

一维二元非对角关联无序体系 交流跳跃电导特性^{*}

马松山[†] 徐 慧 李燕峰 张鹏华

(中南大学物理科学与技术学院,长沙 410083)

(2006 年 11 月 13 日收到 2007 年 3 月 9 日收到修改稿)

在单电子紧束缚无序模型基础上,建立了一维二元非对角关联无序体系电子跳跃运输交流电导模型,并推导了其交流电导公式,通过计算其交流电导率,探讨了格点能量无序度、格点原子组分、非对角关联及温度、外场对体系交流跳跃电导的影响.计算结果表明,一维二元非对角关联无序体系的交流电导率随格点能量无序度的增大而减小.同时,体系中两种原子的组分的变化实际代表着体系成分无序程度的变化,因而对其交流电导率的影响很大.表现为随 A 类原子含量 p 的增加而先减小后增大.当引入非对角关联时,体系出现退局域化现象,电子波函数由局域态向扩展态发展,从而使体系的交流电导率大于 Anderson 模型情况下体系的电导率.此外,温度对一维二元非对角关联无序体系的电子运输的影响表现为体系的交流电导率随温度的升高而减小,而外加交变电场对体系交流电导率的影响表现为随外场频率的升高而增大很快.

关键词:二元无序体系,交流跳跃电导,格点能量无序度,非对角关联

PACC: 7210, 7215C, 7155J

1. 引 言

近年来,随着生物物理学的发展,对 DNA 分子中电子结构、运输特性的研究已成为国内外普遍关注的一个重要课题^[1-6].而 DNA 分子链由 4 种核苷酸,即鸟嘌呤(G)、腺嘌呤(A)、胞嘧啶(C)和胸腺嘧啶(T)为基本单元按一定的序列构成双螺旋链状结构,其中 A-T, C-G 相互成对构成碱基对,因此, DNA 双螺旋结构链可以认为是由两种基本碱基对所构成的一维二元无序体系^[7-12],其中每个碱基对可视为一个格点.因而研究一维二元无序体系的电子运输特性对探讨 DNA 分子中电学性能,揭示生命体的某些生物规律,无疑是非常有意义的.

对于完全有序的晶体其电子波函数在整个晶体中是扩展的,但当体系的有序结构被破坏时,体系由有序体系转变为无序体系,其电子波函数呈现出局域化特性^[13],因而其电子运输特性完全不同于有序的晶态材料电子运输特性.对于无序体系的电子运输最早由 Mott 等^[14,15]提出了电子跳跃运输机理,并

成功解释了冷却到液氮温度下的补偿性晶态半导体的直流电导行为.随后, Miller 和 Abrahams^[16]运用随机电阻网络模型(resistance network analogy)研究了低杂质浓度体系中电子迁移率. Aldea 等^[17]和 Newman 等^[18]在此基础上考虑单电子、近邻相互作用,分别用傅里叶晶格变换和重正化群的方法发展了该理论.最近, Fogler 等研究了一维无序体系电子变程跳跃运输的非欧姆特性^[19], Ma 等人研究了一维对角无序体系的直流电导规律^[20], Rosenow 等结合重整化群理论探讨了一维电子体系的非线性交流电子运输^[21].然而目前对于无序体系的研究大都注重于其电子结构特性的研究,如 Davids 用传输矩阵方法研究了随机二元合金的 Lyapunov 指数特性^[22], 刘小良等探讨了一维二元无序固体的电子局域性质^[23], Liu 等研究了电场作用下具有库仑相互作用的电子波函数的局域化特性^[24],得到了很有意义的结论,但对于其电子运输特性的研究,特别是格点能量无序及非对角关联对其电子运输的影响研究并不多见.

我们曾从一维二元非对角关联无序模型出发,在单电子紧束缚近似下,忽略电子间的相互作用,且

^{*} 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)资助的课题.

[†] E-mail: masongshan1126@yahoo.com.cn

只考虑近邻格点相互作用,通过数值计算探讨了其直流电子输运特性^[25],本文将进一步研究一维二元非对角关联无序体系的交流电子输运特性,通过计算探讨了包含 2×10^3 个格点的一维二元非对角关联无序体系中格点能量无序、原子的组分、非对角关联、温度及外场频率对其交流电导的影响。

2. 模型与方法

一维无序二元体系是由两种原子 A 和 B 随机排列所构成,为了研究其电子输运特性,我们构建了一维无序二元体系模型,其中原子 A 具有格点能量 ϵ_A , 原子 B 具有格点能量 ϵ_B . 在单电子紧束缚近似下,其哈密顿量可表示为^[8,9]

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

其中 ϵ_i 为第 i 格点的位能,且 ϵ_i 分别以 p 和 $1-p$ 的概率取 ϵ_A, ϵ_B , 因而 p 表示体系中原子 A 的含量,从而可描述体系中两种原子的组分, N 为体系所含格点的数量,当 N 确定时体系的长度 L 即可确定,即 $L = Na$, 其中 a 为最近邻格点之间的距离,在本文中我们把 a 取为单位长度,其数量级取为 10^{-10} m. 显然, $|\epsilon_A - \epsilon_B|$ 代表格点能量的变化范围,即体系的格点能量无序度 W , 在本文中我们取 $\epsilon_A = \frac{W}{2}$,

$\epsilon_B = -\frac{W}{2}$. t_{ij} 描述电子在 i 与 j 格点之间转移的跃迁矩阵元,不同的 t_{ij} 取值方式,对体系电子结构也会产生不同的影响. 在文献[9]中,考虑了两种不同关联方式对体系电子态的退局域化效应的影响,其中第一种关联方式为

$$t_{ij} = \begin{cases} t_{AA} = 1.0 \ \epsilon_i = \epsilon_j = \epsilon_A, \\ t_{BB} = 1.73 \ \epsilon_i = \epsilon_j = \epsilon_B, \\ t_{AB} = \frac{t_{AA} + t_{BB}}{2} = 1.36 \ \epsilon_i \neq \epsilon_j, \end{cases} \quad \text{其中 } |i - j| = 1. \quad (2)$$

第二种关联方式为

$$t_{ij} = \begin{cases} t_{AA} = 1.0 \ \epsilon_i = \epsilon_j = \epsilon_A, \\ t_{BB} = 1.73 \ \epsilon_i = \epsilon_j = \epsilon_B, \\ t_{AB} = t_C = \sqrt{t_{AA} t_{BB}} = 1.316 \ \epsilon_i \neq \epsilon_j, \end{cases} \quad \text{其中 } |i - j| = 1. \quad (3)$$

在本文中我们称第一种关联方式为典型关联,而第二种关联方式为黄金关联,显然,在两种关联方式下

的一维二元非对角关联无序体系模型都是 Anderson 无序模型的简单推广,因为在 Anderson 无序模型^[13]中非对角项被视为与格点原子无关的量,即 $t_{AA} = t_{BB} = t_{AB} = 1$ 而忽略非对角无序关联的影响。

若 E_i 为哈密顿量的能量本征值, $|\varphi\rangle = \sum_i \phi_i |i\rangle$ 为与能量本征值 E_i 相对应的本征态,其中 $|\phi_i|^2$ 代表在二元无序体系中格点 i 处发现电子的概率,则薛定谔方程可表示为

$$E_i \phi_i = t_{i-1,i} \phi_{i-1} + \epsilon_i \phi_i + t_{i,i+1} \phi_{i+1}. \quad (4)$$

利用负本征值理论^[26]和无限阶微扰理论^[27],可以求解其的本征方程. 由于无序导致电子波函数呈现局域化特性,局域态的位置、局域长度亦可确定^[23,28]. 虽然由于非对角关联的引入使体系的电子波函数呈现出退局域化特性^[9],但是由于扩展态通常只出现在中间能区的一个很小的范围内,有时甚至根本没有出现扩展态而只是电子波函数的局域长度增大了,电子波函数向扩展态的方向发展,所以在整个能区范围内,可以认为体系的电子输运依然是通过电子在不同局域态间跳跃而实现。

当有外加交变电场 $F(t) = F_0 \cos(\omega t)$ 时,其中 F_0 为外场幅值, ω 为外场频率,电子通过吸收或放出光子而实现在局域态 $|i\rangle$ 和 $|j\rangle$ 之间跳跃,其中电子局域态 $|i\rangle, |j\rangle$ 的能量本征值分别为 E_i, E_j , 从而实现与外加交变电场的能量变换. 若电子通过吸收一个光子而实现从局域态 $|i\rangle$ 跳跃到局域态 $|j\rangle$, 则在此过程中与外场交换的能量可计为^[29,30]

$$q_{ij} = \Gamma_{ij} \hbar \omega f(E_i) [1 - f(E_j)] \delta[\hbar \omega - (E_j - E_i)], \quad (5)$$

其中 $f(E_i) = \left[\exp\left(\frac{E_i}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}$ 为体系中格点 i 为电子占据的概率, k_B 为波尔兹曼常数, Γ_{ij} 为电子跳跃概率,可表示为

$$\Gamma_{ij} = \begin{cases} \nu_0 \exp\left(-2\alpha R_{ij} - \frac{E_j - E_i}{k_B T}\right), & E_j > E_i \\ \nu_0 \exp(-2\alpha R_{ij}), & E_j < E_i \end{cases} \quad (6)$$

其中 ν_0 为声子频率, α 为电子波函数平均衰减因子,可以用电子波函数局域化长度来描述,即 $\alpha = 1/\lambda$, 其中 λ 为体系的电子局域态的平均局域长度,且 λ 以最近邻格点间的距离 a 为长度单位,可以通过数值计算求得^[23,28], 因此 α 反映了体系波函数的局域化程度,由体系的无序度决定,无序度越大,电子波函数的局域化程度越强,电子波函数扩展长度越小,衰减因子 α 就越大, $R_{ij} = |j - i|a$ 为电

子跳跃距离. 反之, 电子从局域态 $|j\rangle$ 跳跃到局域态 $|i\rangle$ 与外场交换的能量可计为

$$q_{ji} = \Gamma_{ji} \hbar \omega f(E_j) [1 - f(E_i)] \delta[\hbar \omega - (E_j - E_i)]. \quad (7)$$

显然, $\Gamma_{ji} = \Gamma_{ij} \exp\left(\frac{-\hbar \omega}{k_B T}\right)$. 因此, 电子在单位时间内通过在这两个局域态之间跳跃而消耗了能量可表示为

$$q_i = \frac{2\hbar \omega}{Z} \Gamma_{ij} \exp\left(\frac{E_i}{k_B T}\right) \sinh\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) \times \delta[\hbar \omega - (E_j - E_i)], \quad (8)$$

其中

$$Z = 1 + \exp\left(\frac{E_i}{k_B T}\right) + \exp\left(\frac{E_j}{k_B T}\right) + \exp\left(\frac{E_i + E_j}{k_B T}\right),$$

所以单位时间内整个体系所消耗的能量为体系中所有的这些“局域态对”所消耗的能量之和, 即 $Q = \sum_i q_i$. 根据电动力学理论, 在一定时间间隔时外加交变电场所做的功等于整个体系所消耗的能量, 即

$Q = \frac{1}{2} \sigma_{ac}(\omega) F_0^2$, 从而可得到体系的交流电导率

$$\sigma_{ac}(\omega) = \frac{4\hbar \omega}{F_0^2} \sum_i \frac{\Gamma_{ij}}{Z} \exp\left(\frac{E_i}{k_B T}\right) \times \sinh\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) \delta[\hbar \omega - (E_j - E_i)]. \quad (9)$$

3. 结果与分析

根据交流电导公式, 我们选择了含 2×10^3 个格点原子的一维二元无序体系, 计算了其不同参数下的交流电导率, 并探讨了其交流电导率与格点能量无序度、组分、非对角关联的关系, 以及温度、外场频率对其交流电导率的影响.

图 1 为典型关联下一维二元非对角关联无序体系不同 A 原子含量情况下的交流电导率随格点能量无序度的变化关系图, 其中外加电场幅值及频率取为定值 $F_0 = 1 \times 10^3 \text{ V/cm}$, $\omega = 1 \times 10^{10} \text{ Hz}$, 温度 $T = 250 \text{ K}$. 由图可知, 与直流情况一样, 体系的交流电导率随格点能量无序度的增大而减小. 我们知道, 由于无序导致电子波函数局域化, 因而随着格点能量无序度的增加, 电子波函数局域化程度逐渐增强, 电子波函数扩展长度减小, 电子在局域态之间的跳跃概率相应减小, 所以体系的交流电导率随格点能量无

序度的增大而减小.

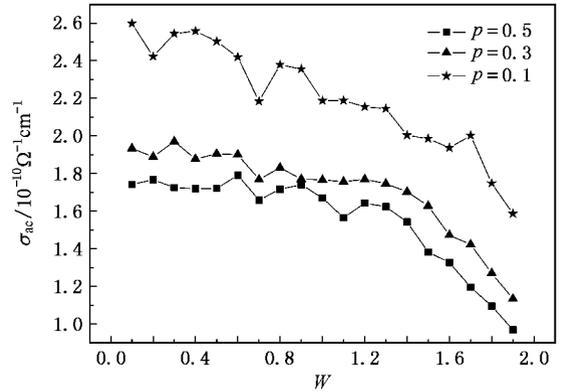


图 1 一维二元非对角关联无序体系交流电导率与格点能量无序度的关系

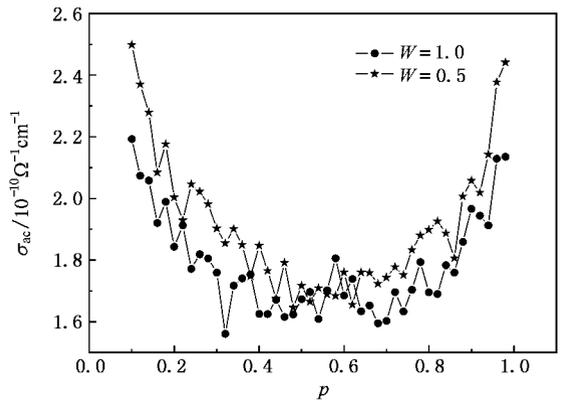


图 2 一维二元非对角关联无序体系交流电导率与 A 原子含量 p 的关系

同时, 体系中两种原子的组分对其交流电导率的影响亦非常明显. 如图 2 所示, 我们计算了在温度、外场及格点能量无序度一定情况下, 典型关联方式下体系交流电导率随其原子组分的变化关系, 其相应的参数取为 $F_0 = 1 \times 10^3 \text{ V/cm}$, $\omega = 1 \times 10^{10} \text{ Hz}$, $T = 250 \text{ K}$. 可见, 体系交流电导与其两种原子的组分的变化表现为随 A 类原子含量 p 的增加而先减小后增大. 这是因为在一维二元无序体系中, A, B 两种原子的排列是随机的, 因而 A 原子的含量 p 取不同值时实际代表着体系成份无序的变化情况, 如当 $p = 0$ 或 $p = 1$ 时, 体系可视为只由一种原子所构成理想的周期体系, 而当 p 取其他值时, 相当于周期体系中引入了其他杂质原子, 即成分无序, 因而随着 p 的增大, 刚开始 B 原子的含量由占主体地位向与 A 原子含量均等的过程变化, 体系的成份无序随之逐渐增加, 即体系向无序的方向发展, 从而电子波函数

局域化程度逐渐增强,电子波函数扩展长度减小,电子的跳跃概率相应减小,但随着 p 的进一步增大(如 $p \geq 0.5$),A 类原子逐渐占据主体含量,随着 p 的增大体系又逐渐向有序方向发展,成份无序程度逐渐减弱,从而电子波函数局域化程度逐渐减弱,电子波函数扩展长度增长,电子跳跃概率相应增加.所以,体系交流电导与其两种原子的组分的变化表现为随 p 的增加而先减小后增大.

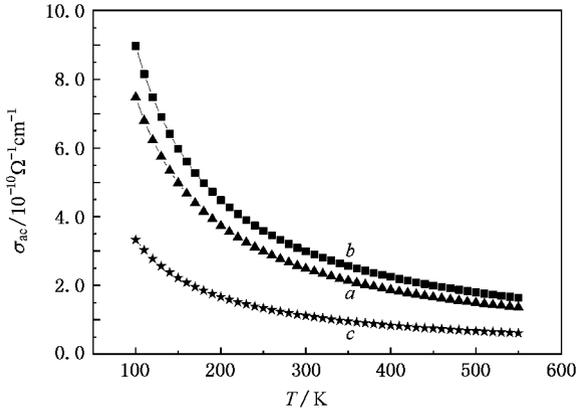


图3 一维二元无序体系交流电导率与温度的变化关系

图3曲线 a, b 分别为典型关联方式和黄金关联方式下一维二元非对角关联无序体系的交流电导率随温度的变化关系,其中外加电场幅值及频率取为定值 $F_0 = 1 \times 10^3 \text{ V/cm}$, $\omega = 1 \times 10^{10} \text{ Hz}$,体系中 A 原子的含量 p 取 $p = 0.5$,格点能量无序度 W 取 $W = 1.0$.为了对比,我们同时计算了在相同参数下不考虑非对角关联、即 Anderson 模型的情况下体系的交流电导率随温度的变化关系(曲线 c).由图可见,三种情况下体系的交流电导率都随温度的升高而减小,这种现象在电子跳跃运输系统中是很反常的^[31].对于这一反常现象,我们认为这是因为:无序体系的电子运输是通过声子的帮助而实现在不同局域态之间跳跃运输,由(6)式可知,电子在不同局域态之间的跳跃概率受声子的影响,同时由于某个格点被电子占据的概率服从费米统计分布,并随温度的改变而改变,从而温度的变化必然影响体系与外场交换的能量,因此随着温度的升高,格点原子热运动加剧,体系的有效无序程度随着温度的升高而增大,并伴随着格点原子热运动对电子跳跃运输的散射作用增强,电子在不同局域态之间进行跳跃的平均概率降低,单位时间内与外场交换的能量相应减少,因而表现为体系的电导率随温度的升高而减小,

这与 Gallos 等^[32]研究准一维电子系统在交变电场作用下载流子迁移率对温度依赖关系时所得结论很好地符合.

对比曲线 a, b 和曲线 c 还可发现,曲线 a, b 的电导率大于曲线 c 的电导率,说明考虑非对角关联时,体系的交流电导率大于 Anderson 模型情况下体系的电导率.这是因为,当引入非对角关联时,体系出现退局域化现象^[9],电子波函数由局域态向扩展态发展,同时非对角关联实现上相当于在体系中增加了电子长程跳跃运输的“通道”,从而在交变电场的作用下能够发生跳跃运输的“局域态对”增多,因而在考虑非对角关联的情况下,体系的交流电导率要大于 Anderson 模型情况下体系的电导率.同时我们还可发现,典型关联方式下体系的交流电导率要小于黄金关联方式下体系的交流电导率,表明不同的关联方式对其电子结构的影响也不同.根据文献^[9]可知,在存在对角无序和非对角无序关联的体系中,关联参数的不同对退局域化的影响也不同,并有 $\lambda(E_c) \propto (t_{AB} - t_C)^{-2}$ 的关系,其中 $\lambda(E_c)$ 为能量本征值 E_c 的电子波函数的扩展长度,可见当 $t_{AB} \rightarrow t_C$ 时, $\lambda(E_c) \rightarrow \infty$,即电子态是扩展态,因此我们可以认为,黄金关联是一种最佳的关联方式, t_{AB} 的取值越接近 t_C ,则越容易出现扩展态,所以在黄金关联方式下体系的退局域化程度要大于典型关联方式下的退局域化程度,从而使在黄金关联方式下体系的电导率大于典型关联方式下体系的电导率.

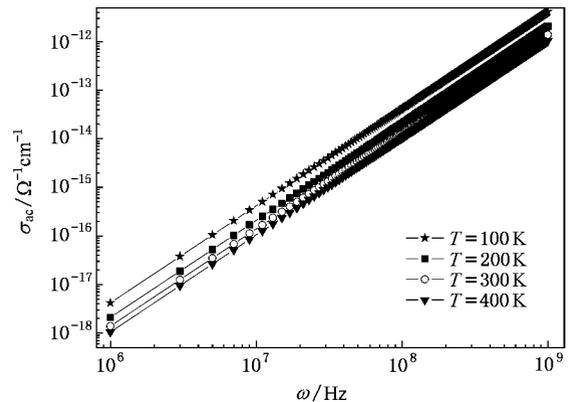


图4 一维二元非对角关联无序体系交流电导率与外场频率的关系

此外,外加交变电场对一维二元非对角关联无序体系交流电导率的影响亦非常明显.如图4所示,我们计算了在不同温度、典型关联方式下体系交流

电导率随外场频率的变化关系, 体系中 A 原子的含量 p 取 $p = 0.5$ 格点能量无序度 $W = 1.0$, 并且为了图示的方便, 我们把横坐标、纵坐标都取了以 10 为底的对数. 可见, 在一定温度下体系的交流电导率随外场频率的升高而增大很快. 对于体系的交流电导率随外场频率的升高而增大, 我们认为这主要是因为随着外场频率的升高, 光子能量相应增大, 电子在“局域态对”间的跳跃概率增大, 从而大大提高体系的交流电导率. 根据文献 [21, 33] 的结果, 一维体系的交流电导率与外场频率满足形如 $\sigma_{ac}(\omega) \sim \omega^2 [\ln(1/\omega)]^2$ 的关系式, 为此我们进一步计算了体系的交流电导率与 $\omega^2 [\ln(1/\omega)]^2$ 的关系, 其中外场频率范围与图 4 的范围相同, 如图 5 所示, 可见对于一维二元非对角关联无序体系的交流电导率 $\sigma_{ac}(\omega)$ 与 $\omega^2 [\ln(1/\omega)]^2$ 满足线性关系, 这与文献 [21, 33] 结果符合很好.

4. 结 论

1. 一维二元非对角关联无序体系的交流电导率随格点能量无序度的增大而减小. 同时, 体系中两种原子的组分的变化实际代表着体系成分无序程度的变化, 因而对其交流电导率的影响很大, 表现为随 A 类原子含量 p 的增加而先减小后增大.

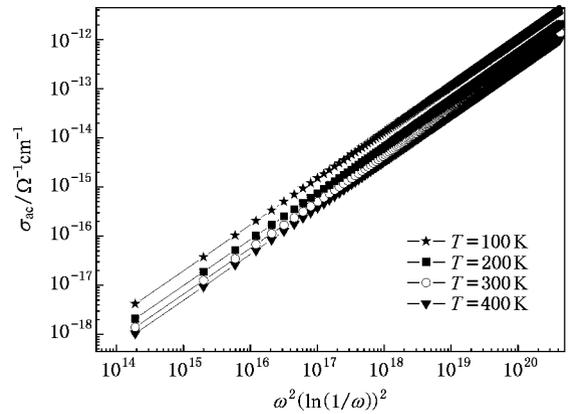


图 5 一维二元非对角关联无序体系交流电导率与外场频率的关系

2. 当引入非对角关联时, 体系出现退局域化现象, 电子波函数由局域态向扩展态发展, 从而使引入非对角关联时体系的交流电导率大于 Anderson 模型情况下体系的电导率, 同时关联方式的不同对其交流电导率的影响不同, 黄金关联情况下体系的电导率要大于典型关联情况下体系的电导率.

3. 温度对一维二元非对角关联无序体系的交流电子输运的影响表现为体系的交流电导率随温度的升高而减小.

4. 外加交变电场对体系交流电导率的影响表现为随外场频率的升高而增大很快, 并满足形如 $\sigma_{ac}(\omega) \sim \omega^2 [\ln(1/\omega)]^2$ 的关系式.

- [1] Porath D, Bezryadin A, Vries S de, Dekker C 2000 *Nature* (London) **403** 635
- [2] Rikitin A, Aich P, Papadopoulos C, Kobzar Y, Vedenev A S, Lee J S, Xu J M 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3670
- [3] Kasumov A Y, Kociak M, Gueron S, Reulet B, Volkov V T, Klinov D V, Bouchiat H 2001 *Science* **291** 280
- [4] Braun E, Eichen Y, Sivan U, Ben-Yoseph G 1999 *Nature* (London) **391** 775
- [5] Richter J, Mertig M, Pompe W, Monch I, Schackert H K 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 536
- [6] Cuniberti G, Craco L, Porath D, Dekker C 2002 *Phys. Rev. B* **65** 241314
- [7] Yu Z G, Song X Y 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 6018
- [8] Carpena P, Bernaola-Galvan P, Ivanov P Ch, Stanley H E 2002 *Nature* **418** 955
- [9] Wei Zhang, Sergio E Ulloa 2004 *Phys. Rev. B* **69** 153203
- [10] Ma S S, Xu H, Liu X L, Guo A M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3170 (in Chinese) [马松山、徐慧、刘小良、郭爱敏 2006 物理学报 **55** 3170]
- [11] Liu X L, Xu H, Ma S S, Deng C S, Guo A M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5562 (in Chinese) [刘小良、徐慧、马松山、邓超生、郭爱敏 2006 物理学报 **55** 5562]
- [12] Ma S S, Xu H, Liu X L, Li M J 2007 *Chin. Phys.* **16** 862
- [13] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [14] Mott N F 1956 *Can. J. Phys.* **34** 1356
- [15] Mott N F, Davis E A 1979 *Electronic processes in non-crystalline materials* (London: Clarendon Press)
- [16] Miller A, Abrahams E 1960 *Phys. Rev.* **120** 745
- [17] Aldea A, Dulea A 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 1672
- [18] Newman M E J, Stinchcombe R B 1991 *Phys. Rev. B* **43** 1183
- [19] Fogler M M, Kelley R S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 166604
- [20] Ma S S, Xu H, Liu X L, Xiao J R 2006 *Chin. Phys.* **15** 190
- [21] Rosenow B, Nattermann T 2006 *Phys. Rev. B* **73** 085103
- [22] Davids P S 1995 *Phys. Rev. B* **52** 4146
- [23] Liu X L, Xu H, Ma S S, Song J Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2949 (in Chinese) [刘小良、徐慧、马松山、宋招权 2006 物理学报 **55** 2949]

- [24] Liu W M , Liang J Q , Chui S T 2002 *Phys. Rev. B* **65** 033102
- [25] Ma S S , Xu H , Liu X L , Wang H Y *Acta Phys. Sin.* (in Press)
(in Chinese] 马松山、徐 慧、刘小良、王焕友 物理学报 (出版中)]
- [26] Dean P , Martin J L 1960 *Proc. Roy. Soc. A* **259** 409
- [27] Wu S Y , Zheng Z B 1981 *Phys. Rev. B* **24** 4787
- [28] 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]
- [29] Xu H , Song Y P 2002 *Chinese Physics* **11** 1294
- [30] Galperin Y M 1999 *Doped semiconductors : Role of disorder* (Lectures at Lund University)
- [31] Bottger H , Bryksin V V 1985 *Hopping Conduction in solids* (Akademie verlag , Berlin)
- [32] Lazaros K Gallos , Bijan Movaghar , Laurens D A Siebbeles 2003 *Phys. Rev. B* **67** 165417
- [33] Reedijk J K , Martens H C F , Bron H B , Michels M A J 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 3904

Characteristic of alternating current hopping conductivity in one-dimensional binary disordered system with off-diagonal correlations^{*}

Ma Song-Shan[†] Xu Hui Li Yan-Feng Zhang Peng-Hua

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

(Received 13 November 2006 ; revised manuscript received 9 March 2007)

Abstract

Based on a tight-binding disordered model describing a single electron band , we establish a model of one-dimensional binary disordered systems with off-diagonal correlations , and derive the alternating current (ac) conductance formula. By calculating the ac conductivity , the function of disorder and off-diagonal correlations in electronic transport are analyzed , and the dependence of the ac conductivity on the field frequency and the temperature is studied. The results indicate that the ac conductivity of one-dimensional binary disordered system decreases with the increasing of the degree of lattices energy disorder. And the ac conductivity of the system is also dependent on the probabilities p , which represents the degree of compositional disorder of the system to some extent. The ac conductivity of system first decreases with the increasing of p , then increases with farther increasing of p . We also find that off-diagonal correlations lead to delocalization and enhance the ac conductivity of the system , namely , the ac conductivity of one-dimensional binary disordered system with off-diagonal correlations is larger than that of uncorrelated system in the Anderson limit. Moreover , the ac conductivity of one-dimensional binary disordered system decreases with the increasing of temperature , and increases drastically with the increasing of the frequency of the electric field.

Keywords : binary disordered systems , ac hopping conductivity , degree of lattices energy disorder , off-diagonal correlations

PACC : 7210 , 7215C , 7155J

^{*} Project supported by the Doctoral Program Foundation of Institutions of Higher Education , China (Grant No. 20020533001) and Hunan Provincial Natural Science Foundation of China (Grant No. 05JJ40135).

[†] E-mail : masongshan1126@yahoo.com.cn