

一类非公度体系的电子动力学*

张凯旺[†] 袁辉球 钟建新

(湘潭大学物理系, 湘潭 411105)

(1998 年 7 月 14 日收到; 1998 年 8 月 18 日收到修改稿)

研究了格点势能 $V_n = \lambda \tanh[\text{Acos}(2\pi\sigma n)]/\tanh A$, $\sigma = (\sqrt{5}-1)/2$ 的一类非公度体系的电子动力学性质, 分析了体系中不同相区内波函数的特征, 发现延展态的波函数类似于 Bloch 波, 在一定范围内体系中存在临界态. 计算了自关联函数 $C(t)$ 和均方位移 $d(t)$, 分析了它们的长时行为, 发现当体系各态均为延展态时, $C(t) \sim t^{-1}$, $d(t) \sim t^1$; 当体系各态均为局域态时, $C(t) \sim t^0$, $d(t) \sim t^0$; 在复杂相区, 即延展态、局域态和临界态共存时, $C(t)$ 的行为与初始位置密切相关, 但 $d(t) \sim t^\beta$, $\beta=1$. 研究还表明 $C(t)$ 的行为可由其相应局域态密度的关联维数来确定.

PACC: 7130; 7215

1 引 言

非公度体系(如层状化合物和汞链化合物等)以及准晶具有独特的电导输运性质^[1,2], 引起人们对准周期体系电子性质研究的广泛重视. 这一领域的早期研究局限于对各种准周期哈密顿量的能谱和波函数分析^[3]. 最近, 人们对准周期体系中的电子动力学行为及其与能谱和波函数的联系产生了浓厚的兴趣^[4-9].

对于一维紧束缚哈密顿量, 通常考虑如下形式:

$$\phi_{n+1} + \phi_{n-1} + V_n \phi_n = E \phi_n. \quad (1)$$

一些形式简单的模型, 如 Harper 模型 [$V_n = \lambda \cos(2\pi\sigma n)$, $\sigma = (\sqrt{5}-1)/2$] 和 Fibonacci 模型, 已有较详细的研究^[6,8,9].

为了进一步研究低维准周期体系中的电子局域化现象, Hiramoto 等人研究了一种推广的一维非公度体系^[10], 其格点势能为

$$V_n = \lambda \tanh[\text{Acos}(2\pi\sigma n)]/\tanh A, \quad (2)$$

其中 $\sigma = (\sqrt{5}-1)/2$. 研究表明^[10], 其本征态特征与哈密顿量参数的关系远比 Harper 模型丰富, 并构成一个复杂的相图. 当 A 接近于零时, 该模型退化到 Harper 模型. 当 A 较小时, 对于较小的 λ , 能谱是绝对连续的, 本征态是延展的; 随 λ 增大, 本征态首先在能谱中心出现局域化, 体系中局域态和延展态共存, λ 再增大时, 迁移率边向能谱边缘移动, 当 λ

* 国家自然科学基金(批准号: 19674046)及湖南省自然科学基金(批准号: 97JJN-45)资助的课题.

[†]E-mail: kw@xtu.edu.cn

大于某一值时,所有的态都变成局域态,能谱密集点状. A 较大时,情况变得更为复杂,对应于同一个 λ ,可能有多个迁移率边存在.

2 本征波函数

在研究电子的动力学之前,有必要讨论体系的本征波函数.简单的方法就是考虑静态 Schrödinger 方程

$$H\psi(E) = E\psi(E), \quad (3)$$

其中 H 为体系的哈密顿量, E 为本征能量, $\psi(E)$ 为本征波函数, $\psi(E) = (\dots, \phi_{n-1}, \phi_n, \phi_{n+1}, \dots)^T$. 设所讨论的体系格点数为 N , 则该问题实际上就是 N 阶哈密顿矩阵 H 的本征值问题,可采用改进的 QR 方法来计算.

图1示出 $A=1.0$ 对应不同 λ 值的电子能谱^[10], 图2—图4分别示出不同情形下体

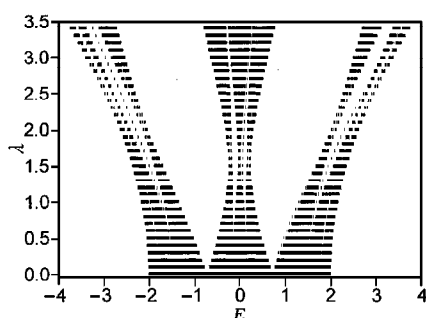


图1 $A=1.0$ 对应不同 λ 值的电子能谱

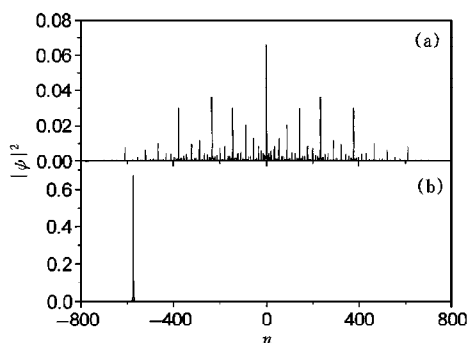


图2 $A=1.0, \lambda=2.5$ 电子概率密度分布 (a) 为 $E=2.9628300$, (b) 为 $E=0.0165187$

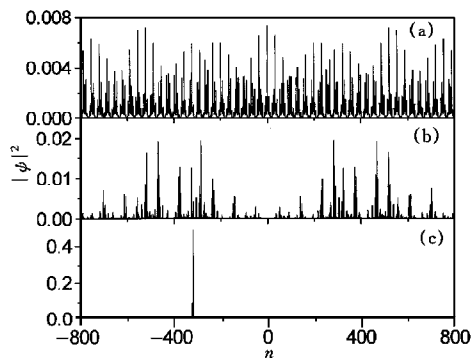


图3 $A=1.0, \lambda=2.1$ 电子概率密度分布 (a) 为 $E=2.680138$, (b) 为 $E=2.1675614$, (c) 为 $E=0.2003385$

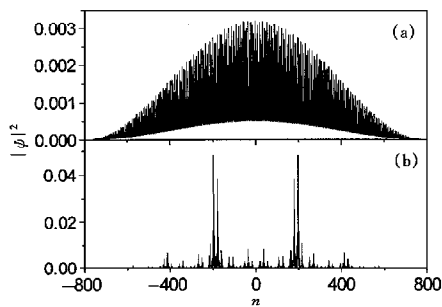


图4 $A=1.0, \lambda=1.6$ 电子概率密度分布 (a) 为 $E=2.4049121$, (b) 为 $E=0.0011944$

系($A=1.0$, $N=1597$)的本征波函数.可以看出,在一定范围内,体系中存在临界态.当 $\lambda > 2.5$ 时,各态均为局域态.当 $\lambda = 2.5$ 时,临界态和局域态共存,能谱带边的态为临界态.图 2(a)示出 $E=2.9628300$ 的本征波函数呈现临界态特点,其他的态均为局域态(图 2(b)).当 $2.1 < \lambda < 2.5$ 时,延展态和局域态共存,带边为延展态,其他的态为局域态.当 $\lambda = 2.1$ 时,延展态、临界态和局域态共存,带边为延展态(图 3(a)),带边与中心能带之间的态为临界态(图 3(b)),中心能带为局域态(图 3(c)).当 $1.6 < \lambda < 2.1$ 时,延展态和局域态共存,中心能带为局域态,其他的态均为延展态.当 $\lambda = 1.6$ 时,延展态和临界态共存,中心能带以外的态均为延展态(图 4(a)),中心能带为临界态(图 4(b)).当 $\lambda < 1.6$ 时,各态均为延展态.值得注意的是,该体系中延展态的本征波函数类似于自由粒子在一维无限深势阱中的 Bloch 波.对于 $A=3.0$ 的情形,该体系中延展态的本征波函数同样类似于 Bloch 波,这可从图 5 清楚地看到.

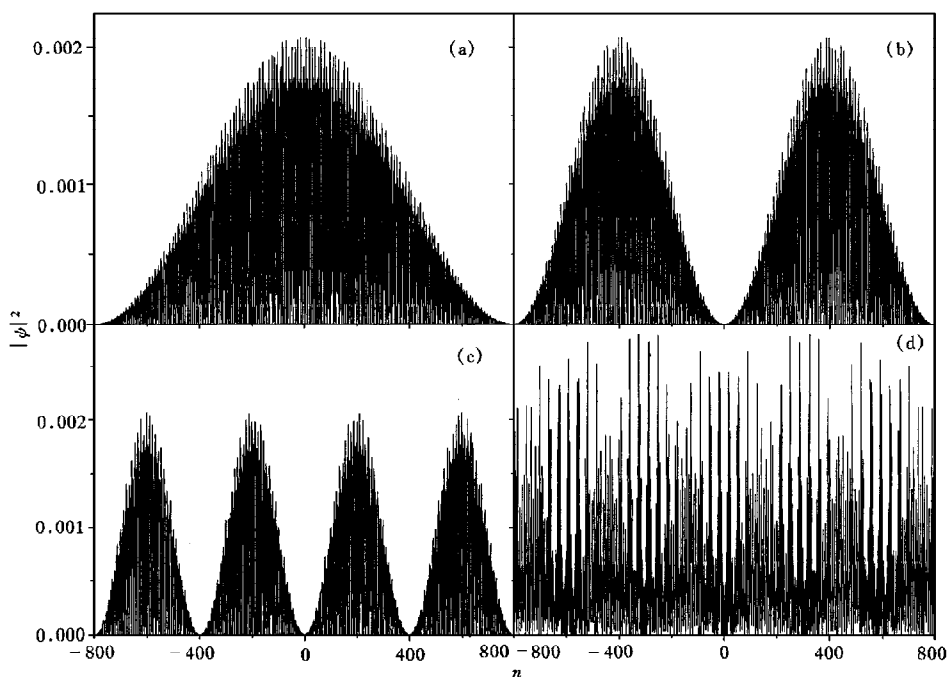


图 5 $A=3.0$, $\lambda=0.6$ 体系的概率密度分布 波函数类似 Bloch 波. (a) 为 $E=0.4264986$, (b) 为 $E=0.4264434$, (c) 为 $E=0.4262227$, (d) 为 $E=-0.0071896$

3 电子动力学

根据量子力学理论,要研究电子的运动,需考虑含时 Schrödinger 方程

$$i \frac{d}{dt} \psi(t) = H \psi(t), \quad (4)$$

其中 $\psi(t) = (\dots, \psi_{n-1}(t), \psi_n(t), \psi_{n+1}(t), \dots)^T$, $\psi_n(t)$ 为第 n 个格点在 t 时刻的波函

数. 设初始条件为

$$|\psi_n(t=0)| = \delta_{n,n_0}, \quad (5)$$

亦即在初始时刻($t=0$), 电子位于位置 n_0 . 我们所要研究的问题就是研究该波函数包络在体系中随时间的演化. 通过求解静态 Schrödinger 方程, 可求得本征能量 E_j 和相应的本征矢 $\phi(E_j)$, $j=1, \dots, N$. 由于 $\phi(E)$ 构成正交完备集, 则波函数

$$\psi_n(t) = \sum_j C_j \phi_n(E_j) \exp(-iE_j t). \quad (6)$$

由初始条件式(5)可得

$$C_j = \phi_{n_0}^*(E_j), \quad (7)$$

则在时刻 t , 波函数 $\psi_n(t)$ 可由下式给出:

$$\psi_n(t) = \sum_j \phi_{n_0}^*(E_j) \phi_n(E_j) \exp(-iE_j t). \quad (8)$$

为了描述电子波包的扩散运动, 人们常引入均方位移 $d(t)^{[4-7]}$ 和自关联函数 $C(t)^{[7-9]}$. 均方位移 $d(t)$ 定义为

$$d(t) = \sqrt{\sum_n |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n_0}|^2 |\psi_n(t)|^2}. \quad (9)$$

自关联函数 $C(t)$ 定义为

$$C(t) = \frac{1}{t} \int_0^t P(t') dt', \quad (10)$$

其中 $P(t) = |\psi_{n_0}(t)|^2$. $d(t)$ 反映了波包扩散的宽度. $C(t)$ 则是在时刻 t , 在初始位置 n_0 找到电子概率的时间平均. 对于有限大小体系, 由于边界条件的影响, 人们仅考虑波包到达边界之前 $C(t)$ 和 $d(t)$ 的行为.

自关联函数 $C(t)$ 与能谱测度 $\mu(E)$ 是直接相关的^[8,9], $P(t)$ 可写成

$$P(t) = \left| \int \exp(-iEt) d\mu(E) \right|^2. \quad (11)$$

根据分形理论, 定义能谱测度 $\mu(E)$ 的关联维数 D_2 ,

$$R(l) = \int d\mu(E) \int_{E-l/2}^{E+l/2} d\mu(E') \propto l^{D_2}, \quad (12)$$

其中 $R(l)$ 称为能谱概率. 理论分析表明^[8,9]:

$$R(l) \sim l^{D_2} \quad (l \rightarrow 0) \Leftrightarrow C(t) \sim t^{-\delta} \quad (t \rightarrow \infty), \quad \text{且 } D_2 = \delta. \quad (13)$$

数值计算时, 可采用“盒子”计数方法计算能谱关联维数 D_2 . 将能谱分成长为 l 的“盒子” B_j , 则 $R(l)$ 可由下式给出:

$$R(l) = \sum_j \left[\int_{E \in B_j} d\mu(E) \right]^2 \sim l^{D_2} \quad (l \rightarrow 0). \quad (14)$$

对于 Harper 模型^[6,8,9], 当 $\lambda < 2$ 时, 能谱为绝对连续的, 本征态为延展的, $C(t) \sim t^{-1}$, $d(t) \sim t^1$; 当 $\lambda > 2$ 时, 能谱为点状的, 本征态为局域态, $C(t) \sim t^0$, $d(t) \sim t^0$; 当 $\lambda = 2$ 时为临界态, 其能谱为 Cantor 集, $C(t)$ 和 $d(t)$ 表现出幂律行为 $C(t) \sim t^{-\delta}$, $\delta \approx 0.13$, $d(t) \sim t^\beta$, $\beta \approx 0.48$. 对于一维 Fibonacci 链^[6,9], 本征态均为临界态, 此时 $C(t) \sim t^{-\delta}$, $0 < \delta < 1$, $d(t) \sim t^\beta$, $0 < \beta < 1$.

下面将通过对自关联函数 $C(t)$ 、能谱关联维数 D_2 和均方位移 $d(t)$ 的计算与分析, 研究由(2)式所定义的有着复杂能谱的非公度体系电子动力学特征.

3.1 自关联函数

首先考虑 A 较小的情形 ($A=1.0$). 任意假定在时刻 $t=0$, 电子位于初始位置 $n_0=494$, 图 6(a) 示出此情形对应于不同 λ 值的 $C(t)$ 与 t 的双对数关系. 由图 6(a) 可知, $C(t)$ 的长时行为具有幂律衰减, 即 $C(t) \sim t^{-\delta}$. 仔细分析发现, 当 $0 < \lambda < \lambda_{C1}$ 时, 对于长时间 t , 各条曲线能较好地相互平行, 说明 $C(t)$ 此时有相同的标度关系. 为了更好地说明 $C(t)$ 这种长时行为, 可以改变坐标, 将图 6(a) 中 $\lambda=0.5, 1.3$ 所对应的曲线重画于图 6(b). 由图 6(b) 易知, $C(t) \sim [c_0 + c_1 \log(t)]/t$, 若将上式写成 $C(t) \sim t^{-\delta}$, 则 $\delta = 1 - \frac{\ln(c_0 + c_1 \ln t)}{\ln t}$. 当 $t \rightarrow \infty$ 时, $\delta \rightarrow 1$, 这与周期体系的情形类似^[9], 即长时间 t , $C(t) \sim t^{-1}$. 当 $\lambda_{C1} < \lambda < \lambda_{C2}$ 时, 初始一段短时间内, $C(t) \sim t^{-\delta}$, 且 $0 < \delta < 1$, 而当 t 较大时, $\delta = 0$, 这说明长时间后还有一些电子停留在初始位置. 当 $\lambda > \lambda_{C2}$ 时, $C(t) \sim t^0$, 电子被局域在初始位置附近, 不向体系扩散. 我们还发现, 当 $\lambda = \lambda_{C1}$ 时, 对于长时间 t , $C(t) \sim t^{-\delta}$, $0 < \delta < 1$, 这与体系存在临界态有关.

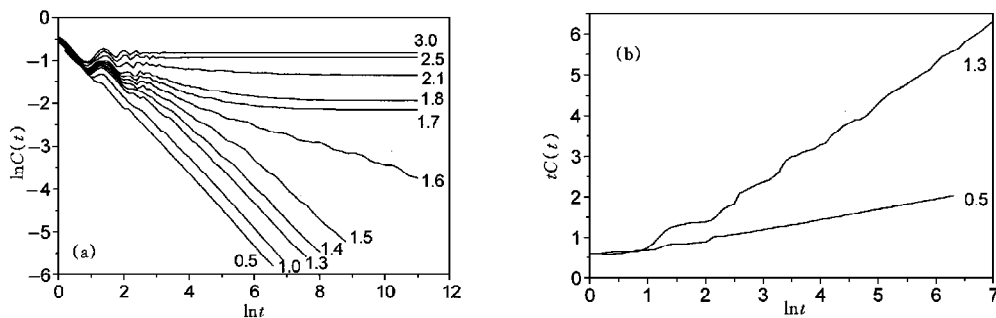


图 6 $A=1.0$, 初始位置 $n_0=494$ 时对应不同 λ 值的自关联函数 $C(t)$

自关联函数 $C(t)$ 的行为与初始位置 n_0 密切相关. 图 7 示出 $A=1.0$, 初始位置 $n_0=0$ 时对应不同 λ 值的 $C(t)$. 比较图 7 与图 6(a) 可以看出, 两者的 $C(t)$ 有较大的差异, 这说明对于不同初始位置, $C(t)$ 的行为可能不同. 我们发现, 当 $0 < \lambda < \lambda_{C1}$ 时, 与图 6(a) 的情形一致. 当 $\lambda_{C1} < \lambda < \lambda_{C2}$ 时, 图 7 中各条曲线能较好地相互平行. 但仔细分析发现, 初始位置 $n_0=0$ 时, 在所考虑的有限时间 t 内, $C(t)$ 主要由带边延展本征态决定 (其作用表现为 $\sim t^{-1}$), 中心能带局域本征态对 $C(t)$ 的

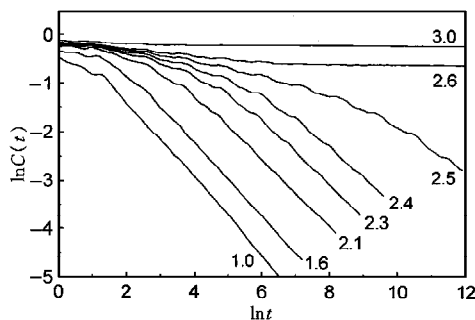


图 7 $A=1.0$, 初始位置 $n_0=0$ 时对应不同 λ 值的 $C(t)$ 与 t 的双对数关系

作用较小(其作用表现为 $\sim t^0$).可以推测,当时间 t 足够长时,中心能带本征态将起主要作用,与初始位置 $n_0=494$ 时的情形会相似.但由于计算条件的限制,此情形下 $C(t)$ 的长时行为还有待进一步研究.当 $\lambda > \lambda_{C2}$ 时, $C(t) \sim t^0$.同时还发现,对于 $\lambda = \lambda_{C2}$, $C(t) \sim t^{-\delta}$, $0 < \delta < 1$,这与体系中存在临界态相对应.

我们也计算了 A 较大时($A=3.0$)的 $C(t)$ 行为.与 $A=1.0$ 的情形基本类似,随 λ 增大,也存在两个临界参数 λ_{C1} 和 λ_{C2} .当 $0 < \lambda < \lambda_{C1}$ 时, $C(t) \sim t^{-1}$,具有与周期体系相同的性质.而当 $\lambda > \lambda_{C2}$ 时, $C(t) \sim t^0$,电子被局域在初始位置附近.当 $\lambda_{C1} < \lambda < \lambda_{C2}$ 时, $C(t)$ 行为与初始位置有关,但这时 $C(t)$ 的行为更为复杂,存在更多的临界态.

3.2 能谱关联维数

为了更好地说明 $C(t)$ 与能谱测度的关系,引入能谱概率 $R(l)$ 来研究 $C(t)$ 的标度指数与能谱关联维数 D_2 的关系.图8分别示出 $A=1.0$,初始格点为 $n_0=494$ 和 $n_0=0$ 的 $C(t)$ 与 $R(l)$.由图8可知 $\ln R(l)$ 对 $1.10 - \ln l$ 曲线与 $\ln C(t)$ 对 $\ln t$ 曲线能较好地重合,这表明对任意 λ , $C(t) \sim t^{-\delta}$, $t \rightarrow \infty$, $R(l) \sim l^{D_2}$, $l \rightarrow 0$,且 $D_2 = \delta$.由此看来, $C(t)$ 的行为由其相应局部态密度的关联维数来确定,而与波函数没有简单的联系.

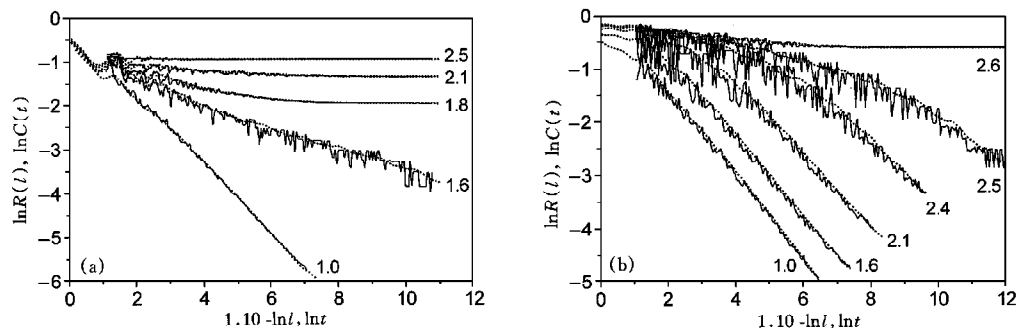


图8 $A=1.0$,不同初始位置 n_0 对应不同 λ 值 $C(t)$ 与 $R(l)$ 的关系. $\cdots$ 对应 $C(t)$, $—$ 对应 $R(l)$, $R(l)$ 所对应的曲线已作了平移,(a)为 $n_0=494$, (b)为 $n_0=0$

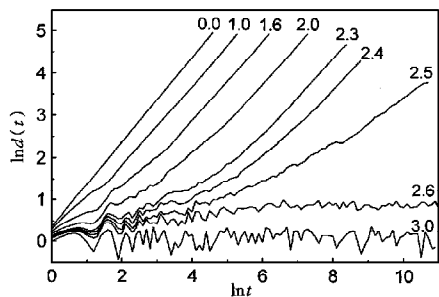


图9 $A=1.0$ 对应不同 λ 值的均方位移 $d(t)$ 与时间 t 的双对数关系

3.3 均方位移

为了进一步说明体系的局域性质,计算了均方位移 $d(t)$.图9示出 $A=1.0$ 不同 λ 值的 $d(t)$.由图9可以看出 $d(t)$ 的长时行为可表示成 $d(t) \sim t^\beta$.当 $\lambda < \lambda_{C2}$ 时, $d(t) \sim t^0$;而当 $\lambda < \lambda_{C2}$ 时,对应的各条曲线能较好地平行,且满足 $d(t) \sim t^1$,具有同周期体系相类似的弹道扩散行为.我们知道,若体系仅有延展态,则 $\beta=1$.值得注意的是,混合相区($\lambda_{C1} < \lambda < \lambda_{C2}$)内, $d(t)$ 的行为与延展区($\lambda < \lambda_{C1}$)的行

为一致,不同的是前者($\lambda_{C1} < \lambda < \lambda_{C2}$)的扩散速度比后者($\lambda < \lambda_{C1}$)的慢.可以这样来理解:对于一维非公度体系,当延展态、局域态和临界态共存时, $d(t)$ 可理解为 $d(t) \sim C_a t^1 + C_b t^0 + C_c t^\gamma \sim (C_a + C_b t^{-1} + C_c t^{\gamma-1}) t^1$, $0 < \gamma < 1$, 当 $t \rightarrow \infty$ 时, $d(t) \sim t^1$. 由此可推断,只要体系中有延展态存在,即有 $d(t) \sim t^1$ 成立.我们同时还计算了 $A=3.0$ 时的情形,结果也是如此.

4 结 论

本文研究了格点势能 $V_n = \lambda \tanh[A \cos(2\pi \sigma n)] / \tanh A$, $\sigma = (\sqrt{5} - 1)/2$ 的一类非公度体系的电子动力学性质.数值计算与分析结果表明:体系中延展态的波函数类似于 Bloch 波,并且在一定范围内体系中有临界态存在.当体系各态均为延展态时, $C(t) \sim t^{-1}$, $d(t) \sim t^1$, 具有与周期体系相类似的性质.当体系各态均为局域态时, $C(t) \sim t^0$, $d(t) \sim t^0$, 电子被局域在初始位置附近,不向外扩散.在复杂相区,即当体系为延展态、局域态和临界态共存时, $C(t)$ 的行为与初始位置密切相关,而与体系的本征波函数没有简单的对应关系,但其标度指数与相应的能谱维数 D_2 相关.同时还发现,若体系中存在延展态,则有关系 $d(t) \sim t^1$ 成立.

- [1] J. Wilson, F.J. Disalvo, S. Mahajan, *Phys. Rev. Lett.*, **32**(1974), 882; C.K. Chiang *et al.*, *Solid State Commun.*, **22**(1977), 293.
- [2] C. Janot, R. Mosseri, *Proceedings of the 5th International Conference on Quasicrystals* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 1995); D.L. Zhang, *Phys. Rev. Lett.*, **66**(1991), 2778.
- [3] M. Arai, T. Tokihiro, T. Fujiwara *et al.*, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 62; M. Kohmoto, B. Sutherland, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 2184; Y. Y. Liu, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 9675; J. X. Zhong *et al.*, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 13778; T. Odagaki, D. Nguyen, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 2184; Liu You-nian *et al.*, *Progress in Physics*, **17**(1997), 1 (in Chinese).
- [4] M. Wikinson, E.J. Austin, *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 1420.
- [5] R. Ketzmerick, K. Kruse, S. Kraut *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **79**(1997), 1959.
- [6] H. Hiramoto, S. Abe, *J. Phys. Soc. Japan*, **57**(1988), 230, 1365.
- [7] D. E. Katsanos, S. N. Evangelou, S. J. Xiong, *Phys. Rev.*, **B51**(1995), 859.
- [8] R. Ketzmerick, G. Petschel, T. Geisel, *Phys. Rev. Lett.*, **69**(1992), 695.
- [9] J. X. Zhong, R. Mosseri, *J. Phys: Condens. Matter*, **7**(1995), 8383.
- [10] H. Hiramoto, M. Kohmoto, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 2714.

ELECTRONIC DYNAMICS IN AN INCOMMENSURATE SYSTEM*

ZHANG KAI-WANG[†] YUAN HUI-QIU ZHONG JIAN-XIN

(Department of Physics, Xiangtan University, Xiangtan 411105)

(Received 14 July 1998; revised manuscript received 18 August 1998)

ABSTRACT

The electronic dynamics of an incommensurate system have been studied with site potentials $V_n = \lambda \tanh[A \cos(2\pi \sigma n)] / \tanh A$, where $\sigma = (\sqrt{5} - 1)/2$. By analyzing the wave function, we find the extended eigenstates are similar to the Bloch waves, and critical states occur in some Hamiltonian parameter regions. Much attention is paid to the long-time behavior of the autocorrelation function $C(t)$ and mean square displacement $d(t)$. When all states in the system become extended, $C(t) \sim t^{-1}$ and $d(t) \sim t^1$. In the regime with absolute localized states, $C(t) \sim t^0$ and $d(t) \sim t^0$. Between these two extremes, there exists a complex phase regime in which extended states, critical states and localized states coexist, and the behavior of $C(t)$ is related to the initial site, but with $d(t) \sim t^1$. Moreover, the relation between $C(t)$ and the local spectral probability $R(t)$ have been studied.

PACC: 7130; 7215

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19674046), and by the Natural Science Foundation of Hunan Province (Grant No. 97JJN-45), China.

[†]E-mail: kw@xtu.edu.cn