транспорт происходит при данном значении V_g лишь после того, как напряжение достигнет одного из пороговых значений $V_b(V_g)$.

$$V_{b;1,2} = \mp \frac{e}{C_2 + C_g/2} \left(\frac{1}{2} \pm \left(n + \frac{C_g V_g}{e} \right) \right) \quad (2a)$$

$$V_{b;3,4} = \mp \frac{e}{C_1 + C_g/2} \left(\frac{1}{2} \pm \left(n + \frac{C_g V_g}{e} \right) \right) \quad (2b)$$

2 Транспорт электрона через островок

2.1 Постановка задачи и описание модели

В предыдущих работах кулоновская блокада рассматривалась в хорошо проводящих островках, в большинстве случаев эффективно являющихся нульмерными. В этом случае линейная проводимость системы содержит всего один экспоненциальный множитель – $\sigma \propto \exp\{-E_{\text{act}}/T\}$. Конечная протяженность островка (например, выполненного в виде тонкой – “одномерной” – проволоочки) приводит к дополнительному экспоненциальному подавлению его проводимости, связанному с необходимостью перераспределения добавляемого заряда (первоначально попадающего на край островка) равномерно по всей его длине, что соответствует наименьшей потенциальной энергии. Такое перераспределение происходит туннельным образом, что и приводит к дополнительному вкладу в экспоненту.

В этой работе нас будет интересовать, каким образом происходит транспорт через плохо проводящий островок, в котором все состояния электронов локализованы (в этом смысле островок является диэлектриком). Ясно, что в этом случае эффекты туннелирования должны проявиться наиболее сильно. В качестве модели мы рассмотрим проволочку из слабо легированного полупроводника, соединенную с хорошо проводящими берегами двумя туннельными контактами. Диаметр проволоочки будем считать много меньше среднего расстояния между примесями, так что система эффективно является одномерной. Приходящие на островок или уходящие с островка электроны должны добираться до его центральной области, туннелируя между локализованными состояниями. Как мы увидим, в случае низкой температуры (или достаточно коротких островков), эффект туннелирования приводит к появлению в показателе экспоненты, наряду с обычным активационным слагаемым $S_{\text{act}} = E_{\text{act}}/T$, дополнительного туннельного слагаемого S_{tun} , не зависящего от температуры. Мы убедимся, что и E_{act} , и S_{tun} сильно флуктуируют от образца к образцу, но флуктуации этих двух величин практически между собой не скоррелированы. Мы найдем функции распределения E_{act} и S_{tun} численно. При более высокой температуре (или для более длинных островков) показатель экспоненты уже нельзя разделить на активационное и туннельное слагаемое; прыжки в истинное основное состояние островка могут

оказаться слишком длинными, а потому невыгодными. Выгоднее оказывается прыгнуть в состояние с более высокой энергией, зато расположенное ближе к краю островка. В результате оптимизации мы приходим к результату $\sigma \propto \exp\{-\tilde{S}\}$, где характерное значение \tilde{S} есть $\tilde{S}_{\text{opt}} \propto T^{-1/2}$, а величина $\tilde{S}/\tilde{S}_{\text{opt}}$ сильно флуктуирует от образца к образцу.

Итак, мы рассмотрим систему, содержащую N_d и N_a акцепторов, причем все примеси считаются случайно распределенными по длине образца. Полученную систему мы будем изучать при помощи моделирования на компьютере, степень компенсации мы выберем равной $K \equiv N_a/N_d = 0.5$. Ввиду вычислительной сложности, мы ограничимся сравнительно небольшим количеством доноров, равным $N_d = 128$. При достаточно низкой температуре все акцепторы в системе заняты и имеют заряд $-e$ (e - заряд электрона). Часть доноров занята ($n_i = 1$; i - индекс донора, n_i - число заполнения) и незаряжена, а часть свободна ($n_i = 0$) и имеет заряд e . Обозначим безразмерные координаты доноров как x_i , а акцепторов как y_i .

Тогда термодинамический потенциал островка с некоторой конфигурацией доноров и акцепторов является свободной энергией системы электронов, взаимодействующих по закону Кулона.

$$\Omega = \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ i \neq j}} \frac{(1 - n_i)(1 - n_j) e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| L} - \sum_{\langle ij \rangle} \frac{1 - n_i}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_j| L} - \mu N \quad (3)$$

Здесь

$N = \sum_i n_i$ - общее количество электронов, занимающих доноры;

L - линейный размер островка.

Термодинамический потенциал зависит от конфигурации доноров и акцепторов и от заполнения доноров электронами. Вклад взаимодействия акцепторов между собой можно не учитывать, так как от чисел заполнения он не зависит.

Мы будем исследовать транспорт электрона через островок, находящийся в тепловом равновесии при температуре T . Для определенности будем рассматривать транспорт электрона слева направо.

Нам будет удобнее работать не с самой вероятностью, а с действием, которое связано

с вероятностью следующим образом:

$$P \propto \exp(-\tilde{S}) \quad (4)$$

Именно величина \tilde{S} и будет вычисляться в наших расчетах.

2.2 Выражения для полного действия, и активационного и туннельного вкладов в него.

Из формулы

$$\tilde{S} = E \frac{e^2}{LT} + S \frac{2L}{a} \quad (5)$$

где E и S - безразмерные энергия активации и туннельное действие соответственно, видно, что в задаче присутствует единственный безразмерный параметр:

$$\kappa = T \frac{L}{e^2} \frac{2L}{a} \quad (6)$$

Параметр κ настраивать за счет изменения температуры и длины островка, мы будем считать, меняется только температура, а длина островка остается неизменной. Тем не

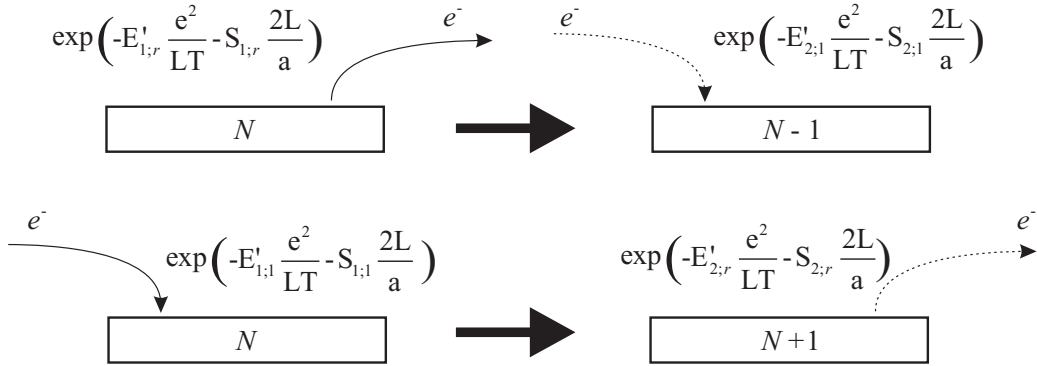


Рис. 4: Транспорт электрона через островок слева направо может происходить двумя способами. Либо в первом акте электрон уходит с островка на правый контакт, а во втором акте электрон садится на островок с левого контакта, либо в первом акте электрон садится на островок с левого контакта, а во втором акте электрон уходит с островка на правый контакт.

менее, факт, что κ зависит от обеих величин нам понадобится.

При различных значениях параметра κ соотношение вкладов энергетического члена и туннельного действия в полное действие различно.

2.2.1 Случай $\kappa \ll 1$.

При $\kappa \ll 1$ процесс транспорта электрона через островок состоит из двух последовательных актов. При этом транспорт возможен по двум каналам, в зависимости от того, добавляется ли сначала электрон на островок, или уходит с него. Но так как выкладки для обоих типов процессов практически одинаковы, то для того, чтобы упростить изложение, мы будем рассматривать лишь первый из изображенных процессов, при котором электрон сначала садится на островок (см. рис. 4). Будем лишь помнить, что для нахождения вероятности транспорта электрона через островок необходимо найти вероятности обоих процессов и сложить их.

$$\sigma = \sigma^+ + \sigma^- \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \sigma^+ &\propto \exp(-\tilde{S}^+) \\ \sigma^- &\propto \exp(-\tilde{S}^-) \end{aligned} \quad (8)$$

Поскольку мы будем работать в экспоненциальном приближении, из суммы можно оставить лишь максимальное слагаемое.

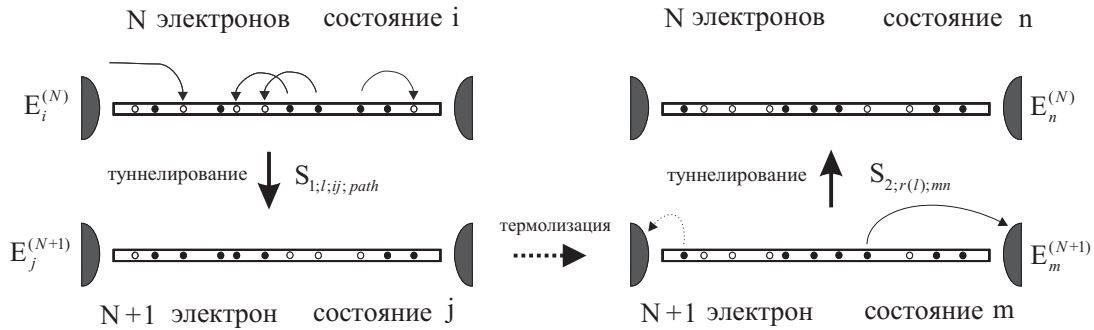


Рис. 5: Для того, чтобы система оказалась в конечном состоянии иногда необходима перестройка состояния.

$$\sigma = \max \{ \sigma^+, \sigma^- \} \quad (9)$$

$$\tilde{S} = \min \{ \tilde{S}^+, \tilde{S}^- \} \quad (10)$$

В указанном на рис. 5 процессе в первом акте электрон садится на островок с левого берега. Во втором акте, проходящим по прошествии времени, достаточно чтобы система пришла в тепловое равновесие, но такого, что в течение его количество электронов на островке не изменяется, что характерно как раз для значений $\kappa \ll 1$, один из электронов покидает островок, и количество электронов на островке восстанавливается до первоначального. Найдем вероятность прохождения такого процесса.

Начнем с вероятности первого акта. Все энергии будем отсчитывать от энергии основного состояния. Энергию обезразмерим на $\frac{e^2}{L}$. Пусть система находится в одном из состояний с N электронами. Занумеруем эти состояния индексом i . После добавления электрона система оказывается в состоянии с $N + 1$ электронами. Для этих состояний будем использовать индекс j . Обозначим изменение энергии системы при добавлении электрона как $\Delta E_{ij} = E_i^{(N+1)} - E_j^{(N)}$. Здесь $E_j^{(N+1)}$ и $E_i^{(N)}$ - конечная и начальная энергии системы.

После попадания электрона с контакта на островок система может оказаться не сразу в конечном состоянии j . Для того, чтобы это случилось, может быть необходимо, чтобы электроны перешли с одних доноров на другие путем туннелирования (см. рис. 5) и произошло перераспределение зарядов. Вероятность каждого прыжка электрона с одного донора на другой зависит от длины прыжка и пропорциональна $\exp(-2L|x_{fin} - x_{init}|/a)$, где a - константа туннелирования, L - длина образца. Для прыжков с берегов на образец $x_{init} = 0$ или 1 в зависимости от контакта. При совершении же всех необходимых прыжков, их длины суммируются, и набирается туннельное действие:

$$\frac{2L}{a} S_{1;l;ij,path} = \sum_{\langle init, fin \rangle} \frac{2L}{a} |x_{fin} - x_{init}| \quad (11)$$

Если энергия конечного состояния j выше энергии начального, то требуется забрать разницу в энергии ΔE_{ij} у резервуара, что привносит в вероятность акта дополнительный фактор $\exp(-\Delta E_{ij} \theta (\Delta E_{ij}) / T)$. Вероятность перехода из состояния i в состояние j , при совершении определенной цепочки прыжков (индекс $path$), тогда равна произведению вероятностей:

$$\begin{aligned} \exp\left(-E_i^{(N)} \frac{e^2}{LT}\right) \exp\left(-\Delta E_{ij} \theta(\Delta E_{ij}) \frac{e^2}{LT}\right) \exp\left(-\frac{2L}{a} S_{l;ij,path}\right) = \\ = \exp\left(-\max\left\{E_i^{(N)}, E_j^{(N+1)}\right\} \frac{e^2}{LT} - \frac{2L}{a} S_{l;ij,path}\right) \end{aligned} \quad (12)$$

Обозначим ее:

$$\tilde{S}_1^+ \{i, j, path\} = \max\left\{E_i^{(N)}, E_j^{(N+1)}\right\} \frac{e^2}{LT} + \frac{2L}{a} S_{1;l;ij,path} \quad (13)$$

Вероятности всех подобных переходов необходимо просуммировать. Работая в экспоненциальном приближении, оставим из суммы только член, для которого действие $\tilde{S}_1^+ \{i, j, path\}$ минимально.

Для этого сначала минимизируем туннельное действие для заданного количества электронов N , конечного и начального состояний i и j . В одномерном случае можно представить алгоритм, *вычисляющий* действие. Используя этот алгоритм, перебор различных путей из состояния i в состояние j осуществлять не требуется. Результат минимизации обозначим как $S_{1;l;ij}$. Минимизация по индексам i и j выполняется численно. Значения максимума из энергий и туннельного действия, полученные в результате минимизации будем обозначать как $E'_{1;l}$ и $S_{1;l}$ соответственно.

Займемся вторым актом. Перед ним система опять находится в тепловом равновесии при количестве электронов равном $N + 1$. Для последующих событий возможны два варианта: электрон с островка переходит на правый контакт либо обратно, на левый контакт. Вклад в ток дает только первый вариант. Вычислим его вероятность.

Вероятность того, что система находится в каком-то конкретном состоянии m с энергией E_m^{N+1} , распределена по Гиббсу. После ухода электрона система оказывается в состоянии n с N электронами и энергией E_n^N . Для различных m наборы состояний n , в принципе, различны, хотя некоторые конечные состояния могут и совпадать. Если энергия $\Delta E_{mn} = E_n^N - E_m^{N+1} > 0$ то, так же как и для первого акта, появляется дополнительный множитель $\exp(-\Delta E_{mn}/T)$.

При переходе набирается туннельное действие $S_{2;r(t);mn} 2L/a$. Так как конечное состояние получается в результате единственного прыжка с одного из доноров (обозначим его номер как k) на контакт, то туннельное действие вычисляется просто:

$$\begin{aligned} S_{2;l;mn} &= x_k \\ S_{2;r;mn} &= 1 - x_k \end{aligned} \quad (14)$$

Перемножая вероятности, получаем, что вероятность такого перехода пропорциональна:

$$\begin{aligned} \exp\left(-E_m^{(N+1)}e^2/LT - S_{r(l);nm}2L/a\right) \exp\left(-\left(E_n^{(N)} - E_m^{(N+1)}\right)\theta\left(E_n^{(N)} - E_n^{(N+1)}\right)e^2/LT\right) = \\ = \exp\left(-\max\left\{E_m^{(N+1)}, E_n^{(N)}\right\}\frac{e^2}{LT} - S_{r(l);mn}\frac{2L}{a}\right) \end{aligned} \quad (15)$$

$$P_2^+ \propto \frac{\sum_{\langle mn \rangle} \exp\left(-\max\left\{E_m^{(N+1)}, E_n^{(N)}\right\}\frac{e^2}{LT} - S_{2;r;mn}\frac{2L}{a}\right)}{\sum_{\langle mn \rangle} \exp\left(-\max\left\{E_n^{(N+1)}, E_m^{(N)}\right\}\frac{e^2}{LT} - S_{2;r;mn}\frac{2L}{a}\right) + \sum_{\langle mn \rangle} \exp\left(-\max\left\{E_n^{(N+1)}, E_m^{(N)}\right\}\frac{e^2}{LT} - S_{2;l;mn}\frac{2L}{a}\right)} \quad (16)$$

Работая в экспоненциальном приближении, в каждой из сумм оставляем лишь наибольший член. Минимизация выражений $\max\left\{E_m^{(N+1)}, E_n^{(N)}\right\}e^2/LT - S_{r(l);mn}2L/a$ происходит сначала по индексу n при заданном m , что легко сделать обычным перебором, а затем по индексу m . Значения максимума из двух энергий и туннельного действия, минимизирующие указанные величины обозначим соответственно $E'_{2;r(l)}$ и $S_{2;r(l)}$. В результате получаем:

$$P_2^+ \propto \frac{\exp\left(-E'_{2;r}e^2/LT - S_{2;r}2L/a\right)}{\exp\left(-E'_{2;r}e^2/LT - S_{2;r}2L/a\right) + \exp\left(-E'_{2;l}e^2/LT - S_{2;l}2L/a\right)} \quad (17)$$

Обозначим для краткости:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{2;r} &= E'_{2;r}\frac{e^2}{LT} + S_{2;r}\frac{2L}{a} \\ \tilde{S}_{2;l} &= E'_{2;l}\frac{e^2}{LT} + S_{2;l}\frac{2L}{a} \end{aligned} \quad (18)$$

Тогда, в экспоненциальном приближении:

$$\tilde{S}_2^+ \approx \begin{cases} 0 & \text{если } \tilde{S}_{2;r} < \tilde{S}_{2;l} \\ \tilde{S}_{2;r} - \tilde{S}_{2;l} & \text{если } \tilde{S}_{2;r} > \tilde{S}_{2;l} \end{cases} \quad (19)$$

Так как $\kappa \ll 1$, то вкладом прыжков электронов можно пренебречь. Система стремится понизить энергию, и большая часть переходов происходит из основного состояния с энергией $E_0 = 0$ в наинищее возбужденное с энергией E_1 и обратно. Согласно нашим результатам, в подавляющем большинстве случаев наинищее возбужденное состояние отличается от основного состояния, если сравнить распределения электронов по донорам, наличием лишь одной несовпадающей пары чисел заполнения, и туннельное действие складывается из длины только одного прыжка между берегом и островком. Объединяя это с фактом, что в обоих актах переходы совершаются между основным и наинищим возбужденным состояниями можно заключить, что:

$$S_{1;l} = S_{2;l} \quad (20)$$

$$S_{1;r} = S_{2;r}$$

$$S_{1;r} + S_{1;l} = 1 \quad (21)$$

$$S_{2;r} + S_{2;l} = 1$$

$$\max \{E_i^{(N)}, E_j^{(N+1)}\} = \max \{E_m^{(N+1)}, E_n^{(N)}\} = E_1 \quad (22)$$

Из (20),(21) и (19) следует, что:

$$\tilde{S}_2^+ \approx \begin{cases} 0 & \text{если } S_{1;r} \leq \frac{1}{2} \\ \frac{2L}{a} (S_{1;r} - S_{1;l}) & \text{если } S_{1;r} > \frac{1}{2} \end{cases} \quad (23)$$

С учетом вышесказанного, для полного действия получаем:

$$\tilde{S}^+ = \frac{e^2}{LT} E_1 + \frac{2L}{a} S_{1;l} + \tilde{S}_2^+ = \frac{e^2}{LT} E_1 + \frac{2L}{a} \max \{S_{1;r}, S_{1;l}\} \quad (24)$$

Из (24) и (21) немедленно следует, что туннельное слагаемое равно:

$$S = \max \{S_{1;r}, S_{1;l}\} \geq \frac{1}{2} \quad (25)$$

2.2.2 Случай $\kappa \gg 1$.

При высоких температурах $\kappa \gg 1$ и длинные прыжки становятся невыгодными. Транспорт электрона происходит следующим образом. В первом акте на левый конец образца,

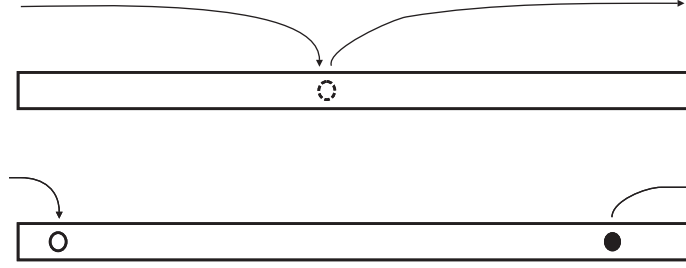


Рис. 6: При низких температурах электрон в большинстве случаев приходит и уходит с одного и того же донора. При высоких температурах электрон прыгает с берега и на берег из областей вблизи концов образца.

близко к краю, садится электрон. Ввиду невыгодности длинных прыжков во втором акте электрон уходит с правого конца образца. Чем выше температура, тем менее акты связаны друг с другом. Действительно, согласно строению безразмерного параметра κ , изменение температуры можно поменять на изменение длины образца. Увеличению температуры в α соответствует увеличение длины образца в $\sqrt{\alpha}$ раз, что очевидным образом приводит к уменьшения влияния одного акта на другой. Заметим, что так как приход и уход электрона стали независимы, то на островке может присутствовать более одного дополнительного электрона, что впрочем при численных расчетах можно не учитывать ввиду вышеуказанного слабого влияния концов островка друг на друга.

Это соответствует представлению, согласно которому концы островка имеют сопротивления:

$$R_l \propto \exp\left(\tilde{S}_l\right) \quad (26a)$$

$$R_r \propto \exp\left(\tilde{S}_r\right) \quad (26b)$$

а общее сопротивление равно их сумме.

$$R = R_l + R_r \quad (27)$$

Тогда проводимость σ равна:

$$\sigma = R^{-1} \propto \exp\left(-\max\left\{\tilde{S}_l, \tilde{S}_r\right\}\right) \quad (28)$$

$$\tilde{S} = \max \left\{ \tilde{S}_l, \tilde{S}_r \right\} \quad (29)$$

Для прыжка электрона с берега на островок можно получить зависимость значения действия \tilde{S}_1 , при котором функция распределения максимальна, от температуры. Левая часть рис. 5 изображает как раз такой прыжок, и ее можно использовать и при $\kappa \gg 1$, что мы и будем делать, работая в тех же обозначениях, что и на рисунке.

Из независимости актов прихода и ухода электрона получается, что можно рассмотреть лишь один из них и получить для него зависимость вклада в действие от температуры. Для другого акта зависимость будет такой же. Из того, что электрон садится в малой области вблизи конца образца, получаем, что можно считать, что плотность состояний постоянна. Тогда:

$$\max \left\{ E_i^{(N)}, E_j^{(N+1)} \right\} \sim \frac{1}{x} \quad (30)$$

где x - расстояние от конца образца, до донора, на который прыгнет электрон.

$$S_{1;r} \sim x \quad (31)$$

Минимизируя действие:

$$\tilde{S}_{1;opt}^+ \sim \frac{1}{x} \frac{e^2}{LT} + x \frac{2L}{a} \quad (32)$$

Получаем, что:

$$\tilde{S}_{1;opt}^+ \propto \frac{1}{\sqrt{T}} \quad (33)$$

Так как при больших значениях κ , прыжок электрона с левого берега на островок и прыжок электрона с островка на правый берег практически не связаны, то из функции $P_1 \left(\tilde{S}_1^+ \right)$ можно получить функцию распределения полного действия $P \left(\tilde{S} \right)$.

Из соображений симметрии очевидно, что функция распределения действия для прыжка электрона островка на правый берег совпадает с функцией распределения действия для прыжка электрона с левого берега на островок. Из (29) следует:

$$P(\tilde{S}) = 2P_1(\tilde{S}) \int_0^{\tilde{S}} P_1(\zeta) d\zeta \quad (34)$$

3 Результаты моделирования

При малых значениях κ мы видим, как и следует из предсказания (25), что $\tilde{S} \geq 1$. Поэтому, $P(\tilde{S}_{1;l}) = 0$ при $\tilde{S}_{1;l} < 0,5$, что мы и видим на графике (см. рис. 7).

При больших значениях $\kappa \sim 10^2$, перестройка состояний происходит тоже сравнительно редко и, более того, все еще сравнительно часты случаи, когда электрон приходит и уходит с одного и того же донора (см. табл. 1 и табл. 2). На графиках для полного действия (рис. 11) видно, что растет влияние туннельного действия: характерные значения туннельного действия уменьшаются; характерные значения энергий при этом растут ($E \sim 0.5 \cdot 10^2$), но это подавляется ростом температуры.

Также из результатов видно, что функцию распределения для действия \tilde{S}_1^+ для прыжка электрона с левого берега на островок можно представить в виде:

$$P_1(\tilde{S}_1^+) = \frac{1}{b(T)} \tilde{P}_1\left(\frac{\tilde{S}_1^+}{b(T)}\right) \quad (35)$$

где вид функции \tilde{P}_1 от температуры не зависит. Параметром $b(T)$ можно выбрать положение максимума распределения:

$$b(T) = \tilde{S}_{1;opt}(T) \quad (36)$$

$$P_1(\tilde{S}_1^+) = \frac{1}{\tilde{S}_{1;opt}} \tilde{P}_1\left(\frac{\tilde{S}_1^+}{\tilde{S}_{1;opt}}\right) \quad (37)$$

Подставив в (34) выражение (37) получаем:

$$\begin{aligned} P(\tilde{S}) &= 2 \frac{1}{\tilde{S}_{1;opt}} \tilde{P}_1\left(\frac{\tilde{S}_1^+}{\tilde{S}_{1;opt}}\right) \Phi\left(\frac{\tilde{S}_1^+}{\tilde{S}_{1;opt}}\right) \\ \Phi\left(\frac{\tilde{S}_1^+}{\tilde{S}_{1;opt}}\right) &= \int_0^{\tilde{S}_1^+/\tilde{S}_{1;opt}} \tilde{P}_1(\zeta) d\zeta \end{aligned} \quad (38)$$

что означает, что функция распределения для полного действия также универсальна.

Как следует из результатов, сдвиг максимума $\tilde{S}_{1;opt}$ при больших значениях κ соответствует предсказанию (33) (см. рис 14).

Данная универсальность может наблюдаться лишь при значениях κ , таких что функция распределения туннельного действия теряет вид, имеющийся при малых κ . То есть значения туннельного действия $S \approx 1$ становятся совсем маловероятными, а особенности, связанные с краями образца, "замываются". Чтобы данное "замытие" произошло, необходимо, чтобы стремление электронов садиться вблизи краев образца, связанное с более вероятным нахождением там энергетического минимума, было слабее стремления сесть у края для минимизации туннельного действия. Это требование выполняется при больших значениях κ . Теоретическое доказательство наличия универсальности дано в отдельном разделе.

κ	0.02	0.1	0.4	10	15	120	160	200	1000
Электрон приходит и уходит с одного и того же донора (другой перестройки не происходит)	0.86078	0.85644	0.85408	0.55334	0.33546	0.17118	0.08424	0.08636	0.15456
Электроны приходят и уходят с разных доноров (другой перестройки не происходит)	0.13018	0.13482	0.13560	0.43020	0.64474	0.76004	0.8194	0.80838	0.71382
Происходит перестройка состояния, затрагивающая более одного донора	0.00904	0.00874	0.01032	0.01646	0.01980	0.06878	0.09636	0.10526	0.13162

Таблица 1: Характеристика перестройки состояния и прыжков электронов для различных значений $\kappa = T \frac{L}{e^2} \frac{2L}{a}$.

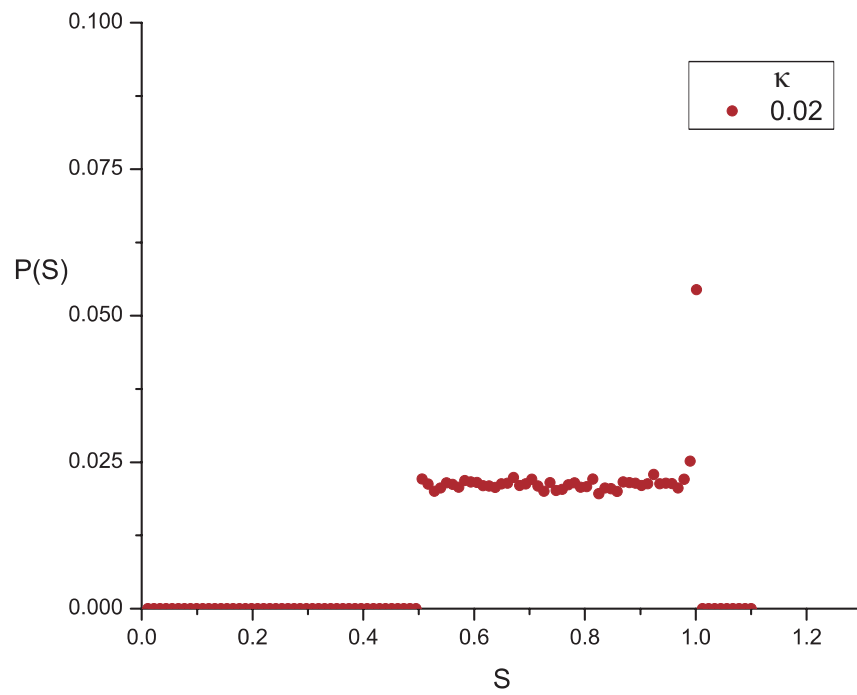


Рис. 7: Функция распределения туннельного действия $S = \max\{S_{1;l}, S_{1;r}\}$ для $\kappa = 0.02$.

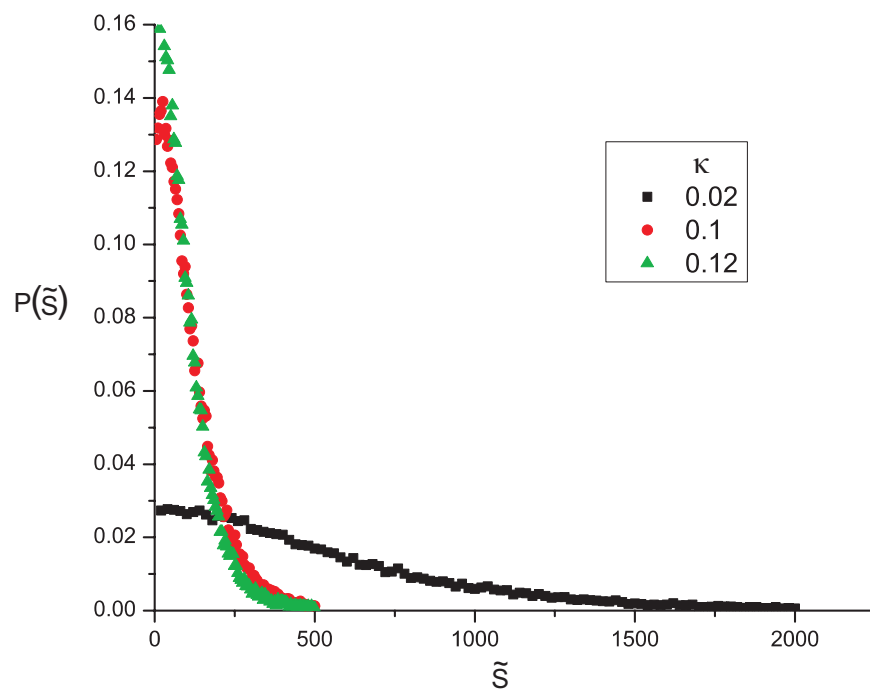


Рис. 8: Функция распределения полного действия для малых значений $\kappa = T \frac{L}{e^2} \frac{2L}{a}$. Ввиду больших значений полного действия на графике не видно, что $P(\tilde{S}) = 0$ при $\tilde{S} < 1$.

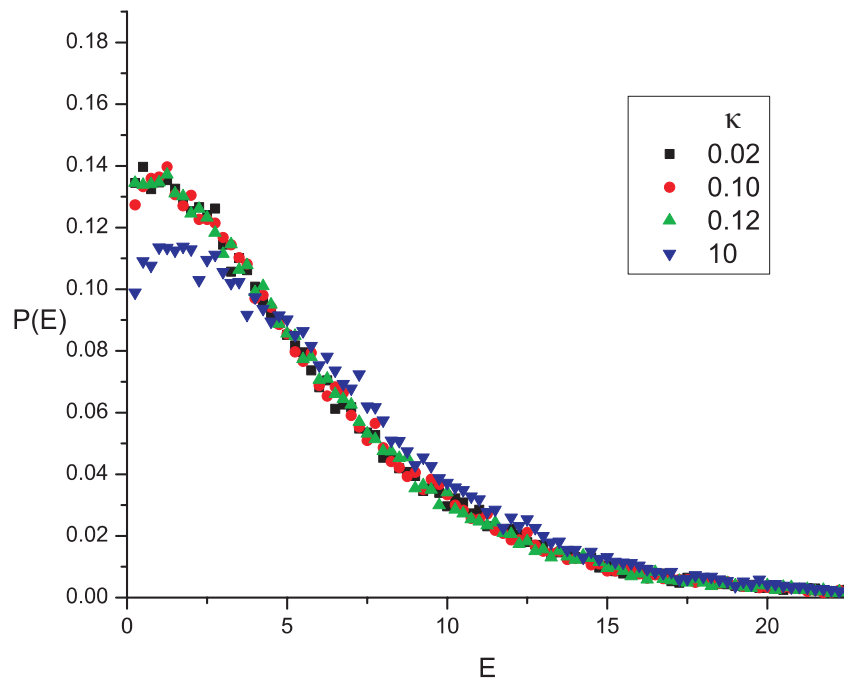


Рис. 9: Функция распределения энергии активации для малых значений $\kappa = T \frac{L}{e^2} \frac{2L}{a}$. При малых κ энергия активации E_{act} в подавляющем большинстве случаев равна разнице между энергией наинизшего возбужденного и основного состояний: $E_{\text{act}} = E_1 - E_0$. Для сравнения приведен также график для $\kappa = 10$.

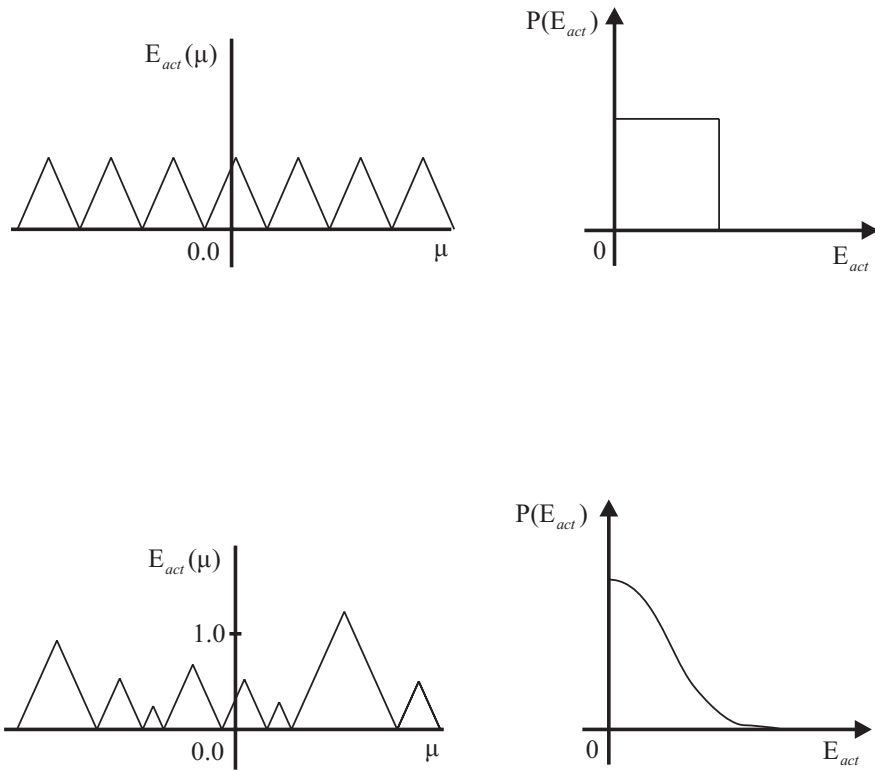


Рис. 10: Сравнение получающихся зависимостей энергии активации от химического потенциала и функций распределения энергии активации для металлического (вверху) островка и островка с сильной локализацией электронов (внизу), типа изучаемого в нашей работе.

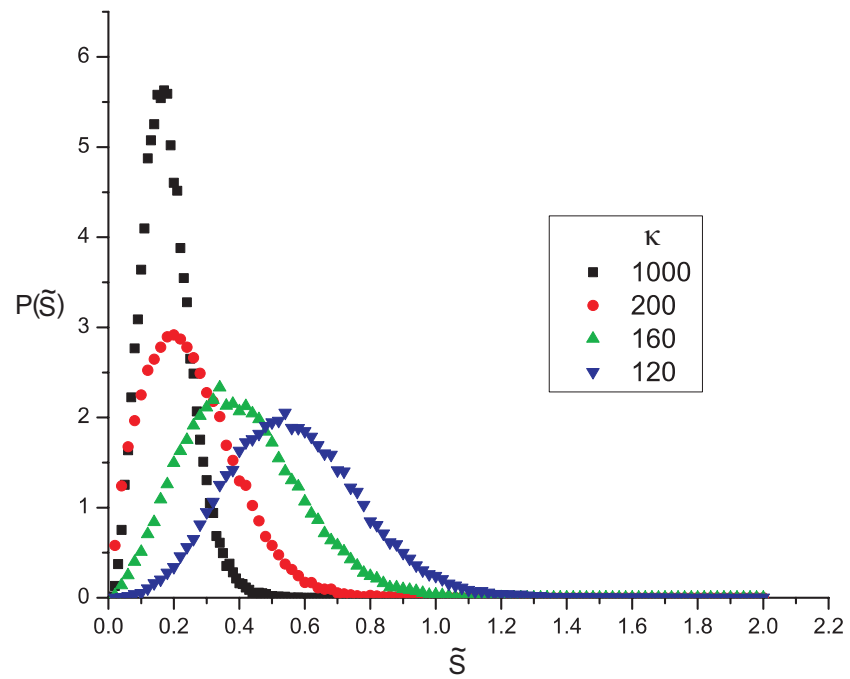


Рис. 11: Функция распределения полного действия для больших значений параметра $\kappa = T \frac{L}{e^2} \frac{2L}{a}$.

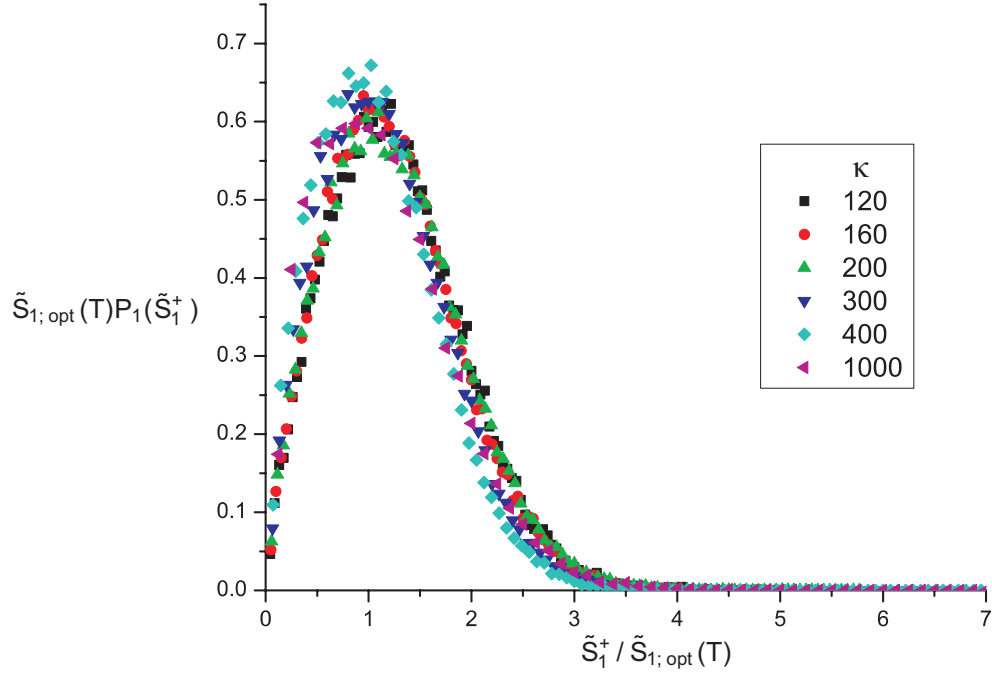


Рис. 12: При больших значениях параметра $\kappa = T \frac{L}{e^2} \frac{2L}{a}$ функцию распределения действия для прыжка электрона с левого берега на островок $P(\tilde{S}_1^+)$ можно представить в виде $P_1(\tilde{S}_1^+) = \frac{1}{S_{1, \text{opt}}(T)} \tilde{P}_1\left(\frac{\tilde{S}_1^+}{S_{1, \text{opt}}(T)}\right)$. В качестве доказательства приведен график для функции \tilde{P}_1 , получающийся для различных значений κ . Совпадение графиков подтверждает существование указанной функции \tilde{P}_1 .

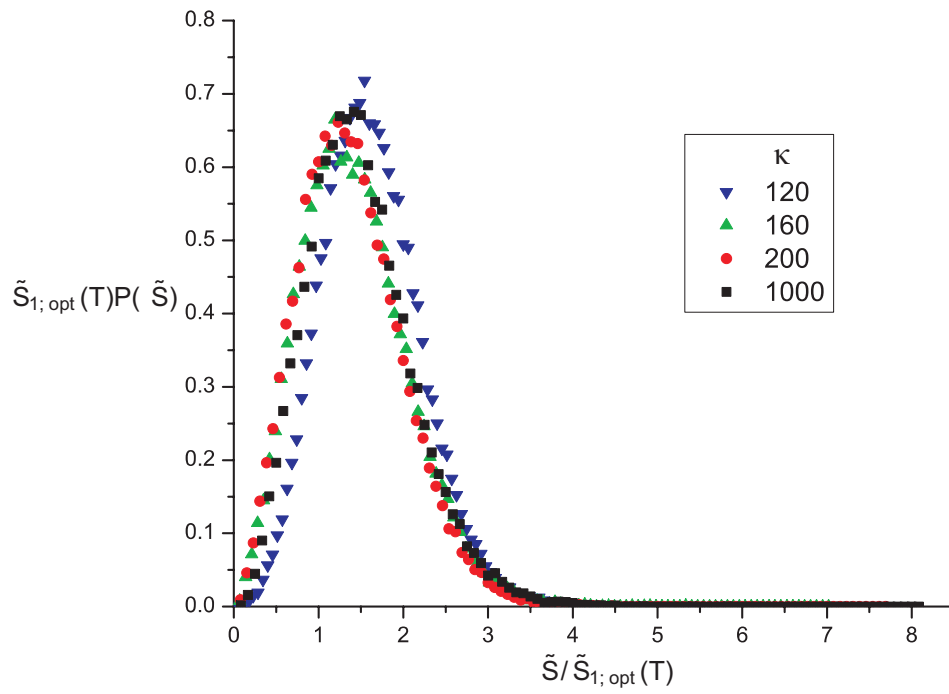


Рис. 13: При больших значениях параметра $\kappa = T \frac{L}{e^2} \frac{2L}{a}$ функцию распределения полного действия можно представить в виде $P(\tilde{S}) = \frac{1}{S_{1,opt}(T)} \tilde{P}_1\left(\frac{\tilde{S}}{S_{1,opt}(T)}\right) \Phi\left(\frac{\tilde{S}}{S_{1,opt}(T)}\right)$ (см. (38)).

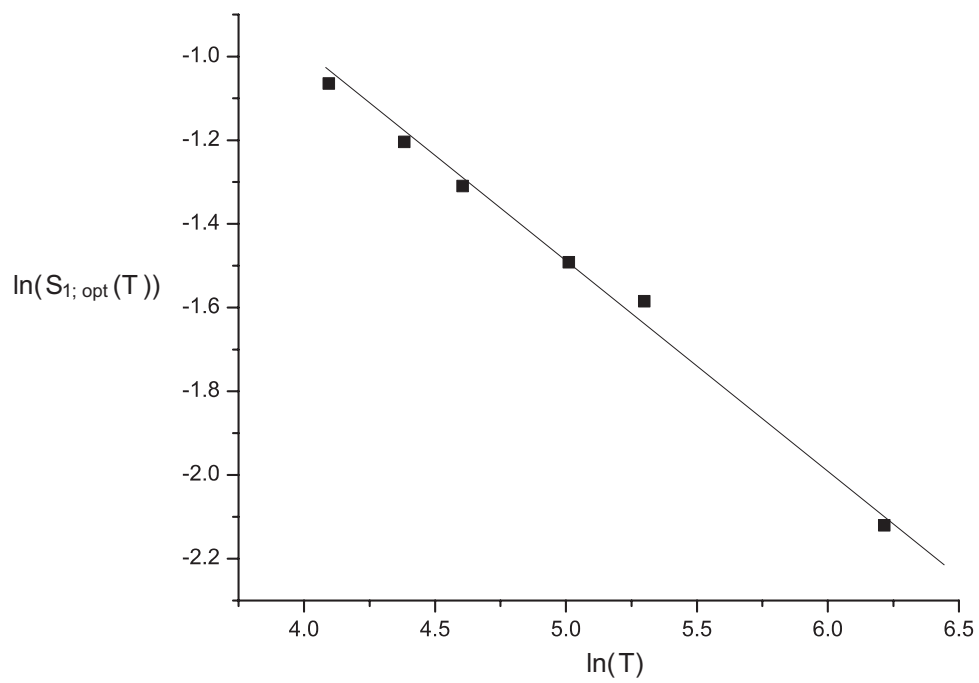


Рис. 14: $\ln(\tilde{S}_{1;opt}^+) = C \ln(T) + \text{const}$, $C \approx -0.49 \pm 0.06$

κ	0.02	0.1	0.4	10	15	120	160	200	1000
d=1	0.99096	0.99126	0.98968	0.98354	0.980200	0.93122	0.90364	0.89474	0.86838
d=3	0.00894	0.00014	0.01022	0.01602	0.019040	0.06586	0.09198	0.10054	0.12436
d=5	0.00010	0.00000	0.00008	0.00044	0.000720	0.00282	0.00418	0.00450	0.00708
d=7	0.00000	0.00000	0.00002	0.00000	0.000040	0.00010	0.00020	0.00020	0.00018

Таблица 2: Статистика количеств несовпадающих пар d для состояний до и после первого акта для различных значений $\kappa = T \frac{L}{e^2} \frac{2L}{a}$.

4 Заключение

Смоделировав систему мы получили, что и активационное слагаемое E_{act}/T , и туннельное слагаемое S_{tun} в показателе экспоненты в выражении для проводимости сильно флуктуируют от образца к образцу. При всех рассматриваемых температурах и, следовательно, значениях параметра $\kappa = T \frac{2L}{a} \frac{L}{e^2}$ энергия активации принимает значения $E_{\text{act}} \sim 10^2$.

При низких значениях κ величины E_{act} и S_{tun} не скоррелированы. Функция распределения энергии активации имеет максимум вблизи нуля. Туннельное действие (обезразмеренное) S при таких κ распределено практически равномерно в пределах от 0.5 до 1, с особенностью при $S = 1$. Туннельное и активационное слагаемые легко разделить, чего нельзя сделать при больших κ .

В большинстве случаев в момент добавления электрона на островок дополнительного перераспределения заряда не происходило. Это связано с недостаточно большим размером системы. Эффекты перераспределения растут с размером всего лишь логарифмически и трудно наблюдаемы.

При $\kappa \gg 1$ удалось обнаружить наличие универсальной, не зависящей от температуры, функции распределения, такой, что функция распределения полного действия при любой высокой температуре может быть выражена через нее и единственный параметр, зависящий от температуры, в качестве которого можно выбрать наиболее вероятное значение действие для прыжка электрона с берега на островок.

5 Приложения

5.1 Алгоритм Tabu Search

Задача нахождения размещения электронов по донорам, минимизирующего энергию их взаимодействия, является задачей минимизации квадратичной формы от бинарного вектора, которыми являются энергия взаимодействия и числа заполнения доноров. Действительно, переобозначим в формуле 3 переменные и коэффициенты:

$$\begin{aligned}u_{ij} &= \frac{e^2}{L} \frac{1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}, \quad i \neq j \\u_{ii} &= -\sum_j \frac{e^2}{L} \frac{1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_j|} + \mu \\n'_i &= 1 - n_i\end{aligned}\tag{39}$$

Таким образом, отбросив несущественную константу, мы получаем классическую формулировку задачи минимизации бинарной квадратичной формы:

$$F = \sum_j n'_i u_{ii} + \sum_{\langle ij \rangle} n'_i n'_j u_{ij}, \quad n'_i \in \{0, 1\}\tag{40}$$

С развитием теории сложности алгоритмов довольно быстро стало понятно, что эффективных алгоритмов, получающих точные решения для таких задач найти не удастся. Тогда стали прибегать к различным эвристическим подходам.

В 1986 Фредом Гловером был предложен один из таких подходов, названный tabu search, который по сей день является лучшим алгоритмом для решения подобного рода задач. Этот метод позволяет при поиске минимума вылезать из локальных минимумов за счет наличия краткосрочной памяти, в которой хранится некоторое количество предыдущих шагов алгоритма. Эта память называется запрещающим списком (tabu list). Благодаря хранению недавней истории заикливание алгоритма в одном из локальных минимумов может быть предотвращено, так как имеется возможность запретить откат алгоритма в состояние, которое уже встречалось и уже хранится в запрещающем списке. По ходу работы алгоритма иногда могут возникать ситуации такие, что оказываются запрещены переходы в состояния, улучшающие значение исследуемой функции и не приводящие к заикливанию алгоритма. Чтобы избежать подобных ситуаций вводятся так называемые подгоняющие критерии (aspiration criteria). Наиболее простой и часто используемый по-

добный критерий разрешает переходить в состояния, для которых значение исследуемой функции меньше, чем наименьшее из ранее найденных. Приведем шаблон алгоритма:

Обозначения

- S , текущее состояние;
- S^* , наилучшее известное состояние;
- f^* , значение минимизируемой функции для состояния S^* ;
- $N(S)$, множество состояний, близких к S ;
- $\tilde{N}(S)$, допустимое подмножество $N(S)$ (т.е. его элементы не запрещены или разрешены согласно подгоняющему критерию);
- T , запрещающий список;

Инициализация переменных

Set $S := S_0$, $f^* := f(S_0)$, $S^* := S_0$, $T := \emptyset$

Поиск

While (*termination criterion not satisfied*) do

- Select S in $\underset{S' \in \tilde{N}(S)}{\operatorname{argmin}} [f(S')]$;
- if $f(S) < f^*$, then set $f^* := f(S)$, $S^* := S$;
- record tabu for the current move in T (delete oldest entry if necessary)

Функция *argmin* возвращает набор решений в $\tilde{N}(S)$, который минимизирует f . Обычно, в качестве критериев останова алгоритма выступают:

- превышение алгоритмом заданного количества итераций
- последовательное выполнение алгоритмом заданного количества итераций без улучшения значения изучаемой функции (наиболее часто используемый критерий);
- достижение изучаемой функцией предопределенного значения.

В нашем исследовании мы используем второй критерий. Количество запоминаемых предыдущих шагов равно 7.

5.2 Метод вычисления наименьшего туннельного действия

Пусть есть два распределения чисел заполнения. Сравнив числа заполнения, можно найти все несовпадающие пары чисел заполнения для двух данных распределений (будем записывать такие пары в форме (n'_i, n_i)). Несовпадающие пары могут быть двух типов: $(0, 1)$ и $(1, 0)$. Для определенности выберем первую несовпадающую пару, начиная с левого конца, и назовем ее парой "-". Пары другого типа назовем парами "+". Если общее количество электронов в распределениях не совпадает, то мысленно добавим на один из концов образца, к примеру на левый (с координатой $x = 0$), если нас интересует прыжок электрона с левого контакта, недостающее число электронов, так чтобы их число в двух распределениях сравнялось. Переход от одного распределения к другому определяется связыванием несовпадающих пар разных знаков. Будем отображать такие связывания стрелками. Длина стрелки соответствует длине прыжка электрона.

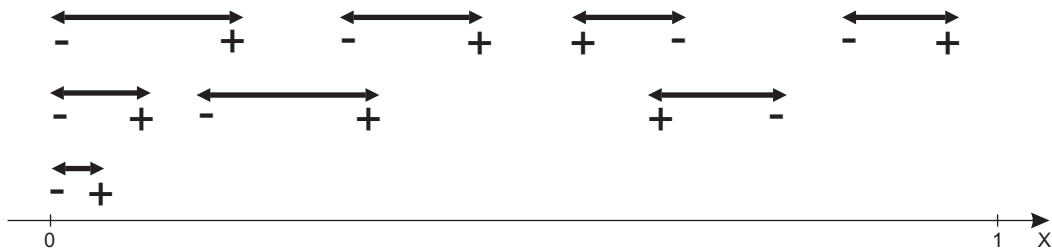


Рис. 15: Переход с минимальным туннельным действием между двумя состояниями с различным распределением электронов. Ради примера показан случай, когда количества электронов отличается на три. На верности вывода это не сказывается.

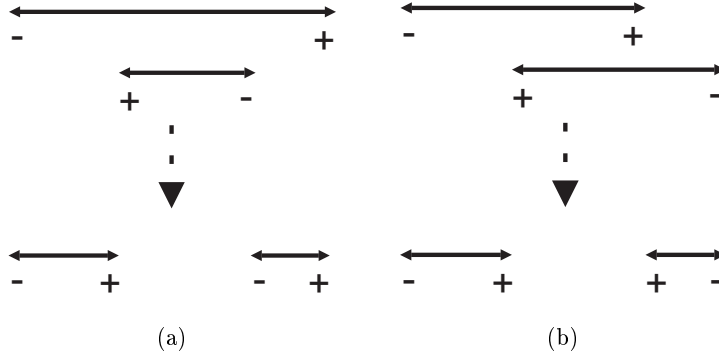


Рис. 16

Построим теперь переход определенного типа. Начнем с левого конца: выберем несовпадающую пару; ищем справа ближайшую несовпадающую пару противоположного знака и соединяем их; соединенные пары выбрасываем из рассмотрения; повторяем процедуру. Тогда получится нечто, похожее на изображенное на рис.15.

Такой переход обладает тем свойством, что внутри любой стрелки может находиться левый конец другой стрелки, если только он совпадает по знаку с левым концом данной стрелки.

Покажем теперь, что любой переход, не обладающий этим свойством, не является минимальным по сумме длин перескоков.

Из отрицания свойства: существует такая стрелка, что внутри находится левый конец другой стрелки, совпадающий по знаку с левым концом данной стрелки. С точностью до обращения всех знаков, возможны два варианта (см. рис. 16а и рис. 16б).

Как показано на рис., в любом из вариантов можно поменять партнеров, так что суммарная длина перескоков уменьшится, из чего следует, что данный переход не минимизирует сумму длин перескоков.

Такая процедура помогает найти переход между двумя распределениями за количество операций $O(N_d)$.

Приведем конкретную формулу для расчета наименьшего туннельного действия для перестройки, полученной в соответствии с описанной выше процедурой:

$$\begin{aligned}
S_{jump;r(l)} &= \frac{2L}{a} \sum_{k=0}^{N_d+1} (n'_k - n_k) \text{sign}(p_k - 0.5(n'_k - n_k)) x_k \\
p_k &= - \sum_{k'=0}^{k-1} (n'_{k'} - n_{k'}), \quad p_0 = 0
\end{aligned} \tag{41}$$

Для удобства счета введены фиктивные доноры на концах образца, на которые мысленно добавлено такое количество электронов, что при реальных общих количествах электронов на донорах равных N' и N , общие количества, учитывающие фиктивные электроны, совпадали.

$$\begin{aligned}
x_0 &= 0, & (n'_0, n_0) &= \begin{cases} (0, N' - N), & \text{если } l \\ (0, 0), & \text{если } r \end{cases} \\
x_{N_d+1} &= 1, & (n'_{N_d+1}, n_{N_d+1}) &= \begin{cases} (0, 0), & \text{если } l \\ (0, N' - N), & \text{если } r \end{cases}
\end{aligned} \tag{42}$$

5.3 Теоретическое доказательство наличия универсальности

Нам нужно минимизировать величину:

$$\tilde{S}_1 = E \frac{e^2}{LT} + S_{1;l} \frac{2L}{a} \tag{43}$$

Функция распределения зависит только от одного безразмерного параметра κ (см. (6)). Но менять его можно, изменяя и параметр L , и параметр T .

Мы хотим менять только лишь температуру, то есть искать функцию $P_1(\tilde{S}_1; L_1, T)$, где L_1 - некоторая фиксированная длина. Для большей наглядности неизменный параметр будем заключать в скобки. То есть ищем функцию $P_1(\tilde{S}_1; (L_1), T)$.

Теперь вспомним, что безразмерный параметр на самом деле один, и изменение температуры можно трактовать как изменение длины. Зафиксируем температуру на некотором значении T_1 и будем менять длину L . Из неизменности безразмерного параметра следует $L = \sqrt{\frac{T}{T_1}} L_1$.

Таким образом:

$$P_1(\tilde{S}_1; (L_1), T) = P_1\left(\tilde{S}_1; L_1 \sqrt{\frac{T}{T_1}}, (T_1)\right) \tag{44}$$

Заметим, что все линейные размеры можно одновременно изменить, и это не скажется на физике системы. Изменится лишь способ обезразмеривания величины S . По сути, сделаем обычную замену переменной.

$$P_1 \left(\tilde{S}_1; L_1 \sqrt{\frac{T}{T_1}}, (T_1) \right) d\tilde{S}_1 = \tilde{P}_1 \left(\tilde{S}_1 \sqrt{\frac{T}{T_1}}; L_1, (T_1) \right) d\tilde{S}_1 \sqrt{\frac{T}{T_1}} \quad (45)$$

$$P_1 \left(\tilde{S}_1; L_1 \sqrt{\frac{T}{T_1}}, (T_1) \right) = \sqrt{\frac{T}{T_1}} \tilde{P}_1 \left(\tilde{S}_1 \sqrt{\frac{T}{T_1}}; L_1, (T_1) \right) \quad (46)$$

Так как мы длину образца теперь не меняем, то имеем право написать:

$$P_1 \left(\tilde{S}_1; L_1 \sqrt{\frac{T}{T_1}}, (T_1) \right) = \sqrt{\frac{T}{T_1}} \tilde{P}_1 \left(\tilde{S}_1 \sqrt{\frac{T}{T_1}}; (L_1), (T_1) \right) \quad (47)$$

Возвращаясь в начало:

$$P_1 \left(\tilde{S}_1; (L_1), T \right) = \sqrt{\frac{T}{T_1}} \tilde{P}_1 \left(\tilde{S}_1 \sqrt{\frac{T}{T_1}}; (L_1), (T_1) \right) \quad (48)$$

Что и являет собой искомую универсальность.

При высоких температур данный вывод справедлив для обоих актов и, следовательно, для полного действия, являющегося суммой действий двух актов. Таким образом, мы еще раз получили результат (33).

Список литературы

- [1] S.D. Baranovskii, A.L. Efros, B.L. Gelmont, B.I. Shklovskii, "Coulomb Gap in Disordered Systems: Computer Simulation J. Phys. C: Solid State Phys. 12, 1023 (1979).
- [2] Fred Glover, Gary A. Kochenberger, Bahram Alidaee, Management Science, Vol. 44, No. 3. (Mar., 1998), pp. 336-345.
- [3] Fred Glover, Gary Kochenberger, Bahram Alidaee, Mohammed Amini, Meta-Heuristics: Theory & Applications, edited by Ibrahim H. Osman, James P. Kelly.
- [4] Elder Magalhães Macambira, Annals of Operations Research 117, 175-190, 2002.

- [5] Michel Gendreau, Jean-Yves Potvin, Search Methodologies: Introductory Tutorials in Optimization and Decision Support Techniques, edited by Edmund K. Burke, Graham Kendall, Chapter 6.
- [6] N.S. Bakhvalov, G.S. Kazacha, K.K. Likharev, S.I. Serdyukova, JETP 95, 1010-1021, (1989).
- [7] Sh. Farhangfar, R.S. Poikolainen, J.P. Pekola, D.S. Golubev, A.D. Zaikin, Phys. Rev. B 63, 075309, (2001).
- [8] J. Johansson, D.B. Haviland, Phys. Rev. B 63, 014201, (2000)
- [9] V. L Nguyen, T. D. Nguyen, H. N. Nguyen, Physics Letters A 291, 150-158, (2001).