第37卷 第5期　　物 理 学 报　　Vol.37, No.5
1988年5月　　ACTA PHYSICA SINICA　　May, 1988

一维无公度系统的电子波函数特征

袁 俭　　熊诗杰
（南京大学固体物理研究所）
蔡 建 华
（上海交通大学凝聚态物理研究所）
1987年6月11日收到

提　　要

本文研究了存在无序及不存在无序两种情况下，一维无公度系统的电子波函数特征．发现存在无序的无公度系统的电子波函数都是指数局域的，而不存在无序的无公度系统则不然．

具有平移不变的周期结构及无序结构是人们所熟知的．最近人们发现了与这两种结构不同的新型结构，无公度结构就是其中之一[1]．本文将讨论存在无序及不存在无序两种情况下，一维无公度系统的电子波函数特征．文中将给出波函数的局域长度、Fractal 维数的数值计算结果．

一维无公度系统的结构可以这样描述：把间距为常数 a（以下取 $a=1$）的周期晶格放在一个假想的矩形周期调制势阱中(如图1所示)，势阱深度为 $-V$，调制周期为 a 的 $\sqrt{\tau}+\theta$ 倍，$\sqrt{\tau}+\theta$ 为无理数．现把落在势阱中的格点称为 B 格点，其它的称为 A 格点，则由这两种不同格点构成的一维结构是无公度的．

紧束缚近似下的电子 Hamilton 量可写成

$$H=\sum_i |i\rangle\varepsilon_i\langle i|+\sum_{i,j}V_{ij}|i\rangle\langle j|.$$

这里 $|i\rangle$ 为格点 i 上的 Wannier 波矢，V_{ij} 为作用矩阵元，这里仅计最近邻互作用并赋值为1，而 ε_i 为格点能量．对以上介绍的无公度系统，我们讨论以下两种 ε_i 的分布形式：

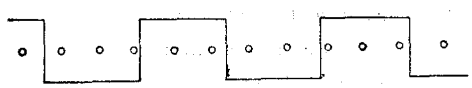


图1　无公度系统示意图

1)
$$\varepsilon_i=\begin{cases}\varepsilon_A & \text{当 } i \text{ 为 } A \text{ 格点,}\\ \varepsilon_B & \text{当 } i \text{ 为 } B \text{ 格点;}\end{cases}$$

2) ε_i 为无规的，几率为

$$P(\varepsilon_i)=\begin{cases}\Gamma_A^{-1} & \text{当 } i \text{ 为 } A \text{ 格点，且 } |\varepsilon_i-\varepsilon_A|\leqslant\Gamma_A/2,\\ \Gamma_B^{-1} & \text{当 } i \text{ 为 } B \text{ 格点，且 } |\varepsilon_i-\varepsilon_B|\leqslant\Gamma_B/2\\ 0 & \text{其它.}\end{cases}$$

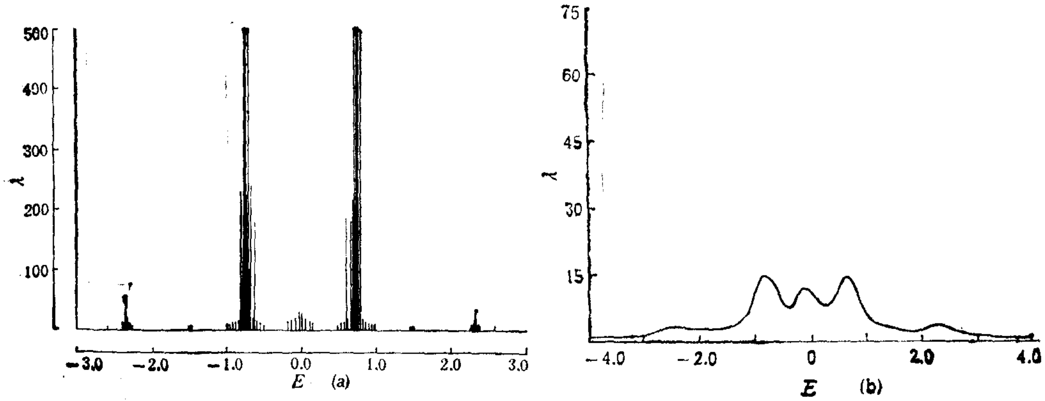
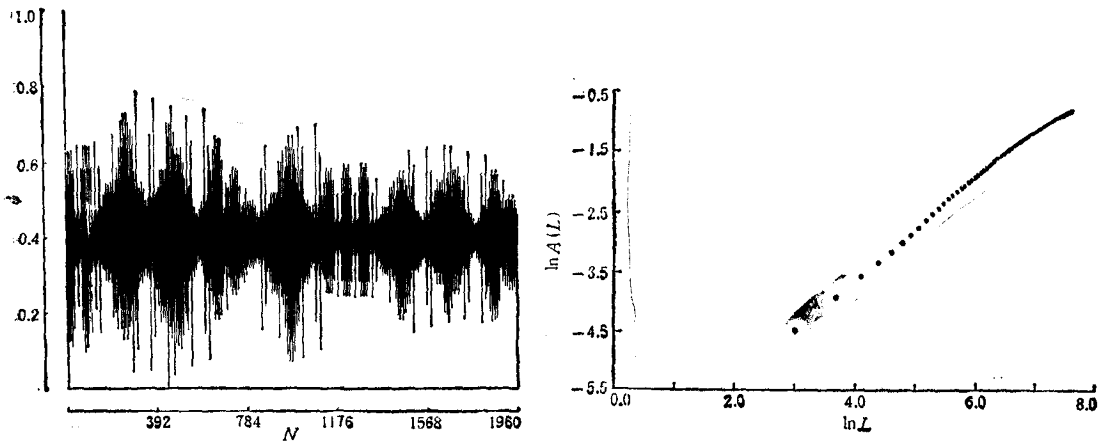


图 2　作为能量函数的局域长度 λ

$\varepsilon_A = 1.0$; $\varepsilon_B = -1.0$; $\theta = 0$; $\tau = 5$; $\Gamma_A = 1.0$; $\Gamma_B = 1.0$



(a) 波函数的分布情况　　　(b) Fractal 维数的确定：$\ln A(L)$-$\ln L$ 曲线

图 3　能量本征值 $E = -0.7438166$

1) 为不存在无序的无公度系统；2) 为存在无序的无公度系统.

我们曾在文献 [2] 中计算了一维非均匀无序系统电子波函数的局域化长度. 这里将仍用原方法分别对 1), 2) 两种系统电子波函数的局域长度做计算. 通过计算，我们看到存在无序的无公度系统 [情形 2)] 中，电子波函数都是指数局域的，局域长度由图 2(b) 表示；而不存在无序的无公度系统[情形 1)]，其波函数有偏离指数局域的情况，结果由图 2(a) 表示，图上那些局域长度高度达 500 的态表示偏离指数局域的态. 我们取了其中的一个态画出了波函数在空间的分布情况(见图 3(a))，从图上可以看到：波函数不是指数衰减的，有相当复杂的结构. 波函数的行为还可以用 Fractal 维数来描述，尤其是对于那些难以用局域长度描述的非指数局域态. 根据文献 [3] 中的定义，Fractal 维数 D 满足

$$A(L) \equiv \int dr\,|\phi(r)|^2 \int_0^L dr'\,|\phi(r+r')|^2 = \text{常数} \times L^D.$$

这里 $\phi(r)$ 为 r 处的波函数. 我们对图 3(a) 对应的态计算了 Fractal 维数，结果由图 3(b) 表示. 从图中得到的 Fractal 维数 $D \approx 0.8 < 1$，因而这个态也不是扩展态(对扩

展态 $D=1$). 这说明它介于扩展态与指数局域态之间.

作者之一(袁俭)对庞根弟博士给予的帮助表示感谢.

参 考 文 献

[1] A. D. Zdetsis, C. M. Soukoulis and E. N. Economou, *Phys. Rev.*, B33(1986), 4936.
[2] Yuan Jian *et al.*, *Solid State Comm.*, 62(1987), 69.
[3] E. Roman, C. Wiecko, *Z. Phys. B*, 62(1986), 163.

CHARACTERISTICS OF ELECTRON WAVE FUNCTIONS IN ONE-DIMENSIONAL INCOMMENSURATE SYSTEMS

YUAN JIAN XIONG SHI-JI
(*Institute of Solid State Physics, Nanjing University*)

CAI JIAN-HUA
(*Institute of Condensed Matter Physics, Shanghai Jiaotong University*)

ABSTRACT

The characteristics of electron wave functions in one-dimensional incommensurate systems with or without disorder are studied. In disordered systems, the wave functions are always exponentially localized in contrast to systems without disorder.