

## گذار فاز فلز- عایق در مدل سه تایی زنجیر یک بعدی با همبستگی بلندبرد

ایوب اسماعیل پور<sup>۱</sup>، مهدی اسماعیل زاده<sup>۱</sup>، محمدرضا رحیمی تبار<sup>۳</sup>

۱ - دانشکده فیزیک- دانشگاه علم و صنعت ایران- تهران

۲ - گروه فیزیک- دانشگاه شهید رجایی- تهران

۳ - دانشکده فیزیک- دانشگاه دانشگاه صنعتی شریف- تهران

### چکیده

در این مقاله گذار فاز فلز- عایق برای زنجیر یک بعدی در مدل سه تایی اندرسون با بی نظمی همبسته بلند برد را مطالعه کرده و نشان می دهیم که آلیاژ سه تایی در صورت وجود همبستگی بلند برد میان انرژی های جایگاهی آن، گذار فاز فلز- عایق می دهد. سپس یک پارامتر نظم تعریف کرده و مقدار بحرانی آن را برای گذار فاز سیستم به ازای هر نمای همبستگی بدست می آوریم. به این روش نشان می دهیم که مدل سه تایی آلیاژی در مقایسه با مدل دوتایی آلیاژی برای گذار فاز به همبستگی ضعیف تری نیاز دارد. در آخر نمودار فضای فازی را رسم می کنیم که حالت های گسترده را از حالت های جایگزیده جدا می کند.

### Metal-Insulator transition in a ternary model of 1-d chain with long range correlated disorder

Ayoub Esmailpour<sup>1,2</sup>, Mahdi Esmaeelzadeh<sup>1</sup>, Mohammad Reza Rahimitabar<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Department of physics, Iran University of Science and Technology, Tehran.

<sup>2</sup>Department of physics, Shahid Rajaei University, Tehran.

<sup>3</sup>Department of physics, Sharif University of Technology, Tehran.

### Abstract

We study Metal-Insulator transition of one dimensional diagonal Anderson ternary model with long range correlated disorder. We show that a ternary alloy shows Metal-Insulator transition when the random distribution of site energies is assumed to have a long range correlation. In this paper, we define a purity parameter, and for any given correlation exponent we calculate the critical purity parameter for which extended states are obtained. In this way, we show that the ternary alloy requires weaker correlations than the binary alloy to present a phase transition from localized to extended states. A phase diagram which separates the extended regime from the localized one for the ternary alloy is presented, obtained as the critical purity parameter in terms of the corresponding correlation exponent.

### ۱- مقدمه

الکتريکی سیستم می شود [۲]. این یافته ها توجه بسیاری از محققین را به بررسی گذار فاز فلز-عایق در یک بعد جلب کرد. اخیراً نتایج آزمایشگاهی وجود حالت های گسترده را در ابر شبکه های نیمه هادی که دارای همبستگی کوتاه برد هستند را تایید کرده است [۳]. همبستگی بلند برد در پتانسیل جایگاهی در یک سیستم الکترونی باعث بوجود آمدن یک باند انرژی رسانای پیوسته می شود. دمورا و لایرا<sup>۱</sup> [۴] نشان دادند که چگونه وجود همبستگی بلند برد در

حدود چهل سال اعتقاد بر این بود که همه حالت های الکترونی در سیستم های الکترونی بی نظم یک بعدی جایگزیده هستند [۱]. اخیراً مطالعات زیادی در مورد سیستم های یک بعدی با بی نظمی همبسته انجام شده و ثابت شده است که همبستگی در بی نظمی باعث گسترده شدن برخی از حالت های الکترونی می شود. در یک سیستمی که انرژی های جایگاهی دارای همبستگی کوتاه برد باشند، یک حالت انرژی گسترده وجود دارد که باعث رسانایی

<sup>1</sup> - Demoura & Lyra

انرژی جایگاهی باعث بوجود آمدن حالت‌های گسترده پیوسته در سیستم می‌شود. همچنین همبستگی بلندبرد آمار ترازاها را در سیستم تغییر می‌دهد و باعث گذار از شکل پواسون به شکل غیرپواسون می‌شود [۵]. مطالعات اخیر نشان می‌دهند که همبستگی بلندبرد در فاصله آنها باعث بوجود آمدن حالت‌های گسترده می‌شود [۶]. برای درک بیشتر اثر همبستگی بلندبرد روی گذار فاز، ایزائیل اف<sup>۱</sup> و همکارانش [۷] با استفاده از تئوری اختلال رابطه بین طول جایگزیدگی و نمای همبستگی را بصورت تئوری محاسبه کرده و نشان دادند که چگونه همبستگی بلندبرد باعث گذار فاز می‌شود. نتایج آزمایشگاهی حاصل از گذار امواج میکرو در هدایت کننده موج<sup>۲</sup> با سطوح پراکننده همبسته، کار آنها را تایید کرد [۸]. در این مقاله با انتخاب یک مدل سه تایی آلیاژی بی‌نظم با همبستگی بلندبرد، مدل اندرسون را مورد بررسی قرار می‌دهیم (این مدل در ادامه مقاله توضیح داده شده است). سپس یک پارامتر خلوص تعریف کرده و نشان می‌دهیم که این پارامتر می‌تواند خواص جایگزیدگی سیستم را تغییر دهد و همچنین نشان می‌دهیم که برای یک سیستم با طول و نمای همبستگی معین، یک مقدار بحرانی برای پارامتر خلوص وجود دارد که در آن مقدار، گذار از حالت‌های جایگزیده به گسترده رخ می‌دهد. با استفاده از طول محدود مقدار پارامتر خلوص را در حد ترمودینامیکی برای هر مقدار از نمای همبستگی بدست می‌آوریم و بدین ترتیب فضای فازی که حالت‌های جایگزیده را از حالت‌های گسترده جدا می‌کند را با استفاده از دو پارامتر خلوص و نمای همبستگی رسم می‌کنیم که نتیجه اصلی این مقاله می‌باشد.

## ۲- تعریف مدل

معادله شرودینگر را در جایگاه  $m$  برای الکترون‌های غیر برهمکنشی در تقریب بستگی قوی نزدیکترین همسایه بصورت زیر می‌توان نوشت:

$$\varepsilon_i \psi_i + t_{i,i+1} \psi_{i+1} + t_{i,i-1} \psi_{i-1} = E \psi_i \quad (1)$$

بطوریکه  $E$  انرژی الکترون ورودی است.  $|\Psi_i|^2$  احتمال یافتن الکترون در جایگاه  $i$ ،  $\varepsilon_i$  انرژی پتانسیل جایگاه  $i$  و

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E - \varepsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (2)$$

توابع موج دوطرف زنجیره را می‌توان با محاسبه حاصلضرب ماتریسهای گذار بصورت  $P_{N,1} = \prod_{i=1}^N P_{i,i-1}$  به یکدیگر ربط داد. در این معادله،  $N$  طول زنجیره و  $p_{i,i-1}$  ماتریس گذاری است که جایگاه  $i$  و  $i-1$  را به یکدیگر ربط می‌دهد. مطابق با عناصر این ماتریس، نمای لیپانف بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$\gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle \ln \|P_{N,1}\| \rangle \quad (3)$$

نمای لیپانف با کاهش نمایی تابع موج ارتباط دارد و طول جایگزیدگی عکس نمای لیپانف تعریف می‌شود.  $(\lambda \alpha \frac{1}{\gamma})$

برای مطالعه خواص جایگزیدگی مدل سه تایی با بی‌نظمی همبسته بلندبرد، نیاز به یک رشته همبسته بلندبرد داریم. یک رشته از پتانسیل‌های همبسته بلند برد  $\{\varepsilon_i\}$  را با استفاده از روش فیلتر فوری می‌توان تولید کرد [۹]. این رشته از انرژیهای پتانسیل، بصورت رابطه زیر همبسته و دارای توزیع گاوسی می‌باشند.

$$s(k) = k^{-(2\alpha-1)} \quad (4)$$

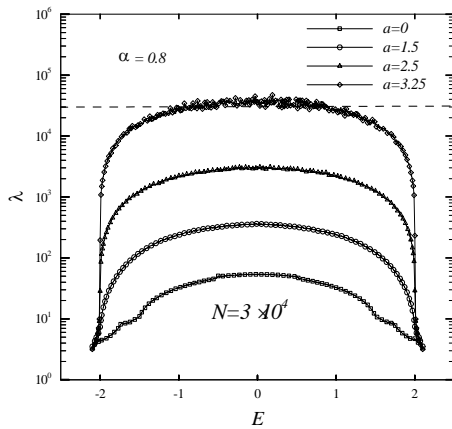
نمای  $\alpha$ ، نمای همبستگی نامیده می‌شود و درجه همبستگی بین پتانسیل‌های جایگاهی سیستم را بیان می‌کند با تعریف معادله (۴)،  $\alpha$  نمایی است که با استفاده از DFA تعیین می‌شود [۱۰-۱۲]. توجه کنید که  $\alpha = 0/5$  به بی‌نظمی بدون همبستگی و  $\alpha > 0/5$  به همبستگی‌های مثبت مربوط می‌شود.

## ۳- مدل سه تایی آلیاژی

<sup>1</sup> - Izraeliov

<sup>2</sup> - Wave Guide

پارامتر خلوص  $a$  و نمای همبستگی  $\alpha$  طول جایگزیدگی سیستم را کنترل می کنند. برای یک  $\alpha$  مشخص، طول جایگزیدگی با

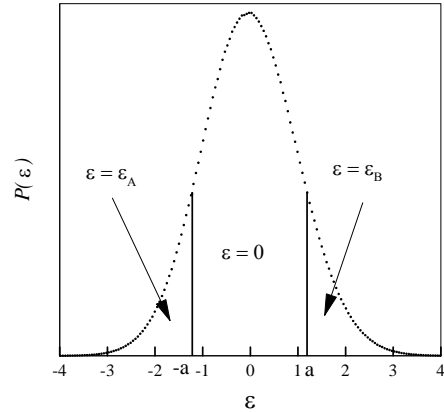


شکل ۲. طول جایگزیدگی برحسب انرژی برای نمای همبستگی  $\alpha = 0.8$  برای سیستمی با تعداد  $N = 3 \times 10^4$  سایت.

افزایش پارامتر خلوص  $a$ ، افزایش می یابد ( شکل ۲ را ببینید). به این دلیل که با افزایش  $a$  سیستم منظم تر می شود. برای یک سیستم با طول محدود  $N$ ، به ازای مقداری از  $a$  سیستم گذار فاز انجام می دهد که طول جایگزیدگی  $\lambda$ ، بزرگتر از طول سیستم باشد ( $\lambda \geq N$ ). بنابراین به ازای یک مقدار بحرانی از پارامتر خلوص ( $a_c(N)$ ) گذار رخ خواهد داد. برای جلوگیری از تأثیر طول محدود در حالت های گسترده،  $a_c(N)$  را در حد ترمودینامیکی  $N \rightarrow \infty$  برای هر مقدار از  $\alpha$  بدست آوریم.

شکل (۲) طول جایگزیدگی را برحسب انرژی به ازای  $\alpha = 0.8$  برای سیستمی با تعداد  $N = 3 \times 10^4$  سایت نشان می دهد. چنانچه در این شکل دیده می شود، طول جایگزیدگی با افزایش پارامتر خلوص  $a$ ، افزایش یافته و با افزایش بیشتر آن در ( $a = 3/25$ )، گذار از حالت جایگزیده به حالت گسترده اتفاق می افتد. در حالت بخصوص  $a = 0$  در مرجعهای [۷ و ۸] نشان داده شده است که حالت های گسترده در محدوده مرکز باند انرژی به ازای نمای همبستگی  $\alpha \geq 1/5$  بوجود می آیند. در زیر نشان می دهیم که این نتیجه در مدل سه تایی تغییر می کند و مقدار بحرانی  $\alpha$  که به ازای آن گذار فاز رخ می دهد، بوسیله پارامتر خلوص  $a$  کنترل می شود. برای یک نمای همبستگی  $\alpha$ ، سیستمی با طول بزرگتر  $N$  نیاز به پارامتر خلوص بحرانی  $a_c$  بزرگتری دارد که گذار انجام دهد.

در این مدل، یک رشته  $\{\varepsilon_i\}$  دارای همبستگی بلندبرد با توزیع گاوسی تولید می کنیم. با استفاده از یک پارامتر خلوص،  $a$ ، توزیع احتمال گاوسی،  $p(\varepsilon)$ ، یک رشته که دارای همبستگی بلندبرد



شکل ۱- توزیع گاوسی از پتانسیل های همبسته با نمای همبستگی  $\alpha = 1$ . پارامتر خلوص  $a$ .

است را به سه ناحیه تقسیم می کنیم. هر مقدار از سری همبسته در ناحیه  $-a \leq \varepsilon_n \leq a$  را صفر، هر مقدار کوچکتر از  $-a$  را به  $-0.5$  و هر مقدار بزرگتر از  $a$  را به  $0.5$  نگاشت می کنیم. بنابراین بطور خلاصه خواهیم داشت:

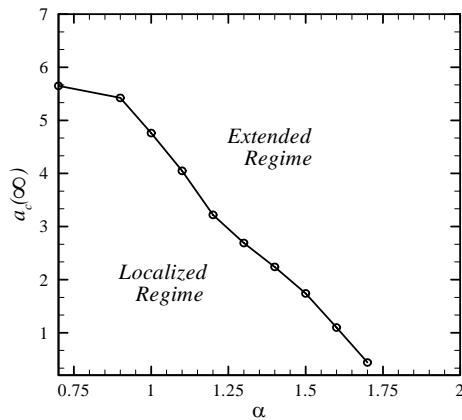
$$\varepsilon_n = \begin{cases} \varepsilon_B & \varepsilon_n < -a \\ \cdot & -a \leq \varepsilon_n \leq a \\ \varepsilon_A & \varepsilon_n > a \end{cases} \quad (5)$$

شکل (۱) توزیع گاوسی از پتانسیل های همبسته با نمای همبستگی  $\alpha = 1$  را نشان می دهد. پارامتر خلوص  $a$  میزان نظم سیستم را مشخص می کند. بنابراین در حد  $a \rightarrow 0$  سیستم کاملاً بی نظم است. در این حالت یک زنجیر آلیاژی دوتایی داریم که هر کدام مقادیر  $0.5$  و  $-0.5$  در آن بطور یکسان توزیع شده اند. در ادامه نشان خواهیم داد که در حالت های سه تایی، برای هر مقدار از نمای همبستگی  $\alpha$  می توان یک  $a$  در حد  $N \rightarrow \infty$  پیدا کرد که به ازای آن سیستم از حالت جایگزیده به حالت گسترده گذار فاز انجام دهد. همچنین نشان می دهیم که سیستم های سه تایی ( $a \neq 0$ ) با نمای همبستگی کوچکتری نسبت به سیستم های دوتایی ( $a = 0$ ) گذار فاز انجام می دهند.

#### ۴- محاسبات عددی

در ادامه، خواص جایگزیدگی مدل سه تایی را به صورت عددی مطالعه می نماییم. برای یک سیستم با طول مشخص دو

مدل سه تایی یک پارامتر نظم به نام پارامتر خلوص را شامل می‌شود. افزایش پارامتر نظم موجب افزایش طول جایگزیدگی



شکل (۴) - نمودار فازی  $a_c(\infty)$  بر حسب نمای همبستگی که سیستم جایگزیده را از گسترده در حد ترمودینامیکی جدا می‌کند.

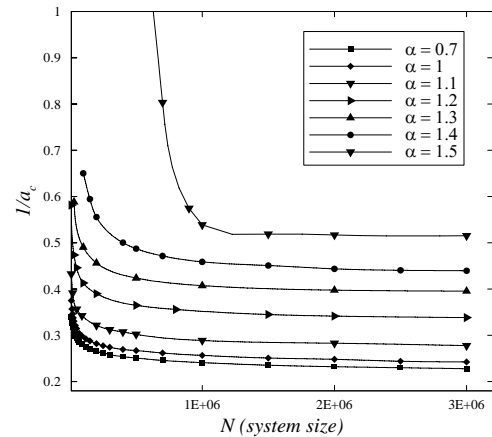
شده و افزایش بیشتر آن باعث گذار فاز عایق-فلز می‌شود. همچنین پارامتر خلوص به نمای همبستگی در سیستم بستگی دارد و به وسیله نمای همبستگی  $\alpha$  کنترل می‌شود. برای یک  $\alpha$  مشخص سیستم با طول بزرگتر نیاز به پارامتر خلوص بزرگتری دارد تا گذار عایق-فلز انجام دهد. نهایتاً نشان دادیم که پارامتر خلوص در حد ترمودینامیکی به یک مقدار بحرانی میل می‌کند. بعنوان نتیجه اصلی نیز نمودار فازی رسم نمودیم که رژیم جایگزیده را از گسترده جدا می‌کند و این نمودار برحسب دو پارامتر، پارامتر خلوص بحرانی در حد ترمودینامیک و نمای همبستگی، مشخص می‌شود.

## ۶- مرجع ها

- 1- P. W. Anderson, Phys. Rev. 109,1492 (1958).
- 2- D.H. Dunlap, H.L. Wu, P.W. Philips, Phys. Rev. Lett, 65,88 (1990)
- 3- V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B.Parravicini, F. Dominguez-Adame, and R. Gomez- Alcala, Phys. Rev. Lett.82, 2159 (1999).
- 4- F. A. B. F. de Moura, M. Lyra, Phys.Rev. Lett. 81, 3735(1998).
- 5- P. Carpena, P. Bernaola-Galvan and P.Ch. Ivanov, Phys.Rev. Lett. 93, 176804 (2004).
- 6- F.A.B.F. de Moura, A.V. Malyshev, M.L. Lyra, V.A.Malyshev and F. Dominguez-Adame, Phys. Rev. B 71,174203 (2005).
- 7- F. M. Izrailev, A. A. Krokhnin, Phys. Rev. Lett. 82, 4062(1999).
- 8- U. Kuhl, F.M. Izrailev, A. A. Krokhnin and H.-J. Stockmann, Appl. Phys. Lett. 77, 633 (2000).
- 9- H. A. Makse, S. Havlin, M. Schwartz, and H. E. Stanley, Phys. Rev. E,53, 5445 (1996).
- 10- K. Hu, Z. Chen, P-Ch. Ivanov, P. Carpena and H.E. Stanley, Phys. Rev. E 64, 011114 (2001).
- 11- Z. Chen et al, Phys. Rev. E 71, 011104 (2005).
- 12- A.V. Coronado and P. Carpena, Journal of Biological Physics, 31, 121 (2005).

بنابراین، برای هر مقدار از  $\alpha$  رفتار  $a_c(N)$  را با افزایش طول سیستم ( $N$ ) محاسبه می‌کنیم.

شکل (۳) معکوس پارامتر خلوص بحرانی  $a_c(N)$  را بر حسب



شکل (۳) - معکوس پارامتر خلوص بحرانی  $a_c$  بر حسب طول سیستم  $N$  برای هر مقدار از  $\alpha$  که در شکل نشان داده می‌شود.

طول سیستم  $N$  برای هر مقدار از  $\alpha$  نشان می‌دهد. مطابق این شکل، در یک سیستم با طول مشخص، یک سیستم با نمای همبستگی  $\alpha$  بزرگتر با پارامتر خلوص  $a_c$  کوچکتری گذار فاز انجام می‌دهد. با توجه به این شکل، ملاحظه می‌گردد که  $a_c$  در حد ترمودینامیکی  $N \rightarrow \infty$  به ازای هر  $\alpha$  به مقدار مشخصی از  $a_c(\alpha)$  میل می‌کند. برای به دست آوردن  $a_c(\alpha)$  بصورت عددی، داده‌های شکل (۳) را به معادله زیر فیت می‌کنیم:

$$\frac{1}{a_c} = u + \frac{w}{N^\gamma} \quad (6)$$

واضح است که  $u^{-1}$  مقدار  $a_c(N)$  در حد  $N \rightarrow \infty$  می‌باشد.

( برای  $\alpha < 1/6$ ،  $N = 3 \times 10^6$  و برای  $\alpha > 1/6$ ،  $N = 9 \times 10^6$  ) بصورت عددی حل شده است). همه نتایج برای پارامتر خلوص در بی‌نهایت ( $a_c(\infty)$ ) و نمای همبستگی مربوطه، در نمودار شکل (۴) خلاصه شده است. نمودار (۴) نتیجه اصلی این مقاله است و همه اطلاعات مربوط به خواص جایگزیدگی را شامل می‌شود. برای  $\alpha \cong 1/8$  در یافتیم که  $a_c(\infty) = 0$  می‌گردد. بعبارت دیگر، برای  $\alpha > 1/8$  زنجیر یک بعدی فقط فاز فلزی دارد.

## ۵- خلاصه

بطور خلاصه، مدل اندرسون یک بعدی با بی‌نظمی همبسته بلندبرد را با معرفی مدل سه تایی مطالعه کردیم و دریافتیم که