

Aubry 模型的 Anderson 转变区与 能量的关系

孙金祚 王传奎 王继锁

山东聊城师范学院物理系, 聊城, 252000

1990年12月22日收到

在已经证明一维无公度系统 Aubry 模型存在 Anderson 转变区的基础上, 进一步研究转变区与能量的关系。数值结果表明, 高能量区本征态的转变区处于势强度 V 较低的范围, 低能量区本征态的转变区处于势强度 V 较高的范围。

PACC: 7130; 7125; 7150

一、引 言

1976年 Hofstadter^[1]研究了电子在垂直于磁场的二维方晶格中的运动, 得到十分有价值的结果。在此之后, 许多物理学工作者和数学工作者对无公度系统发生了极大兴趣。这不仅是因为无公度系统具有周期系统和无序系统所没有的独特性质, 而且许多实际的物理体系都是无公度系统, 像电荷密度波 (CDW) 和自旋密度波 (SDW)^[2,3], 层状化合物和汞链化合物^[4,5], 就是其中的例子。10多年来, 许多解析方法和数值方法用于研究无公度系统, 得到一些十分重要的结果。

迄今为止, 被广泛研究的无公度系统模型是一维紧束缚 Aubry 模型^[6]。如果只考虑最近邻相互作用, 一维紧束缚 Aubry 模型的哈密顿量为

$$H = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n a_n^+ a_n + t \sum_{n=-\infty}^{\infty} (a_{n+1}^+ a_n + a_{n-1}^+ a_n), \quad (1)$$

式中 $E_n = V \cos(Qan)$, V 是调幅势强度, Qa 与 π 的比值是无理数, a 是晶格常数, t 是最近邻电子跨越积分。Aubry 和 Andre^[7] 用对偶性理论证明, 当 $V < 2t$ 时, (1) 式的所有本征态都是扩展态; 当 $V > 2t$ 时, (1) 式的所有本征态都是局域态; 当 $V = 2t$ 时发生金属-绝缘体转变, 即通常所说的 Anderson 转变。

尽管 Aubry 和 Andre 的结论为多数作者所接受, 然而也存在不同意见。Avron 和 Simon 证明^[8], 如果 $Qa/2\pi$ 是 Liouville 数, 则当 $V > 2t$ 时 (1) 式的频谱奇异连续, 也就是说, 既不是纯点谱, 也不是绝对连续 (即能量的光滑函数)。这个结果不同于 Aubry 和 Andre 的结论。Aubry 和 Andre 的结论意味着, 当 $V > 2t$ 时 (1) 式的所有本征态都是指数定域, 因而频谱是纯点谱。Azbel^[9] 用准经典方法证明, 当 $Q \rightarrow 0$ 时, 在 $V < 2t$ 的范围内也存在局域态。Dy 和 Ma^[10] 的工作表明, 在 $V > 2t$ 的范围内, (1) 式的本征态

并不都是按指数定域。我们的数值结果表明^[11], Aubry 模型的 Anderson 转变不是在 $V = 2t$ 这个所谓临界点突然发生的,从扩展态到局域态的转变,要经过一个中间态过渡区,称之为 Aubry 模型的 Anderson 转变区。

按照 Aubry 和 Andre 的对偶性理论^[7], Aubry 模型的 Anderson 转变与能量无关。我们自然要考虑, Anderson 转变区是否与能量无关呢? 最近我们用数值方法研究了这个问题,发现 Aubry 模型的转变区与能量有关。因而,根据到目前为止我们所得到的结果,关于一维无公度系统 Aubry 模型的 Anderson 转变,应该给出下述结论: Aubry 模型在 $V = 2t$ 附近存在与能量有关的 Anderson 转变区。

二、数值方法与结果

选取(1)式中的跨越积分 $t = 1$ 。波矢 Q 取作 $(\sqrt{5} - 2) \cdot 2\pi$, 晶格常数 a 取作 1, 并令系统长度等于 6000。本文基本做法是:

1. 利用 Dean 方法^[12]计算 $V = 1.900$ 时 Aubry 模型的能谱。考虑到 Aubry 模型能谱的对称性,可以只研究能量 $E \geq 0$ 的本征态。

2. 从低能量区到高能能量区选取 $V = 1.900$ 时的不同能量本征态,当 V 逐步增大时计算所选取本征态的本征能量。

3. 用波函数、平均电阻率 $\rho(E)$ 和增长因数 $\gamma(E)$ 来研究不同能量本征态的性质。

下面分别以低能量区和高能量区的两个本征态为例,说明我们的结果。

首先选取低能量区的一个本征态,当 $V = 1.900$ 时它的本征能量 $E = 0.000,069,401,173$ 。令 V 以 10^{-3} 的步长增大,计算 V 改变时相应的本征能量。当 $V = 2.000$ 和 2.010 时,相应的本征能量分别为 $E = 0.000,001,016,421$ 和 $E = 0.000,002,547,854$ 。在图 1 给出 $V = 1.900, 2.000$ 和 2.010 时的波函数。

由图 1 可以看出,当 $V = 1.900$ 时本征态是扩展态,当 $V = 2.010$ 时本征态是局域态。当 $V = 2.000$ 时,尽管本

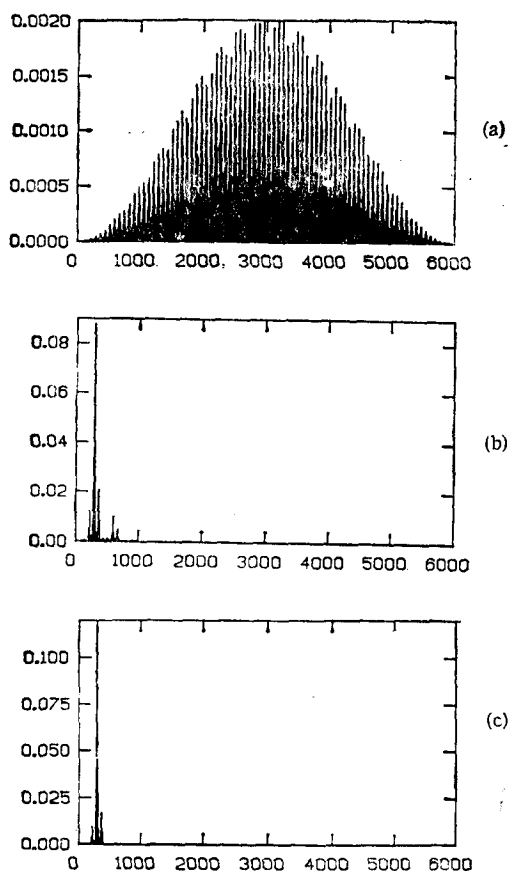


图 1 在低能量区选取的本征态波函数 (a) $V = 1.900$, $E = 0.000,069,401,173$; (b) $V = 2.000$, $E = 0.000,001,016,421$; (c) $V = 2.010$, $E = 0.000,002,547,854$

征态的波函数与 $V = 1.900$ 时典型扩展态的波函数不同,然而它仍然具有扩展态波函数

的基本特征.

波函数看起来十分直观,特别是根据波函数立刻就能判断出典型的扩展态和强局域态.然而在文献[11]中已经指出,对于 Aubry 模型,随着势强度的不断增大,能量本征态的性质发生连续变化,即从扩展态到十分接近扩展态的中间态,经过典型的中间态,到十分接近中间态的弱局域态,再经过弱局域态到强局域态.显然,要想仅用波函数将本征态性质的上述变化表现出来,是相当困难的,因而必须结合其他判据.

电阻是表征本征态性质的重要物理量之一.对于长度为 N 的一维无公度系统,其算术平均电阻率定义为

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N R_l(E)/N_l, \quad (2)$$

式中 $R_l(E)$ 是系统长度取 N_l 时的无量纲电阻.关于计算电阻的办法,在文献[11]中已经给出,也可见文献[13,14]或文献[15].

图2给出图1所示本征态的平均电阻率.图2中曲线 a, b, c , 分别是 $V = 1.900$, 2.000 和 2.010 时本征态的平均电阻率.

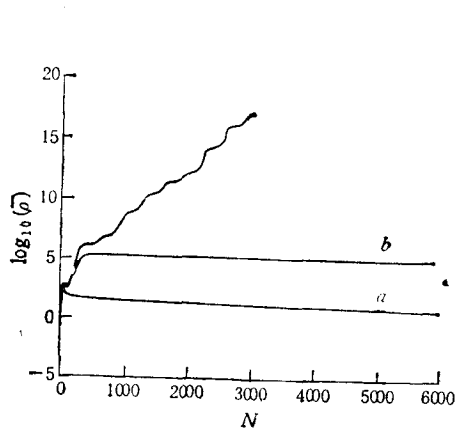


图2 在低能量区选取的本征态的平均电阻率 曲线 a 为 $V = 1.900, E = 0.000,069,401,173$; 曲线 b 为 $V = 2.000, E = 0.000,001,016,421$; 曲线 c 为 $V = 2.010, E = 0.000,002,547,854$

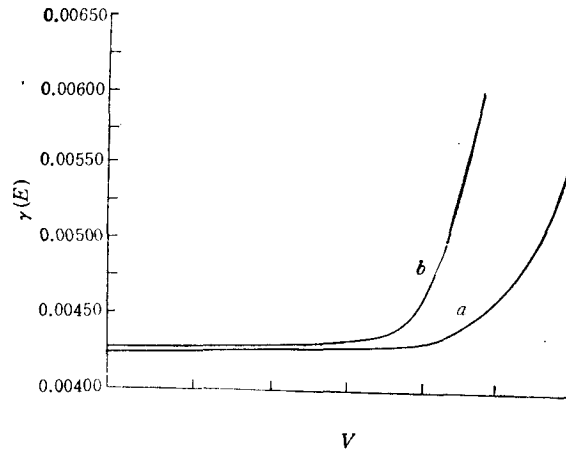


图3 本征态波函数的增长因数 $\gamma(E)$ 随 V 的变化 曲线 a 和 b 分别对应于选取的低能量本征态和高能量本征态

图2曲线 a 所示平均电阻率曲线的基本特征是:当系统长度达到某一数值之后,平均电阻率单调下降,最后趋于不到 10^0 的常数值.图2曲线 b 的平均电阻率上升到约为 10^2 之后,不再随系统长度变化.图2曲线 c 的平均电阻率上升到约为 10^{17} 之后,也不再随系统长度变化.当系统长度进一步增加时,图2曲线 a, b 和 c 所示的特征保持不变.

图2曲线 a 和 b 的平均电阻率,进一步表明图1(a)和(b)的波函数显示的结果,即 $V = 1.900$ 时的本征态是典型的扩展态, $V = 2.000$ 时的本征态是十分接近于扩展的中间态.根据图1(c)的波函数,可以说 $V = 2.010$ 时的本征态是局域态.然而根据由电阻或平均电阻率判断本征态性质的一般原则,又难以说它是局域态.按照一般的原则,局域态的电阻或平均电阻率随系统长度的增加而增大^[11,13,15,16],或者说,局域态的电导随系统长度的增加而减小.虽然图2曲线 c 的平均电阻率高达 10^{17} ,然而在系统长度大于

3000 以后不再随系统长度变化。因而,根据平均电阻率来判断,这时的本征态还应该属于中间态。当然,这时的中间态已经十分接近于弱局域态。

为了得到 $V = 2t(t = 1)$ 附近本征态性质变化的总体面貌,利用增长因数 $\gamma(E)$ 这个判据。哈密顿量(1)式的本征态波函数振幅的运动方程是

$$(E - E_n)f_n - f_{n+1} - f_{n-1} = 0. \quad (3)$$

如果 f_0 和 f_1 满足 $f_0^2 + f_1^2 \approx 0$, 则方程(3)可以改写为矩阵方程的形式,

$$\begin{bmatrix} f_{n+1} \\ f_n \end{bmatrix} = \left[\prod_{n=1}^N P^{(n)} \right] \begin{bmatrix} f_1 \\ f_0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

式中转移矩阵 $P^{(n)}$ 定义为

$$P^{(n)} = \begin{bmatrix} E - E_n & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (5)$$

增长因数 $\gamma(E)$ 定义为

$$\gamma(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log_{10}(f_N^2 + f_{N+1}^2), \quad (6)$$

式中 f_N 和 f_{N+1} 可由(4)式得到。

Ishii 证明^[17], 增长因数 $\gamma(E) \geq 0$ 。对于扩展态 $\gamma(E) = 0$; 对于局域态 $\gamma(E) > 0$ 。Llois 等人的数值结果表明^[18], 对于扩展态 $\gamma(E) < 0.002$, 对于局域态 $\gamma(E) > 0.005$; 对于 $\gamma(E)$ 处于 0.002 和 0.005 之间的本征态, Llois 等人感到难以确定它们的类型。显然, 如果接受中间态这一概念, Llois 等人认为难以确定类型的本征态就是中间态。我们近来的工作表明^[19], 对于不同的模型系统, 扩展态, 中间态和局域态的 $\gamma(E)$ 不同。然而最重要的是, 无论采用什么模型, 总是扩展态有较小的 $\gamma(E)$ 值, 局域态有较大的 $\gamma(E)$, 中间态的 $\gamma(E)$ 值界于两者的 $\gamma(E)$ 值之间。在 $V = 2t(t = 1)$ 附近, 计算了上述在低能量区选取的本征态的增长因数 $\gamma(E)$ 随 V 的变化, 结果如图 3 曲线 *a* 所示。

根据波函数、平均电阻率以及增长因数综合考察本征态的性质, 结合图 1、图 2 和图 3 曲线 *a*, 可以发现, 对于现在研究的 Aubry 模型, 当 $\gamma(E) < 0.0043$ 时本征态是扩展态, 当 $\gamma(E) > 0.0046$ 时本征态是局域态, 当 $0.0043 \leq \gamma(E) \leq 0.0046$ 时本征态属于中间态。从而得到上述低能量本征态的 Anderson 转变区, 大约是从 $V = 1.995$ 到 2.020。

按照上述办法, 即根据波函数、平均电阻率和增长因数来判断本征态的性质, 研究不同能量本征态的转变区, 可以发现, 从低能量区到高能量区本征态的转变区下移, 即高能量本征态的转变区处于势强度 V 较低的范围, 低能量本征态处于势强度 V 较高的范围。

图 4、图 5 和图 3 曲线 *b* 所示的, 是在高能量区选取的能量本征态的波函数、平均电阻率和增长因数。当 $V = 1.900, 2.000$ 和 2.010 时, 本征能量分别是 0.902, 841, 337, 155; 0.920, 634, 627, 834 和 0.922, 990, 375, 746。

由图 4(a) 所示波函数可以看出, $V = 1.900$ 时本征态仍是扩展态。图 4(b) 和 (c) 表明, 当 $V = 2.000$ 和 $V = 2.010$ 时本征态是局域态。根据图 5, 可以进一步证实图 4 说明的结果。图 5 曲线 *a* 的平均电阻率显然具有扩展态平均电阻率的特征, 而图 5 曲线 *c* 的平均电阻率显然表现出强局域态平均电阻率的特征。虽然图 5 曲线 *b* 所示平均电阻率的最大值(约 10^{10})比图 2 曲线 *c* 所示平均电阻率的最大值(约 10^{17})小得多, 然而

图 5 曲线 *b* 所示平均电阻率随系统长度单调上升。当系统长度进一步增大时, 平均电阻

率单调上升的趋势保持不变, 所以这时的本征态属于局域态。根据图 4 和图 5 所示结果, 得到上述在高能量区选取的本征态, 其 Anderson 转变区处于 $V = 2t(t = 1)$ 之下。

对于上述在高能量区选取的本征态, 增长因数 $\gamma(E)$ 随 V 的变化由图 3 曲线 *b* 给出。根据前面研究低能量本征态时得到的结果, 即当 $\gamma(E) < 0.0043$ 时本征态是扩展态, 当 $\gamma(E) > 0.0046$ 时本征态是局域态, 得到该高能量本征

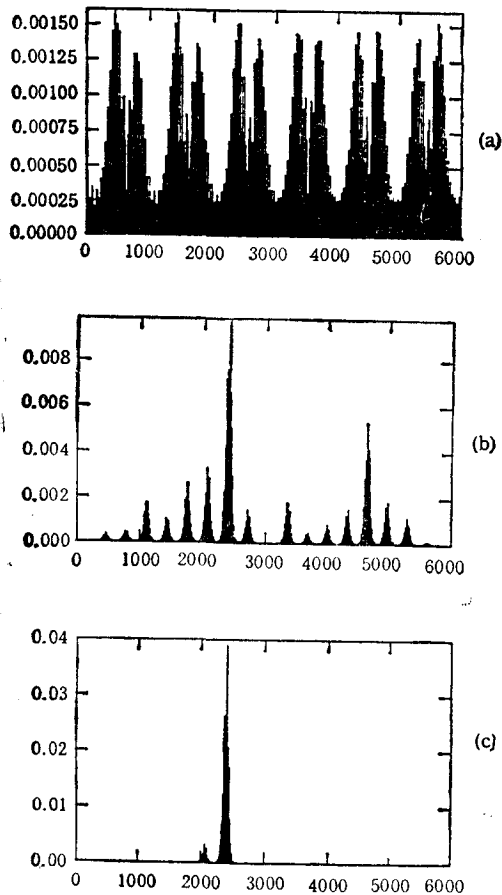


图 4 在高能量区选取的本征的波函数 (a) $V = 1.900, E = 0.902, 841, 337, 155$; (b) $V = 2.000, E = 0.920, 634, 627, 834$; (c) $V = 2.010, E = 0.922, 990, 375, 746$

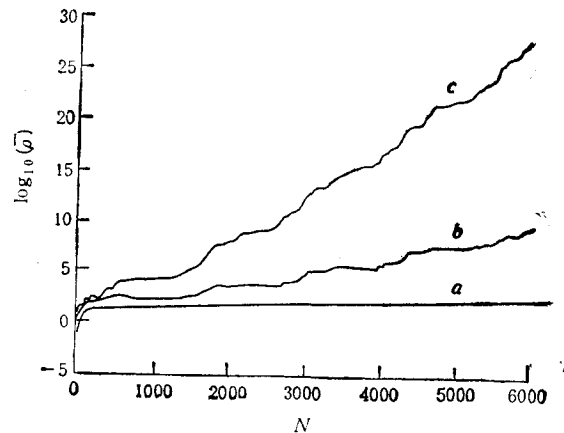


图 5 在高能量区选取的本征态的平均电阻率 曲线 *a* 为 $V = 1.900, E = 0.902, 841, 337, 155$; 曲线 *b* 为 $V = 2.000, E = 0.920, 634, 627, 834$; 曲线 *c* 为 $V = 2.010, E = 0.922, 990, 375, 746$

态的 Anderson 转变区大约从 $V = 1.970$ 到 $V = 1.992$ 。与前述低能量本征态的 Anderson 转变区(大约从 $V = 1.995$ 到 2.020)相比较, 该高能量本征态的 Anderson 转变区处于 V 值较低的范围。

三、讨 论

在文献 [13, 19, 20] 中均发现, 能量本征态的局域性质与其所处能带的带宽有关。在文献 [19] 中定量地给出, 扩展态所处能带的带宽不小于 10^{-6} , 局域态所处能带的带宽不大于 10^{-8} , 在带宽为 10^{-6} 到 10^{-8} 之间的能带中, 本征态是中间态。这一结果是在研究不同模型体系时得到的, 应该具有普遍意义。

随着势强度 V 的增大, Aubry 模型的能带不断分裂为越来越窄的次子带。由于一般

总是在高能量区首先分裂出窄子带,因而高能量区的本征态首先发生局域性质的变化.这样就很容易理解,为什么高能量区本征态的 Anderson 转变区处于较低的 V 值范围.

关于 Anderson 转变区的大小(或者说它的宽度)是否与能量有关,在现在的工作中还没有得到准确的结果.这主要是由于随着 V 的增大本征态的性质连续发生变化,因而难以给出转变区的边界.

由于受到计算量的限制,在数值研究中不可能将系统长度取作无穷大,因而不可避免地带来一定的误差.但是可以发现,将系统长度逐渐增加,最后一直到 50000, 所得结果并无实质变化.因而,在系统长度为无限大的极限情况下,我们的结论应该仍然成立.

- [1] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev.*, **B14**(1976), 2239.
- [2] P. Bruesch, S. Strassler and H. R. Zeller, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 210.
- [3] J. A. Wilson, F. J. Di Salvo and S. Mahajan, *Phys. Rev. Lett.*, **32**(1974), 882.
- [4] J. A. Wilson, F. J. Di Salvo and S. Mahajan, *Adv. Phys.*, **24**(1975), 117.
- [5] C. K. Ching, R. Spal, A. Denenstein, A. J. Heeger, N. D. Miro and A. G. Macdiarmid, *Solid State Commun.*, **22**(1977), 293.
- [6] S. Aubry, in *Solitons and Condensed Matter Physics*, Vol. 8 of Solid State Sciences, A. P. Bishop and T. Schneider ed., Springer, New York, (1978), p. 264.
- [7] S. Aubry and G. Andre, *Ann. Isr. Phys. Soc.*, **3**(1980), 133.
- [8] J. Avron and B. Simon, *Bull. Am. Math. Soc.*, **6**(1982), 81; *Commun. Math. Phys.*, **82**(1981), 101.
- [9] M. Ya. Azbel, *Phys. Rev. Lett.*, **43**(1979), 1954.
- [10] K. S. Dy and T. C. Ma, *J. Phys. C*, **15**(1982), 6971.
- [11] 孙金祚、王传奎, *物理学报*, **40**(1991), 469.
- [12] P. Dean, *Rev. Mod. Phys.*, **44**(1972), 127.
- [13] Jinzuo Sun(孙金祚), *Phys. Rev.*, **B40**(1989), 8270.
- [14] Jinzuo Sun et al. (孙金祚等), *J. Phys. Chem. Solids*, **51**(1990), 539.
- [15] 刘有延、周义昌, *物理学报*, **37**(1988), 1807.
- [16] 吴式玉、郑兆勃, *物理学进展*, **4**(1984), 11.
- [17] K. Ishii, *Supp. Prog. Theor. Phys.*, **53**(1973), 77.
- [18] A. M. Llois, N. V. Cohan and M. Weissman, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 3111.
- [19] Jinzuo Sun (孙金祚) and Chuankui Wang (王传奎), *Phys. Rev.*, **B42**(1991), to be published.
- [20] C. de. Lange and T. Janssen, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 195.

RELATION BETWEEN THE ANDERSON TRANSITION ZONE AND ENERGY OF THE AUBRY MODEL

SUN JIN-ZUO WANG CHUAN-KUI WANG JI-SUO

Department of Physics, Shandong Liaocheng Teachers College, Liaocheng, 252000

(Received 22 December 1990)

ABSTRACT

On the basis of having proved that there exists the Anderson transition zone in the Aubry model of one-dimensional incommensurate systems, we further study the relation between the Anderson transition zone and energy. Our numerical results indicate that the Anderson transition zone of the eigenstates in higher energy region is located in the range of lower values of the potential strength V , while, the Anderson transition zone of the eigenstates in lower energy region is located in the range of higher values of V .

PACC: 7130; 7125; 7150