

## 有序-无序二维耦合系统的电子输运性质\*

陆艳艳 王超 刘洁 蒋金益 钟建新†

(湘潭大学物理与光电工程学院, 湘潭 411105)

(2022年5月27日收到; 2022年8月26日收到修改稿)

基于双层耦合正方晶格的紧束缚近似模型, 通过对态密度、波函数格点占据数和量子扩散的计算与分析, 系统研究了不同堆垛界面结构、层间耦合强度和无序强度对有序-无序双层二维耦合系统中电子输运性质的影响. 研究发现, *AA* 堆垛双层耦合正方晶格在层间耦合较弱时保持单一能带, 带尾态为局域态, 带中态始终保持延展态及近似延展态的临界态, 存在不随无序增强而消失的迁移率边; 对于强耦合体系, 弱无序时能带的带尾态为临界态, 带中态为扩展态, 而强无序使得耦合导致的两能带交叠为单一能带, 其带尾态为局域态, 带中态为临界态. *AB* 堆垛双层耦合正方晶格的能带始终为单一能带, 且能带中心区始终包含延展态和临界态. 对于 *AA* 和 *AB* 堆垛两种构型, 有序-无序双层耦合系统的量子扩散随无序强度增大均呈现出先减弱再增强的反常量子扩散现象. *AA* 型弱耦合系统和 *AB* 型耦合系统中的量子扩散均表现为超扩散, *AA* 型强耦合系统中弱无序导致超扩散, 而强无序导致亚扩散. 计算结果进一步表明, 有序-无序双层耦合六角晶格系统表现出同样的行为.

关键词: 二维系统, 有序-无序耦合, Anderson 无序

PACS: 03.65.-w, 71.30.+h, 73.50.-h, 72.10.-d

DOI: 10.7498/aps.71.20221055

## 1 引言

2004年, Novoselov 等<sup>[1]</sup>分离出单层石墨烯, 打破了二维晶体材料不可独立存在的传统观念, 引发了二维材料的研究热潮<sup>[2-6]</sup>. 2018年, 双层石墨烯魔角的发现<sup>[7]</sup>, 将扭角双层石墨烯研究推至高潮<sup>[8-10]</sup>, 自此双层二维耦合量子体系引起了人们的广泛关注<sup>[11-13]</sup>. 二维材料以优越的性质而备受关注, 电子输运作为二维材料最重要的性质之一, 其相关研究一直是物理领域的热门课题. 迄今为止, 改善材料电导率最快捷有效的方法仍然是通过掺杂提高载流子浓度. 然而掺杂引发无序, 将导致载流子发生以掺杂原子为中心的随机散射, 最终引发载流子的局域化. Anderson<sup>[14]</sup>指出局域态电子对传导没有贡献, 因此掺杂过量反而导致电导率下

降. 局域化标度理论<sup>[15]</sup>进一步指出, 对于无相互作用、存在非关联无序的所有一维和二维系统不存在扩展态电子, 无序的存在极大地降低了电子迁移率, 因此突破二维无序体系传统理论的限制, 控制无序是关键.

表面无序是一种极为常见的无序形式, 以石墨烯和  $\text{MoS}_2$  为代表的典型二维材料 (如过渡金属硫化物、黑磷和  $\text{InSe}$ ) 表面本身存在大量无序 (缺陷)<sup>[16]</sup>, 二维层状材料在切割分离过程中也极易产生表面无序, 纳米线掺杂过程中杂质极有可能分离在未钝化的纳米线表面<sup>[17]</sup>从而产生表面无序. 另外, 在纳米晶体中可采用溶剂诱导表面无序<sup>[18]</sup>以提高材料性能. 表面无序应用广泛, 在器件制作<sup>[19]</sup>及生物系统<sup>[20,21]</sup> (如 DNA 分子) 等多领域适用. 关于表面无序<sup>[22-26]</sup>的报道至今已有不少, 但大部分工作仅关注实验现象. 2006年, Zhong 和 Stocks<sup>[27]</sup>提出了

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11874316, 11474244)、国家基础研究发展计划 (批准号: 2015CB921103) 和湖南省政府国际访问教师项目资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jxzhong@xtu.edu.cn

有序-无序分区耦合的一维纳米线表面无序理论模型, 指出表面无序一维纳米线在强无序下的载流子浓度及迁移率可实现同步提升, 该纳米线表面掺杂模型被认为打破了传统掺杂局限<sup>[28]</sup>, 为一维无序耦合系统的研究提供新思路. 随后, 该模型被推广至多种一维有序-无序耦合链模型, 用于研究无序强度及链间耦合能对电子输运性质的影响<sup>[29–31]</sup>. 2007年, 有序-无序分离概念被进一步推广至有序-无序双层耦合二维晶格<sup>[32]</sup>, 发现该体系存在金属-绝缘体转变以及不随无序强度增加而消失的迁移率边, 并且其量子扩散呈现出超扩散式的反量子子扩散现象.

前期工作中所提出的有序-无序双层二维耦合系统模型<sup>[32]</sup>仅考虑了层间-层内耦合作用强度相同的各向同性双层二维正方晶格, 没有考虑层间耦合作用的强弱对电子输运性质的影响. 在近年来受到广泛关注的层状准二维晶体中, 普遍存在各向异性的耦合跳跃能, 即层间耦合跳跃能不同于层面耦合跳跃能, 且其强度可通过施加应变的方式加以改变, 同时亦可通过不同层面晶向角度的调节实现具有不同堆垛构型的错位双层结构. 因此, 有必要进一步研究不同堆垛结构、层间耦合强度、无序强度对有序-无序双层耦合二维系统中电子输运性质的影响, 探讨前期发现的反量子子扩散和超扩散现象是否具有普遍性. 本文基于单带紧束缚近似框架下的 Anderson 格点能无序模型, 以理论模型中常见的 AA 型堆垛 (上层原子位于下层原子正上方) 和 AB 型堆垛 (上层原子位于下层晶格的空位中心) 形成的有序-无序双层耦合二维正方晶格系统为例, 深入研究不同界面构型、层间耦合强度和无序强度对有序-无序双层二维耦合系统中电子输运性质的影响. 采用材料体系中常见的有序-无序双层耦合二

维六角晶格系统, 验证结论的普适性.

## 2 模型与方法

AA 型和 AB 型有序-无序双层二维耦合晶格如图 1 所示, 体系格点数为  $N$ , 其紧束缚哈密顿量  $H$  为

$$H = H_1 + H_2 + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

$$H_1 = \sum_{i=1}^{N/2} \varepsilon_i^{(1)} |1, i\rangle \langle 1, i| + \sum_{\langle i, j \rangle}^{N/2} V_{ij}^{(1)} |1, i\rangle \langle 1, j|, \quad (2)$$

$$H_2 = \sum_{i=1}^{N/2} \varepsilon_i^{(2)} |2, i\rangle \langle 2, i| + \sum_{\langle i, j \rangle}^{N/2} V_{ij}^{(2)} |2, i\rangle \langle 2, j|, \quad (3)$$

$$H_{\text{int}} = \sum_{i=1}^{N/2} V_{ii}^{(1,2)} |1, i\rangle \langle 2, i| + \sum_{i=1}^{N/2} V_{ii}^{(2,1)} |2, i\rangle \langle 1, i|, \quad (4)$$

其中,  $H_1$  表示下层周期晶格哈密顿量,  $H_2$  表示上层无序晶格哈密顿量,  $H_{\text{int}}$  为层间相互作用哈密顿量,  $|2, i\rangle$  和  $|1, i\rangle$  分别为上层与下层原子的轨道波函数基矢,  $\varepsilon_i^{(2)}$  和  $\varepsilon_i^{(1)}$  分别对应上层与下层格点能,  $V_{ij}^{(1)}$  和  $V_{ij}^{(2)}$  为层内最近邻跃迁项,  $V_{ii}^{(1,2)}$  和  $V_{ii}^{(2,1)}$  为层间最近邻跃迁能. 依据 Anderson 格点能局域化模型和我们提出的有序-无序双层二维耦合体系模型<sup>[32]</sup>, 本文对所有物理量采用无量纲形式对薛定谔方程进行数值求解. 考虑到紧束缚近似下电子的格点能和跃迁能以电子伏特能量  $e_0 = 1 \text{ eV}$  为特征, 位置以晶格常数  $a$  为特征, 引入以  $e_0$ ,  $a$  和以  $t_0 = \hbar/e_0$  为单位的无量纲能量  $E$ , 距离  $r_i$  和时间  $t$ . 数值求解过程中将体系晶格常数及层间距离设为 1, 仅考虑最近邻格点间跃迁能的贡献, 层内跃迁能取 1, 有序层格点能取 0, 无序层格点能取  $[-W, W]$  之间随

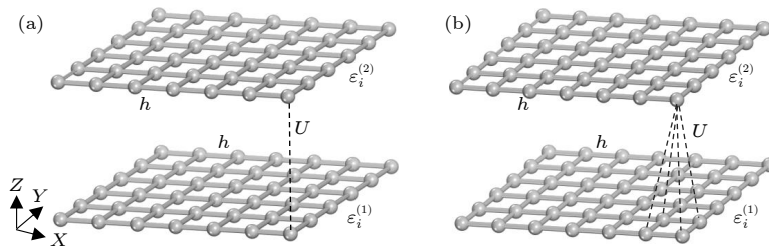


图 1 有序-无序双层耦合正方晶格模型图 ( $\varepsilon_i^{(2)}$ ,  $\varepsilon_i^{(1)}$  分别表示上、下层格点能,  $U$  和  $h$  分别表示层间与层内最近邻格点跃迁能) (a) AA 堆垛 (上层原子位于下层原子正上方); (b) AB 堆垛 (上层原子位于下层正方形中心正上方)

Fig. 1. Schematic illustration of the order-disorder coupling system of bilayer square lattices ( $\varepsilon_i^{(2)}$ ,  $\varepsilon_i^{(1)}$  are onsite energies of upper and lower layers,  $U$  and  $h$  represent the hopping energy of inter-layer and intra-layer respectively): (a) AA stacking (the upper atom is directly above the lower atom); (b) AB stacking (the upper atom is located directly above the center of the lower square).

机数. 无序强度  $W$  与层间耦合强度  $U$  为可调参数,  $W = 0$  及  $W > 0$  分别对应于双层耦合周期系统和有序-无序双层耦合系统.

采用固定边界条件和矩阵对角化方法求解静态与含时薛定谔方程, 将哈密顿量 (1) 式代入耦合体系静态薛定谔方程:

$$H\Phi(E) = E\Phi(E), \quad (5)$$

式中,  $E$  为本征能量;  $\Phi(E)$  为本征波函数,  $\Phi(E) = (\dots, \phi_{i-1}(E), \phi_i(E), \phi_{i+1}(E), \dots)^T$ ,  $\phi_i(E)$  为  $\Phi(E)$  在第  $i$  个格点的分量. 通过矩阵对角化方法, 可得本征能量  $E_m (m = 1, 2, 3, \dots, N)$  及对应本征矢  $\Phi(E_m)$ . 根据静态薛定谔方程本征解, 进一步求解含时薛定谔方程:

$$i \frac{d}{dt} \Psi(t) = H\Psi(t), \quad (6)$$

式中,  $\Psi(t) = (\dots, \psi_{i-1}(t), \psi_i(t), \psi_{i+1}(t), \dots)^T$  为  $t$  时刻体系波函数,  $\psi_i(t)$  为  $\Psi(t)$  在  $i$  格点的分量. 设电子初始 ( $t = 0$ ) 位置  $\mathbf{r}_0$  位于  $i = 0$ , 即

$$|\psi_i(t=0)| = \delta_{i,0}. \quad (7)$$

由于  $\Phi(E_m)$  为正交完备基, 体系含时波函数  $\Psi(t)$

可表示为

$$\Psi(t) = \sum_m c_m \Phi(E_m) \exp(-iE_m t). \quad (8)$$

结合初始条件 (7) 式可得

$$c_m = \phi_0^*(E_m). \quad (9)$$

电子波函数  $\Psi(t)$  可表示为

$$\psi_i(t) = \sum_m \phi_0^*(E_m) \phi(E_m) \exp(-iE_m t), \quad (10)$$

其中,  $|\psi_i(t)|^2$  为  $t$  时刻  $i$  格点处电子出现的概率. 为描述体系中的电子输运特性, 常引入量子扩散均方位移:

$$d(t) = \sqrt{\sum |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0|^2 |\psi_i(t)|^2}, \quad (11)$$

式中,  $d(t)$  表示  $t$  时刻电子波包在体系的扩散宽度,  $\mathbf{r}_i$  为  $i$  格点的格矢. 计算中为避免边界效应影响, 仅考虑波包到达边界前  $d(t)$  的行为.

对于 AA 型双层正方晶格周期体系,  $\varepsilon_{1,i} = \varepsilon_{2,i} = 0$ , 可得能带色散关系:

$$E_{AA}(k) = -2f(k) \pm U, \quad (12)$$

其中,  $f(k) = \cos k_x + \cos k_y$ ,  $k_x$  和  $k_y$  为波矢  $\mathbf{k}$  在  $x$  和  $y$  方向的分量. 当  $U > 4h$  时, 能带分裂为两个子带,

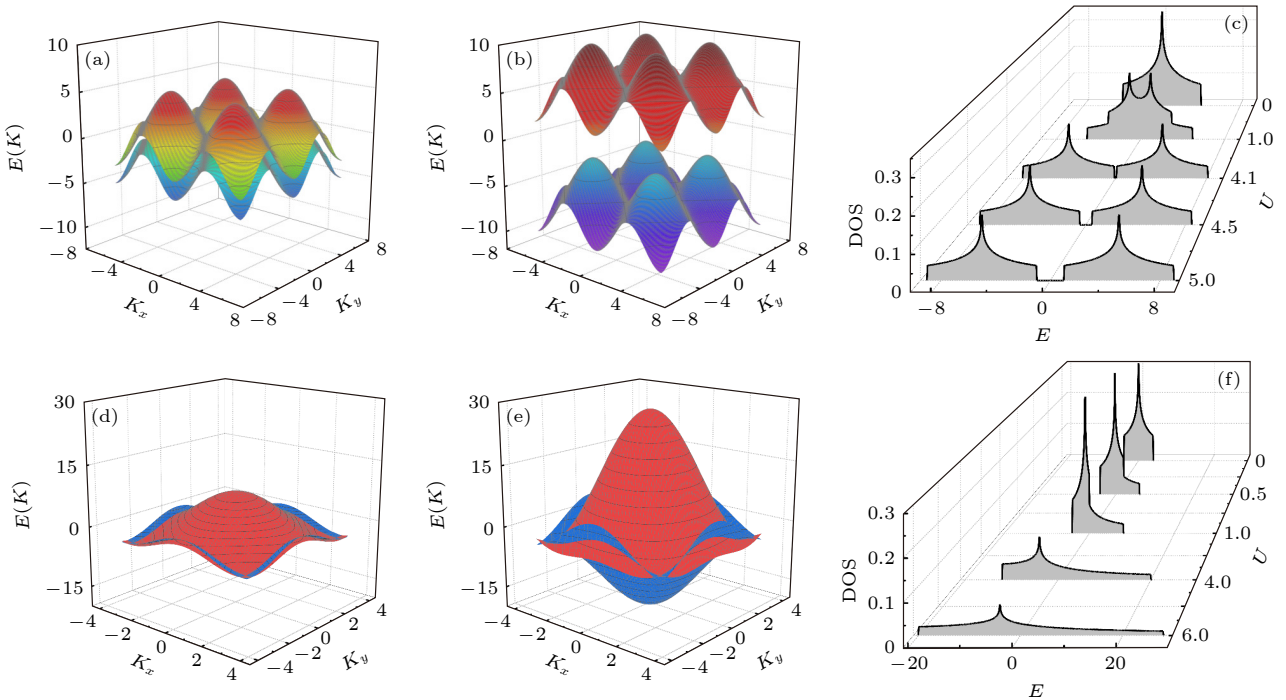


图 2 双层耦合正方周期晶格的能带与 DOS (a), (b) 分别为  $U = 1$  和  $U = 6$  的 AA 型耦合系统的能带图; (c) AA 型耦合晶格的 DOS 随  $U$  的变化; (d), (e) 分别为  $U = 1$  和  $U = 6$  的 AB 型耦合系统的能带图; (f) AB 型耦合晶格的 DOS 随  $U$  的变化

Fig. 2. Energy spectra and DOS for the periodic coupling system of bilayer square lattices: (a), (b) Energy spectra for the coupling system of AA stacking with  $U = 1$  and  $U = 6$ , respectively; (c) variation of DOS with  $U$  for the coupling system of AA stacking; (d), (e) energy spectra for the coupling system of AB stacking with  $U = 1$  and  $U = 6$ , respectively; (f) the variation of DOS with  $U$  for the coupling system of AB stacking.

其带隙宽度  $\Delta E$  为

$$\Delta E = -8 + 2U. \quad (13)$$

对于  $AB$  型双层正方晶格周期体系, 可求得能带色散关系:

$$E_{AB}(k) = -2f(k) \pm 4Ug(k), \quad (14)$$

其中,  $g(k) = \cos(k_x/2)\cos(k_y/2)$ .

### 3 数值计算与模拟

本文研究在  $AA$  型和  $AB$  型堆垛情况下, 无序

强度  $W$  和层间耦合强度  $U$  对有序-无序双层耦合二维体系量子扩散的影响. 综合考虑结论的准确性及计算时间成本, 对该耦合体系尺寸采用  $N = 5202 (X \in [-25, 25], Y \in [-25, 25], Z = 0 \text{ 或 } 1)$  和 50 个不同随机样本进行样本平均. 由于  $AB$  堆垛结构中的层间原子错位, 结构中心与边界距离缩短, 因此对  $AB$  堆垛耦合体系均方位移  $d(t)$  的研究尺寸扩大为  $N = 10082 (X \in [-35, 35], Y \in [-35, 35], Z = 0 \text{ 或 } 1)$ , 取 20 个不同随机样本进行平均, 模型如图 1 所示.

图 2 为双层耦合正方周期晶格 ( $W = 0$ ) 的

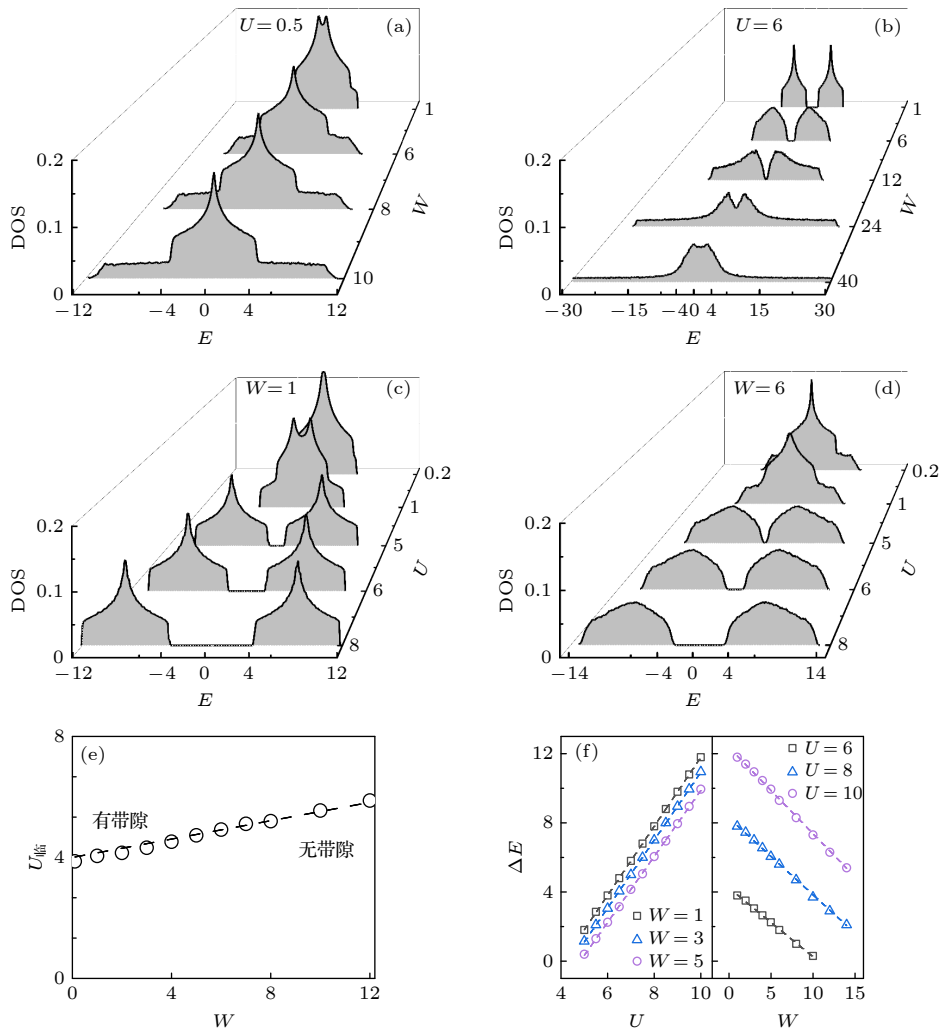


图 3  $AA$  型堆垛有序-无序双层耦合正方晶格电子能谱 (a)–(d) DOS 随  $U$  和  $W$  的变化; (e) 产生带隙所对应的  $U$  和  $W$  (空心圆) 及其拟合线 (虚线); (f) 带隙宽度  $\Delta E$  随  $U$  和  $W$  的变化, 左图为  $\Delta E$  (空心符号) 随  $U$  的变化及其拟合线 (虚线), 其中  $W = 1, 3, 5$  分别对应斜率 1.99, 1.96, 1.90; 右图为  $\Delta E$  (空心符号) 随  $W$  的变化及其拟合线 (虚线), 其中  $U = 6, 8, 10$  分别对应斜率  $-0.40, -0.44, -0.50$

Fig. 3. Energy spectra for the order-disorder bilayer coupling system of square lattices with  $AA$  stacking: (a)–(d) Changes of the DOS for different  $U$  and  $W$ ; (e) the relationship of  $W$  and  $U$  (open circles) for the band-gap opening with the linear fitting (dashed line); (f) the dependence of bandgap width  $\Delta E$  (hollow symbols) on  $U$  and  $W$  with the left panel for  $U$  with the linear fitting (dash lines), where  $W = 1, 3, 5$  correspond to the slopes of 1.99, 1.96, 1.90, respectively, and the right panel for  $W$  with the linear fitting (dash lines), where  $U = 6, 8, 10$  correspond to the slopes  $-0.40, -0.44, -0.50$ , respectively.

能带与态密度 (density of states, DOS) 随层间耦合能  $U$  的变化, 其中图 2(a)–(c) 和图 2(d)–(f) 分别对应  $AA$  型耦合和  $AB$  型耦合体系. 可以清楚地看出,  $AA$  型耦合与  $AB$  型耦合的能带结构具有显著的差异. 对于  $AA$  型耦合, 其上、下能带随  $U$  增大逐渐分离, 能带在  $U > 4$  时在费米能处产生带隙, 分离为与单层正方周期晶格相同的两个独立能带, 其带隙宽度随  $U$  的变化服从 (13) 式. 对于  $AB$  型耦合, 其上、下能带相互交错, 随着  $U$  增加, 体系能谱范围变宽, DOS 的中心峰值不断下降, 但费米面附近上、下能带始终保持交错, 不产生带隙.

图 3 为  $AA$  型有序-无序双层耦合正方晶格的电子 DOS 对  $W$  和  $U$  的依赖关系. 如图 3(a) 所示, 对于较小层间耦合的系统, 能带随  $W$  增大始终保持单带形式, 其 DOS 的带尾区不断扩大, 而能带中心区则逐渐接近单层正方晶格周期体系的 DOS 分布. 对于较大层间耦合的系统, 随着  $W$  增大, 带隙不断缩小, 带隙消失后带中心区的 DOS 不断增大, 并有逐渐接近单层正方晶格周期体系的 DOS 分布的趋势, 如图 3(b) 所示. 图 3(c) 和图 3(d) 表明无论体系无序强度大小, 随层间耦合能  $U$  的增加, 带中位置出现带隙, 且产生带隙的临界耦合能  $U_{\text{临}}$  与无序度  $W$  满足线性关系  $U_{\text{临}} = 4 + k_1 W$  ( $k_1 \approx$

0.15), 如图 3(e) 所示. 从图 3(f) 可以看出, 带隙宽度  $\Delta E$  随  $U$  和  $W$  的变化分别满足线性关系  $\Delta E = k_2 U$  ( $k_2 \approx 2$ ) 和  $\Delta E = k_3 W$  ( $k_3 \approx -0.5$ ).

以常见的  $AB$  堆垛结构进一步探讨层间堆垛结构对有序-无序双层耦合系统电子性质的影响, 并与  $AA$  堆垛结构数值结果进行对比. 图 4 为  $AB$  堆垛型有序-无序耦合正方晶格的 DOS 分布. 如图 4(a) 所示, 与  $AA$  堆垛类似, 随着  $W$  增大, 对于弱耦合体系, 带中态的 DOS 逐渐稳定并最终与有序单层的 DOS 一致. 如图 4(b) 所示, 对于强耦合体系, 带中态的 DOS 随着  $W$  增大逐渐稳定, 但与有序单层的 DOS 存在较大差异. 然而随着  $U$  的增加, 无论体系无序强弱,  $AB$  堆垛型耦合系统始终保持单一能带, 没有产生带隙, 如图 4(c) 和图 4(d) 所示, 这与  $AA$  堆垛有着显著差异.

耦合体系的本征波函数  $|\Phi(E)|^2$  可表示对应本征能量的空间分布概率. 图 5 为  $AA$  型有序-无序耦合正方晶格部分典型能量的概率分布. 如图 5(a)–(d) 右侧图形所示, 带尾态波函数仅在上、下层的局部位置存在非零值, 且其空间分布范围随  $W$  增大不断缩小, 表现出局域态的特征. 带中态波函数, 无论  $W$  大小如何, 对于较小层间耦合的体系, 均弥

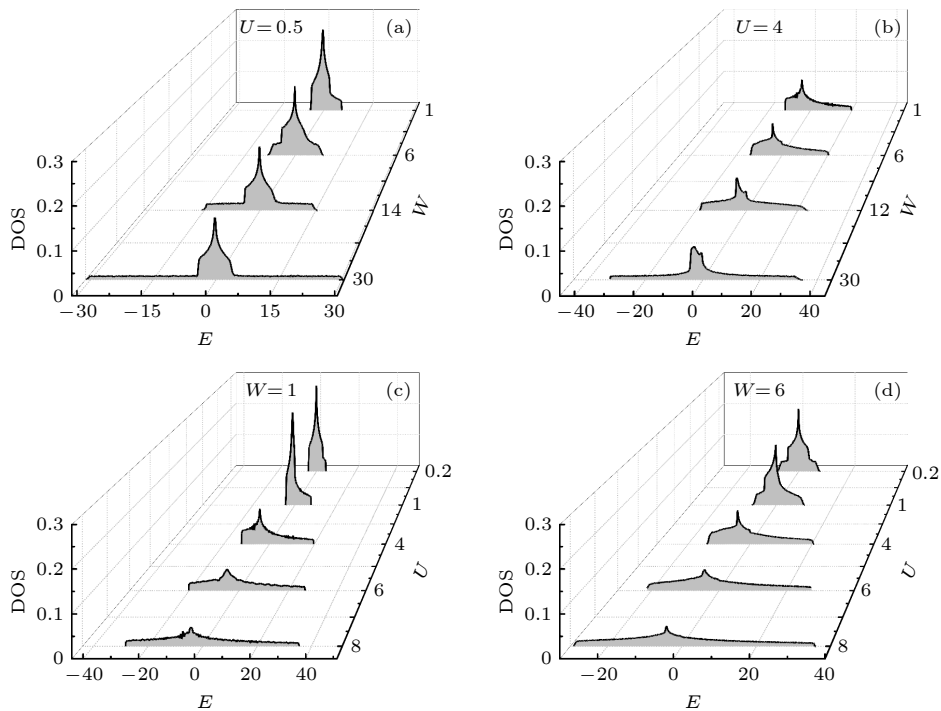


图 4  $AB$  堆垛有序-无序双层耦合正方晶格 DOS 分布 (a), (b) DOS 随无序强度  $W$  的变化; (c), (d) DOS 随层间耦合能  $U$  的变化  
 Fig. 4. DOS for order-disorder bilayer coupling system of the square lattices with  $AB$  stacking: (a), (b) Changes of the DOS for different  $W$ ; (c), (d) changes of the DOS for different  $U$ .

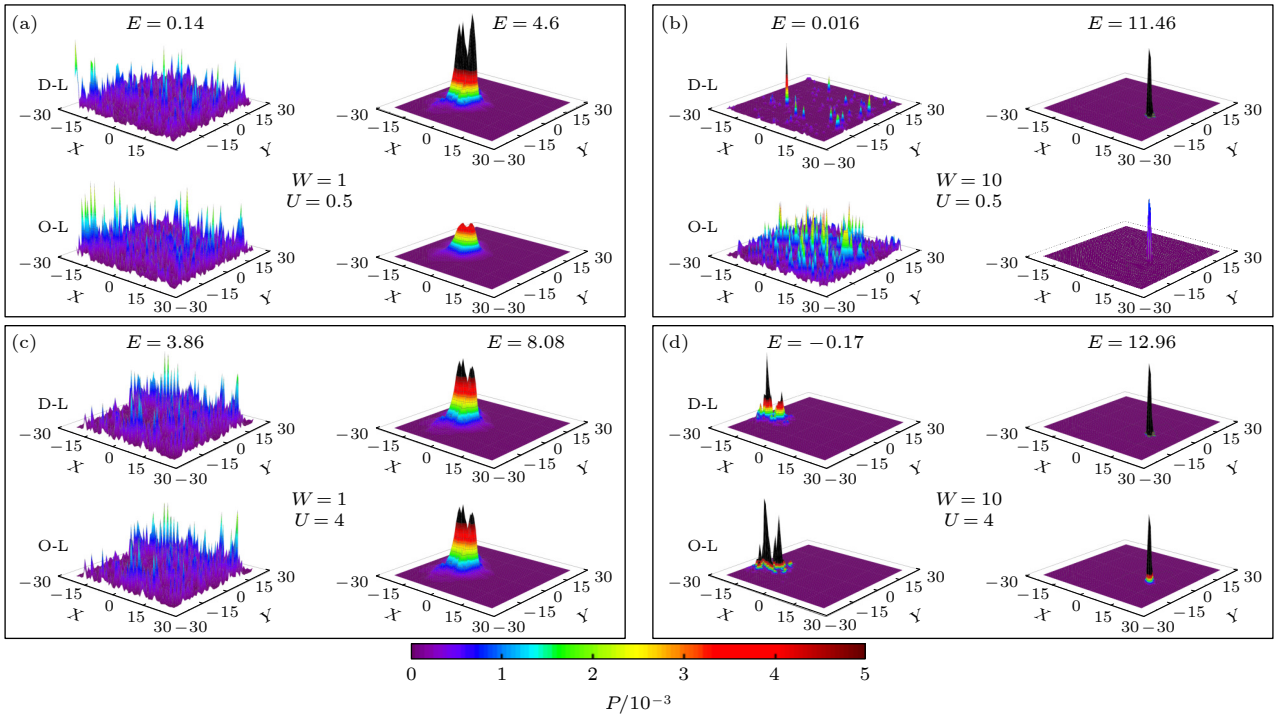


图5 AA型堆垛有序-无序双层耦合正方晶格本征态波函数分布图(其中D-L和O-L分别代表上层无序晶格和下层有序晶格)(a),(b)分别为弱耦合系统( $U=0.5$ )在弱无序( $W=1$ )和强无序( $W=10$ )时的带中态( $E=0.140, 0.016$ )和带尾态( $E=4.60, 11.46$ )的波函数 $|\Phi(E)|^2$ 分布;(c),(d)分别为强耦合系统( $U=4$ )在弱无序( $W=1$ )和强无序( $W=10$ )时的带中态( $E=3.86, -0.17$ )和带尾态( $E=8.08, 12.96$ )的波函数 $|\Phi(E)|^2$ 分布;黑色表示概率大于0.005

Fig. 5. Eigen-wavefunctions  $|\Phi(E)|^2$  for the bilayer coupling system of square lattices with AA stacking, where D-L and O-L represent the upper disordered layer and the lower ordered layer respectively: (a), (b) Eigen-wavefunctions of the eigen-states ( $E=0.140, 0.016$ ) in the spectral central region and the eigen-states ( $E=4.60, 11.46$ ) in the tail region for the weak coupling system of  $U=0.5$  with small disorder of  $W=1$  and strong disorder of  $W=10$ , respectively; (c), (d) the eigen-wavefunctions of the eigen-states ( $E=3.86, -0.17$ ) in the spectral central region and the eigen-states ( $E=8.08, 12.96$ ) in tail region for the strong coupling system of  $U=4$  with small disorder of  $W=1$  and strong disorder of  $W=10$ , respectively. The black color means that the values are larger than 0.005.

散分布在上、下层的整个空间,具有扩展态特征,如图5(a)和图5(b)左侧图形所示;对于层间耦合较大的体系, $W$ 较小时,带中态的非零波函数分布在上、下层较大的空间内,但其分布范围随 $W$ 的增大不断缩小,具有临界态特征,如图5(c)和图5(d)左侧图形所示。

由波函数的空间分布可知,与AA堆垛不同,强无序及强耦合下的AB堆垛有序-无序耦合正方晶格体系带中始终存在扩展态.图6为AB型有序-无序耦合正方晶格结构带中及带尾部分典型能量的概率分布.可见,无论无序强度及层间耦合强度大小如何,带中态波函数始终弥散分布在整个体系,表现出扩展态特征,如图6(a)—(d)左侧图形所示,而带尾态则局限在体系中的特定范围内,且随无序强度增大更加局域化,表现出非扩展态特性,如图6(a)—(d)右侧图形所示。

本征波函数的格点占据数( $P(E)$ )能够很好地描述无序电子系统的电子局域化<sup>[33]</sup>,其定义为 $P(E)^{-1} = \sum_n \phi(E, \mathbf{r}_n)^4$ ,其中 $\phi(E, \mathbf{r}_n)$ 为本征态波函数. $P(E)$ 与系统格点数 $N$ 普遍满足关系 $P(E) \propto N^\gamma$ ,其中 $\gamma=0$ 和 $\gamma=1$ 分别对应于局域态波函数与扩展态波函数, $0 < \gamma < 1$ 对应介于扩展态与局域态之间的临界态波函数.对比AA/AB堆垛结构中不同无序强度及层间耦合强度下指数 $\gamma$ 随 $W$ 的变化情况,发现随着 $W$ 的增加AA堆垛结构带中电子态强无序时仅包含临界态( $0 < \gamma < 1$ ),而AB堆垛结构带中始终包含扩展态( $\gamma=1$ )及临界态( $0 < \gamma < 1$ ).

图7展示出不同耦合强度下AA堆垛型有序-无序耦合正方晶格体系中 $P(E)$ 随无序度 $W$ 的变化情况.可以看出,无论耦合强度大小如何,无序导致的带尾态均具有极小的 $P(E)$ 值,具有局域态

的特征. 对于弱耦合系统 ( $U=0.5$ ), 带中态的  $P(E)$  值随  $W$  增大呈现出先下降然后在  $W \geq 8$  之后保持稳定分布的特征, 如图 7(a) 所示. 对于强耦合体系 ( $U = 4$ ), 两个子带的带中态的  $P(E)$  值随  $W$  增

大先减小, 然后在  $W \geq 12$  后小幅上升, 如图 7(b) 和图 7(c) 所示.

图 8 给出了 AA 型堆垛有序-无序耦合正方晶格体系中部分典型无序强度和层间耦合强度下

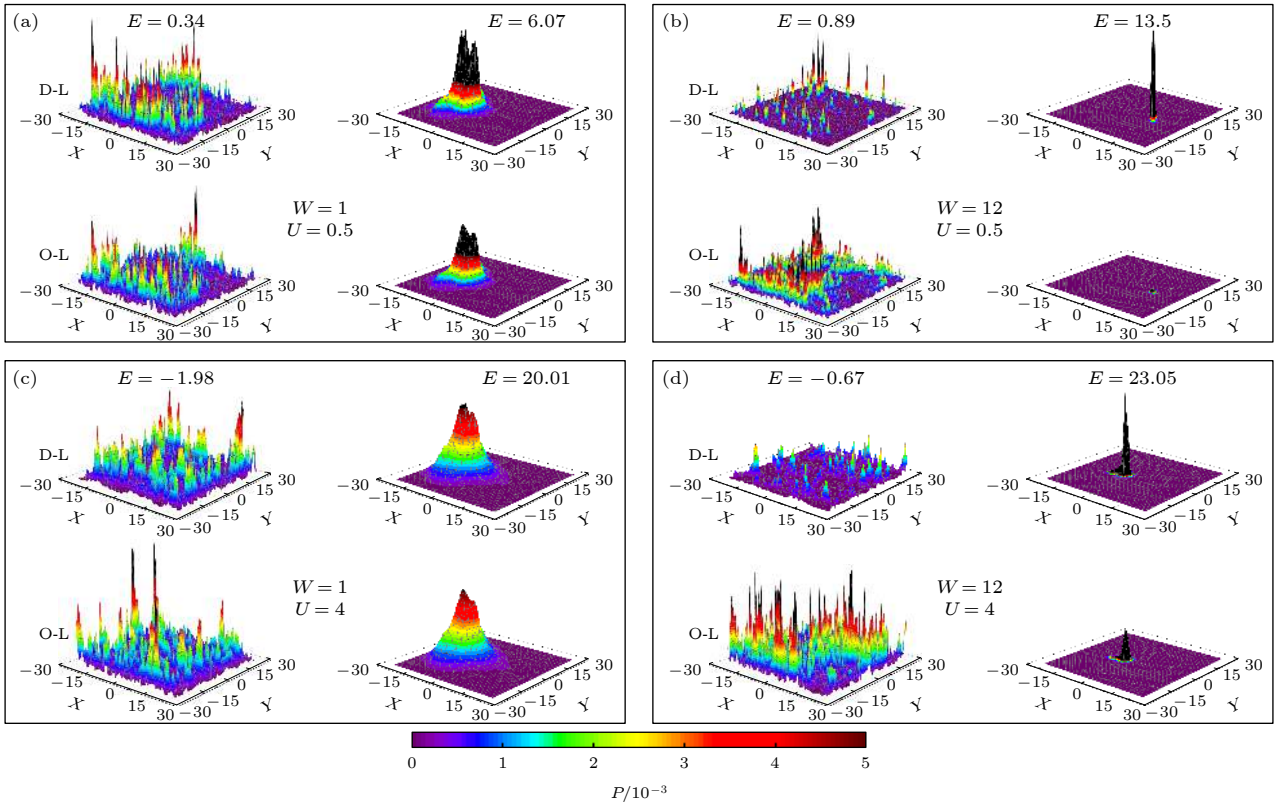


图 6 AB 型堆垛有序-无序双层耦合正方晶格的带中态和带尾态波函数分布图 (a), (b) 分别为层间弱耦合 ( $U = 0.5$ ) 时弱无序 ( $W = 1$ ) 及强无序 ( $W = 12$ ) 体系中带中态 ( $E = 0.34, 0.89$ ) 及带尾态 ( $E = 6.07, 13.50$ ) 波函数的分布; (c), (d) 分别为层间强耦合 ( $U = 4$ ) 时弱无序 ( $W = 1$ ) 及强无序 ( $W = 12$ ) 体系中带中态 ( $E = -1.98, -0.67$ ) 及带尾态 ( $E = 20.01, 23.05$ ) 波函数的分布; 黑色表示概率大于 0.005

Fig. 6. Eigen-wavefunctions of the eigen-states in the spectral central and tail regions for the order-disorder bilayer coupling system of square lattices with AB stacking: (a), (b) Eigen-wavefunctions of the eigen-states ( $E = 0.34, 0.89$ ) in the spectral central region and the eigen-states ( $E = 6.07, 13.50$ ) in the tail region for the weak coupling system of  $U = 0.5$  with small disorder of  $W = 1$  and strong disorder of  $W = 12$ , respectively; (c), (d) the eigen-wavefunctions of the eigen-states ( $E = -1.98, -0.67$ ) in the spectral central region and the eigen-states ( $E = 20.01, 23.05$ ) in tail region for the strong coupling system of  $U = 4$  with small disorder of  $W = 1$  and strong disorder of  $W = 12$ , respectively. The black color means that the values are larger than 0.005.

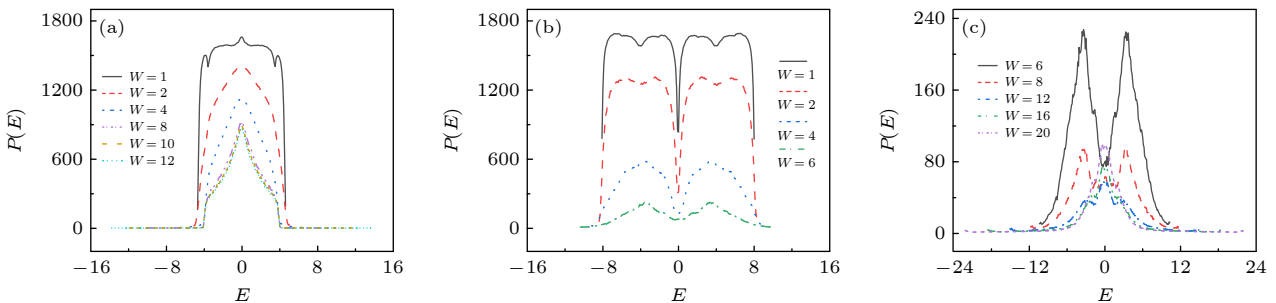


图 7 AA 型堆垛有序-无序双层耦合正方晶格波函数的格点占据数  $P(E)$  随  $W$  的变化情况 (a) 弱耦合系统  $U = 0.5$ ; (b), (c) 强耦合系统  $U = 4.0$

Fig. 7. Variation of participation number  $P(E)$  with  $W$  for the order-disorder bilayer coupling system with AA stacking: (a) Weak coupling system of  $U = 0.5$ ; (b), (c) strong coupling system of  $U = 4.0$ .

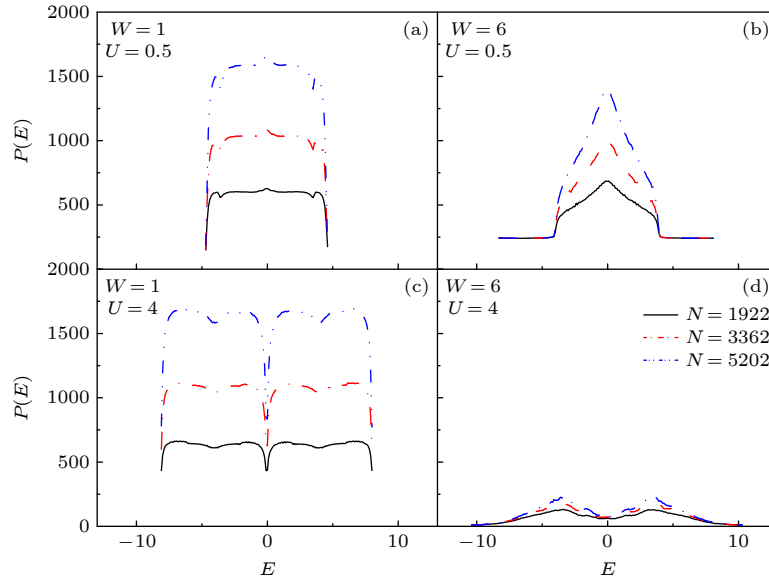


图 8 AA 型堆垛有序-无序双层耦合正方晶格的格点占据数  $P(E)$  随体系尺寸大小  $N$  的变化 (a), (b) 弱耦合系统  $U = 0.5$ ; (c), (d) 强耦合系统  $U = 4.0$ .

Fig. 8. Variation of participation number  $P(E)$  with system size  $N$  for order-disorder bilayer coupling system with AA stacking. (a), (b) Weak coupling system of  $U = 0.5$ ; (c), (d) strong coupling system of  $U = 4.0$ .

$P(E)$  随体系尺寸  $N$  的变化情况. 从图 8(a), (b) 和图 8(c), (d) 可以看出, 弱耦合体系中  $P(E)$  随尺寸  $N$  的变化明显不同于强耦合体系. 如图 8(a) 和图 8(b) 所示, 弱耦合体系的带尾态不随  $N$  变化, 表明带尾呈局域态; 带中态  $P(E)$  随  $N$  增大而增大, 具有扩展态特征. 对于强耦合体系, 如图 8(c) 和图 8(d) 所示, 无序较弱时的所有本征态  $P(E)$  随  $N$  增大而增大, 且带尾增大幅度明显小于带中, 具有非局域态特性; 无序较强时, 带尾态  $P(E)$  不随  $N$  变化, 呈局域态, 带中态  $P(E)$  随  $N$  增大而增大, 但其增大幅度明显小于弱耦合体系, 表现出非局域态性质.

通过对  $P(E)$  进行拟合, 分析发现  $P(E) \propto N^\gamma$ . 图 9(a)—(d) 给出了 AA 型堆垛有序-无序耦合正方晶格体系带尾态和带中态中典型能量处的  $\log P$  随  $\log N$  变化的依赖关系, 图 9(e) 和图 9(f) 为拟合指数  $\gamma$  随能量的分布图. 图 9(a), (b), (e) 显示, 弱耦合体系 ( $U = 0.5$ ) 中  $\gamma$  在能带中心区 ( $|E| < E_c$ ) 和带尾区 ( $|E| > E_c$ ) 表现出完全不同的行为, 能带中心为严格的扩展态 ( $\gamma = 1$ ), 其周围为不随无序强度增加而改变的近似扩展态的临界态 ( $\gamma \approx 1$ ), 带尾态为局域态 ( $\gamma = 0$ ), 并在强无序时存在清晰的与  $W$  无关的迁移率边, 其中无序强度  $W = 1, 3, 6, 12$  分别对应  $E_c = 4.6, 4.6, 4.0, 4.0$ , 这一现象与我们早期在各向同性双层二维正方晶格中的结论一致<sup>[32]</sup>. 从图 9(c), (d), (f) 可知, 强耦合体系 ( $U = 4$ )

中, 无序较弱时带中态和带尾态分别表现出扩展态 ( $\gamma = 1$ ) 和临界态 ( $1 > \gamma > 0$ ) 特征. 当无序  $W \geq 3$  时, 带中态为临界态 ( $1 > \gamma > 0$ ), 带尾态为局域态 ( $\gamma = 0$ ), 且带中态  $\gamma$  值在  $W < 12$  区间随  $W$  增大而减小, 而当  $W \geq 12$  时反而随  $W$  增大而增大.

运用相同方法对 AB 型有序-无序正方晶格波函数的格点占据数  $P(E)$  进行分析. 图 10(a)—(d) 给出 AB 型有序-无序耦合正方晶格带尾态和带中态中典型能量处的  $\log P$  随  $\log N$  的依赖关系及对  $\log P \sim \gamma \log N$  的线性拟合, 图 10(e) 和图 10(f) 为不同能量处指数  $\gamma$  随无序强度  $W$  及层间耦合强度  $U$  的变化情况. 图中可见, 指数  $\gamma$  随  $E$  的分布与 AA 型耦合体系显著不同, 对于 AB 堆垛结构, 无论  $W$  和  $U$  如何变化带中始终包含扩展态 ( $\gamma = 1$ ) 和临界态 ( $0 < \gamma < 1$ ), 弱无序时带尾区为少量临界态, 带中态保持为扩展态; 当  $W \geq 3$ , 带尾态逐渐转变为局域态, 带中态为扩展态与临界态. 图 10(a), (b), (e) 显示, 对于弱耦合体系, 强无序导致负能带区在  $E = -4$  处电子态发生由扩展态 ( $\gamma = 1$ ) 到局域态 ( $\gamma = 0$ ) 的转变, 出现明显的迁移率边, 而正能带区  $\gamma$  值由带中心区往  $E$  增加的方向逐渐由 1 降为 0, 在  $E \approx 5$  处逐渐由临界态过渡为局域态. 从图 10(c), (d), (f) 可看出, 对于强耦合体系, 相同无序强度作用下的带尾区电子局域态数量明显少于弱耦合体系, 多数电子态为扩展态和临界态, 尤其在  $-4 < E < 20$  区

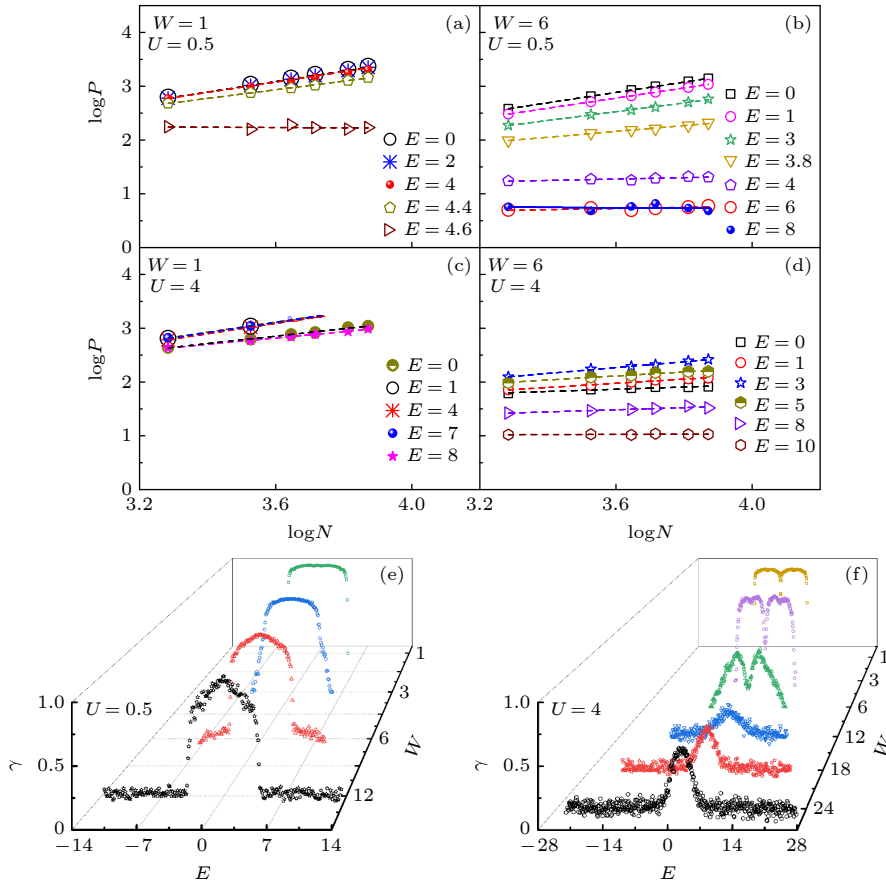


图 9 (a)–(d)  $AA$  型堆垛有序-无序双层耦合正方晶格系统的带尾态和带中态中典型能量处的  $P(E)$  随  $N$  的变化, 符号对应计算结果, 虚线为对  $\log P \sim \gamma \log N$  的拟合线; (e), (f) 拟合指数  $\gamma$  随能量的分布

Fig. 9. (a)–(d) Variation of  $P(E)$  with  $N$  for the order-disorder bilayer coupling system with  $AA$  stacking at typical energy values in the spectral tail and central regions, where symbols are the calculation results, dashed lines are the fitting results to  $\log P \sim \gamma \log N$ ; (e), (f) distribution of fitting exponent  $\gamma$  with energy.

间几乎所有态均为扩展态 ( $\gamma = 1$ ) 和类似扩展态的临界态 ( $\gamma \approx 1$ )。

均方位移  $d(t)$  随时间的演化, 可表征耦合体系中的量子扩散行为. 将双层耦合体系下层中心设置为量子波包起点对  $d(t)$  进行数值计算与分析, 发现  $AA$  和  $AB$  堆垛两种构型, 有序-无序双层耦合系统的量子扩散随无序强度增大均呈现出先减弱再增强的反常量子扩散现象.  $AA$  型弱耦合系统和  $AB$  型耦合系统中的量子扩散均表现为超扩散,  $AA$  型强耦合系统中弱无序导致超扩散, 而强无序导致亚扩散.

根据量子扩散理论, 均方位移的长时行为通常符合  $d(t) \sim t^b$  关系, 其中  $b = 0, 0.5, 1.0$  分别对应于局域化、正常扩散、弹道扩散, 当  $0 < b < 0.5$  和  $0.5 < b < 1.0$  时分别对应亚扩散和超扩散<sup>[34,35]</sup>. 结果表明, 耦合量子体系中的量子扩散行为同样符合这一关系. 图 11 为  $AA$  型有序-无序耦合体系中的

电子均方位移  $d(t)$  与指数  $b$  对无序强度和耦合强度的依赖关系, 其中指数  $b$  通过将  $d(t)$  的长时间数据 ( $t > 1$ ) 对  $d(t) \sim t^b$  进行拟合获得. 从图 11(a) 和图 11(b) 可以看出, 无论层间耦合强度如何变化, 指数  $b$  随  $W$  增大均存在先减小再提升的转变现象, 并且弱耦合体系的反转提升程度远大于强耦合体系. 图 11(c) 给出了不同  $U$  情况下指数  $b$  对  $W$  的依赖关系, 可见指数  $b$  随  $W$  增加均存在先减小再增大的反转现象. 弱耦合作用 ( $U \leq 1$ ) 导致超扩散; 而强耦合作用 ( $U > 1$ ) 下, 弱无序体系导致超扩散, 而强无序体系导致亚扩散.

图 12 展示了  $AB$  型堆垛有序-无序双层耦合正方晶格中量子波包传播的均方位移  $d(t)$  及其对  $d(t) \sim t^b$  拟合的结果. 由图 12(a) 和图 12(b) 可见,  $U = 1$  时  $d(t)$  在  $W = 6$  处明显反转,  $U = 4$  时  $d(t)$  随时间的增长速率在  $W > 15$  以后随  $W$  增大反而

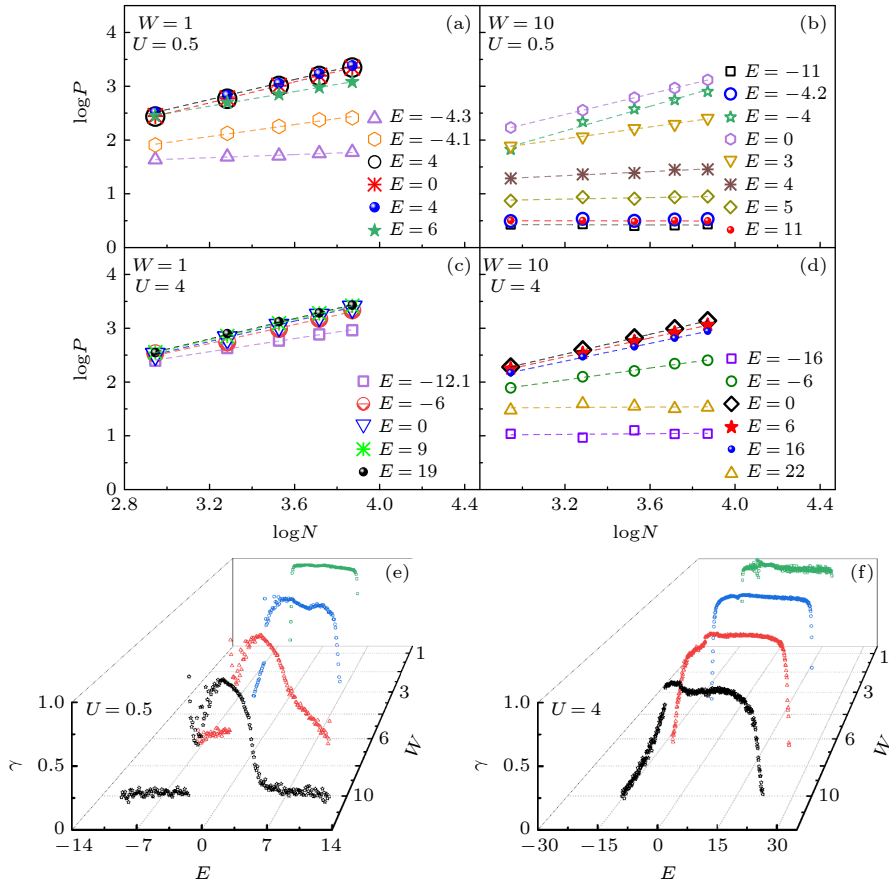


图 10 (a)–(d)  $AB$  型堆垛有序-无序双层耦合正方晶格的带尾态和带中态中典型能量处的  $P(E)$  随  $N$  的变化, 符号对应计算结果, 虚线为对  $\log P \sim \gamma \log N$  的线性拟合线; (e), (f) 拟合指数  $\gamma$  随能量的分布

Fig. 10. (a)–(d) Variation of  $P(E)$  with  $N$  for the order-disorder bilayer coupling system with  $AB$  stacking at typical energy values in the spectral tail and central regions, where symbols are the calculation results, dashed lines are the fitting results to  $\log P \sim \gamma \log N$ ; (e), (f) distribution of fitting exponent  $\gamma$  with energy.

加快. 图 12(c) 显示无论层间耦合强度如何变化, 指数  $b$  随  $W$  增大均存在先减小再提升的转变现象, 这与  $AA$  堆垛结构量子扩散规律一致. 但不同于  $AA$  堆垛的是, 由于  $AB$  堆垛结构无论层间耦合及无序强度大小如何变化带中始终存在扩展态电子, 使得该体系始终表现出超扩散 ( $b > 0.5$ ) 行为, 如图 12(c) 所示.

有序-无序耦合体系中的反常量子扩散是有序、无序层两个子系统共同作用的结果. 无耦合作用时, 有序单层体系的所有态为扩展态, 而无序单层体系的所有态为局域态. 在耦合情况下, 有序层的有效哈密顿量<sup>[32]</sup> 减小为  $H_0^* = H_0 - \delta$ , 其中  $\delta = H_{od}(H_d - E)^{-1}H_{do}$ ,  $H_0$  为不考虑无序层影响的独立有序单层体系哈密顿量,  $H_d$  为不考虑有序层影响的独立无序单层体系哈密顿量,  $H_{od}$  和  $H_{do}$  为有序、无序层相互作用项. 由于  $\delta = \frac{U^2}{H_d - E}$ ,  $H_d$  中无

序格点能的贡献导致  $H_0^*$  中包含无序干扰项, 使得有序层中的电子运动受阻. 随着  $W$  的增加,  $\delta$  项贡献逐渐减小, 因而弱无序时随  $W$  增加量子扩散减弱, 但强无序时量子扩散随  $W$  增加反而提升<sup>[32]</sup>. 由于干扰项  $\delta$  正比于  $U^2$ ,  $\delta$  在弱耦合情况下远小于有序层内的跳跃能  $h$ , 使得无序层对有序层的干扰较小, 带中态仍维持扩展态或近似扩展态的临界态特征; 而在强耦合情况下,  $\delta$  与  $h$  相比不再是小量, 使得带中态受到无序层的显著影响, 导致近似局域态的临界态出现, 而当  $W \gg U$  时,  $\delta$  逐渐小于  $h$ , 使得无序层对有序层的干扰再小, 因此量子扩散在强耦合系统中存在随  $W$  增加先减弱再提升的反常现象, 但其量子扩散要弱于弱耦合系统.

在实际二维体系中, 相较正方晶格而言六角晶格结构 (如石墨烯和六角氮化硼等) 更为常见, 因此有必要进一步讨论无序度和层间耦合强度对六角晶格结构电子输运性质的影响. 计算结果表明,

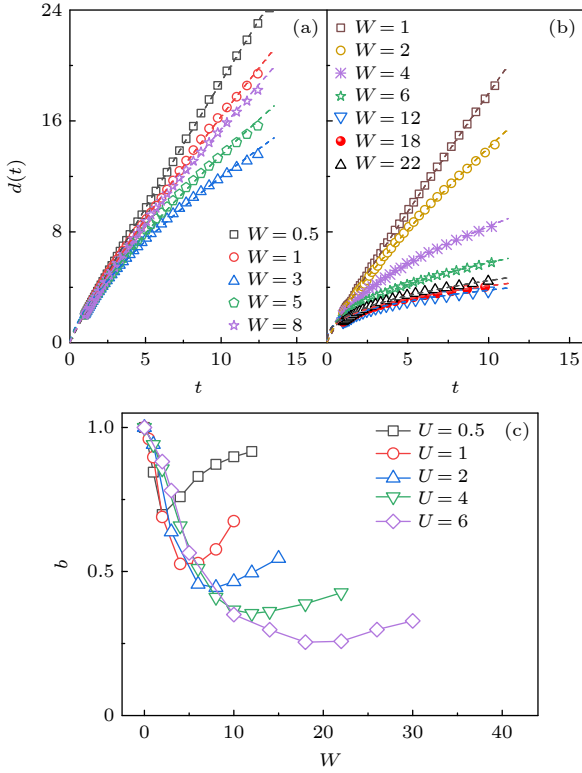


图 11 AA 堆垛有序-无序双层耦合正方晶格中量子扩散的均方位移  $d(t)$  (符号) 及对  $d(t) \sim t^b$  的拟合结果 (虚线) (a) 弱耦合系统  $U = 0.5$ ; (b) 强耦合系统  $U = 4$ ; (c) 拟合指数  $b$  随无序度  $W$  的变化

Fig. 11. Mean-square displacement  $d(t)$  (symbols) of the quantum diffusion for the order-disorder bilayer coupling system of the square lattices with AA stacking and their fitting results to  $d(t) \sim t^b$  (dash line): (a) Weak coupling system of  $U = 0.5$ ; (b) strong coupling system of  $U = 4$ ; (c) variation of the fitting results of  $b$  with the degree of disorder  $W$ .

有序-无序双层耦合六角晶格系统具有与双层耦合正方晶格系统完全一致的结论. 采用 AA 型堆垛有序-无序双层耦合六角晶格系统来展示计算结果, 其模型如图 13 所示. 数值计算中设置键长  $a_0$  及层间距离  $d = 1$ , 仅考虑最近邻格点间跃迁能的贡献, 将层内跃迁能  $h = 1$ , 有序层格点能取 0, 无序层格点能取  $[-W, W]$  之间随机数. 无序强度  $W$  与层间耦合强度  $U$  为可调参数,  $W = 0$  及  $W > 0$  分别对应双层耦合周期系统和有序-无序双层耦合系统. 该耦合体系尺寸采用  $N = 7912$  ( $X \in [-33, 35], Y \in [-21\sqrt{3}, 21.5\sqrt{3}], Z = 0$  或 1) 和 50 个不同随机样本进行样本平均.

对于 AA 型双层六角晶格周期体系, 解薛定谔方程可求得能带色散关系为

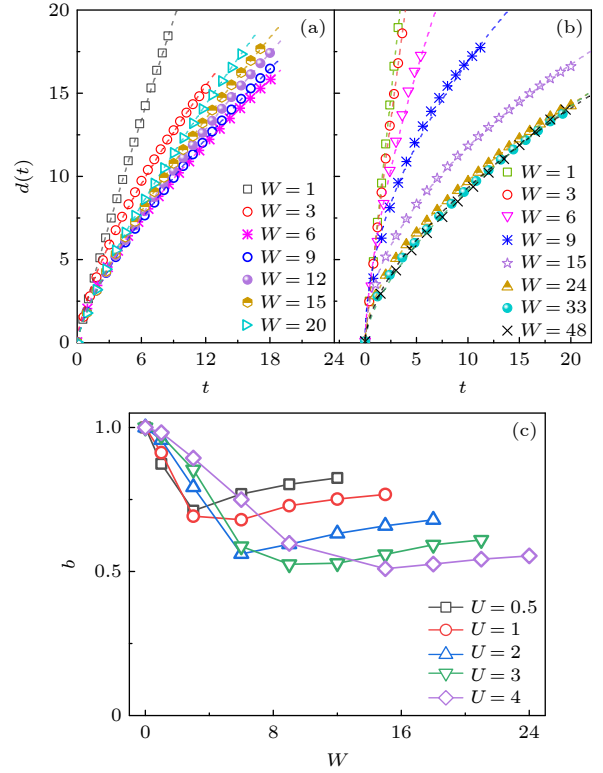


图 12 AB 堆垛有序-无序双层耦合正方晶格中量子扩散的均方位移  $d(t)$  (符号) 及对  $d(t) \sim t^b$  拟合结果 (虚线) (a) 弱耦合系统  $U = 1$ ; (b) 强耦合系统  $U = 4$ ; (c) 拟合指数  $b$  随无序度  $W$  的变化

Fig. 12. Mean-square displacement  $d(t)$  (symbols) of the quantum diffusion for the order-disorder bilayer coupling system of the square lattices with AB stacking and their fitting results to  $d(t) \sim t^b$  (dash line): (a) Weak coupling system of  $U = 1$ ; (b) strong coupling system of  $U = 4$ ; (c) variation of the fitting results of  $b$  with the degree of disorder  $W$ .

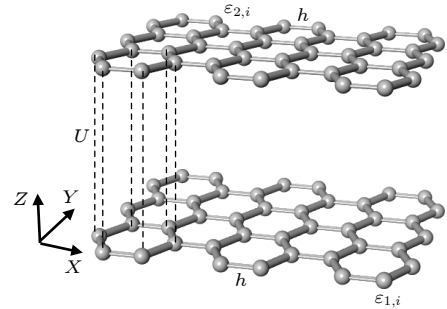


图 13 有序-无序双层六角晶格耦合体系模型图, 上层原子位于下层原子正上方

Fig. 13. Schematic illustration of the order-disorder coupling system of bilayer hexagonal lattices, the upper atom is directly above the lower atom.

$$E(k) = \pm \left[ U \pm h \left( 3 + 2 \cos \sqrt{3} k_y a_0 + 4 \cos \frac{3}{2} k_x a_0 \cos \frac{\sqrt{3}}{2} k_y a_0 \right)^{1/2} \right]. \quad (15)$$

当  $U > 3h$  时, 能带分裂为两个子带, 其带隙宽度  $\Delta E$  为

$$\Delta E = -6 + 2U. \quad (16)$$

图 14 给出双层耦合六角周期晶格 ( $W = 0$ ) 的能带及 DOS 随层间耦合能  $U$  的变化关系. 可见, 其上、下能带随  $U$  增大逐渐分离, 能带在  $U > 3$  时在费米能处产生带隙, 分离为与单层六角晶格相同的两个独立能带, 其带隙宽度随  $U$  的变化服从 (16) 式. 与正方周期晶格相比, 六角周期晶格能带分离所对应的临界层间耦合能  $U_{\text{临}}$  更小. AA 型有序-无序双层耦合六角晶格结构与 AA 型有序-无序

双层正方晶格结构在电子态密度 DOS、粒子参与数  $P(E)$  及均方位移  $d(t)$  对  $W$  和  $U$  的依赖关系上表现出类似的特征. 从图 15(a) 可知, 有序-无序六角晶格弱耦合体系能带随  $W$  增大始终保持单带形式, 且能带中心区逐渐接近单层六角晶格周期体系的 DOS 分布; 对于强耦合体系, 随着  $W$  增大, 带隙不断缩小直至消失, 随后带中 DOS 逐渐增大, 如图 15(b) 所示. 图 15(c) 和图 15(d) 表明无论体系无序强度大小, 随层间耦合能  $U$  的增加, 带中均出现带隙, 且带隙宽度随  $U$  增加.

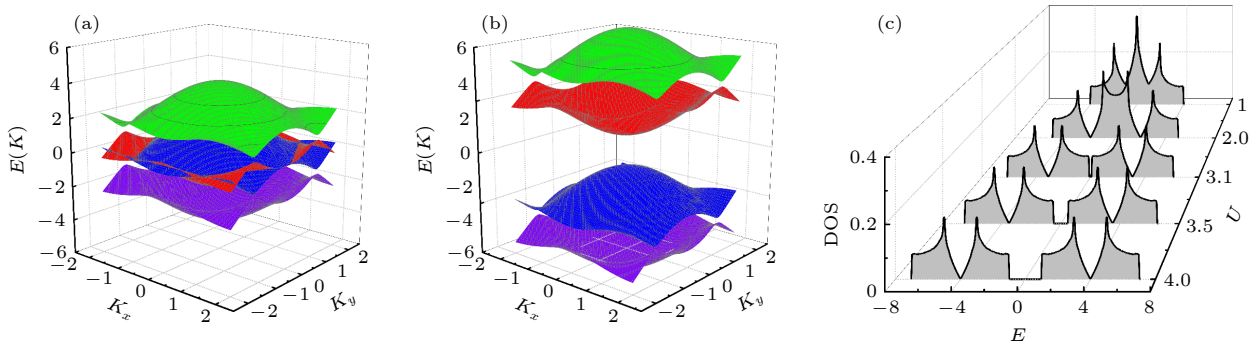


图 14 双层耦合六角周期晶格的能带与 DOS (a)  $U=1$  的能带图; (b)  $U=4$  的能带图; (c) DOS 随  $U$  的变化

Fig. 14. Energy spectra and density of states for the periodic coupling system of bilayer hexagonal lattices: (a) Energy spectra with  $U=1$ ; (b) energy spectra with  $U=4$ ; (c) variation of DOS with  $U$ .

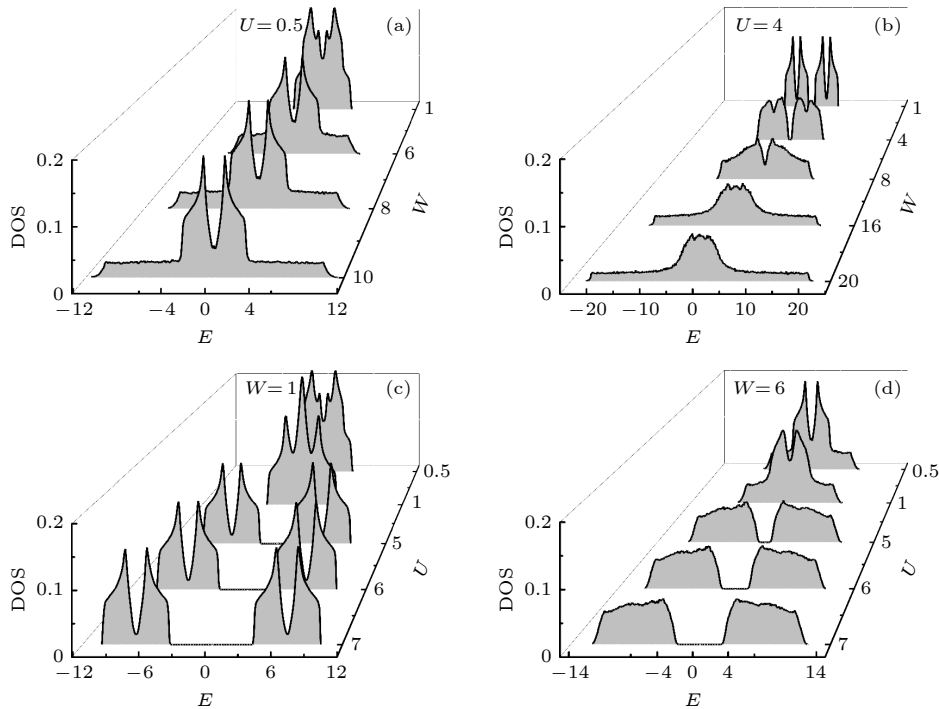


图 15 有序-无序双层耦合六角晶格电子能谱 (a), (b) DOS 随  $W$  的变化; (c), (d) DOS 随  $U$  的变化

Fig. 15. Energy spectra for the order-disorder bilayer coupling system of bilayer hexagonal lattices: (a), (b) Changes of the DOS for different  $W$ ; (c), (d) changes of the DOS for different  $U$ .

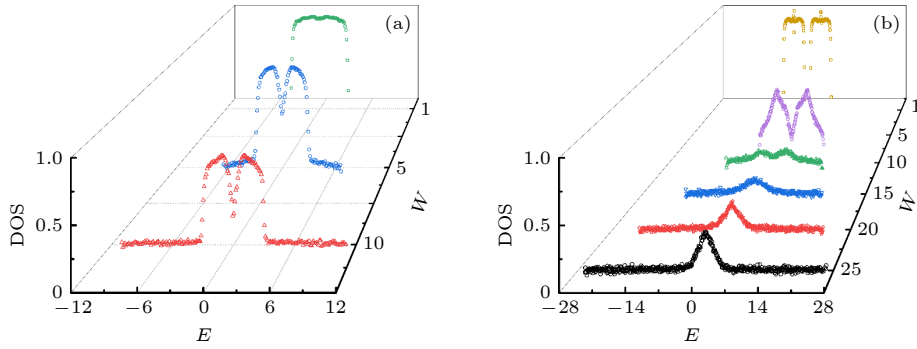


图 16 有序-无序双层耦合六角晶格结构中对不同能量处  $\log P \sim \gamma \log N$  的拟合结果 (a) 弱耦合体系 ( $U = 0.5$ ) 中不同  $W$  下拟合指数  $\gamma$  随能量的分布; (b) 强耦合体系 ( $U = 4.0$ ) 中不同  $W$  下拟合指数  $\gamma$  随能量的分布

Fig. 16. Fitting results to  $\log P \sim \gamma \log N$  for the order-disorder bilayer coupling system of bilayer hexagonal lattices at different energy: (a) Changes of the distribution of fitting exponent  $\gamma$  with energy for different  $W$  for weak coupling system of  $U = 0.5$ ; (b) changes of the distribution of fitting exponent  $\gamma$  with energy for different  $W$  for strong coupling system of  $U = 4.0$ .

进一步研究有序-无序双层耦合六角晶格结构不同能量处的  $\log P$  随  $\log N$  的依赖关系并对  $\log P \sim \gamma \log N$  做线性拟合, 图 16 为不同能量处拟合指数  $\gamma$  随无序强度  $W$  及层间耦合强度  $U$  的变化情况. 可见, 随着  $W$  的增加, 弱耦合体系 ( $U = 0.5$ ) 能带中心 ( $|E| < E_c$ ) 为严格的扩展态 ( $\gamma = 1$ ), 其周围为不随无序强度增加而改变的近似扩展态的临界态 ( $\gamma \approx 1$ ), 带尾态为局域态 ( $\gamma = 0$ ), 并在强无序时存在清晰的与  $W$  无关的迁移率边, 其中无序强度  $W = 5, 10$  分别对应  $E_c = 3.1, 3.3$ , 如图 16(a) 所示. 强耦合体系 ( $U = 4$ ) 中, 无序较弱时带中态和带尾态分别表现出扩展态和临界态特征, 随无序度增加, 带中态逐渐变为临界态, 带尾态为局域态, 且带中态  $\gamma$  值在  $W < 10$  区间随  $W$  增大而减小, 而当  $W \geq 10$  时反而随  $W$  增大而增大, 见图 16(b).

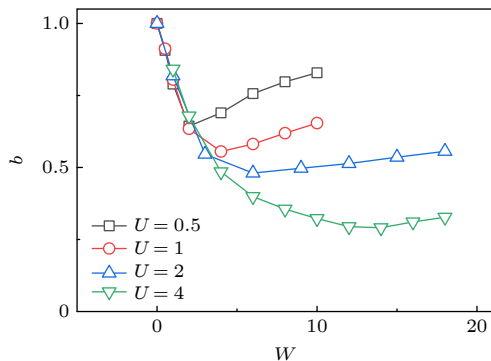


图 17 有序-无序双层耦合六角晶格结构中对  $d(t) \sim t^b$  的拟合参数  $b$  随无序度  $W$  的变化情况

Fig. 17. Variation of the fitting parameter of  $b$  of the fitting function  $d(t) \sim t^b$  with the degree of disorder  $W$  for the order-disorder bilayer coupling system of bilayer hexagonal lattices.

运用函数  $d(t) \sim t^b$  对有序-无序双层耦合六角晶格中量子波包传播的均方位移  $d(t)$  数值结果进行拟合, 拟合参数  $b$  随无序度  $W$  依赖关系见图 17. 可知, 无论层间耦合强度如何变化, 指数  $b$  随  $W$  增加均存在先减小再增大的反转现象, 弱耦合作用 ( $U \leq 1$ ) 导致超扩散; 而强耦合作用 ( $U > 1$ ) 下, 弱无序体系导致超扩散, 强无序体系导致亚扩散.

#### 4 结论与展望

基于紧束缚近似理论, 采用矩阵对角化方法对电子本征波函数、DOS 及量子扩散行为进行数值计算, 将单层无序强度及层间耦合强度作为可调参量, 深入研究有序-无序双层二维耦合系统的电子输运性质. 首先计算双层周期体系能谱特性, 随后进一步研究有序-无序耦合体系. 研究发现, 对于 AA 堆垛的双层耦合正方晶格, 层间耦合较弱时保持单一能带, 带中部分始终保持为延展态和近似延展态的临界态, 而带尾态为局域态, 在正负能量区存在对称的不因无序强度增加而消失的迁移率边, 这一现象与我们前期在各向同性的 AA 型有序-无序双层二维耦合系统中得到的结论一致 [32]; 对于层间耦合较强的耦合系统, 弱无序时能带带尾态为临界态, 带中态为扩展态, 而强无序时两能带交叠为单一能带, 其带尾态为局域态, 带中态为临界态且其延展性随无序强度增大呈现出先降低后增强的现象. 在 AB 堆垛的有序-无序双层耦合正方晶格中, 无论无序强度和层间耦合强度如何改变, 其始终保持能带中心区为延展态和临界态的单一能带, 且当层间耦合较弱时强无序作用导致负能量区

存在明显迁移率边. 在  $AA$  和  $AB$  堆垛两种构型的有序-无序双层耦合系统中, 量子扩散随无序强度增大均呈现出先减弱再增强的反常量子扩散现象.  $AA$  型弱耦合系统和  $AB$  型耦合系统中的量子扩散均表现为超扩散,  $AA$  型强耦合系统弱无序体系导致超扩散, 而强无序体系导致亚扩散. 最后, 将有序-无序分离概念进一步推广至六角晶格结构并得出与四方晶格结构一致的结论. 有序-无序双层二维耦合系统可进一步应用于石墨烯和  $\text{MoS}_2$  等其他层状材料. 实验上可以通过掺杂微加工、衬底调制等方式使其中一个原子层形成不均匀的无序层, 因此本研究将为层状材料的研究及电子器件的设计提供新思路.

感谢法国巴黎索邦大学凝聚态理论物理实验室 Rémy Mosseri 教授以及湘潭大学物理与光电工程学院李金老师的讨论.

## 参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Novoselov K S, Jiang D, Schedin F, Booth T J, Khotkevich V V, Morozov S V, Geim A K 2005 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102** 10451
- [3] Geim A K, Grigorieva I V 2013 *Nature* **499** 419
- [4] Novoselov K S, Mishchenko A, Carvalho A, Neto A C 2016 *Science* **353** aac9439
- [5] Zhu Y, Ji H, Cheng H M, Ruoff R S 2018 *Natl. Sci. Rev.* **5** 90
- [6] Bian R, Li C, Liu Q, Cao G, Fu Q, Meng P, Zhou J, Liu F, Liu Z 2021 *Natl. Sci. Rev.* **0** nwab164
- [7] Cao Y, Fa Temi V, Fa Ng S, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 43
- [8] Lu X, Stepanov P, Yang W, Xie M, Efetov D K 2019 *Nature* **574** 653
- [9] Lü X Y, Li Z Q 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 220303 (in Chinese) [吕新宇, 李志强 2019 物理学报 **68** 220303]
- [10] Nimbalkar A, Kim H 2020 *Nano-Micro Lett.* **12** 20
- [11] He L, Song Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 057303 (in Chinese) [何龙, 宋筠 2013 物理学报 **62** 057303]
- [12] Rozhkov A V, Sboychakov A O, Rakhmanov A L, Nori F 2016 *Phys. Rep.* **648** 1
- [13] Conte F, Ninno D, Cantele G 2019 *Phys. Rev. B* **99** 155429
- [14] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [15] Abrahams E A, Anderson P, Licciardello D, Ramakrishnan T 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 673
- [16] Addou R, Colombo L, Wallace R M 2015 *ACS Appl. Mater. Interf.* **7** 11921
- [17] Fernández-Serra M, Adessi C, Blase X 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 166805
- [18] Yang K W, Chen X Y, Zheng Z H, Wan J Q, Feng M, Yu Y 2019 *J. Mater. Chem. A* **7** 3863
- [19] Xu D, Liu H, Iv V S, Song J, Jiang H, Sun Q F, Xie X C 2013 *J. Phys. Condens Matter* **25** 105303
- [20] Bagci V, Krokhin A A 2007 *Phys. Rev. B* **76** 134202
- [21] Zhang W, Yang R, Ulloa S E 2009 *Phys. Rev. E* **80** 051901
- [22] Markussen T, Ruruli R, Brandbyge M, Jauho A P 2006 *Phys. Rev. B* **74** 245313
- [23] Akguc G B, Gong J 2009 *Phys. Rev. B* **81** 117402
- [24] Menezes M G, Nero J D, Capaz R B, Rego L 2010 *Phys. Rev. B* **81** 117401
- [25] Sun L, Li S, Su Y, He D, Zhang Z 2019 *Appl. Surf. Sci.* **463** 474
- [26] Abhinav S, Muttalib K A 2019 *J. Phys. Communica.* **3** 105010
- [27] Zhong J, Stocks G M 2006 *Nano Lett.* **6** 128
- [28] Vogel E 2007 *Nature Nanotechnol.* **2** 25
- [29] Xiong, Gang 2007 *Phys. Rev. B* **76** 153303
- [30] Wei Z, Rong Y, Yi Z, Duan S, Ping Z, Ulloa S E 2010 *Phys. Rev. B* **81** 214202
- [31] Ganguly S, Maiti S K 2020 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **53** 025301
- [32] Zhong J X, Stocks G M 2007 *Phys. Rev. B* **75** 033410
- [33] Patrick A, Lee T, Ramakrishnan V 1985 *Rev. Modern Phys.* **57** 287
- [34] Zhong J X, Mosseri R 1995 *J. Phys. Condensed Matter* **7** 8383
- [35] Schulz-Baldes H, Bellissard J 1998 *Rev. Mathema. Phys.* **10** 1

# Electron transport properties of order-disorder separated two-dimensional bilayer systems\*

Lu Yan-Yan Wang Chao Liu Jie Jiang Jin-Yi Zhong Jian-Xin<sup>†</sup>*(Department of Physics and Optoelectronics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)*

( Received 27 May 2022; revised manuscript received 26 August 2022 )

## Abstract

In the framework of the electronic tight-binding model of order-disorder separated (ODS) bilayer square lattice (BSL) and by calculating the density of states (DOS), participation number of eigen-wavefunctions and quantum diffusion, we systematically study the effects of stacking interface structure, strength of interlayer coupling and degree of disorder on the electron transport properties of order-disorder separated two-dimensional bilayer systems. Our results show that for the ODS-BSL of *AA*-stacking in the regime of weak coupling, the ODS-BSL always possesses a single energy band with localized states in its band tail, and extended states or critical states similar to the extended ones in the band center region with persistent metal-insulator transitions and associated mobility edges under strong disorder. In the regime of strong coupling, weak disorder leads the critical states to exist in its band tails and extended states to occur in the band center regions, while strong disorder results in the formation of a single band due to the overlapping of the coupling-induced two bands with localized states in the band tails and critical states in the band center region with increasing participation numbers as disorder increases. The ODS-BSL of *AB*-stacking always possesses a single band and supports extended states and critical states in its band center region, regardless of the strengths of interlayer coupling and disorder. In both ODS-BSL systems of *AA*- and *AB*- stackings, quantum diffusion undergoes an anomalous transition from weakening to enhancing behaviors as disorder increases. In the *AA*-stacking ODS-BSL of weak coupling, *AA*-stacking ODS-BSL of weak disorder and the *AB*-stacking ODS-BSL, quantum diffusion exhibits super-diffusion due to the contribution of extended states and the critical states similar to extended ones. In the *AA*-stacking ODS-BSL of strong coupling, quantum diffusion undergoes sub-diffusion under strong disorder due to the existence of critical states. The numerical results also show that the order-disorder separated (ODS) bilayer hexagonal lattice exhibits the same behaviors as those revealed in ODS-BSL systems.

**Keywords:** two-dimensional system, order-disorder separation, Anderson localization**PACS:** 03.65.-w, 71.30.+h, 73.50.-h, 72.10.-d**DOI:** [10.7498/aps.71.20221055](https://doi.org/10.7498/aps.71.20221055)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11874316, 11474244), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2015CB921103), and the International Visiting Faculty Program of Hunan Provincial Government, China.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [jxzhong@xtu.edu.cn](mailto:jxzhong@xtu.edu.cn)

## 有序-无序二维耦合系统的电子输运性质

陆艳艳 王超 刘洁 蒋金益 钟建新

### Electron transport properties of order-disorder separated two-dimensional bilayer systems

Lu Yan-Yan Wang Chao Liu Jie Jiang Jin-Yi Zhong Jian-Xin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 240301 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20221055

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221055>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 二维系统研究中的无电极输运方法

Contactless transport method of two-dimensional electron system studies

物理学报. 2022, 71(12): 127303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220246>

#### Sc<sub>x</sub>Y<sub>1-x</sub>Fe<sub>2</sub>合金固溶和V<sub>2x</sub>Fe<sub>2(1-x)</sub>Zr有序-无序转变的理论预测

Theoretical prediction of solution in Sc<sub>x</sub>Y<sub>1-x</sub>Fe<sub>2</sub> and order-disorder transitions in V<sub>2x</sub>Fe<sub>2(1-x)</sub>Zr

物理学报. 2021, 70(21): 213601 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210998>

#### 有机分子插层调控二维关联电子系统的研究进展

Research progress of tuning correlated state in two-dimensional system by organic molecule intercalation

物理学报. 2022, 71(12): 127403 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220856>

#### 有限尺寸胶体体系的二维结晶

Two-dimensional crystallization in finite-sized colloidal systems

物理学报. 2019, 68(10): 106401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190304>

#### 二维Janus原子晶体的电子性质

Electronic properties of two-dimensional Janus atomic crystal

物理学报. 2021, 70(2): 026801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201406>

#### 二维冰相I的电子和光学性质

Electronic and optical properties of two-dimensional ice I

物理学报. 2021, 70(13): 133101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210708>