

一维无公度系统 Aubry 模型的 Anderson 转变

孙 金 祚

王 传 奎

山东省聊城师范学院物理系,聊城,252000 北京师范大学物理系,北京,100875

1990 年 5 月 16 日收到

数值计算结果表明,一维无公度系统 Aubry 模型存在扩展态、中间态和局域态.由扩展态向局域态的转变,要经过处于势强度 $V = 2t$ 附近的一段过渡区.这个新的结果不同于用对偶性理论证明给出的结论,即当势强度 $V < 2t$ 时都是扩展态,而当 $V > 2t$ 时都是局域态,在 $V = 2t$ 存在 Anderson 转变.

PACC: 7130;7125;7150

一、引 言

无公度系统是指两种以上彼此无公度的周期结构形成的物理系统.电荷密度波(CDW)和自旋密度波(SDW)^[1,2],层状化合物及汞链化合物^[3,4],就是这种系统的例子.对于理想的周期系统,所有电子态都是扩展的;对于一维无序系统,所有电子态都是局域的.然而在无公度系统中,电子态既不都是扩展态,也不都是局域态.无公度系统是不同于周期系统和无序系统的新物理系统.由于这种物理系统具有一系列独特的物理性质,近年来得到物理学工作者和数学工作者的广泛注意,许多极有价值的结果已经作出.1985 年以前在这个领域的工作已由 Sokoloff 进行了评述^[5].

Aubry 模型是近 10 年来最为广泛采用的一维无公度系统模型^[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

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

包括本作者之一在内的一些作者^[9-11],在采用不同模型研究一维无公度系统时,都发现中间态或临界态的存在. 本作者之一的结果表明,当分裂出的子带宽度小于 10^{-6} 时,中间态就会出现. 在扩展态和局域态之间有一个过渡区. 这就意味着,由扩展态向局域态的转变是逐渐发生的. Aubry 模型的能谱具有层系结构^[12],即随着势强度 V 从零开始逐渐增大,能带分裂为子带,各子带又进一步分裂为更窄的次子带. 当 V 达到一定值之后,连续带不再存在,形成所谓奇异连续谱^[7]. 因此,有理由推测,在 V 值的某一区间,是从扩展态到局域态的过渡区, $V = 2t$ 应该处于这个过渡区之内. 为了证实上述推测,进行了数值研究. 结果表明,在 $V = 2t$ 的邻域存在中间态,这是由扩展态向局域态转变的过渡区. 这个结果不同于目前仍被接受的关于在 $V = 2t$ 存在 Anderson 转变的结论.

二、计算方法与结果

取(1)式中的跨越积分 $t = 1$, $Q = (\sqrt{5} - 2)\pi$. 选取一定的 V 值,利用 Dean 方法计算电子能谱^[13]. 首先令 $V = 1.900$,并从得到的能谱取能量 $E = 0.027620453381$ 作为被研究的本征态. 然后令 $V = 1.997$,得到与 $V = 1.900$ 时 $E = 0.027620453381$ 相应的本征态,其能量为 $E = 0.025838816023$. 同样地,得到 $V = 2.000$ 时的能量 $E = 0.025856082809$, $V = 2.001$ 时的能量 $E = 0.025862782119$, $V = 2.010$ 时的能量 $E = 0.025944323178$, 以及 $V = 2.100$ 时的能量 $E = 0.028799658041$.

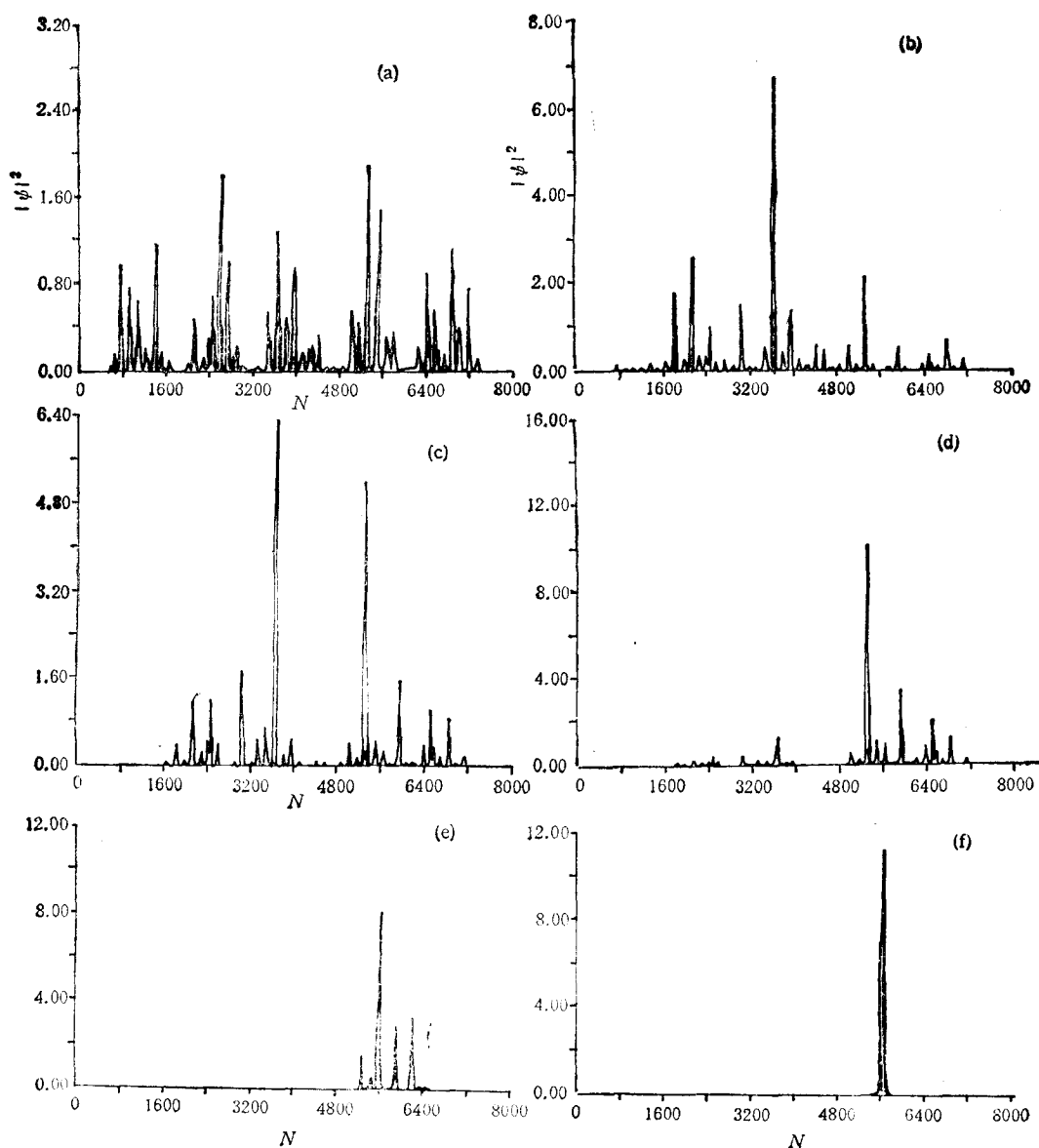
为了研究上述不同 V 值时本征态的性质,即它们是扩展态,中间态,还是局域态? 分别计算并画出各个能量相应的波函数,其结果由图 1 给出.

图 1 表明, $V = 1.900$ 时的本征态是扩展态,而 $V = 2.010$ 和 $V = 2.100$ 时的本征态是局域态,其余都是中间态.

为了更充分地说明问题,还采用了另外一条研究途径,即利用 Landauer 公式计算电阻^[14]. 这也是一种判断电子态局域性的有效方法. 本文采用的计算方案,是基于 Stone 等人建立的方法^[15].

将一段包含 $N + 1$ 个原子长度为 N (取晶格常数为 1) 的一维无公度系统,置于一无限长的理想有序原子链中. 取跨越积分 $t = 1$, 采用 Wannier 表象,波函数 $\Psi_n = \sum_n \times a_n |n\rangle$. 对于只考虑最近邻相互作用的紧束缚模型,波函数振幅的运动方程为

$$(\varepsilon - E_n)a_n - a_{n+1} - a_{n-1} = 0. \quad (2)$$

图1 V 取不同值时的波函数

- (a) $V = 1.900$, $E = 0.027620453381$; (b) $V = 1.997$, $E = 0.025838816023$;
 (c) $V = 2.000$, $E = 0.025856082809$; (d) $V = 2.001$, $E = 0.025862782119$;
 (e) $V = 2.010$, $E = 0.025944323178$; (f) $V = 2.100$, $E = 0.028799658041$

对于无公度段左边和右边的理想有序链,非归一化波函数可以写成

$$a_n = Ae^{ikn} + Be^{-ikn} \quad -\infty < n \leq 1 \quad (6)$$

和

$$a_n = Ce^{ikn} + De^{-ikn} \quad N+1 \leq n < \infty. \quad (7)$$

定义转移矩阵 T_N

$$\begin{bmatrix} D \\ C \end{bmatrix} = T_N \begin{bmatrix} B \\ A \end{bmatrix}, \quad (8)$$

则

$$T_N = \theta S^{-1} P_N S, \quad (9)$$

式中

$$\theta = \begin{bmatrix} e^{ik(N+1)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(N+1)} \end{bmatrix},$$

$$S = \begin{bmatrix} e^{-ik} & e^{ik} \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

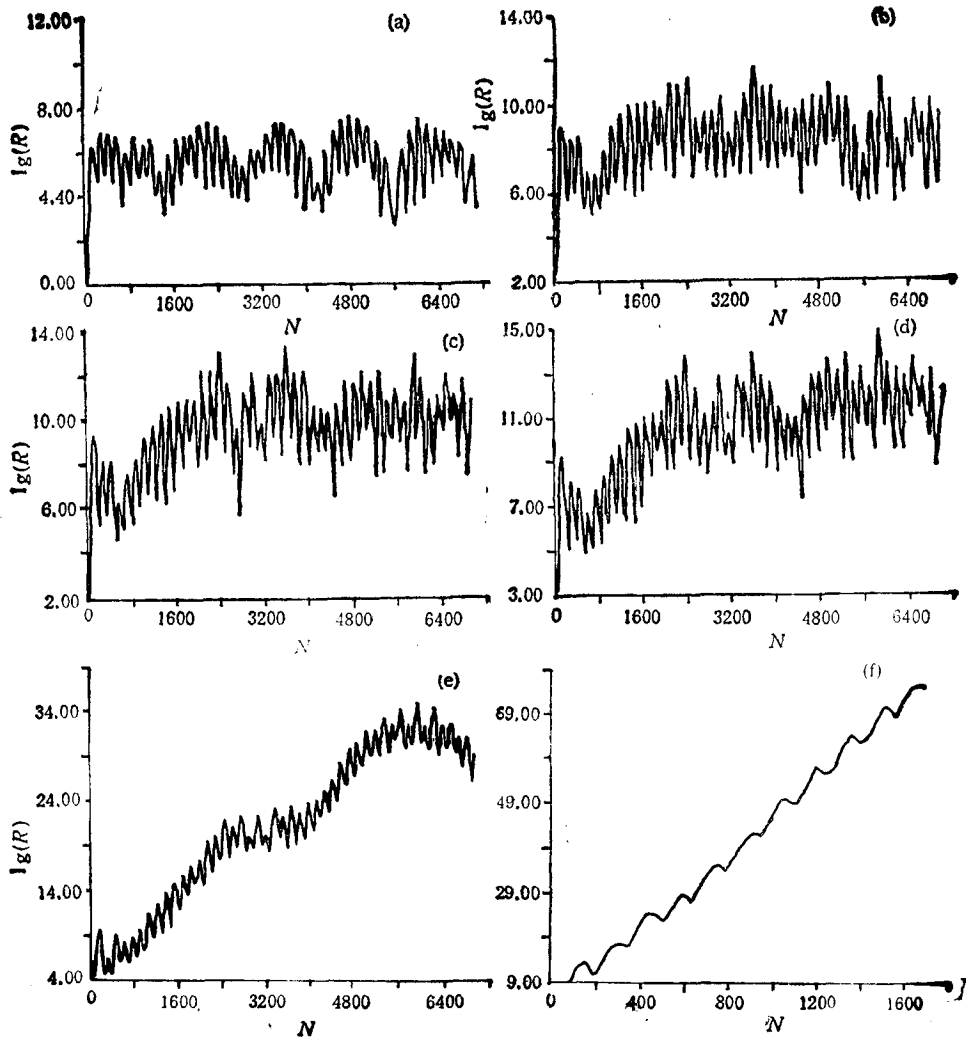


图 2 V 取不同时的电阻

- (a) $V = 1.900$, $E = 0.027620453381$; (b) $V = 1.997$, $E = 0.025838816023$;
 (c) $V = 2.000$, $E = 0.025856082809$; (d) $V = 2.001$, $E = 0.025862782119$;
 (e) $V = 2.010$, $E = 0.025944323178$; (f) $V = 2.100$, $E = 0.028799658041$

根据 Landauer 公式^[14],可以得到所研究一维无公度系统能量依赖的无量数电阻

$$R(E, N) = |(T_N)_{12}|^2, \quad (10)$$

式中 $(T_N)_{12}$ 为转移矩阵 T_N 的矩阵元。

利用上述方法分别计算依赖于不同能量(即 V 取不同值)的电阻,结果由图 2 给出。

图 2(a) 呈现出扩展态电阻的特征。在整个被研究的长度范围内,电阻相对于一个较小的平均值振荡,其最大值小于 10^7 。图 2(e) 和 (f) 为局域态电阻。尽管在长度增大的过程中电阻值发生振荡,但电阻曲线的包络随长度单调上升。对于图 2(e),当试样长度为 6400 时,电阻值高达 10^{24} ;对于图 2(f),当试样长度为 1700 时,电阻值竟高达 10^{74} 。图 2(b), (c) 和 (d) 表现出中间态电阻的特征。在电阻随格点的变化过程中,其最大值可以达到相当高的数值,远远高于扩展态情况下的电阻值。然而中间态的电阻又表现出与局域态电阻不同的特征。中间态电阻随格点的变化仍然是相对于某一平均值振荡,不过这时的平均值要比扩展态情况下大得多。

一维无公度系统电阻的振荡行为,在 Sokoloff 的工作中已经发现^[16],本作者之一的工作进一步揭示了扩展态电阻和中间态电阻的振荡周期与本征态的关系^[11,17]。由图 2 以及以上对它的说明可以看出,直接给出电阻随试样长度或格点的变化,而不是计算电阻的平均值,更能准确地判断扩展态中间态和局域态。

为了得到 $V = 2t(t = 1)$ 附近由扩展态向局域态过渡的总体面貌,取试样的某一固定长度,研究电阻随 V 的变化,结果由图 3 给出。计算过程中取试样的固定长度等于 4000, V 变化步长为 10^{-4} 。

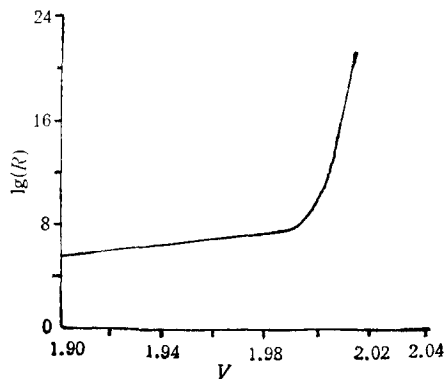


图 3 $V = 2t(t = 1)$ 附近电阻随 V 的变化曲线

三、讨 论

图 1, 图 2 和图 3 表明,一维无公度系统 Aubry 模型存在由扩展态向局域态的转变,但是这种转变不是在 $V = 2t$ 这个所谓临界点突然发生的,而是有一个中间态过渡区。这个过渡区是包括 $V = 2t$ 在内的一个区间。由图 1 给出的波函数和图 2 给出的电阻可以看出, $V = 1.997$ 时的中间态比较接近于扩展态,而 $V = 2.001$ 时的中间态又比较接近于局域态; $V = 2.010$ 时的局域态与 $V = 2.100$ 时局域态又不尽相同,前者和后者比较起来是弱局域态。综上所述可以得到一般性的结论:随着势强度 V 的连续增大,从 $V < 2t$ 到 $V > 2t$ 能量本征态的性质发生连续变化,即从扩展态到比较接近扩展态的中间态,经过典型的中间态,到比较接近局域态的中间态,再经过弱局域态到强局域态。图 3 的 V - $\lg(R)$ 曲线能够概括这种变化。

我们系统地研究了对波矢 $Q = (\sqrt{5} - 2)\pi$ 采取不同近似,以及使用不同链长度对结果的影响。数值计算表明,当对 Q 的近似不断改进和链长不断增加时,上述过渡区没有

缩小的趋势。随着 Q 值近似程度的提高和链长的增加,过渡区趋于一个定值。下面仅以使用不同链长得到的结果为例,说明这个结论。在图4中给出 $V-\lg(R)$ 曲线1,曲线2,曲线3和曲线4,它们分别对应于链长为7,000,20,000,30,000和40,000的情况。采用上述不同链长的系统,都在 T 点($V=1.990$)发生由扩展态到中间态的转变,但是由

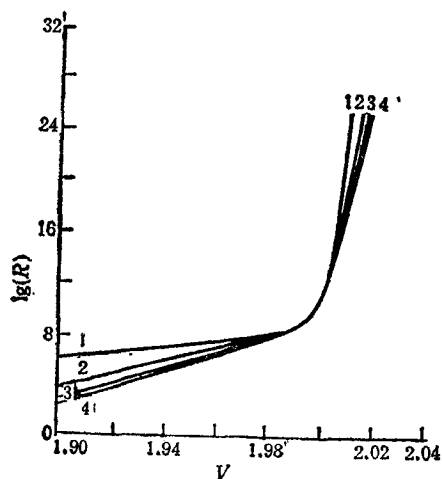


图4 链长取不同值时对过渡区的影响
曲线1,曲线2,曲线3和曲线4分别对应于
链长等于7,000,20,000,30,000和40,000

中间态向局域态的转变点(图中未标出)略有不同。计算结果表明,随着链长增加,由中间态向局域态转变点对应的 V 值略有增加,也就是说,随链长的增加过渡区不仅没有缩小,而且略有扩大。然而,当链长增加到50,000时,所得 $V-\lg(R)$ 曲线与链长等于40,000时的 $V-\lg(R)$ 曲线即图4中的曲线4基本重合,在我们的计算精度内,对于链长等于40,000和链长等于50,000这两种情况,由中间态向局域态转变的 V 值都是2.004,过渡区不再扩大。进一步增加链长,一直到计算机所能允许的最大长度,情况不再发生变化,过渡区保持在 $V=1.990$ 到 $V=2.004$ 这个区间不变。

我们的结果不同于Aubry的结论,即当 $V < 2t$ 时所有的态都是扩展态, $V > 2t$ 时所有的态都是局域态,当 $V = 2t$ 时存在Anderson转变。

可以认为造成这种分歧的主要原因是Aubry的理论不够严格。Aubry在证明过程中使用了Thouless建立的一个公式^[18],而这个公式是以指数局域即强局域为依据的。本文前面给出的结果,以及其他作者的工作都说明^[9,10],对于Aubry模型来说,情况并非如此,不仅存在强局域态,而且还存在弱局域态。

由于处理无公度系统时碰到的数学上的困难,目前对Aubry模型尚没有一个严格的解析解,因此对我们的数值结果的严格理论说明还不能给出,有待进一步的工作。

本文的数值计算是在北京师范大学计算中心完成的,对该中心有关成员的支持表示感谢。马本莖教授审阅了本文的初稿,并提出了宝贵意见,对此表示谢意。

- [1] P. Bruesch, S. Strassler and H. R. Zeller, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 210.
- [2] L. B. Coleman *et al.*, *Solid State Commun.*, **12**(1973), 1125.
- [3] J. Wilson, F. J. Disalvo and S. Mahajan, *Phys. Rev. Lett.*, **32** (1974), 882.
- [4] C. K. Chiang *et al.*, *Solid State Commun.*, **22**(1977), 293.
- [5] J. B. Sokoloff, *Phys. Rep.*, **126**(1985), 190.
- [6] S. Aubry, in *Solitons and Condensed Matter Physics*, Vol. 8 of *Solid State Sciences*, edited by A. P. Bishop and T. Schneider, Springer, New York, (1978), 264.
- [7] J. Avron and B. Simon, *Bull. Am. Math. Soc.*, **6**(1982), 81; *Commun. Math. Phys.*, **82** (1981), 101.
- [8] J. Bellissard R. Lima and D. Testard, *Commun. Math. Phys.*, **88**(1983), 207.
- [9] C. de Lange and T. Janssen, *Phys. Rev.*, **B28** (1983), 195.
- [10] C. Wiercko and E. Roman, *Phys. Rev.*, **B30** (1984), 1603.
- [11] Jinzuo Sun (孙金祚), *Phys. Rev.*, **B40** (1989), 8270.
- [12] K. A. Chao, *J. Phys. A*, **19** (1986), 2907.

- [13] P. Dean, *Rev. Mod. Phys.*, **44** (1972), 127.
- [14] R. Landauer, *Philos. Mag.*, **21**(1970), 863.
- [15] A. D. Stone, J. D. Joannopoulos and D. J. Chadi, *Phys. Rev.*, **B24** (1981), 5583.
- [16] J. B. Sokoloff, *J. Phys. C*, **17** (1984), 1703.
- [17] Jinzuo Sun(孙金祥), *J. Phys. and Chem. Solids*, to be published.
- [18] D. J. Thouless, *J. Phys. C*, **5**(1972), 77.

ANDERSON TRANSITION IN THE AUBRY MODEL OF ONE-DIMENSIONAL INCOMMENSURATE SYSTEMS

SUN JIN-ZUO

(Department of Physics, Liaocheng Teachers College, Shandong Province, Liaocheng, 252000)

WANG CHUAN-KUI

Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing, 100875

(Received 16 May 1990)

ABSTRACT

Using numerical calculation, it is found that there are extended states, intermediate states and localized states in the Aubry model of one-dimensional incommensurate systems. The transition from extended states to localized states should pass through a regime in which the intermediate states exist. The regime is situated at about the potential strength $V=2t$. The new result is different from that of duality theory which predicts that all states are extended for $V<2t$, while, for $V>2t$ all states are localized, at $V=2t$ there exists Anderson transition.

PACC: 7130; 7125; 7150