

纳米结构链的 hopping 电导 实空间重正化群方法*

丁建文¹⁾ 颜晓红¹⁾²⁾ 方显承¹⁾ 段祝平²⁾

¹⁾(湘潭大学物理系, 湖南 411165)

²⁾(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

(1998 年 5 月 25 日收到; 1998 年 8 月 10 日收到修改稿)

基于 Miller-Abrahams 理论, 发展了一种重正化群方法, 研究了一维纳米结构体系的 hopping 电导. 研究表明在纳米结构体系中晶粒种类、晶粒尺寸对 hopping 电导有显著的调制作用, 界面结构及晶格畸变等对 hopping 电导也有不同程度的影响.

PACC: 7280; 6146

1 引 言

随着制备工艺和技术的进步, 人们已成功地制备出性质丰富的各类纳米结构材料, 形成了纳米结构体系物理新的研究领域^[1]. 理论上, 人们也发展了研究其物理性质的一些有效方法, 如 Wang 等^[2]利用数值算法研究 ZnSe/Ge 的本征态, 讨论了有关量子尺寸效应; Kubo 等^[3]应用量子统计等方法研究了关于金属粒子电子性质的理论性质; Yan 等^[4]应用格林函数重正化群方法较系统地研究了纳米晶体的电声子性质. 基于 Miller-Abrahams(M-A) 理论^[5], 本文发展了一种实空间重正化群方法, 研究一维纳米结构的跳跃(hopping)电导及其相关因素, 并得到了一些有趣的结果.

2 Miller-Abrahams 方程和纳米结构模型

Miller-Abrahams 方程是

$$i C_n (V_n - EX_n) = \frac{V_{n-1} - V_n}{Z_{n-1, n}} + \frac{V_{n+1} - V_n}{Z_{n, n+1}}, \quad (1)$$

其中 X_n 是第 n 个格点的位置, V_n 是第 n 个格点的势, E 是外电场的幅值, ω 是外电场的频率, 并且有

$$C_n = e^2 f(\epsilon_n) [1 - f(\epsilon_n)] / KT, \quad (2)$$
$$1/Z_{n, n+1} = e^2 f(\epsilon_n) [1 - f(\epsilon_{n+1})] U_n / KT,$$

其中 $f(\epsilon_n)$ 为费米函数, ϵ_n 是无外场时单个电子处于第 n 个格点的电子能, U_n 是无外场

*国家自然科学基金(批准号:59871044)和湖南省自然科学基金(批准号:96WLX001010)资助的课题.

时单个电子从第 n 个格点向第 $n + 1$ 个格点的跃迁率, K 为玻尔兹曼常数, T 为热力学温度. 电导率 相应地表示为

$$= \frac{1}{EL} \sum_n (X_{n+1} - X_n) \frac{V_{n+1} - V_n}{Z_{n,n+1}}, \quad (3)$$

式中 L 表示链的长度. 由此可以计算有关体系的电导率^[6,7]. 选取

$$I_n = \frac{V_{n+1} - V_n}{Z_{n,n+1}}, \quad H_n = X_{n+1} - X_n, \quad (4)$$

其中 H_n 表示从第 n 个格点到第 $n + 1$ 个格点的距离, 则由 (1) 式有

$$\begin{aligned} \text{i} \quad C_n (V_n - EX_n) &= I_n - I_{n-1}, \\ \text{ii} \quad C_{n+1} (V_{n+1} - EX_{n+1}) &= I_{n+1} - I_n. \end{aligned} \quad (5)$$

(5) 式中两式相减后, 由 (2) 和 (4) 式有

$$(2 + i/U_n) I_n + i C_n V_n = I_{n+1} + I_{n-1} + i E_n H_n C_n, \quad (6)$$

其中 $C_n = C_{n+1} - C_n$, $V_n = V_{n+1} - EX_{n+1}$. 假定无外场时 n 与格点 n 无关, 因而 $f(n)$ 是一个与 n 无关的量, 由 (2) 式可知 C_n 也是一个与 n 无关的常数, 并且 $C_n = 0$. 令 EC_n 为 E , (6) 式可简化为

$$(2 + i/U_n) I_n = I_{n+1} + I_{n-1} + i E H_n. \quad (7)$$

为了便于重正化群方法消元, 将 (7) 式变形为

$$E_n I_n = t_{n-1,n} I_{n-1} + t_{n,n+1} I_{n+1} + i E d_n, \quad (8)$$

式中

$$E_n = 2 + i/U_n, \quad t_{n\pm 1,n} = t_{n,n\pm 1} = 1, \quad d_n = H_n, \quad (9)$$

其中 $t_{n,n\pm 1}$ 表示格点 n 与左右格点 $n \pm 1$ 之间相关的系数, $t_{n,n\pm 1}$ 及 E_n 均是重正化前初始链对应的无量纲参量, d_n 则是与初始链格点距离对应的参量.

此时电导率公式 (3) 变为

$$= \frac{1}{EL} \sum_n d_n. \quad (10)$$

结合纳米晶格固体结构特点我们考虑图 1(a) 所示的一维纳米结构模型^[4,8].

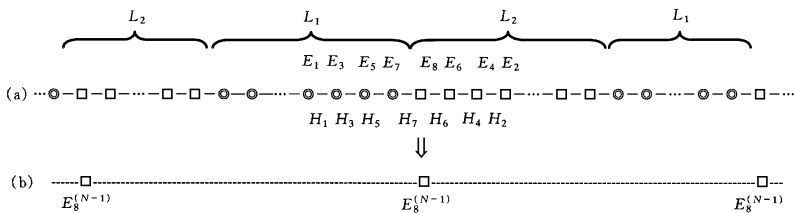


图 1 (a) 纳米晶格链, 周期为 $L_0 = L_1 + L_2$; (b) 重正化后的简周期链

该模型是由格点数分别为 N_1 和 N_2 的两类纳米晶粒 L_1 和 L_2 交替排列而成的周期序列, 其周期为 $L_0 = L_1 + L_2$, 其中每一纳米晶粒中的格点分为两类: 含有周期性构型的晶格格点 (E_1, E_2) 和两类晶粒相连接处的界面格点 (E_3, \dots, E_8), 其对应格点的跃迁率

U_n 分别取值为 (U_1, U_2) 和 (U_3, \dots, U_8) . 根据相邻格点的具体情况, 参量 d_n 则对应取几种不同值, 分别为

$$d_n = \begin{cases} H_1 : L_1 \text{ 中相邻格点之间距离;} \\ H_2 : L_2 \text{ 中相邻格点之间距离;} \\ H_3 : L_1 \text{ 的次级界面格点与相邻的 } L_1 \text{ 中格点之间距离;} \\ H_4 : L_2 \text{ 的次级界面格点与相邻的 } L_2 \text{ 中格点之间距离;} \\ H_5 : L_1 \text{ 的最外层界面格点与次级界面格点之间距离;} \\ H_6 : L_2 \text{ 的最外层界面格点与次级界面格点之间距离;} \\ H_7 : L_1 \text{ 和 } L_2 \text{ 的最外层界面格点之间距离.} \end{cases}$$

其中 $L^{(k)}$ 表示经过 k 次重正化后所产生新链的长度, L 是初始链的长度, N_i 周期序列的周期个数, 并且有 $L = N_i L_0$.

若 $k = N - 1$ 时, 初始链中 $E_1 - E_7$ 类及半数 E_8 类格点全部被消掉, 所剩下的都是与 E_8 同类的格点, 初始链被重正化为一个简周期链, 如图 1 (b) 所示. 简周期链的电导方程重正化为

$$E_n^{(N-1)} I_n^{(N)} = t_{n-1, n}^{(N)} I_{n-1}^{(N)} + t_{n, n+1}^{(N)} I_{n+1}^{(N)} + i E d_n^{(N-1)}, \quad (22)$$

并且可以得出

$$t_{n \pm 1, n}^{(N)} = \frac{t_{n \pm 1, n}^{(N-1)} t_{n \pm N, n \pm (N-1)}}{E_{n \pm (N-1)}}, \quad (23)$$

因而简周期链的电导率 $\sigma^{(N)}$ 可以简单地由 (10), (22) 和 (23) 式得出

$$\sigma^{(N)} = \frac{i}{L^{(N)}} \cdot \frac{N_i [d_n^{(N-1)}]^2}{E_n^{(N-1)} - t_{n-1, n}^{(N)} - t_{n, n+1}^{(N)}}, \quad (24)$$

$L^{(N)}$ 为简周期链的长度. 对应的初始链的电导率为

$$= \frac{i}{2L_0} \left[\frac{2 [d_n^{(N-1)}]^2}{E_n^{(N-1)} - t_{n-1, n}^{(N)} - t_{n, n+1}^{(N)}} + \sum_{k=0}^{N-1} \frac{[d_{n+k}]^2}{E_{n+k}} \right]. \quad (25)$$

4 计算与讨论

作为特例, 我们计算了 $\{N_1, N_2\}, \{U_1, U_2, \dots, U_8\}, \{H_1, H_2, \dots, H_7\}$ 等参量对纳米晶格链 hopping 电导的影响.

图 2 示出了 $N_1/N_2 = 10/20$ 的纳米结构链的 hopping 电导率. 考虑晶粒间的界面效应及晶格应变, 格点参量分别选取 $\{U_1, U_2\}$ 为 $\{1, 0.01\}$, $\{H_1, H_2\}$ 为 $\{1, 0.9\}$, $\{U_3, U_4, \dots, U_8\}$ 为 $\{0.95, 0.0105, 0.90, 0.011, 0.85, 0.0115\}$, $\{H_3, H_4, \dots, H_7\}$ 为 $\{1.01, 0.89, 1.03, 0.87, 0.95\}$, 电导率 为任意单位. 从图中可以看出其电导率实部呈现两个阶梯, 一个在低频处, 一个在 $\omega = 1$ 左边处; 相对应的电导率虚部存在两个‘共振峰’, 低频处峰值较小, 另一峰值较大. 这一结果与文献 [6] 所得准晶链结果相似. 调节晶粒 L_1 和 L_2 对应的参量大小, 不难得到高低频的峰位和阶梯与跃迁率大小不同的晶粒密切相关, 当跃迁率较小的晶粒 L_2 的参量变化时低频电导率变化显著, 低频处的阶梯和峰位随之移动; 而当跃迁率较大的晶粒 L_1 的参量变化时高频电导率变化显著, 高频处的阶

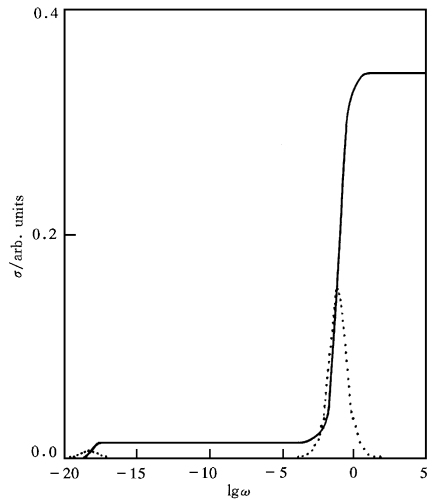


图 2 纳米晶格链的 hopping 电导率, 实线和虚线分别对应电导率的实部和虚部, 对应参量为 $N_1/N_2 = 10/20, \{U_1, U_2, \dots, U_8\} = \{1, 0.01, 0.95, 0.0105, 0.90, 0.011, 0.85, 0.0115\}, \{H_1, H_2, \dots, H_7\} = \{1, 0.9, 1.01, 0.89, 1.03, 0.87, 0.95\}$. 频率 以 U_1 为单位

梯和峰位也随之移动。

图 3 示出了晶格周期变化对电导率的影响. 实线和虚线分别对应 N_1/N_2 为 10/20, 20/40 的情形, 其他参量与图 2 中相同, 插图(c)为低频峰处的放大情况. 从图中可以看出随晶格周期增加, 电导率实部在高频区 (> 1) 有所增加, 低频区 ($< 10^{-5}$) 有所减少, 而虚部低频峰值基本没变, 高频峰值有所减少, 但高低频的阶梯和峰位均发生‘红移’, 即向低频方向移动。

图 4 示出了界面参量变化对电导率的影响. 图中只改变了 L_1 的界面参量 $U_i (i = 3, 5, 7)$, 实线对应 $\{U_3, U_5, U_7\} = \{0.95, 0.9, 0.85\}$, 虚线对应 $\{U_3, U_5, U_7\} = \{0.9, 0.8, 0.7\}$, 其他参量与图 2 中相同. 从图中可以看出界面效应加强, 高频区 (> 1) 电导率有一定减少, 其他影响不明显. 同样, 只改变 L_1 的界面参量 $H_i (i = 3, 5, 7)$ 时, 也不难看出晶格应变加大, 高频区 (> 1) 电导率有一定增加。

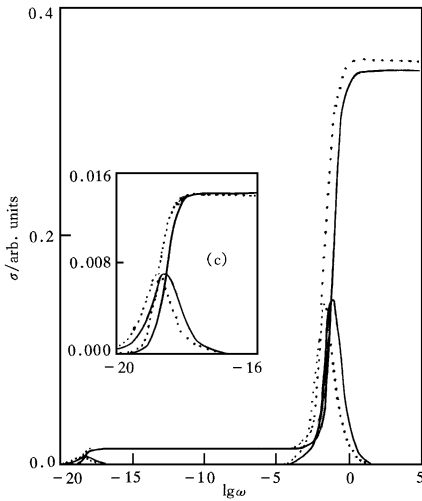


图 3 不同晶格周期对应的电导率, 实线和虚线分别对应 $N_1/N_2 = 10/20$ 和 $N_1/N_2 = 20/40$, 其他参量与图 2 相同, 频率以 U_1 为单位

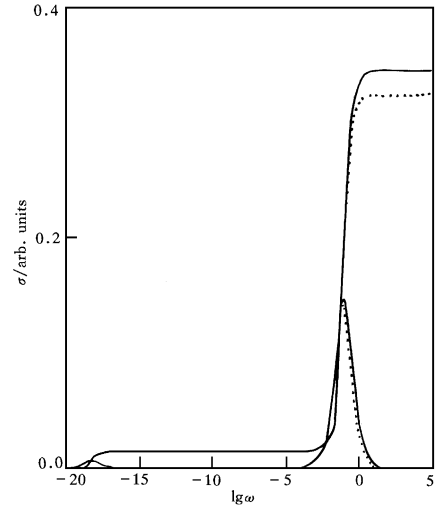


图 4 界面参量变化对电导率的影响, 实线对应 $\{U_3, U_5, U_7\} = \{0.95, 0.9, 0.85\}$, 虚线对应 $\{U_3, U_5, U_7\} = \{0.9, 0.8, 0.7\}$, 其它参量与图 2 相同. 频率以 U_1 为单位

5 结 论

上述计算结果表明由于纳米链的特殊结构其电导率类似于准晶链而不同于周期链, 同时也表明跃迁率不同, 对应晶粒对 hopping 电导的影响行为明显不同. 特别是, 跃迁率较大的晶粒对高频电导影响显著, 跃迁率较小的晶粒对低频电导影响显著. 界面结构、晶格畸变使晶粒的原子构型、电子能谱发生了畸变, 对电导率也有不同程度的影响。

- [1] L. D. Zhang and C. M. Mo, *Nanometer Material Science*, published by Liaoning Science & Technology Press, (1994).
 [2] Wang E. G., Ting C. S., *J. Appl. Phys.*, **78**(1995), 1832.

- [3] R. Kubo ,A. Kawabata. , *Annu. Rev. Matter. Sci.* , **14**(1984) ,49.
- [4] X. H. Yan ,Lide Zhang ,Zhuping Duan and Shuzhi Cai , *Phys. Rev.* , **B53**(1996) ,4752.
- [5] A. Miller and E. Abrahams , *Phys. Rev.* , **120**(1960) ,745.
- [6] M. E.J. Newman and R. B. Stinchcombe , *Phys. Rev.* , **B43**(1991) ,1183.
- [7] A. Aldea and M. Dulea , *Phys. Rev. Letter* , **60**(1988) ,1672.
A. Aldea and M. Dulea , *J. Phy.* , **C19**(1986) ,4045.
- [8] Yan Xiao-hong ,Zhang Li-de ,Duan Zhurping and Zhou Yi-chun , *Acta Physica Sinica* , **6**(1997) ,589.

HOPPING CONDUCTIVITY OF NANOSTRUCTURED CHAIN : REAL-SPACE RENORMALIZATION GROUP APPROACH*

DINGJIAN-WEN¹⁾ YAN XIAO-HONG¹⁾²⁾ FANG XIAN-CHENG¹⁾ DUAN ZHU-PING²⁾

¹⁾ (Department of Physics , Xiangtan University , Hunan 411105)

²⁾ (Institute of Solid State Mechanics , Chinese Academy of Science , Beijing 100080)

(Received 25 May 1998 ; revised manuscript received 10 August 1998)

ABSTRACT

In terms of Miller-Abrahams' theory , a real-space renormalization group approach is developed to calculate the hopping conductivity of one-dimensional nanostructured chain. It is found that the kinds and the sizes ,as well as the interface structures and lattice distortion ,of nanograins have a notable effect on the hopping conductivity of nanostructured systems.

PACC: 7280 ; 6146

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 59871044) and the Hunan Provincial Natural Science Foundation of China (Grant No. 96WLX001010) .