

# 无序度和温度对一维无序体系费米能的影响

马松山, 徐 慧, 刘小良, 李燕峰

(中南大学 物理科学与技术学院, 湖南 长沙, 410083)

**摘 要:** 从一维情况出发, 采用单电子紧束缚无序模型, 建立无序体系一定温度下费米能公式, 同时考虑到无序体系中无序这一本质要素, 通过数值计算探讨不同无序模式下无序度与体系费米能关系, 并进一步探讨温度等对体系费米能的影响。结果表明: 无序体系的费米能随无序度的增大而减小, 并且非对角无序对体系费米能的影响很大, 考虑非对角无序时, 体系的费米能大大降低; 温度对体系费米能的影响表现为, 随温度的升高, 体系的费米能相应增大, 且在低温区费米能随着温度的升高而增大比较缓慢, 而在高温区费米能随着温度的升高而增大较快。

**关键词:** 对角无序; 非对角无序; 费米能

中图分类号: O481.3

文献标识码: A

文章编号: 1672-7207(2007)02-0281-04

## Effects of disorder and temperature on Fermi-energy of one-dimensional disordered systems

MA Song-shan, XU Hui, LIU Xiao-liang, LI Yan-feng

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

**Abstract:** Based on tight-binding disordered model describing a single electron band, the Fermi-energy formula at certain temperature of one-dimensional disordered systems was established. By calculating the Fermi-energy of different disordered cases, the effect of the degree of disorder on the Fermi-energy and the temperature dependence of the Fermi-energy were investigated. The results show that the Fermi-energy decreases with increasing the degree of disorder, and the off-diagonal disorder has great effect on the Fermi-energy. When the off-diagonal disorder is considered, the Fermi-energy of system decreases obviously. And the Fermi-energy increases with increasing temperature, showing the characteristics that the Fermi-energy increases slowly at low temperatures, but increases fast at high temperatures.

**Key words:** diagonal disorder, off-diagonal disorder, Fermi-energy

近年来, 不具有周期结构的无序体系的电子输运问题已越来越为人们所重视。如 Lin 等<sup>[1]</sup>研究了金属粉末材料的电子跳跃电导问题; Cordes 等<sup>[2]</sup>研究了有机固体材料电子传输特性, 并讨论了在光电技术中具有相当应用潜力的柱状盘形分子液晶材料的电子输运问题; Hennig 等<sup>[3]</sup>把无序体系电子输运理论应用于生物领域, 研究了 DNA 分子链中的电子输运机制; Yu 等<sup>[4]</sup>就 DNA 双螺旋结构中的电子跳跃电导进行的研

究, Albuquerque 等<sup>[5]</sup>进一步考虑了 DNA 分子链中远程关联对电子局域化特性及电子输运的影响; Fogler 等<sup>[6]</sup>研究了掺杂对准一维电子晶体直流电子输运的影响。而对于无序体系来说, 其电子波函数呈现出局域化特性, 电子输运主要是通过费米能级附近的电子在声子的帮助下实现在不同局域态间的跳跃输运<sup>[7-9]</sup>, 因而研究无序体系的费米能, 对探讨无序体系的电学特性以及热力学性质具有重要意义。一维无序体系在实

收稿日期: 2006-06-20

基金项目: 高等学校博士点专项科研基金资助项目(20020533001); 湖南省自然科学基金资助项目(05JJ40135)

作者简介: 马松山(1971-), 男, 湖南隆回人, 博士研究生; 从事无序材料微观结构、电子特性研究

通讯作者: 马松山, 男, 博士研究生; 电话: (0731-8836762); E-mail: massongshan1126@yahoo.com.cn

际材料的应用中受到很多限制,但它包含了许多无序体系的基本原理和性质,同时它在数学处理上也很方便,特别是近年来随着纳米线、碳纳米管等低维体系器件的相继研制成功,一维无序体系电学性能的研究已成为国内外普遍关注的一个热点课题。在此,本文作者从一维情况出发,考虑到无序体系中无序这一本质要素,通过数值计算探讨不同无序模式下无序度与体系费米能关系,同时进一步探讨温度对体系费米能的影响。

## 1 模型与方法

对于一维无序体系电子特性的研究,采用单电子紧束缚无序模型,其哈密顿量可表示为:

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

式中:  $|i\rangle$  为一组已知的正交完备基函数;  $N$  为格点数;  $\varepsilon_i$  代表  $i$  格点的位能;  $t_{ij}$  描述电子在  $i$  与  $j$  格点之间转移的跃迁矩阵元,它代表着近邻格点  $i$  和  $j$  之间的相互作用,显然有  $t_{ij}=t_{ji}$ 。在此基础上,若将对角元  $\varepsilon_i$  取为无规变量,而  $t_{ij}$  仍具有平移对称性,它只是  $(R_i - R_j)$  的函数,其中  $R_i$  为格点坐标,这时哈密顿  $H$  属于对角无序体系。但是若将  $t_{ij}$  视为与  $i$  和  $j$  格点位置以及格点上原子都有关的无规变量时,  $H$  所描述的体系既有对角无序,又有非对角无序。

在只考虑对角无序时,按 Anderson 模型<sup>[10]</sup>取  $\varepsilon_i$  在  $-W/2$  和  $W/2$  内无规起伏。其中  $W$  为无序度,表明格点能量的涨落情况,而对于  $t_{ij}$ , 取

$$t_{ij} = -2/(|i-j|+1), \quad |i-j| \leq 2. \quad (2)$$

若进一步考虑非对角无序,则  $t_{ij}$  取为随机数,对于最近邻 ( $|i-j|=1$ ), 可以取  $t_{ij}$  以  $-1$  为中心在  $-W/4$  与  $W/4$  内随机变化,而对于次近邻 ( $|i-j|=2$ ), 取  $t_{ij}$  以  $-2/3$  为中心在  $-W/8$  与  $W/8$  内随机变化。

利用 Dean 等<sup>[11]</sup>提出的负本征值理论和 Wu 等<sup>[12]</sup>提出的无限阶微扰理论,可以求解无序体系的本征问题<sup>[13]</sup>,该方法高效精确,能计算近 10 万阶矩阵,计算误差小于  $10^{-12}$ 。

考虑到无序系统的电子同样服从费米统计分布,因而,对于一定温度  $T$  下体系的费米能  $E_F$  可以表示为<sup>[14]</sup>:

$$E_F = E_F^0 \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{6E_F^0} \left[ \frac{d}{dE} \ln N(E) \right]_{E_F^0} (K_b T)^2 \right\}. \quad (3)$$

式中:  $E_F^0$  为绝对零度时的费米能;  $N(E)$  为电子能态密度;  $K_b$  为波耳兹曼常数。

由于无序体系不存在长程序,其电子态密度分布不同于晶态系统。一般认为,无序体系电子能态可以用高斯态密度分布来描述<sup>[2, 15]</sup>:

$$N(E_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi W}} \exp\left(-\frac{E_i^2}{2W^2}\right). \quad (4)$$

式中:  $W$  为导致体系格点势无序变化的无序度;  $E_i$  为能量本征值。因而,对于无序体系,在温度  $T$  下费米能  $E_F$  可以表示为:

$$E_F = E_F^0 \left[ 1 + \frac{\pi^2}{6W^2} (K_b T)^2 \right]. \quad (5)$$

此即无序体系费米能公式。对于一个具有  $N$  个格点的一维无序体系,在单电子近似下,可认为每个格点处有 1 个电子。假设体系电子能态不简并,温度为 0 K 时,如果  $N$  个电子将能量较低的  $N/2$  个能态全部填满,而能量较高的  $N/2$  个能态全部是空的,那么,有电子填充的最高一个能级就对应着无序体系在绝对零度时的费米能  $E_F^0$ ,因而,  $E_F^0$  可以通过求解无序体系的本征问题而得到,从而可以求解一定温度和一定无序度下体系的费米能。

## 2 计算结果与讨论

对于无序体系,其局域态具有较好的稳定性,其本征态的形状、分布范围和局域态中心位置受体系大小的影响不大<sup>[16]</sup>。因此,根据无序体系费米能公式,计算了体系大小为  $N=20\,000$ ,具有不同无序度和不同温度时无序体系的费米能,并探讨了费米能与体系无序度和温度的关系。

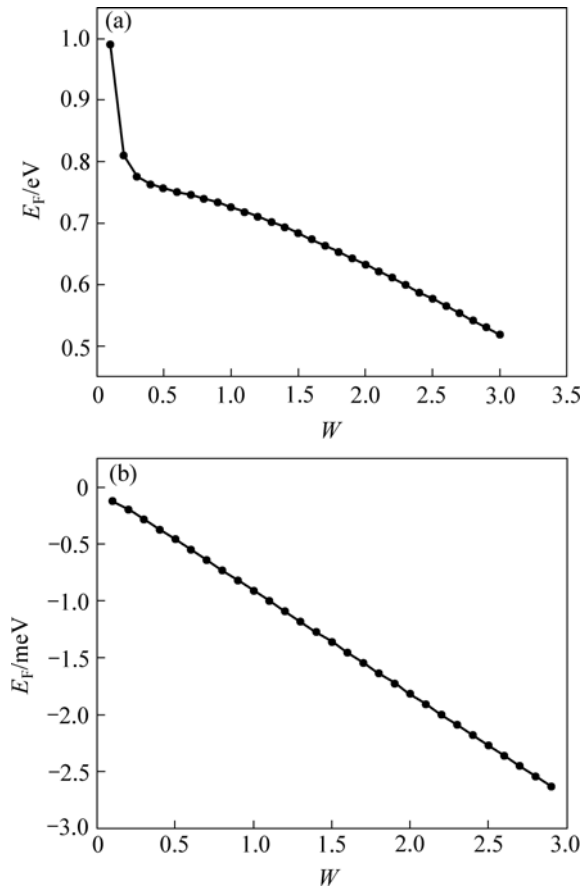
图 1 所示为温度在 200 K 时费米能级随无序度的变化关系,  $N=20\,000$ 。其中图 1(a)所示为只考虑对角无序时费米能与无序度的变化关系,图 1(b)所示为考虑非对角无序的影响,即同时考虑了对角无序和非对角无序时费米能与无序度的变化关系。由图 1 可见,无序体系的费米能较晶态体系的费米能大大降低,且随无序度的增加而减小,只是在只考虑对角无序时,体系的费米能在弱无序区随无序度的增大而降低得较快,而在强无序区,其费米能随无序度的增大而降低

变缓。当考虑非对角无序项的影响时, 体系的费米能随无序度的变化近似线性地降低。这表明由于无序的作用, 体系能带发生分裂, 出现更多的低能级, 从而增大了电子占据低能级的机会, 同时, 电子波函数在整个能区展宽, 低能区的电子态密度增加, 因而体系的费米能降低。同时还发现, 在只考虑对角无序时, 费米能级的变化在 0.5 eV 以上, 而在进一步引入非对角无序项的影响时, 费米能级的变化在 0 eV 附近。可见, 考虑非对角无序的影响时, 体系的费米能级较只考虑对角无序时的费米能大大降低, 从而说明非对角无序项的引入对体系的费米能的影响亦很大。可以认为当引入非对角无序时, 由于非对角无序描述的是各近邻格点之间的跃迁矩阵元, 即各格点之间的关联相互作用, 因此, 随着非对角无序的引入, 系统趋向稳定, 几乎所有的电子都处于低能级。同时, 由于无序体系电子结构中存在大量的能量本征值处于 0 eV 以下低能态<sup>[16]</sup>, 从而使体系的费米能大大降低, 甚至出

现负的费米能情况。

从图 1 还可看出, 在相同的无序度变化范围内 (0~3.0), 当只考虑对角无序时, 体系费米能的变化范围较大(1~0.5 eV); 而当引入非对角无序时, 体系的费米能变化范围大大减小, 与只考虑对角无序时相差几个数量级。也就是说, 在同时考虑对角无序和非对角无序的情况下, 体系的费米能随无序度的增大而减小的速率大大降低。这说明虽然非对角无序的引入使体系的费米能比只考虑对角无序时体系的费米能大大降低, 但由于非对角无序描述的是各近邻格点之间的关联相互作用, 当引入非对角无序时, 系统趋向稳定, 体系费米能降低, 无序的影响相对减弱。因此, 当引入非对角无序时, 无序度对费米能的影响不再像只考虑对角无序时那么显著。

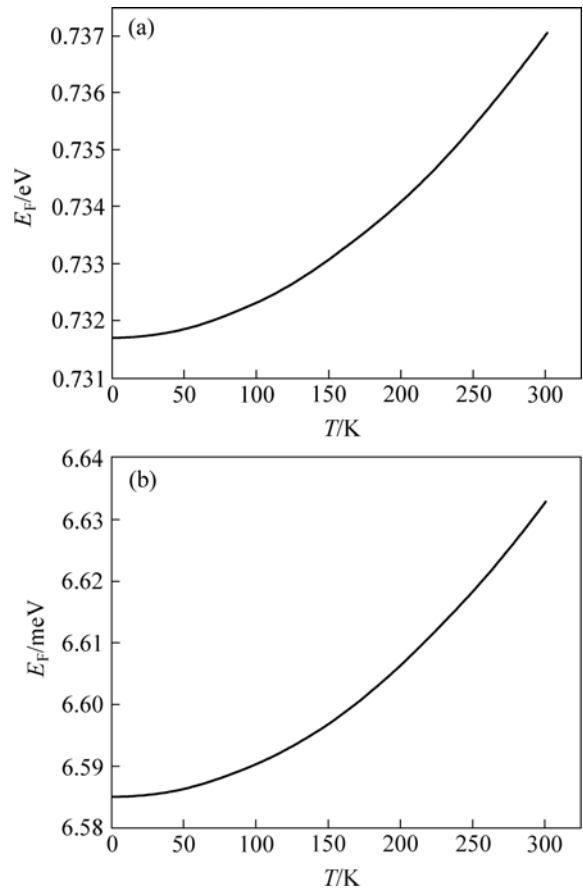
图 2 所示为 20 000 个格点, 无序度取定值  $W=1$  时无序体系费米能随温度的变化关系, 其中图 2(a)所示为只考虑对角无序的情况, 而图 2(b)所示为进一步



(a) 只考虑对角无序; (b) 引入非对角无序项  
 $E_F$ —费米能;  $W$ —无序度

图 1 无序体系费米能与无序度的关系

Fig.1 Relationship between Fermi-energy and of degree of disorder in disordered systems



(a) 只考虑对角无序; (b) 引入非对角无序项  
 $E_F$ —费米能,  $T$ —温度

图 2 无序体系费米能与温度的关系

Fig.2 Relationships between Fermi-energy and temperature of disordered systems

考虑了非对角无序时的情况。由图 2 可知, 无序体系的费米能级随温度的升高而增大。这是因为当温度升高时, 由于热激发使电子占据高能级的几率增加, 体系的费米能相应增大。同时还可发现, 当温度较低时, 体系费米能随温度的升高而增大比较平缓, 而当温度较高时, 体系费米能随温度的升高而增大的趋势加快。这是因为温度升高对体系费米能的作用具有双重效应。一方面, 在低温区, 随温度的升高, 格点原子热运动加剧, 体系无序程度加强, 使体系费米能有减小的趋势; 另一方面, 由于温度的升高使电子占据高能级的几率增加, 体系的费米能呈增大的趋势。由于温度升高所导致的体系无序程度的增加在一定程度上缓解了体系的费米能增加的速度, 所以, 在低温区, 体系的费米能随温度升高而增大的速度比较缓慢。但随着温度的进一步升高, 电子占据高能级的几率大大增加, 使体系费米能增大的速度更快, 所以, 在高温区, 体系的费米能随温度升高而增大的速度较快。

### 3 结 论

**a.** 无序体系的费米能级随着体系无序度的增加而减小, 且正是由于无序的作用, 使无序体系的费米能较晶态体系的费米能大大降低。

**b.** 非对角无序对无序体系的费米能级的影响很大, 考虑非对角无序时, 体系的费米能级大大降低, 但无序度对费米能的影响不再像只考虑对角无序项情况下表现得那么显著。

**c.** 无序体系的费米能级随着温度的升高而增大, 在低温区, 体系的费米能级增大比较缓慢, 但在高温区, 体系的费米能增大速度较快。

#### 参考文献:

- [1] Lin C H, Wu G. Y. Hopping conduction in granular metal[J]. *Physica B*, 2000, 279: 341-346.
- [2] Cordes H, Baranovskii S D, Kohary K et al. One dimensional hopping transport in disorder organic solids[J]. *Phys Rev B*, 2001, 63: 094201.
- [3] Hennig D, Archilla J F R, Agarwal J. Nonlinear charge transport mechanism on periodic and disordered DNA[J]. *Physica D*, 2003, 180: 256-273.
- [4] Yu Z G, Song Xueye. Variable range hopping and electrical conductivity along the DNA double helix[J]. *Phys Rev Lett*, 2001, 86: 6018-6021.
- [5] Albuquerque E L, Vasconcelos M S, Lyra M L, et al. Nucleotide correlations and electronic transport of DNA sequences[J]. *Phys Rev E*, 2005, 71: 021910.
- [6] Fogler M M, Teber S, Shklovskii B I. Variable range hopping in quasi one dimensional electron crystals[J]. *Phys Rev B*, 2004, 69: 035413.
- [7] 徐 慧, 宋祎璞, 李新梅. 一维无序体系电子跳跃导电研究[J]. *物理学报*, 2002, 51(1): 143-147.  
XU Hui, SONG Yi-pu, LI Xin-mei. Hopping conductivity studies on one-dimensional disordered system[J]. *Acta Physica Sinica*, 2002, 51(1): 143-147.
- [8] 丁建文, 颜晓红, 方显承, 等. 纳米结构链的 Hopping 电导: 实空间重整化群方法[J]. *物理学报*, 1999, 48(2): 314-319.  
DING Jian-wen, YAN Xiao-hong, FANG Xian-cheng, et al. Hopping conductivity of nanostructured chain[J]. *Acta Physica Sinica*, 1999, 48(2): 314-319.
- [9] 缪智武, 丁建文, 颜晓红, 等. 畸变对 Hopping 电导的影响: Thue-Morse 纳米结构模型[J]. *物理学报*, 2003, 52(5): 1213-1217.  
MIAO Zhi-wu, DING Jian-wen, YAN Xiao-hong, et al. Effect of distortion on hopping conductivity: Thue-Morse nanostructured model[J]. *Acta Physica Sinica*, 2003, 52(5): 1213-1217.
- [10] Anderson P W. Absence of diffusion in certain random lattices[J]. *Phys Rev*, 1958, 109(5): 1492-1505.
- [11] Dean P. The vibrational properties of disordered systems: numerical studies[J]. *Rev Mod Phys*, 1972, 44(2): 127-168.
- [12] Wu S Y, Zheng Z B. Amplitude analysis of localization in one-dimensional disordered systems: Vibrational states of an isotopically disordered binary chain[J]. *Phys Rev B*, 1981, 24: 4787-4795.
- [13] 徐 慧. 一维无序系统本征矢的解法[J]. *计算物理*, 1991, 8(3): 295-304.  
XU Hui. The solution of the eigenvectors in one dimensional disordered system[J]. *Journal of Computational Physics*, 1991, 8(3): 295-304.
- [14] 黄 昆, 韩汝琦. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2001: 276-282.  
HUANG Kun, HAN Ru-qi. *Solid states physics*[M]. Beijing: Higher Education Press, 2001: 276-282.
- [15] Soukoulis C M, Economou E N. Electronic localization in disordered systems[J]. *Waves Random Media*, 1999, 9: 255-269.
- [16] 徐 慧, 曾红涛. 无序系统中电子局域态分布[J]. *物理学报*, 1992, 41(10): 1666-1671.  
XU Hui, ZENG Hong-tao. Distribution of electronic localization in the disordered system[J]. *Acta Physica Sinica*, 1992, 41(10): 1666-1671.