

Aubry 模型 Anderson 转变区 与波矢的关系

王传奎*

(聊城师范学院光通信研究所, 山东省聊城 252059)

孙金祚*

(聊城师范学院物理系, 山东省聊城 252059)

王继锁*

(聊城师范学院光通信研究所, 山东省聊城 252059)

(1992 年 12 月 3 日收到)

在以前工作^[7,8]的基础上, 我们进一步研究了一维无公度系统 Aubry 模型 Anderson 转变区与波矢的关系。数值结果表明: 该转变区与波矢有关; 波矢值愈小, 该转变区处于愈低的势强度 V 值的范围。

PACC: 7130; 7125; 7150

1 引言

Aubry 模型是近年来最为广泛采用的一维无公度系统模型^[1]。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

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

式中 $E_n = V \cos(Qn)$, V 为势强度, 波矢 Q 与 π 之比为无理数, t 为最近邻电子跨越积分。

Aubry 和 Andre 利用(1)式的对偶性^[2]和 Thouless 建立的一个公式^[3]证明, 当 $V > 2t$ 时, (1)式的所有本征态都是指数局域态; 当 $V < 2t$ 时, 它的所有本征态都是扩展态; 当 $V = 2t$ 时发生 Anderson 转变, 且这一转变与本征能量和波矢无关。

Aubry 模型的重要特征之一, 是存在 Anderson 转变。包括本作者之一在内的一些作者^[4-6]的工作表明, 在 Aubry 模型中, 除了具有扩展态和强局域态外, 还有中间态和弱局域态。中间态和弱局域态都不属于指数局域态。由于 Thouless 的公式^[3]只适用于指数局域态, 因此 Aubry 和 Andre 的结果需要修改。我们的数值结果表明^[7,8]: Aubry 模型的 Anderson 转变不是在 $V = 2t$ 这个所谓的临界点突然发生的, 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; 该转变区与本征能量有关。接下去自然要考虑, Aubry 模型 Anderson 转变区是否与波矢有关呢?

* 中国高等科学技术中心(世界实验室)协联成员。

一方面,文献[6,9,10]发现,本征态的局域性与该本征态所处的子带的带宽有关。文献[6]进一步指出:扩展态处于带宽不小于 10^{-6} 的子能带中;局域态处于带宽不大于 10^{-8} 的子能带中;中间态处于带宽为 $10^{-6}-10^{-8}$ 的子能带中;另一方面,Aubry 模型的能谱具有层系结构^[11],即随着势强度 V 的增大,能带分裂为子带,各子带又进一步分裂为更窄的次子带。在每一分裂阶段,分裂出的子能带的数目,即子能带的带宽,与波矢 Q 有关。一般说来, Q 值愈小,分裂出的子能带的数目愈多,即子能带的带宽愈窄。

综上所述,可以推断,Aubry 模型的 Anderson 转变区与波矢 Q 有关,并且,波矢 Q 愈小,Anderson 转变区处于愈低的 V 值范围。数值结果证实了上述的推断。

2 数值方法和结果

选取(1)式中的跨越积分 $\tau = 1$,并令研究系统的长度等于 6000.本文的数值方法可见文献[7]或文献[12]。首先,利用 Dean 方法^[12]计算了 $Q = (\sqrt{5} - 2)2\pi$ 和 $V = 1.900$ 时 Aubry 模型的能谱,然后选取本征能量 $E = 0.902, 841, 337, 155$ 作为初始能量。当 V 改变时这个本征能量发生变化。当 $V = 2.000$ 和 2.010 时相应的本征能量分别是 $E = 0.920, 634, 627, 834$ 和 $E = 0.922, 990, 375, 746$ 。对 $Q = (\sqrt{2} - 1)2\pi$, 当 $V = 1.900, 2.000$ 和 2.010 时,相应的本征能量分别是 $E = 1.774, 957, 116, 165$, $E = 1.820, 395, 742, 743$ 和 $E = 1.824, 894, 455, 472$ 。对 $Q = (\sqrt{5} - 2)2\pi$, 当 $V = 1.900, 2.000$ 和 2.010 时,相应的本征态的波函数及平均电阻率由文献[8]中图 4 和图 5 给出。

图 1 给出了 $Q = (\sqrt{2} - 1)2\pi$, 和 $V = 1.900, 2.000$ 和 2.010 的平均电阻率。根据由平均电阻率判断本征态性质的一般规则,可以看出,图 1 曲线 a 和 b 所示的平均电阻率显然具有扩展态平均电阻率的特征,所以这两个本征态都是扩展态;图 1 曲线 c 的平均电阻率上升到约 10^{20} 之后,不再随系统长度变化,一方面,它不同于扩展态的平均电阻率,另一方面,它又不同于局域态的平均电阻率,因此这个本征态为中间态。

图 2 给出了图 1 所示的本征态的波函数。由波函数可以看出, $V = 1.900$ 时本征态是扩展态,即波函数连续分布于被研究的系统之内;当 $V = 2.000$ 时,尽管本征态的波函数与 $V = 1.900$ 时典型的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

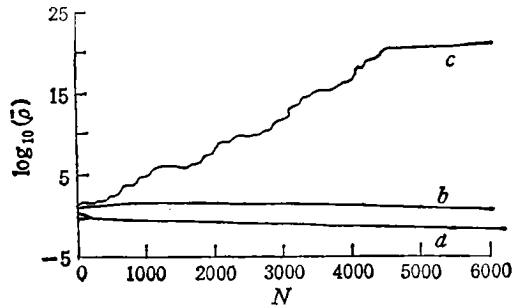
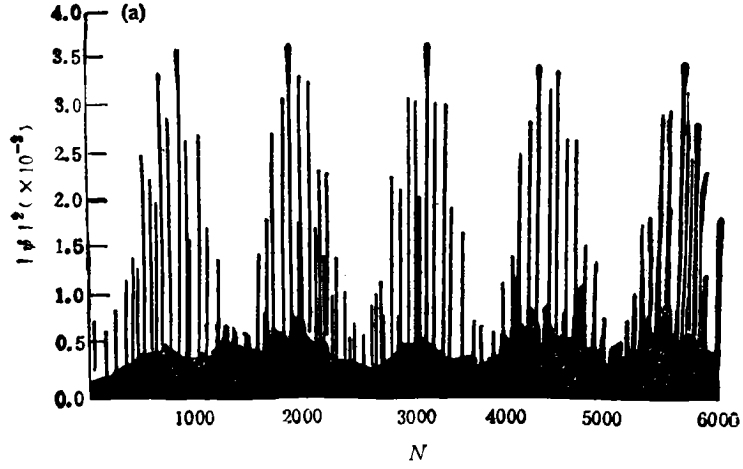
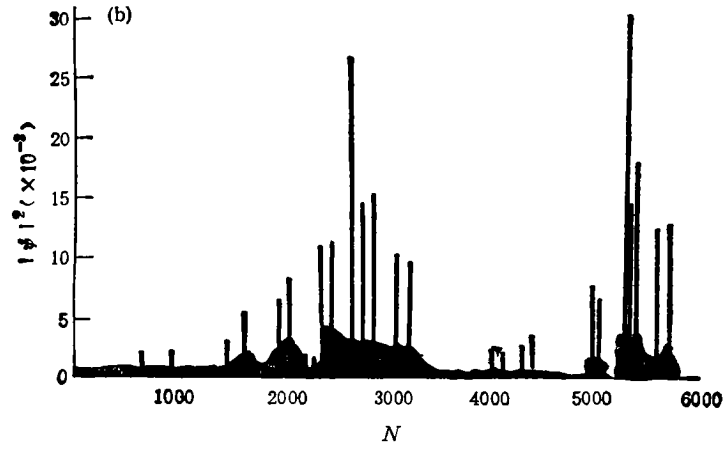


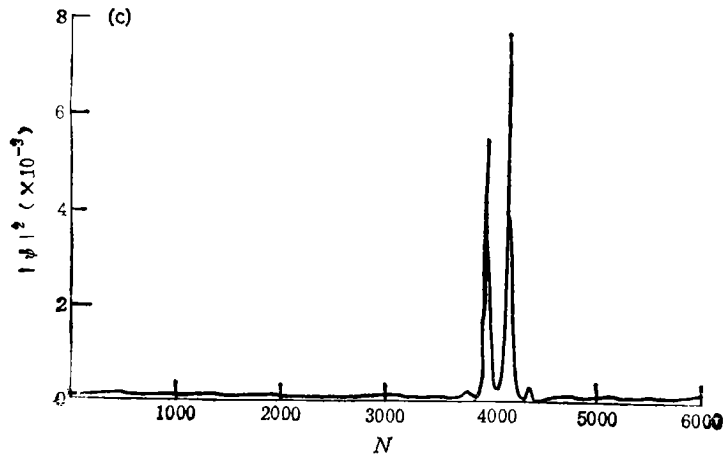
图 1 本征态的平均电阻率 $Q = (\sqrt{2} - 1)2\pi$ 时,曲线 a 为 $V = 1.900$, $E = 1.774, 957, 116, 165$; 曲线 b 为 $V = 2.000, E = 1.820, 395, 742, 743$; 曲线 c 为 $V = 2.010, E = 1.824, 894, 455, 472$



(a) $V = 1.900, E = 1.774, 957, 116, 165$



(b) $V = 2.000, E = 1.820, 395, 742, 743$



(c) $V = 2.010, E = 1.824, 894, 455, 472$

图 2 本征态的波函数 $Q = (\sqrt{2} - 1)2\pi$

征;图 2(c) 给出了中间态的波函数,很显然,中间态的波函数亦局域于被研究系统的某一长度之内。

为了得到 $V = 2z(z = 1)$ 附近本征态性质变化的总体面貌,选取被研究系统的某一固定长度,令 V 以 10^{-3} 的步长增大,计算了平均电阻率随 V 的变化,结果如图 3 所示。由图 3 曲线 a 可以看出,当 $V < 1.970$ 时,平均电阻率近似为一常数;当 $V > 1.992$ 时,平均电阻率线性增大;当 $1.970 < V < 1.992$ 时,平均电阻率缓慢增加,即当 $Q = (\sqrt{5} - 2)2\pi$ 时,该高能本征态的 Anderson 转变区大约从 $V = 1.970$ 到 $V = 1.992$ 。由图 3 曲线 b 可以看出,当 $Q = (\sqrt{2} - 1)2\pi$ 时,该本征态的 Anderson 转变区大约从 $V = 2.001$ 到 $V = 2.019$ 。

最后的结果是,Aubry 模型的 Anderson 转变区与波矢有关;波矢 Q 值减小时,Anderson 转变区左移,即处于较低的 V 值范围。

为了进一步说明前面的结果,首先选取 $Q = (\sqrt{5} - 2)2\pi, V = 1.900$ 的处于低能区的一个本征能量 $E = 0.000,571,262,919$ 作为初始能量,然后选取被研究系统的某一固定长度,令 V 以 10^{-3} 的步长增大,计算了采用不同的 Q 值相应的本征态的平均电阻率随 V 的变化,结果见图 4。由图 4 可以看出,当 $Q = (\sqrt{5} - 2)2\pi, (\sqrt{101} - 10)2\pi$, 和 $(\sqrt{626} - 25)2\pi$ 时,该能量本征态的 Anderson 转变区分别大约从 $V = 2.002$ 到 $V = 2.017$, 从 $V = 1.992$ 到 $V = 2.008$, 和从 $V = 1.978$ 到 $V = 1.991$ 。这些结果再一次说明: Aubry 模型的 Anderson 转变区与波矢 Q 有关, Q 值愈小, Anderson 转变区处于愈低的 V 值范围。

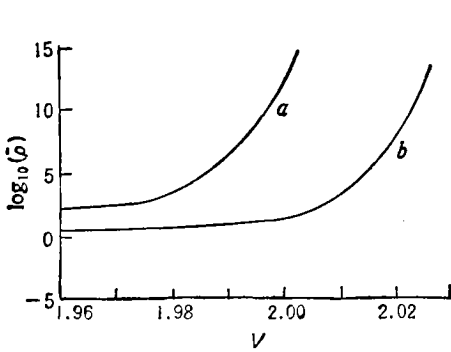


图 3 本征态的平均电阻率随 V 的变化 曲线 a 和 b 分别对应于 $Q = (\sqrt{5} - 2)2\pi$ 和 $Q = (\sqrt{2} - 1)2\pi$

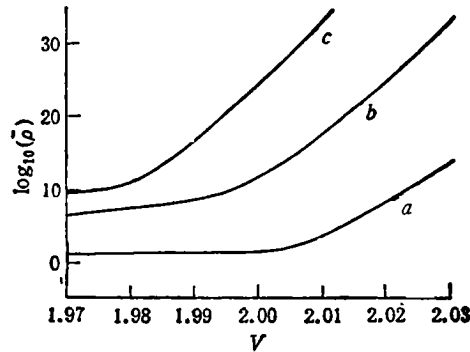


图 4 本征态的平均电阻率随 V 的变化 曲线 a 为 $Q = (\sqrt{5} - 2)2\pi$; 曲线 b 为 $Q = (\sqrt{101} - 10)2\pi$; 曲线 c 为 $Q = (\sqrt{626} - 25)2\pi$

3 讨论和结论

本文的结果是在被研究系统的格点数取为 6000 时得到的。然而我们发现,当系统长度逐渐增加,最后直到 60000 时,所得的结果并无实质变化。因而在系统长度为无限大的极限情况下,我们的结论仍然成立。

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 模型存在与能量和波矢有关的 Anderson 转变区; 对于确定的 Q 值, 本征能量愈高, 该转变区处于愈低的 V 值范围; 对于同一本征态, Q 值愈小, 该转变区处于愈低的 V 值范围。

- [1] 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.
- [2] S. Aubry and G. Andre, *Ann. Isr. Phys. Soc.*, **3** (1980), 133.
- [3] D. J. Thouless, *J. Phys. C*, **5** (1972), 77.
- [4] C. de Lange and T. Janssen, *Phys. Rev.*, **B28** (1983), 195.
- [5] C. Wiecek and E. Roman, *Phys. Rev.*, **B30** (1984), 1603.
- [6] Jinzuo Sun, *Phys. Rev.*, **B40** (1989), 8270.
- [7] 孙金祚、王传奎, *物理学报*, **40**(1991), 469.
- [8] 孙金祚、王传奎、王继锁, *物理学报*, **40**(1991), 1833.
- [9] H. Hiramoto and M. Kohmoto, *Phys. Rev. Lett.*, **62** (1989), 2714.
- [10] T. Fujiwara, M. Kohmoto, and T. Tokihiro, *Phys. Rev.*, **B40** (1989), 7413.
- [11] K. A. Chao, *J. Phys. A*, **19** (1986), 2907.
- [12] 刘有延、周义昌, *物理学报*, **37**(1988), 1807.
- [13] D. Dean, *Rev. Mod. Phys.*, **44** (1972), 127.

DEPENDENCE OF THE ANDERSON TRANSITION ZONE OF THE AUBRY MODEL ON THE WAVE VECTOR

WANG CHUAN-KUI

(Institute for Optical Communication, Liaocheng Teachers' College,
Shandong Province Liaocheng 252059)

SUN JIN-ZUO

(Department of Physics, Liaocheng Teachers' College, Shandong, Province Liaocheng 252059)

WANG JI-SUO

(Institute for Optical Communication, Liaocheng Teachers' College,
Shandong Province Liaocheng 252059)

(Received 3 December 1992)

ABSTRACT

On the basis of our previous works, we further study the dependence of the Anderson transition zone of the Aubry model in one-dimensional incommensurate systems on the wave vector. Our numerical results indicate that the Anderson transition zone is related to the wave vector; the smaller the wave vector, the lower the values of the potential strength V in which the Anderson transition zone lies.

PACC: 7130; 7125; 7150