

畸变对 hopping 电导的影响： Thue-Morse 纳米结构模型^{*}

缪智武^{1,2)} 丁建文¹⁾ 颜晓红¹⁾ 唐娜斯¹⁾

¹⁾ 湘潭大学物理系, 湘潭 411105)

²⁾ 株洲师专物理系, 株洲 412007)

(2002 年 3 月 25 日收到, 2002 年 10 月 14 日收到修改稿)

发展实空间重正化群方法, 研究了一维非周期 Thue-Morse 纳米结构链的 hopping 电导率. 计算表明 Thue-Morse 纳米结构体系的晶粒种类、晶粒尺寸对 hopping 电导有显著的调制作用, 界面结构和晶格畸变对 hopping 电导也有不同程度的影响. 从无序度对 hopping 电导的影响来看, Thue-Morse 纳米结构链的无序度介于 Fibonacci 链和周期链之间.

关键词: Thue-Morse 纳米结构链, 重正化群方法, hopping 电导, 尺寸效应, 界面效应

PACC: 6172Y, 6460Ak, 7363B

1. 引言

随着现代生长技术的发展, 人们可以按照自己的意愿成功地制备出各种具有奇特性质的复杂或简单的结构, 如一维准周期 Fibonacci 超晶格^[1-3]. 与一维准周期 Fibonacci 体系相类似, 非周期 Thue-Morse (T-M) 链作为一种典型的一维体系, 也是近年来物理学家们的研究热点之一^[4-8]. 对其电子性质的研究表明, 非周期 T-M 系统是介于晶体和 Fibonacci 准晶体之间而更接近前者的一种非周期晶体^[4, 5, 7]. 另一方面, 其傅里叶谱分析却呈现出奇异连续谱, 从而被认为其有序度介于 Fibonacci 准晶体与无序晶体之间^[8]. 因而有待人们从不同角度对该体系进行更多的探索. 与真实材料相比, 一维 T-M 体系实际上是将有一定厚度的一层物质等效成一格点, 这对于不考虑界面效应的理想体系而言, 所得结果能够定性地说明体系的一些性质. 然而, 纳米结构材料具有丰富的界面结构, 这对其电子结构及其相关性质可能有不同程度的调制作用. 本文构建了一维非周期 T-M 纳米结构模型, 发展实空间重正化群方法, 研究了该体系的 hopping 电导及其纳米尺寸等相关因素

对它的影响, 得到了一些有趣的结果.

2. 一维非周期 Thue-Morse 纳米结构模型及其重正化群方法

2.1. Miller-Abraham 电导方程

为研究该体系 hopping 电导的性质, 考虑在交变外场 $Ee^{i\omega t}$ 下格点能相等的 Miller-Abraham 电导方程为^[9-12]

$$(2 + i\omega/U_n)I_n = I_{n+1} + I_{n-1} + i\omega Ed_n, \quad (1)$$

其中 E 是外电场的幅值, U_n 是无外场时单个电子从第 n 个格点向第 $n+1$ 个格点的跃迁率, ω 是外电场的频率, $I_n, I_{n\pm 1}$ 是格点间的电流, d_n 表示从第 n 个格点到第 $n+1$ 个格点的距离.

为便于重正化群方法消元, 将(1)式变为

$$\epsilon_n I_n = t_{n-1,n} I_{n-1} + t_{n,n+1} I_{n+1} + i\omega Ed_n, \quad (2)$$

式中

$$\epsilon_n = 2 + i\omega/U_n, \quad t_{n\pm 1,n} = t_{n,n\pm 1} = 1, \quad (3)$$

其中 $\epsilon_n, t_{n,n\pm 1}$ 均为重正化前初始链对应的无量纲参量, ϵ_n 是赝格点能, $t_{n,n\pm 1}$ 表示格点 n 与左右格点

^{*} 国家 973 计划项目(批准号: 1999-0645-4500), 湖南省中青年科技基金(批准号: 00JZY2138)和湖南省教育厅基金(批准号: 00C072)资助的课题.

$n \pm 1$ 之间相关的系数. 此时电导率 σ 表示为^[10-12]

$$\sigma = \frac{1}{EL} \sum_n I_n d_n, \tag{4}$$

其中 L 是研究体系的长度.

2.2. 一维非周期 Thue-Morse 纳米结构模型

将 A, B 按一定的迭代规则 $A \rightarrow AB$ 和 $B \rightarrow BA$ 一代代无限地迭代下去, 从而获得 T-M 序列的字母排列:

$$\begin{aligned} F_0 &= A \\ F_1 &= AB \\ F_2 &= ABBA \\ F_3 &= ABBABAAB \\ F_4 &= ABBABAABBAABBA \\ &\dots \end{aligned}$$

上述排列满足迭代关系

$$F_n = F_{n-1} \bar{F}_{n-1} [\bar{F}_{n-1} = F_{n-1} (A \rightarrow B, B \rightarrow A)].$$

其中 F_n 为第 n 代排列, 第 n 代字母个数 $N(n) = 2^n$, $N_A(n) = N_B(n) = 2^{n-1}$. 设 A, B 分别代表格点数为 N_A 和 N_B 的两类纳米晶粒, 并按 T-M 序列排列, 则构造出如图 1(a) 所示的一维非周期 T-M 纳米结构模型. 考虑到界面效应和晶格畸变, 每一纳米晶粒中的格点分为晶格格点 $\{S_1, S_2\}$ 和两类粒子相连接处的界面格点 $\{S_3, S_4, \dots, S_8\}$. 由于晶粒种类、界面结构、晶格畸变等因素的影响, 晶格格点和界面格点对应的跃迁率 U_n 分别取值为 $\{U_1, U_2\}$ 和 $\{U_3, U_4, \dots, U_8\}$. 与此对应, 相邻格点距离 d_n 分别取值为 $\{H_1, H_2\}$ 和 $\{H_3, H_4, \dots, H_7\}$, 如图 1(a) 所示. 改变格点数 N_A 和 N_B , 亦即改变了粒子的尺寸, 界面原子所占比例相应改变, 所以该模型能较真实地反映粒子的尺寸效应和界面效应. 从而利用该模型可以研究一维非周期 T-M 链的各种结构参量对 hopping 电导率的影响.

2.3. 重正化群方法

为研究该类纳米结构体系的电导率, 采用两步实空间重正化群变换. 首先应用重正化群方法对初始链进行消元. 每一次消去某类格点(如 S_8)的左右相邻格点, 原来的纳米结构链重正化为一个仍具有 T-M 非周期序列的赭格点链, 相应地有关参量将被重正化, 每一次重正化参量有如下递推关系

$$\begin{aligned} \epsilon'_{n \pm k} &= \epsilon_{n \pm k} - \frac{t_{n \pm k, n \pm (k-1)}^2}{\epsilon'_{n \pm (k-1)}}, \\ d'_{n \pm k} &= d_{n \pm k} + \frac{t_{n \pm k, n \pm (k-1)} d_{n \pm (k-1)}}{\epsilon'_{n \pm (k-1)}}, \\ t_{n \pm 1, n}^{(k)} &= \frac{t_{n \pm 1, n}^{(k-1)} t_{n \pm k, n \pm (k-1)}}{\epsilon'_{n \pm (k-1)}}, \\ \epsilon_n^{(k)} &= \epsilon_n^{(k-1)} - \frac{[t_{n-1, n}^{(k)}]^2}{\epsilon'_{n-k}} - \frac{[t_{n, n+1}^{(k)}]^2}{\epsilon'_{n+k}}, \\ d_n^{(k)} &= d_n^{(k-1)} + \frac{t_{n-1, n}^{(k)} d_{n-k}}{\epsilon'_{n-k}} + \frac{t_{n, n+1}^{(k)} d_{n+k}}{\epsilon'_{n+k}}, \end{aligned} \tag{5}$$

式中上标 (k) 表示保留格点 n 经过 k 次重正化后的参量, \pm 号表示不变格点 n 的左右边格点. 重正化前后格点链对应的电导率 σ 和 σ' 满足关系

$$\sigma = \frac{L'}{L} \sigma' + \frac{i\omega}{2L} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\sum_{i=1}^{N_{k-1}-1} \frac{(d'_{n-i})^2}{E'_{n-i}} + \sum_{j=1}^{N_k} \frac{(d'_{n+j})^2}{E'_{n+j}} \right], \tag{6}$$

式中 L' 表示第一步重正化后赭格点链的长度, N_k 是非周期序列中第 k 个晶粒的格点数.

第二步 根据第一步重正化后赭格点链中各格点的局域环境, 将它们重新标定为 α, β, γ 或 μ 四类赭格点, 如图 1(b) 所示. 各类格点对应的参量也重新标定为 $\{\epsilon_i, d_i, t_i\}$ (i 为 α, β, γ 或 μ). 该类赭格点仍按 T-M 序列排列, 链中每一类格点对应的 Miller-Abrahams 方程重写为

$$\begin{aligned} \epsilon_{\alpha} I_n &= t_{\alpha} I_{n-1} + t_{\alpha} I_{n+1} + i\omega E d_{\alpha}, \\ \epsilon_{\beta} I_n &= t_{\beta} I_{n-1} + t_{\beta} I_{n+1} + i\omega E d_{\beta}, \end{aligned}$$

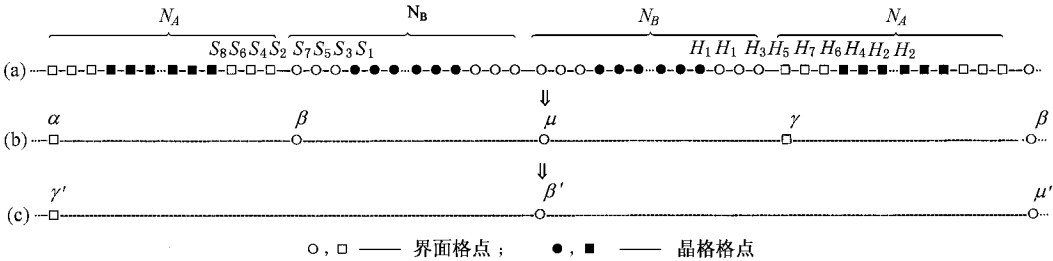


图 1 (a) 非周期 T-M 纳米结构模型, (b) 重正化后的 T-M 序列格点链, (c) 进一步重正化后的简周期链

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\gamma} I_n &= t_{\beta} I_{n-1} + t_{\alpha} I_{n+1} + i\omega E d_{\gamma}, \\ \varepsilon_{\mu} I_n &= t_{\beta} I_{n-1} + t_{\beta} I_{n+1} + i\omega E d_{\mu},\end{aligned}\quad (7)$$

式中 ε_i 和 d_i ($i = \alpha, \beta, \gamma, \mu$) 分别为赝格点的格点能和赝格点间距离, t_{α}, t_{β} 为赝格点间的关联系数.

根据 T-M 链的构造规则, 利用 $AB \rightarrow A, BA \rightarrow B$ 的收缩规则进行重正化消元, 将图 1(b) 中所示赝 T-M 链的格点隔一个消去一个, 该链被进一步重正化为一具有相似结构的子链, 重正化前后各参量满足如下的递推关系:

$$\begin{aligned}\varepsilon'_{\alpha} &= \varepsilon_{\gamma} - t_{\beta}^2/\varepsilon_{\beta} - t_{\alpha}^2/\varepsilon_{\beta}, \\ \varepsilon'_{\beta} &= \varepsilon_{\mu} - t_{\beta}^2/\varepsilon_{\beta} - t_{\alpha}^2/\varepsilon_{\gamma}, \\ \varepsilon'_{\gamma} &= \varepsilon_{\alpha} - t_{\alpha}^2/\varepsilon_{\beta} - t_{\alpha}^2/\varepsilon_{\gamma}, \\ \varepsilon'_{\mu} &= \varepsilon_{\beta} - t_{\alpha}^2/\varepsilon_{\gamma} - t_{\beta}^2/\varepsilon_{\gamma}, \\ d'_{\alpha} &= d_{\gamma} + \frac{t_{\beta}}{\varepsilon_{\beta}} d_{\beta} + \frac{t_{\alpha}}{\varepsilon_{\beta}} d_{\beta}, \\ d'_{\beta} &= d_{\mu} + \frac{t_{\beta}}{\varepsilon_{\beta}} d_{\beta} + \frac{t_{\beta}}{\varepsilon_{\gamma}} d_{\gamma}, \\ d'_{\gamma} &= d_{\alpha} + \frac{t_{\alpha}}{\varepsilon_{\beta}} d_{\beta} + \frac{t_{\alpha}}{\varepsilon_{\gamma}} d_{\gamma}, \\ d'_{\mu} &= d_{\beta} + \frac{t_{\alpha}}{\varepsilon_{\gamma}} d_{\gamma} + \frac{t_{\beta}}{\varepsilon_{\gamma}} d_{\gamma}, \\ t'_{\alpha} &= \frac{t_{\alpha} t_{\beta}}{\varepsilon_{\beta}}, t'_{\beta} = \frac{t_{\alpha} t_{\beta}}{\varepsilon_{\gamma}}.\end{aligned}\quad (8)$$

经过无数次这种重正化消元, 该链重正化为一简周期链, 如图 1(c) 所示. 该简周期链的长为 L'' , 电导率为 σ'' , 且 σ' 与 σ'' 的关系为

$$\sigma' = \frac{L''}{L'} \sigma'' + \frac{i\omega}{L'} \sum_{n=0}^{\infty} N_{\beta\gamma}^{(n)} \left[\frac{d_{\beta}^{(n)^2}}{\varepsilon_{\beta}^{(n)}} + \frac{d_{\gamma}^{(n)^2}}{\varepsilon_{\gamma}^{(n)}} \right], \quad (9)$$

其中 $N_{\beta\gamma}^{(n)}$ 是第二步中第 n 次重正化消除的 β 或 γ 型格点数, $\{\varepsilon_i^{(n)}, d_i^{(n)}\}$ ($i = \alpha, \beta, \gamma, \mu$), $\{t_{\alpha}^{(n)}, t_{\beta}^{(n)}\}$ 对应第二步中第 n 次的重正化参量. 至于简周期链的电导率 σ'' 可以简单地得出为

$$\sigma'' = \frac{i\omega}{L''} \cdot \frac{N_{\alpha} [d_{\alpha}^{(\infty)}]^2}{\varepsilon_{\alpha}^{(\infty)} - 2t_{\alpha}^{(\infty)}}, \quad (10)$$

其中 N_{α} 为简周期链中的 α 型格点数. 结合方程 (6), (9) 和 (10), 可以获得原纳米结构链的电导率 σ 为

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{i\omega}{L} \left\{ \frac{N_{\alpha} [d_{\alpha}^{(\infty)}]^2}{\varepsilon_{\alpha}^{(\infty)} - 2t_{\alpha}^{(\infty)}} + \sum_{n=0}^{\infty} N_{\beta\gamma}^{(n)} \left[\frac{d_{\beta}^{(n)^2}}{\varepsilon_{\beta}^{(n)}} + \frac{d_{\gamma}^{(n)^2}}{\varepsilon_{\gamma}^{(n)}} \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\sum_{i=1}^{N_{k-1}-1} \frac{(d'_{n-i})^2}{\varepsilon'_{n-i}} + \sum_{j=1}^{N_k} \frac{(d'_{n+j})^2}{\varepsilon'_{n+j}} \right] \right\} \quad (11)\end{aligned}$$

3. 数值计算与讨论

作为特例, 讨论中我们计算了 $\{N_A, N_B\}, \{U_1,$

$U_2, \dots, U_8\}, \{H_1, H_2, \dots, H_7\}$ 等参量对非周期 T-M 纳米结构链 hopping 电导率的影响. 计算中频率以 U_1 为单位, 其他参量及电导率 σ 均为任意单位.

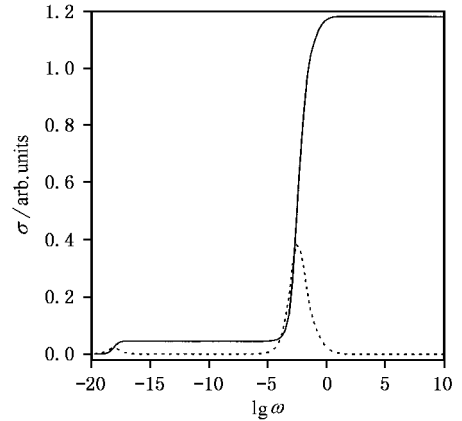


图 2 T-M 纳米结构链的 hopping 电导率. 实线和虚线分别对应电导率的实部和虚部, 对应参量选取为 $N_A/N_B = 32/24$, $\{U_1, U_2, \dots, U_8\} = \{1, 0.01, 0.95, 0.0105, 0.9, 0.011, 0.85, 0.0115\}$, $\{H_1, H_2, \dots, H_7\} = \{1, 0.9, 1.01, 0.89, 1.03, 0.87, 0.95\}$, 频率 ω 以 U_1 为单位

图 2 示出了 $N_A/N_B = 32/24$ 的非周期 T-M 纳米结构链的 hopping 电导率. 考虑晶粒间的界面效应及晶格应变, 图中格点参量分别选取 $\{U_1, U_2\}$ 为 $\{1, 0.01\}$, $\{H_1, H_2\}$ 为 $\{1, 0.9\}$, $\{U_3, U_4, \dots, U_8\}$ 为 $\{0.95, 0.0105, 0.90, 0.011, 0.85, 0.0115\}$, $\{H_3, H_4, \dots, H_7\}$ 为 $\{1.01, 0.89, 1.03, 0.87, 0.95\}$. 从图中可以看出, 非周期 T-M 纳米结构链的 hopping 电导随频率发生变化, 其实部呈现两个阶梯, 一个在 $\omega = 10^{-18} U_1$ 处, 一个在 $\omega = 10^{-2.5} U_1$ 处; 对应的, 电导率的虚部存在两个“共振峰”, 低频处峰值较小, 另一峰值较大. 这一结果与 Fibonacci 准晶类似^[13, 14], 不过, 其高频区的阶梯和峰位均发生了蓝移, 这一点与纳米结构周期链相似^[11].

当比值 N_A/N_B 一定, 改变 N_A 和 N_B 的格点数, 这样体系中两类粒子所占比例不变, 但晶粒尺寸发生了变化, 此时电导率的变化情况如图 3 所示. 图中实线对应 $N_A/N_B = 32/24$, 虚线对应 $N_A/N_B = 16/12$ 的 hopping 电导率, 其他参量与图 2 一致. 从图中可以看出, 随粒度减小, 电导率在高频区 ($\omega > 10^{-2.5} U_1$) 有所减小, 且高低频区的阶梯和峰位均有所蓝移 (向高频方向移动), 表现出明显的尺寸效应. 另外, 当保持 $N_A = 32$ 不变, N_B 改变为 16, 其他参量不

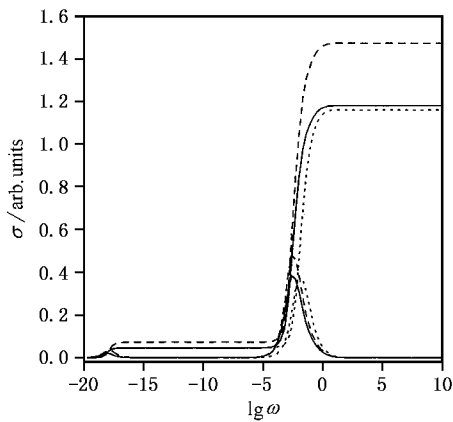


图3 晶粒尺寸对 hopping 电导率的影响 实线和虚线分别对应 $N_A/N_B = 32/24$ 和 $N_A/N_B = 16/12$,破折线对应 $N_A/N_B = 32/16$ 其他参量与图2相同,频率 ω 以 U_1 为单位

变,此时电导率变化如图3破折线所示.从图中可以看出,电导率在整个频区有所增加,高频区尤为明显,说明该体系有较强的成分调制作用.

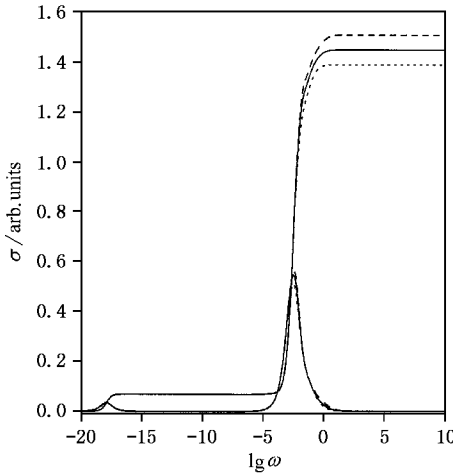


图4 界面参量变化对 hopping 电导率的影响 实线对应 $\{U_3, U_5, U_7\} = \{0.95, 0.90, 0.85\}$,虚线对应 $\{U_3, U_5, U_7\} = \{0.85, 0.7, 0.55\}$,破折线对应 $\{U_3, U_5, U_7\} = \{1.05, 1.10, 1.15\}$ 其他参量与图2相同,频率 ω 以 U_1 为单位

图4示出了界面参量变化对电导率的影响.图中只改变 N_A 的参量 $U_i (i = 3, 5, 7)$,实线对应 $\{U_3, U_5, U_7\} = \{0.95, 0.9, 0.85\}$,虚线对应 $\{U_3, U_5, U_7\} = \{0.85, 0.7, 0.55\}$,破折线对应 $\{U_3, U_5, U_7\} = \{1.05, 1.10, 1.15\}$ 其他参量与图2一致.从图中可以看出界面效应加强,高频区($\omega > 10^{-2.5} U_1$)

电导率相应的随界面参量 $U_i (i = 3, 5, 7)$ 增减,其他影响不明显.同样,改变 N_A 的界面参量 $H_i (i = 3, 5, 7)$ 时,可以发现晶格应变加大,高频区电导率也有一定变化.

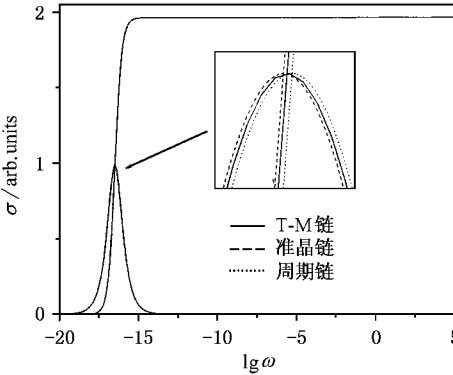


图5 T-M 链、周期链和准晶链的 hopping 电导率的比较 实线、虚线和破折线分别对应 T-M 链($N_A/N_B = 33/27$)、周期链($N_A/N_B = 33/27$)和准晶链($N_A/N_B = 33/25$),对应参量选取 $\{U_1, U_2, \dots, U_8\} = \{1, 1, 0.95, 0.95, 0.9, 0.9, 0.85, 0.85\}$, $\{H_1, H_2, \dots, H_7\} = \{1, 1, 1.01, 1.01, 1.03, 1.03, 1.05\}$ 频率 ω 以 U_1 为单位

Yan 等人^[10]研究了无序纳米结构链中纳米构造块排列的无序度对其电性质的影响,得到了一些有趣的结果.为探讨 T-M 链中纳米构造块排列的无序度对体系 hopping 电导的影响,图5同时示出了 T-M 链、周期链和 Fibonacci 准晶链的 hopping 电导率.为便于比较,这里只考虑一种成分的颗粒,粒子平均格点数相同,选取为 $\bar{N} = 30$,因而界面原子比例一样. T-M 链、周期链中颗粒格点数之比 N_A/N_B 为 $33/27$,而 Fibonacci 准晶链中 N_A/N_B 为 $33/25$.粒子中各格点参量选取 $\{U_1, U_2, \dots, U_8\} = \{1, 1, 0.95, 0.95, 0.9, 0.9, 0.85, 0.85\}$, $\{H_1, H_2, \dots, H_7\} = \{1, 1, 1.01, 1.01, 1.03, 1.03, 1.05\}$.从图中可以看出, hopping 电导率低频处的峰和阶梯有相对移动,从左到右依次对应为 Fibonacci 准晶链(破折线)、T-M 链(实线)和周期链(虚线)的电导率.显然纳米结构链中颗粒排列的无序度对 hopping 电导有一定影响,从这个角度看 T-M 链的无序度介于 Fibonacci 准晶链与周期链之间.这一结果与从研究 T-M 链的电子性质得到的相关结论相符.

4. 结 论

为研究纳米材料 hopping 电导的结构关联,构造

了一维非周期纳米结构固体模型 ,发展了实空间重整化群理论研究方法 .研究了各种结构参量因素对一维非周期 T-M 纳米结构链的 hopping 电导率的影响 ,表明纳米晶粒种类、晶粒尺寸、跃迁率等因素 ,对 hopping 电导率有明显的调制作用 ;界面结构、晶格

畸变对 hopping 电导率也有不同程度的影响 ,电导率的大小及峰位随晶粒尺寸、跃迁率而改变 .另外 ,纳米构造块排列对 hopping 电导影响的计算表明一维 T-M 序列的无序度介于 Fibonacci 准周期序列与周期序列之间 .

[1] Merlin R , Bajema K , Clarke R , Juang F Y and Bhattachrya P 1985 *Phys . Rev . Lett .* **55** 1768

[2] Hu A and Jiang S S , 1992 *Acta Phys . Sin .* **41** 62 (in Chinese)
[胡安等 1992 物理学报 **41** 62]

[3] Mao H B and Lu W , 1995 *Acta Phys . Sin .* **44** 1588 (in Chinese)
[茅蕙兵等 1995 物理学报 **44** 1588]

[4] Avishai Y and Berend D 1992 *Phys . Rev . B* **45** 2717

[5] Zhong J X , You J Q and Yan J R 1992 *J . Phys . :Condens . Matter* **4** 5959

[6] Axel F and Peyriere J 1989 *J . Stat . Phys .* **57** 1013

[7] Qin M ,Ma H and Tsai C 1990 *J . Phys : Condens . Matter* **2** 1059 .

[8] Kolar M , Ali M K and Nori F1991 *Phys . Rev . B* **43** 1034

[9] Miller A and Abrahams E 1960 *Phys . Rev .* **120** 745

[10] Yan X H and Ding J W 2001 *Eur . Phys . J . B* **20** 157

[11] Ding J W *et al* 1999 *Acta Phys . Sin .* **48** 314 (in Chinese) [丁建文等 1999 物理学报 **48** 314]

[12] Aldea A and Dulea M 1986 *J . Phys .* **19** 4055

[13] Newman M E J and . Stinchcombe R B 1991 *Phys . Rev . B* **43** 1183

[14] Ding J W , Yan X H and Fang X C 1999 *Chin . Phys . Lett .* **16** 529

Effect of distortion on hopping conductivity :

Thue-Morse nanostructured model ^{*}

Miao Zhi-Wu^{1 2)} Ding Jian-Wen¹⁾ Yan Xiao-Hong¹⁾ Tang Na-Si¹⁾

¹⁾*(Department of Physics , Xiangtan University , Xiangtan 411105 ,China)*

²⁾*(Department of Physics , Zhuzhou Teachers College , Zhuzhou 412007 ,China)*

(Received 25 March 2002 ; revised manuscript received 14 October 2002)

Abstract

A real-space renormalization-group approach is developed to calculate hopping conductivity of Thue-Morse(T-M) nanostructured chain. It is found that the kinds and the sizes , as well as the interface structures and lattice distortion of nano-grains have a notable effect on the hopping conductivity of nanostructured systems . From the effect of the degree of random on hopping conductivity , T-M chain is a system between Fibonacci and periodic sequence .

Keywords : Thue-Morse nanostructured chain , renormalization group approach , hopping conductivity , size effect , interface effect .

PACC : 6172Y , 6460Ak , 7363B

^{*} Project supported by the State Key National Major Project (Grant No. 1999-0645-4500) , the Science and Technology Foundation for of Hunan province (Grant No. 00JZY2138) , and Science and Research Foundation of Hunan Provincial Bureau , China (Grant No. 00C072) .