跳躍傳導係數

理學院 物理系

蘇 賢 錫

一、前　　言

就單粒子無規行走而言，由時率方程式所描述的紊亂系統，在頻率爲ω時的跳躍傳導係數（hopping conductivity），業已證明係與擴散係數$D(\omega)$成正比[1]。

在熱平衡之下，當一切點座（site）的易接近性相等時，擴散係數可以寫成.

$$D(\omega) = -(\omega^2/2Nd)\sum_{ij} R_{ij}^2 G_{ij}(\omega)$$

式中，N爲點座數，d爲該系統的廣延性，R_{ij}爲點座i與j之間的距離，而G_{ij}爲格林函數（Green's function）的適當矩陣素，其定義如下：

$$G = 1/(W - i\omega)$$

而

$$W_{ij} = \delta_{ij}\sum_{k}(W_{ik} - W_{ij})$$

式中，W_{ij}爲點座i與j之間的跳躍時率，而根據定義，當$i=j$時，$W_{ij}=0$。在熱力學限度以內，擴散係數等於$D(\omega)$的組態平均（configuration average）。

假設點座在於週期性點陣，該系統的一切無規性只在於跳躍時率，而跳躍時率僅受到最靠近點座的影響。這種模型的本質，與Kirkpatrick用以討論跳躍傳導係數者相同[2]。

二、計　　算

當一個系統的全部鍵均係定值W_0時，其擴散係數與頻率無關，可以下式表示：

$$D = Za^2W_0/2d \qquad (1)$$

式中，a爲晶格常數，而Z爲配位數。有效介質法應用在無規鍵模型時，皆假設有一個具備有效時率W_{eff}的等軸晶系等效於該無規系統。一般而言，W_{eff}爲無規系統的參數與頻率的函數。這時的$D(\omega)$，其形式相同於(1)式，只是以W_{eff}代替W_0而已。

與等軸晶系結合的格林函數G^M，其定義如下：

$$G^M = 1/(W^M - i\omega)$$

式中，W^M為有效時率的矩陣。設

$$W = W^M - W^1$$

再利用標準演算[3]，吾人可寫

$$G = G^M + G^M T G^M$$

式中，

$$T = W^1/(1 - G^M W^1)$$

根據適當的等軸晶系之定義，吾人可令$\langle G \rangle = G^M$，而得下列條件：

$$<T> = 0$$

這是G^M的隱含方程式，也是W_{eff}的隱含方程式。

應用狄拉克括號的符號法，可以寫成

$$W = \sum_{ij} |i>(\delta_{ij} \sum_k W_{ik} - W_{ij})<j|$$

而

$$W^M = \sum_{ij} |i> W_{eff}(Z\delta_{ij} - \Delta_{ij})<j|$$

式中，當i與j最靠近時，$\Delta_{ij} = 1$，否則$\Delta_{ij} = 0$。微擾W^1 可以寫成下列形式：

$$W^1 = \Sigma V_{kl}$$

式中，$V_{kl} = |a>\Delta<a|$ ；$\Delta = W_{eff} - W_{kl}$，而 $|a> = |k> - 1|>$

仿照kirkpatrick 的方法，對於單時率，吾人用t 矩陣 t_{kl} 以估計T，即

$$t_{kl} = V_{kl}/(1 - G^M V_{kl})$$

而得

$$t_{kl} = |a>\Delta<a|/(1 - \Delta F_{kl}) \qquad (2)$$

式中，

$$F_{kl} = <a|G^M|a> = 2(G^M_{kk} - G^M_{kl})$$

其次，利用有效介質的對稱性，得

$$F_{kl} = 2(1 + i\omega G^M_{kk})/ZW_{eff} \qquad (3)$$

若時率分布的機率密度爲$\rho(W)$，則可將(3)式代入(2)式，且設$\langle t \rangle = 0$，而得

$$\int \rho(W) dW (W_{eff} - W)/[\{(Z/2) - 1\} W_{eff} + W - i\omega (W_{eff} - W) G^M_{kk}] \qquad (4)$$

當$\omega \to 0$時，(4)式變成Kirkpatrick 的結果。當$\omega \to \infty$時，$G^M_{kl} \simeq 1/i\omega$ 而 $W_{eff} = \int \rho(W) dW$，係正確解。

三、討　　論

爲了討論(4)式的正確性，設想一維鍵滲透（bond-percolation）模型。

時，時率不是常數（但是經過適當的歸一化，這常數可以等於 1，而機率爲 p ），就是等於零（機率爲 $1-p$ ），因而

$$P(W)=p\delta(1-W)+(1-p)\delta(W)$$

而(4)式變成

$$P(W_{eff}-1)/\{1-i\omega(W_{eff}-1)G^M_{kk}\}=(1-p)/i\omega G^M_{kk} \qquad (5)$$

G^M_{kk} 可以仿照Bernasconi 等人的方法算出 [4]。

$$G^M_{kk}=1/(2S-i\omega)$$

式中，

$$S=1/[(1/W_{eff})+\{1/(s-i\omega)\}]$$

故$W_{eff}=-s(s-i\omega)/i\omega$而(5)式變成縣於 s 的方程式：

$$s^2-\{i\omega-2(1-p)\}s+i\omega p=0$$

其解導致

$$D(\omega)=(a^2/2i\omega)[\{i\omega-2(1-p)\}-\{-\omega^2-4i\omega+4(1-p)\}^{1/2}]$$
$$\times(1/2)[\{i\omega+2(1-p)\}-\{-\omega^2+4i\omega+4(1-p)\}^{1/2}]$$

當 $\omega\to 0$ 時

$$D(\omega)\simeq\{p(2-p)/8(1-p)^4\}\omega^2+i\{p(2-p)/4(1-p)^2\}\omega+O(\omega^3)$$

而當 $\omega\to\infty$ 時

$$D(\omega)\simeq p-\{2p(1-p)(2-p)/\omega^2\}+2ip(1-p)/\omega+O(1/\omega^3)$$

正確結果分別爲 [5]

$$D(\omega)\simeq\{p(1+p)^2/4(1-p)^4\}\omega^2+i\{p/2(1-p)^2\}\omega+O(\omega^3)$$

$$D(\omega)\simeq p-2p(1-p)/\omega^2+2ip(1-p)/\omega+O(1/\omega^3)$$

就一切 p 值與 ω 值而言，本文近似計算的誤差僅在一個數量級的範圍內，而當 $p\to 0$ 時，其結果與正確解一致。$D(W)$ 既已求出，跳躍傳導係數當可隨之算出。

四、結　　論

本文應用標準的有效介質法，就點座位於規則點陣而點座間跳躍時率爲無規變數的系統，估計其跳躍傳導係數。本文的方法是Kirkpatrick 對這種系統所處理的方法之推廣。計算結果與一維鏈滲透問題的正確解互相比較，發現兩者頗爲一致。

五、參考資料

1. J.T. Devreese and V.E. van Doren, " Linear and Nonlinear Electronic Transport in Solids, " Plenum Press, New York, P. 341, 1976.
2. S. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys., 45 574-588, 1973.
3. R.J. Elliot, J.A. Kramhansl and P.L. Leath, Rev. Mod. Phys.,

46, 465-543, 1974.
4. J. Bernasconi, S. Alexander and R. Orbach, Phys. Rev. Lett., 41, 185-187, 1978.
5. T. Odagaki and M. Lax, Phys. Rev. Lett., 45, 847-850, 1980.

Hopping Conductivity

Hsien-hsi Su

Department of Physics
College of Sciences

Abstract

A simple effective medium model has been developed for the hopping conductivity of a randomly-bonded system of any dimensionality. The results are compared with exact solution of the one-dimensional bond percolation problem, and good agreement is found.