两种扩展 Harper 模型的波包动力学*

张振俊 于 淼 巩龙龑 童培庆†

(南京师范大学物理科学与技术学院,南京 210097)

(2009 年 12 月 24 日收到;2010 年 12 月 17 日收到修改稿)

本文通过二次矩 $M_2(t)$ 和概率分布 $W_n(t)$ 数值地研究了两种扩展 Harper 模型的波包动力学,得到了这两种模型中各个相、各条临界线以及三相点的波包扩散情况. 对于第一种扩展 Harper 模型,发现两个金属相中波包是弹道扩散的,在绝缘体相中波包不扩散,而在三相点以及各条临界线上波包是反常扩散的. 同时,发现金属相—金属相转变的临界线上的波包动力学行为与金属相—绝缘体相转变的临界线上的相同,但三相点的动力学行为与各临界线上的不同;对于第二种扩展 Harper 模型,发现金属相中波包是弹道扩散的,在绝缘体相中波包不扩散,而在临界相、三相点、以及各条临界线上波包是反常扩散的. 同时,发现临界相—金属相转变的临界线上的波包动力学行为与三相点、临界相—绝缘体相转变的临界线上的相同,但与金属相—绝缘体相转变的临界线上的不同.

关键词: 金属绝缘体转变, 扩展 Harper 模型, 波包动力学

PACS: 71.30. +h, 03.65.-w, 73.22.Dj

1. 引 言

自从发现准晶体[1,2]之后,准周期系统就引起了人们广泛的关注[3—9]. 在众多的准周期系统中,研究得非常广泛的是 Harper 模型[10—12]. 该模型可以用来描述在均匀磁场作用下的正方形格子中仅考虑最近邻相互作用的电子的运动情况.

一维紧束缚模型的动力学方程为

$$\mathrm{i}\frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t} = -\psi_{n+1}(t) - \psi_{n-1}(t) - V_n\psi_n(t), \tag{1}$$

这里 $\psi_n(t)$ 是粒子在第 n 点处 t 时刻的波函数, V_n 是 n 点处的势能. 当 $V_n = \lambda\cos(2\pi\phi n)$ 且 ϕ 取无理数时,就得到了传统的 Harper 模型. 对于该模型,研究发现当 $\lambda < 2$ 时,波包以弹道形式扩散;当 $\lambda > 2$ 时,波包不扩散;当 $\lambda = 2$ 时是处于临界情况,波包反常扩散,出现了金属—绝缘体转变,此时能谱呈现为丰富的结构(hofstadter butterfly)[13]. 最近,此结构引起了人们广泛的兴趣[14—16].

如果研究在均匀磁场作用下,仅考虑最近邻相互作用的三角格子中电子的运动情况,就得到了一种新的模型,我们称它为第一种扩展 Harper 模型. 如果研究在均匀磁场作用下,考虑最近邻以及次近邻相互作用的正方形格子中电子的运动情况,就得到了另一种新的模型,我们称它为第二种扩展 Harper 模型. Kohmoto 等人利用能级统计和复分形分析方法[17,18]研究了这两种扩展 Harper 模型的能谱和波函数的性质,得到了结构丰富但有区别的相图(图(1)). 这两种模型在相Ⅰ和相Ⅱ中波函数分别是扩展的和局域的;在相Ⅲ中前者波函数是扩展的,而后者是临界的;各个相的临界线上波函数都是临界的;并且在三相点的波函数与其它临界线上有区别.

Kohmoto 等人利用静态的方法来研究系统的性质(即求解波函数或能谱[19—21]),另一方面,利用动力学方法[22—28]也能很好得得到系统的性质,同时系统的动力学行为与能谱和波函数有很大的关系:在单电子系统中随时间演化的波包与输运特性如电导紧密相关[29,30],如果波包在长时间没有扩散则系统就是绝缘相(能谱是点状谱,波函数是局域的);相反,如果波包是弹道扩散的,则系统就是有一定电导率的金属相(能谱是绝对连续的,波函数是扩展的);介于两者之间的系统是临界的,其波包是反常扩散的(能谱是奇异连续的,波函数是临界的).

* 国家自然科学基金(批准号:10974097 和 10904074)和高等学校博士点基金(批准号:20060319007)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail:pqtong@njnu.edu.cn

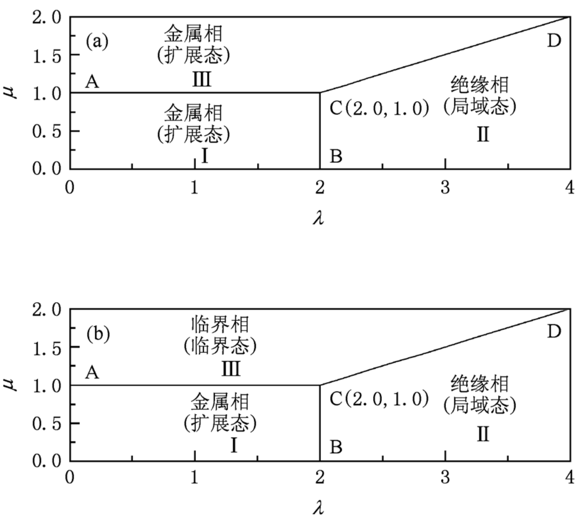

图1　(a)是第一种扩展 Harper 模型的相图；(b)是第二种扩展 Harper 模型的相图

本文的主要工作是利用波包动力学方法来研究两种扩展 Harper 模型的动力学性质.

2. 两种扩展 Harper 模型和相关物理量

2.1. 第一种扩展 Harper 模型

如图2(a)所示，在均匀磁场作用下，仅考虑最近邻相互作用的三角形格子中电子运动的哈密顿可以表示为[17]

$$
\begin{aligned}
H = & -t_a \sum_{n,m} C^{+}_{n+1,m} C_{n,m} \exp(\mathrm{i}A_{n+1,m;n,m}) \\
& -t_b \sum_{n,m} C^{+}_{n,m+1} C_{n,m} \exp(\mathrm{i}A_{n,m+1;n,m}) \\
& -t_c \sum_{n,m} C^{+}_{n,m+1} C_{n+1,m} \exp(\mathrm{i}A_{n+1,m;n,m+1}) + \mathrm{H.C.}, \quad (2)
\end{aligned}
$$

这里 t_a, t_b, t_c 为三角格子对应链的跳跃积分系数，$A_{n,m;k,l}$，($k = n \pm 1, l = m \pm 1$)是每条链上的规范势，C^{+}_{nm}(C_{nm})是 (n,m) 点处的产生(湮没)算符.

通过变换[20]之后就得到了第一种扩展 Harper 模型的波包动力学方程为

$$
\begin{aligned}
& -[1 + \mu \mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}\phi(n-1/2)+\mathrm{i}k_y}]\psi_{n-1}(t) \\
& -[1 + \mu \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\phi(n+1/2)-\mathrm{i}k_y}]\psi_{n+1}(t) \\
& -\lambda\cos(2\pi\phi n + k_y)\psi_n(t) = \mathrm{i}\frac{\partial\psi_n(t)}{\partial t}, \quad (3)
\end{aligned}
$$

这里 $\mu = t_c/t_a$，$\lambda = 2t_b/t_a$，$\phi/2$ 是每个三角格子均匀磁通量，k_y 是沿 y 方向的动量，$\psi_n(t)$ 是粒子在 n 点处 t 时刻的波函数，ϕ 是无理数.

2.2. 第二种扩展 Harper 模型

如图2(b)所示，在均匀磁场作用下，考虑最近邻以及次近邻相互作用的正方形格子中电子运动的哈密顿可以表示为[28]

$$
\begin{aligned}
H = & -t_a \sum_{n,m} C^{+}_{n+1,m} C_{n,m} \exp(\mathrm{i}A_{n+1,m;n,m}) \\
& -t_b \sum_{n,m} C^{+}_{n,m+1} C_{n,m} \exp(\mathrm{i}A_{n,m+1;n,m}) \\
& -t_c \sum_{n,m} C^{+}_{n+1,m+1} C_{n,m} \exp(\mathrm{i}A_{n+1,m+1;n,m}) \\
& -t_{c'} \sum_{n,m} C^{+}_{n,m+1} C_{n+1,m} \exp(\mathrm{i}A_{n,m+1;n+1,m}) + \mathrm{H.C.}. \quad (4)
\end{aligned}
$$

通过变换[18,28]之后就得到了第二种扩展 Harper 模型的波包动力学方程为

$$
\begin{aligned}
& -[1 + \mu\cos\{2\pi\phi(n - 1/2) + k_y\}]\psi_{n-1}(t) \\
& -[1 + \mu\cos\{2\pi\phi(n + 1/2) + k_y\}]\psi_{n+1}(t) \\
& -\lambda\cos(2\pi\phi n + k_y)\psi_n(t) = \mathrm{i}\frac{\partial\psi_n(t)}{\partial t}, \quad (5)
\end{aligned}
$$

这里 $\mu = 2t_c/t_a$，$\lambda = 2t_b/t_a$.

对于这两种扩展 Harper 模型的动力学方程，当

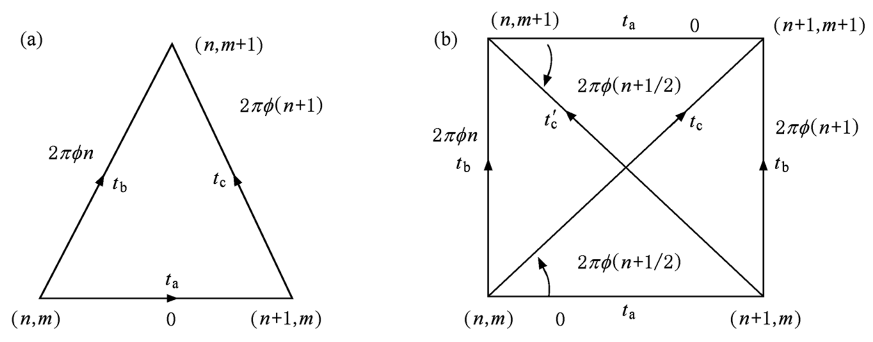

图2　(a)是三角格子的示意图，(b)是正方形格子的示意图. 在这两种格子中磁场都是垂直纸面向外，分别给出了对应链的跳跃积分系数以及规范势

$\mu = 0$,就退化到熟悉的传统 Harper 模型(方程(1)).

2.3. 波包二次距 $M_2(t)$

$$m_2(t) = \sum_n (n - n_0)^2 \left| \psi_n(t) \right|^2,$$

该物理量可以表征波包的宽度. n_0 表示的是初始位置.

为了消除初始位置对非均匀系统波包扩散的影响,本文计算了不同初始位置的结果,并取了平均值. 则有这样的关系

$$M_2(t) = \langle m_2(t) \rangle \propto t^\gamma. \tag{6}$$

当 $\gamma = 0$, 波包不扩散(局域), $0 < \gamma < 2$ 波包反常扩散, $\gamma = 2$, 波包弹道扩散[30].

2.4. 概率分布 $W_n(t)$

$$W_n(t) = \left| \psi_n(t) \right|^2, \tag{7}$$

$W_n(t)$ 表示电子在 n 点处出现的概率.

初始条件取

$$\psi_n(t = 0) = \delta_{nn_0}. \tag{8}$$

3. 数值结果

在数值计算中,不失一般性,取 $k_y = 0$, $\phi = (\sqrt{5} - 1)/2$. 在准周期系统中人们习惯的利用连续的 Fibonacci 数的比值来近似 $\phi = F_{m-1}/F_m$, 这里 F_m 是 Fibonacci 序列,定义 $F_0 = F_1 = 1, F_m = F_{m-1} + F_{m-2}$, m 为 Fibonacci 指标,取 $N = F_m$ (N 是指系统大小). 本文利用四阶龙格-库塔(forth-order Runge-Kutta)算法来求解方程(3)和(5). 计算的精度通过检查归一化量 $\sum_n \left| \psi_n(t) \right|^2 = 1$ 来满足.

3.1. 三角格子的扩展 Harper 模型

对于第一种扩展 Harper 模型,图 3 给出了不同参数 (λ, μ) 时 $M_2(t)$ 随时间的变化. 在相Ⅰ、相Ⅱ和相Ⅲ中分别以 $(\lambda, \mu) = (1.0, 0.2)$, $(3.0, 0.2)$, $(1.0, 2.0)$ 作为例子. 在相Ⅰ和相Ⅲ中都得到 $\gamma = 2.0$ (在表 1 给出了三角格子的不同参数时 γ 的值),说明波包是以弹道形式扩散的,即相Ⅰ和相Ⅲ都是金属相;在相Ⅱ中得到 $\gamma = 0$, 说明波包是不扩散的,即相Ⅱ是绝缘体相. 在三个相的临界线上(文中所有的临界线都不包括三相点),以 $(\lambda, \mu) = (2.0, 0.4)$, $(4.0, 2.0)$ 和 $(1.0, 1.0)$ 作为例子,分

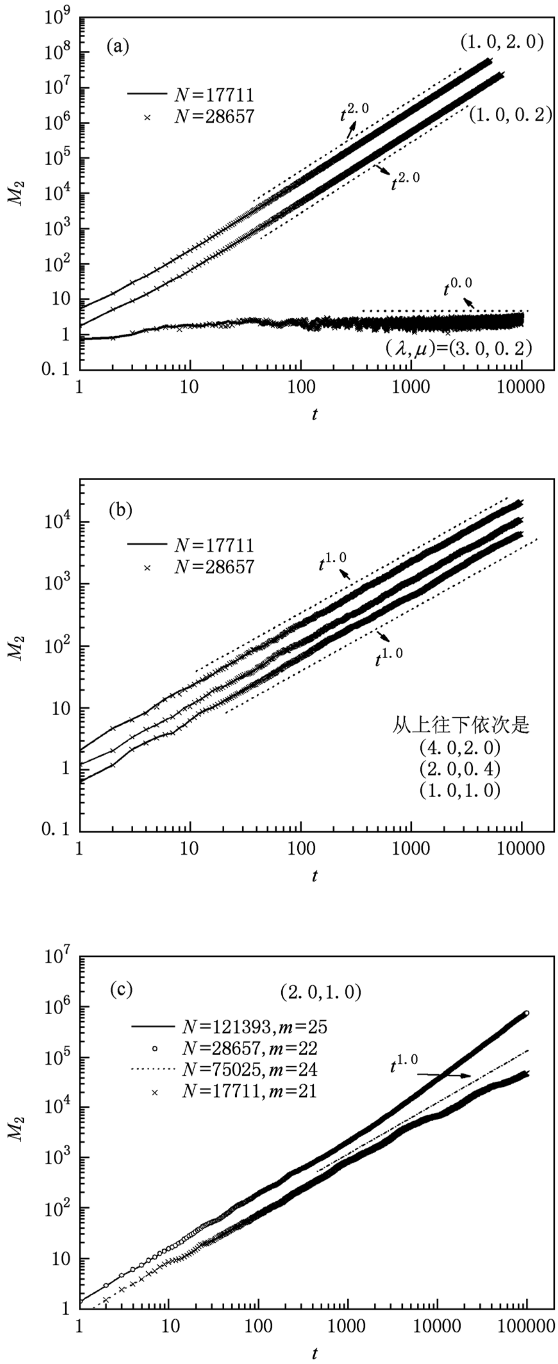

图3 给出的是第一种扩展 Harper 模型七组参数下的 $M_2(t)$ 随时间的变化 (a)是三个相中的;(b)是三条临界线的;(c)是三相点的

别对应相Ⅰ与相Ⅱ的 BC 临界线、相Ⅱ与相Ⅲ的 CD 临界线、相Ⅰ与相Ⅲ的 AC 临界线,在这些线上都得到 $\gamma = 1.0$, 说明波包都是反常扩散的,它们的动力学行为是相似的. 从图上可以看出以上的所有结论都不受系统大小的影响. 最后值得注意的是三相点 C 点 $(\lambda, \mu) = (2.0, 1.0)$ 的波包扩散情况:当系统

大小取值不同时得到 γ 的值是不同的，当 $m = 3l$ 时，得到 $\gamma \approx 0.9$，当 $m = 3l + 1$ 时，$\gamma \approx 1.26$，见图 3(c)，说明在三相点不同系统大小的扩散是不同的（与 m 的取值有关，$m = 3l$ 与 $m = 3l + 1$，$l = 0, 1, 2, 3\cdots$，扩散有明显的区别），但都是反常扩散的. 同时注意的是三相点的波包扩散与各临界线上的点都是不同的.

表 1 给出的是第一种扩展 Harper 模型在各种参数值 (λ, μ) 时的 γ 值

(λ, μ)	γ	
(1.0, 0.2)	2.0	
(1.0, 1.0)	1.0	
(1.0, 2.0)	2.0	
(2.0, 0.4)	1.0	
(3.0, 0.2)	0.0	
(4.0, 2.0)	1.0	
(2.0, 1.0)	$m = 3l$	$m = 3l + 1$
	0.9	1.26

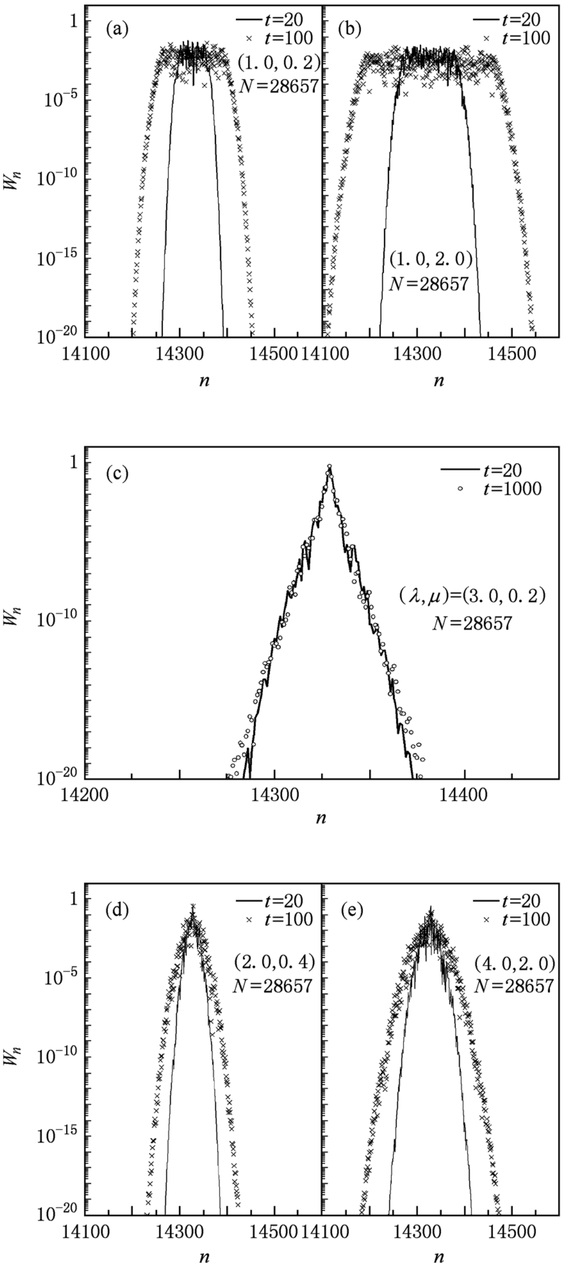

图 4 给出的是第一种扩展 Harper 模型各种参数下的 $W_n(t)$ 的分布 (a)—(c) 分别是三个相中的；(d)，(e) 是临界线上的

图 4 给出了取不同参数的概率分布 $W_n(t)$. 在相Ⅰ和相Ⅲ中概率分布与熟悉的传统 Harper 模型的金属相相同，是扩散的；而相Ⅱ与传统 Harper 模型的绝缘体相相同，是不扩散的；在相Ⅰ和相Ⅱ的 BC、相Ⅱ和相Ⅲ的 CD 临界线上，概率分布与传统 Harper 模型的金属—绝缘体相变点的分布相同. 并且它们的概率分布与系统大小无关（对于概率分布与系统大小无关的，文章中只给出系统 $N = 28657$ 的概率分布）.

3.2. 第二种扩展 Harper 模型

在第二种扩展 Harper 模型中，图 5 分别给出了不同参数 (λ, μ) 时 $M_2(t)$ 随时间的变化. 在相Ⅰ、相Ⅱ和相Ⅲ中分别以 $(\lambda, \mu) = (1.0, 0.2)$，$(3.0, 0.2)$，$(1.0, 2.0)$ 作为例子. 在相Ⅰ中，得到 $\gamma = 2.0$（在表 2 给出了第二种扩展 Harper 模型在不同参数时 γ 的值），说明波包是以弹道形式扩散的，即相Ⅰ是金属相；在相Ⅱ中，得到 $\gamma = 0$，说明波包是不扩散的，即相Ⅱ是绝缘相；相Ⅲ中，得到 $\gamma \approx 0.76$，波包是反常扩散的，即相Ⅲ是临界相. 在三个相的临界线上，分别以 $(\lambda, \mu) = (2.0, 0.4)$，$(4.0, 2.0)$ 和 $(1.0, 1.0)$ 作为例子，分别对应相Ⅰ与相Ⅱ的 BC 临界线、相Ⅱ与相Ⅲ的 CD 临界线、相Ⅰ与相Ⅲ的 AC 临界线. 在相Ⅰ与相Ⅱ的 BC 临界线上，得到 $\gamma = 1.0$；在相Ⅱ与相Ⅲ的 CD 临界线上，得到 $\gamma \approx 0.70$；在相Ⅰ和相Ⅲ的 AC 临界线上，得到 $\gamma \approx 0.65$，都是处在临界情况，波包是反常扩散的. 最后在三相点 C 点 $(\lambda, \mu) = (2.0, 1.0)$，得到 $\gamma \approx 0.66$，说明波包也是反常扩散的. 值得注意的是，三相点的波包扩散是不同于相Ⅰ与相Ⅱ的 BC 临界线上的，而与 AC 和 CD 线上的相似. 在误差允许下上面的所有结论不受系统大小的影响.

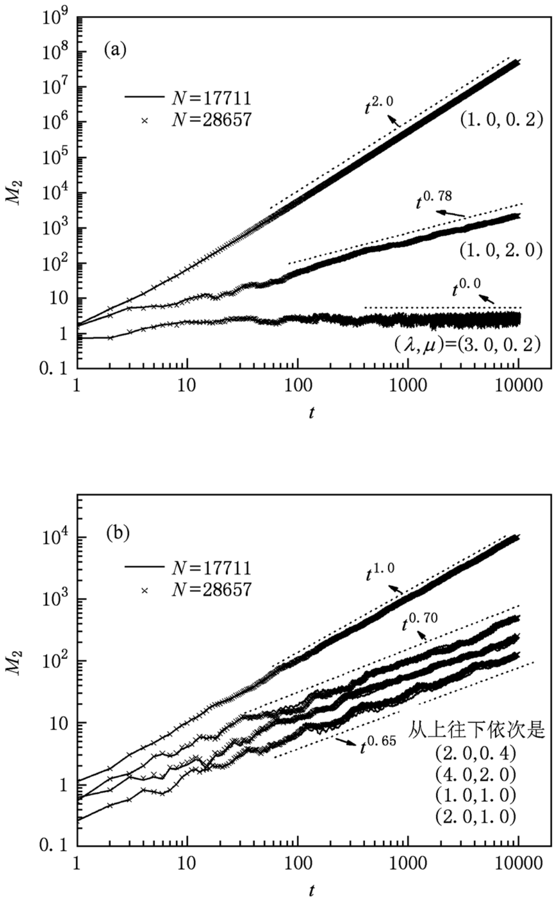

图 5　给出的是第二种扩展 Harper 模型七组参数下的 $M_2(t)$ 随时间的变化　(a)是三个相中的;(b)是三条临界线上和三相点的(其中 (2.0,1.0) 是三相点)

表 2　给出的是第二种扩展 Harper 模型在各种参数值 (λ,μ) 时的 γ 值

(λ,μ)	γ
(1.0,0.2)	2.0
(1.0,1.0)	0.65
(1.0,2.0)	0.76
(2.0,0.4)	1.0
(2.0,1.0)	0.66
(3.0,0.2)	0
(4.0,2.0)	0.70

图 6 给出了取不同参数的概率分布 $W_n(t)$. 相Ⅰ中的概率分布与传统 Harper 模型金属相的概率分布相同,是扩散的;在相Ⅱ中与传统 Harper 模型绝缘体相的概率分布相同,是不扩散的;在相Ⅲ、相Ⅰ与相Ⅱ的 BC 线上、以及相Ⅱ与相Ⅲ的 CD 临界线上概率分布都介于金属相和绝缘体相之间,并且它们的概率分布与系统大小无关.

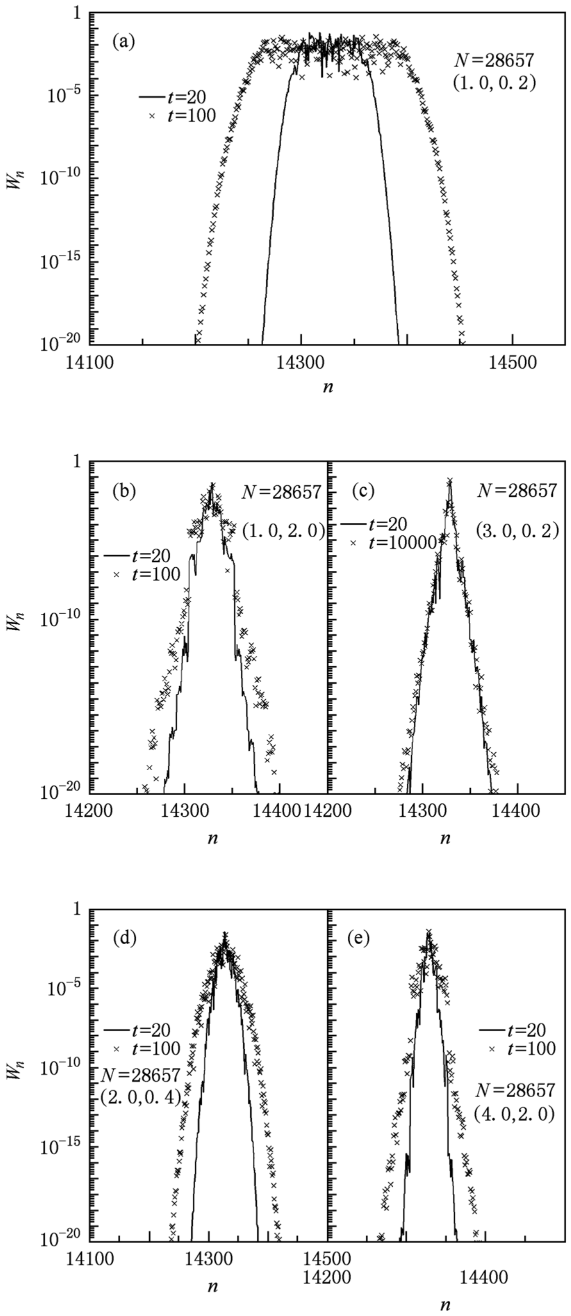

图 6　给出的是第二种扩展 Harper 模型各种参数下的 $W_n(t)$ 的分布　(a)—(c)是三个相的;(d),(e)是临界线上的

3.3. 奇异的概率分布

研究发现,这两种模型都存在奇异的概率分布,如图 7 所示. 在两种模型中的相Ⅰ与相Ⅲ的 AC 临界线上(或 $\mu = 1.0$ 线上),如果系统大小取 $N = 28657$ (对于所有 $m = 3l + 1$)时,都会有奇异的概率分布,出现了奇异的波包单向扩散现象. (断裂的位置是 $n = (N-1)/2$ 或 $n = (N+1)/2$ 处). 其原

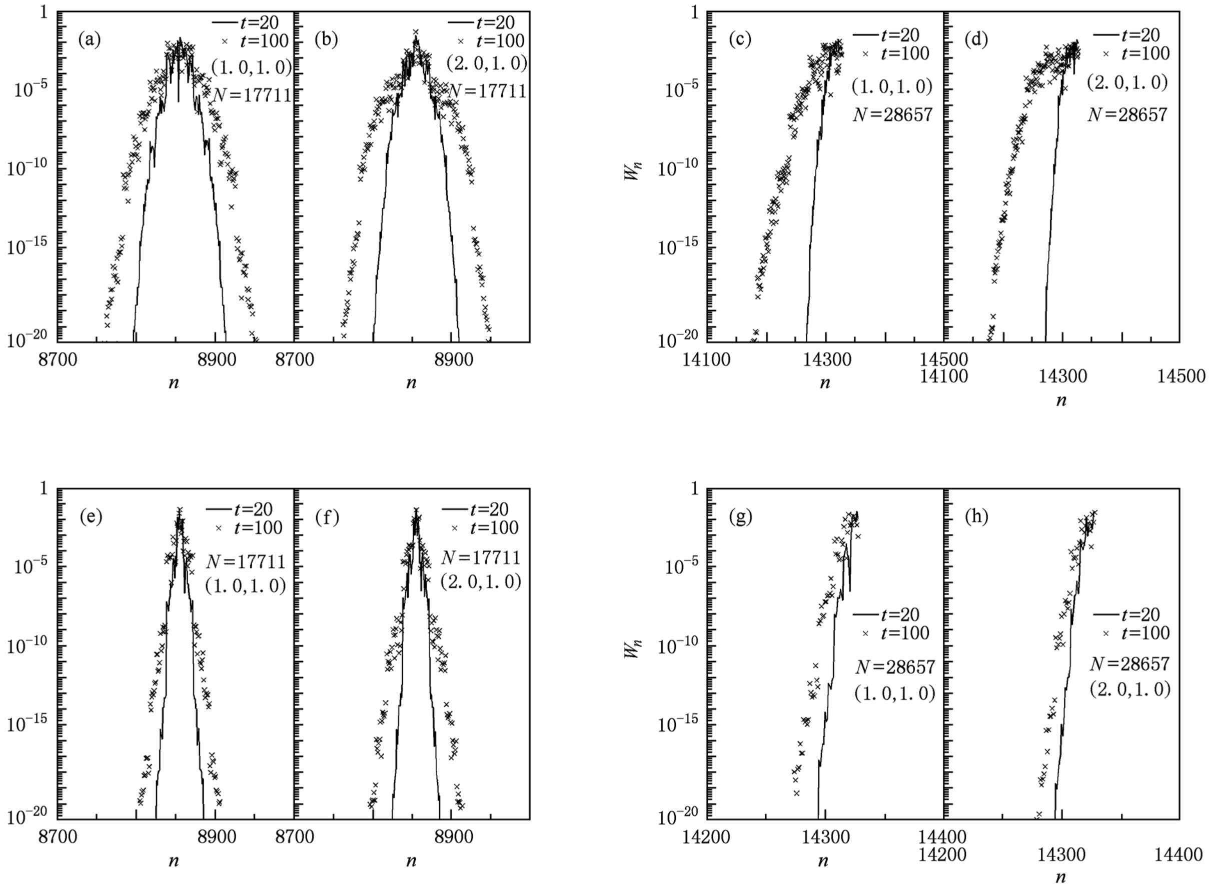

图 7　奇异的概率分布　(a)—(d)是第一种扩展 Harper 模型在 AC(μ = 1.0)线的(包括三相点);(e)—(h)是第二种扩展 Harper 模型在 AC(μ = 1.0)线的(包括三相点)

因是当系统大小取上述值时,方程(3)和(5)出现了零对角项, 此时色散关系是平的. 对于这两种扩展 Harper 模型,在 $\mu = 1.0$ 线上的概率分布与系统大小有关,即 Fibonacci 序列 F_m 分成两种情况: $m = 3l$ 和 $m = 3l + 1$, 其中后者出现奇异的波包单向扩散现象.

4. 结　论

本文借助于动力学量 $M_2(t)$ 和 $W_n(t)$, 数值地研究了两种扩展 Harper 模型的波包动力学,通过改变参数 (λ,μ) 分别得到这两种模型各种情况的动力学行为. 文中给出了七组参数 (λ,μ) 值(取其他相应参数也能得到相同的结果)分别对应相图中的相Ⅰ,相Ⅱ,相Ⅲ,相Ⅰ和相Ⅱ的 BC 临界线,相Ⅱ和相Ⅲ的 CD 临界线,相Ⅰ和Ⅲ的 AC 临界线,三相点 C 点.

通过对这两种扩展 Harper 模型的研究,发现两种模型动力学行为不同于我们所熟悉的传统 Harper 模型. 对于第一类扩展 Harper 模型,发现该模型中金属相—金属相转变的 AC 临界线上的波包动力学行为与金属相—绝缘体相转变的 BC,CD 临界线上的相同,但三相点的动力学行为与所有临界线上的不同. 对于第二类扩展 Harper 模型,发现该模型中临界相—金属相转变的 AC 临界线上的波包动力学行为与临界相—绝缘体相转变的 CD 临界线上的相似,与金属相—绝缘体相转变的 BC 临界线上的则不同. 同时发现三相点的动力学行为与金属相—绝缘体相转变的 BC 临界线上的不同. 并且在 $\mu = 1.0$, $m = 3l + 1$ ($l = 0,1,2,3,\cdots$)时两种模型中都出现了奇异的波包单向扩散现象. 本文利用动力学方法研究了两种扩展 Harper 模型,得到的结论与 Kohmoto 等人的是一致的. 这说明动力学方法也能很好的研究系统的性质.

[1] Shechtman D, Blech I, Gratias D, Cahn J W 1984 *Phys. Rev. Lett*. **53** 1951
[2] Levine D, Steinhardt P H 1984 *Phys. Rev. Lett*. **53** 2477
[3] Sokoloff J B 1985 *Phys. Rep*. **126** 189
[4] Albuquerque E L, Cottam M G 2003 *Phys. Rep*. **376** 225
[5] Aubry S, André G 1980 *Ann. Isr. Phys. Soc*. **3** 133
[6] Kohmoto M, Kadanoff L P, Tang C 1983 *Phys. Rev. Lett*. **50** 1870
[7] Song W G, Tong P Q 2009 *Chin. Phys*. B **18** 4707
[8] Luck J M 1989 *Phys. Rev*. B **39** 5834
[9] Luck J M 1993 *J. Stat. Phys*. **72** 417
[10] Tang C, Kohmoto M 1986 *Phys. Rev*. B **34** 2041
[11] Hiramoto H, Kohmoto M 1989 *Phys. Rev*. B **40** 8225
[12] Ng G S, Kottos T 2007 *Phys. Rev*. B **75** 205120
[13] Hofstadter D R 1976 *Phys. Rev*. B **14** 2239
[14] Nemec N, Cuniberti G 2006 *Phys. Rev*. B **74** 165411
[15] Nemec N, Cuniberti G 2007 *Phys. Rev*. B **75** 201404
[16] Wang J, Gong J B 2008 *Phys. Rev*. A **77** 031405
[17] Ino K, Kohmoto M 2006 *Phys. Rev*. B **73** 205111
[18] Chang I, Ikezawa K, Kohmoto M 1997 *Phys. Rev*. B **55** 12971
[19] Han J H, Thouless D J, Hiramoto H, Kohmoto M 1994 *Phys. Rev*. B **50** 11365
[20] Kohmoto M, Hasegawa Y 2007 *Phys. Rev*. B **76** 205402
[21] Izrailev F M, Kottos T, Politi A, Tsironis G P 1997 *Phys. Rev*. E **55** 4951
[22] Klymenko Yu, Shevtsov O 2008 Cond-mat/0806.4531v2
[23] Nazareno H N, de Brito P E, Rodrigues E S 2007 *Phy. Rev*. B **76** 125405
[24] Zhu J M, Wang S J 2006 *Acta Phys. Sin*. **55** 5018 (in Chinese) [祝敬敏、王顺金 2006 物理学报 **55** 5018]
[25] Wang J M, Wang R, Zhang Y P, Liang J Q 2007 *Chin. Phys*. **16** 2069
[26] Flach S, Krimer D O, Skokos C H 2009 *Phys. Rev. Lett*. **102** 024101
[27] Hufnagel L, Ketzmerick R, Kottos T, Geisel T 2001 *Phy. Rev*. E **64** 012301
[28] Wang L F, Yang G C 2009 *Chin. Phys*. B **18** 2523
[29] Hatsugai Y, Kohmoto M 1990 *Phy. Rev*. B **42** 8282
[30] Zhou B H, Duan Z G, Zhou B L, Zhou G H 2010 *Chin. Phys*. B **19** 037204

Wave packet dynamics of two extended Harper models*

Zhang Zhen-Jun Yu Miao Gong Long-Yan Tong Pei-Qing†
(*Department of Physics*, *Nanjing Normal University*, *Nanjing* 210097, *China*)
(Received 24 December 2009; revised manuscript received 17 December 2010)

Abstract

We study the wave packet dynamics of two extended Harper models by using the second moment $M_2(t)$ and probability distribution $W_n(t)$ numerically. The dynamical behaviors of two extended Harper models in all phases, on all phase boundary lines, and at the bicritical points are studied. For the first extended Harper model, we find that the wave packet is of ballistic diffusion in two metal phases, localized in the insulator phase, and of anomalous diffusion on the phase boundary lines and at the bicritical point. We also find the dynamical behavior on the boundary line of the metal-metal phase transition is the same as that on the metal-insulator phase transition. The spreading at the bicritical point is different from that on the phase boundary lines. For the second extended Harper model, we find that the wave packet is of ballistic diffusion in the metal phase, localized in the insulator phase, and of anomalous diffusion in the critical phase, on the phase boundary lines, and at the bicritical point. We also find the dynamical behavior on the boundary line of the critical-metal phase transition is similar to that at the bicritical point and the critical-insulator phase transition, but different from that of the metal-insulator phase transition.

Keywords: metal-insulator transition, extended Harper model, wave packet dynamics
PACS: 71.30. +h, 03.65.-w, 73.22.Dj

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10974097, 10904074) and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education (Grant No. 20060319007).

† Corresponding author. E-mail: pqtong@njnu.edu.cn