

一维无公度体系的电子谱和迁移率边

郑兆勃 朱 凯

(中国科学技术大学物理系)

1986 年 6 月 18 日收到

提 要

本文详细地计算了对角元为 $1.9 \left[\cos(0.7n) + \frac{1}{3} \cos(1.4n) \right]$, 非对角 $H_{n,n+1} = H_{n,n-1} = 1$ 的一维无公度模型的电子态密度, 用自能收敛性判据确定出迁移率边的精确位置, 讨论了电子谱与迁移率边的自相似性.

一、引 言

一维无公度体系, 由于其特有的属性, 近年来得到了广泛的研究^[1]. 一维链的单电子运动, 在只考虑第一近邻相互作用的紧束缚近似下, 可以用下面的哈密顿量描述:

$$H = \sum_n [H_{n,n-1}|n\rangle\langle n-1| + H_{n,n}|n\rangle\langle n| + H_{n,n+1}|n\rangle\langle n+1|]. \quad (1)$$

这里 n 为格点坐标指标, $|n\rangle$ 为所选取的格点上原子的完备正交归一电子基函数. 如果对角元 $H_{n,n}$ 是一个空间平移周期函数, 周期为 $(2\pi/Q)a$ (Q 为实数, a 为晶格常数, 取 $a = 1$), 且 $2\pi/Q$ 为无理数, 则此电子模型为无公度模型 (incommensurate model). Aubry 和 Andre^[2] 讨论了 $H_{n,n} = E_0 \cos(nQ)$, $H_{n,n-1} = H_{n,n+1} = t$ 的情况, 指出当 $E_0/t < 2$ 时, 所有的本征态为延展态, 而 $E_0/t > 2$ 时, 均为局域态, 即在 $E_0/t = 2$ 处存在金属-绝缘体转变. 然而, 在这个简单的模型中不存在迁移率边^[3-5]. 进而, Soukoulis 和 Economou^[6] 提出了以下模型:

$$H_{n,n} = 1.9 \left[\cos(0.7n) + \frac{1}{3} \cos(1.4n) \right], \quad (2)$$

$$H_{n,n-1} = H_{n,n+1} = 1.$$

他们用数值计算方法, 得到了由九个能带组成的电子谱, 并且在高能区第一次于一维体系中发现了一个迁移率边. 这是一个十分有意义的结果. 众所周知, 一维周期势电子本征态均为延展态. 相反, 一维 Anderson 无序模型电子本征态均为局域态, 而(2)式的模型提供了一个介于以上两种极端情况之间的体系. 最近, 赵光安等人^[7] 用实空间重整化群方法分析了体系(2)式, 指出其中所含的迁移率边远远不仅一个, 并且在靠近能带底的电子波函数表现出奇特的行为, 他们称之为“共振态”.

对物理体系和模型做理论分析与数值计算时, 所采用的方法至关重要. 本文中应用

Dean 方法计算了模型 (2) 式的电子态密度, 用自能收敛性判据和 EDWW 方法, 讨论了本征态的局域性和延展性, 以及电子波函数, 得到了一些有意义的结果, 同时还证实了这些方法在研究一维无公度体系问题中的有效性.

二、电子态密度

Dean 方法^[6]非常适用于处理最近邻相互作用紧束缚近似的一维链本征问题. 对于 (2) 式的哈密顿量, 其矩阵为三对角型

$$H = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & & & \\ & 1 & H_{-1,1} & 1 & & \\ & & 1 & H_{00} & 1 & \\ & & & 1 & H_{11} & 1 \\ & & & & 1 & H_{22} & 1 \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (3)$$

引入能量参数 E , 构造矩阵 $H - EI$, I 为与 H 同阶的单位方阵, 以 $\eta(H - EI)$ 表示矩阵 $H - EI$ 的实的负本征值数目. 根据负本征值理论, 可以用以下递推关系式求出

$$\eta(H - EI) = \sum_{n=-N}^N \eta(\mu_n), \quad (4)$$

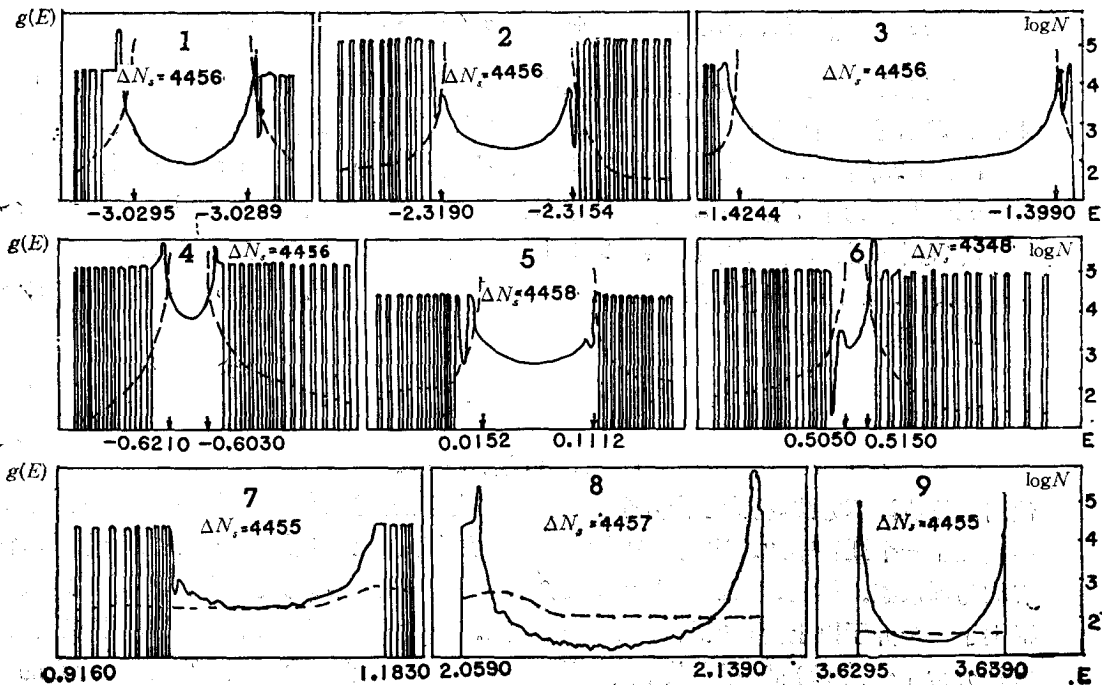


图 1 每个方框中间的数字表示各子带所包括的本征态数目; 虚线是自能收敛长度

$N(E + i\epsilon)$; 箭头标出子带内迁移率边的确切位置

其中如果 $\mu_n < 0$, 则 $\eta(\mu_n) = 1$, 而

$$\begin{aligned}\mu_{-N} &= H_{-N,-N} - E, \\ \mu_n &= H_{n,n} - E - \mu_{n-1}^{-1}.\end{aligned}\quad (5)$$

我们所研究的体系是从 $-N$ 到 N_0 可以证明, 矩阵 $\mathbf{H} - E\mathbf{I}$ 的实的负本征值数目恰好等于矩阵 \mathbf{H} 小于 E 的本征值的数目, 即 \mathbf{H} 在 E 处的积分态密度. 从而, 在 E 到 $E + \Delta E$ 间隔的平均态密度可以表示为

$$\overline{\rho(E)} = \frac{\eta(\mathbf{H} - (E + \Delta E)\mathbf{I}) - \eta(\mathbf{H} - E\mathbf{I})}{(2N + 1) \cdot \Delta E}, \quad (6)$$

ΔE 为计算时所选取的能量间隔. 当 $N \rightarrow \infty$, $\Delta E \rightarrow 0$ 时, $\overline{\rho(E)}$ 将趋向 $\rho(E)$.

计算哈密顿量 (3) 式的电子谱时, 考虑了包含 40001 个格点的体系. 所得到的电子谱图 $\rho(E)$ 由图 1 中的九个子带组成, 这与以前的结果相同^[6,7]. 这些子带的能量宽度相差最大达两个数量级, 且中间子带比两边的子带宽, 而各个子带所含有的本征态数目几乎相同. 这说明, 本征态在中间子带比在两边的子带要稀疏得多.

从图 1 可考察各个子带的结构. 它们都具有与整体电子谱相同的特点, 子带两边的电子本征态密度比中间部分高, 并且, 子带 1 到子带 7 两边分裂出一系列次子带, 这些次子带的高度几乎相等. 在 Llois 等人^[9]的工作中也发现过类似的现象. 这说明, 每个子带在电子谱结构方面与它们所组成的总体电子谱有一定程度的相似, 即所谓“自相似”性 (self-similarity). 这种自相似性在其它一些工作中也指出过^[10-12], 且普遍地被认为是无公度体系的特性. 所以, 可以想象, 如果计算的能量间隔 ΔE 继续减小, 以及增加体系所包含的格点数目, 每个子带将会分裂为次子带, 而这些次子带的谱结构与子带和总能带的谱结构相似.

九个子带所包括的本征态数目为 39997, 与 40001 相比少四个. 经计算, 在子带 6 与子带 7, 8 以及与子带 9 之间的带隙中分别存在两个独立的本征态, 而当体系为 4001 时, 这些本征态并不存在, 这也说明了只有足够大的体系才能计算出谱图的一些精细结构.

三、迁移率边

在研究无序体系的局域态问题过程中, 发展了许多判据 Anderson 局域态的方法^[13]. 方法之一是格林函数的自能收敛^[14,15]. 对一维无公度体系, 已经有人用此方法对本征态的局域性和延展性做过研究^[4,9].

哈密顿量 (3) 式的格林函数为

$$\mathbf{G} = (z\mathbf{I} - \mathbf{H})^{-1}, \quad (7)$$

z 为复变量, $z = E + i\varepsilon$, E 为电子能量, ε 称为能量虚部. 对 \mathbf{G} 的研究, 可以得到关于 \mathbf{H} 的谱图、本征值、局域性和延展性等物理信息. \mathbf{G} 的对角元可以写成^[15]

$$G_{n,n} = \frac{1}{z - H_{n,n} - \Sigma_n}. \quad (8)$$

Σ_n 称为局部自能, 并且可以表示为

$$\Sigma_n = \Delta_n^+ + \Delta_n^-. \quad (9)$$

即对 Σ_n 的研究可以转化为对 Δ_n^\pm 的研究. 有递推关系式如下:

$$\Delta_n^\pm = \frac{1}{z - H_{n,n} - \Delta_{n\pm 1}^\pm}. \quad (10)$$

从(10)式可知,如以 $n=0$ 为起始点,则 $\Delta_0^+ = \Delta_0^- = \Delta_0$, 且 Δ_0 可以表示为连分数的形式

$$\Delta_0 = \frac{1}{z - H_{0,0} - \frac{1}{z - H_{1,1} - \frac{1}{z - H_{2,2} - \dots}}}. \quad (11)$$

在 n' 处截断,则有

$$\Delta_0^{(n')} = \frac{1}{z - H_{0,0} - \frac{1}{z - H_{1,1} - \dots - \frac{1}{z - H_{n',n'}}}}. \quad (12)$$

所以, $\Delta_0 = \lim_{n' \rightarrow \infty} \Delta_0^{(n')}$.

在我们的计算中,只考虑半无穷链,且 $n' \geq 0$. 选用 Dy 等人发展起来的方法^[4],对 $\Delta_0^{(n')}$ 有递推公式

$$\Delta_0^{(n')} = \frac{X_{n'}}{Y_{n'}} \Delta_0^{(n'-1)},$$

$$X_{n'} = z - H_{n',n'} - X_{n'-1}^{-1},$$

$$Y_{n'} = z - H_{n',n'} - Y_{n'-1}^{-1}. \quad (13)$$

初始值为: $\Delta_0^{(0)} = (z - H_{0,0})^{-1}$, $X_1 = z - H_{1,1}$, $Y_1 = z - H_{1,1} - (z - H_{0,0})^{-1}$. 所谓自能收敛性方法,是建立在以下事实上^[4],在局域态情况下, $\lim_{\substack{n' \rightarrow +\infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \Sigma_0^{(n')}(E + i\varepsilon)$ 收敛于实数,

在延展态情况下, $\lim_{\substack{n' \rightarrow +\infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \Sigma_0^{(n')}(E + i\varepsilon)$ 发散,而 $\lim_{\substack{n' \rightarrow +\infty \\ (\varepsilon \neq 0)}} \Sigma_0^{(n')}(E + i\varepsilon)$ 收敛于一个虚部

不为零的复数. 这样,对于局域态和延展态都有

$$\lim_{\substack{n' \rightarrow +\infty \\ \varepsilon \neq 0}} \left| \frac{\Delta_0^{(n')}(E + i\varepsilon)}{\Delta_0^{(n'-1)}(E + i\varepsilon)} - 1 \right| = 0. \quad (14)$$

两条竖线表示取复数的模. 用 Cauchy 判据,把(14)式表示为,对于任意小正值 δ ,总存在 $N = N(E + i\varepsilon)$,使得当 $n' > N(E + i\varepsilon)$ 时

$$\left| \frac{\Delta_0^{(n')}(E + i\varepsilon)}{\Delta_0^{(n'-1)}(E + i\varepsilon)} - 1 \right| < \delta. \quad (15)$$

为使判据(15)式更可靠,要求在保证 M 个 $n' > N(E + i\varepsilon)$ 的自能 $\Delta_0^{(n')}(E + i\varepsilon)$ 均满足(15)式的条件下,才认为 $\Delta_0^{(n')}(E + i\varepsilon)$ 收敛. 令 $\varepsilon \rightarrow 0$, 如果 $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} N(E + i\varepsilon)$ 趋

于一常数,则在能量 E 的本征态为局域的,此常数 $N(E)$ 称为相应的自能收敛长度. 如果在所限制一定大小的体系范围内, $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} N(E + i\varepsilon)$ 不趋于一个有限值,则称本征态在

此体系范围内是延展的。我们的计算取 $\delta = 10^{-5}$, $M = 5$. δ 从 10^{-2} 到 10^{-10} 的范围内取值时,对以下的结果无实质影响。

利用以上判据,对各个子带的本征态计算其自能收敛长度 $N(E + i\varepsilon)$ 随 ε 变化的情况。表 1 和图 2(a) 是对子带 3 带底附近的一个本征态的计算结果。可以看到, $N(E + i\varepsilon)$ 随 ε 趋向零而趋向一个常数,自能的虚部 $\text{Im}\Delta_0^{(N+3)}(E + i\varepsilon)$ 趋于零。这说明此本征态为局域态。高能区的子带 7, 8 和 9 表现出很强的局域性,其它子带中的带底和带顶也同样表现为局域性。这些局域态的收敛长度 $N(E + i\varepsilon)$ 用虚线表示,画在相应的电子谱图上。表 2 和图 2(b) 是对子带 3 带中某个本征态的计算结果。当 ε 趋于零时, $N(E + i\varepsilon)$ 线性地趋向无穷大,且自能的虚部 $\text{Im}\Delta_0^{(N+3)}(E + i\varepsilon)$ 趋向一个不为零的常数。对于子带 1 到子带 6 的中间部分,我们都得到了这样的图象。当 ε 为 10^{-6} 时, $N(E + i\varepsilon)$ 一般达到 10^5 。这说明,至少在 10^5 量级的范围内,子带 1 到子带 6 的中间部分为延展态。

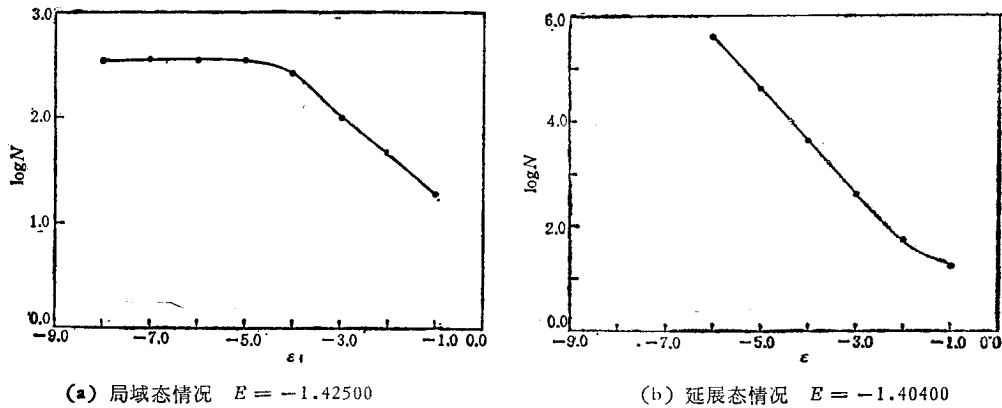


图 2 自能收敛长度 $N(E + i\varepsilon)$ 随能量虚部 ε 的变化
方框内的数字为电子本征态能量

表 1 子带 3 带底的某个本征态
 $N(E + i\varepsilon)$ 为自能收敛长度; ε 为能量虚部; $\text{Im}\Delta_0^{(N+3)}(E + i\varepsilon)$ 为自能的虚部; $\text{Re}\Delta_0^{(N+3)}(E + i\varepsilon)$ 为自能的实部

ε	$N(E + i\varepsilon)$	$\text{Re}\Delta_0^{(N+3)}(E + i\varepsilon)$	$\text{Im}\Delta_0^{(N+3)}(E + i\varepsilon)$
10^{-1}	19	-0.2789	-0.2599×10^{-1}
10^{-2}	46	-0.3491	-0.6622×10^{-1}
10^{-3}	100	-0.4360	-0.2967×10^{-1}
10^{-4}	261	-0.4493	-0.4891×10^{-2}
10^{-5}	343	-0.4486	-0.4699×10^{-3}
10^{-6}	343	-0.4486	-0.4703×10^{-4}
10^{-7}	343	-0.4486	-0.4704×10^{-5}
10^{-8}	343	-0.4486	-0.4706×10^{-6}

上面的计算结果表明,在子带 1 到子带 6 中,都成对地出现了迁移率,且位于分裂出的窄带与中间部分的宽带之间的交界附近。赵光安等人^[7]的工作已指出在子带 3 到子带 6 各存在两个“局部迁移率”(local mobility edge),而由于子带 1 和子带 2 是“共振态”,

表 2 子带 3 带中的某个本征态
变量符号的意义与表 1 相同

ϵ	$N(E + i\epsilon)$	$\text{Re}\Delta_0^{(N+i\epsilon)}(E + i\epsilon)$	$\text{Im}\Delta_0^{(N+i\epsilon)}(E + i\epsilon)$
10^{-1}	19	-0.2773	-0.2648×10^{-1}
10^{-2}	55	-0.2377	-0.1185
10^{-3}	406	-0.1835	-0.2214
10^{-4}	4202	-0.1771	-0.2396
10^{-5}	40070	-0.1764	-0.2414
10^{-6}	381947	-0.1767	-0.2421

即延展而电导为零,故在子带 2 和子带 3 之间存在“整体迁移率边”(global mobility edge). 另外在子带 6 和子带 7 之间也存在一个整体迁移率边. 如果称由九个子带所组成的整个电子谱图为第一层次,而每个子带为第二层次,那么第二层次子带 1 到子带 6 的迁移率边位置,或局域性与延展性的本征态的分布情况,与第一层次的情况相似. 这样,此无公度体系的电子态,不仅在谱图结构,而且在迁移率也具有一定程度的自相似性. 沿此思路我们猜测,在子带 1 到子带 6,迁移率边将继续以嵌套的形式成对地出现. 进一步的计算工作将涉及到更大的体系,从而需要更多的计算机时.

本文所有的数值计算在 Honeywell DPS-8 机上进行,用 FORTRAN77 编程. 当我们使用单精度(8 位有效数字)时,所得到的结果都是图 2(a) 的形式,即所有的本征态表现为局域态. 只有在换用双精度(18 位有效数字)之后,才得到正确的结果. 所以,当涉及的体系相当大时,必须特别注意计算机中的数值误差积累对结果的影响.

四、本征波函数

EDWW 方法^[16,17]是计算一维体系本征波函数的有效方法. 它首先用 Dean 方法求出本征值,在求本征值过程中所得到的量,被用来代入 DWW 方法^[18]中的递推公式,从而非常方便地求出本征波函数. 我们用这一方法,选取每个子带中间的本征态,计算包括

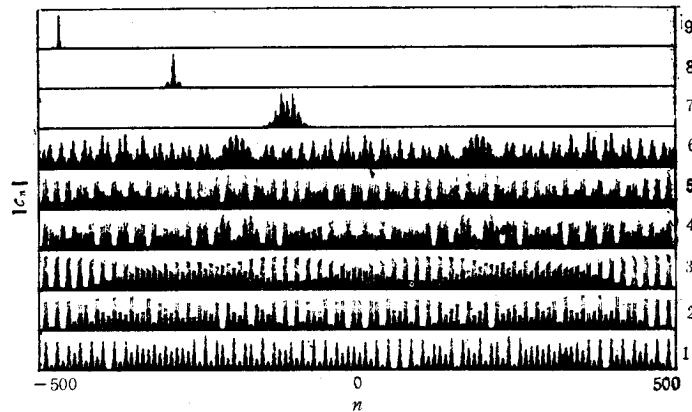


图 3 各子带带中本征态的电子波函数 振幅取绝对值 $|c_n|$, n 为格点位置指标

1001 个粒子体系的本征波函数,得到的结果如图 3 所示. 从波函数可看出,子带 7, 8 和 9 表现为强烈的局域性,而子带 1 到子带 6 的带中本征态为延展态. 这与用自能收敛性判据得到的结果一致.

五、结 论

对于模型 (2) 式, 用数值方法计算的结果表明, 电子态在谱图结构, 以及局域性与延展性的分布都一定程度地具有自相似性. EDWW 方法对计算一维无公度体系的本征波函数非常有效.

感谢赵光安教授在他们的论文发表之前, 向我们提供论文的影印件.

参 考 文 献

- [1] J. B. Sokoloff, *Phys. Rep.*, **126**(1985), 189.
- [2] S. Aubry and G. Andre, in *Annals of the Israel Physical Society*, C. G. Kupler ed. Adam Hilger, Bristol, **3**(1979), 133.
- [3] M. Y. Azbel, *Phys. Rev. Lett.*, **43**(1979), 1954.
- [4] J. B. Sokoloff, *Phys. Rev.*, **B22**(1980), 5823; *ibid.*, **B23**(1981), 6422.
- [5] K. S. Dy and T. C. Ma, *J. Phys. C*, **15**(1982), 6971.
- [6] C. M. Soukoulis and E. N. Economou, *Phys. Rev. Lett.* **48**(1982), 1043.
- [7] K. A. Chao, R. Riklund and Y. Y. Liu, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 5979.
- [8] P. Dean, *Rev. Mod. Phys.*, **44**(1972), 127.
- [9] A. M. Llois, M. Weissmann and N. V. Cohen, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 7379.
- [10] M. Kohmoto, L. P. Kadanoff and C. Tang, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1870.
- [11] M. Kohmoto, *Phys. Rev. Lett.*, **51**(1983), 1198.
- [12] S. Ostlund and R. Pandit, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 1394.
- [13] 吴式玉、郑兆勃, *物理学进展*, **4**(1984), 12.
- [14] K. S. Dy, S. Y. Wu and C. Wongtawanugool, *J. Phys. C*, **14**(1981), L781.
- [15] K. S. Dy, S. Y. Wu and T. Spratlin, *Phys. Rev.*, **B15**(1979), 4237.
- [16] 吴式玉、郑兆勃、黄筑, *中国科学技术大学学报*, **15**(1985), 150.
- [17] S. Y. Wu and Z. B. Zheng, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 4787.
- [18] K. S. Dy, S. Y. Wu and C. Wongtawanugool, *J. Phys. C*, **12**(1979), L141.

ELECTRONIC SPECTRA AND MOBILITY EDGES IN ONE-DIMENSIONAL INCOMMENSURATE SYSTEM

ZHENG ZHAO-BO ZHU KAI

(Department of Physics, University of Science and Technology of China, Hefei)

ABSTRACT

Fine structures of electronic spectra of one-dimensional lattice with incommensurate potential

$$H_{n,n} = 1.9 * (\cos(0.7n) + 1/3 * \cos(1.4n)) H_{n,n-1} = H_{n,n+1} = 1$$

are obtained. The precise positions of mobility edges are found by means of self-energy convergence criterion. Self-similarity in spectra and mobility edges are discussed.