

一维长程关联无序系统中的电子态^{*}

徐 慧 邓超生[†] 刘小良 马松山 伍晓赞

(中南大学物理科学与技术学院,长沙 410083)

(2006 年 6 月 1 日收到,2006 年 7 月 1 日收到修改稿)

利用傅里叶滤波法在一维 Anderson 无序系统中产生了具有幂律谱密度公式 $s(q) \propto q^{-p}$ 形式的长程关联随机能量序列,并利用传输矩阵方法计算了系统中引入了长程关联后的局域长度,同时应用负本征值理论对系统中的电子态密度进行了分析,并分别把计算结果与系统中不具有长程关联时的局域长度与电子态密度进行了比较.结果表明,长程幂律关联的引入对电子态的性质产生了很大的影响,当关联指数 $p \geq 2.0$ 时,在系统能带中心范围内发生了部分局域态向退局域态的转变,而同时电子态密度也发生了很大的变化,出现了六个范霍夫奇点,系统的能带范围也相应地得到展宽.

关键词:无序系统,长程关联,局域长度,电子态密度

PACC: 7320D, 7155J, 7130

1. 引 言

随着无序材料应用的日益广泛,无序材料内部的微观电子结构引起了许多研究者的广泛关注. Anderson^[1]指出,一维非关联无序系统中所有的电子态都是指数形式局域化的,并提出了用以描述无序系统中电子波函数哈密顿量的 Anderson 模型,后来的标度分析^[2]也指出,一维无序系统中任意大小的无序度都将导致电子的局域化,但是,这些理论都是建立在系统中不具有长程关联的基础之上的,当不考虑格点间能量的关联效应时,第 i 个格点处的能量 ϵ_i 与第 j 个格点处的能量 ϵ_j 之间不存在相互作用,也就是传统的 Anderson 模型中的关联函数为 $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle = \delta_{ij}$. 然而,随着人们对无序材料以及自然现象的更进一步研究,在许多无序领域如 DNA 序列^[3,4]、心脏跳动^[5]、气候变化^[6]、材料科学^[7]等中,发现它们的空间无序是互相关联的,也就是系统中格点的能量 ϵ_i 并不是独立的无规变量,而是存在有关联函数为 $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+l} \rangle = \alpha(l)$ 的长程关联,即第 i 个格点处的能量 ϵ_i 与第 $i+l$ 个格点处的能量 ϵ_{i+l} 通过函数 $\alpha(l)$ 相互决定.

考虑到这点之后,近些年来人们又对一维关联

无序模型的研究产生了极大的兴趣^[8,9],同时许多研究成果也在一定程度上存在着争议. 在一维 Anderson 无序系统中引入长程关联后,由于格点能量之间的相互关联,系统中的电子状态发生了很大的变化,许多研究者在这方面进行了卓有成效的研究,这些研究成果也极大地改变了人们对无序材料微观结构的认识. de Moura 等人^[10]利用重整化群的方法对系统的局域长度进行了计算,Shima 等人^[11]在此基础上进行了有限尺寸的标度分析,但是,他们都没有对系统中的电子态密度做重点分析,没有考虑到系统中引入长程关联后对电子态密度所产生的影响,同时 Carpena 等人^[12]考虑了一维二元固体模型,由于模型中仅存在两种类型的原子 A 和 B ,可认为它们的格点能量分别为取值概率为 p 的 ϵ_A 和取值概率为 $1-p$ 的 ϵ_B ,对于这种情况,Carpena 等人研究了一维二元固体中长程关联对系统局域性质的影响.但是,对于一维无序系统中格点能量取值 ϵ_i 都随机而又相互关联的情况,Carpena 等人还没有考虑到.

本文在以上研究成果的基础上,对一维对角长程关联无序系统中的电子态进行了研究.我们首先在一维 Anderson 无序系统中引入了具有幂律谱密度公式 $s(q) \propto q^{-p}$ 形式^[13]的长程关联,并给出了关联

^{*} 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: csudeng@126.com

指数对能量分布曲线粗糙程度的影响,然后利用传输矩阵方法^[14-16]计算了系统的局域长度,结果表明系统中某些能量范围内有局域长度超过系统尺寸的扩展态存在,应用负本征值理论^[17-19]对该系统中的电子态密度进行了计算和分析,本文的结果对以后进一步研究具有各种关联情况的 DNA 核苷酸序列的电子性质及电子传输打下了基础.

2. 模型与方法

一般对无序系统电子结构的研究,大都采用单电子紧束缚无序模型即 Anderson 模型^[1],此模型的哈密顿量可表示为

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

其中 $\{|i\rangle\}$ 是原子轨道波函数基, N 为一维无序系统中格点的数目, ϵ_i 表示电子在第 i 个格点上所具有的能量,在只考虑最近邻格点之间的相互作用时, t 为最近邻格点之间电子的跳跃积分,对于对角无序,则根据 Day 和 Martino^[20]提出的方案,跳跃积分 t 取为 -1 ,即以 $-t$ 为能量单位.

在对关联无序现象的研究过程中,人们发现,用以描述分形布朗运动轨迹的格点能量 ϵ_i 之间存在的关联函数 $\alpha(l)$ 具有幂律关联形式^[21],即 $\alpha(l) = \epsilon_i \epsilon_j \approx l^p$,同时,人们采用“DNA 行走”方法^[22]沿 DNA 分子链对核苷酸之间的相互关联进行了分析后,也发现在 DNA 的核苷酸序列中,核苷酸之间的关联也具有这种幂律关联形式,而以上的物理过程都可以用一维 Anderson 模型来实现,因此,基于以上考虑,本文在研究长程关联对一维 Anderson 模型中电子局域性质的影响时采用这种幂律形式的关联函数.

由以上格点能量之间的关联函数 $\alpha(l)$,并利用傅里叶滤波法^[23,24]可以产生长程关联能量序列 $\{\epsilon_i\}$,这种方法是建立在对一组随机数所进行的傅里叶变换的基础之上的,能量 $\{\epsilon_i\}$ 的产生大致可分为以下几个步骤:1)首先产生一个互不相关的具有高斯分布的一维随机数序列 $\{u_i\}$;2)利用快速傅里叶变换方法对此序列 $\{u_i\}$ 进行变换,得到其傅里叶变换系数 $\{u_q\}$;3)计算关联函数 $\alpha(l)$ 的傅里叶变换(即谱密度),可以得到关联函数 $\alpha(l)$ 的幂律谱密度公式 $s(q) \propto q^{-p}$,其中 p 为关联指数,对于一个给定的 p 值,联合关系式 $\epsilon_q = q^{-p/2} u_q$,可以得到一个

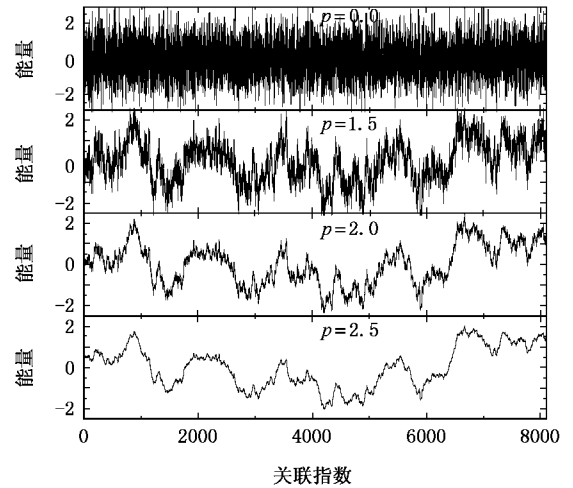


图 1 不同关联指数的长程关联能量随格点的分布情况

序列 $\{\epsilon_q\}$, q 为波矢 k 最后,能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 就可以对序列 $\{\epsilon_q\}$ 进行傅里叶逆变换而得到.在我们接下来的各部分中,设定能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 的平均值 $\epsilon_i = 0$,并且满足偏差 $\Delta\epsilon = \sqrt{\epsilon_n^2 - \epsilon_n^2} = 1$,同时加上周期性边界条件.

根据上述方法所产生的计算结果,在图 1 中表示了在不同的关联指数情况下,长程关联能量 $\{\epsilon_i\}$ 随格点的分布情况,可以很明显地看到,随着关联指数 p 的增加,能量分布曲线的粗糙程度急剧降低,变得越来越光滑,这证明产生的能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 确实存在有幂律谱密度公式形式 $s(q) \propto q^{-p}$ 的长程关联.

3. 局域长度

我们可以利用传输矩阵方法来计算系统的局域长度,并以此来探讨长程幂律关联对系统局域性质的影响.将系统的波函数表示成格点轨道波函数基的线性组合 $\psi = \sum_i \phi_i |i\rangle$,其中 ϕ_i 为波函数在第 i 个格点上的振幅.系统的哈密顿量 H 作用在 ψ 上则可以将(1)式表示成

$$E\phi_i = \epsilon_i \phi_i + t(\phi_{i+1} + \phi_{i-1}), \quad (2)$$

其中 E 是与电子波函数相对应的能量本征值, t 为跳跃积分,取为 -1 .将(2)式进行变换,得到如下的回归形式:

$$\begin{pmatrix} \phi_{i+1} \\ \phi_i \end{pmatrix} = M_i \begin{pmatrix} \phi_i \\ \phi_{i-1} \end{pmatrix}, M_i \equiv \begin{pmatrix} \frac{E - \epsilon_i}{t} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

由以上公式,我们定义在给定的能量 E 处系统的局域长度 $\lambda(E)$ 为

$$\frac{1}{\lambda(E)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left| \frac{\psi_N}{\psi_0} \right|, \quad (4)$$

其中 N 为系统的格点数,并选择 $\psi_0 = \psi_1 = \sqrt{2}/2$,通过改变系统的能量值 E ,结合方程(3)和(4)可以得到相应的局域长度值 $\lambda(E)$.

利用这种方法,我们计算了一维对角长程关联无序系统中局域长度随能量的变化关系,并且对不同的关联指数 p 下的局域长度 λ 进行了计算(图 2 (b)(c)(d)),同时我们也给出了不考虑长程关联时系统中的局域长度 λ 随能量 E 的变化关系(图 2 (a)).系统的格点数取为 $N = 2^{13}$ 个,能量范围 E 取在 $[-1.5, 1.5]$ 之间,也就是系统能带的中心区域.由于不存在长程关联时一维无序系统中的电子态都是局域的,则局域长度也必然小于系统尺寸,我们看到,在图 2(a)中体现出了系统的这种性质.而系统中引入关联后,电子态的局域长度普遍增大,而关联

指数较小时,格点能量之间的相互关联程度并不是很大,这时局域长度的改变并不是很明显(图 2 (b)),但是随着关联指数的增加,在能带中心的某些区域内,存在有局域长度大于系统尺寸的扩展态,也就是出现了关联诱导的金属—绝缘转变,这时的关联指数 2.0 为系统由局域态开始向退局域态转变的临界指数,当关联指数 $p \geq 2.0$ 时,这种退局域化的现象随着关联指数的增加而变得更加明显(图 2 (c)(d)).

从图上还可以看到,虽然长程幂律关联对一维无序系统中电子波函数的局域性质产生了很大的影响,使得系统中出现了部分扩展态,但对于格点数 N 很大的系统,利用傅里叶滤波法产生长程幂律关联的随机数时也会产生一小部分的截断,使得产生的关联随机数并不完全是相互关联的,为了克服这种微小误差,可以利用退趋势振动分析方法(DFA)来估计长程幂律关联随机数中的关联指数,这还有待进一步研究.

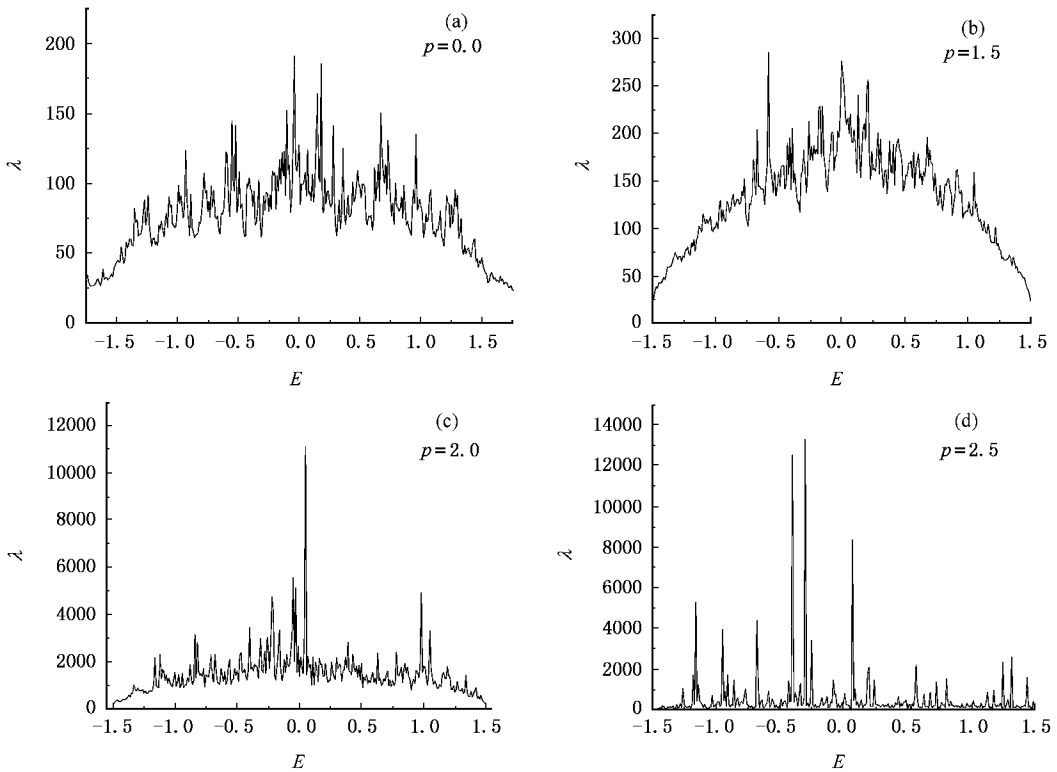


图 2 系统中局域长度 λ 随能量 E 的变化关系 (a)为一维无序系统中不考虑长程关联时的局域长度 λ (b)(c)(d)分别对应长程关联无序系统中关联指数不同的局域长度 λ

4. 电子态密度

对于一维单链无穷体系,系统的能态密度可定义为 $\rho(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_i \delta(E - E_i)$ 其中 N 是系统的格点数, $\rho(E) dE$ 表示在能量本征值间隔 $E \rightarrow E + dE$ 之间电子本征态的数目,而本征态的积分密度为小于某一本征值的所有本征态数目之和,即有 $N(E) = \int_{-\infty}^E \rho(E) dE$,由此可以看出,系统的态密度是能量本征值的函数,它的数值完全可以利用 Dean 的负本征值理论^[17-19]得到.

对格点数为 $N = 2^{13}$ 的一维关联无序系统,利用负本征值理论我们计算了当关联指数分别为 $p = 1.5$, $p = 2.0$, $p = 2.5$ 时系统的电子态密度,同时也给出了当不考虑系统的对角关联时系统的电子态密度,如图 2 所示.

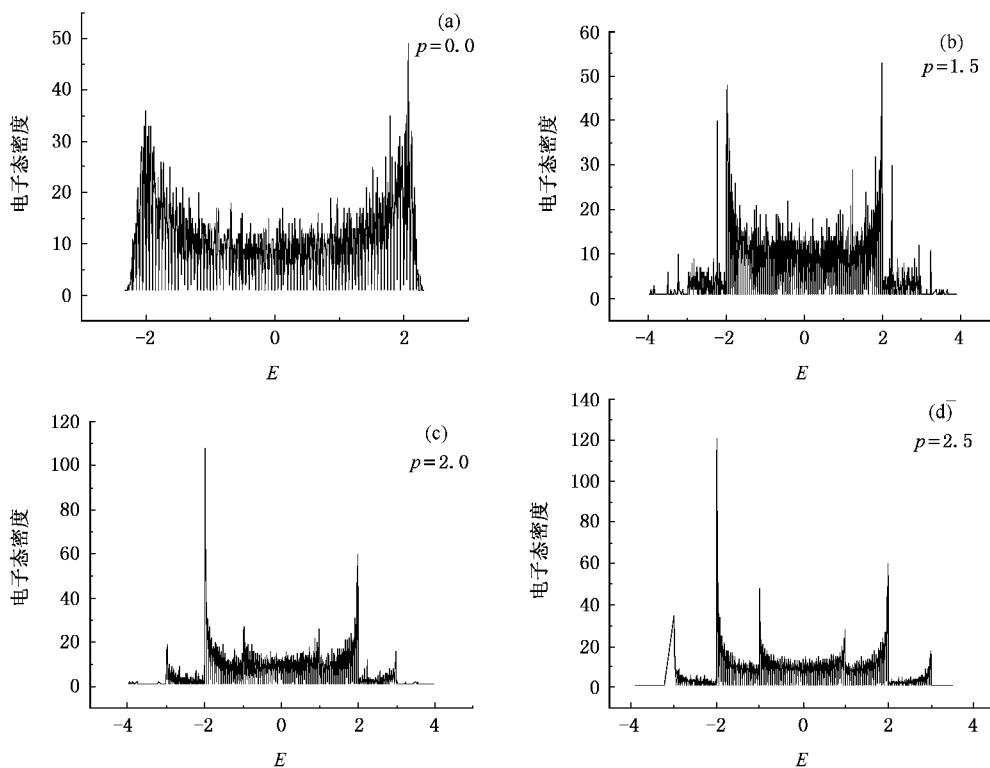


图 3 关联指数不同时的电子态密度(DOS) (a)为系统中没有引入长程关联时的电子态密度 (b)(c)(d)分别对应关联指数 $p = 1.5$ 2.0 2.5 时的电子态密度

另外,当关联指数较小($p = 1.5$)时,除了能带范围展宽之外,系统的电子态密度与不考虑关联时的态密度没有很大的变化(图 3(b)),这是与前面在计算局域长度时得到的结论一致的.而当 p 增加到

从图 3 中可以看到,关联的引入对系统的电子态密度分布产生了很大的影响,而随着关联指数的增大这种变化更加明显.对于同一个一维无序系统,考虑了能量之间的长程关联(图 3(b)(c)(d))后,系统的能带范围大约为 $(-4, 4)$,这相对于不考虑关联(图 3(a))时的能量范围 $(-2, 2)$ 来说显著增加了,这是由于系统中电子态的局域长度普遍增加后,电子的运动范围也相应地扩大,从而系统中会有部分电子由能带的中心区域向两端运动,也就导致了在更大的能量范围内发现有电子态的存在,同时系统中不同格点上的电子波函数随着局域长度的增加而发生相互重叠,所以在能带的带顶和带底也就分别形成了带尾结构,使得能带范围展宽.正是由于一维长程关联无序系统中电子能带的展宽,电子的跳跃也相对来说变得更加容易,这种性质也将为以后对一维长程关联无序系统中电子的传输以及电导的计算提供理论依据.

2.0(图 3(c))或更大($p = 2.5$)时,态密度的分布发生了很大变化,由原来的仅在能量范围两端出现态密度峰值变为总共有 6 个态密度峰值,而当 p 值增加时这种现象更加明显,并且在峰值处电子的态密度

数也相应增多.这是因为随着系统中部分扩展态的出现,电子态密度随能量的分布也就发生了变化,态密度 $N(E)$ 在能量 $E(k)$ 对波矢 k 的梯度 $\nabla E(k)$ 为零的地方出现了奇异性,此时的能量值我们称之为范霍夫奇点,图中我们看到,在能量值分别为 -3 , -1 , 1 , 3 的地方,出现了这种奇点(图 3(c)(d)).一维单链无序系统中引入长程关联后电子态密度出现的这种变化与宋招权^[25]、刘小良^[26]等人所研究的多链系统中电子态密度的分布具有很大的一致性,这说明一维无序系统中存在长程关联时的性质与多链系统中的性质有很多相似的地方.

5. 结 论

通过以上的分析与计算结果,我们发现长程关

联改变了一维无序系统中的局域性质,在能带中心范围内电子态的局域长度随着关联指数 p 的增大而发生很大的变化,特别是当 $p \geq 2.0$ 时,系统中的某些能量范围内的局域长度大于系统尺寸,表明此时有扩展态的存在,即关联的引入使得一维 Anderson 无序系统中发生了部分局域态向退局域态的转变.

一维无序系统中长程关联的引入也相应地影响着系统中电子态密度的分布,系统的能带有了很大的展宽,另外,系统中不存在长程关联时,仅在能带的带顶和带底存在有两个态密度峰值,而此时态密度的峰值增加为六个,也就是出现范霍夫奇点的数目显著增加,并且当关联指数 $p \geq 2.0$ 时,这种变化随关联指数的增大而越来越明显.

- [1] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [2] Abrahams E, Anderson P W, Licciardello D C, Ramakrishnan T V 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 673
- [3] Peng C K, Buldyrev S V, Havlin S, Simons M, Stanley H E, Goldberger A L 1994 *Phys. Rev. E* **49** 1685
- [4] Buldyrev S V, Dokholyan N V, Goldberger A L, Havlin S, Peng C K, Stanley H E, Viswanathan G M 1998 *Physica A* **249** 430
- [5] Ashkenazy Y, Ivanov P C, Havlin S, Peng C K, Goldberger A L, Stanley H E 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1900
- [6] Ausloos M, Ivanova K 2001 *Phys. Rev. E* **63** 047201
- [7] Kantelhardt J W, Berkovits R, Havlin S, Bunde A 1999 *Physica A* **266** 461
- [8] Jonathan M C, MacKinnon A 2005 *Phys. Rev. B* **72** 024208
- [9] Sedrakyan T, Ossipov A 2004 *Phys. Rev. B* **70** 214206
- [10] de Moura F, Lyra M L 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3735
- [11] Shima H, Nomura T, Nakayama T 2004 *Phys. Rev. B* **70** 075116
- [12] Carpena P, Bemaola-Galvan P, Ivanov P C, Stanley H E 2002 *Nature* **418** 955
- [13] Reif R 1965 *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics* (New York : McGraw-Hill)
- [14] Xiong S J, Zhang G P 2003 *Phys. Rev. B* **68** 17420
- [15] Kramer B, MacKinnon A 1993 *Rep. Prog. Phys.* **56** 1469
- [16] Sedrakyan T 2004 *Phys. Rev. B* **69** 085109
- [17] Dean P 1972 *Rev. Mod. Phys.* **44** 127
- [18] Wu S Y, Zheng Z B 1981 *Progress in Physics* **1** 125(in Chinese) [吴式玉、郑兆勃 1981 物理学进展 **1** 125]
- [19] Dean P, Martin J L 1960 *Proc. Roy. Soc. A* **259** 409
- [20] Day R, Martino F 1981 *J. Phys. C :Solid State Phys.* **29** 4247
- [21] Feder J 1988 *Fractals* (New York : Plenum Press)
- [22] Peng C K, Buldyrev S V, Goldberger A L, Havlin S, Sciortino F, Simons M, Stanley H E 1992 *Nature* **356** 168
- [23] Makse H A, Havlin S, Schwartz M, Stanley H E 1996 *Phys. Rev. E* **53** 5445
- [24] Prakash S, Havlin S, Schwartz M, Stanley H E 1992 *Phys. Rev. A* **46** R1724
- [25] 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]
- [26] Liu X L, Xu H, Ma S S, Song Z Q, Deng C S 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2492(in Chinese) [刘小良、徐 慧、马松山、宋招权、邓超生 2006 物理学报 **55** 2492]

The electronic states in one-dimensional disordered system with long-range correlations^{*}

Xu Hui Deng Chao-Sheng[†] Liu Xiao-Liang Ma Song-Shan Wu Xiao-Zan
(*School of Physics Science and Technology, Central South University, Changsha 410083, China*)
(Received 1 June 2006 ; revised manuscript received 1 July 2006)

Abstract

We generated the long-range correlated random energy sequences with the power-law spectral density $s(q) \propto q^{-p}$ in the one-dimensional Anderson disordered chain, and then investigated the localization length by using the transfer matrix method. The density of electronic states were also analyzed with the help of the negative eigenvalue theory. Then we made a comparison between the results and that of the system which does not have long-range correlations. Our results show that after introducing the long-range correlations in the one-dimensional Anderson disordered chain, the properties of electronic states change greatly, and when the correlation exponent $p \geq 2.0$, there exists a localization-delocalization transition at the energy band center. Accordingly, the density of electronic states changes obviously and presents six van Hove singularities, and moreover, the energy band of the system also extends slightly, accompanying the above changes.

Keywords : disordered system, long-range correlations, localization length, density of electronic states

PACC : 7320D, 7155J, 7130

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 05JJ04135) and the Arts and Science Fund of the Central South University (Grant No. 0601052).

[†] E-mail : esudeng@126.com