第 51 卷 第 1 期 2002 年 1 月
1000-3290/2002/51(01)/0143-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.51,No.1,January,2002

一维无序体系电子跳跃导电研究

徐 慧 宋祎璞 李新梅

(中南大学应用物理系,长沙 410083)

(2001 年 4 月 9 日收到;2001 年 6 月 4 日收到修改稿)

建立了电子隧穿电导模型,推导了一维无序体系新的直流电导公式.通过计算 20000 格点无序体系的直流电导率,分析了直流电导率和温度及外场电压的关系,讨论了无序度对直流电导的影响.计算结果表明,无序体系的直流电导率随无序度的增加而减小.外加电场较小时,电导率相对较大,且出现一系列峰值,电压较大时,电导率反而较小.无序体系在低温区出现了负微分电阻特性,电导率随温度的升高而增大,在高温区电导率随温度的升高而减小.计算结果和实验符合很好.

关键词:无序体系,电子隧穿,直流电导率

PACC:7210

1 引 言

近年来,由于非晶态半导体和有机聚合物所展现的令人鼓舞的应用前景,无序体系的电导问题越来越受到重视.电子 Hopping 电导的输运机制最早由 Mott 等[1]提出,解释了冷却到液氮温度下补偿性晶态半导体的直流电导行为.Miller 和 Abrahams[2]用经典的处理方法计算了 Hopping 电导的迁移率.Aldea 等[3]和 Newman 等[4]在此基础上考虑单电子紧束缚近似,近邻相互作用,分别用傅里叶晶格变换和重正化群的方法发展了该理论.Havlin 等[5],Samukhin 等[6]采用分形愈渗理论对无序体系电导问题作了有益的研究.但是目前这方面的研究仍处于实验总结阶段,还没有完整的理论和一致的认识.

物质的电阻主要有两部分因素引起:一是由结构缺陷无序(包括结构无序,成分无序和拓扑无序)引起的电导;二是由格点原子热运动引起的电导.电声相互作用引起的电导研究较多[1],而由电子隧穿效应引起的电导则研究很少.考虑到一维问题能将明晰的物理思想和有效的数学方法联系起来,我们建立了电子隧穿电导模型,由此推导了一维无序体系的直流电导公式.通过计算 20000 格点无序体系的直流电导率,分析了电导率和温度及外场电压的关系,讨论了无序度对无序体系直流电导的影响.计算结果和实验符合很好.

2 模型和方法

我们采用一维无序体系的 Anderson[7]模型,各格点处势能无规起伏,记及次紧邻格点电子的作用,体系哈密顿量可写为

$$H = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i \mid i\rangle\langle i \mid + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq 1}^{N} t_{ij} \mid i\rangle\langle j \mid, \tag{1}$$

N 为格点数,ε_i 在 $-D/2$ 和 $D/2$ 内无规起伏,D 代表无序度,t_{ij} 为近邻格点对电子的作用,计及最近邻和次近邻.

我们取[8]

$$t_{ij} = -2/(\mid i-j \mid + 1) \qquad \mid i-j \mid \leqslant M, \tag{2}$$

$$t_{ij} = 0 \qquad \mid i-j \mid > M, \tag{3}$$

这里 $M = 2$.

我们利用 Dean 和 Martin[9]的负本征值理论和 Wu 等[10]的无限阶微扰理论,发展了新的方法求解无序体系的本征问题,该方法高效精确,能计算近十万阶的矩阵,计算误差小于 10^{-12}.无序体系的电子波函数呈现局域化的特性.我们定义局域态电子波函数的扩展长度为体系哈密顿量的本征值对应的非零本征矢分量的个数.随着无序度的增加,电子波函数由扩展态变为局域态;电子局域化程度不断加强,波函数扩展长度迅速减小.电子局域态形成后,本征矢量的量值和振幅位置不随格点数的增加而改变,中枢点也保持不变,但是本征矢和中枢点随着本征值的不同而改变.图 1 是无序体系的局域态波函

数图. 图 2 为局域态波函数的扩展长度随无序度的变化规律图.

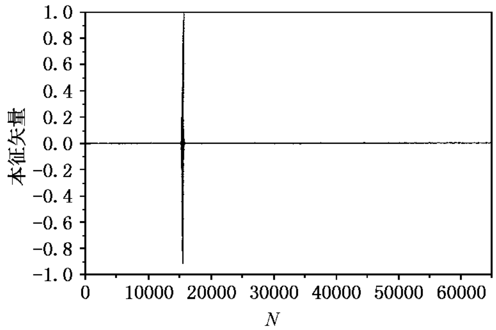

图 1 无序体系局域态波函数图 (体系格点数 N 为 65000,无序度 D 为 2,本征值为 -0.999817456576420,中枢点 $L=15476$,纵轴表示本征矢量,横轴表示体系格点数)

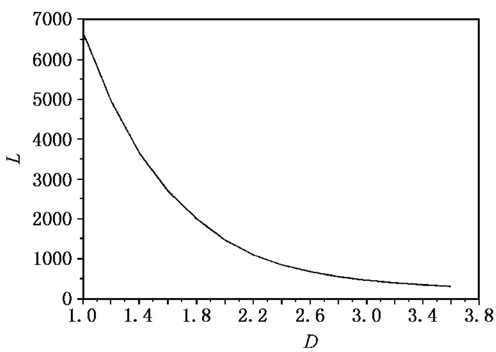

图 2 局域态波函数的扩展长度随无序度的变化规律图 (纵轴 L 表示扩展长度,横轴 D 表示体系无度)

外加直流电场后,电子和电场相互作用,通过隧道效应,由一局域态跳跃至另一局域态. 我们建立如下的电子隧穿电导模型:电子由格点 i 跳跃到格点 $i+n$,穿过一系列势垒和势阱,势垒和势阱在 $-D/2$和 $D/2$ 之间无规起伏,如图 3 所示.

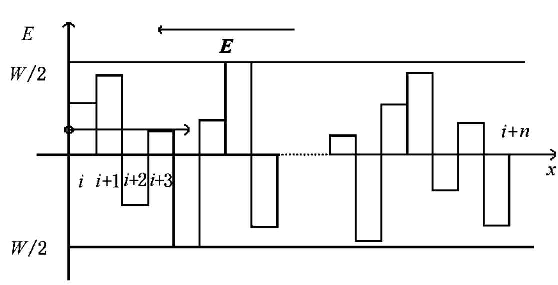

图 3 电子隧穿电导模型

利用传输矩阵[11,12] 的方法,我们计算了电子在局域态之间的跳跃概率. 在入射区和出射区,电子波函数可以通过求解其相应的薛定谔方程而得到,分别表示为

$$\phi_i(x) = e^{ik_{/\!/}\rho}\begin{bmatrix} A_i e^{ik_i x} \\ B_i e^{ik_i x} \end{bmatrix}, \tag{4}$$

$$\phi_{i+n}(x) = e^{ik_{/\!/}\rho}\begin{bmatrix} A_{i+n} e^{ik_{i+n} x} \\ B_{i+n} e^{ik_{i+n} x} \end{bmatrix}, \tag{5}$$

$k_{/\!/}$ 为 x 轴垂面上波矢 k 的分量,在势垒和势阱区,可以分别求解单电子薛定谔方程,进而利用波函数及其导数在势垒势阱界面处连续的条件写出传递矩阵,求得电子隧穿整个结构的传输概率.

电子的隧穿过程可用方程表示为

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} A_i e^{ik_i x} \\ B_i e^{ik_i x} \end{bmatrix} &= M\begin{bmatrix} A_{i+n} e^{ik_{i+n} x} \\ B_{i+n} e^{ik_{i+n} x} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_{i+n} e^{ik_{i+n} x} \\ B_{i+n} e^{ik_{i+n} x} \end{bmatrix},\end{aligned} \tag{6}$$

M 是总传递矩阵,求解的实质是令 $B_{i+n}e^{ik_{i+n}x}=0$,即出射区只有透射波而无反射波.

若定义透射概率 W 为透射概率流密度与入射概率流密度之比,则 W 可表示为

$$W = \frac{k_{i+n}\,|A_{i+n}|^2}{k_i\,|A_i|^2} = \frac{k_{i+n}\,|M_{11}|^{-2}}{k_i}. \tag{7}$$

由于时间反演对称性,本征态的复共轭也是薛定谔方程的解, 即 $A_i^* e^{-ik_i x} + B_i^* e^{ik_i x}$ 也是入射区的解, $A_{i+i}^* e^{-ik_{i+n}x} + B_{i+n}^* e^{ik_{i+n}n}$ 也是出射区的解. 只不过 B_i^* 为入射波振幅,A_i^* 为反射波振幅,B_{i+n}^* 为透射波振幅,因而有

$$\begin{bmatrix} A_i^* e^{-ik_i x} \\ B_i^* e^{ik_i x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_{i+n}^* e^{-ik_{i+n} x} \\ B_{i+n}^* e^{ik_{i+n} x} \end{bmatrix}, \tag{8}$$

它等价于

$$\begin{bmatrix} A_i e^{ik_i x} \\ B_i e^{ik_i x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11}^* & M_{12}^* \\ M_{21}^* & M_{22}^* \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_{i+n} e^{ik_{i+n} x} \\ B_{i+n} e^{ik_{i+n} x} \end{bmatrix}, \tag{9}$$

M 必然满足

$$M_{11}^* = M_{11},\ M_{12}^* = M_{12}, \tag{10}$$

这样,

$$W = \frac{\det|M|}{|M_{11}|^2}. \tag{11}$$

3 无序体系的直流电导公式

对无序体系外加直流电场,电场强度为 E,电子和外加电场相互作用,由格点 i 处的局域态跳跃至格点 j 处的局域态,跳跃距离 $R=l_j-l_i$,l 为格点

坐标.

电子穿过势垒和势阱，由格点 i 处跳跃至格点 j 处，跳跃概率为

$$W = \frac{\det|M|}{|M_{11}|^2}\delta(E_i + eE(l_j - l_i) - E_j), \tag{12}$$

电子从 $|E_i\rangle$ 态跳跃到 $|E_j\rangle$ 态上所形成的正向电流密度为

$$\begin{aligned} j_+ &= eWf(E_i)[1 - f(E_i + eER)] \\ &= e\frac{\det|M|}{|M_{11}|^2}f(E_i)[1 - f(E_i + eER)] \\ &\quad \cdot \delta(E_i + eER - E_j). \end{aligned} \tag{13}$$

电子从 $|E_j\rangle$ 态跳跃到 $|E_i\rangle$ 态上所形成的反向电流密度为

$$\begin{aligned} j_- &= eWf(E_i + eER)[1 - f(E_i)] \\ &= e\frac{\det|M|}{|M_{11}|^2}f(E_i + eER)[1 - f(E_i)] \\ &\quad \cdot \delta(E_i + eER - E_j). \end{aligned} \tag{14}$$

电子跳跃所形成的净电流密度为

$$\begin{aligned} j &= j_+ - j_- \\ &= e\frac{\det|M|}{|M_{11}|^2}[f(E_i) - f(E_i + eER)] \\ &\quad \cdot \delta(E_i + eER - E_j) \\ &= e^2RE\frac{\det|M|}{|M_{11}|^2}\left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E}\right). \end{aligned} \tag{15}$$

无序体系由于电子隧穿效应而形成的总电流密度为

$$j_{总} = \int e^2RE\frac{\det|M|}{|M_{11}|^2}\left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E}\right)\mathrm{d}E, \tag{16}$$

$f(E)$为电子费米分布，

$$f(E) = \frac{1}{\mathrm{e}^{(E-E_F)/KT} + 1}, \tag{17}$$

E_F 为电子费米能.

由电流密度和电场强度的关系，最后得到无序体系由于电子隧穿效应产生的直流电导率.

$$\begin{aligned} \sigma_{dc} &= \frac{j_{总}}{E} \\ &= \int e^2R\frac{\det|M|}{|M_{11}|^2}\left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E}\right)\mathrm{d}E. \end{aligned} \tag{18}$$

从推导的直流电导率公式来看，对体系电导有贡献的电子跳跃主要发生在费米能级 E_F 附近. 因此电子跳跃的初末两态能量相差较小，但是两局域态中电子的局域位置可能相差很大[13]. 这就意味着电子跳跃时，为了寻找能量相近的初末局域态，需要跳跃较远的距离. 在有限温度下，电子只在费米能附近几个 kT 能量范围内的能态上进行跳跃，直流电导公式可简化为

$$\sigma_{dc} = e^2R\frac{\det|M|}{|M_{11}|^2}\left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E}\right)N(E_F)kT, \tag{19}$$

其中，$N(E_F)$费米能 E_F 附近的电子态密度.

4 计算结果与讨论

根据推导的直流电导公式，我们计算了一个具有 20000 格点的一维无序体系的直流电导率. 图 4 为一维无序体系直流电导率和外场电压的关系图. 图中参数 N 为体系格点数，D 为无序度，T 为温度，其值分别为 $N = 20000$，$D = 2$，$T = 80\mathrm{K}$. 从计算结果来看，无序体系的直流电导率很小，电导特性已经不是简单的欧姆定律的关系了. 外加电场较小时，电导率相对较大，且出现一系列峰值；电压较大时，电导率反而较小. 从图中可以看到，直流电导率在电压为 0.09，0.13，0.14，0.15，0.17 和 0.23V 附近出现了一系列峰值，而在电压较高的范围内，电导率相对较小，且变化不大. 对这一现象，可作如下解释：无序体系的能态在整个能带范围展宽，基本没有简并. 外加不同的电压，电子在两局域态间跳跃时的隧穿概率不同. 当电压在某些特定值附近(如 0.23V)时，电子发生共振隧穿，电子在局域态间跳跃的隧穿概率增大，同时满足电子跳跃条件的初末局域态数目增多. 这些因素都能引起无序体系的直流电导率随外场电压的变化而改变.

图 5 为无序体系的直流电导率和温度的依赖关系图. 图中体系格点数 N 为 20000，外加电压 V 为 0.14V. 图 5(a)，(b)两曲线对应体系的无序度不同，(a)的无序度为 2，(b)的无序度为 0.5. 从图中可以看到，(a)，(b)两曲线对应的无序体系具有基本一致的电导-温度依赖关系. 在低温区，出现了负微分电阻温度关系，即电导率随温度的升高而增大. 而在高温区，电导率随温度的升高而减小. 这和 Savvides 等[14]及 Xia 等[15]关于纳米超晶格 Cu-SiO$_x$ 及 Zr(Co$_{0.6}$Pt$_{0.4}$)(Sb$_{0.7}$Sn$_{0.3}$)的电阻温度依赖关系的实验结果符合很好. 这一现象与电子在局域态间的跳跃有关，可作如下解释：在低温度区，格点原子热运动不很剧烈. 随温度升高，格点原子热运动被逐渐激活，这将有助于电子在局域态间的跳跃，导致电导率的增大. 但在高温区，格点原子热运动非常剧烈，这时对电子的定向跳跃产生散射. 温度越高，散射作

用也越明显,致使电导率减小.

无序度对体系的直流电导也有明显的影响. 无序体系直流电导率有随无序度的增加而减小的趋势. 图 5(a)对应体系的无序度为 2,(b)对应体系的无序度为 0.5. 前者的直流电导率仅有 $10^{-10}\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$数量级,而后者有 $10^{-9}\Omega^{-1}\cdot cm^{-1}$数量级,前者明显小于后者. 体系的无序度越大,势场的无规起伏就越剧烈. 这种无规起伏的势场对电子定向跳跃的散射作用也越加明显. 所以无序体系的直流电导率会随无序度的增大而减小. 从图 5 中还可以看到,(a)体系和(b)体系的直流电导率极大值对应的温度不同,分别在 80K 和 30K 附近. 无序度越大,呈现负微分电阻特性的温度区域也越大. 这些现象与体系本身的特性有关.

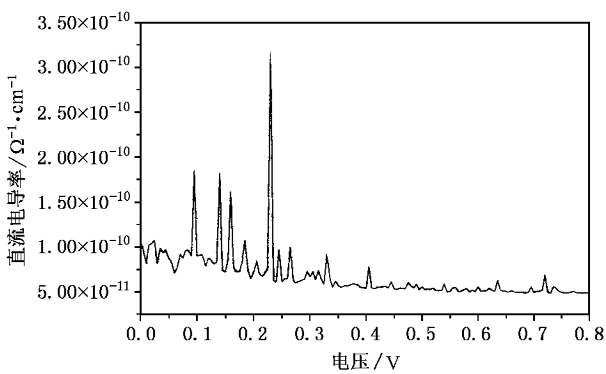

图 4 无序体系直流电导率与外加电压的关系图 ($N = 20000$, $D = 2$, $T = 80K$)

5 结 论

通过对一维无序体系直流电导率计算结果的分析,得到以下结论:

1. 无序体系与晶格体系的直流电导特性完全不同. 对无序体系电导有贡献的电子跳跃主要发生

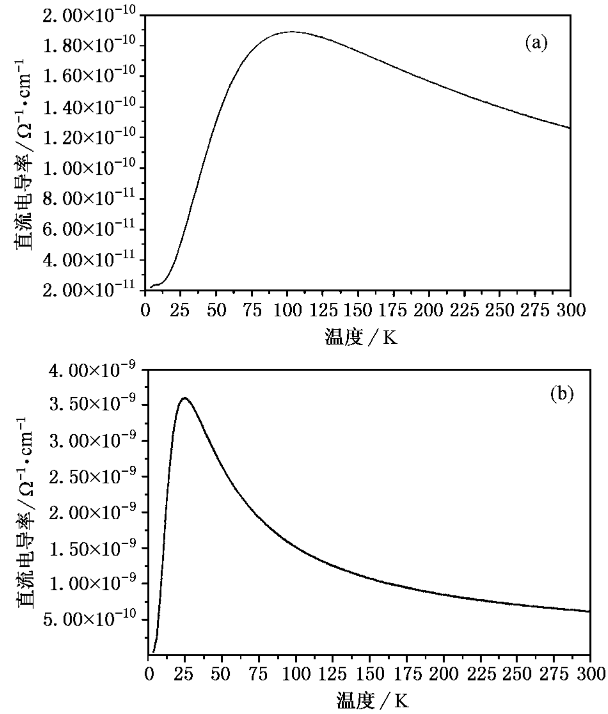

图 5 无序体系直流电导率与温度的关系图($N = 20000$, $V = 0.14V$. (a) $D = 2$, (b) $D = 0.5$)

在费米面附近,电子跳跃的初末局域态能量相差较小,而局域位置相差很大.

2. 无序体系的直流电导特性已经不是简单的欧姆定律的关系了. 外加电场较小时,电导率相对较大且出现一系列峰值;电压较大时,电导率反而较小.

3. 无序体系在低温区出现了负微分电阻特性,即电导率随温度的升高而增大. 而在高温区,电导率随温度的升高而减小. 不同体系的电导率极大值对应的温度不同.

4. 无序度对无序体系的直流电导有明显影响. 无序度越大,体系的直流电导率越小,呈现负微分电阻特性的温度区间变大.

[1] Mott N F and Davis E A 1979 *Electronic processes in non-crystalline Materials* (Clarendon. press, Oxford) Chapter 6, 7
[2] Miller A and Abrahams E 1960 *Phys. Rev.* **120** 745
[3] Aldea A *et al* 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 1672
[4] Newman M E J *et al* 1991 *Phys. Rev.* **B43** 1183
[5] Havlin S and Ben-Avraham D 1987 *Adv. Phys.* **36** 695
[6] Samukhin A N *et al* 1998 *Phys. Rev.* **B17** 11354
[7] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
[8] Day R and Martino F 1981 *J. Phys.* **C14** 4247
[9] Dean P and Martin J L 1960 *Proc. Roy. Soc.* **A259** 409
[10] Wu S Y and Zheng Z B 1981 *Phys. Rev.* **B24** 4787
[11] Ricoo B and Azbel M Ya 1984 *Phys. Rev.* **B29** 1970
[12] Azbel M Ya 1983 *Phys. Rev.* **B28** 4106
[13] Xu H *et al* 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 1666 (in Chinese) [徐慧等 1992 物理学报 **41** 1666]
[14] Savvides N *et al* 1982 *Solid State Commun.* **42** 143

[15] Xia Y *et al* 2000 *Journal of Applied Physics* **88** 1952

Hopping conductivity studies on one-dimensional disordered system

Xu Hui Song Yi-Pu Li Xin-Mei

(*Department of Applied Physics*, *Central South University*, *Changsha* 410083, *China*)

(Received 9 April 2001; revised manuscript received 4 June 2001)

ABSTRACT

A conductance model of electronic tunneling transfer is set up, and a new D.C conductance formula in one-dimensional disordered system is derived. By calculating the D.C conductivity, the relationship among the electric field、temperature and conductivity is analyzed, and the effect of disordered degree on the D.C conductance is discussed. The result shows that the conductivity of a disordered system decreases with the increase of disordered degree. When the electric field is weak, its conductivity is high and has a series of peak values. Hewever, when the electric field is strong, its conductivity is weak. In the low-temperature region, the disordered system shows a characteristic of negative differential dependence of resistance and temperature. On the contrary, its conductivity decreases with the rise of temperature in the high-temperature region. This result is in good agreement with the experiments.

Keywords: disordered system, electronic tunnel transfer, D.C. conductivity

PACC: 7210