Асимптотическое поведение электронных волновых функций в неупорядоченных гранулированных материалах

И. П. Звягин, А. Г. Миронов[a], М. А. Ормонт

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики полупроводников. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.
E-mail: [a] scon282@phys.msu.ru

Статья поступила 09.12.2008, подписана в печать 26.12.2008.

Вычислена длина затухания волновых функций слабо локализованных электронов в неупорядоченном гранулированном материале, определяющая скорость пространственного убывания волновых функций в режиме суперлокализации. Установлена зависимость длины затухания от энергии и структурных параметров системы.

Ключевые слова: гранулированный проводник, туннелирование, оптимальная траектория, длина затухания волновой функции.

УДК: 538.915. PACS: 71.15.–m.

Введение

При анализе процессов переноса в гранулированных неупорядоченных материалах по слабо локализованным состояниям на диэлектрической стороне перехода металл–изолятор существенную роль играет структура волновых функций при энергиях, прилегающих снизу к порогу подвижности. В рассматриваемых системах основную долю объема занимают проводящие области случайной формы, разделенные плохо проводящими прослойками переменной толщины. Для выяснения особенностей переноса в таких системах особый интерес представляет асимптотическое поведение волновых функций на расстояниях от центра локализации, значительно превышающих средний размер проводящих областей — гранул Λ_0. Это связано с тем, что при низких температурах основной вклад в вероятности прыжковых переходов между удаленными гранулами может формироваться не за счет обычного механизма прыжков переменной длины с участием фононов, а посредством когерентных переходов через виртуальные промежуточные состояния [1–3]. Асимптотическое поведение волновых функций, формируемых изоэнергетическими переходами, достаточно изучить в предельном случае нулевой температуры. Очевидная характерная черта поведения локализованных волновых функций состоит в убывании их амплитуды на больших расстояниях, причем возможные редкие случайные «всплески» волновых функций [4] не изменяют вывода о преобладании тенденции к убыванию. Можно полагать, что далекие хвосты всего семейства подобных функций, отвечающих различным конечным точкам на заданном расстоянии R от центра локализации, группируются вблизи некоторой огибающей, монотонно убывающей с ростом R. Существенную информацию о ее поведении можно получить в пренебрежении отраженными от барьеров волнами. В результате задача сводится к более простой проблеме когерентного туннельного прохождения сквозь последовательность барьеров [5].

1. Постановка задачи

Характерная особенность рассматриваемой системы состоит в наличии барьеров малой случайной толщины, отделенных друг от друга сравнительно большими промежутками, распределенными по размерам в окрестности величины Λ_0. При этом в пределах гранул спектр движущегося электрона практически непрерывен, так что достаточно удовлетворительно работает квазиклассическое приближение, позволяющее легко учитывать малые случайные отклонения глубин потенциальных ям от их среднего значения. Рассматриваемый процесс состоит в распространении электрона, рожденного в некоторой грануле — центре локализации, к удаленной грануле, находящейся на расстоянии $R \gg \Lambda_0, w$, где w — средняя толщина барьеров между гранулами, которая в плотных гранулированных материалах часто мала по сравнению с размерами гранул ($w \ll \Lambda_0$).

Процесс распространения электрона можно разбить на несколько последовательных этапов. Каждый из них включает одномерное, вообще говоря, непрямолинейное, квазиклассически свободное движение внутри гранулы и одномерное прохождение через очередной барьер. Фактически используется представление запаздывающей антикоммутаторной одночастичной функции Грина в виде интеграла по траекториям. Ее фурье-образ по времени, отвечающий заданной энергии, а также граничному условию убывания на бесконечности, и дает нам искомую асимптотику. Основанием для такого квазиодномерного подхода к решению задачи для трехмерной системы служат результаты изучения структуры зарождающегося перколяционного кластера, оказывающегося в основном одножильным вблизи порога протекания [6]. Для учета искривленности траекторий, т. е. отличия длины пути L вдоль траекторий, дающих основной вклад в итоговый результат, от геометрического расстояния R, мы воспользуемся результатами численных расчетов [7]. Вместе с тем мы будем явно учитывать роль других факторов, определяющих разброс параметров системы (размеров гранул и глубин потенциальных ям в них, а также толщин межгранульных барьеров).

Конкретизируем постановку задачи. Будем считать, что потенциальный рельеф системы определяется наличием барьеров с плоскими потолками, расположенными на одинаковой высоте $\varepsilon = \hbar^2\kappa^2/(2m)$ над некоторым интересующим нас уровнем энергии E. Будем нумеровать барьеры, встречающиеся электрону на рассматриваемой траектории, индексом j, $1 \leqslant j \leqslant N$, где N — случайное полное число звеньев данной цепочки-траектории. Будем считать толщины барьеров $D_j = w + d_j$ случайными величинами, распределенными около среднего значения

w независимо друг от друга по одному и тому же закону

$$P_d(d) = (2\delta)^{-1}\theta(\delta^2 - d^2). \qquad (1)$$

Конкретный вид столь простого модельного прямоугольного распределения не принципиален, важна лишь конечность величин w и $\delta < w$. Дно потенциальной ямы в j-й грануле будем считать плоским и расположенным ниже E на величину $U_j = U_0 + u_j$, где $U_0 = \hbar^2 k^2/(2m)$. Будем также считать, что флуктуации глубин ям u_j малы, $|u_j| \ll U_0$, а распределения $P_u(u)$ величин u_j имеют нормальный вид

$$P_u(u) = \left(bU_0\sqrt{2\pi}\right)^{-1} \exp\left[-u^2/\left(2b^2U_0^2\right)\right], \qquad (2)$$

причем $b \ll 1$. Наконец, длину пробега в j-й грануле будем задавать в виде $\Lambda_j = a + l_j$, где $a \sim \Lambda_0$ есть средняя по всем ямам величина Λ_j, а одинаковые для всех j распределения флуктуаций l_j длин пролета возьмем в виде

$$P_l(l) = (2\lambda)^{-1}\theta(\xi^2 - l^2). \qquad (3)$$

Пространственное поведение волновой функции определяется суммированием по траекториям величины $\exp(\sigma)$, где функционал σ, равный укороченному действию, умноженному на $i/\hbar$, в нашей квазиклассической модели легко вычисляется. В силу того что волновое число постоянно в пределах каждой из ям, а скорости затухания волновой функции внутри всех барьеров одинаковы, он превращается в сумму вкладов σ_j отдельных звеньев

$$\sigma = \sum_{j=1}^{N} \sigma_j, \quad \sigma_j = i\Lambda_j\sqrt{k^2 - 2mu_j} - (w + d_j)\kappa. \qquad (4)$$

Задача решается нахождением точки стационарности σ, отвечающей максимуму вещественной части σ, в многомерном пространстве переменных N, u_j, d_j, Λ_j с учетом вероятностей их реализации. Этой точке соответствует оптимальная траектория, определяющая основной вклад в зависимость действия (4) от длины траектории, т. е. асимптотическое поведение волновой функции с экспоненциальной точностью. Возможное отличие интеграла по траекториям в окрестности указанной точки от нормировочного множителя может привести лишь к появлению сравнительно медленно меняющегося предэкспоненциального множителя.

2. Нахождение оптимальной траектории

Процедура нахождения оптимальной траектории выполняется в несколько этапов. Прежде всего, вклады в действие от движения внутри каждой гранулы оптимизируются с учетом (2) по переменным u_j при фиксированном числе звеньев N; это приводит к замене σ_j на величину σ_j^*, равную

$$\sigma_j^* = i\Lambda_j k - (b\Lambda_j k)^2/8 - (w + d_j)\kappa. \qquad (5)$$

Затем суммы многих ($N \gg 1$) случайных величин Λ_j, Λ_j^2 и d_j, распределенных одинаково и независимо друг от друга согласно (1), (3), вычисляются с помощью предельной теоремы, в соответствие с которой подобные суммы суть случайные величины, распределенные по нормальному закону. Соответствующие дисперсии просто связаны с дисперсиями распределений отдельных слагаемых. Получающийся в итоге результат представляет собой функцию $\sigma^*(L, D, N)$ случайных переменных — полной длины траектории L, суммарной толщины D встречающихся на ней барьеров и N:

$$\sigma^*(L, D, N) = ikL - \kappa D - \left(a^2 + \xi^2/3\right)Nk^2b^2/8, \qquad (6)$$

а распределения переменных L и D гауссовы:

$$P_L(L, N) \approx \exp\left[-3(L - Na)^2/(2N\xi^2)\right],$$
$$P_D(D, N) \approx \exp\left[-3(D - Nw)^2/(2N\delta^2)\right].$$

Следующий этап состоит в оптимизации действия (6) по переменным N и D с учетом вероятности их реализации, что эквивалентно нахождению точки N^*, D^* стационарности функции

$$f(L, D, N) = \sigma^*(L, D, N) + \ln[P_L(L, N)P_D(D, N)]$$

при фиксированной длине траектории L. Это дает в точке оптимума

$$f^*(L) = f(L, D^*, N^*) = ikL - \nu\gamma w,$$

где

$$\gamma = \kappa - \kappa^2\delta^2/6 + \left(a^2 + \xi^2/3\right)k^2b^2/8, \qquad (7)$$

$$\nu = 2L/[ag(1 + g)], \quad g = \sqrt{1 + 2(\xi/a)^2\gamma w/3}. \qquad (8)$$

Таким образом, убывание волновой функции вдоль рассматриваемой траектории с ростом длины траектории L происходит экспоненциально, как $\exp(-L/\lambda)$, причем характерная длина затухания λ определяется выражением

$$\lambda = ag(1 + g)/(2\gamma w). \qquad (9)$$

Эффективная проницаемость отдельного барьера, пропорциональная $\exp(-2\gamma w)$, содержит, согласно (7), (8), зависимость от энергии (через κ и k) и от структурных параметров, характеризующих как средние размеры гранул и барьеров ($a \sim \Lambda_0, w$), так и их разброс (ξ и δ соответственно), а также разброс глубины потенциальных ям (через b).

Заключение

Полученный результат для затухания волновой функции вдоль квазиодномерных траекторий определяет и скорости убывания волновой функции при увеличении геометрического расстояния R до центра локализации, если воспользоваться выводами скэйлинговой теории локализации и результатами численных расчетов [6, 7]. Согласно этим результатам, минимальная длина L траектории без самопересечений (так называемое химическое расстояние), связывающая две точки перколяционного кластера, разделенные геометрическим расстоянием R, асимптотически растет быстрее, чем по линейному закону: $L/\lambda \sim c(R/\lambda)^\zeta$, где для трехмерных систем критический индекс $\zeta \approx 1.36$, а c — численная константа. Таким образом, при удалении от центра локализации волновая функция убывает быстрее, чем по экспоненциальному закону (суперлокализация):

$$\psi(R) \sim \exp\left[-c(R/\lambda)^\zeta\right], \qquad (10)$$

причем характерная длина затухания определяется выражением (9).

Проведенное рассмотрение обосновывает картину, предложенную в работах [2, 3] для рассмотрения проводимости по слабо локализованным состояниям через промежуточные виртуальные состояния в окрестности

порога локализации. Температурная зависимость проводимости, определяемой туннелированием между суперлокализованными состояниями, описывается выражением моттовского типа $\sigma = \sigma_0 \exp\{-(T_0/T)^x\}$, где σ_0 — предэкспоненциальный множитель, слабо зависящий от температуры, T_0 — параметр Мотта, а x — показатель степени, который выражается через критический индекс ζ и фрактальную размерность скелетного кластера, определяющего проводимость [2]. Полученные выражения (9), (10) определяют зависимость параметра Мотта T_0 от структурных характеристик системы, т.е. от размеров гранул и толщин диэлектрических барьеров между ними, а также от степени беспорядка, определяющего флуктуации этих величин.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 09-02-00561).

Список литературы

1. *Zvyagin I.P., Keiper R.* // Phil. Mag. B. 2001. **230**, N 9. P. 997.
2. *Zvyagin I.P., Keiper R.* // Phys. Stat. Sol. (b). 2002. **230**, N 1. P. 151.
3. *Zvyagin I.P.* // Proc. 10th Int. Symp. «Nanostructures: Physics and Technology». St. Petersburg, June 17–21, 2002. P. 550.
4. *Anderson P.W.* // Phys. Rev. 1958. **109**. P. 1492.
5. *Лифшиц И. М., Кирпиченков В.Я.* // ЖЭТФ. 1979. **77**, № 3(9). С. 980.
6. *Stauffer D., Aharony A.* Introduction to Percolation Theory. L.; Washington, 1992.
7. 7. *Hermann H.J., Stanley H.E.* // J. Phys. A. 1983. **14**. P. L159.

Asymptotic behavior of electronic wave functions in disordered granular materials

I. P. Zvyagin, A. G. Mironov[a], M. A. Ormont

Department of Superconductor Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.
E-mail: [a] scon282@phys.msu.ru.

For weakly localized electrons in a disordered granular material, the decay length is calculated that determines the wave function decay rate in the super-localization regime. The dependence of the decay length on energy and structure parameters is established.

Keywords: granular conductor, tunneling, optimal trajectory, wave function decay rate.
PACS: 71.15.–m.
Received 9 December 2008.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 3(2009).

Сведения об авторах

1. Звягин Игорь Петрович — д. ф.-м. н., профессор, профессор; тел.: 939-37-31, e-mail: zvyagin@phys.msu.ru.
2. Миронов Александр Григорьевич — к. ф.-м. н., ст. научн. сотр., ст. научн. сотр.; тел.: 939-37-31, e-mail: scon282@phys.msu.ru.
3. Ормонт Михаил Александрович — к. ф.-м. н., доцент; тел.: 939-41-18, e-mail: ormont@phys.msu.ru.