

一维无序二元固体中电子局域性质的研究^{*}

刘小良[†] 徐 慧 马松山 宋招权

(中南大学物理科学与技术学院,长沙 410083)

(2005 年 5 月 17 日收到,2005 年 11 月 16 日收到修改稿)

从单电子紧束缚模型的哈密顿量出发,格点能量随机取 ϵ_A 和 ϵ_B ,只计及格点之间的近程跳跃积分,建立了一维无序二元固体模型.利用负本征值理论及无限阶微扰理论,对系统电子的本征值和本征态进行了数值计算.结果表明与一定能量本征值对应的电子波函数只分布在系统的一定范围内,显示了其局域性.借助传输矩阵方法,计算出电子的局域长度,讨论了局域长度随本征能量和无序度的变化关系,并研究了计入不同范围跳跃积分下,局域长度的变化特征.

关键词:无序,二元固体,电子态,局域长度

PACC: 7150

1. 引 言

完全有序的晶体中电子的波函数是布洛赫函数,即在整个晶体中电子态是扩展的.当系统的有序结构被破坏时,系统的电子态会变成局域化的. Anderson^[1]在其开创性论文《某些无规格中扩散的缺失》中论证了由于无序导致电子的局域化的观点,他后来被称为米泽^[2]准粒子模型哈密顿量出发,只考虑了短程跳跃中的最近邻跳跃,构造了著名的安德逊模型.安德逊^[3]、莫特^[4]以及许多后来者深入地研究了无序系统中电子波函数局域化条件、标度理论^[5-6]、局域态与扩展态的转化^[7-10]以及电子输运特性^[11-16].而局域长度作为系统中电子定域化程度的定量描述,是反映系统的导电性能的重要参数,也是衡量系统的局域相和绝缘相转变的关键指标,对局域长度随系统的本征能量、无序度及系统大小变化关系的研究是目前许多作者所关注的内容.

一维随机二元固体是显示安德逊局域的最简单的模型,系统只有两种能量值被随机分配给各个格点,将处理无序系统的一般方法,如负本征值理论^[17-19]、无限阶微扰理论^[20]以及传输矩阵方法^[21-22],应用于这种系统,可以实现对系统中电子的本征能量、本征矢量和局域长度的数值计算,并得出

一系列有意义的结论.鉴于 DNA 可以被描绘成无序二元固体模型,已经有人尝试把这一方法用于 DNA 导电性的研究方面^[23,24],对于阐明具有不同结构的 DNA 片段的电子输运和生物功能是很重要的.

最近,已经有作者在进一步讨论考虑长程跳跃^[10,21,23]下无序系统的特征.本文适度扩大计入的格点关联范围,将存在跳跃积分的格点范围由最近邻扩展到次次近邻.

2. 一维无序二元固体模型的建立

考虑一维随机二元固体模型^[7],其中两种原子 A 和 B 分别具有对角能量 ϵ_A 和 ϵ_B ,并且这两种能量以概率 P 和 $1-P$ 随机分配给各个格点.

在原子轨道波函数基 $\{|i\rangle\}$ 之下,考虑周期性边界条件的一维无序系统,其单电子紧束缚模型的哈密顿量^[2]可表示为

$$H = \sum_{i=1}^N \epsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i=1}^N \sum_{j=-l, j \neq 0}^l t_{i,i+j} |i\rangle \langle i+j|, \quad (1)$$

其中 N 为系统的格点总数,即系统的链长; ϵ_i 为格点能量,以概率 P 和 $1-P$ 随机取 ϵ_A 和 ϵ_B ,显然, $|\epsilon_A - \epsilon_B|$ 代表格点能量的变化范围,即代表了系统的对角无序度 W ; $t_{i,i+j}$ 为两个中心分别处在格点 i

^{*} 高等学校博士学科点专项科研基金(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: xlliu@csu@sina.com

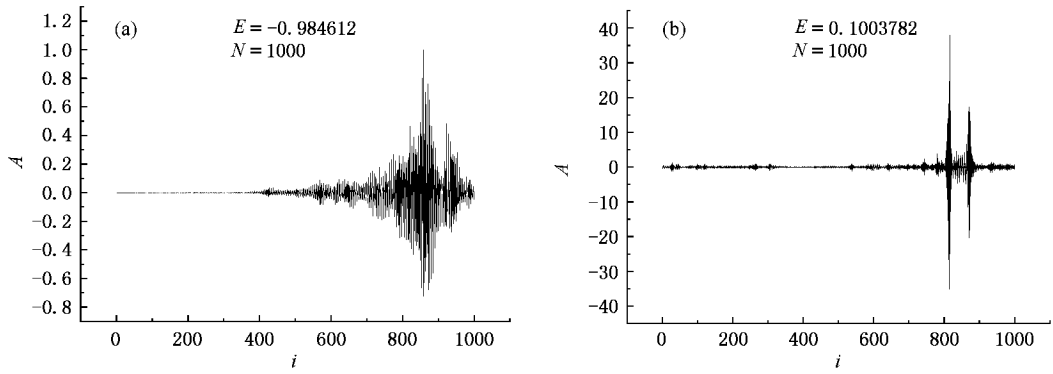


图 1 (a)(b)分别是本征能量为 -0.984612 和 0.1003782 时的波函数图像。横坐标为格点指标,纵坐标为振幅,其中取链长 $N = 1000$, $p = 0.5$ 。

4. 电子本征态的局域长度

借助传输矩阵方法^[7,25],结合(3)式,可将薛定谔方程(4)写成如下的形式:

$$Ea_i = \varepsilon_i a_i + \sum_{j=-1, j \neq 0}^l t_{i,i+j} a_{i+j}. \quad (6)$$

$$\begin{bmatrix} a_{i+2} \\ a_{i+1} \\ a_i \\ a_{i-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -t_1/t_2 & (E - \varepsilon_i)t_2 & -t_1/t_2 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{i+1} \\ a_i \\ a_{i-1} \\ a_{i-2} \end{bmatrix}, \quad (9)$$

$$\begin{bmatrix} a_{i+3} \\ a_{i+2} \\ a_{i+1} \\ a_i \\ a_{i-1} \\ a_{i-2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -t_2/t_3 & -t_1/t_3 & (E - \varepsilon_i)t_3 & -t_1/t_3 & -t_2/t_3 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{i+2} \\ a_{i+1} \\ a_i \\ a_{i-1} \\ a_{i-2} \\ a_{i-3} \end{bmatrix} = 0. \quad (10)$$

对于局域长度 L ,我们采用如下的定义:

$$\frac{1}{L} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left| \frac{a_N}{a_0} \right|, \quad (11)$$

其中 N 为系统的格点总数。

以上三式中分别取 $(a_0, a_1) = (\sqrt{2}/2, i\sqrt{2}/2)$, $(a_0, a_1, a_2, a_3) = (1/2, 1/2, 1/2, 1/2)$, $(a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) = (1/\sqrt{6}, 1/\sqrt{6}, 1/\sqrt{6}, 1/\sqrt{6}, 1/\sqrt{6}, 1/\sqrt{6})$. 对某一给定的能量 E 和一组给定的格点能量 $\{\varepsilon_i\}$,由(8)(9)和(10)式可得出 a_N ,再由(11)式便可得出电子波函数的局域长度.通过对 100 种随机格点能

同样也只考虑“对角无序系统”,并且,为标记的方便,做如下约定:

$$t_{i,i+k} = t_{i,i-k} \equiv t_k, \quad k = 1, 2, 3, \quad (7)$$

则对应于 $l = 1, 2, 3$ (6)式可分别写成如下的递推公式

$$\begin{bmatrix} a_{i+1} \\ a_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E - \varepsilon_i)t_1 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_i \\ a_{i-1} \end{bmatrix}, \quad (8)$$

量分布求平均,计算出了三种近邻时的局域长度,讨论了局域长度随系统本征能量(图 2, 3)及系统无序度(图 4)的变化关系。

图 2 中,我们取 $N = 1000$, $t_1 = -1$, $\varepsilon_A = 0.5$, $\varepsilon_B = -0.5$,即无序度 $W = |\varepsilon_A - \varepsilon_B| = 1$, A, B 原子的成分比例为 1:1.可以看出,系统的局域长度随本征能量而改变,在能带的中心部分,局域长度大,而在远离中心的部分,局域长度小,说明在能带的中心附近,电子波函数的局域化程度要弱,这一结论和莫特的关于迁移率边的理论是相一致的,在莫特的理论

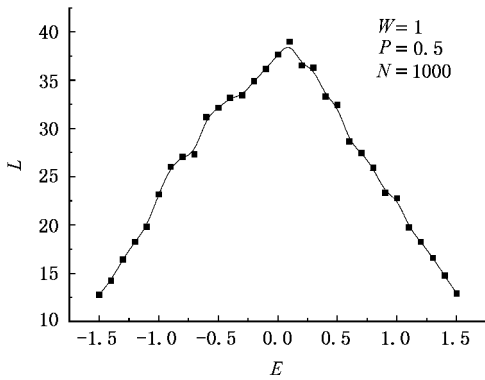


图 2 计及最近邻时局域长度与本征能量的变化关系

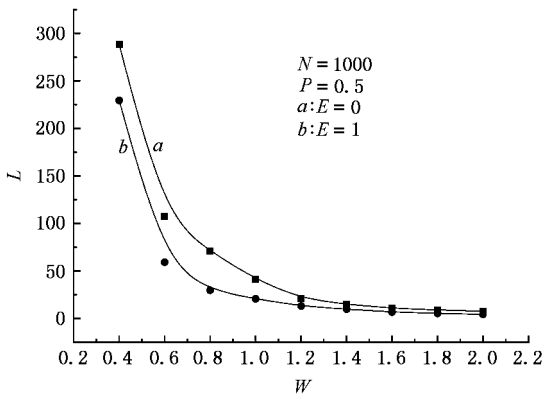
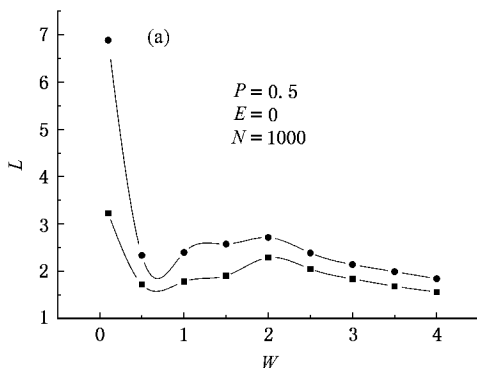


图 3 考虑最近邻时局域长度随无序度的变化关系

中,系统中的扩展态总是率先出现在能带的中心,而局域态则往往出现在带尾处.

图 3 中,线 a, b 分别对应于能量本征值 $E = 0$ 和 $E = 1$, 容易看出,局域长度随无序度的增加而减小,完全符合一般的电子输运理论,无序度的增加,使电子受到的散射作用加强,扩散受阻,局域化程度愈强.而当无序度趋向于零时,局域长度无限增大,



对应于有序条件下的扩展态.比较线 a 和线 b 还可以发现,本征能量越小,即能量越接近能带中心,局域长度越长,这也印证了前文的结论.

图 4 中(a)(b)分别对应于 A 原子的浓度 P 为 0.5 和 0.7,除了局域长度大小有所不同外,两种情况下的 $L-W$ 曲线几乎遵循相同的变化规律.

图中 a, b 分别是考虑次近邻和次次近邻时系统的局域长度,可以看出,考虑次次近邻时,电子的局域长度比只考虑次近邻时要大,因为电子跳跃的通道数增多,电子被局域化的程度效应降低.已有文献提出,若进一步考虑系统的长程跳跃,随着电子跳跃通道数的增加,系统的局域长度会等于或大于系统的格点数,在一维系统中也可以存在扩展态.

由图还可以看出,当系统的无序度约为 2 时,系统的局域长度出现一个峰值,即在区间 $[0.6, 2]$ 之间,局域长度随系统的无序度的增加反而增大.其出现的原因尚不十分清楚,分析可能的原因是,无序度的改变是通过调整两种原子的格点势 ϵ_A 和 ϵ_B 来实现的,对于特定本征能量的电子,不同的格点势分布必然会影响电子的散射能力,电子在系统中的输运性质以及局域性质也会相应发生改变,在这一区间中由于格点势和格点之间的交迭积分之间满足了某种特别的关系,而使电子的局域性质出现了反常行为.对这一问题的严密阐述,将在今后的工作中去进一步探讨.

5. 结论和讨论

若一维二元固体具有周期性,其波函数为布洛赫函数,可以扩展到整个原子链的范围.但当其结构呈无序分布时,其波函数将是局域的,与一定能量

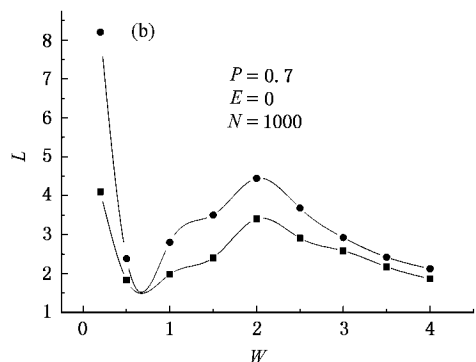


图 4 不同浓度下系统的局域长度随无序度的关系 (a) $P = 0.5$, (b) $P = 0.7$ ■次近邻, ●次次近邻

本征值相对应的波函数只能分布在原子链的特定范围内.

不同的能量本征值下,波函数的局域化程度不同.在能带的中心部分,局域长度大,即电子的局域化程度弱,而在带尾处,电子的局域化程度高.

随着系统的对角无序度的增大,局域长度总体呈减少的趋势.但在计及次近邻和次次近邻跳跃积分时,在无序度的某一区间内,局域长度出现反常特性.随无序度的增加反而增加.

考虑次次近邻跳跃比次近邻跳跃时的局域长度要大,可以理解为电子跳跃通道数的增加,弱化了电

子局域程度.由此可以推断出,若考虑格点之间的长程跳跃,当作用强度达到一定的程度,系统会出现退局域化现象.

最近,有作者提出长程非对角关联作用的概念^[6],在考虑格点之间的长程跳跃时,整条链中的格点之间均存在交迭积分,此时, $l = N$. 另外,对一个完全无序的系统而言,不仅存在格点的成分无序,同时还存在着格点的位置无序,这样必然会导致格点之间的跳跃积分具有一定的随机性,这样的系统取名为“完全无序系统”.我们将在以后的研究中来进一步讨论长程跳跃下的完全无序系统.

-
- [1] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [2] Yonezawa F 1982 *The structure and Properties of Matter* (Berlin : Springer Press) Chap 11
- [3] Anderson P W , Thouless D J , Abraham E *et al* 1980 *Phys. Rev. B* **22** 3519
- [4] Mott N F 1967 *Adv. Phys.* **16** 49
- [5] Abrahams E , Anderson P W , Licciardello D C *et al* 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 673
- [6] Xiong S J , Zhang G P 2003 *Phys. Rev. B* **68** 17420
- [7] Carpena P , Bernaola-Galvan P , Ch Ivanov P *et al* 2002 *Nature* **418** 955
- [8] Shima H , Nomura T , Nakayama T 2004 *Phys. Rev. B* **70** 075116
- [9] Francisco A B F de Moura , Marcelo L Lyra 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3735
- [10] Rodriguez A , Malyshev V A , Sierra G *et al* 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 027404
- [11] 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]
- [12] Xu H , Song Y P 2002 *Chin Phys.* **11** 1294
- [13] Xu H , Song Y P 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1798 (in Chinese) [徐 慧、宋 璞 2002 物理学报 **51** 1798]
- [14] Samukhin A N , Prigodin V N , Jastrabik L *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **58** 11354
- [15] Klaus Maschke , Michael Schreiber 1994 *Phys. Rev. B* **49** 2295
- [16] Fogler M M , Teber S , Shkloski B I 2004 *Phys. Rev. B* **69** 035413
- [17] Dean P , Martin J L 1960 *Proc. Roy. Soc. A* **259** 409
- [18] 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]
- [19] 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]
- [20] Wu S Y , Tung C C , Schwartz M 1974 *J. Math. Phys.* **15** 938
- [21] Usatenko O V , Yampolshii V A 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 110601
- [22] Karpov V G 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 226806
- [23] Hennig D , Archilla J F R , Agarwal J 2002 *Physica D* **128** 1
- [24] Yu Z G , Song X Y 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 6018
- [25] Kramer B , MacKinnon A 1993 *Rep. Prog. Phys.* **56** 1469

The localized properties of electronic states in one-dimensional disordered binary solid^{*}

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

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

(Received 17 May 2005 ; revised manuscript received 16 November 2005)

Abstract

Based on the tight-binding model of the single electron, the 1D model of disordered binary alloy is established, where two different diagonal energies ϵ_A and ϵ_B are assigned at random to each lattice site and only the short-range hopping integrals between the lattice sites are considered. Using the negative eigenvalue theory and the infinite order perturbation theory, we calculate numerically the eigenvalues and the eigenvectors of the electronic states. The results show that the electronic wavefunctions only exist in some narrow region of the system and the localization properties are expected. Using the transfer matrix method, we calculate the localization lengths and discuss how they change with the eigen-energies and the degree of disorder and discuss some characteristics of the localization length with different hopping integral ranges.

Keywords : disorder, binary solid, electronic state, localization length

PACC : 7150

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

[†] E-mail : xlliucs@ sina . com