

A new method of the calculation of confidence region for non-linear approximating function by the parameters was proposed and realized.

Худсон Д. Статистика для фізиків. – М.: Мир, 1970. – 296с.

Фреик Д.М. и др. Особенности получения слоев PbSe методом горячей стенки
Электронная техника – 1982. – Т.2 – С.48 – 51.

Возняк О.М., Возняк Н.О.

ПОБУДОВА ЗАМКНУТИХ ШЛЯХІВ БЕЗ САМОПЕРЕТИНІВ НА КВАДРАТНІЙ ГРАТЦІ, ПІДРАХУНОК ЇХ КІЛЬКОСТІ ТА ОХОПЛЕНИХ НИМИ ПЛОЩ

Використовуючи комп'ютерні методи, побудовано замкнуті шляхи без самоперетинів на квадратній ґратці для 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18 і 20 кроків. Обчислено максимальну кількість діаграм із заданою довжиною периметра та їх площі

Оскільки точний розв'язок прикладних задач вдається знайти лише для обмеженої кількості і притому лише дуже ідеалізованих моделей, то розв'язання більшості задач здійснюється, в основному, різними наближеними методами, і, зокрема, розкладом у ряди за одним із малих параметрів системи. В цьому випадку, оскільки ряд збіжний, суму ряду можна із заданою точністю замінити сумою більшої чи меншої кількості його перших доданків. Дуже часто кожному члену ряду зручно співставити деякий "граф", або, як кажуть частіше, діаграму. Широко відомі діаграми групових розкладів класичної статистичної фізики [1], чи діаграми Фейнмана квантової теорії полів [2]. Представлення коефіцієнтів ряду у вигляді комбінаторних множників для ґраткових діаграм тепер широко використовується також в теорії фазових переходів [3], теорії неупорядкованих систем [4] та інших галузях теоретичної фізики. При цьому дуже часто ненульовий вклад вносять лише такі доданки, які містять певну величину парну кількість разів. Ця умова приводить до того, що можливі конфігурації зв'язків зображаються многокутниками без самоперетинів.

Така ситуація має місце і при розгляді проблеми андерсонівської локалізації, яка найчастіше вивчається на моделі сильного зв'язку з гільбертоніаном Андерсона [4]

$$H = \sum_i E_i a_i^+ a_i + \sum_{ij} V_{ij} a_i^+ a_j, \quad (1)$$

де a_i^+ (a_i) – оператор породження (знищення) електрона на i -му вузлі,

E – енергія локалізованого на вузлі i електрона, яка є випадковою величиною,

V_{ij} – інтеграл переносу між найближчими сусідніми вузлами i та j .

Локалізація в цій моделі пов'язується із збіжністю локаторного ряду для масового оператора

$$\Delta(E, i) = \sum_j V_{ij} g_j V_{ji} + \sum_{j,k} V_{ij} g_j V_{ki} + \dots, \quad (2)$$

де $g_i = (E - E_i)^{-1}$ – вузлова функція Гріна.

Як впливає із загального аналізу виразу (2), кожному члену ряду можна співставити діаграму, що являє собою ламану лінію довільної форми з умовою, що вона не буде самоперетинатися і до останнього кроку не повертатиметься до початкової точки i . При цьому різні діаграми з однаковою довжиною периметра можуть відрізнятися величиною площі, охопленої діаграмою. Підрахунок кількості різних замкнутих шляхів без самоперетинів, що починаються і закінчуються на одному і тому ж вузлі, для реальної ґратки є складним і може бути "вручну" здійснений лише для невеликої кількості кроків: 4, 6, 8. Однак існує модель ґратки, так звана ґратка Бете [5,9], для якої такий підрахунок реалізується точно для довільного порядку.

Як відомо, ґратка Бете являє собою регулярне дерево (дерево Кейлі), тобто зв'язний граф без циклів. Таку ґратку можна побудувати так: довільно вибираємо центральну точку O , додаємо ще Z точок кожна з них з'єднуємо з центральною точкою. Ця сукупність точок утворює першу оболонку. Наступні оболонки одержують, взявши точку на оболонці r і з'єднавши її з наступними $Z-1$ новими точками. Проробивши цю операцію з усіма точками r ої оболонки, одержимо $r+1$ -шу оболонку. Цей граф можна розглядати як регулярну ґратку з координатним числом Z , якщо не враховувати вузли на границі дерева. Таку ґратку легко визначити, але неможливо реалізувати фізично. Щоб зберегти геометричну однорідність структури і еквівалентність Z гілок, що виходять з кожної вершини, кожна з гілок розглядають як крок в новому вимірі простору нескінченної розмірності. Для ґратки Бете легко вираховується кількість шляхів довжиною в n кроків, які можна провести з даної вершини

$$N(n) = Z(Z-1)^{n-1}. \quad (3)$$

Особливістю цієї моделі є те, що всі шляхи незалежні і без самоперетинів, а повна кількість замкнутих діаграм на ґратці пов'язана із кількістю випадкових шляхів без самоперетинів тієї ж довжини.

Для збіжності ряду, яким визначають масовий оператор (2) суттєвим є відношення кількості незалежних шляхів довжиною в n

крок до кількості шляхів довжиною в n кроків. При великих n ця величина прямує до коефіцієнта зв'язності ґратки

$$K = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{N_{n+1}}{N_n} \quad (4)$$

Зазначимо, що для ґратки Бете $K=Z-1$.

В реальній ґратці не всі можливі кроки є незалежними, оскільки деякі з них приводять до перетинання різних гілок дерева і утворення циклів. Щоб уникнути цього, виконується операція, названа "обрізуванням дерева", яка полягає у видаленні тих його гілок, які приєднують даний вузол з вузлами, через які вже пройшла інша гілка [8]. Розглянемо процес конструювання дерева Кейлі, що відповідає квадратній ґратці. Починаючи з i -го вузла, можна здійснити перший крок в чотирьох допустимих напрямках. Цей крок визначає перші чотири гілки дерева. Наступний крок можна здійснити в трьох напрямках, що додає по три гілки до кожної з чотирьох вихідних. В кінці двокрокового шляху нові кроки виконуються так, щоб уникнути тих вузлів, через які вже пройшов шлях. Ті кроки, які можуть бути реалізовані, приєднують до дерева нові гілки. Цей процес може бути продовжений на більшу кількість кроків. В результаті одержують дерево з багатьма втраченими гілками. Це приводить до зниження коефіцієнта зв'язності ґратки.

На рис. 1 зображено процес побудови чотирьохкрокових шляхів без самоперетинів на квадратній ґратці.

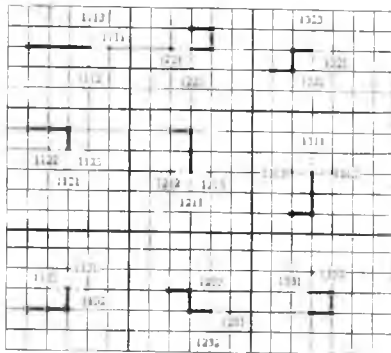


Рис. 1. Послідовність крокувань без самоперетинів на квадратній ґратці для чотирьох кроків ($n = 4$). Суцільні лінії зображають шляхи вже реалізовані, пунктирні — можливі наступні кроки. Цифри індексують кроки вперед, вправо і вліво відповідно як 1, 2 і 3

Однак такий підхід не можна застосувати до систем, що перебувають в постійному магнітному полі \vec{B} , яке, як відомо, приводить до виникнення в інтегралах переносу V_{ij} додаткового фазового множника, так званого фактора Пайєрлса

$$V_{ij}^B = V_{ij} e^{-i\Phi_{ij}}, \quad (5)$$

де $\Phi_{ij} = \frac{e}{hc} \vec{B} [\vec{R}_{ij}, \vec{R}_{ij}]$, а \vec{R}_{ij} — радіус-вектор, що визначає положення i -го вузла ґратки.

Основна властивість цих факторів полягає в тому, що сума вздовж шляху Γ_n на ґратці рівна потоку магнітного поля \vec{B} через площадку S_{Γ_n} , яку охоплює контур Γ_n , виміряного в одиницях кванта магнітного потоку

$$\Phi_0 = \frac{hc}{e};$$

$$\Phi_{\Gamma_n} = \Phi_{ij} + \Phi_{jk} + \dots + \Phi_{ij} = \Phi_0^{-1} B S_{\Gamma_n}. \quad (6)$$

Звідси випливає, що вплив магнітного поля на локалізацію повністю визначається розподілом площ S_{Γ_n} , охоплених шляхами Γ_n без самоперетинів на ґратці. Без врахування розподілу діаграм за площами вдається здійснити лише якісний аналіз впливу магнітного поля на локалізацію [6,7], який ґрунтується на тому, що, згідно із скейлінговою теорією шляхів без перетинів, середньоквадратичний розмір Γ_n рівний

$$\langle R^2 \rangle \sim N^{2\nu} a^2, \quad (7)$$

де a — постійна ґратки, а ν — критичний індекс так званої кореляційної довжини. Для приблизної оцінки середньої площі S_{Γ_n} можна взяти

$$\langle S_{\Gamma_n} \rangle \sim \pi \langle R^2 \rangle \sim \pi a^2 N^{2\nu}. \quad (8)$$

Точніший аналіз впливу магнітного поля на локалізацію можна здійснити, лише маючи детальний розподіл площ шляхів без перетинів. Оскільки постійне магнітне поле впливає на рух зарядів тільки в площині, перпендикулярній до напрямку магнітного поля, то розглянемо процес побудови діаграм і підрахунок їх площ для квадратної ґратки, в якій, до того ж, враховано взаємодію лише між найближчими сусідами.

Першою замкнутою діаграмою, що дає вклад у ряд (2), є квадрат зі стороною a (a — період ґратки) (рис. 2). З вибраним вузлом пов'язано вісім діаграм: чотири діаграми відрізнятимуться положенням квадрата відносно координатних осей, відповідно, у першій, другій, третій чи

четвертій чвертях, а інші чотири відрізняються від перших чотирьох лише напрямом обходу.



Рис. 2. Чотирикрокові діаграми пов'язані з вибраним вузлом

Наступна діаграма, що повинна б утворюватися із п'яти кроків, як і будь-яка інша, що утворена із непарної кількості кроків, відсутня, бо не буде замкнутою.

За допомогою шести зв'язків можна побудувати три однакових прямокутники (рис. 3) різних орієнтацій, тому загальна кількість діаграм дорівнює 24.

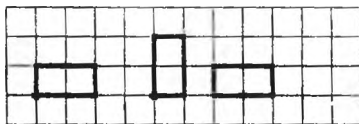


Рис. 3. Орієнтації шестикрокових діаграм відносно вибраного вузла

Із восьми зв'язків можна побудувати три типи діаграм (рис. 4) двох різних площ, а якщо врахувати різні положення початкового вузла та напрям обходу, то загальна кількість діаграм буде 112.

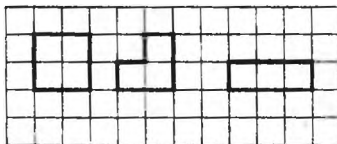


Рис. 4. Три типи восьмикрокових діаграм

Вже з аналізу цих діаграм видно, що найменшу площу мають найбільш витягнуті діаграми. Площа такої діаграми-стовпчика рівна $S_{\min} = \left(\frac{n}{2} - 1\right) a^2$. Найбільшу площу охоплюють діаграми квадратної форми, якщо кількість кроків, що її утворюють, кратна чотирьом:

$S_{\max} = \frac{n^2}{16} a^2$. Якщо ж кількість кроків діаграми кратна двом, але не

кратна чотирьом, то найбільшу площу має прямокутна діаграма з мінімальною різницею між довжинами її сторін. В цьому випадку відповідна площа буде $S_{\Gamma_n}^{\max} = \frac{n^2 - 4}{16} a^2$. Проте детальний розрахунок розподілу площ діаграм, очевидно, може бути здійснений лише з допомогою комп'ютера.

Виконані нами розрахунки базуються на представленні ґратки з допомогою графа, вершин якого співпадають з її вузлами. Тоді задача побудови діаграм еквівалентна задачі про побудову всіх замкнених шляхів (циклів), які починаються в деякій фіксованій точці і проходять лише один раз через підмножину вершин графа. А для реалізації цього завдання використано методику побудови шляхів Гамільтона, але без умови обов'язкового проходження їх через кожен з вершин графа. Найпростіший алгоритм, який можна використати з цією метою, полягає у переборі всіх можливих послідовностей вузлів. Він вимагає генерування $n!$ (n – кількість кроків циклу) різних послідовностей, кожен з яких треба перевірити на предмет того, чи визначає вона відповідний шлях, а це збільшує кількість кроків обчислювальної процедури до величини $n!n$.

Нами використано метод, який дає змогу значно скоротити кількість кроків алгоритму, і називається алгоритмом з поверненням (backtracking) [10]. Основна ідея методу полягає в тому, що на основі n -крокової послідовності, відшукується крок, який дав би $(n+1)$ -крокову послідовність. Якщо такого не знайдено, то робиться крок назад і відшукується інший n -ий крок, який продовжив би послідовність. Роботу цього алгоритму можна проілюструвати процесом пошуку на деякому дереві, кожній вершині якого відповідає певна кількість кроків. Об'єм обчислень за допомогою алгоритму з поверненням хоч і зменшується порівняно з випадком повного перебору, все ж залишається великим і експоненціально зростає при збільшенні розмірності задачі. Це суттєвішого скорочення об'єму обчислень вдалося досягнути, поставивши умову припинення розрахунків на тих гілках дерева, для яких довжина шляху від кореня до даної гілки перевищує задану довжину, але не утворює циклів. В такий спосіб, в рамках розумних часових затрат, вдалося реалізувати розрахунки, починаючи від найпростіших чотирикрокових діаграм до діаграм, утворених двадцятьма кроками.

На наступному етапі роботи програми здійснюється розрахунок площ одержаних фігур і підраховується їх кількість. Обчислення площі діаграми здійснюється шляхом підрахунку її внутрішніх вузлів, тобто вузлів, що знаходяться всередині утвореної фігури і не належать її межі. Цей процес містить також ряд перевірок того, чи вузол справді відноситься до внутрішніх. Результати розрахунків подано в таблиці 1.

Таблиця 1.

Розподіл площ та кількості замкнених діаграм без самоперетинів, утворених із n кроків

К-сть кроків n	Площа діаграми $S_n (a^2)$	К-сть діаграм площею S_n	Повна к-сть n -крокових діаграм N_n	$\frac{N_{n+2}}{2N_n}$
4	1	8	8	-
6	2	24	24	1,5
8	3	96	112	2,33
	4	16		
	6	40		
10	4	360	560	2,5
	5	160		
	6	40		
	7	1320		
	8	960		
12	5	1320	2976	2,66
	6	960		
	7	528		
	8	144		
	9	24		
14	6	4872	16464	2,77
	7	4704		
	8	3752		
	9	2016		
	10	840		
	11	224		
	12	56		
16	7	18112	94016	2,86
	8	21632		
	9	20992		
	10	15424		
	11	9920		
	12	4832		
	13	2176		
	14	704		
	15	192		
	16	32		
18	8	67248	549648	2,92
	9	96192		
	10	107712		
	11	93312		
	12	75096		
	13	50112		
	14	31104		
	15	16416		
	16	7848		
	17	3168		
	18	1080		
	19	288		
20	72			

20	9	249320	3273040	2.98
	10	415200		
	11	526400		
	12	514480		
	13	468680		
	14	373280		
	15	281280		
	16	189920		
	17	120400		
	18	69120		
	19	36560		
	20	17040		
	21	7480		
	22	2720		
	23	880		
	24	240		
	25	40		

В таблиці також наведено відношення повної кількості діаграм, утворених із $n+2$ кроків, до кількості діаграм, утворених із n кроків:

$\frac{N_{n+2}}{2N_n}$. Якщо останнє зобразити графічно, як функцію кількості кроків, з яких утворена відповідна діаграма (рис. 5), то, як видно із графіка, ця залежність має регулярний характер, що є додатковим підтвердженням правильності розрахунків за вибраним алгоритмом обчислень. Крім того, відношення $\frac{N_{n+2}}{2N_n}$ прямує до числа, рівного трьом, що відповідає коефіцієнту зв'язності квадратної ґратки.

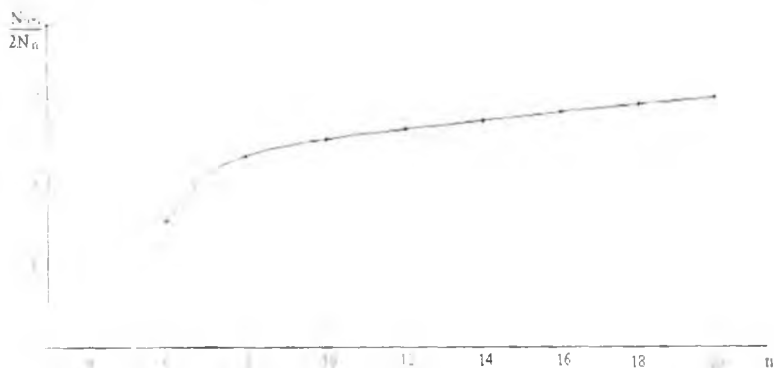


Рис. 5. Залежність відношення кількості $(n+2)$ -крокових діаграм до подвійної кількості n -крокових діаграм від кількості кроків n

Результати розрахунків можна використати при аналізі збіжності рядів теорії збурень, високотемпературних розкладів, локаторних розкладів.

The closed self-avoiding paths on a square lattice for 4,6,8,10,12,14,16,18 and 20 steps have been constructed using computer methods. The total number of diagrams with fixed perimeter length and their squares have been calculated.

1. Исихара А. Статистическая физика. М.: Мир.– 1973.– 471 с.
2. Ахиезер А.И., Бересгецкий В.Б. Квантовая электродинамика. М.: Наука. – 1981 – 432 с.
3. Фишер М. Природа критического состояния. М.: Мир. – 1969 – 221 с.
4. Займан Дж. Модели беспорядка. М.: Мир.– 1982.– 591 с.
5. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир. – 1985. – 486с.
6. Fastenrath U. Numerical and analytical investigation of localization in magnetic fields // J. Phys.:C. – 1990. V. 2. - P.7123 – 7135.
7. Садовский М.В. Локализация в модели случайных фаз и в магнитном поле // ЖЭТФ. 1981. – Т. 80. – № 3. С.1135 – 1147
8. Srivastava V. A nearly exact method of solving certain localization problems/ J. Phys.:C. – 1989. - № 1. – P.4311 – 4322.
9. Furusak A. Anderson localization due to a random magnetic field in twodimension //Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82 – № 3. – P 604 – 607.
10. Липский В. Комбинаторика для программистов. М.: Мир. 1988. 214с.

О.Я. Довгий, І. В. Калитчук

**ТРИШАРОВО-ПОТИПОВА МОДЕЛЬ РУХЛИВОСТІ НОСІВ
ЗАРЯДУ ПЛІВОК**

За допомогою тришарової моделі Петрица застосованої окремо для р- і n-типу плівки PbSnTe зроблена оцінка рухливості носіїв заряду в плівці PbSnTe.

Для визначення вкладу поверхневих ефектів проаналізовано рухливість тонких плівок PbSnTe різної товщини.

Плівки PbSnTe вирощувались методом гарячої стінки [1] на поліамідній підкладці товщиною 25 мкм при температурі осадження 573К.

Одержані полікристалічні плівки мають кубічну структуру із переважаючою орієнтацією (001) до поверхні підкладки. Товщина плівок змінювалась від 3 до 25 мкм.

Плівки товщина яких менша 12 мкм мали р-тип провідності, а товстіші плівки були n-типу. Холлівська рухливість при температурі 86 К як функція товщини для плівок показана на рис. 1. З рисунка видно, що найбільш суттєва зміна рухливості носіїв струму характерна для товщин плівок від 5 до 10 мкм і від 13,5 до 20 мкм, які відповідають р-