

非均匀无序系统中 Anderson 局域化的 标度理论——实空间重整化群途径*

熊诗杰 蔡建华

(南京大学固体物理研究所)

1984年10月30日收到

提 要

针对大量具有空间调制的无序系统,本文提出一种实空间重整化群变换方案. 这个方案保证了在空间映象下相对的空间调制结构不变,因此可用以研究非均匀无序系统 Anderson 局域化的临界性质. 在有限晶格近似下,我们对无序金属超晶格的一个简化模型求解了 RG 方程,得到不动点和临界指数的近似值,并发现空间调制在一定程度上引起无序系统电子局域化性质的改变.

一、引 言

近年来,已经对均匀无序系统的 Anderson 局域化问题^[1]进行了大量的理论研究^[2-6]. 这些工作的目的在于:(1)证实迁移率边的存在;(2)了解相变的特征并计算临界参数;(3)证实最小金属电导的存在. 现有的工作表明,这些问题的答案取决于电子系统的维数. 一般公认,对一维无序系统,所有的电子态都是局域的,当维数 $d > 2$ 时,存在迁移率边 E_c ,它是局域态和扩展态的边界,而对二维电子系统,通过 RG 分析表明^[7,8],不存在迁移率边,所有的电子态都是局域的.

所谓均匀的无序系统,是指其无规参数在空间所有的点满足相同的统计系综,于是很自然地产生一个问题,如果无规系统是不均匀的,即统计系综与空间坐标有关,Anderson 局域化问题如何表述与处理?

这个问题有着明显的实际意义,各种组分调制合金^[9,10],无序超晶格,以及由非晶膜组成的层状结构,都可看作这种非均匀的无序系统. 针对这种系统的平均场理论(CPA 方法),张昭庆在1980年提出一种处理方法^[11],后来, Gonis^[12]及本文作者之一^[13]亦做了一些发展. 但这种平均场方法难以解决局域化问题. 从物理上考虑,这种系统的电子局域化性质应是相当复杂的. 文献[14]表明,即使对排除了无序因素的完整超晶格,电子态仍可分为扩展的(三维的)及面束缚的(准二维的)两种. 如前所述,无序对三维和二维系统的影响是很不相同的. 因此,可以期望,这种三维和准二维的混合系统在加上无序后应有一

* 中国科学院科学基金资助的课题.

些令人感兴趣的性质。

从以上考虑出发,本文试图将实空间重整化群方法加以推广,使之能应用到非均匀无序系统的电子局域化问题上,其基本原则在于,构造一种实空间 RG 变换,使得在空间映射下维持统计系综空间分布的相似性,变换后的系统应仍能保持原有系统的基本物理特征。从直观上看,经过粗粒平均后非均匀性应被“抹平”。但是,如果事先赋予非均匀系统以超晶格的周期性(这在原则上不影响问题的一般性),那末以超原胞作为空间的“基本单位”来看,系统仍是均匀的,只不过这时系统应由 l 个独立的统计系综所描述,它们对应于超原胞内的不同格点。从这个意义上说,实空间的标度变换应是可行的。我们尝试采用粗粒局部对角化表象下的 Hilbert 空间的投影技术来实现这样的变换。它一方面对应着空间标度的变化,另一方面还对应着由 l 个独立统计系综所张成的函数空间的变换,得到的函数空间仍应具有从泛函意义上说是独立的 l 个分布函数。这样,从物理上说新的系统仍具有超晶格的特性。下面具体描述模型、变换步骤及数值计算的结果。

二、非均匀无规系统的哈密顿模型

考虑单能带紧束缚电子哈密顿量

$$H = \sum_m |m\rangle \varepsilon_m \langle m| + \sum_{m \neq n} |m\rangle V_{mn} \langle n|. \quad (1)$$

其中 m, n 是格点位置,只考虑对角元素的无规分布。对非均匀系统,不同格点上的对角元 ε_m 满足不同的统计系综,其概率密度记作 $P_m(\varepsilon)$ 。为方便计,我们赋予这种非均匀性以一定的空间周期性,在这种周期性的基础上构成空间超晶格,令 $\mathbf{R}$ 为该超晶格的格矢,则有

$$P_{m+\mathbf{R}}(\varepsilon) = P_m(\varepsilon). \quad (2)$$

设超原胞内包含 l 个格点,则无规系统具有 l 个不同的概率密度 $P_1(\varepsilon), P_2(\varepsilon), \dots, P_l(\varepsilon), \dots, P_l(\varepsilon)$, 所有格点上能量分布的概率密度都可通过(2)式用这 l 个分布函数来表示。

注意到这种超原胞的周期性,可把系统的哈密顿量(1)式改写成

$$\begin{aligned} H = & \sum_n \sum_i |n, i\rangle \varepsilon_{n,i} \langle n, i| + \sum_n \sum_{ii'} |n, i\rangle V_{ni,ni'} \langle n, i'| \\ & + \sum_{n \neq n'} \sum_{ii'} |n, i\rangle V_{ni,n'i'} \langle n', i'|. \end{aligned} \quad (3)$$

其中 n, n' 是超原胞的标号, i, i' 是超原胞内原子的标号。

我们假设不同格点间没有统计上的相关。

三、一般重整化群途径

重整化群方法在临界现象和 Kondo 效应的理论研究上获得很大的成功^[12]。这里我们试图把重整化群的思想推广应用到由哈密顿(3)式所描绘的系统中。为此,首先必须构

造一个实空间的标度变换,使变换后的新系统的长度标度缩小 b 倍,即 $L' = L/b$, 超原胞数缩小 b^d 倍,亦即 $N' = N/b^d$, 这里 d 是系统的维数,但应保持每个超原胞内的原子数及其空间构型不变,这样,新系统将仍然具有类似于原来的系统的空间不均匀性。然后,求出描述新系统的哈密顿量 H' , 由映象 $H \rightarrow H'$, 就可以得到我们所需要的 RG 方程。

对于哈密顿(3)式,一开始,我们只考虑对角元素的无规分布。为简单起见,我们只计及最近邻原子间的非对角矩阵元,并认为它们是均匀的,这样就可以选取适当的能量单位使 $V_{ni,ni'} = 1$ 。于是系统的统计性质将由 l 个概率密度 $P_1(\epsilon), P_2(\epsilon), \dots, P_l(\epsilon)$ 所组成的集合 $\{P(\epsilon)\}$ 所决定。 RG 变换后的新哈密顿量 H' , 也将由另一个函数集合 $\{P(\epsilon)\}'$ 所决定,这样,算子空间的映象 $H \rightarrow H'$ 就可以由函数空间的映象 $\{P(\epsilon)\} \rightarrow \{P(\epsilon)\}'$ 所代替¹⁾。

更进一步,我们可将概率密度用其各阶矩来表征

$$\sigma_{ij} = \int_{-\infty}^{+\infty} \epsilon^i P_i(\epsilon) d\epsilon. \quad (4)$$

这里 $P_i(\epsilon)$ 是已归一化的,即

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P_i(\epsilon) d\epsilon = 1. \quad (5)$$

以 $\{\sigma\}$ 代表所有的矩的集合,在 RG 变换下参数空间 $\{\sigma\}$ 的映象 $\{\sigma\} \rightarrow \{\sigma'\}$ 亦可完全代表算子空间的映象 $H \rightarrow H'$ 。

这里必须注意的是,尽管我们已对 H 的非对角元作了一定的限制,但其映象 H' 不一定能满足这些限制,它可能出现更高阶的近邻的非对角元,而且非对角元也是混乱分布的,因此一般来说,在参数空间 $\{\sigma\}$ 中应该包含所有非对角元的各阶矩。当然,在具体的计算中,为了使计算能够进行,必须对 H' 的高阶近邻非对角元及高阶矩做切断近似。

在 RG 变换之前,能量本征值 E 所对应的电子态 $|\phi\rangle$ 满足 Schrödinger 方程

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle. \quad (6)$$

如果这个态是局域的,则局域化长度 L 是 $\{\sigma\}$ 及 E 的函数

$$L = L(\{\sigma\}, E). \quad (7)$$

经过 RG 变换,方程(6)演变成

$$H'|\phi'\rangle = E'|\phi'\rangle, \quad (8)$$

由 E 和 $\{\sigma\}$ 构成的参数空间在标度变换下映照到新的空间

$$\sigma'_{ij} = f_{ij}(\{\sigma\}, E), \quad (9)$$

$$E' = g(\{\sigma\}, E). \quad (10)$$

如果态 $|\phi\rangle$ 是局域的,其局域化长度为 L , 那末态 $|\phi'\rangle$ 的局域化长度将为

$$L' = b^{-1}L, \quad (11)$$

这时 L' 应是 $\{\sigma'\}$ 和 E' 的函数,利用(7)式,可得如下方程:

$$L(\{\sigma'\}, E') = b^{-1}L(\{\sigma\}, E). \quad (12)$$

1) 函数空间 $\{P(\epsilon)\}$ 应有以下性质: (1) 它由 l 个在泛函意义上说是独立的分布函数所构成,一切其他量都可由这 l 个函数的泛函所表达; (2) 这 l 个分布函数分别对应于超原胞内的不同格点。在这一点上它不同于均匀的各向异性系统,在那里不同的分布函数对应于不同的方向。在物理上有意义的标度变换应保持以上两个特点不变。

RG 变换的不动点可由下列方程求出:

$$\sigma_{ij}^* = f_{ij}(\{\sigma^*\}, E^*), \quad (13)$$

$$E^* = g(\{\sigma^*\}, E^*). \quad (14)$$

方程(13),(14)构成 RG 不动点方程.

四、RG 变换的具体形式及其数值结果

假设点阵结构是三维简立方, x, y, z 沿三个晶轴方向, 系统在 x, y 方向是均匀的, 在 z 方向是周期性调制的, 每个调制周期包含 l 个原子平面. 这样在只计及对角无序的情况下, 这个无规系统由 l 个独立的统计系综所描述, 每个统计系综对应于超原胞中的一个格点. 现在我们做标度变换, 把超原胞在 x, y, z 三个方向都扩大 l 倍, 这样得到的“新超原胞”包含了 l^3 个原来的超原胞. 如果我们希望仍能够把标度变换后的系统哈密顿量写成类似于(3)式的形式, 必须用某种投影技术来确定新系统的新的格点波函数. 新超原胞内的不同新格点仍然对应于不同的统计系综. 在进行这样的步骤之前, 我们关心的是, 这样的标度变换是否会扭曲(尤其是抹平)原来的超晶格结构. 下面的分析表明, 如果变换后的系统仍能在结构平均的意义上(亦即从物理可观测量的含义上说)充分地描述了原来的物理系统, 那末在新超原胞内仍应包含 l 个新格点, 也就是说变换前后的超晶格在结构上是相似的.

假设变换后的新超原胞包含着 l' 个新格点, 变换后的哈密顿量仍可用(3)式表达, 只不过在每个量上加上标硬撇以区别于原来的系统. 那末其对角元可用 l' 个统计系综来表述, 记作 $P'_1(\varepsilon), P'_2(\varepsilon), \dots, P'_{l'}(\varepsilon)$. 既然新系统是由原来的系统经过一定的投影手续得到的, 带撇的量与不带撇的量之间有确定的对应关系, 因此新的统计系综应是原来的统计系综的泛函, 即

$$P'_i(\varepsilon) = f_i[P_1(\varepsilon), P_2(\varepsilon), \dots, P_l(\varepsilon)] \quad i = 1, 2, \dots, l'. \quad (15)$$

而任何一个可观测量 A 在原来的系统中也可写成泛函的形式

$$A = F[P_1(\varepsilon), P_2(\varepsilon), \dots, P_l(\varepsilon)]. \quad (16)$$

如果新的系统仍能从物理上充分描述原来的系统, 那末 A 应也能写成 $P'_1(\varepsilon), P'_2(\varepsilon), \dots, P'_{l'}(\varepsilon)$ 的泛函形式

$$A = F'[P'_1(\varepsilon), P'_2(\varepsilon), \dots, P'_{l'}(\varepsilon)]. \quad (17)$$

如果 $l' > l$, 那末可从(15)式看出, P'_i 中有 $l' - l$ 个系综不是独立的, (17)式只能在 l' 维函数空间内的某个子空间内有意义, 因此不能用这 l' 个独立统计系综来描述原来的系统. 同样, 如果 $l' < l$, 可以从(15)式看出, 只有原来系统的 l 维函数空间的一个子空间才能在新的系统中反映出来, (16)式只能在这个子空间内有意义, 这同样是不能允许的.

因此, 出于物理上的考虑, 在标度变换中既不能抹平原来的超晶格结构, 也不能造出新的结构, 只能维持结构的相似性. 当然, 作为一种变换, 在具体形式的选取上存在着一定的人为的任意性, 但上述原则是不能违背的.

作为对这种非均匀无序系统进行实空间重整化群处理的一种尝试, 我们构造了具有如同图 1 所示的新超原胞和新格点的变换形式, 新超原胞内的不同新格点仍然沿 z 方向

分布,其个数与原来的系统相同.从图1中可以看出,每个新格点都包含了若干个原有系统的超原胞.有必要对不同的新格点采用不同的投影方式,以便得到对应于新格点的 l 个独立的统计系综.

首先,我们将系统的哈密顿量写成两个部分

$$H = H_0 + H_I. \quad (18)$$

其中 H_0 包含对角元及每个“新格点”内部的格点间的跨越积分(图1中的实线所示).而 H_I 则包含不同“新格点”间的跨越积分(图1中用虚线表示).如果 H_0 的归一化本征矢是已知的

$$\begin{aligned} H_0 |\phi_n\rangle &= E_n |\phi_n\rangle, \\ \langle \phi_m | \phi_n \rangle &= \delta_{mn}. \end{aligned} \quad (19)$$

那末可用这些本征矢构成 Hilbert 空间 $\mathcal{Q}$ 的基,在这种表象下,可得到一种想象中的超晶格,它的结构仍如图1所示,但这时每个格点的格点能对应于 H_0 的一个能量本征值 E_n ,而图1中的实线所代表的格点间的跨越积分消失了.从统计系综的观点来看,在一个超原胞内的各个格点的 E_n 所满足的分布函数仍是各不相同的.现在我们在这样的表象下进行 Hilbert 空间的投影.具体做法是:在每个“新格点”内选择一个格点所对应的态,而对同一个“新超原胞”内的不同的“新格点”所选用的格点在统计上是不等价的.用这些态作为基,所构成的空间是 Hilbert 空间 $\mathcal{Q}$ 的一个子空间 D ,投影算符 P_D 将把 $\mathcal{Q}$ 空间内的任何一个态投影到子空间 D 上.

设 $|\phi\rangle$ 是 H 的本征态

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle. \quad (20)$$

$|\phi_D\rangle$ 是它在 D 空间中的投影

$$|\phi_D\rangle = P_D |\phi\rangle. \quad (21)$$

很明显, $|\phi_D\rangle$ 满足本征方程

$$H_D |\phi_D\rangle = E |\phi_D\rangle. \quad (22)$$

其中

$$H_D = H_0 + V \quad (23)$$

V 可由算符方程解出

$$V = H_I + H_I \frac{1 - P_D}{E - H_0} V. \quad (24)$$

很明显,每个“新格点”对应着子空间 D 的一个基,不同的基是互相正交的.如果对每个新超原胞内的不同新格点分别采用统计上不等价的投影规则(例如,分别取 H_0 的对应于不同能量值范围的本征态作为 D 的基),并取 H_D 为 H' ,那末经过(21)–(24)式算出的 H' 的对角元将分别满足 l 个不同的统计系综,并对应于新超原胞内的不同新格点.据(15)–(17)式,这 l 个系综可完整地描述原来的物理系统,所有可观测量都能用它们的泛函表出. l 维函数空间的这个变换亦可用由各阶矩构成的参数空间表出.

在数值计算中我们将采用如下近似:(1)哈密顿量只保留最近邻的跨越积分;(2)对角元的概率分布的矩只取到二阶,忽略非对角元的无序性;(3)采用有限晶格近似;(4)只对统计系综中的有限组态进行统计平均,以求出各阶矩.

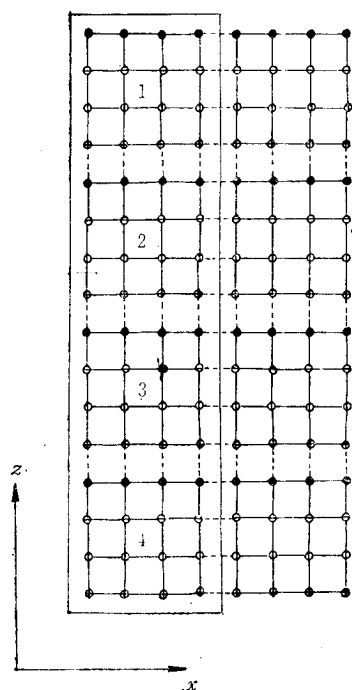


图1 无序超晶格在 x - z 剖面上的一个片断简立方点阵, z 轴是调制方向, y 方向的形态与 x 方向相同. 超原胞的原子数 $l=4$, 格点的不同表示法指明它们分别对应于 4 个不同的概率分布. 尺度重整化因子 $b=4$, 方框代表 RG 变换后的“新超原胞”, “新超原胞”内仍有 4 个“新格点”, 分别对应于不同的新的概率分布

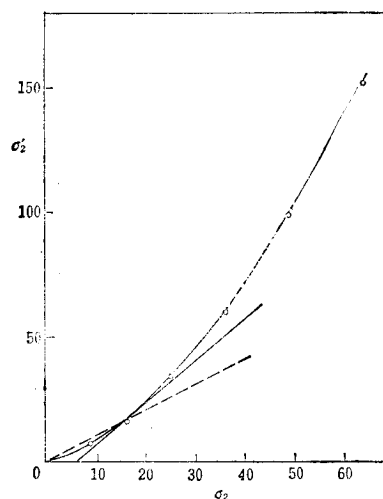


图2 对 $l=2$ 的无序超晶格进行 RG 变换后的 σ'_2 随 σ_2 变化曲线. 取 $E=0, \sigma_1=0$, 已选取适当的投影算符使 σ_1 保持不变. 虚线代表 $\sigma'_2 = \sigma_2$ 线, 它与曲线的交点给出了不动点 $\sigma_2^* = 15.0$. 实线是不动点上的切线, 用其斜率由 (26) 式计算出临界指数 $\nu \approx 1.27$

在上述近似下, 我们对每个超原胞内只包含两个原子的无序超晶格进行了数值计算. 在这种情况下, 空间重整化因子 $b=2$, 对角元所满足的统计系综由两个概率密度函数 $P_a(\epsilon)$ 与 $P_b(\epsilon)$ 所表述, 非对角元是均匀的并选为能量的单位. 为使参数空间简化起见, 设定 $P_a(\epsilon)$ 与 $P_b(\epsilon)$ 的二阶矩相等, 且忽略三阶以上的矩, 取适当的能量零点, 使 $\sigma_{1a} = -\sigma_{1b} \equiv \sigma_1$, 这样集合 $\{\sigma\}$ 中只留下两个参数 σ_1 和 σ_2 . 一阶矩符号的不同反映出 a, b 两个原子平面具有不同的平均格点能, 这对超晶格的物理性质是重要的. 对每一个超晶格样品, 选取 $5 \times 5 \times 5$ 个超原胞, 对整个统计系综, 选取 200 个样品进行数值计算. 计算步骤按 (15)–(21) 式指明的过程进行, 并采用以上所述的近似. 在此基础上, 适当选取投影算符 P_D , 使 $\sigma'_1 = \sigma_1$ (这只要在 a “超格点” 和 b “超格点” 中, 分别选取其本征值位于 σ_1 及 $-\sigma_1$ 附近的本征态作为子空间 D 的基, 当然, 由于 E' 的重新标度, 这个过程必须用最后的 σ'_1 值进行迭代以达到自治). 注意到在只取最近邻非对角元的情况下, 算符方程 (24) 可精确求解. 方程 (18)–(24) 的矩阵元形式是显而易见的, 为简洁起见, 不再一一列出. 对系综中的 200 个样品所求出的 H' 的元素做平方平均, 得到新的矩 σ'_2 , 能量 E' 将由新的能量标度决定. 对各种不同的参数组合 E, σ_1, σ_2 重复上述计算, 可以得到参数空间的相图, 亦可由

图形求出不动点和临界面。

在图 2 中我们给出了 $E = 0, \sigma_1 = 0$ 时, σ'_2 随 σ_2 变化的曲线, 这时, 由以上叙述可知, E' 和 σ'_1 也均为零, 这样从图 2 中可方便地求得 RG 变换的一个非平庸不动点。

$$E^* = 0, \sigma_1^* = 0, \sigma_2^* = 15.0. \quad (25)$$

在这个不动点附近, 如果固定 σ_1 , 由于 E 相对于 $E^* = 0$ 的对称性, 可将 $\Delta\sigma_2 = \sigma_2 - \sigma_2^*$ 展开到 E 的二次项

$$\Delta\sigma'_2 = a_1\Delta\sigma_2 + a_2E^2, \quad (26)$$

但在该点上局域化长度是发散的, 其发散行为可用幂指数表示如下:

$$L \simeq L_0(\sigma_2 - \sigma_2^*)^{-\nu}. \quad (27)$$

据(12)式, 有

$$(\sigma' - \sigma^*)^{-\nu} = b^{-1}(\sigma - \sigma^*)^{-\nu}, \quad (28)$$

利用(26)式, 可得

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln a_1}. \quad (29)$$

很明显, a_1 是图 2 的曲线在不动点上的斜率, 由图 2 可求出不动点的临界指数

$$\nu \approx 1.27.$$

由于对样品统计的涨落, 这只能是比较粗略的估计。

在图 3 和图 4 中, 我们分别给出了 $\sigma_1 = 0$ 和 $\sigma_1 = 0.5$ 的相图, 图中的曲线给出了局域态和扩展态的分界线(临界线), 图中的箭头表示在 RG 变换下参数空间的点的流向, 可看出临界线以上的态是局域态, 临界线以下的态是扩展态。在图 3 中可看出前述的不动点是不稳定的。在图 4 中可看出在 $\sigma_1 \neq 0$ 的情况下, 对于一定范围内的 σ_2 , 可能存在四个临界点, 局域态不仅可能存在于带的两边, 而且可能存在于带的中心。这是空间调制引起无序系统电子结构特点的一个变化, 它对宏观性质的影响值得进一步研究。

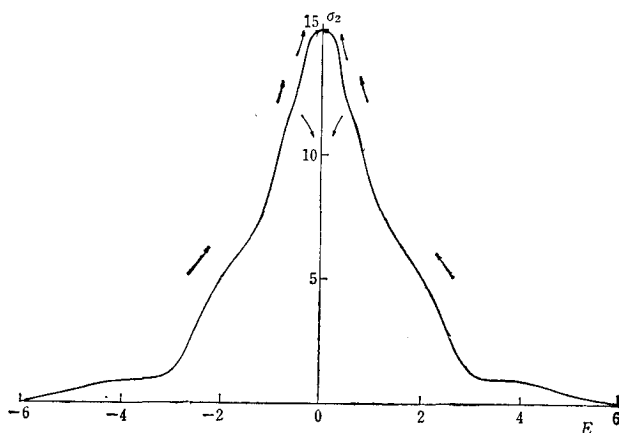
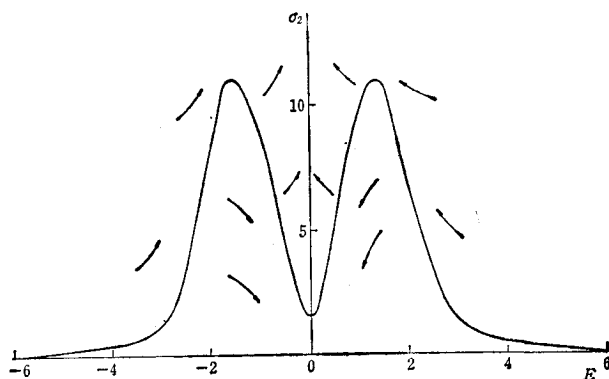


图 3 固定 $\sigma_1 = 0$ 所得的相空间流图

从箭头可看出位于临界线上方的点在 RG 变换下 σ_2 增大, 代表局域态。位于临界线下方的点在 RG 变换下 σ'_2 减小, 代表扩展态。不动点 A 是不稳定的

图4 固定 $\sigma_1 = 0.5$ 所得的相空间流图

它与 $\sigma_1 = 0$ 的情况有明显的不同,对固定的 σ_2 , 可能存在四个 E_c , 局域态不仅可能处于能带的两边,亦可能处于能带的中心。说明空间调制可能引起无序系统局域化性质的变化

参 考 文 献

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **109** (1958), 1492.
- [2] D. C. Licciardello and E. N. Economou, *Phys. Rev.*, **B11**(1975), 3697.
- [3] T. Edwards and D. J. Thouless, *J. Phys. C*, **5** (1972), 807.
- [4] D. C. Licciardello and D. J. Thouless, *J. Phys. C.*, **8**(1975), 4157.
- [5] D. C. Licciardello and D. J. Thouless, *J. Phys. C*, **11** (1978), 925.
- [6] P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, **42**(1979), 1492.
- [7] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello and T. V Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.*, **42** (1979), 673; P. W. Anderson, E. Abrahams and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.*, **43** (1979), 718.
- [8] S. Sarker and E. Domany, *Phys. Rev.*, **B23** (1981), 6018.
- [9] W. M. C. Yang, T. Tsakalokos and J. E. Hilliard, *J. Appl. Phys.*, **48** (1977), 876.
- [10] J. E. Hilliard, in *Modulated Structures*, ed. by J. M. Cowley et al., AIP, New York, (1979), p. 407.
- [11] 张昭庆, 物理学报, **29**(1980), 1193.
- [12] A. Gonis et al., *Phys. Rev.*, **B15** (1982), 7544.
- [13] 熊诗杰, 物理学报, 待发表.
- [14] 熊诗杰、蔡建华, 物理学报, **31**(1982), 474.
- [15] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.*, **47**(1975), 773.

SCALING THEORY OF ANDERSON LOCALIZATION IN DISORDERED SYSTEMS WITH SPACE MODULATIONS A REAL SPACE RENORMALIZATION GROUP APPROACH

XIONG SHI-JIE CAI JIAN-HUA

(Institute of Solid State Physics, Nanjing University)

ABSTRACT

We developed a method of real space renormalization group transformation, suitable to handle a variety of space-modulated disordered systems. By this method, maintaining the relative space-modulation structures unchanged under transformation, we could study the critical properties of Anderson localization of these systems. By solving the RG equations for disordered metallic superlattices with finite-lattice approximation, the fixed point and critical exponent have been calculated approximately. It is found that space-modulation may change the properties of electronic localization in disordered systems to some extent.