

## جایگزیدگی الکترون و گذار فاز فلز - عایق در زنجیر یک بعدی اتمها

ایوب اسماعیل پور<sup>۱</sup> و مهدی اسماعیل زاده<sup>۱</sup>

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

۲. گروه فیزیک، دانشگاه شهید رجایی، تهران

(دریافت مقاله: ۸۴/۳/۱۸ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۴/۱/۱)

### چکیده

در این مقاله، طول جایگزیدگی الکترون برای یک زنجیر یک بعدی، با توزیع انرژی کاتوره‌ای برای آلیاژ دوتایی در تقریب بستگی قوی به صورت عددی محاسبه شده، و نشان داده شده است که برای یک زنجیر یک بعدی با طول محدود، با افزایش تراکم ناخالصی طول جایگزیدگی کاهش می‌یابد و با افزایش بیشتر آن، طول جایگزیدگی از طول سیستم کوچکتر شده و گذار فاز فلز - عایق رخ می‌دهد. همچنین نشان داده شده است که اگر توزیع ناخالصی دارای نظم معینی باشد، تابع موج الکترون توسط حالت‌های گسترده داده می‌شود؛ در نتیجه سیستم همواره رسانا باقی می‌ماند.

واژه‌های کلیدی: جایگزیدگی، آلیاژ دوتایی کاتوره‌ای، گذار فاز فلز - عایق

### ۱. مقدمه

الکترونی سیستم‌های یک بعدی وجود دارد. یکی از آنها روش تابع گرین است که به صورت گسترده از آن برای حل سیستم‌های یک بعدی استفاده می‌شود [۸ و ۹]. در این روش قسمت حقیقی تابع گرین، طول جایگزیدگی و قسمت موهومی آن، چگالی حالت‌های انرژی را می‌دهد. می‌توان از این روش برای محاسبه رسانایی سیستم استفاده کرد. روش دیگر، استفاده از ماتریس انتقال است که می‌توان با محاسبه ماکزیم نمای لیاپانوف، طول جایگزیدگی را محاسبه نمود [۲، ۷ و ۱۰]. محاسبه تحلیلی نمای لیاپانوف بسیار مشکل است و تاکنون فقط برای بی‌نظمی‌های ضعیف به صورت بسط اختلالی برای مدل اندرسون یک بعدی به کار برده شده است [۱۱ و ۱۲]. توضیح اینکه بسط اختلالی برای بی‌نظمی‌های ضعیف معتبر است [۷ و ۱۲].

در این مقاله تابع موج الکترون با استفاده از روش ماتریس انتقال برای یک سیستم یک بعدی آلیاژ دوتایی کاتوره‌ای

مطابق نظریه بلاخ، توابع موج الکترونی در بلورهای کامل، همواره گسترده هستند [۱]. بنابراین امکان حرکت الکترون در کل بلور وجود دارد. این حالت‌های گسترده باعث رسانایی الکترونی در جامد می‌شوند. با افزودن ناخالصی به سیستم از رسانایی الکترونی به دلیل جایگزیدگی شدن تابع موج الکترون کاسته می‌شود [۲-۴]. با استفاده از محاسبه طول جایگزیدگی می‌توان خواص الکترونی سیستم را بررسی نمود [۱]. اگر طول جایگزیدگی از طول سیستم بزرگتر باشد حالت‌های الکترونی، حالت‌های گسترده می‌شوند که رسانایی سیستم را توصیف می‌کنند [۵ و ۶]. اگر از طول جایگزیدگی کاسته شود به طوری که از طول سیستم کوچکتر شود، به دلیل اینکه تابع موج الکترون به ناحیه معینی از سیستم محدود می‌شود، رسانایی سیستم صفر می‌شود که به گذار فاز فلز - عایق مشهور است [۷]. روش‌های مختلفی برای مطالعه خواص

$$E\psi_n = V_{n,n-1}\psi_{n-1} + \varepsilon_n\psi_n + V_{n,n+1}\psi_{n+1} \quad (2)$$

که  $E$  ویژه مقدار انرژی و  $\psi_n$  تابع موج الکترون در جایگاه  $n$  می‌باشد. در مدل  $(RBA)$  دو نوع اتم  $A$  و  $B$ ، و در نتیجه دو انرژی پتانسیل متفاوت  $\varepsilon_A$  و  $\varepsilon_B$  وجود دارد که  $\varepsilon_A$  و  $\varepsilon_B$  به ترتیب با احتمال  $p$  و  $(1-p)$  در شبکه توزیع می‌شوند. با در نظر گرفتن  $V_{n,n\pm 1} = 1$  در معادله (۲) می‌توان نوشت:

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} = (E - \varepsilon_n) \psi_n \quad (3)$$

اگر ناخالصی در سیستم وجود نداشته باشد، تابع موج الکترون گسترده است و سیستم ترابری الکترونی دارد. در این حالت با در نظر گرفتن  $\varepsilon_n = 0$  در معادله (۳)، ویژه مقدار انرژی توسط معادله زیر داده می‌شود

$$E = 2\cos(ka) \quad (4)$$

که  $a$  ثابت شبکه و برابر  $L/N$  است و  $L$  طول سیستم است. با توجه به اینکه  $1 \leq \cos ka \leq -1$  می‌باشد، بنابراین انرژی الکترون بین  $2$  تا  $-2$  تغییر می‌کند و حالات انرژی در  $E = \pm 2$  تکینه می‌شود [۷]. معادله بستگی قوی برای زنجیر یک بعدی که در آن پتانسیلهای بی‌نظمی وجود دارد را می‌توان با استفاده از ماتریس انتقال فرمول‌بندی کرد، در این حالت معادله شروینگر (۳) را می‌توان به صورت زیر نوشت [۷]:

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = A_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (5)$$

که در معادله بالا،  $A_n$  ماتریس انتقال است و تعریف آن توسط معادله زیر داده شده است

$$A_n = \begin{pmatrix} E - \varepsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

در معادله (۵) ویژه حالت  $\psi$  به صورت گسترده،  $\psi = (\psi_1, \dots, \psi_n, \dots)$  در نظر گرفته شده است.

با توجه به معادله (۵) می‌توان نوشت:

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = A_n A_{n-1} \dots A_1 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

با داشتن مقادیر اولیه  $\psi_0$  و  $\psi_1$ ، می‌توان  $\psi_n$  و  $\psi_{n+1}$  را محاسبه کرد.

$(RBA)$  به صورت عددی محاسبه شده و طول جایگزیدگی الکترون با استفاده از نمای لیاپانف محاسبه گردیده است. این مدل را می‌توان به عنوان مدلی برای زنجیر پلیمرهای بی‌نظم دوتایی  $(RDM)$  نیز به کار برد [۱۴، ۱۳ و ۱۱]. همچنین این مدل برای ساختار الکترونی پروتئینها می‌تواند بکار برده شود [۱۱ و ۱۴].

در بخش ۲ با نوشتن هامیلتونی، توابع موج سیستم را با استفاده از نتایج تقریب بستگی قوی محاسبه می‌نماییم. در بخش ۳ با استفاده از نتایج بخش ۲ به محاسبه نمای لیاپانف و در نتیجه طول جایگزیدگی الکترون می‌پردازیم. نهایتاً در بخش ۴ با استفاده از محاسبات عددی، نتایج را مورد بحث و بررسی قرار می‌دهیم.

در این مقاله همچنین درصد ناخالصی آستانه را برای این گذار فاز به دست می‌آوریم و نشان می‌دهیم که بالای این حد، سیستم عایق شده و پایین آن سیستم فلز می‌شود.

## ۲. هامیلتونی و تابع موج

با استفاده از تقریب بستگی قوی هامیلتونی سیستم را برای یک الکترون می‌توان به صورت زیر نوشت [۱۵]:

$$H = \sum_{n=1}^N \varepsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_{nm} V_{nm} |n\rangle\langle m| \quad (1)$$

که  $N$  تعداد جایگاههای شبکه  $(L = Na)$ ،  $V_{nm}$  همپوشانی توابع موج الکترونی جایگاههای همسایه است و

$$V_{n-1,n} = V_{n,n-1}, \quad V_{n,n+1} = V_{n+1,n}, \\ n = 1, 2, \dots, N.$$

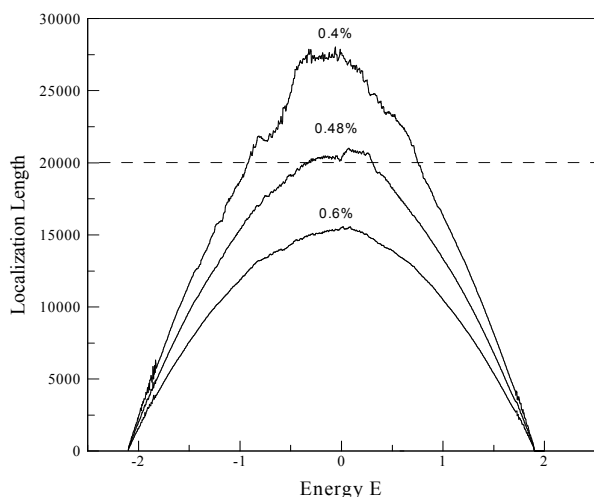
برای یک بلور کاملاً منظم،  $\varepsilon_n$  (انرژی جایگاه  $n$ ) برای تمامی  $n$ ها مقدار یکسانی دارد. در حالی که برای جامدات بی‌نظم،  $\varepsilon_n$ ها یکسان نبوده و دارای توزیع احتمال معینی (مثلاً گاوسی) هستند.

معادله شروینگر را برای هامیلتونی (۱) می‌توان به صورت

زیر نوشت:

۱. Random Binary Alloy

۲. Random Dimmer Model

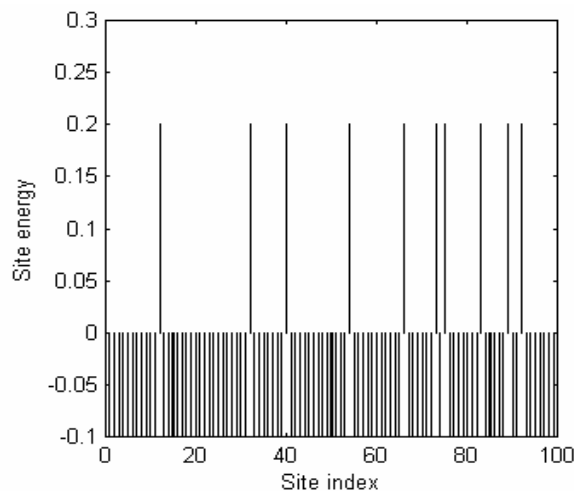


شکل ۲. نمودار رفتار طول جایگزیدگی برحسب انرژی  $E$ ، برای درصدهای مختلف ناخالصی ۰/۴٪، ۰/۴۸٪ و ۰/۶٪. در این شکل طول سیستم  $L = Na = 20000$  در نظر گرفته شده است که توسط خط چین نشان داده شده است. برای این ناخالصیها، سیستم به ترتیب رسانا، در آستانه گذار فاز فلز- عایق و عایق می‌باشد. به این دلیل که برای ناخالصی ۰/۶٪، طول جایگزیدگی کمتر از طول سیستم، و برای ناخالصی ۰/۴٪، طول جایگزیدگی بزرگتر از طول سیستم است.

#### ۴. محاسبات عددی و نتایج

در این بخش با استفاده از معادله (۱۰) طول جایگزیدگی به روش ماتریس انتقال محاسبه می‌شود. ابتدا طول جایگزیدگی برای توزیع ناخالصی کاتوره‌ای بررسی می‌شود. در شکل ۱ توزیع پتانسیل شبکه (انرژی جایگاهی) برحسب شاخص جایگاهی نشان داده شده است. در این شکل توزیع ناخالصی گرفته شده است. همچنین پتانسیل شبکه  $\mathcal{E}_A$  برابر  $\mathcal{E}_B$  برابر ۰/۲ و به صورت کاتوره‌ای با توزیع یکنواخت در نظر گرفته شده است. همچنین پتانسیل شبکه  $\mathcal{E}_A$  برابر ۰/۱- در نظر گرفته شده است.

در شکل ۲ نمودار طول جایگزیدگی بر حسب انرژی، برای تعداد نقاط شبکه برابر  $N = 20000$  و درصد ناخالصیهای مختلف رسم شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش ناخالصی، طول جایگزیدگی کاهش می‌یابد، به طوری که برای ناخالصی ۰/۴٪ سیستم رسانا است در حالی که برای ناخالصی ۰/۶٪ سیستم عایق می‌شود. همچنین مشاهده می‌شود که گذار فاز فلز- عایق برای ناخالصی حدود ۰/۴۸٪ اتفاق می‌افتد.



شکل ۱. نمودار توزیع پتانسیل شبکه (انرژی جایگاهی) برحسب شاخص جایگاهی. همان طور که در این شکل مشاهده می‌شود. پتانسیل شبکه  $\mathcal{E}_A$  برابر ۰/۱- و پتانسیل ناخالصی  $\mathcal{E}_B$  برابر ۰/۲ در نظر گرفته شده است. توزیع ناخالصی  $\mathcal{E}_B$  به صورت کاتوره‌ای و با توزیع یکنواخت در نظر گرفته شده است.

#### ۳. نمای لیاپانف و طول جایگزیدگی

با فرض اینکه تابع موج در فضا به صورت نمایی جایگزیده باشد،  $\psi_n$  را می‌توان برحسب  $\xi$  به صورت زیر نوشت [۷]:

$$|\psi_n| = |\psi_0| e^{-\frac{|n|}{\xi}} \quad (8)$$

که  $\xi$  طول جایگزیدگی است. ماکزیمم نمای لیاپانف،  $\xi^{-1}$ ، را می‌توان به صورت زیر به دست آورد [۱، ۷ و ۱۳]:

$$\xi^{-1}(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left| \ln \left( \frac{\psi_N}{\psi_0} \right) \right| \quad (9)$$

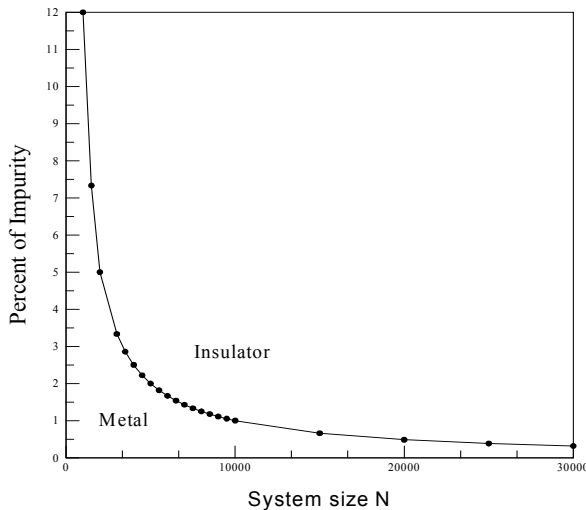
در این محاسبات، برای سهولت، ثابت شبکه  $a$  را برابر یک در نظر می‌گیریم. با استفاده از معادله (۷) طول جایگزیدگی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\xi^{-1}(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left| \ln |P_N| \right| \quad (10)$$

که  $P_N$  حاصل ضرب ماتریسهای انتقال می‌باشد و تعریف آن چنین است:

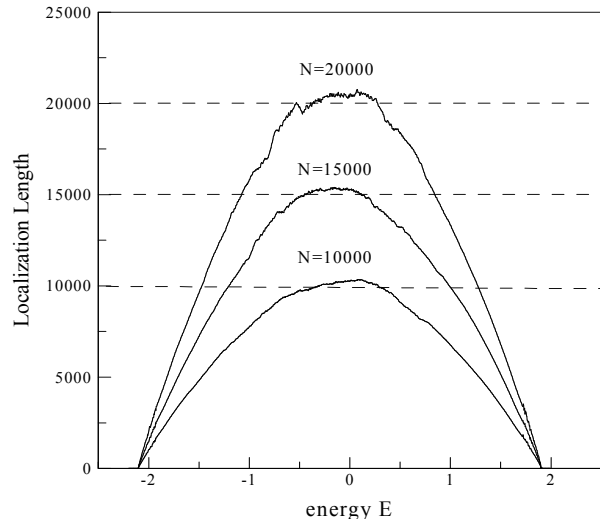
$$P_N = A_N A_{N-1} \dots A_2 A_1 \quad (11)$$

بنابراین با داشتن  $E$  و انرژی جایگاهی می‌توان طول جایگزیدگی را محاسبه نمود و ترابری الکترونی جامدات را بررسی کرد.

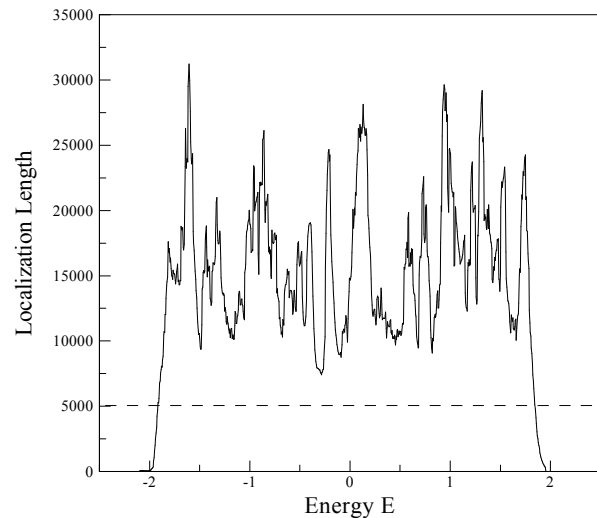


**شکل ۴.** نمودار درصد ناخالصی شبکه برای قرار گرفتن در آستانه گذار فاز فلز-عایق، برحسب طول سیستم. این نمودار فضای فاز فلز - عایق را نشان می‌دهد. در این شکل نیز پتانسیلهای جایگاهی  $\mathcal{E}_A$  برابر  $-0/1$  و  $\mathcal{E}_B$  برابر  $0/2$  در نظر گرفته شده است و توزیع ناخالصی به صورت کاتوره‌ای و یکنواخت است. همان طور که مشاهده می‌شود هر چقدر طول سیستم بزرگتر شود گذار فلز به عایق در ناخالصی کمتری اتفاق می‌افتد و برای طول بی نهایت در صورت وجود کمترین ناخالصی، سیستم عایق می‌شود.

در شکل ۳ نمودار طول جایگزیدگی برحسب انرژی، برای تعداد نقاط شبکه برابر ۱۰۰۰۰، ۱۵۰۰۰ و ۲۰۰۰۰ درصد ناخالصی به ترتیب برابر  $0/95$ ،  $0/63$ ،  $0/475$ ، نشان داده شده است. همان طور که این شکل نشان می‌دهد سیستم در سه حالت فوق تقریباً در آستانه گذار فاز فلز-عایق قرار می‌گیرد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که سیستم با طول بزرگتر، با درصد ناخالصی کمتری نسبت به سیستم با طول کوچکتر عایق می‌شود. برای مثال همان گونه که در این شکل نشان داده شده است، سیستم با ۲۰۰۰۰ نقطه شبکه، با ناخالصی کمی بالاتر از حد آستانه (ناخالصی آستانه برای این سیستم برابر  $0/475$  است) عایق می‌شود در صورتی که برای سیستم با طول کوچکتر ۱۰۰۰۰ نقطه، با همین مقدار ناخالصی رسانا است و با ناخالصی بالاتر از  $0/95$  عایق می‌شود. در شکل ۴ درصد ناخالصی سیستم برای قرار گرفتن در آستانه گذار فاز فلز-عایق برحسب طول سیستم نشان داده شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که هرچه طول سیستم بزرگتر باشد، با درصد



**شکل ۳.** نمودار طول جایگزیدگی برحسب انرژی برای توزیع پتانسیل شکل ۱. در این شکل طول سیستم ۱۰۰۰۰، ۱۵۰۰۰ و ۲۰۰۰۰ در نظر گرفته شده و درصد ناخالصی به ترتیب  $0/95$ ،  $0/63$  و  $0/475$  در نظر گرفته شده است. همان طور که مشاهده می‌شود، در این سه حالت سیستم تقریباً در آستانه گذار فاز فلز - عایق است. خط‌چینها طول سیستم را نشان می‌دهند.



**شکل ۵.** نمودار طول جایگزیدگی برحسب انرژی برای توزیع ناخالصی به صورت منظم. در این شکل پتانسیل شبکه  $\mathcal{E}_A = -0/1$  و پتانسیل ناخالصی  $\mathcal{E}_B = 0/5$  در نظر گرفته شده است. همچنین توزیع ناخالصی به صورت کاملاً منظم  $(\mathcal{E}_A \mathcal{E}_B \mathcal{E}_A \mathcal{E}_B \mathcal{E}_A \mathcal{E}_B \mathcal{E}_A \dots)$  در نظر گرفته شده است. همان گونه که این شکل نشان می‌دهد، برای تمام انرژیهای مجاز  $-2 < E < +2$  طول جایگزیدگی از طول سیستم  $(L = Na = 5000)$  بزرگتر است (خط‌چین، طول سیستم را نشان می‌دهد). بنابراین برای توزیع ناخالصی منظم، سیستم همواره رسانا (فلز) باقی می‌ماند.

در پایان، شکل ۵ نمودار طول جایگزینی بر حسب انرژی، برای حالتی که توزیع ناخالصی کاملاً منظم است را نشان می‌دهد. این نمودار برای  $\epsilon_A$  برابر  $0/1$  و  $\epsilon_B$  برابر  $0/5$  و تعداد  $5000$  نقطه شبکه رسم شده است. در این شکل می‌بینیم که با وجود اینکه شدت پتانسیل ناخالصی ( $\epsilon_B = 0/5$ ) نسبت به حالت بی‌نظمی ضعیف ( $\epsilon_B = 0/2$ ) بسیار قویتر است ولی سیستم رسانا باقی می‌ماند [۱۷].

ناخالصی کمتری، عایق می‌شود. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که در حد  $N \rightarrow \infty$  (زنجیر یک بعدی با طول بی‌نهایت) سیستم با درصد ناخالصی بسیار اندک (غیر صفر) عایق می‌شود. این نتیجه با نظریه اندرسون برای شبکه یک بعدی با طول بی‌نهایت کاملاً توافق دارد [۱۶] که بیان می‌کند وجود کمترین ناخالصی سبب گذار فاز فلز-عایق می‌شود. توضیح اینکه وجود ناخالصی بدون همبستگی معین است که باعث عایق شدن سیستم می‌شود. در این مقاله نیز برای پتانسیل ناخالصی هیچ گونه همبستگی در نظر گرفته نشده است.

## مراجع

1. S Russ, J W Kantelhardt, A Bunde and S Havlin, *Phys. Rev. B* **64** (2001) 134209.
2. B Souillard, *Proceeding of the Les Houches Summer School of Theoretical Physics, Amsterdam, 1986*, edited by J Vannimenus and R Stora, Elsevier Science Publishers, New York (1987).
3. A D Stone, J D Joannopoulos and D J Chadi, *Phys. Rev. B*, **24** (1981) 5583.
4. S Kotani and B Simon, *Comm. Math Phys.* **89** (1983) 227.
5. P W Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **66** (1991) 1366.
6. A Sanchez, E Macia and F Dominguez-Adame, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 147.
7. A Crisanti, G paladian and A Vulpiani 'Products of Random Matrices in Statistical Physics' Springer Series in Solid State Physics Springer-Verlag, USA (1993).
8. C Papatriantafillou, E C Economou and T P Eggart, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 910.
9. C Papatriantafillou and E C Economou, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 920.
10. P S Davids, *Phys. Rev. B* **52** (1995) 4146.
11. B Derrida and E Gardner, *J. Phys.* **45** (1984) 1283.
12. B Derrida, K Mecheri and J L Pichard, *J. Phys.* **48** (1987) 733.
13. David H Dunlap, H-L Wu, and Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990) 88-91.
14. P Phillips and H-L.Wu, *Science*, **252** (1991) 1805.
15. P Carpena, P Bernaola-Galvain, P C Ivanov and H Eugene Stanley, *Letters to Nature*, **418** (2002).
16. P W Anderson, *Phys.Rev.***109** (1985) 1492.
17. P Enz Charles "A Course on Many-Body Theory Applied to Solid state Physics",Chapter **3** (1992) 116.