

非对角无序和维数效应对低维无序系统电子结构的影响*

宋招权[†] 徐 慧 李燕峰 刘小良

(中南大学物理学院,长沙 410083)

(2004 年 1 月 9 日收到,2004 年 9 月 6 日收到修改稿)

运用负本征值理论,探讨了非对角无序、维数效应对低维无序系统电子结构的影响,研究表明,非对角无序和维数效应对低维无序系统电子结构的影响很大.非对角无序主要体现出系统的结构变化和粒子边界效应;从一维单链、准一维双链到准一维三链无序系统,电子局域化程度加大,电子能带结构更复杂,体现出显著的维数效应.

关键词:电子结构,低维无序系统,非对角无序,维数效应

PACC:6480G,7320D,0200

1. 引 言

现在实际应用中的多功能材料,如非晶合金材料、高掺杂聚合物材料和纳米材料等,其微观结构都具有显著的无序特征.从查阅的文献来看^[1-3],对具有无序材料的研究,更多的还是集中在制备及应用上,而对无序材料微观结构的理论研究,特别是电子结构的研究,最新文献报道得比较少. Inui 等人^[4]研究了非对角无序系统能带中心区电子特性,在非对角条件下,中间能带区出现电子局域化,而对角无序条件下则没有出现. Steiner 等人^[5]研究了一维系统电子局域化与非局域化间转变的统计特性. Xiong 等^[6]重点研究了具有非对角无序的二维和三维系统中电子满足幂律(power-law)分布的局域化问题.王广厚等对纳米微晶材料的结构和性质进行了详细研究和讨论^[7],徐慧等人针对一维无序系统的本征矢解法^[8]、电子局域态分布^[9]、电子结构^[10,11]、电子跳跃导电^[12]等等研究得比较多.但是由于无序系统不具备周期性,其微观结构理论研究仍是当今的一大热点和难点.因此,有必要继续深入研究准一维无序系统,创建一个简便的模型来研究无序机理,但由于计算相当复杂等原因,这方面的研究进展比较缓慢.随着计算机软硬件技术水平的飞速发展及其他计算软件功能的不断增强,为进一步研究无序系统提供

了可能.

本文在已有的一维无序系统电子结构研究工作的基础上,利用负本征值理论,运用一种新的求解方法,将高阶多对角随机矩阵计算代数化,从而在保证精度基础上简化运算复杂度,计算出准一维三链无序系统的电子态密度,探讨非对角元素无序和无序系统维数对其电子结构的影响,进一步发展无序窄带系统微观结构理论.

2. 研究方法

采用 Anderson 无序模型,即单电子紧束缚无序模型^[13],其哈密顿量写为

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

其中 $|i\rangle$ 是一组已知的正交完备基函数, N 代表系统中的粒子数, ϵ_i 为在第 i 个点阵上的电子能量,它是 $-W/2$ — $W/2$ 之间的随机数, W 代表了系统的无序程度. t_{ij} 为电子的转移能量,利用 Day 和 Martino^[14] 提出的幂函数式,其表达式可写为

$$t_{ij} = \begin{cases} -2\langle |i-j|+1 \rangle, & |i-j|=1, \\ 0, & |i-j| \neq 1. \end{cases}$$

当只考虑电子最近邻相互作用时, $t_{ij} = -1$.如考虑非对角无序,则 t_{ij} 就取为 $(-W/4, W/4)$ 之间的随

* 教育部高等学校博士学科点专项基金(批准号 20020533001)资助的课题.

[†]E-mail: zqsong@mail.csu.edu.cn

机数.

根据上述,参照文献[7],在只考虑电子的最近邻相互作用情况下,建立一组低维(一维单链、准一维双链、准一维三链)电子紧束缚无序模型,其粒子编号正好将系统的哈密顿量分别表示为三、五、七对角对称矩阵的形式,它们的电子态密度的计算,用负

本征值理论计算方法^[11]完全可以求得,本文中系统粒子数统一取为 30000,无序度 W 取 1.

3. 计算结果及分析

计算结果通过绘图如图 1 和图 2.

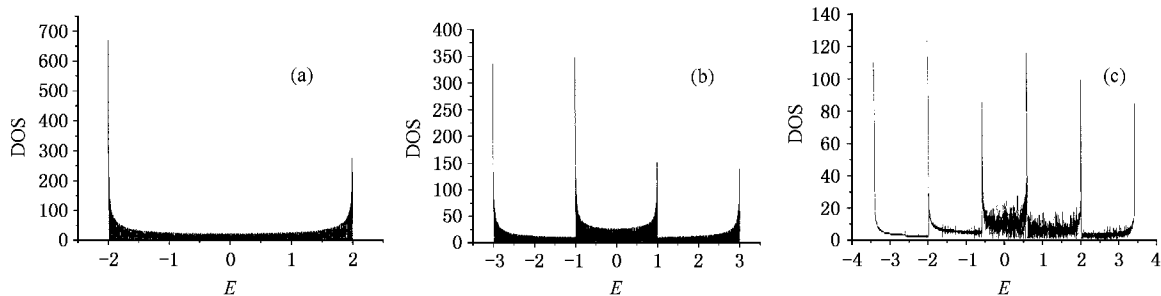


图 1 有序情况下,不同维数系统的电子态密度 (a)为一维单链系统 (b)为准一维双链系统 (c)为准一维三链系统

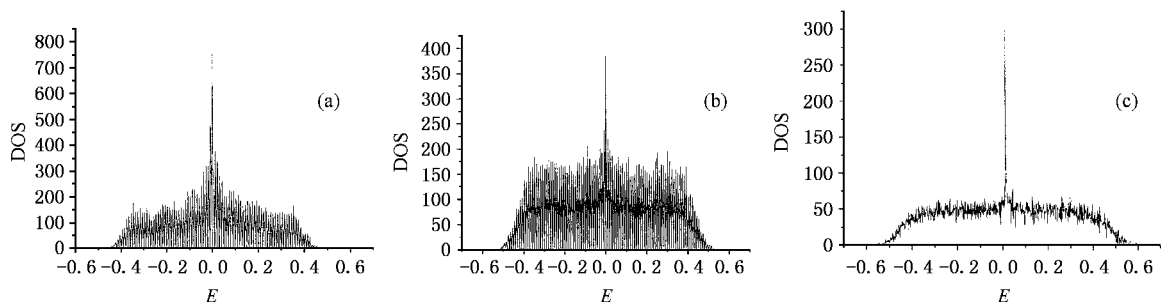


图 2 非对角无序情况下,不同维数系统的电子态密度 (a)为一维单链系统 (b)为准一维双链系统 (c)为准一维三链系统

图 1 和图 2 表示能量(E)和电子态密度(DOS)的关系.通过对比图 1 和图 2,可做以下分析.

3.1. 有序情况下

为了说明计算结果的准确性,本文首先讨论了有序情况下电子态密度.计算研究表明:如图 1,随着系统维数的增加,电子态密度的峰值数随之增多,一维单链系统有 2 个峰值,准一维双链系统有 4 个峰值,准一维三链系统有 6 个峰值.从一维到带状(窄带),电子态密度峰值在减小,但能量的分布范围(能带)有所加宽.根据文献[3]经进一步计算表明,一维单链系统若考虑第三近邻电子相互作用,其系统哈密顿量也正好表示为一个七对角对称矩阵形式,但其电子态密度峰值只有 4 个,而不像准一维三链时有 6 个电子态密度峰值.

3.2. 非对角无序的影响

如图 2 所示,非对角无序引入后,与图 1 相比,能带显著变窄,系统能量分布宽度基本由 4—7 个单位变为 1—2 个单位,最大峰值数均减少至 1 个,这个电子局域化区都出现在零能量点.这点与文献[4]的结果是符合的.由此可见,非对角无序极大改变了电子态密度的分布,这说明非对角无序应主要体现在系统的结构变化或粒子边界效应上,因为只有结构的变化和边界效应才会对系统产生如此大的影响.这些变化对应着相变及相变参数所对应的序参数的变化,因此对电子结构产生很大影响.能带显著变窄,最大峰值在中间,由于结构的稳定取向总是能量最小,这可以获得系统的最小能量,趋向结构稳定.

3.3. 维数效应的影响

随着系统耦合链数目的增加,电子态密度为零的能量区间大为减少.可以借助维数效应来解释这一现象.一维情况下电子只能在一个方向上运动,电子的能级呈现出某种方式的分布,在某些能量区间没有能级出现,而在准一维的情况下电子可在横向运动而产生能带结构的变化,将产生横向的能级分裂,使能级数目增多,且每个子能带相邻能级间距随横向尺寸的增大而减小,从而使有些能量间隙被覆盖.同时,由电子总态数目恒定可以解释态密度的峰值降低.

比较一维无序系统与准一维三平行链无序系统电子态密度分布图,还可见一个最明显的区别,就是后者的电子态密度底部出现一个大的空白区域,表明在这些能量区间上电子的态密度起伏比较小.

综合比较图 1 和图 2 可推知,一维情况下,系统电子只能向一个方向运动,不存在相变,其序参量为零,而准一维双链和三链系统,由于电子可在两个方

向上运动,可引起系统结构变化,存在相变,其序参量不为零,具体序参量值还可以做进一步研究.

4. 结 论

1. 在有序情况下,随着系统维数的增加,电子态密度的峰值数目同样明显增多.一维单链无序系统有 2 个峰值,准一维双链无序系统有 4 个峰值,准一维三链无序系统有 6 个峰值.

2. 非对角无序体现系统的结构变化和粒子边界效应,对无序系统电子结构影响很大.

3. 态密度为零的能量区间的减少,是从一维到准一维,即在向二维过渡的变化中所带来的影响,是维数效应的体现.准一维无序系统电子可在两个方向上运动带来能带结构的变化,使一维情况下态密度为零的某些能量区间被覆盖.

4. 准一维三链无序系统电子态密度分布底部出现空白,说明准一维三链系统的这些能量区间上电子的态密度起伏比较小.

- [1] Lu Z C 2002 *Advanced Materials Industry* **3** 20 (in Chinese) 卢志超 2002 新材料产业 **3** 20]
- [2] Sun G Q 1999 *Metallic Functional Materials* **4** 156 (in Chinese) 孙桂琴 1999 金属功能材料 **4** 156]
- [3] Wang X L 2001 *Advanced Materials Industry* **4** 19 (in Chinese) 王新林 2001 新材料产业 **4** 19]
- [4] Inui M *et al* 1994 *Phys. Rev. B* **49** 3190
- [5] Steiner M *et al* 1999 *Phys. Rev. B* **59** 14848
- [6] Xiong S J *et al* 2001 *Phys. Rev. B* **64** 113107
- [7] Wang G H 1990 *Progress in Physics* **3** 248 (in Chinese) 王广厚 1990 物理学进展 **3** 248]
- [8] Xu H 1991 *Chinese Journal of Computational Physics* **3** 295 (in

Chinese) 徐 慧 1991 计算物理 **3** 295]

- [9] Xu H 1992 *Acat Phys. Sin.* **41** 1666 (in Chinese) 徐 慧 1992 物理学报 **41** 1666]
- [10] Xu H 1993 *J. Cent South Inst. Min. Metall.* **1** 122 (in Chinese) [徐 慧 1993 中南矿冶学院学报 **1** 122]
- [11] Xu H 1997 *Chinese Journal of Computational Physics* **4-5** 574 (in Chinese) 徐 慧 1997 计算物理 **4-5** 574]
- [12] Xu H 2002 *Acat Phys. Sin.* **51** 143 (in Chinese) 徐 慧 2002 物理学报 **51** 143]
- [13] Anderson P W 1958 *Phys Rev.* **4** 1492
- [14] Day R and Martino F 1981 *J. Phys. C : Solid State Phys.* **29** 4247

The effects of non-diagonal disorder and dimensions in low-dimensional disordered electronic system *

Song Zhao-Quan Xu Hui Li Yan-Feng Liu Xiao-Liang

(School of Physical Science and Technology , Central South University , Changsha 410083 , China)

(Received 9 January 2004 ; revised manuscript received 6 September 2004)

Abstract

Based on the negative eigenvalue theory we discuss the non-diagonal disorder and dimensional effects for the electronic structure in low-dimensional disordered systems. The result shows that : It is the non-diagonal disorder and the dimensional effect that strongly affects the electronic structure in the low-dimensional disordered system. The non-diagonal disordered mainly shows the changes of the structure and the boundary effects of the particles in the system. From one- dimensional system to narrow gap one , the number of the electronic bandgap decreases , the degree of local states increases , and the structure of the energy gap will be more complicated.

Keywords : electronic structure , low-dimensional disordered system , non-diagonal disorder , dimensional effect

PACC : 6480G , 7320D , 0200

* Project supported by the Special Research Fund for the Doctoral Program of High Education of China (Grant No.20020533001).