

Jednowymiarowe układy nieuporządkowane – własności elektronowe

Maciej Wołoszyn

25 października 2004

1 Wstęp

1.1 Układy jednowymiarowe

$$D = 1$$

- pojedyncze łańcuchy polimerowe, DNA
- druty kwantowe

Uwaga:

wymiarowość może być typu $D = 1.2$ (np. dopuszczamy przeskokki el. na sąsiednie łańcuchy).

1.2 Nieporządek

- zaburzenie symetrii translacyjnej poprzez nieporządek:
 - podstawieniowy
 - strukturalny

Źródła

Niedoskonałości sieci krystalicznej, domieszki, struktura amorficzna.

Skutki mogą być:

- niepożądane – np. wzrost oporu el. w metalu,
- korzystne – poprawa przewodnictwa dla niektórych polimerów,

Konsekwencje dla obliczeń

Standardowe techniki obliczeniowe skuteczne zwykle tylko dla układów periodycznych (uporzędkowanych).

1.3 Cele

- wyznaczenie funkcji gęstości stanów elektronowych (Density Of States)

$$\rho(E) = \frac{dS(E)}{dE}$$

Typowe przewidywania analityczne dla kwadratowej relacji dyspersji:

$$\rho(E) \propto (E - E_0)^{(D-2)/2}$$

Dla $D = 1$

$$\rho(E) \propto \frac{1}{\sqrt{E - E_0}}$$

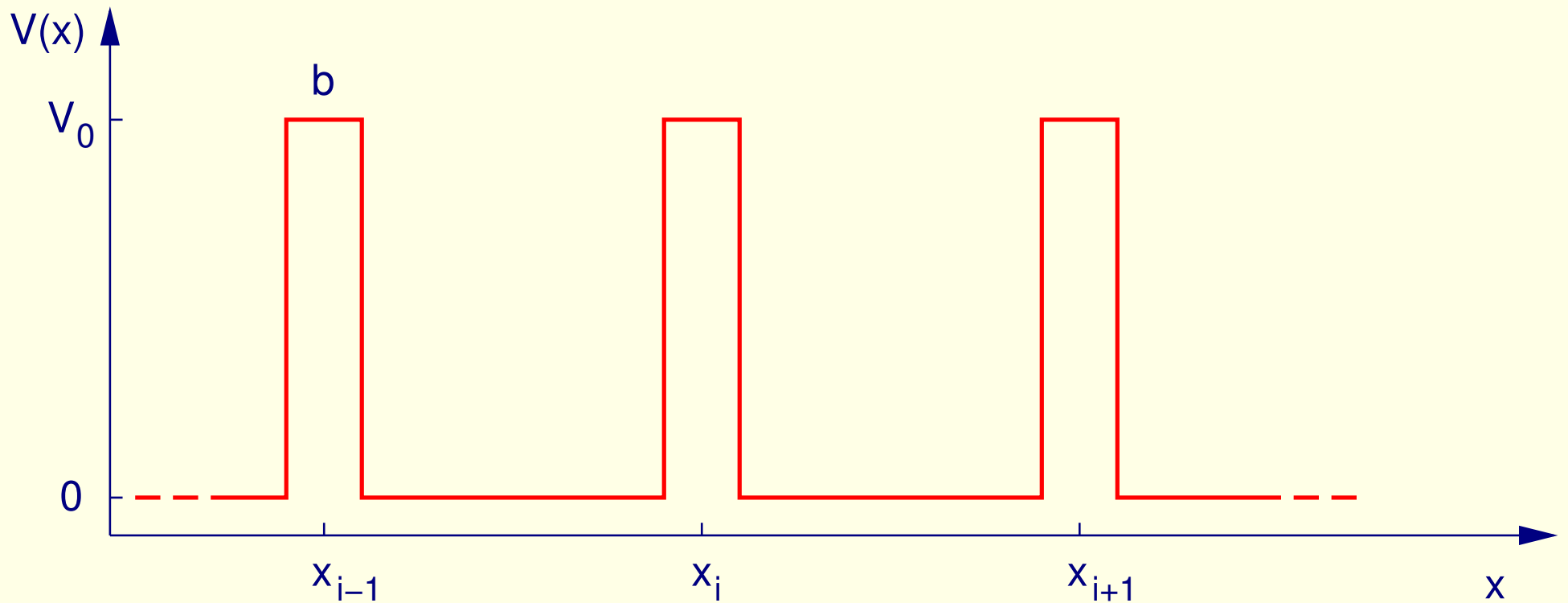
Znaczenie $\rho(E)$ – zwłaszcza dla $E = E_F$:

- własności transportowe,
- elektronowe ciepło właściwe,
- własności magnetyczne.

- analiza lokalizacji funkcji falowej stanu podstawowego, w tym w przestrzeni fazowej, w zależności od stopnia nieporządku,
- porównanie wyników z innymi modelami układów nieuporządkowanych.

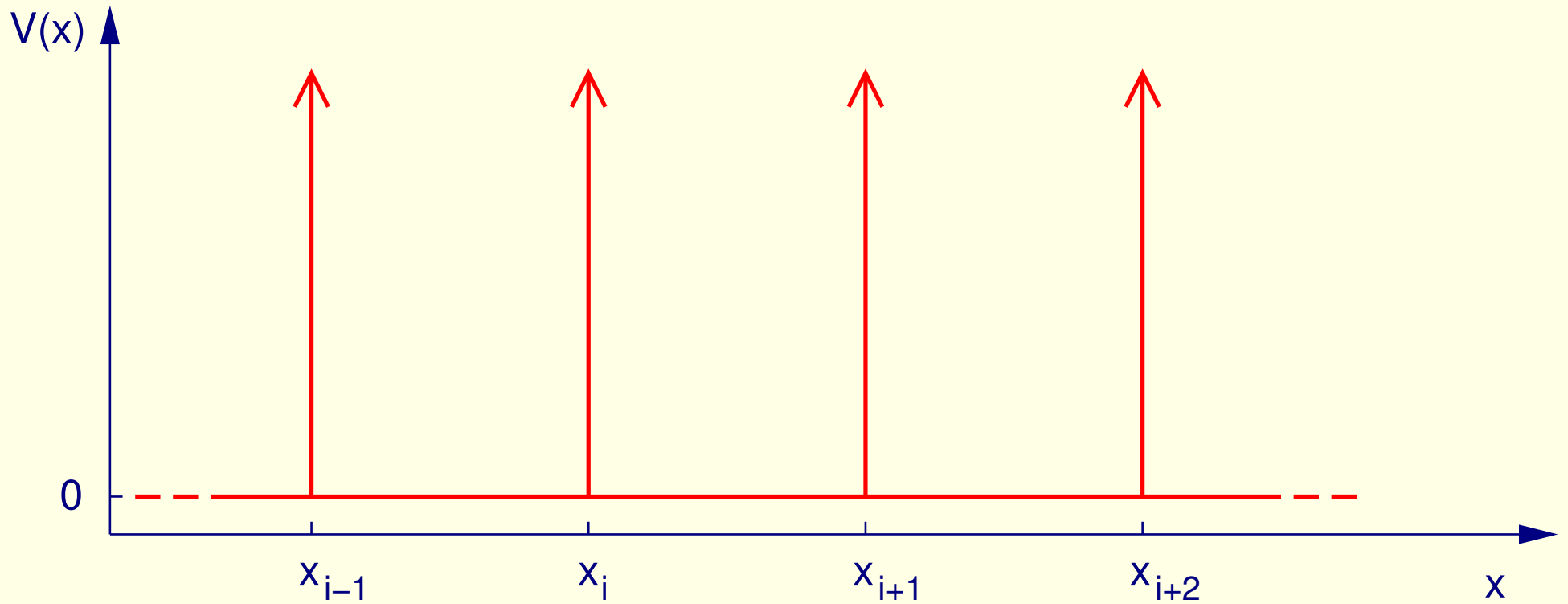
2 Model

- Oparty na modelu Kroniga-Penneya: ciąg prostokątnych barier potencjału



... przejście graniczne

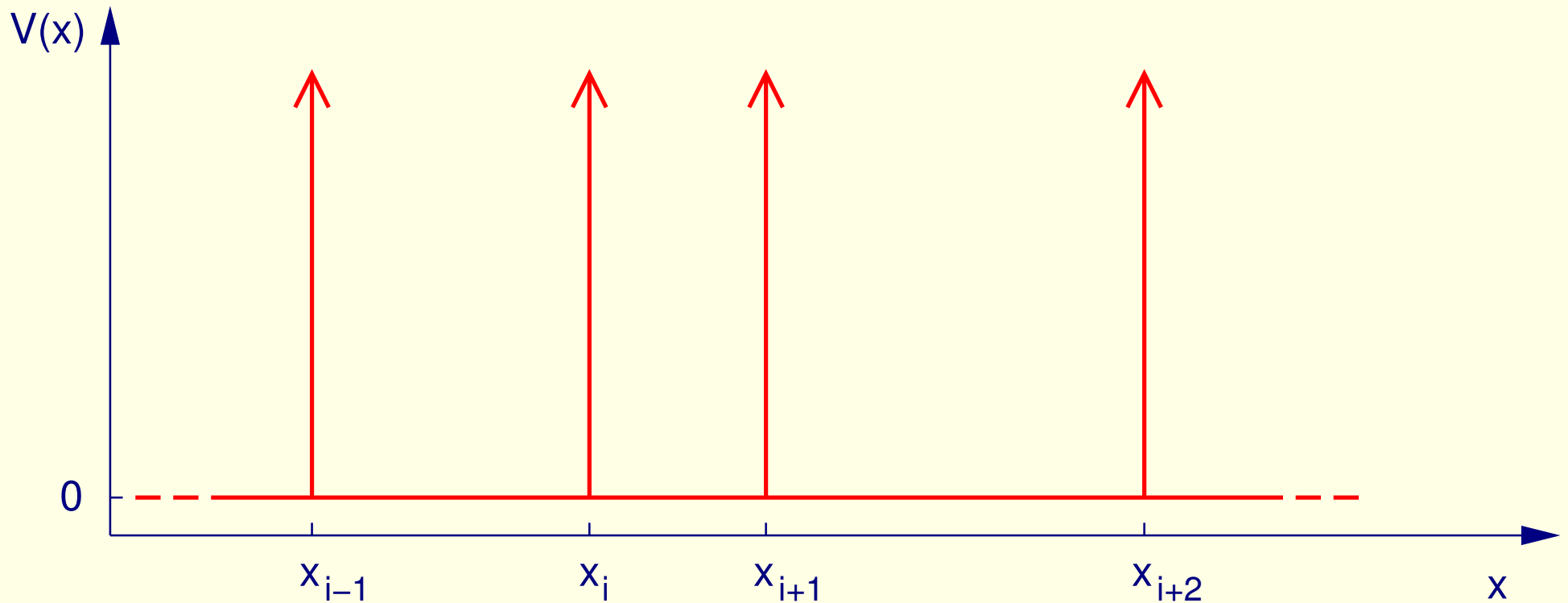
$$b \rightarrow 0, \quad V_0 \rightarrow \infty$$



... modyfikacja dopuszczająca przypadkowe położenia x_i

$$V(x) = V_0 b \sum_i \delta(x - x_i)$$

→ "Liquid Kronig-Penney" (η – par. nieporządku)



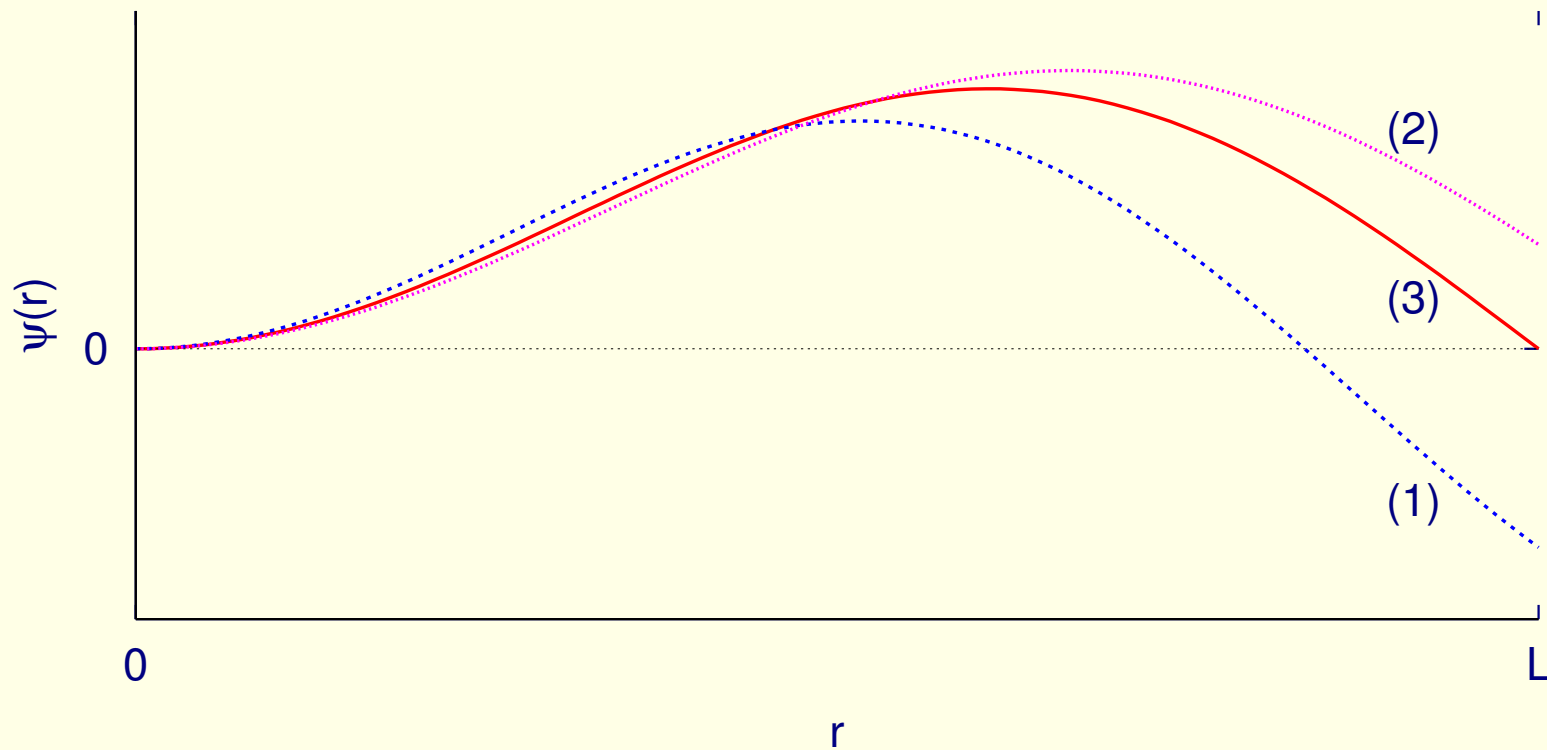
2.1 Wyznaczanie funkcji falowej

Rozwiązywanie równania Schrödingera dla użytego modelu:

- rozwiązania w poszczególnych studniach potencjału wyznaczone analitycznie,
- sklejenie rozwiązań w węzłach x_i (pochodna ma skok),

- narzucenie warunków brzegowych

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$



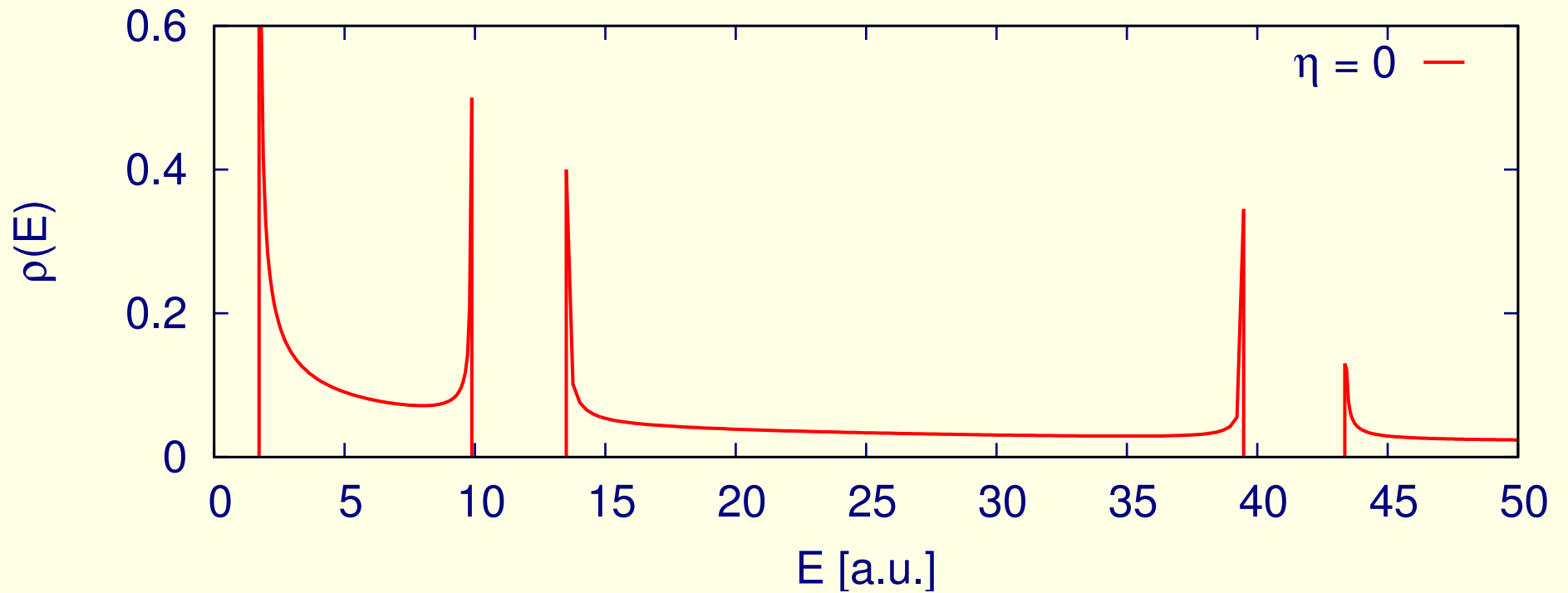
2.2 Wyznaczanie gęstości stanów

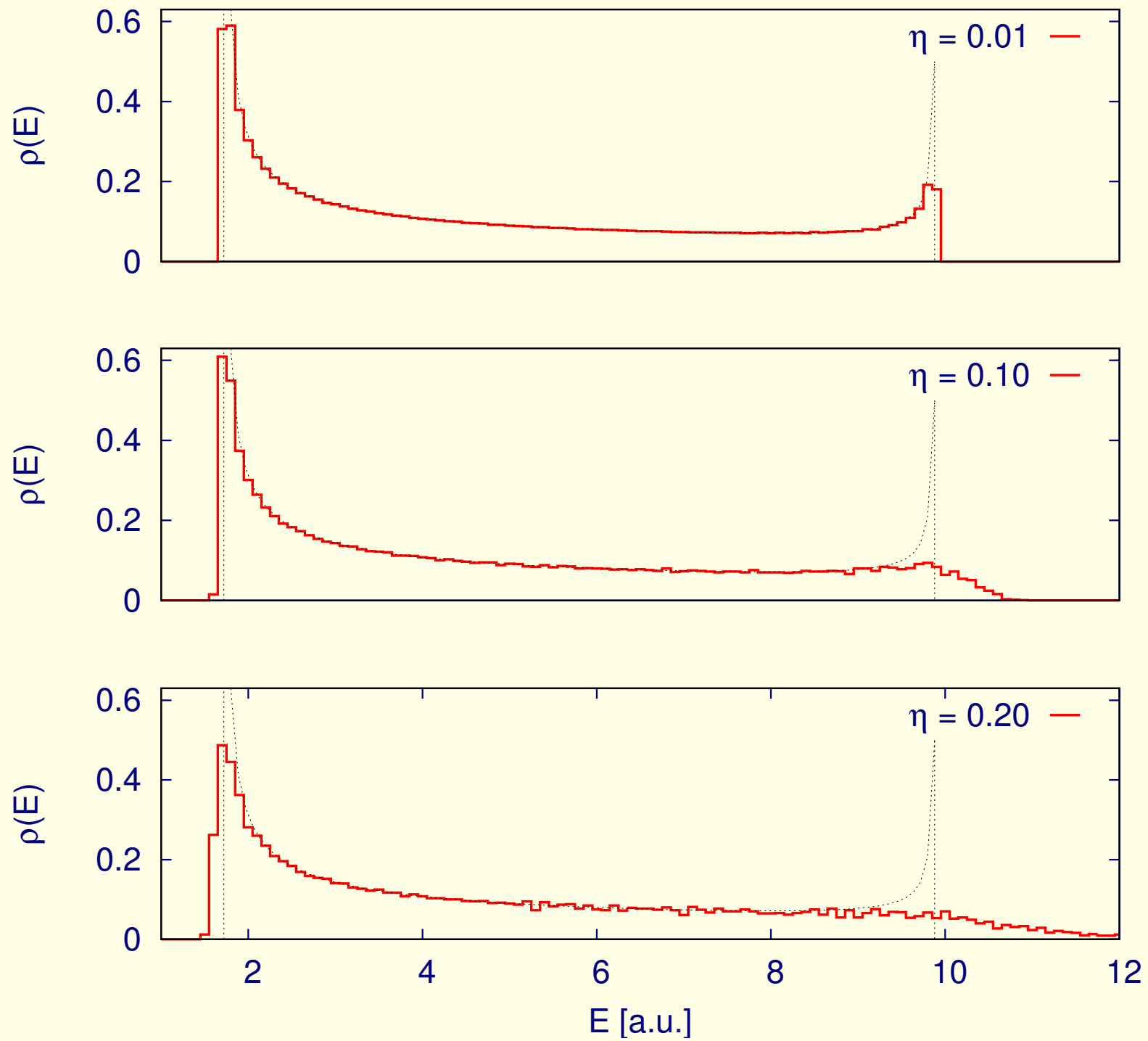
- konstrukcja $\psi(x)$,
- w przypadku $D = 1$ liczba zer funkcji falowej odpowiadającej wartości własnej ε jest równa liczbie stanów o energiach nie większych niż ε .

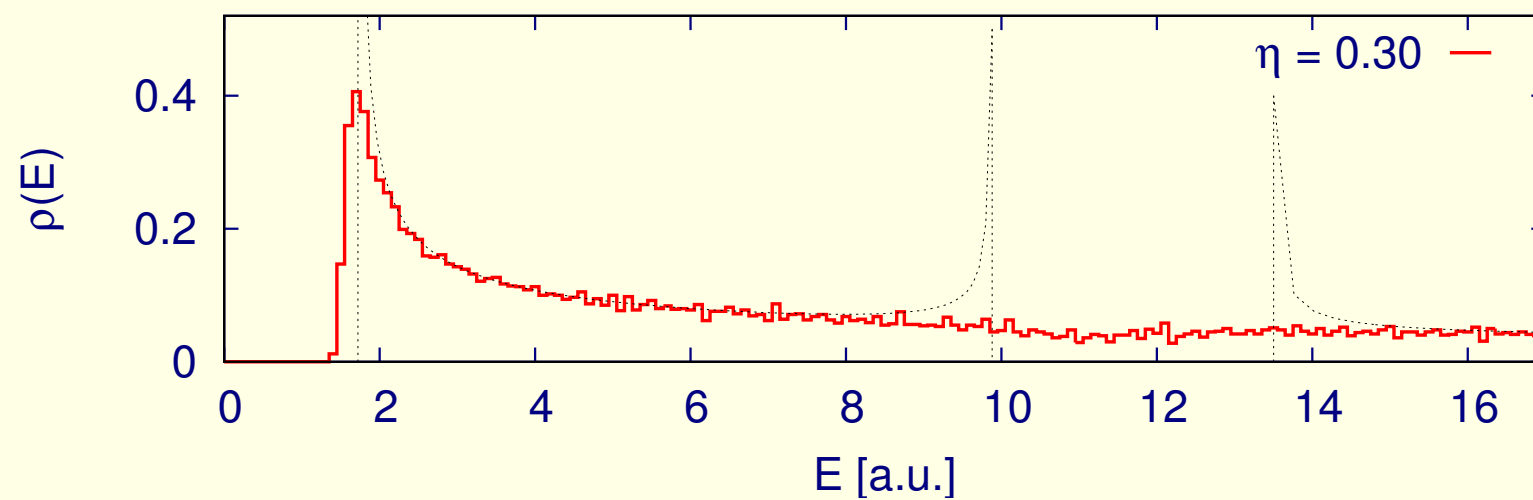
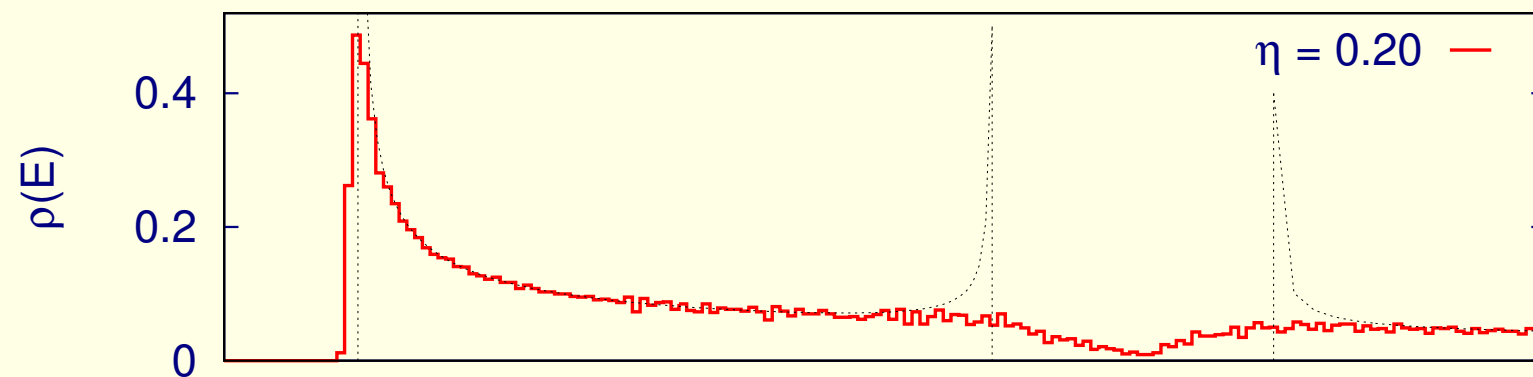
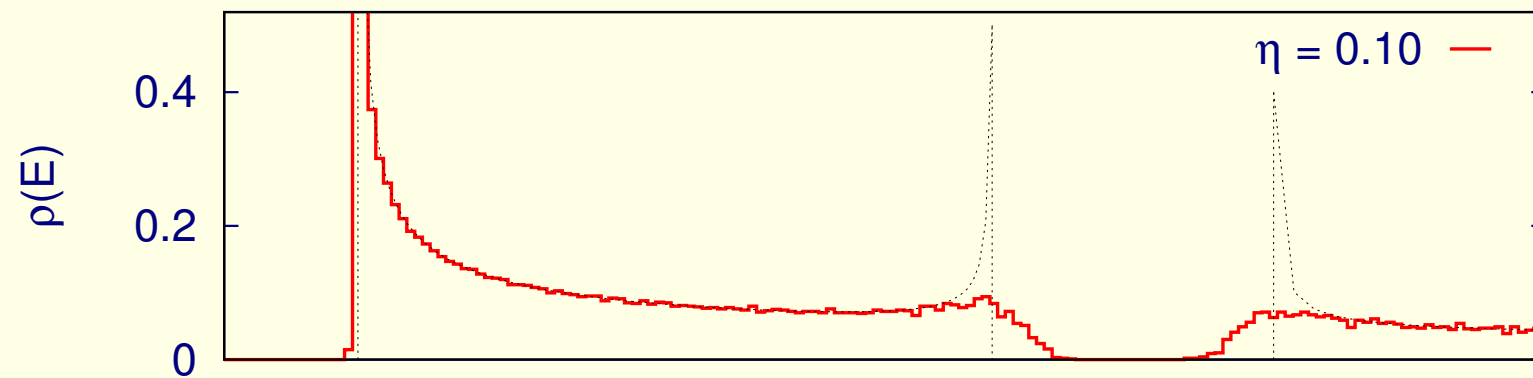
→ wystarczy zliczać miejsca zerowe $\psi(x)$

3 Funkcja gęstości stanów

Układ uporządkowany ($\eta = 0$)



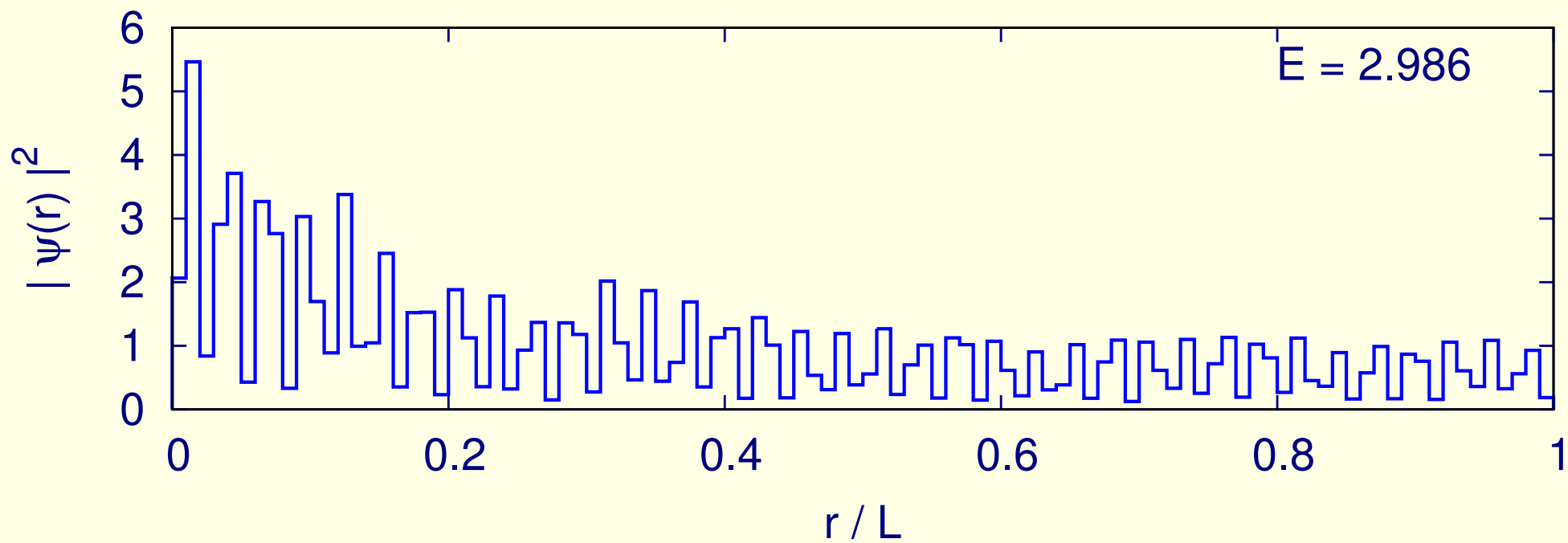
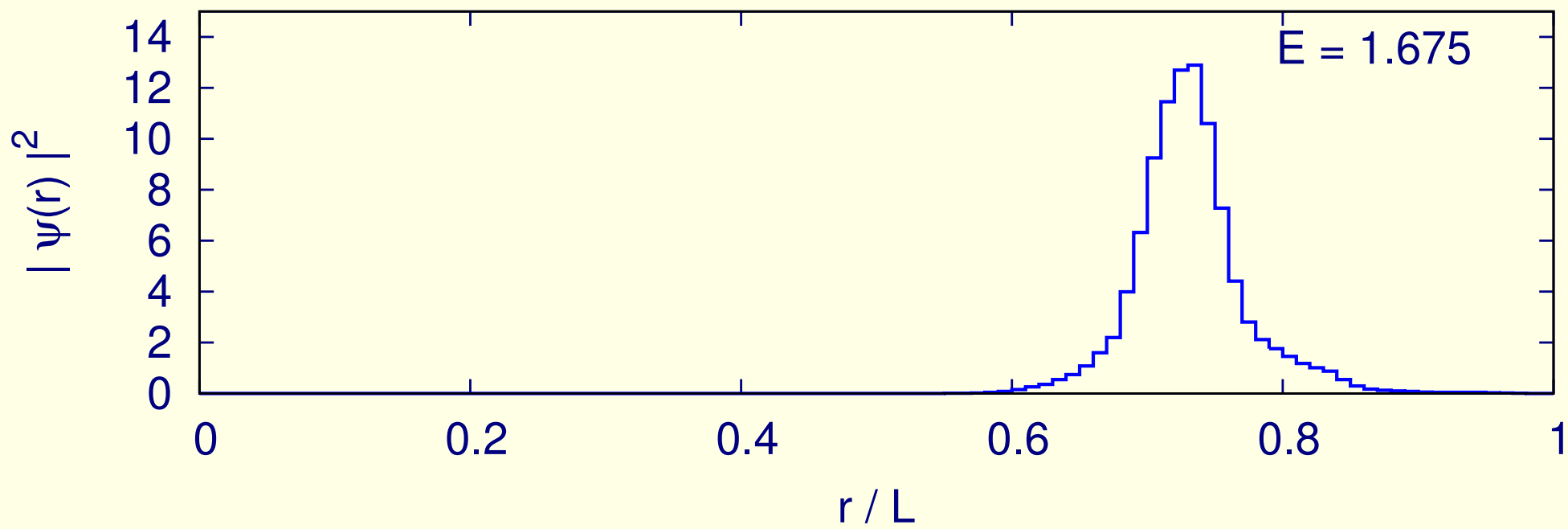


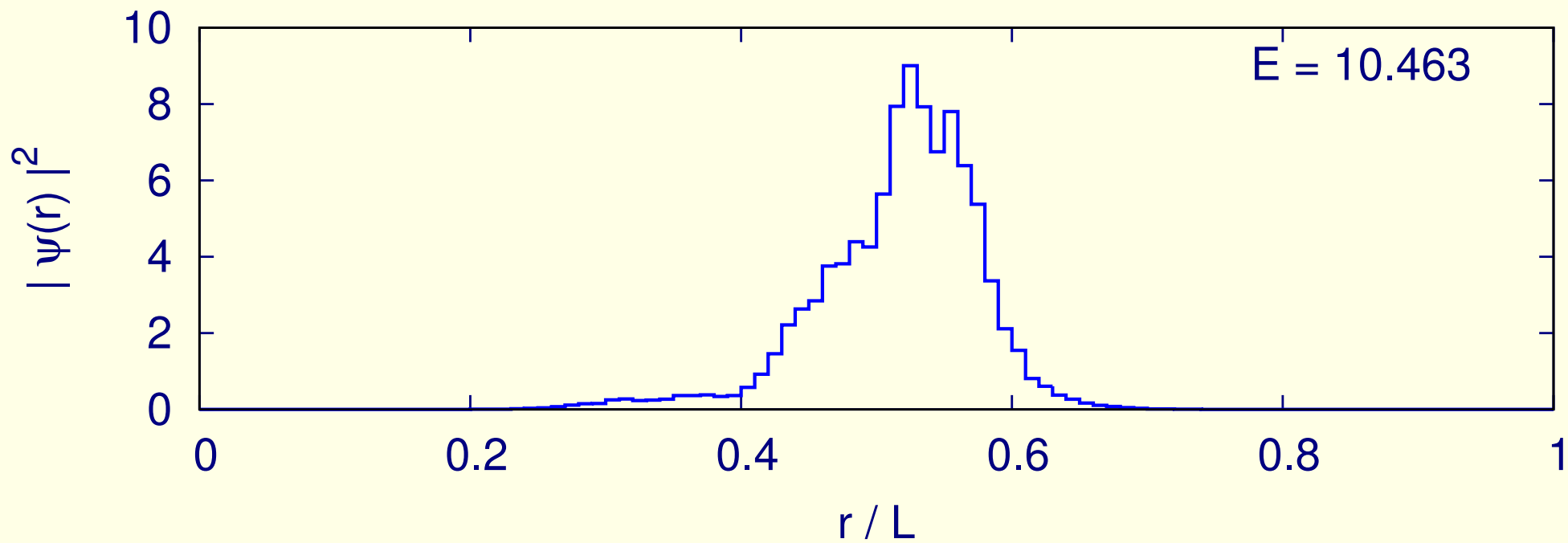
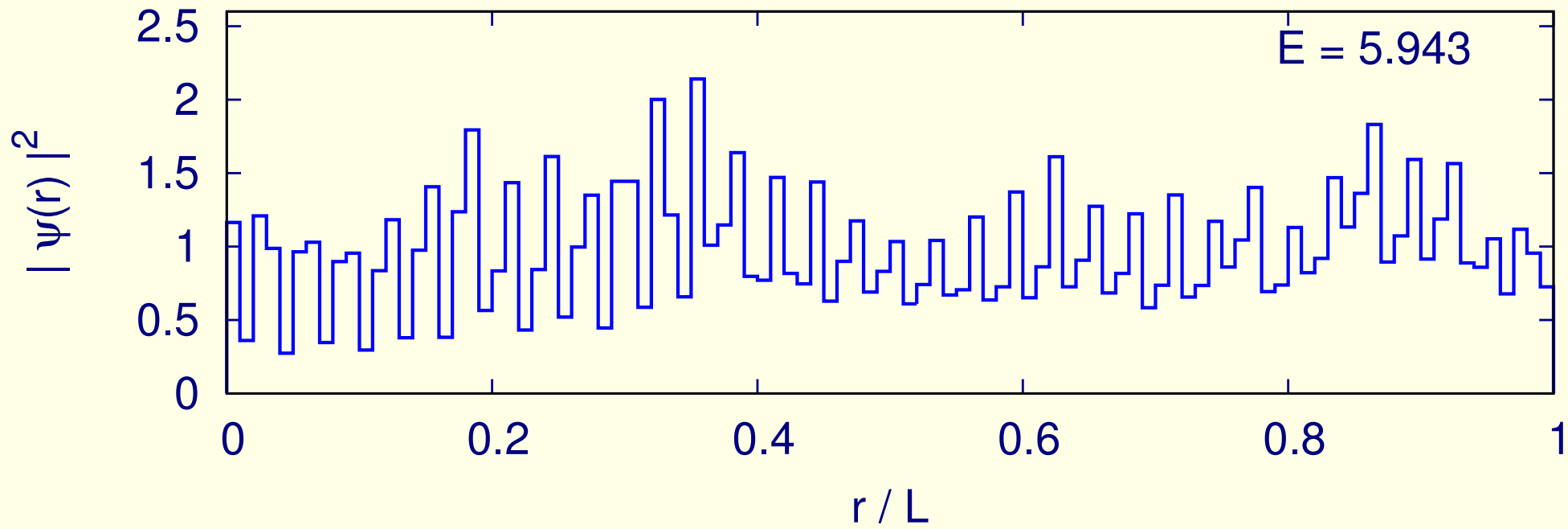


4 Lokalizacja funkcji falowej

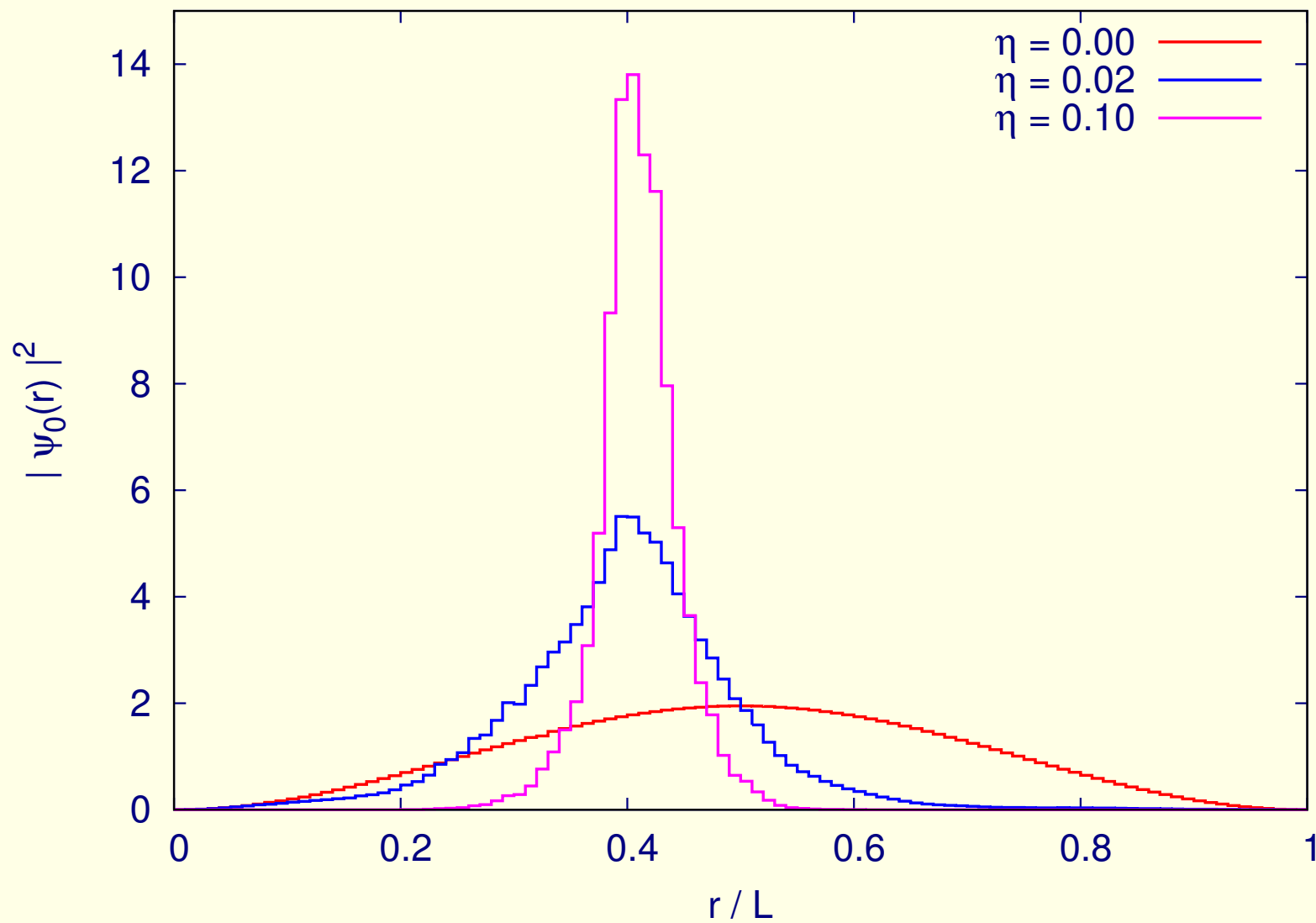
- stany zlokalizowane w obszarze tzw. "ogonów"
funkcji gęstości stanów $\rho(E)$
- stany zdelokalizowane bliżej środka pasma

(wyniki dla $\eta = 0.1$)





4.1 Stan podstawowy



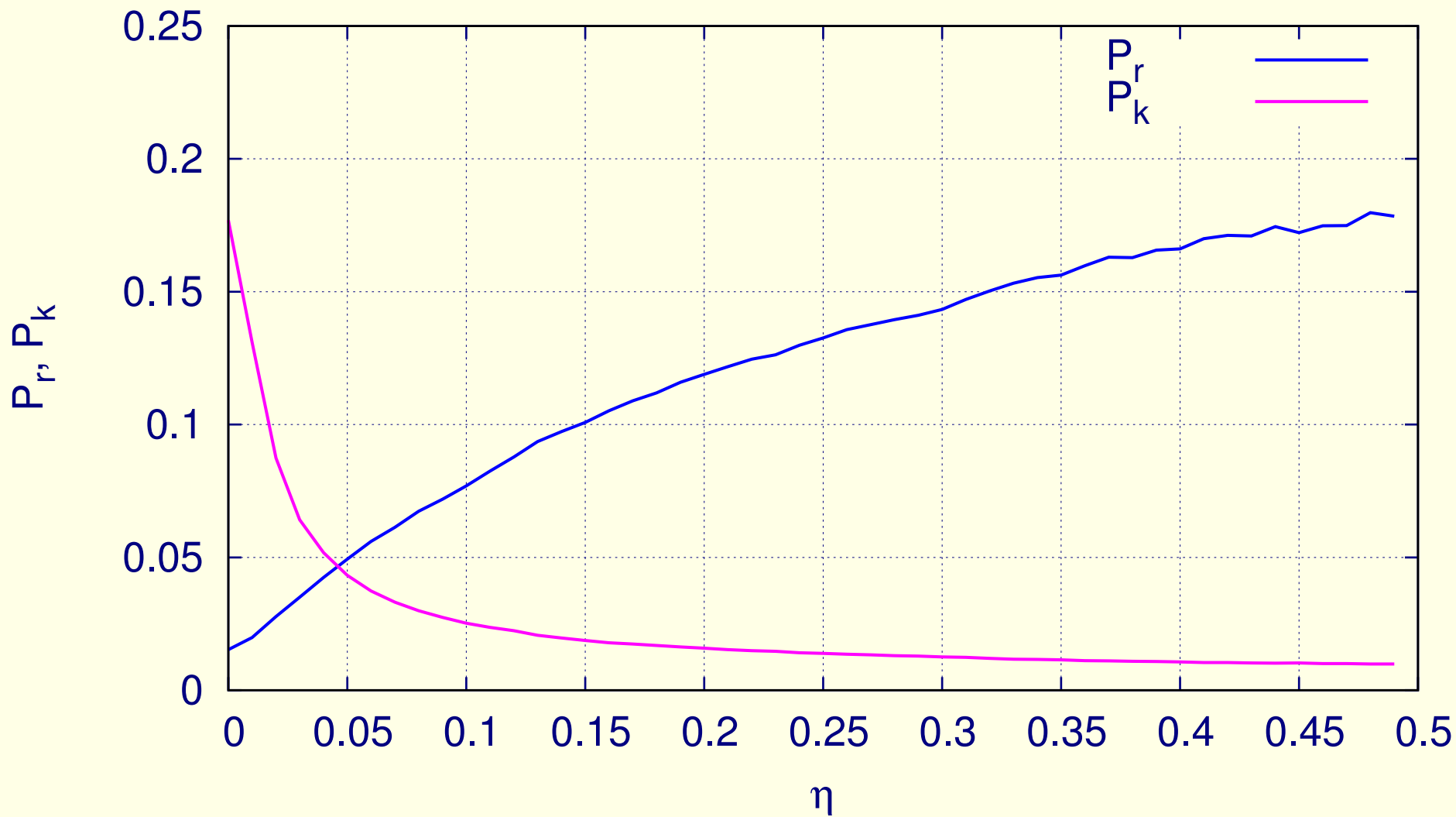
4.2 Analiza ilościowa

Miara lokalizacji – parametr IPR (Inverse Participation Ratio) w przestrzeni położeniowej

$$P_r = \int |\psi(r)|^4 dr$$

i odwrotnej

$$P_k = \int |\tilde{\psi}(k)|^4 dk$$



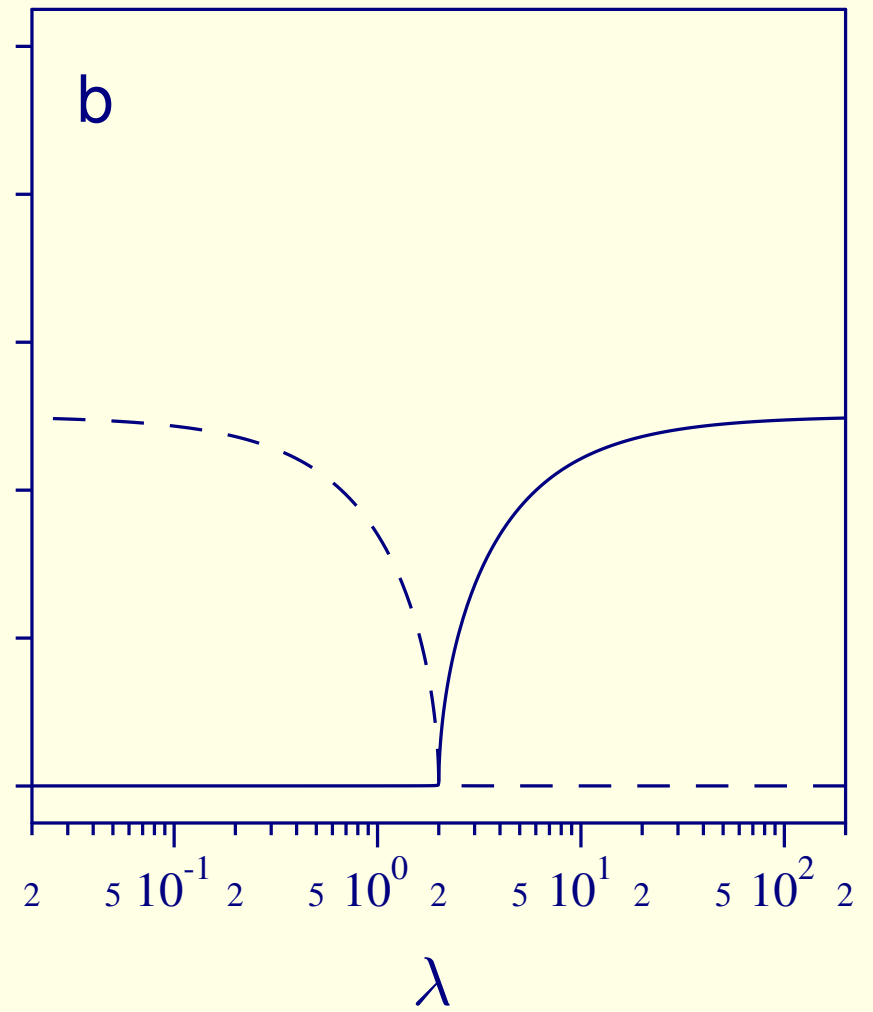
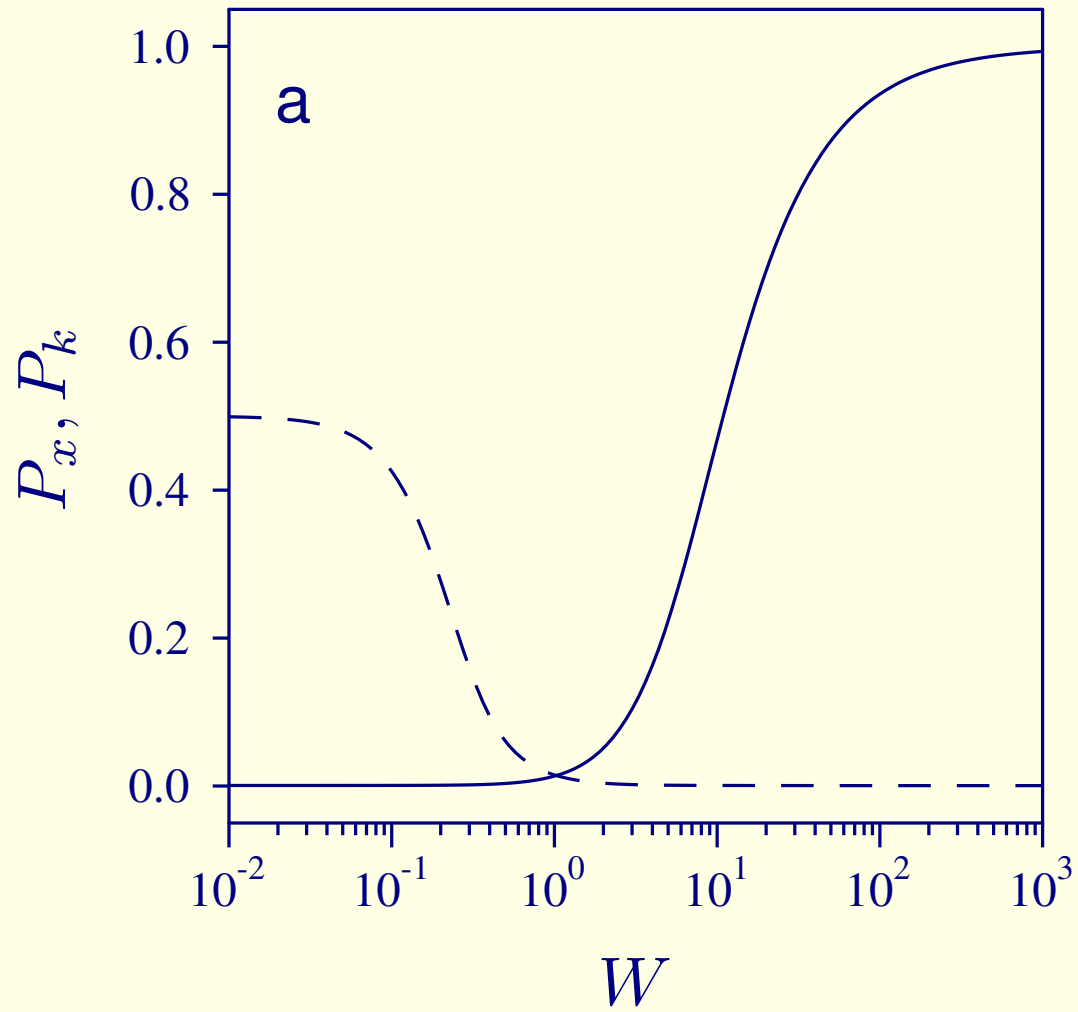
4.3 Porównanie z innymi modelami

- model Andersona

$$H = - \sum_n (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) + \\ + W \sum_n v_n |n\rangle\langle n|$$

- model Aubry-André

$$H = \sum_n (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) + \\ + \lambda \sum_n \cos(2\pi\beta n) |n\rangle\langle n|$$



5 Lokalizacja w przestrzeni fazowej

Funkcja rozkładu (funkcja Husimiego)

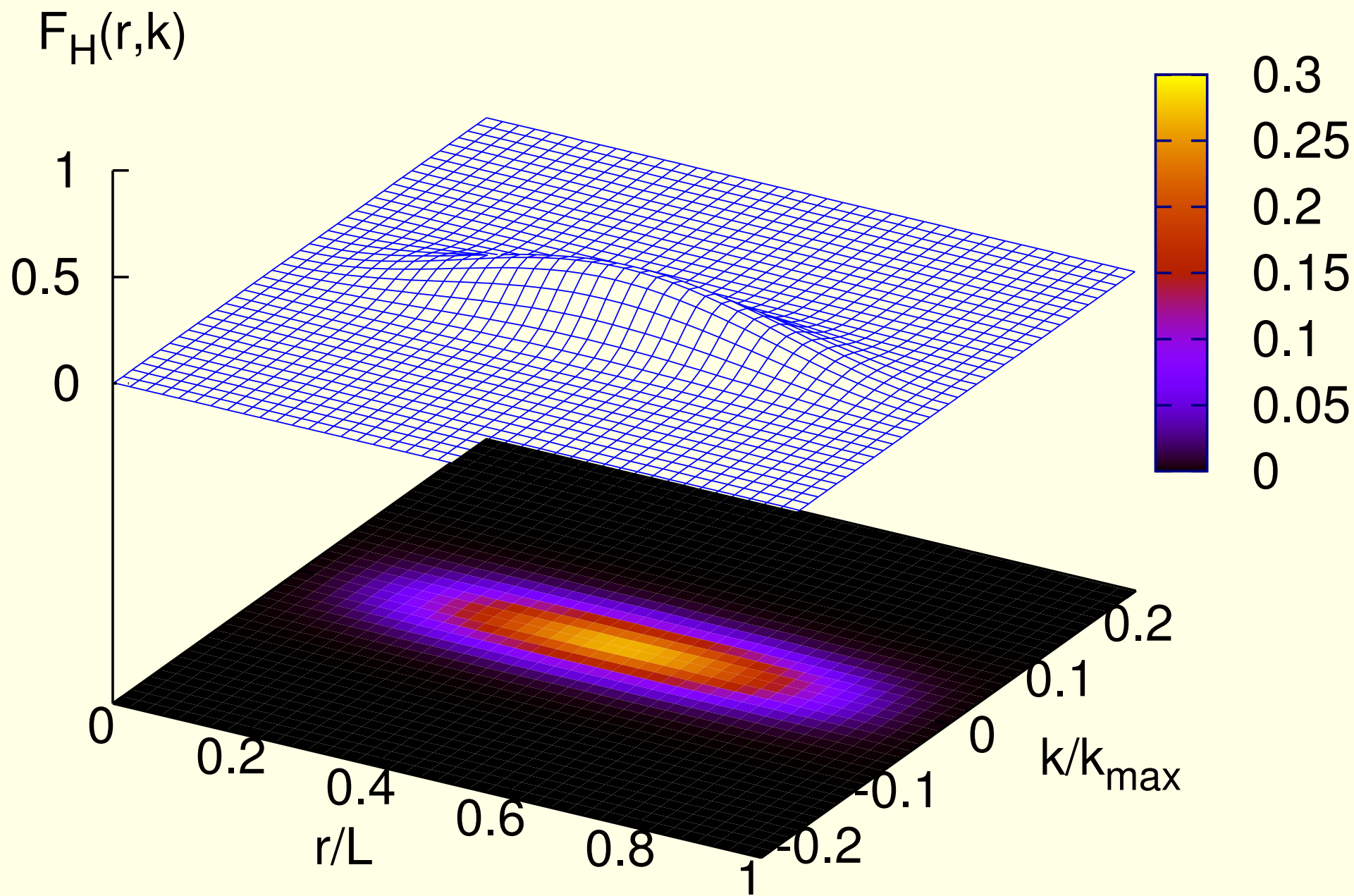
$$F_H(r, k) = \left| \int dr' \langle r, k | r' \rangle \langle r' | \psi \rangle \right|^2 =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left| \int \exp \left[-\frac{(r - r')^2}{4\sigma^2} + ikr' \right] \psi(r') dr' \right|^2$$

Miara lokalizacji

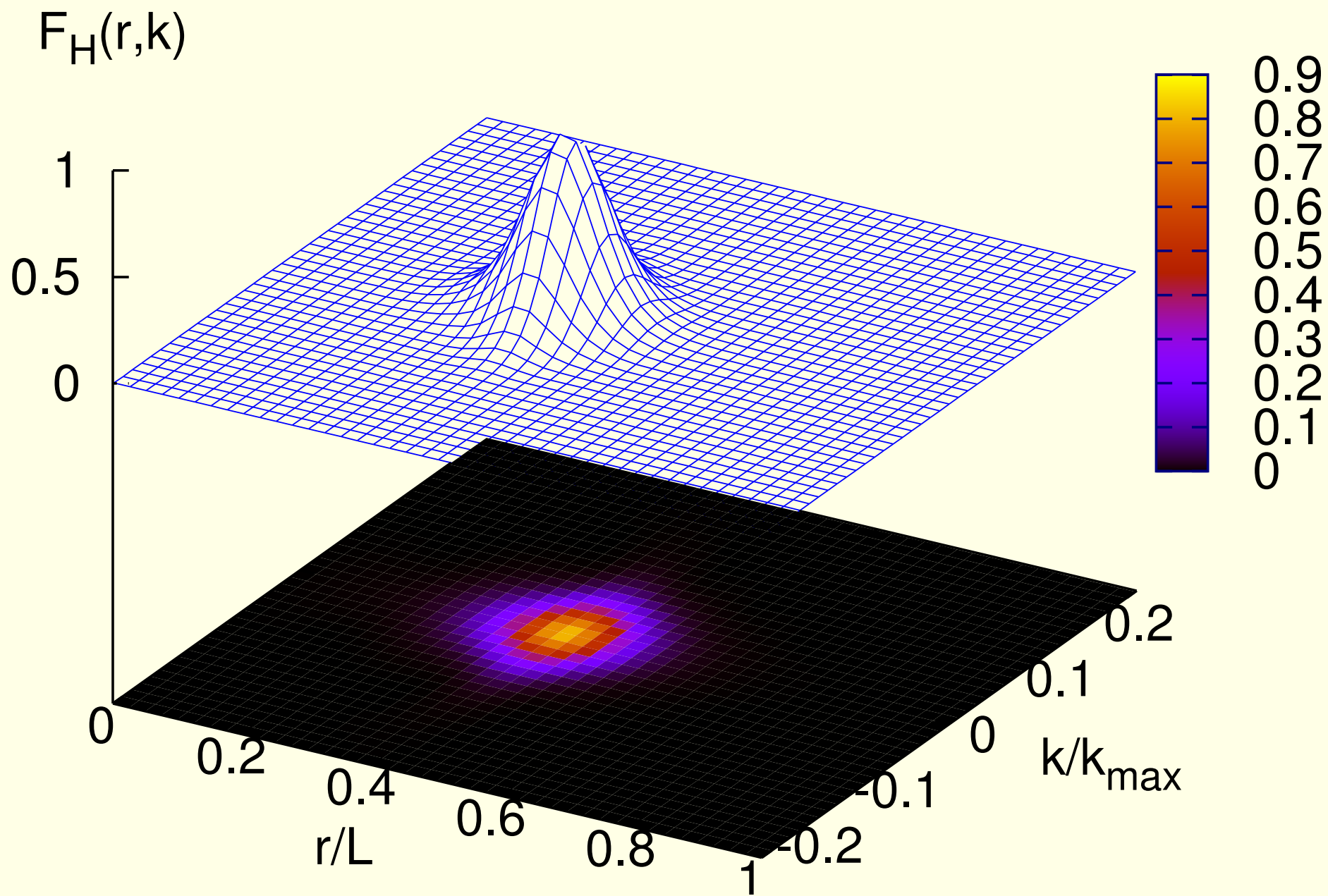
→ parametr IPR dla przetrzeni fazowej

$$P_{r,k} = \int \frac{|F_H(r, k)|^2}{2\pi} dr dk$$

$\eta = 0.00$



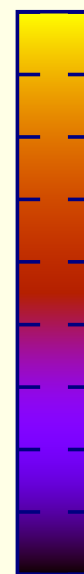
$\eta = 0.05$



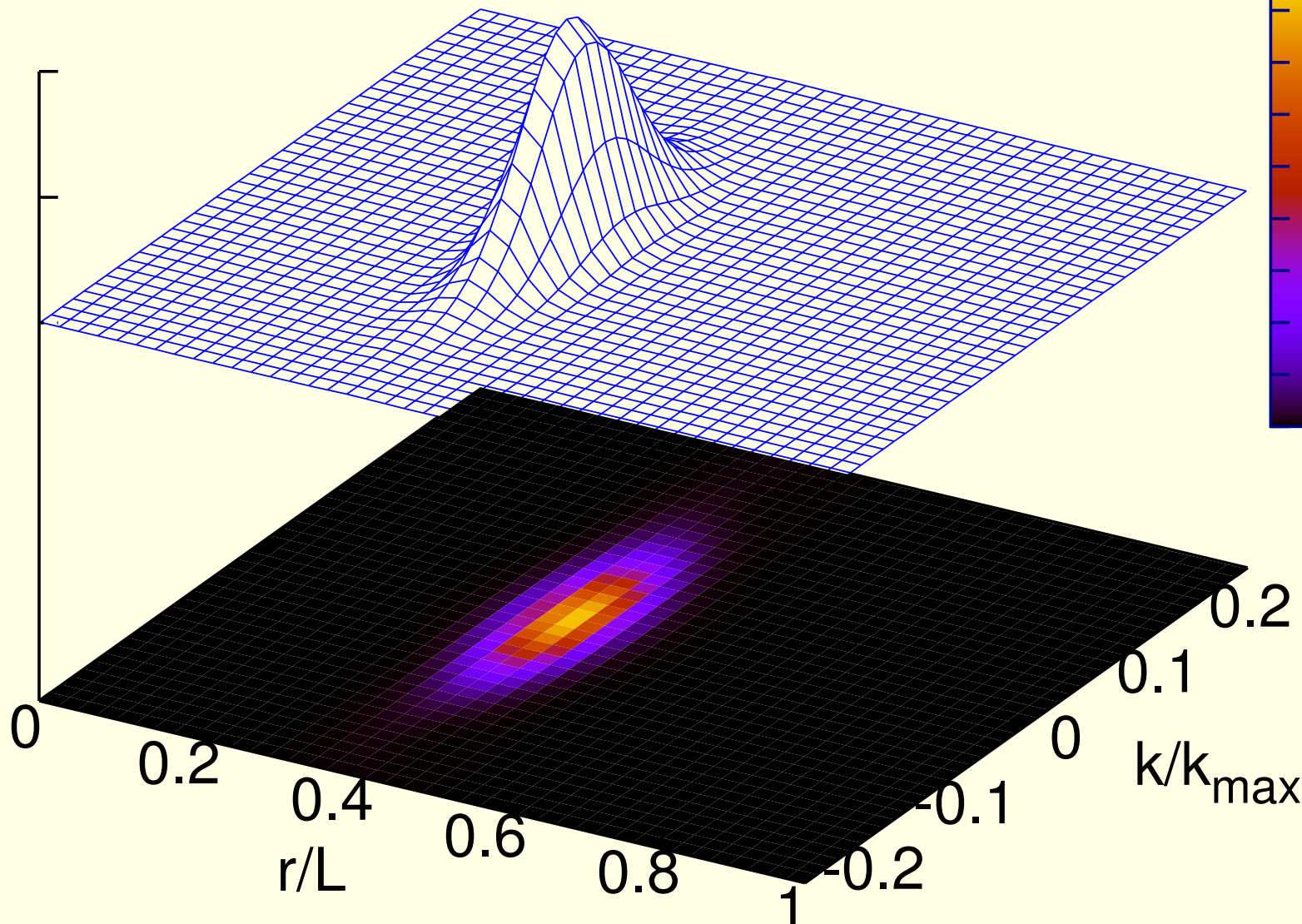
$\eta = 0.40$

$F_H(r,k)$

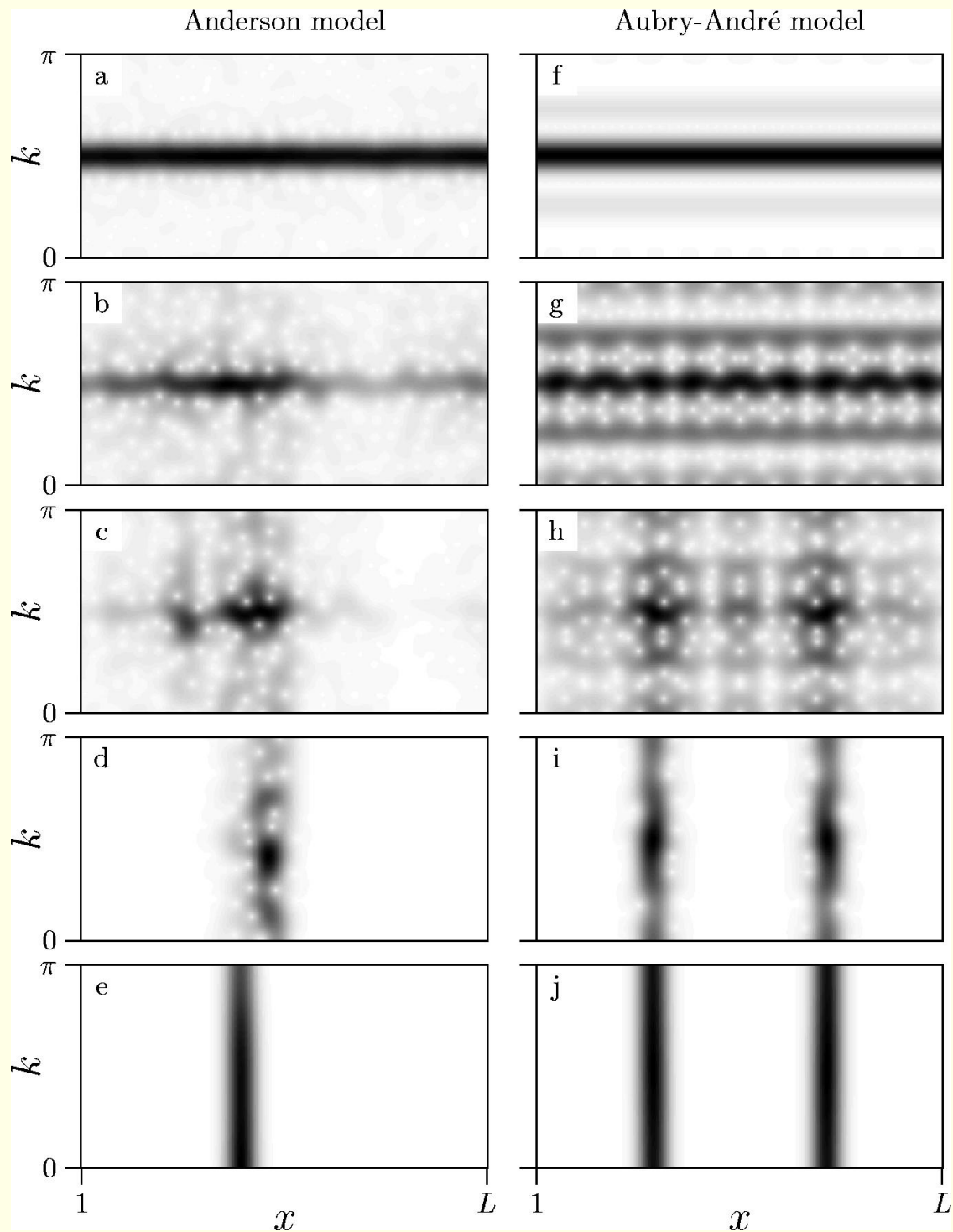
1
0.5
0

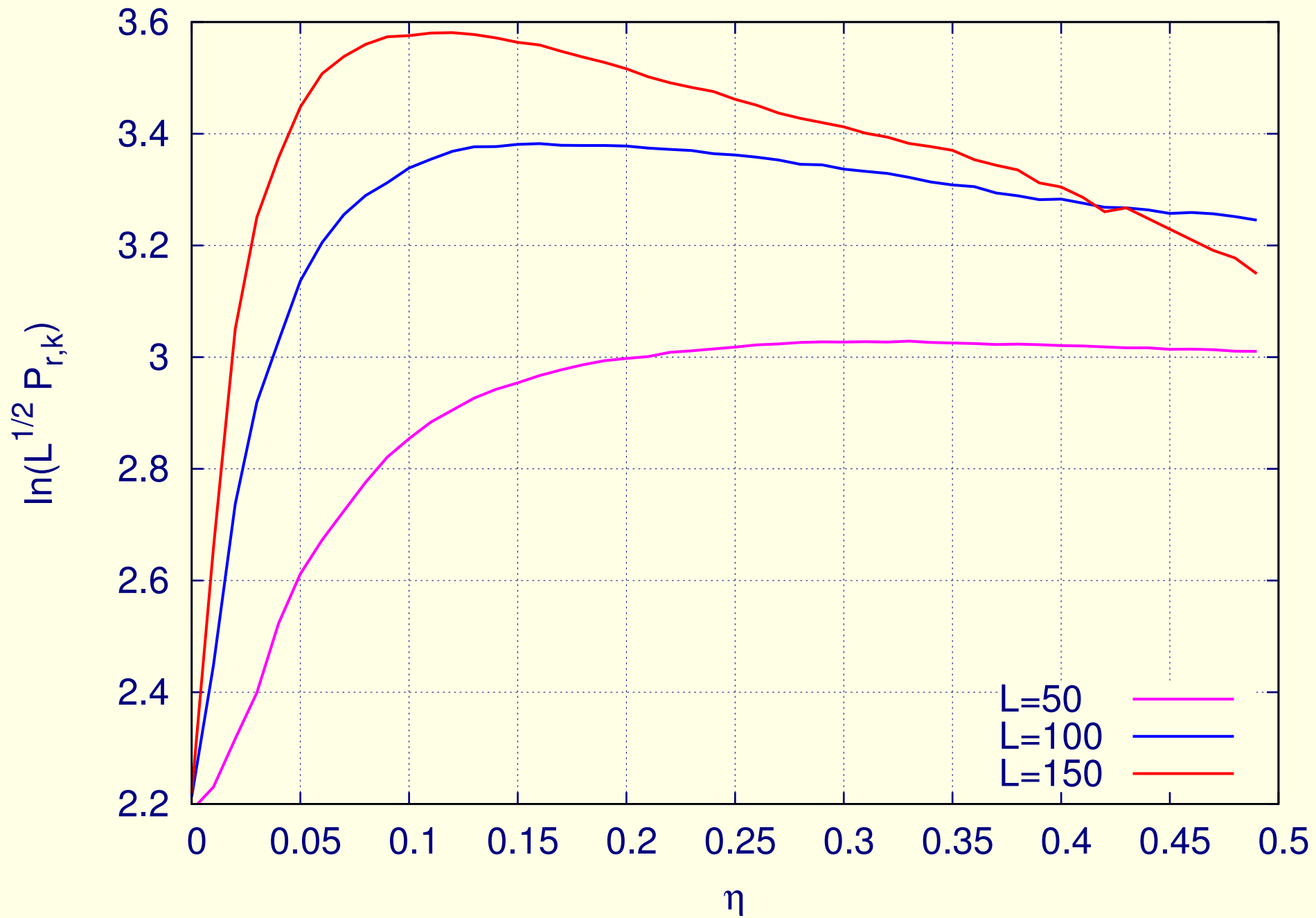


0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0

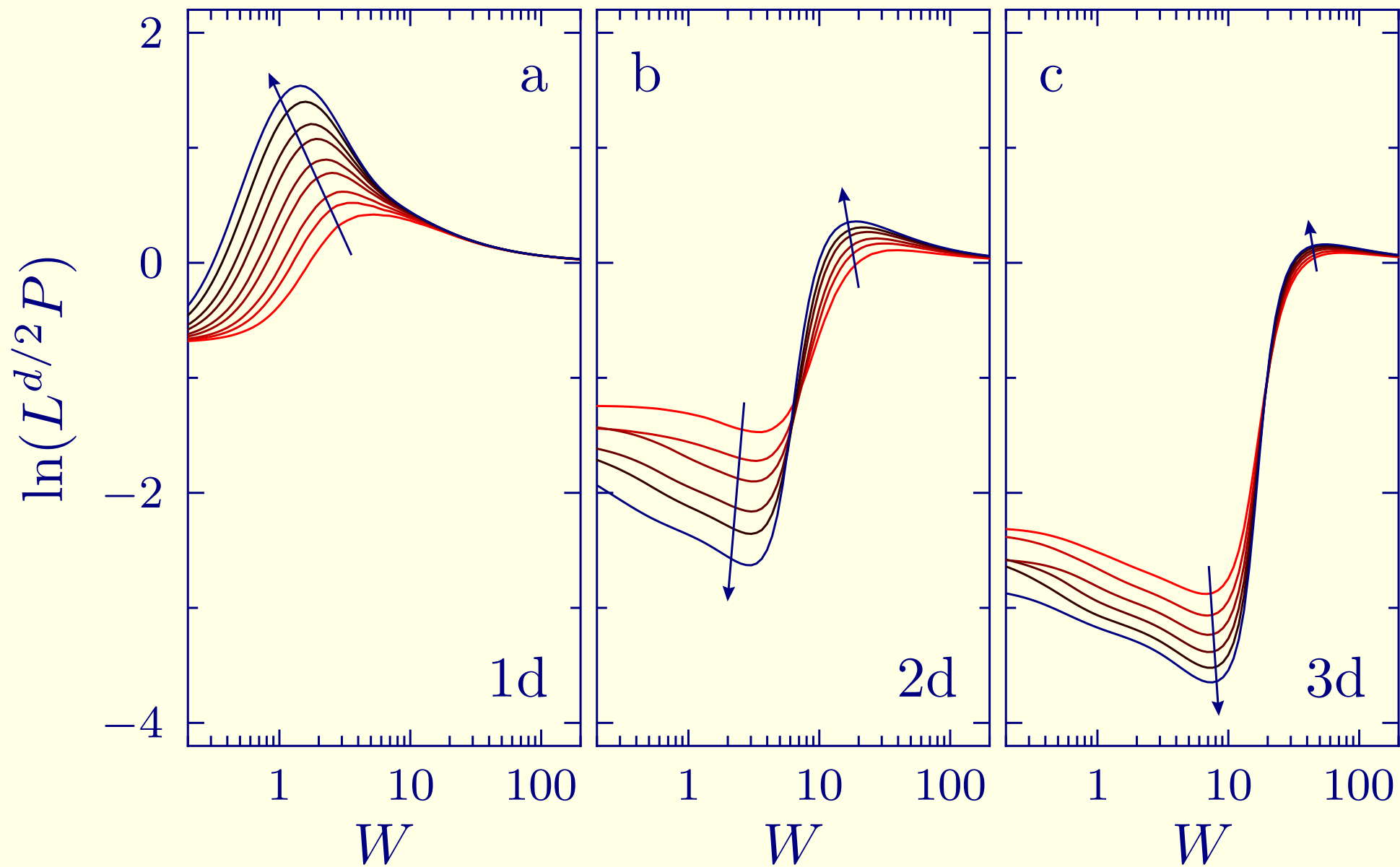


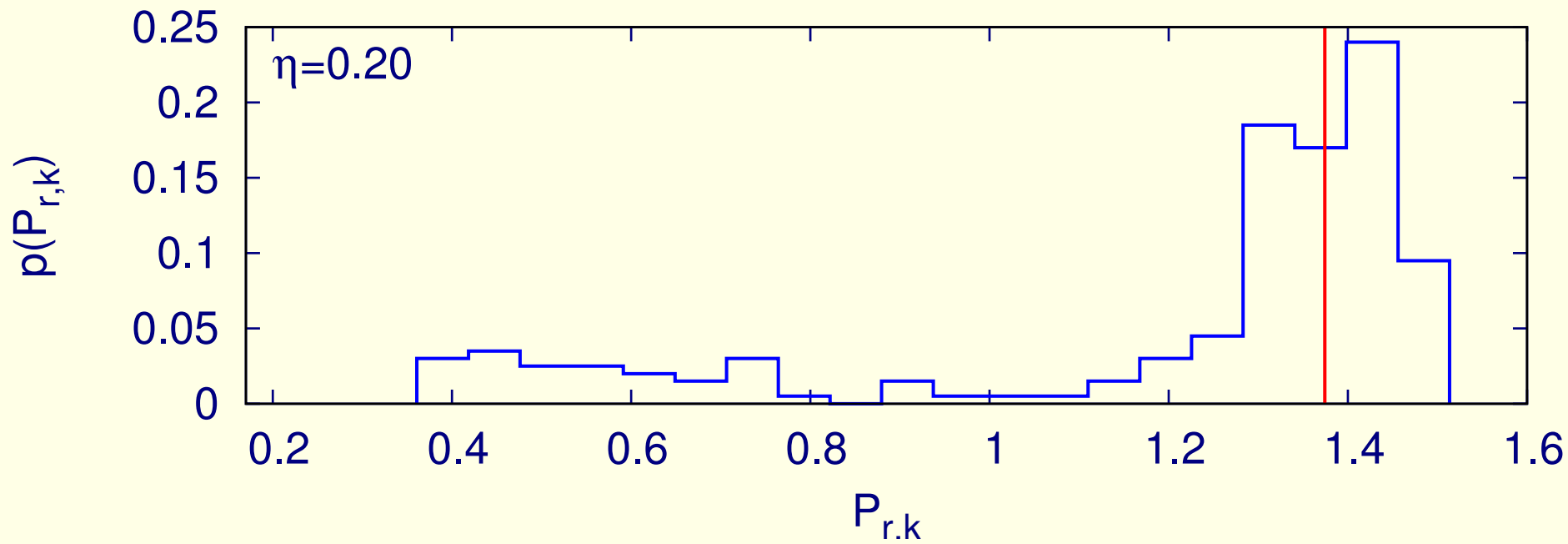
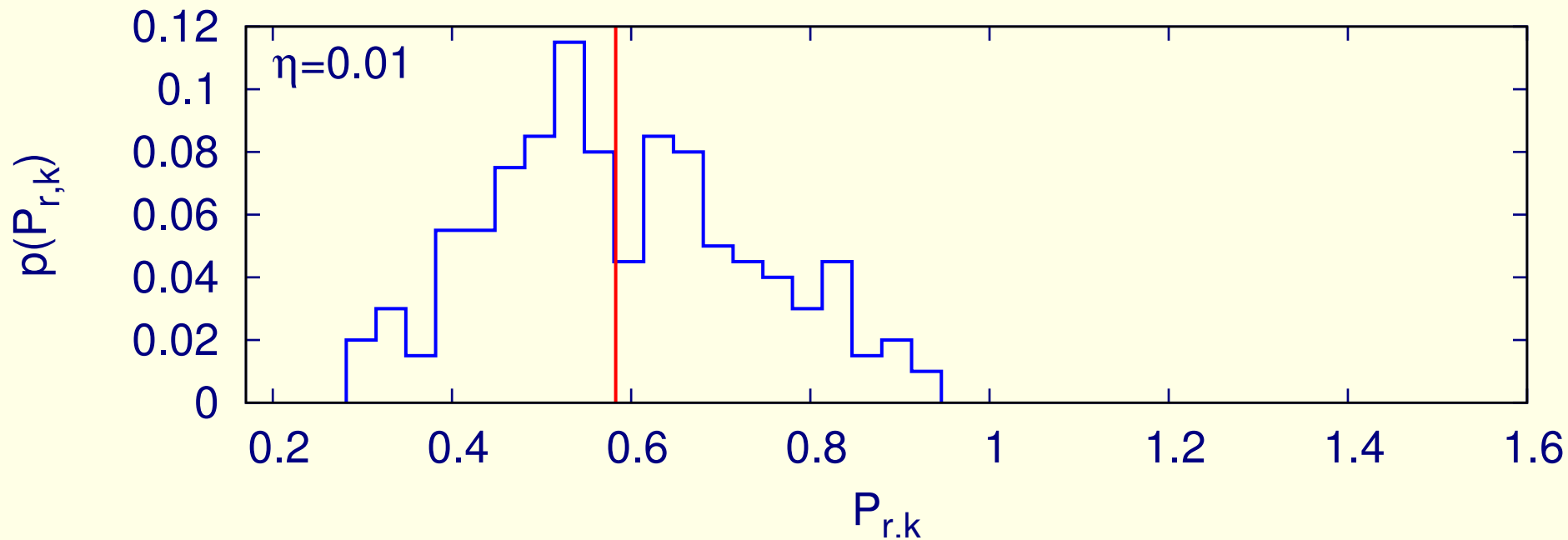
$F_H(x, k)$ [Ingold *et al.*]

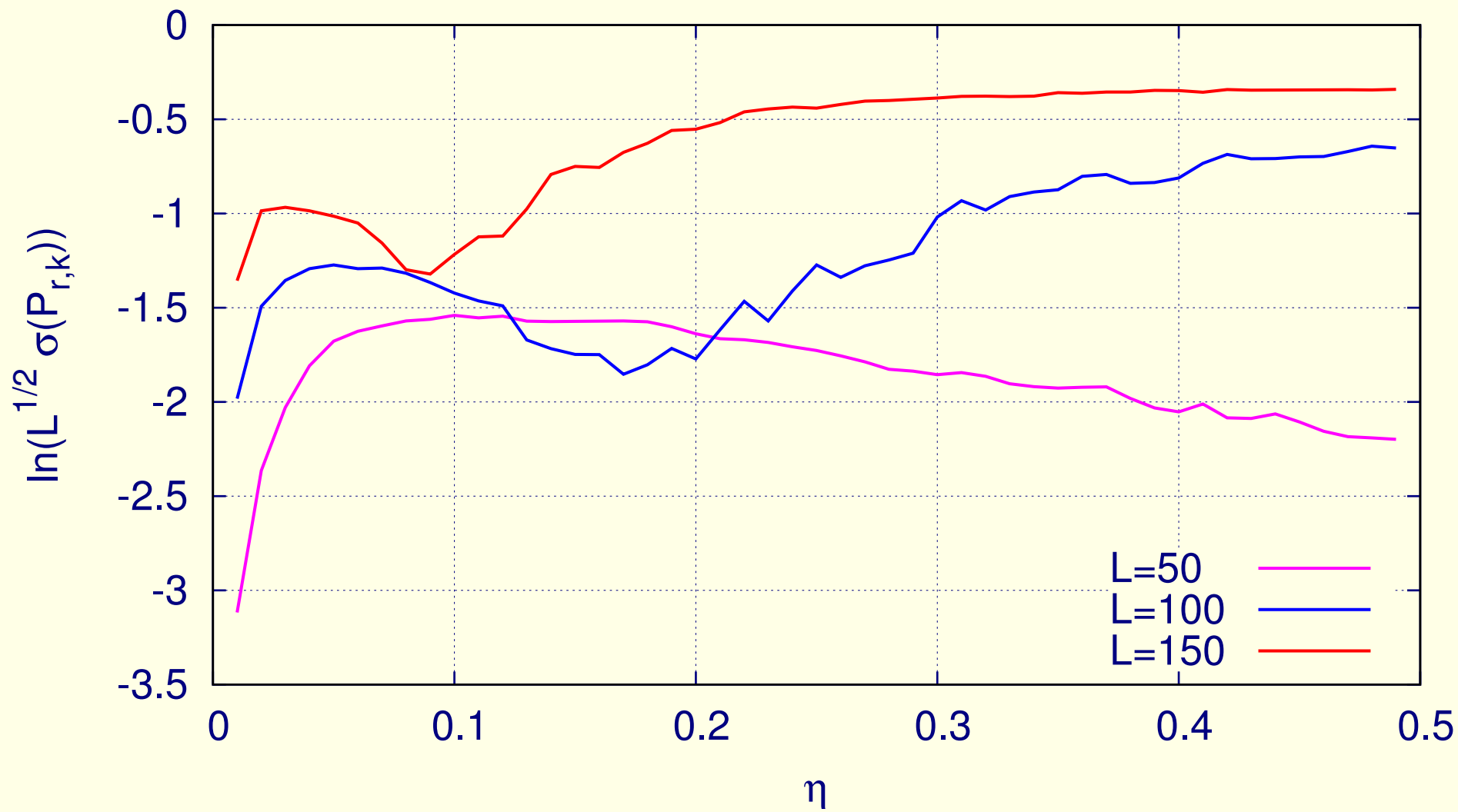




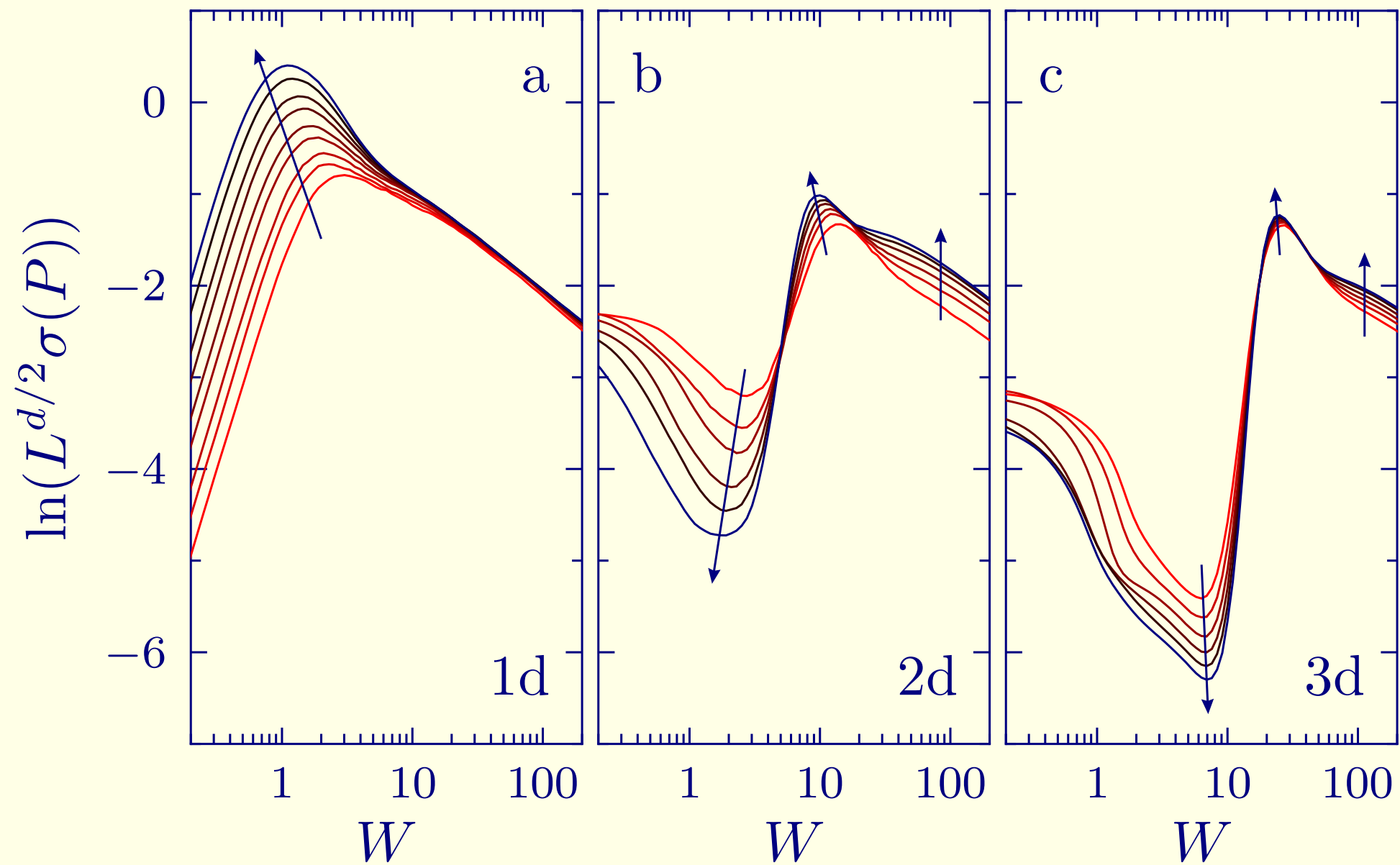
Model Andersona [Wobst *et al.*, Phys.Rev.B **68** (2003) 85103]







[Wobst *et al.*, 2003]



6 Ograniczenia numeryczne

- Dla dużych L oraz/lub dużych η nie zawsze jest możliwe wyznaczenie wartości własnych energii oraz funkcji falowych.

Procedura wyliczania ψ nie jest w takim przypadku zbieżna.

7 Podsumowanie

- Użyty modelowy potencjał umożliwia wyliczenie struktury elektronowej: wyznaczenie poziomów en., funkcji własnych, funkcji gęstości stanów elektronowych.
- Ilustracja modyfikacji $\rho(E)$ wraz ze zmieniającym się stopniem nieporządku.
- Szczegółowy opis procesu lokalizacji stanów elektronowych w zależności od η .