

准二维无序系统的电子结构^{*}

刘小良[†] 徐 慧 马松山 宋招权 邓超生

(中南大学物理科学与技术学院,长沙 410083)

(2005 年 9 月 25 日收到,2005 年 11 月 9 日收到修改稿)

对形如 $N_x \times N_y$ 型准二维无序系统,只考虑格点之间的最近邻跳跃积分,采用特殊的格点编号方案,在单电子近似下,系统的哈密顿量可表示为简明对称矩阵,借助豪斯荷尔德变换将其约化为对称三对角矩阵,再利用负本征值理论及传输矩阵等方法,对系统态密度、局域长度及电导等电子结构特性进行数值计算.重点研究了准一维四平行链和五平行链无序系统,将结果与一维单链、准一维双链及三链系统进行对比,发现随维度的增加,系统的能带有所展宽,能态密度分布发生很大的变化,其峰值数量呈偶数规律增加.并且在能带中心处存在有局域长度大于系统大小的扩展态,处于这些态下的系统具有较大电导.从单链到多链,相当于扩大了系统的关联范围,使系统出现了类似非对角长程关联的行为.

关键词:准二维无序系统,态密度,局域长度,电导

PACC:7320D,7150,0200

1. 引言

鉴于无序系统处理上的复杂性,人们在建立模型时尽量采用能体现物理实质的最简便模型,单电子近似下一维无序安德逊模型等^[1-6]因此被广泛应用.从一维模型出发,已获得很多有意义的结论,如一维无序系统中电子态的局域特性等.但一维模型毕竟是一个过于简化的模型,在反映实际的无序系统时,有着其显而易见的局限性.二维无序系统^[7,8]包含了许多无序系统的基本原理,在实际问题中也能得到很好的应用,但二维实际上相当复杂,数学上处理很难,在理论研究上一直存在争议.作为一维向二维的过度,准一维无序系统^[9,10]自然引起了很多研究者的注意.徐慧等人^[11-13]曾研究了准一维双链和三链无序系统的电子态特性,取得了一定的成果,但从三链到二维系统还存在较大的跨度,需要做进一步的研究.

本文在他们所做工作的基础上,采用新的技巧,将研究范围由准一维三链向四链和五链等多链系统推广,并向二维系统自然拓展,我们称之为准二维无序系统.采用“之”字形的格点编号方案,将多链系

统的哈密顿量写成比较简明的对称矩阵形式,利用豪斯荷尔德(Householder)变换将其约化为对称三对角矩阵,这样,一个多链系统或准二维系统可转化为一个等效的一维单链系统.借助负本征值理论^[14]及传输矩阵^[15-17]等研究方法,对系统态密度、局域长度及电导进行数值计算,探索多链无序系统的电子结构特性^[18,19].

本方法从原理上适用于任意 $N_x \times N_y$ 型准二维无序系统,鉴于计算上的困难,我们重点讨论了准一维四平行链和五平行链无序系统,并将结果与一维单链、准一维双链和三链系统进行对比,发现态密度的分布有明显的差异,其局域和导电性质有类似长程关联的行为^[20-22].本文介绍准一维四平行链无序模型,讨论了系统的态密度,研究系统的局域长度及电导,给出了五链系统的情况并将该方法向准二维系统进行了推广.

2. 准一维四平行链无序系统模型

只计及格点间最近邻跳跃积分,单电子紧束缚模型的哈密顿量^[1]即安德逊模型可表示为

$$H = \sum_{i=1}^N \epsilon_i |i\rangle \langle i| + t \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^Z |i\rangle \langle j|, \quad (1)$$

^{*} 教育部高等学校博士学科点专项基金(批准号:20020533001),湖南省自然科学基金(批准号:05JJ40135)和中南大学文理基金(批准号:0601052)资助的课题.

[†] E-mail: xlliucs@ sina. com

照,同时还给出了单链、双链及三链系统的态密度, 如图 3 所示.

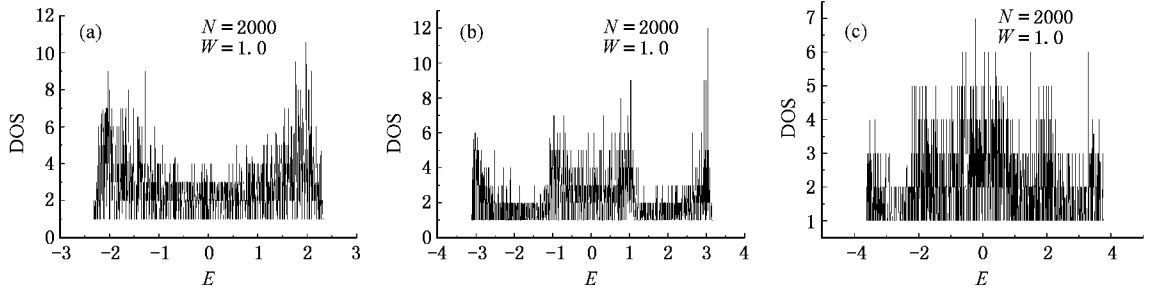


图 3 单链(a)、双链(b)和三链(c)系统的态密度

结果表明,从单链到四链,系统的能带有所展宽,对四链系统有明显的能隙出现. 能态密度分布发生很大的变化,反映奇点情况的峰值数量按 2, 4, 6, 8 规律增加. 分析可能的原因如下,上述几种情况格点总数相等,随着链数的增多,处于最近邻位置关系的格点数量增加,哈密顿量(1)中与交叠积分对应的第二项数值增大,系统的能量本征值范围自然随之增大. 同时,由于链数的增加,电子跳跃的通道增多,一维条件下的单通道问题就转化为多通道问题,由兰多尔公式可知,系统的能级将产生横向的分裂,能级结构不再是单能带,图 2 中出现的态密度间隙应该对应于能带之间存在的能隙.

4. 局域长度及电导

将系统的波函数表示成格点轨道波函数基的线性组合

$$\psi = \sum_n a_n |n\rangle, \quad (4)$$

则约化哈密顿量(3)所对应的薛定谔方程可写成

$$E a_n = \zeta_n a_n + t_{n,n+1} a_{n+1} + t_{n,n-1} a_{n-1}. \quad (5)$$

利用传输矩阵,可得到如下的迭代公式:

$$\begin{bmatrix} a_{n+1} \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E - \zeta_n)/t_{n,n+1} & -t_{n,n-1}/t_{n,n+1} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_n \\ a_{n-1} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

采用文献 [17] 中的表达式来定义局域长度 L :

$$\frac{1}{L} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left| \frac{a_N}{a_0} \right|. \quad (7)$$

图 4 给出了准一维四链系统中局域长度对能量的依赖关系. 在本文的格点编号方案中,每 8 个格点可视为最小的重复单元,计算时,考虑周期性边界条件,认为格点 i 周围的环境与格点 $i+8$ 等同,因此在对局域长度的数值计算时我们补充定义了 $t_{1,0}$

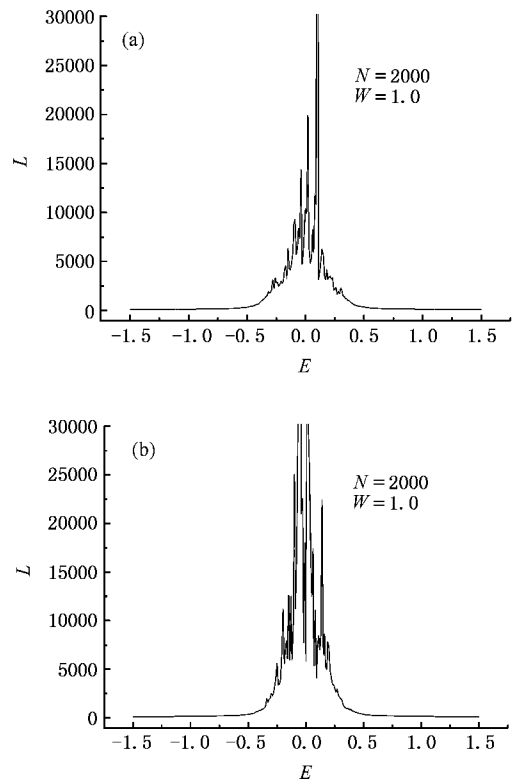


图 4 准一维四链系统的局域长度(L)随能量的变化 (a)(b) 分别对应于不同的格点能量分布

$= t_{9,8}, t_{N,N+1} = t_{N-8,N-7}$. 由于能带边缘区域局域长度很小,图中只画出了能带中心部分所对应的局域长度. 虽然对不同的格点能量分布,系统的局域长度有所区别,但具有明显的共同特性,在中心一个比较窄的能量区间内,约为 $[-0.35, 0.35]$,存在着局域长度大于系统尺寸的态 ($L > 2000$),根据有些理论我们可以称之为扩展态. 这些扩展态只能存在于有限大小的系统中,当系统的大小增加时,局域长度不会随之增大,而导致在一定大小尺寸下存在的扩展态在连续极限之下最终会变成局域态,通过标度

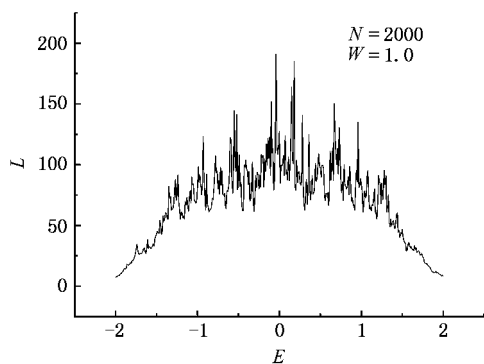


图5 单链系统局域长度与能量的关系

分析可得出这样的结论,我们将在今后来讨论这个问题.作为对照,图5给出了一维单链时的局域长度,可以看出,一维单链系统中所有能量范围之下局域长度均小于系统的大小,也就是说没有扩展态的存在.分析出现这种差异可能的原因是,准一维四链系统中,存在跳跃积分的格点数量有显著增加,扩大了格点间短程关联的作用范围,相当于在系统中掺入了非对角长程关联的成分,根据最近有些文献^[15]的结论,在考虑非对角长程关联下,一维、二维无序系统中可以出现扩展态,这和本文的结论是符合的.另外,由哈密顿量的三角化过程可知,多链的引入改变了哈密顿量的非对角元,也会导致系统局域性质的改变.

由于准一维四链无序系统可以化为一个等效的一维单链系统,可以利用一维兰多尔公式^[24],定义系统的电导为

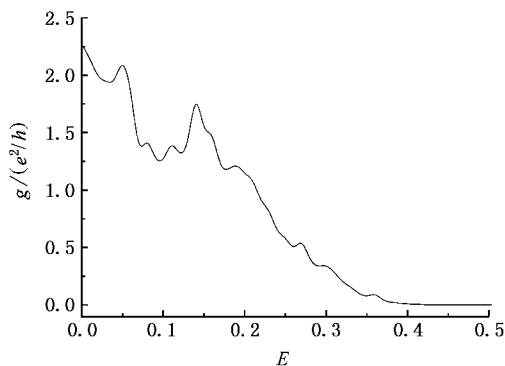
$$g(E) = \left[\exp\left(\frac{2N}{L}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (8)$$

其中 g 为无量纲电导, N 为系统的大小, L 为系统的局域长度.

图6给出了电导随能量变化的数值计算结果,可以看出,总体上,电导随系统能量的增大而减少.在能带的中心部分 $E < 0.35$, 系统具有较大的电导,对应于系统中存在的扩展态.当 $E > 0.35$ 时,系统的电导趋近于零,因为在此能量范围中,系统的电子态都是局域化的.由于我们只是对有限种格点能量的分布进行了平均,电导呈现出一定的振荡行为,致使电导的曲线存在有非单调性.

5. 准一维五平行链及准二维无序系统

利用上述方法,对准一维五平行链无序系统进

图6 准一维四链无序系统的电导(g)

行了数值计算,得出其态密度分布及局域长度随系统能量的变化关系分别如图7和图8所示.

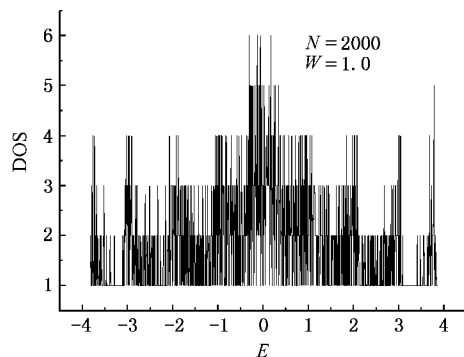


图7 五链无序系统态密度随能量的变化关系

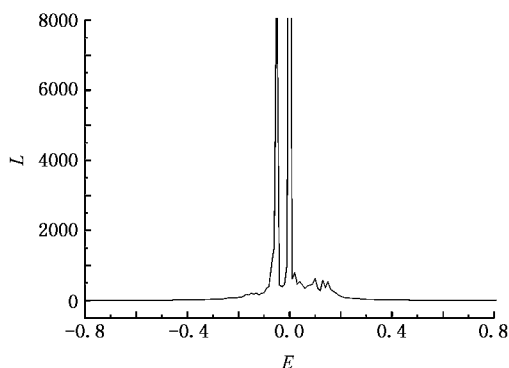


图8 五链无序系统局域长度随能量的变化关系

相比于准一维四链无序系统,五链时能量分布进一步展宽,带隙更为明显,态密度的峰值数量也遵循偶数规律增加为10个.从局域长度的图示中可以看出,在能带中心的某些区域存在有局域长度大于系统大小的态,意味着有限尺寸的五链无序系统中扩展态的存在,支持了前文由四链无序系统得出

的结论. 存在扩展态的能量范围进一步缩小,只存在于能带中心一个更小的区域中,我们正在寻求其合理的理论解释.

我们的算法对任意多链系统都是实用的,仅考虑格点之间的最近邻跳跃积分,形如 $N_l \times N_l$ 的准二维无序系统的哈密顿量都可以写成(2)式形式,做豪斯荷尔德变换总能将其三对角化,相应的系统可看成一个等效的单链无序系统,再利用已有的单链无序系统的处理方法来研究系统的电子结构特性.因此这一方法为解决 $N_l \times N_l$ 型的准二维无序系统的电子结构提供了一种有效途径.我们这里主要在于阐明这种原理,因此计算的格点数并不太大,但从理论上讲,含有 2000 个格点的无序系统即能展现其无序特性.

6. 结 论

1. 对 $N_l \times N_l$ 型准二维无序系统,借助豪斯荷尔德变换可将多链系统化为一个等效的一维单链系统,并进而实现对系统电子结构的数值计算.

2. 多链系统的能级结构随链数而变化,存在按偶数规律变化的态密度峰值数,并伴随有能隙的出现,考虑为能级结构由单带向多带转化的结果.

3. 有限长度的多链系统中,在能带的中心区域有扩展态的存在,相应的系统具有较大的电导,分析原因为多链的引入改变了其等效单链系统的跳跃积分项,且格点的关联范围可理解为由短程向长程扩展,故系统出现类似非对角长程关联的行为.

- [1] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [2] Shen H X, Cai N L, Wen Y H *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5362 (in Chinese) [沈汉鑫、蔡娜丽、文玉华等 2005 物理学报 **54** 5362]
- [3] Xu H, Zeng H T 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 1666 (in Chinese) [徐 慧、曾红涛 1992 物理学报 **41** 1666]
- [4] Xu H, Song Y P 2002 *Chin Phys.* **11** 1294
- [5] Xu H, Song Y P, Li X M 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 143 (in Chinese) [徐 慧、宋 璞、李新梅 2002 物理学报 **51** 143]
- [6] Wang G C, Yuan J M 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 970 (in Chinese) [王贵春、袁建民 2003 物理学报 **52** 970]
- [7] Zsolt G 2004 *Phys. Rev. B* **69** 054204
- [8] Cerovski V Z, Mahanti S D, Kaplan T A 1999 *Phys. Rev. B* **59** 13977
- [9] Fogler M M, Teber S, Shkloshi B I 2004 *Phys. Rev. B* **69** 035413
- [10] Rodriguez A, Malyshev V A, Sierra G *et al* 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 027404
- [11] Song Z Q, Xu H, Li Y F, Liu X L 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2198 (in Chinese) [宋招权、徐 慧、李燕峰、刘小良 2005 物理学报 **54** 2198]
- [12] Song Z Q, Xu H, Liu X L, Ma S S 2005 *Chin. J. Comp. Phys.* **22** 51 (in Chinese) [宋招权、徐 慧、刘小良、马松山 2005 计算物理 **22** 51]
- [13] Xu H 1997 *Chin. J. Comp. Phys.* **14** 574 (in Chinese) [徐 慧 1997 计算物理 **14** 574]
- [14] Dean P 1972 *Rev. Mod. Phys.* **44** 127
- [15] Xiong S J, Zhang G P 2003 *Phys. Rev. B* **68** 17420
- [16] Kramer B, MacKinnon A 1993 *Rep. Prog. Phys.* **56** 1469
- [17] Carpena P, Bemaola-Galvan P, Ch Ivanov P *et al* 2002 *Nature* **418** 955
- [18] Wang L M, Luo Y, Ma B K *et al* 2002 *Chin Phys.* **11** 812
- [19] Xiao X B, Zhou G H, Yang M *et al* 2004 *Chin Phys.* **13** 1531
- [20] Shima H, Nomura T, Nakayama T 2004 *Phys. Rev. B* **70** 075116
- [21] Moura F A B F, Lyra M L 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3735
- [22] Usatenko O V, Yampolshii V A 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 110601
- [23] Day R, Martino F 1981 *J. Phys. C :Solid State Phys.* **29** 4247
- [24] Landauer R 1970 *Phil. Mag.* **21** 863
- [25] Ma S S, Xu H, Liu X L *et al* 2006 *Chin. Phys.* **15** 190

The electronic structure of quasi-two-dimensional disordered systems *

Liu Xiao-Liang[†] Xu Hui Ma Song-Shan Song Zhao-Quan Deng Chao-Sheng

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

(Received 25 September 2005 ; revised manuscript received 9 November 2005)

Abstract

For the quasi-two-dimensional disordered systems of the form of $N_l \times N_l$, only considering the nearest-neighbor hopping integrals and using a special method to code the sites, we write the Hamiltonians of the systems as precisely symmetric matrixes, which can be transformed into three diagonally symmetric matrixes by the Householder transformation. The densities of states, the localization lengths and the conductance of the systems are calculated numerically using the negative eigenvalue theory and the transfer matrix method. We study mainly the quasi-two-dimensional disordered systems with four and five parallel chains. By comparing the results with that of the disordered systems with one chain, two chains and three chains, we find that the energy band of the system extends slightly and the distribution of the density of states changes obviously with the increase of the effective dimensionality. Especially, for the systems with four or five chains, at the energy band center, there exist extended states whose localization lengths are larger than the size of the systems, accordingly, they have greater conductance. With the increasing of the number of the chains, the correlated ranges expand and the systems present the behaviour similar to that with off-diagonal long-range correlation.

Keywords : quasi-two-dimensional disordered system, density of states, localization length, conductance

PACC : 7320D, 7150, 0200

* Project supported by the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20020533001), the Hunan Provincial Natural Science Foundation of China (Grant No. 05JJ40135) and the Arts and Science Fund of the Central South University (Grant No. 0601052).

[†] E-mail : xlliucsu@sina.com