

边界条件对无序体系本征态的影响

吴式玉 周子舫¹⁾

(Department of Physics, University of Louisville, Louisville, KY 40292, U. S. A.)

1983 年 11 月 21 日收到

提 要

本文仔细地分析了当无序体系被嵌放在一个无限有序体系之中时, 边界条件对体系本征态的影响. 结果表明, 在离边界距离大于局域长度的区域内, 这种本征态能够重现无序体系的性质. 这就提出了研究无序体系本征态的一种方便的方法.

一、引 言

研究无序体系性质的一个很重要的问题是决定体系的本征态, 但是, 实际上并没有一种方法能够精确地计算一个无序体系的本征态. 一种常用的方法是求解一个有 N 个粒子的有限无序体系的本征值和本征矢, 这些本征值和本征矢是和体系的粒子数 N 有关的, 然后研究在 N 趋向于无穷的极限过程中, 它们是如何随 N 变化的. 利用这种方法作数值计算是很费时间的, 而且所得的结果的精度难以控制^[1]. 此外, 这种方法是从无限的无序体系中取出 N 个粒子来研究, 这就涉及到这 N 个粒子体系和其余的粒子体系的相互关联的问题. 对此, 不同的作者有不同的假设, 不少作者是在给定边界点粒子的本征矢的振幅 a_0 和 a_1 , 然后研究其余粒子的振幅, 如 Kazushige Ishii^[2] 和 Mackinnon^[3] 所作的, 他们所研究的体系是半无限的无序体系. (实际上是 N 个粒子的有限无序体系, 只有当 $N \rightarrow \infty$ 时才是半无限无序体系.) Deuglas Stone 和 Joannopoulos^[4] 等人则采用了另一种模型, 他们是把这 N 个粒子的无序体系放在无限的, 但是有序的体系之中. 利用 Stone 模型, 人们可以很方便地得到体系的本征态, 不仅简化了计算手续, 而且还可以大大提高计算精度. 所以如果 Stone 模型能够得到精确的本征态, 它将是计算无序体系本征态的一种有效而方便的方法. 本文详细地研究了 Stone 模型的边界条件对无序体系本征态的影响.

Stone^[4] 在研究一维 Anderson 模型的无序体系的电阻时, 对体系采用了如下的简化模型, 他们所用的哈密顿量为

$$H = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_{n,n+1} (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|). \quad (1)$$

式中 $\{|n\rangle\}$ 是紧束缚基矢集, 对于 $1 \leq n \leq N+1$ 的点, 点能量 ϵ_n 是以 0 为中心的以几率密度 $P(\epsilon_n)$ 分布的不相关的随机变量, 而在此区域外 $\epsilon_n = 0$. 类似地, 对于 $1 \leq n \leq N+1$ 的点, 两个近邻的粒子的相互作用能 $\{V_{n,n+1}\}$ 取不相关的随机变量, 而在此区域外

1) 永久地址: 中国科学技术大学近代物理系.

等于常数 V_0 。因此, Stone 所研究的体系是一个包含 $N + 1$ 个粒子和长度为 Nd (其中 d 为晶格间距) 的有限无序链放置在一个无限的有序链中。由于无序链的两端边界是有序链, 我们可以很方便地得到它的本征态, 使问题大大简化, 但是这种边界条件将会对无序体系的本征态产生某种影响。

1979 年 Dy, Wu 和 Wongtawatnugool^[5] 根据无限次微扰理论^[6] 发展了一整套求解无限维三对角矩阵的本征矢的方法 (称之为 DWW 方法), 并在 1981 年由 Wongtawatnugool 和 Wu^[7] 使这种方法更加完善。这种方法是基于考虑一个体系的哈密顿量有三对角矩阵形式的无限无序体系, 求出它的本征态。由于他们所研究的 N 个粒子体系是在无限的无序体系之中, 考虑了它们之间的关连, 没有任何人为的切断或者加上其它边界条件, 所以他们得到的本征矢确是无限无序体系的本征矢, 我们可以用它来检验其它模型的边界条件对体系本征矢的影响。本文就是用计算无限无序体系本征矢的 DWW 方法来检验 Stone 模型所带来的边界效应。

二、研究无限无序体系本征矢的 DWW 方法^[5,7,8]

对于一个哈密顿量的形式为

$$H_{n,n'} = E_n \delta_{n,n'} - V_{n,n+1} \delta_{n+1,n'} - V_{n,n-1} \delta_{n-1,n'} \quad (2)$$

的三对角矩阵所描述的体系, 它的预解式算符, 即格林函数为

$$R = (Z - H)^{-1}. \quad (3)$$

它的矩阵元可以写为

$$R_{n,n} = (A_n - V_{n,n+1} \Delta_{n+1}^+ V_{n+1,n} - V_{n,n-1} \Delta_{n-1}^- V_{n-1,n})^{-1}. \quad (4)$$

$$R_{n,n'} = R_{n,n} V_{n,n \pm 1} \Delta_{n \pm 1}^{\pm} \cdots V_{n' \mp 1, n'} \Delta_{n'}^{\pm} \quad (5)$$

(式中上面的符号对应于 $n < n'$,

下面的符号对应于 $n > n'$.)

或者

$$R_{n,n'} = \Delta_n^{\pm} V_{n,n \mp 1} \Delta_{n \mp 1}^{\pm} \cdots V_{n' \pm 1, n'} R_{n', n'},$$

(式中上面的符号对应于 $n > n'$,

下面的符号对应于 $n < n'$.)

式中 $A_n = E - E_n$ 和

$$\Delta_n^{\pm} = (A_n - V_{n,n \pm 1} \Delta_{n \pm 1}^{\pm} V_{n \pm 1, n})^{-1}. \quad (6)$$

如果本征矢 v 按定义矩阵 $H_{n,n'}$ 的表象 $\{u_n\}$ 展开, 即

$$v = \sum_n c_n u_n.$$

则本征方程 $(E - H)v = R^{-1}v = 0$ 可简化为

$$\sum_{n'} R_{n,n'}^{-1} c_{n'} = 0. \quad (7)$$

式中

$$R_{n,n'}^{-1} = (E - E_n) \delta_{n,n'} - V_{n,n+1} \delta_{n+1,n'} - V_{n,n-1} \delta_{n-1,n'} \quad (8)$$

如果 $c_l \neq 0$, 我们可以令 $b_n = c_n/c_l$, 则(7)式可以写成

$$\sum_{n'} R_{n,n'}^{-1} b_{n'} = 0 \quad (9)$$

一旦 $\{b_n\}$ 确定后, 本征矢 ν 也就确定了, b_n 即为 ν 在态 u_n 上的振幅, 它可按式计算:

$$b_{l \pm n} = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \frac{\text{Im} R_{l \pm n, l}(N, E + i\varepsilon)}{\text{Im} R_{l, l}(N, E + i\varepsilon)}. \quad (10)$$

式中 $R_{n,n'}(N, E + i\varepsilon)$ 是 N 个粒子体系的预解式 R 的矩阵元, ε 是一个趋向于零的正的小量.

三、无限无序体系和 Stone 模型所得的本征矢的比较

由 Stone 在研究电阻时所得的结果可以看出, 当 N 很大时, 除了 $E = 0$ (带中态) 的纯非对角无序的情形 (此时 $\langle \ln(1 + \rho) \rangle \sim \sqrt{N}$) 外, 其它所有的情形都有 $\langle \ln(1 + \rho) \rangle \sim N$. 所以, 我们分两种情形来讨论: (1) 纯非对角无序的带中态 ($E = 0$) 的情形; (2) 其它情形, 即 $E \neq 0$ 和 $E = 0$ 但有对角无序的情形.

1. 本征值问题

当 E 为哈密顿量 (2) 的本征值时, 体系的本征矢 ν 的振幅 $\{b_n\}$ 由 (10) 式决定. 为方便起见, 我们取某个振幅 c_l 不为零的点作为零点, 当 N 值给定时有

$$b_0 = c_0/c_0 = 1. \quad (11)$$

$$b_n = b_n(N) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\text{Im} R_{n,0}(N, E + i\varepsilon)}{\text{Im} R_{0,0}(N, E + i\varepsilon)}. \quad (12)$$

(1) 纯非对角无序带中态 ($E = 0$) 的情形

(a) 无限无序体系

在无限的无序链中, 我们选取 $N + 1$ 个粒子, 分别记为 $0, 1, \dots, N$, 点 0 左边的粒子记为 $-1, -2, \dots$, 点 N 右边的粒子记为 $N + 1, N + 2, \dots$.

由于对角有序, 所以我们取 $A_n = 0$. 由 (6) 式我们得到

$$\begin{aligned} \Delta_n(i\varepsilon) &= \frac{1}{i\varepsilon - V_{n,n+1} \Delta_{n+1} V_{n+1,n}} \\ &= \frac{1}{i\varepsilon - \frac{V_{n,n+1}^2}{i\varepsilon - \frac{V_{n+1,n+2}^2}{i\varepsilon - \dots}}} \\ &= -id_n(\varepsilon). \end{aligned} \quad (13)$$

同理可得

$$\Delta_n^-(i\varepsilon) = -id_{-n}(\varepsilon). \quad (14)$$

式中 Δ_n 上的“+”号和 N 已从式中略去, 而

$$d_{\pm n}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon + \frac{V_{\pm n, \pm n \pm 1}^2}{\varepsilon + \frac{V_{\pm n \pm 1, \pm n \pm 2}^2}{\varepsilon + \dots}}} \quad (15)$$

是 ε 和 $\{V_{i,j}\}$ 的实函数。把(13)和(14)两式代入(4)式得

$$R_{0,0}(i\varepsilon) = \frac{1}{i(\varepsilon + V_{0,-1}^2 d_{-1}(\varepsilon) + V_{0,1}^2 d_1(\varepsilon))} = -iR(\varepsilon). \quad (16)$$

式中 $R(\varepsilon) = (\varepsilon + V_{0,-1}^2 d_{-1}(\varepsilon) + V_{0,1}^2 d_1(\varepsilon))^{-1}$ 也是 ε 和 $\{V_{i,j}\}$ 的实函数。由(5)式可得

$$R_{n,0}(i\varepsilon) = (-i)^{n+1} d_n V_{n,n-1} d_{n-1} \cdots d_1 V_{1,0} R.$$

$$\text{Im} R_{n,0}(i\varepsilon) = \begin{cases} (-1)^{\frac{n}{2}+1} d_n V_{n,n-1} d_{n-1} \cdots d_1 V_{1,0} R & \text{当 } n \text{ 是偶数时,} \\ 0 & \text{当 } n \text{ 是奇数时.} \end{cases} \quad (17)$$

把(15)–(17)式代入(12)式,当 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时,得到

$$b_n = \begin{cases} (-1)^{n/2} \frac{V_{n-1,n-2}}{V_{n,n-1}} \frac{V_{n-3,n-4}}{V_{n-2,n-3}} \cdots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}} & \text{当 } n \text{ 是偶数时,} \\ 0 & \text{当 } n \text{ 是奇数时.} \end{cases} \quad (18)$$

在计算(18)式时利用了关系式 $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} d_2 V_{2,1} d_1 V_{1,0} = V_{1,0}/V_{2,1}$ 等式。端点 N 的振幅 b_N 也与 N 的奇偶性有关,即

$$b_N = \begin{cases} (-1)^{N/2} \frac{V_{N-1,N-2}}{V_{N,N-1}} \frac{V_{N-3,N-4}}{V_{N-2,N-3}} \cdots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}} & \text{当 } N \text{ 是偶数时,} \\ 0 & \text{当 } N \text{ 是奇数时.} \end{cases} \quad (19)$$

(b) Stone 模型下的无序体系

在 Stone 模型下, $n < 0$ 和 $n > N$ 的粒子所组成的体系是有序体系, $\epsilon_n = 0$, 并取 $V_0 = V_{n,n+1} = 1 (n > N \text{ 及 } n < 0)$ 。由(6)式可得

$$\Delta_{N+1} = \frac{1}{-\Delta_{N+2}}$$

和

$$\Delta_{N+1} = \Delta_{N+2} = \cdots = \Delta.$$

由此可得

$$\Delta = \pm i,$$

同理对于 $n < 0$ 的粒子也有

$$\Delta^- = \Delta_{-1}^- = \Delta_{-2}^- = \cdots = \pm i.$$

所以,对于 $n < 0$ 和 $n > N$ 的粒子所组成的有序体系有

$$\Delta = \Delta^- = \pm i. \quad (20)$$

为了确定起见,在下面的讨论中我们取 $\Delta = i$ 。把(20)式代入(6)式得到

$$\Delta_N(i\varepsilon) = \frac{1}{i\varepsilon - V_{N,N+1}\Delta_{N+1}V_{N+1,N}} = -i\frac{1}{\varepsilon - V_{N,N+1}^2} = -id'_N(\varepsilon),$$

$$\Delta_n(i\varepsilon) = \frac{1}{i\varepsilon - V_{n,n+1}^2\Delta_{n+1}(i\varepsilon)} = -id'_n(\varepsilon) \quad \text{当 } 1 \leq n \leq N-1 \text{ 时} \quad (21)$$

式中 $d'_N(\varepsilon) = (\varepsilon - V_{N,N+1}^2)^{-1}$ 和 $d'_n(\varepsilon) = (\varepsilon + V_{n,n+1}^2 d'_{n+1}(\varepsilon))^{-1}$ (其中 $1 \leq n \leq N-1$) 都是 ε 和 $\{V_{i,j}\}$ 的实函数。

把(20)和(21)两式代入(4),(5)两式,得

$$R_{0,0}(i\varepsilon) = \frac{1}{i(\varepsilon - 1 + V_{0,1}^2 d'_1(\varepsilon))} = -iR'(\varepsilon). \quad (22)$$

$$R_{n,0}(i\varepsilon) = (-i)^{n+1} d'_n(\varepsilon) V_{n,n-1} \cdots d'_1(\varepsilon) V_{1,0} R'(\varepsilon) \quad (23)$$

(22)式中的 $R'(\varepsilon) = (\varepsilon - 1 + V_{0,1}^2 d'_1(\varepsilon))^{-1}$ 是 ε 和 $V_{0,1}$ 的实函数。

把(22)和(23)两式代入(12)式,并令 $\varepsilon \rightarrow 0$, 则得

$$b_n = \begin{cases} (-1)^{n/2} \frac{V_{n-1,n-2}}{V_{n,n-1}} \frac{V_{n-3,n-4}}{V_{n-2,n-3}} \cdots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}} & \text{当 } n \text{ 是偶数时,} \\ 0 & \text{当 } n \text{ 是奇数时.} \end{cases} \quad (24)$$

当 $n = N$ 时,得

$$b_N = \begin{cases} (-1)^{N/2} \frac{V_{N-1,N-2}}{V_{N,N-1}} \frac{V_{N-3,N-4}}{V_{N-2,N-3}} \cdots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}} & \text{当 } N \text{ 是偶数时,} \\ 0 & \text{当 } N \text{ 是奇数时.} \end{cases} \quad (25)$$

把(18),(19)两式和(24),(25)两式进行比较,可以看出,当 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时 Stone 模型所得的本征矢和无限无序体系所得的本征矢完全一致。

b_n 的表达式(18)或者(24)还可以直接从 Schrödinger 方程(9)得到。由(8),(9)两式得

$$A_n b_n - V_{n,n+1} b_{n+1} - V_{n,n-1} b_{n-1} = 0. \quad (26)$$

现在的情形下, $A_n = 0$, 所以,

$$b_{n+1} = -\frac{V_{n,n-1}}{V_{n,n+1}} b_{n-1}. \quad (27)$$

(18)式要求我们取 $b_0 = 1$, $b_1 = 0$ 作为方程(26)的边界值,由此得到

$$\begin{aligned} b_0 &= 1, \\ b_{2k} &= (-1)^k \frac{V_{2k-1,2k-2}}{V_{2k,2k-1}} \frac{V_{2k-3,2k-4}}{V_{2k-2,2k-3}} \cdots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}}, \\ b_1 &= b_3 = \cdots = b_{2k-1} = \cdots = 0 \end{aligned} \quad (28)$$

所得的解(28)式就是我们已经得到的(18)式或(24)式。这说明在纯非对角无序带中态的特殊情形下,由于 $A_n = 0$, 使得 n 为偶数的粒子和 n 为奇数的粒子之间关连中断,从而使得振幅 b_n 只与 b_{n-2} 有关,本征矢 b_n 按 n 的奇偶性分成互不相关的两组值,它们分别取决于边界值 b_0 和 b_1 。如果我们选取 $b_0 = 1$, $b_1 = 0$ 作为一组边界值,所得的解正好和无限无序体系求解本征矢的 DWW 方法所得的结果一致。而 Stone 模型两端的有序体系恰好给出了正确的边界值 b_1 ,这可以从下面的讨论看出。由(23)式

$$R_{1,0}(i\varepsilon) = -d'_1(\varepsilon) V_{1,0} R'(\varepsilon).$$

所以, $\text{Im} R_{1,0}(i\varepsilon) = 0$ 和

$$b_1 = 0. \quad (29)$$

(29)式正好是求解 $A_n = 0$ 时方程(26)本征矢所需的边值条件.

方程(26)式($A_n = 0$)还有另一组独立的边界值 $b_0 = 0, b_1 = 1$. 从物理上来说, 这两组边界值本质上是相同的, 只不过是根据所研究的体系的性质选取不同的 l 作为零点而已(见(52)式后面一段的讨论).

(2) $E \neq 0$ 和 $E = 0$, 但有对角无序的情形

在此情形下, A_n 一般不等于零.

(a) 无限无序体系

由(6)式 $\Delta_n(E + i\varepsilon)$ 和 $\Delta_{-1}(E + i\varepsilon)$ 为

$$\begin{aligned} \Delta_n(E + i\varepsilon) &= \frac{1}{A_n + i\varepsilon - V_{n,n+1}\Delta_{n+1}V_{n+1,n}} \\ &= \frac{1}{A_n + i\varepsilon - \frac{V_{n,n+1}^2}{A_{n+1} + i\varepsilon - \frac{V_{n+1,n+2}^2}{\ddots}}} \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{-1}(E + i\varepsilon) &= \frac{1}{A_{-1} + i\varepsilon - V_{-1,-2}\Delta_{-2}V_{-2,-1}} \\ &= \frac{1}{A_{-1} + i\varepsilon - \frac{V_{-1,-2}^2}{A_{-2} + i\varepsilon - \frac{V_{-2,-3}^2}{\ddots}}} \end{aligned} \quad (31)$$

由此得到

$$R_{0,0}(E + i\varepsilon) = \frac{1}{A_0 + i\varepsilon - V_{0,-1}\Delta_{-1}V_{-1,0} - V_{0,1}\Delta_1V_{1,0}}, \quad (32)$$

$$R_{n,0}(E + i\varepsilon) = \Delta_n(E + i\varepsilon)V_{n,n-1}\cdots\Delta_1(E + i\varepsilon)V_{1,0}R_{0,0}(E + i\varepsilon). \quad (33)$$

$\Delta_n, \Delta_{-1}, R_{0,0}$ 和 $R_{n,0}$ 一般都是既有实部, 又有虚部的复函数, 在文献 [9] 中已得到了在 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时它们的渐近行为, 它们是

$$\begin{aligned} \text{Re } \Delta_n^\pm(E + i\varepsilon) &\xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \text{const} = \Delta_n^\pm(E), \\ \text{Im } \Delta_n^\pm(E + i\varepsilon) &\xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \text{const} \times \varepsilon = k_n\varepsilon, \\ \text{Re } R_{0,0}(E + i\varepsilon) &\xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \text{const} = R_{0,0}(E), \\ \text{Im } R_{0,0}(E + i\varepsilon) &\xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \text{const} \times \varepsilon = k_0\varepsilon. \end{aligned} \quad (34)$$

把(33)和(34)两式代入(10)式, 得

$$b_n = \Delta_n(E)V_{n,n-1}\cdots\Delta_1(E)V_{1,0}\left(\frac{k_n}{\Delta_n(E)} + \frac{k_{n-1}}{\Delta_{n-1}(E)} + \cdots + \frac{k_0}{R_{0,0}(E)}\right). \quad (35)$$

(35)式括号前面的因子 $\Delta_n(E)V_{n,n-1}\cdots\Delta_1(E)V_{1,0}$ 即为 E 是分立谱本征值时的本征矢振幅^[7].

(b) Stone 模型下的无序体系

对于由 $n < 0$ 和 $n > N$ 的粒子所组成的有序体系, $\epsilon_n = 0$, 并取 $V_0 = 1$, 则有

$$\Delta_n^\pm(E) = \frac{1}{E - \Delta_{n\pm 1}^\pm}.$$

由于 $\Delta_{N+1} = \Delta_{N+2} = \cdots = \Delta_{-1} = \Delta_{-2} = \cdots = \Delta$, 所以有

$$\Delta(E) = \frac{E}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{E^2 - 4}. \quad (36)$$

当 $|E| < 2$ 时 $\Delta(E)$ 是个复数, 即

$$\Delta(E) = \frac{E}{2} \pm \frac{i}{2} \sqrt{4 - E^2}. \quad (37)$$

而

$$R_{0,0}(E + i\epsilon) = \frac{1}{A_0 + i\epsilon - \Delta(E) - V_{0,1}^2 \Delta_1(E + i\epsilon)}. \quad (38)$$

由于我们已经得到了 $\Delta_{N+1}(E) = \Delta(E)$, 所以(38)式中的 $\Delta_1(E + i\epsilon)$ 可以由(6)式通过递推求得, 即

$$\Delta_n(E + i\epsilon) = \frac{1}{A_n + i\epsilon - V_{n,n+1}^2 \Delta_{n+1}} \quad 0 \leq n \leq N \quad (39)$$

把(38)和(39)两式代入(5)式和(12)式, 即可求得 $R_{n,0}(E + i\epsilon)$ 和本征矢振幅 b_n .

由于 Stone 所研究的 N 个粒子的无序体系的两端与有序体系相连接, $\Delta(E)$ 由有序体系的能量 ϵ_0 和 V_0 完全确定((37)式的更一般的表达式为

$$\Delta(E) = (E - \epsilon_0)/2V_0^2 \pm i\sqrt{4V_0^2 - (E - \epsilon_0)^2}/2V_0^2.$$

由于 Stone 模型下的振幅 b_n 依赖于 $\{V_{i,j}\}$, $\{\Delta_i(E + i\epsilon)\}$ 和 $R_{0,0}(E + i\epsilon)$, 而 Δ_i 和 $R_{0,0}$ 又通过 Δ_i 的递推关系依赖于 $\Delta(E)$, 所以它的本征矢振幅 b_n 不仅取决于 N 个粒子无序体系的 ϵ_n 和 $V_{n,n+1}$, 而且还取决于有序体系的能量 ϵ_0 和 V_0 , 而无限无序体系的振幅 b_n 表达式 (35) 不仅依赖于 N 个粒子的无序性质, 而且还通过 Δ_n 依赖于 $n > N$ 点粒子的无序性质和通过 $R_{0,0}$ 依赖于 $n < 0$ 点粒子的无序性质. 这清楚地表明了, 我们所研究的 N 个粒子体系的本征态是受到该体系之外的粒子的性质的影响的.

2. 初值问题

这里所说的初值问题是指在给定能量 E , 并取 $b_l = 1$ 时, 求满足方程 $Hv = Ev$ 的一支解 b_{l+n} (或者 b_{l-n}), 这里 $b_{l\pm n} = c_{l\pm n}/c_l$ 是 v 在基矢 $u_{l\pm n}$ 上的振幅. 取 l 点为我们的零点, 则 $b_n(E)$ 为

$$b_n(E) = \Delta_n(E) V_{n,n-1} \Delta_{n-1}(E) \cdots \Delta_1(E) V_{1,0} \quad (40)$$

和边值问题一样, 我们也分两种情形来讨论.

(1) 纯非对角无序带中态 ($E = 0$) 的情形

(a) 无限无序体系

由于 $A_n = 0$, 所以我们有

$$\Delta_{n-1}(E) = \frac{1}{-V_{n-1,n}^2 \Delta_n(E)}$$

或

$$\Delta_n V_{n,n-1} \Delta_{n-1} V_{n-1,n-2} = -V_{n-1,n-2} / V_{n,n-1}. \quad (41)$$

把(41)式代入(40)式, 得到

$$b_n(E) = \begin{cases} (-1)^{n/2} \frac{V_{n-1,n-2}}{V_{n,n-1}} \frac{V_{n-3,n-4}}{V_{n-2,n-3}} \dots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}} & \text{当 } n \text{ 是偶数时,} \\ (-1)^{\frac{n-1}{2}} \Delta_n V_{n,n-1} \frac{V_{n-2,n-3}}{V_{n-1,n-2}} \dots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}} & \text{当 } n \text{ 是奇数时.} \end{cases} \quad (42)$$

下面我们来讨论当 n 为奇数时 Δ_n 的性质. 由(6)式可得

$$\Delta_n = \frac{1}{-V_{n,n+1}^2 \Delta_{n+1}} = \frac{1}{-\frac{V_{n,n+1}^2}{-\frac{V_{n+1,n+2}^2}{\dots}}}. \quad (43)$$

这是一个无穷的连分式, 它可写为

$$\Delta_n = \begin{cases} \lim_{k \rightarrow \infty} (-1)^k \frac{V_{n+1,n+2}^2}{V_{n,n+1}^2} \frac{V_{n+3,n+4}^2}{V_{n+2,n+3}^2} \dots \frac{V_{n+k-1,n+k}^2}{V_{n+k-2,n+k-1}^2} & \text{当 } k \text{ 为偶数时,} \\ \lim_{k \rightarrow \infty} (-1)^k \frac{V_{n+1,n+2}^2}{V_{n,n+1}^2} \frac{V_{n+3,n+4}^2}{V_{n+2,n+3}^2} \dots \frac{V_{n+k-2,n+k-1}^2}{V_{n+k-3,n+k-2}^2} V_{n+k-1,n+k}^2 & \text{当 } k \text{ 为奇数时.} \end{cases} \quad (44)$$

我们讨论 k 为偶数的情形 (当 k 为奇数时, 可令 $x = \ln |\Delta_n| - \ln V_{n+k-1,n+k}^2$, 从下面的讨论可以看出这对 Δ_n 的结果并无影响), 并令

$$x = \ln |\Delta_n|, \quad (45)$$

则

$$x = \sum_{k=2,4,\dots}^{\infty} \ln \left(\frac{V_{n+k-1,n+k}^2}{V_{n+k-2,n+k-1}^2} \right)^2 = \sum_{k=2,4,\dots}^{\infty} \xi_k \quad (46)$$

其中 $\xi_k = 2(\ln V_{n+k-1,n+k} - \ln V_{n+k-2,n+k-1})$ 是一组相互独立的随机变量, 它们都具有相同的平均值 $\langle \xi_k \rangle = 0$ 和相同的方差 $\sigma^2 = \langle \xi_k^2 \rangle$, 根据中心极限定理, 当 $m = \frac{k}{2} \rightarrow \infty$ 时, $\ln |\Delta_n|$ 的值在 x 和 $x + dx$ 之间的几率 $f(x)$ 为

$$f(x)dx = A \exp \left[-\frac{x^2}{2m\sigma^2} \right] dx. \quad (47)$$

式中 A 为归一化常数. 如果我们再令

$$\lambda = x/\sqrt{m}, \quad (48)$$

则

$$f(\lambda)d\lambda = A_1 \exp \left(-\frac{\lambda^2}{2\sigma^2} \right) d\lambda. \quad (49)$$

(49)式说明 λ 的值服从中心为零的正态分布. 由(45)和(48)式可得

$$|\Delta_n| = \exp(\sqrt{m}\lambda). \quad (50)$$

当 $m \rightarrow \infty$ 时, 有

$$|\Delta_n| \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{当 } \lambda < 0 \text{ 时,} \\ \infty & \text{当 } \lambda > 0 \text{ 时.} \end{cases} \quad (51)$$

回想起我们最初的假设: $c_0 \neq 0, b_0 = 1$ 和 $b_n = c_n/c_0$. 由(42)式得到 $b_1 = \Delta_1 V_{1,0}$, 假如 $\Delta_1 \rightarrow \infty$, 则 $b_1 \rightarrow \infty$, 由此得到 $c_0 \rightarrow 0$, 这和我们的假设 $c_0 \neq 0$ 相矛盾, 所以我们只能选取 $\Delta_1 = 0$. 同理可得, 对于奇数 n 都有 $\Delta_n = 0$. 把此结果代入(42)式, 得到

$$b_N = \begin{cases} (-1)^{n/2} \frac{V_{n-1,n-2}}{V_{n,n-1}} \frac{V_{n-3,n-4}}{V_{n-2,n-3}} \dots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}} & \text{当 } n \text{ 是偶数时,} \\ 0 & \text{当 } n \text{ 是奇数时.} \end{cases} \quad (52)$$

这里所得到的 b_n 表达式(52)式和本征值问题所得到的 b_n 表达式(18)式完全一致.

现在我们来进一步讨论 $\Delta_1 \rightarrow \infty$ 的情形. 若 $\Delta_1 \rightarrow \infty$, 则 $c_0 \rightarrow 0$, 这说明我们不能选择该点作为我们的零点. 在 $c_0 = 0$ 的情形下, $c_1 \neq 0$, 所以我们可以选取 $b_1 = 1$, $b_2 = \Delta_2 V_{2,1}, \dots$. 当 $\Delta_1 \rightarrow \infty$ 时, Δ_2 必定趋于零, 所以 $b_2 = b_4 = \dots = 0$. 这样我们就得到这样一组解:

$$b_1 = 1$$

$$b_n = \begin{cases} (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{V_{n-1,n-2}}{V_{n,n-1}} \frac{V_{n-3,n-4}}{V_{n-2,n-3}} \dots \frac{V_{2,1}}{V_{3,2}} & \text{当 } n \text{ 是奇数时,} \\ 0 & \text{当 } n \text{ 是偶数时.} \end{cases} \quad (53)$$

(53)式的 b_n 表达式和(52)式的完全类似, 所不同的只是把(52)式中的 $b_0 = 1$ 变为 $b_1 = 1$, 并把(52)式中的 n 为偶数的表达式和 n 为奇数的表达式交换而已. 从(27)式来看, 只是从一组边界值 $b_0 = 1, b_1 = 0$ 变到另一组边界值 $b_0 = 0, b_1 = 1$. 这两组解代表同一无序体系的本征态. 而值得注意的是我们必须选取 $c_l \neq 0$ 的 l 点作为我们的基点.

(b) Stone 模型下的无序体系

在 Stone 模型的情形下, 当 $n > N$ 时为有序体系, 所以有

$$\Delta = \Delta_{N+1} = \Delta_{N+2} = \dots = \pm i. \quad (54)$$

$$\Delta_n = \frac{1}{-V_{n,n+1}^2 \Delta_{n+1}} = \frac{1}{-V_{n,n+1}^2} \frac{1}{-V_{n+1,n+2}^2 \Delta_{n+2}} = \dots = \frac{1}{-V_{n,n+1}^2 \dots -V_{N,N+1}^2 \Delta} \quad 0 \leq n \leq N. \quad (55)$$

把(54)式代入(42)式, 我们得到 $b_n (1 \leq n \leq N)$

$$b_n = \begin{cases} (-1)^{n/2} \frac{V_{n-1,n-2}}{V_{n,n-1}} \frac{V_{n-3,n-4}}{V_{n-2,n-3}} \dots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}} & \text{当 } n \text{ 是偶数时,} \\ i(-1)^{N-\frac{n-1}{2}} \frac{V_{N+1,N}^2}{V_{N,N-1}^2} \dots \frac{V_{n+2,n+1}^2}{V_{n+1,n}^2} V_{n,n-1} \frac{V_{n-2,n-3}}{V_{n-1,n-2}} \dots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}} & \text{当 } n \text{ 是奇数, 而 } N \text{ 是偶数时,} \\ -i(-1)^{N-\frac{n-1}{2}} \frac{V_{N,N-1}^2}{V_{N+1,N}^2} \dots \frac{V_{n,n-1}}{V_{n+1,n}^2} \dots \frac{V_{1,0}}{V_{2,1}} & \text{当 } n, N \text{ 都为奇数时.} \end{cases} \quad (56)$$

(56)式中已取了 $\Delta = i$.

从(56)式可以看出, 由于 Stone 在 N 个粒子的无序体系的边界上加了半无限的有序体系, 使得 Δ_{N+1} 有确定的值 $\pm i$, 从而使得(55)式的 Δ_n 也有不为零的值. 比较(52)和(56)两式可以看出, 当 n 是偶数时, 两种情形给出相同的 b_n ; 但当 n 是奇数时, 无限无序体系给出 $b_n = 0$, 而 Stone 模型下的体系给出非零的 b_n , Stone 的有序边界改变了 n 为奇数的本征矢振幅 b_n .

(2) $E \neq 0$ 和 $E = 0$ 但有对角无序的情形

在这种情形下, A_n 一般不等于零.

(a) 无限无序体系

对于这样的无限无序体系, Δ_n 和 b_n 的表达式分别由(6)式和(40)式决定, 我们把 Δ_n 写成连分式的形式, 则

$$\Delta_n = \frac{1}{A_n - \frac{V_{n,n+1}^2}{A_{n+1} - \frac{V_{n+1,n+2}^2}{A_{n+2} - \ddots}}} \quad (57)$$

$$b_n = \Delta_n V_{n,n-1} \Delta_{n-1} \cdots \Delta_1 V_{1,0}. \quad (58)$$

从(57)和(58)两式可以看出, 由于 Δ_n 和所有的序号大于和等于 n 的粒子的状态有关, 所以振幅 b_n 将依赖于 $n \geq 0$ 的粒子的无序状态.

(b) Stone 模型下的体系

对于 Stone 模型, 当 $n > N$ 时体系是有序的, $\Delta_n = \Delta$, Δ 由(37)式给出. 当 $n \leq N$ 时 Δ_n 由递推关系可以得到

$$\begin{aligned} \Delta_N &= (A_N - V_{N,N+1}^2 \Delta)^{-1}, \\ \Delta_{N-1} &= (A_{N-1} - V_{N-1,N}^2 \Delta_N)^{-1}, \\ &\dots\dots\dots \\ \Delta_1 &= (A_1 - V_{1,2}^2 \Delta_2)^{-1}. \end{aligned} \quad (59)$$

把(59)式代入(40)式, 即可得到 b_n 的表达式. 由于 b_n 依赖于 $V_{i,j}$ 和 Δ_i ($i, j \leq n$), 而 Δ_i 又通过 Δ 依赖于有序体系的能量参数 ϵ_0 和 V_0 , 所以 b_n 不仅依赖于 N 个粒子的无序体系的状态, 而且还依赖于有序体系的 ϵ_0 和 V_0 . 所以 Stone 模型下所得的振幅 b_n 是和无限无序体系下所得的 b_n 是不同的.

四、结 论

Stone 等人在一个 N 个粒子的无序链的两端各加了一个半无限的有序链, 把一个求 Δ_n 的无穷连分式的问题简化为求如(39)式所表示的递推关系, 如果可行, 这样做不仅节省了计算时间, 而且还能大大地提高计算本征矢振幅 b_n 的精确度.

从上一节的分析比较中可以得出, 只有在纯非对角无序带中态的本征值问题时, Stone 模型才给出与无限无序体系完全相同的本征矢 b_n . 因为只有在这种情形下, Stone 模型的有序边界条件才给出确定振幅 b_n 所要求的正确的边界值 $b_1 = 0$. 除此以外, Stone 模

型所得的本征矢振幅 b_n 。除了与 N 个粒子的无序体系的性质直接有关外,在本征值问题中, b_n 还通过 $R_{n,0}$ 和 Δ_n 依赖于两端的有序体系的性质,而在初始值问题中, b_n 还通过 Δ_n 依赖于右端($n > N$)的有序体系的性质。而在无限无序体系的情形下, b_n 这种与有序体系性质依赖关系应为 b_n 依赖于 $n > N$ 和 $n < 0$ 的无序体系性质(本征值问题)和 b_n 依赖于 $n > N$ 的无序体系性质(初始值问题)所代替。由此我们可以看出边界条件对本征矢的影响。

我们知道对于一个无序体系,在给定的允许精度下, (6) 式的无穷连分式 Δ_n 会在某一链长(比如说 L)下收敛到某一定值,通常 L 是与体系的局域长度成比例的。从上节的讨论可以看出,假如我们要计算一个有 N 个粒子的无序体系,如果我们在这个体系的两端各保留一个长度为 $\bar{L}d$ (其中 $\bar{L}$ 为 Δ_n 的平均收敛长度, d 为晶格间距)的 $\bar{L}$ 个粒子的无序链,则边界的影响可以除去,我们就能从 Stone 模型得到精确的本征矢,从而再现了无序体系的性质。

参 考 文 献

- [1] S. Y. Wu and Zhao-bo Zhang, *Phys. Rev. B*, **24**(1981), 4787.
- [2] Kazushige Ishii, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, **53**(1973), 77.
- [3] A. MacKinnon, *J. Phys. C*, **13**(1980), L1031.
- [4] D. Deuglas Stone, J. D. Joannopoulos and D. J. Chadi, *Phys. Rev. B*, **24**(1981), 5583.
- [5] K. S. Dy, S. Y. Wu and C. Wongtawatnugool, *J. Phys. C*, **12**(1979), L141.
- [6] S. Y. Wu, C. C. Tung and M. Schwartz, *J. Math. Phys.*, **15**(1974), 938.
- [7] C. Wongtawatnugool and S. Y. Wu, *J. Math. Phys.*, **22**(1981), 633.
- [8] 吴式玉、郑兆勃,物理学进展, **4**(1984), 12.
- [9] C. Wongtawatnugool, Ph. D. Thesis, Univ of Louisville, (1982).

BOUNDARY EFFECTS ON THE EIGENSTATES OF DISORDERED SYSTEMS

WU SHI-YU ZHOU ZI-FANG

(Department of Physics, University of Louisville, Louisville, KY 40292, U. S. A.)

ABSTRACT

A careful analysis of the boundary effects on the eigenstates of a disordered system when it is embedded in an ordered system was carried out. It was found that the properties of the system in the region whose distance from the boundary is greater than the localization length of the system can be reproduced. This then suggests a convenient way to study the eigenstates of disordered systems.