

无序系统中电子局域态分布*

徐 慧 曾红涛

中南工业大学应用物理系,长沙 410083

1991 年 10 月 8 日收到

本文应用一种计算无序系统中电子本征态的方法,求得了含有 2000 个粒子的无序系统中电子局域态的分布,并结合态密度、计算误差进行了分析讨论。所得结果表明,在不同的能量范围内局域态的分布不同,分布可遍及整个系统,且与无序度有关。

PACC: 7155J

一、引 言

近年来,随着对材料物理研究的开展,人们对无序系统的研究,特别是它的电子行为的研究,越来越感兴趣。纳米材料,作为一种无序固体材料,在多方面显示其优良性能。

研究无序系统的难点之一就是系统必须取得很大,这给计算带来许多不便。1960 年 Dean 和 Martin^[1] 提出的负本征值理论; 1974 年 Wu 等人^[2] 提出的无限阶微扰理论和 1981 年 Wu 和 Zheng^[3] 提出的三对角矩阵整体求解方法,都给无序系统的计算提供了方便。1990 年本文作者之一徐慧^[4] 在这些基础上,推导出了五对角矩阵本征矢的解法,把矩阵运算代数化,使得高阶五对角矩阵本征矢的求解变得容易。本文就是应用这种方法来计算无序系统中局域态的分布。

对无序系统中电子行为的研究一般都是以 Anderson^[5] 模型为基础。大量的工作都是放在电子是否是局域态上。1983 年 Chao 等人^[6] 对含有几百个粒子的系统讨论了电子局域态。1987 年 Zheng^[7] 又对含有上万个粒子的系统进行了探讨,得到的结论是无序系统中所有的电子态都是局域化的。而对局域态所在系统中的位置的讨论则很少见。

无序系统中电子局域态的位置,亦即局域态的中心以及局域态位置随能量的变化是很重要的。因为在局域态,电子只能够通过热激发和隧道效应,由一个中心跳到另一个中心,跳跃的频率直接影响到材料的导电、导热性能,所以知道了局域态位置及其随能量的变化,有助于了解无序系统中电子的传导性能。

本文得到了无序系统中电子局域态分布及其随能量变化的情况。结果表明,系统中存在着一些分布范围广,能量间隔小的局域态。这就为进一步的深入研究打下了基础。

* 本校科学基金资助的课题。

二、模型与方法

仍采用一般常用的一维 Anderson 模型来计算电子局域态的分布,其哈密顿量为

$$H = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N t_{ij} |i\rangle\langle j|, \quad (1)$$

其中 $|i\rangle$ 为一组已知的正交完备基函数; N 为无序系统中粒子的个数; ε_i 则为一组均匀分布在 $(-W/2, W/2)$ 间的随机数, 它表示电子在第 i 个点阵上所具有的能量; W 表示系统的无序程度, W 大则无序度大; t_{ij} 为点阵 i 和 j 之间的相互作用, 它的取值我们采用 Day 和 Martino^[8] 提出的表达式:

$$t_{ij} = -2/(|i-j|+1) \quad \text{对 } |i-j| \leq 2, \quad (2)$$

$$t_{ij} = 0 \quad \text{对 } |i-j| > 2. \quad (3)$$

如对某一本征值 λ , 将本征态 φ 展开, 即

$$\varphi = \sum_i b_i |i\rangle. \quad (4)$$

由(1)式可列出一矩阵方程

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_1 - \lambda & -1 & -2/3 & & & \\ -1 & \varepsilon_2 - \lambda & -1 & -2/3 & & \\ -2/3 & -1 & \varepsilon_3 - \lambda & -1 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & -2/3 & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & \ddots & -1 & \varepsilon_N - \lambda & \\ -2/3 & & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = 0. \quad (5)$$

这是一个五对角对称矩阵, 对本征值可用负本征值理论来求, 对本征矢可用我们已推出的方法来求。但本文的目的不是求本征态, 而是要求出本征态峰值所处的位置, 即局域态中心的位置。为此下面先作一些分析。

大家知道, 在求解本征值和本征矢时都会有误差, 而误差的大小则直接影响到计算结果。由方程(5)可以取

$$E_i = -\frac{2}{3} b_{i-2} - b_{i-1} + (\varepsilon_i - \lambda) b_i - b_{i+1} - \frac{2}{3} b_{i+2} \quad (6)$$

作为衡量误差的标准。因为当本征值和本征矢存在误差时, 有 $E_i \neq 0$, 所以 E_i 的大小反映了误差的大小。

由方程(6)所定义的误差(参看文献[3])与本征值误差存在着如下关系:

$$\Delta E_l = -\Delta \lambda \sum_{i=1}^N b_i^2 / b_l^2 \quad (l=1, 2, \dots, N). \quad (7)$$

上式意味着当本征值误差一定时, 如误差 ΔE_l 最小, 则本征矢分量 b_l 最大。而本征矢的最大分量也就对应着局域态的中心, l 值就对应着局域态中心在系统中的位置。 l 这一点我们就叫做中枢点, 它在计算本征矢时是很重要的。因此我们只需求出误差 E_i 中的最小值, 即

$$E_i = \text{minimum}\{|E_i|\} \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (8)$$

就可知道局域态中心位置。我们计算出的结果也表明,误差 E_i 最小时,分量 b_i 最大。

由方程(6)可见,要求出 E_i 只需知道 b_i 前后 5 个本征矢分量,而不必求出本征矢。把所有的 E_i 求出后,找出最小的 E_i 即可。显然不同的本征值有不同的 E_i , 亦即有不同的局域态中心。如把所有本征值对应的局域态中心都求出来,则便知道局域态中心位置随能量的分布。至于本征矢分量的解法在文献[4]中已详细讨论过,这里不再赘述。

三、电子态密度及计算误差

由上节的分析可知局域态分布的计算量是很大的,特别是点阵取得很多时。本文选择了一个含有 2000 个点阵的无序系统,因为根据算得的结果,此时的电子态已是局域态了,但也还是要求解 2000 阶的矩阵。

我们曾在保证其它参量不变,只是点阵数从 2000 变到 10000 的情况下,得到过几个本征态。这些本征态的形状、分布范围和峰值位置均相同。这说明局域态有较好的稳定性,同时也意味着知道了局域态中心位置,也就对整个局域态有所了解。可见求出局域态中心位置及其分布是很有意义的。

图 1 和图 2 分别给出 2000 个点阵无序系统无序度 W 为 1 时的电子态密度和计算误差。关于态密度,我们已在另文详细讨论过,放在此处只是为了和计算误差、局域态分布作一些对应分析。

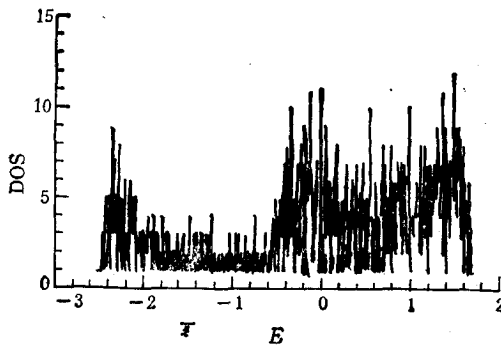


图 1 电子态密度

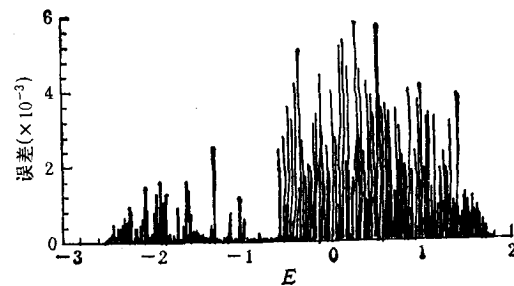


图 2 计算误差

图 1 显示了电子态密度分布。从图 1 中看到能量在 -0.5 处它分为两个区,左边为低密度区,右边为高密度区。和图 2 的计算误差分布相比较,在低密度区误差较小,而在高密度区误差较大。这是由于计算方法所引起的,因这种方法对简并的情况不能处理,所以在接近简并的地方误差就大。好在无序系统中很难有简并,因此计算误差也不会很大。

从图 2 中可见,最大误差也就是 0.006, 因图 2 中的纵坐标是放大了 1000 倍的,而大多数误差都远远小于这个数字,其中相当一部分误差在 10^{-12} 左右。这说明我们所用的方法是有效的,得到的结果也是可信的。

四、电子局域态分布

这里给出电子局域态分布。图 3 为局域态分布图。

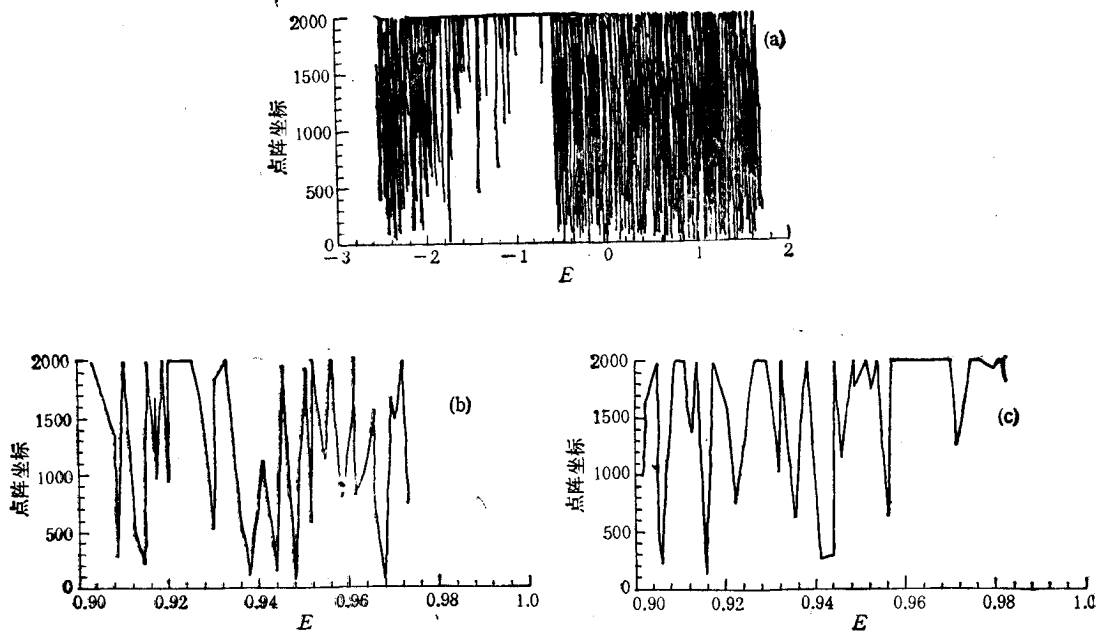


图 3 局域态分布图

图 3(a) 显示了 2000 个局域态在系统中随能量的分布。图 3(b) 和 (c) 都只显示了 50 个局域态的分布。此二图是为了看得清楚而进行了局部的放大。

从图 3(a) 中可以看到,局域态中心所在位置对不同的能量有不同的值。也就是说局域态的分布随能量变化而变化,且变化范围遍及整个系统,即在系统的任何位置都有可能形成局域态,但不是均匀分布。在某些地方局域态形成得多,形成几率大。如在系统的终端,第 2000 个粒子附近。而在某些地方局域态形成得少,形成几率小。如在系统的始端,第 1 个粒子附近。我们认为这种分布与材料本身有关,对不同的材料局域态分布几率不同。

从图 3(a) 中还可看到,局域态的分布与态密度的分布也有所对应。态密度大的地方局域态分布范围广,而态密度小的地方局域态分布范围窄。虽不是严格对应,但也可从态密度分布来大致了解局域态分布。

此外,图 3(a) 中局域态分布的范围在不同的能量区域有所不同。在有的能量区,如 0.5 到 1.5 之间,能量变化很小时,局域态分布范围的变化却很大,即局域态位置在系统中可以从头至尾地排列,或者说系统中存在着连续分布的局域态。如图 3(a) 中所示的一些竖直线就体现了这一点。这也意味着当能量稍有变化时,如通过热激发,电子就可从一个局域态跳跃到另一个局域态,而且跳跃的距离可以很远。

从无定形材料的电导理论中,我们知道电子对电导率的贡献是电子通过跳到距离较

远、能量间隔较小的局域态而产生的。所以可以说,在能量变化小、局域态分布范围变化大的能量区域,电子的跳跃容易发生,系统有较大的导电和导热率。

但在另一些能量区,如 -2.0 到 0.5 之间,当能量变化很大时,局域态分布范围的变化却不大,局域态的位置只集中在系统中某一狭小区域,如图3(a)中所示的横直线就体现了这一点。在这样的区域,即使能量变化很大,电子也很难发生跳跃,结果是系统在这段能量范围内导电和导热性能差。

由此可见,知道了局域态的分布,对电子的跳跃作用,系统的导电和导热性能都会有一定的了解,从而对无定型材料的实际应用起到一定的指导作用。

图3(b)是图3(a)在能量范围 0.9 到 1.0 间的放大部分。图3(b)和图3(c)的唯一区别是它们的无序度不同。在图3(c)中无序度取为 0.5 ,即系统的无序程度降低了。二图相比较来看,局域态分布的范围及变化程度,图3(b)都比图3(c)大。这说明无序度对局域态的分布有明显影响。其次二图形状有所相似,只是图3(c)位置左移,即向低能区移动。这是因为无序度降低,能量范围缩小所致。这与得到的无序度对态密度的影响的结论是完全一致的。

五、结 论

综上所述,我们得到如下结论:

1. 本文所用的方法是可信的,所得到的局域态分布的结果也是可靠的,而且计算误差很小。
2. 局域态中心位置随能量变化而变化,在不同的能量区域有不同的分布范围,且这种分布与材料本身有关。
3. 系统中存在着连续分布的局域态,也存在着能量范围小而分布范围广的局域态,这些局域态对材料的导电、导热性能起着重要的作用。
4. 无序度对局域态分布影响明显,无序度大,则局域态分布的范围宽,且分布随能量的变化程度强。

- [1] P. Dean and J. L. Martin, *Proc. Roy. Soc.*, **A259**(1960),409.
- [2] S. Y. Wu, C. C. Tung and M. Schwartz, *J. Math. Phys.*, **15**(1974),938.
- [3] S. Y. Wu and Z. B. Zheng, *Phys. Rev.*, **B24**(1981),4787.
- [4] 徐慧,计算物理,待发表.
- [5] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **109**(1958), 1492.
- [6] S. Statstrom, R. Riklund and K. A. Chao, *Phys. Rev.*, **B27**(1983),6158.
- [7] Z. B. Zheng, *J. Phys. C*, **20**(1987), 4627.
- [8] R. Day and F. Martino, *J. Phys. C*, **14**(1981),4247.

DISTRIBUTION OF ELECTRONIC LOCALISATION IN THE DISORDERED SYSTEM

XU HUI ZENG HONG-TAO

Department of Applied Physics, Central South university of Technology, Changsha 410083

(Received 8 October 1991)

ABSTRACT

The distribution of electronic localisation in the disordered system of 2000 particles is obtained by a new method for calculating eigenvector. The distribution is discussed with the density of states and the calculation error. The result shows that the distribution is changed with the energy, the distribution area may cover the entire system, and the distribution is affected by the disorder degree.

PACC: 7155J