

无序度对一维长程关联无序系统中 局域化-退局域化转变的影响

邓超生[†] 徐 慧 刘小良 伍晓赞

(中南大学物理科学与技术学院,长沙 410083)

(2007 年 7 月 17 日收到 2007 年 9 月 3 日收到修改稿)

对长程幂律关联能量序列进行了修正,使其能体现出无序度在一维长程关联无序系统中的影响,并利用重正化群方法,计算了能反映该系统局域化-退局域化转变的 Lyapunov 指数.结果表明,在由于关联指数 p 的影响而在系统中出现的局域化向退局域化的转变中,无序度起着相反的作用.当关联指数 p 一定而无序度 W 增大时,系统中心能区范围内由于长程关联而引起的扩展态逐渐向局域态转变.当无序度 W 增大到某一临界值 W_c 时,系统中所有本征态均转变为局域态,此时系统中发生退局域化向局域化的转变,并且临界值 W_c 随着关联指数 p 的增大而增大.

关键词:长程关联, Lyapunov 指数, 无序度, 局域化-退局域化转变

PACC: 7155J, 7130

1. 引 言

根据 Anderson 理论,一维非关联无序系统中的电子态都是局域化的,并且任意大小的无序度都将导致这种局域化的出现^[1].但是,随着人们对无序材料及各种凝聚物质的深入研究^[2-4],发现格点能量之间的空间关联在很大程度上影响了电子局域态的性质,特别是在一维关联无序系统中出现了 Anderson 局域化的崩溃,在系统的中心能区范围内发现了扩展态的存在.这一现象极大地引起了研究者的兴趣,并从理论上^[5-9]和实验上^[10,11]对关联诱导的局域化向退局域化的转变进行了广泛的研究.

在所有短程与长程的关联机制中,长程幂律关联无疑更贴近现实无序系统中真实的一面,大部分研究者在探讨关联对无序系统电子性质的影响时也大多采用了长程幂律关联机制^[12-14].在这种关联机制中,格点的在位能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 具有幂律谱密度 $s(q) \propto q^{-p}$ 的形式,函数 $s(q)$ 为空间关联函数 $\epsilon_i \epsilon_j$ 的傅里叶变换, q 为波矢,而 p 为关联指数,它表征了关联强度的大小.研究发现^[5,7,12],当关联指数 $p < 2.0$ 时,系统的中心能区范围内就会有扩展态的出现,并且系统中相应的电子态密度^[12]、平均电

阻率^[7]等物理量也随着关联指数 p 的变化而变化.

长程关联能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 的无规性通常由关联指数 p 和无序度 W 两个参量所决定,关联指数 p 决定了能量分布曲线的粗糙程度,而无序度 W 则关系到能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 的分布宽度,亦即能量的振幅.这两个参量都是体现无序系统电子性质的重要物理量,在研究系统中的局域化-退局域化转变时,应该同时将这两种参量考虑进去,但大多数研究者往往注重于研究关联指数对这种转变的影响,而无序度在其中所起的本质作用没有得到阐明,也仅有部分研究者试图对此作出解释^[15,16].显然,如果将两者结合起来综合考虑,则能够对长程关联无序系统中的物理图像作出更加准确的描绘.

本文正是基于以上考虑,为了研究无序度在一维长程关联无序系统局域化-退局域化转变中的影响,对长程幂律关联能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 进行了修正,同时利用重正化群方法^[17,18]对不同关联指数和无序度情况下的 Lyapunov 指数进行了计算,并探讨了在关联指数一定时系统中心能区范围内的所有扩展态全部转变为局域态时的各种临界无序度 W_c .对无序度这一重要参量在系统局域化-退局域化转变中的影响进行了深入分析.

[†] E-mail: csudeng@126.com

2. 模型与格点关联能量序列

在对一维长程关联无序系统进行研究时,大都采用单电子紧束缚无序模型即 Anderson 模型^[1],此模型的哈密顿量可表示为

$$H = \sum_{i=1}^N \epsilon_i |i\rangle \langle i| + t \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} |i\rangle \langle j|, \quad (1)$$

其中 $\{|i\rangle\}$ 为原子轨道波函数基, N 为一维无序系统的格点数, $\{\epsilon_i\}$ 表示电子在第 i 个格点上所具有的能量,在长程幂律关联机制中, $\{\epsilon_i\}$ 具有幂律谱密度 $s(q) \propto q^{-p}$ 的形式. 仅考虑最近邻格点之间的相互作用时, t 为最近邻格点之间电子的跳跃积分,对于对角无序,则根据 Day 和 Martino^[19] 提出的方案,跳跃积分 t 取为 -1 ,即以 $-t$ 为能量单位.

长程幂律关联能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 可以由傅里叶滤波法产生^[12,20],在经过对谱密度公式 $s(q) \propto q^{-p}$ 进行一系列的傅里叶变换及逆变换之后, $\{\epsilon_i\}$ 具有如下形式^[5]:

$$\epsilon_i = \sum_{q=1}^{N/2} \left[q^{-p} \left(\frac{2\pi}{N} \right)^{1-p} \right]^{1/2} \cos \left(\frac{2iq\pi}{N} + \phi_q \right), \quad (2)$$

其中 N 为格点数, ϕ_q 是 $N/2$ 个各自独立的均匀分布在区间 $[0, 2\pi]$ 内的随机相位. 当关联指数 p 不同时,格点能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 也相应地具有不同的关联形式. $p=0$ 时表示系统处于非关联纯无序状态, $p < 0$ 表示反关联,而 $p > 0$ 表示正关联. 本文中我们只讨论 $p > 0$ 的正关联情况,并且设定能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 的平均值 $\epsilon_i = 0$, 偏差 $\Delta\epsilon = \sqrt{\epsilon_n^2 - \epsilon_n} = 1$,同时加上周期性边界条件.

我们看到,由以上方法产生的关联能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 没有体现出无序度对系统性质的影响,而无序度正是表征无序系统物理性质的一个重要参量,它的值显著地影响了系统的电子局域态分布^[21]、局域长度^[16,22]等. 因此,为了探讨无序度在一维关联无序系统中所起的本质作用,有必要对以上产生的关联能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 进行修正,修正后的能量序列具有如下形式:

$$\epsilon_i(W) = \frac{W}{\sqrt{12}} \epsilon_i, \quad (3)$$

其中修正项 $W/\sqrt{12}$ 为高斯分布的标准偏差^[16]. 可以发现,能量序列 $\{\epsilon_i\}$ 经过修正后就可以通过无序度 W 来控制格点能量的振幅,这也恰好体现了无序度能够决定能量序列的无规性这一物理意义. 因此,

本文中我们将采用这一修正后的能量序列 $\epsilon_i(W)$ 来进行研究.

3. 重正化群方法

作为一个新的尝试,我们借助重正化群方法来研究一维长程关联无序系统的物理性质,这一方法可以通过将一个有效哈密顿量的矩阵元对所保留的格点重正化来消去所选定的格点. 在消去所选定的格点时,该格点的能量及其与前后最近邻格点的跳跃积分都转移到它最近邻的格点上,而该格点的能量和跳跃积分则被重正化了.

对于具有 N 个格点的一维单链系统,我们完全可以利用重正化群方法来逐一消去格点 1 与格点 N 之间的 $N-2$ 个格点,并得到格点 1 与格点 N 之间的有效能量和它们之间的有效跳跃积分,从而最终达到简化系统哈密顿量的目的. 具体操作过程如图 1 所示. 首先消去第 2 个格点,重正化后将导致第 1 个格点的能量 ϵ_1 、第 3 个格点的能量 ϵ_3 以及它们之间的跳跃积分 $t_{1,3}$ 发生变化,而其他 $N-3$ 个格点的能量以及它们之间的跳跃积分将保持不变.

$$\epsilon_1^{(2)}(E) = \epsilon_1 + t_{1,2} \frac{1}{E - \epsilon_2} t_{2,1}, \quad (4a)$$

$$\epsilon_3^{(2)}(E) = \epsilon_3 + t_{2,3} \frac{1}{E - \epsilon_2} t_{3,2}, \quad (4b)$$

$$\epsilon_{1,3}^{(\text{eff})}(E) = t_{1,2} \frac{1}{E - \epsilon_2} t_{2,3}, \quad (4c)$$

其中 E 是系统的本征能量, $\epsilon_1^{(2)}(E)$ 和 $\epsilon_3^{(2)}(E)$ 分别是消去格点 2 后格点 1 和格点 3 的有效能量,而 $\epsilon_{1,3}^{(\text{eff})}(E)$ 则是格点 1 与格点 3 之间的有效跳跃积分.

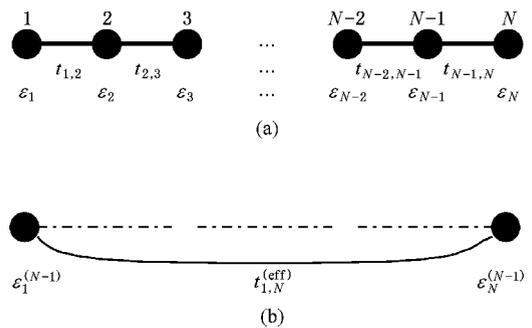


图 1 重正化群方法示意图 (a)重正化前的一维无序链 (b)重正化后的格点 1 和格点 N

重复对格点 3、格点 4、...、格点 $N-1$ 进行上述操作,最终将得到格点 1 和格点 N 的有效能量以及

它们之间的有效跳跃积分

$$\begin{aligned} \epsilon_1^{(N-1)}(E) &= \epsilon_1^{(N-2)}(E) + t_{1,N-1}^{(\text{eff})}(E) \\ &\times \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} t_{N-1,N}^{(\text{eff})}(E), \quad (5a) \end{aligned}$$

$$\epsilon_N^{(N-1)}(E) = \epsilon_N + t_{N-1,N} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} t_{N-1,N}^{(\text{eff})}, \quad (5b)$$

$$t_{1,N}^{(\text{eff})}(E) = t_{1,N-1}^{(\text{eff})}(E) \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-3)}(E)} t_{N-1,N}. \quad (5c)$$

在(4)(5)式中,由于我们只考虑最近邻格点之间的相互作用,因此有

$$\begin{aligned} t_{i,i+1} &= t_{i+1,i} = t \\ (i &= 1, 2, 3, \dots, N-1, N). \end{aligned}$$

经过对该一维单链系统重正化之后,系统的 N 阶哈密顿量矩阵随之变为二阶的有效哈密顿量矩阵形式,即

$$H^{(\text{eff})}(E) = \begin{bmatrix} \epsilon_1^{(N-1)}(E) & t_{1,N}^{(\text{eff})}(E) \\ t_{N,1}^{(\text{eff})}(E) & \epsilon_N^{(N-1)}(E) \end{bmatrix}. \quad (6)$$

为了能够得到系统的 Lyapunov 指数 $\gamma(E)$,引入矩阵元为 $[G_{mn}(E)] = m | \frac{1}{E-H} | n$ 的格林函数 $G_{mn}(E)$,并经过大量的迭代之后,得到 Lyapunov 指数 $\gamma(E)$ 与有效跳跃积分 $t_{1,N}^{(\text{eff})}(E)$ 的关系为^[17]

$$\begin{aligned} \gamma(E) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \ln \left| \frac{G_{N,N}(E)}{G_{1,1}(E)} \right| \right] \\ &= - \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \ln | t_{1,N}^{(\text{eff})}(E) | \right). \quad (7) \end{aligned}$$

从(7)式可以看到,通过对有效跳跃积分 $t_{1,N}^{(\text{eff})}(E)$ 的计算就可以得到系统的 Lyapunov 指数 $\gamma(E)$ 。 $\gamma(E)$ 的一个重要特性如下:如果在系统的整个能区范围内, $\gamma(E)$ 的取值都为某个不为零的有限值,则表明该系统中所有的电子态都为局域态,而如果在系统的某一能量范围内 $\gamma(E)$ 的取值等于零,则表明在该能量范围内系统中出现了局域长度大于系统尺寸的扩展态。因此,根据 $\gamma(E)$ 的这一特性,完全可以计算出系统中出现局域化-退局域化转变时无序度 W 的临界值,从而可以得出无序度在这种转变中所起的作用。

4. 数值计算结果与分析

我们将通过计算 Lyapunov 指数 $\gamma(E)$ 来研究无序度这一重要物理量在系统局域化-退局域化转变中的影响。计算过程中系统的格点数统一取为 $N =$

2000。事实上,当格点数达到 2000 的时候,系统中已经能够形成稳定的局域态,并且随着格点数的增加,电子本征矢的振幅基本上保持不变,即电子在系统中的概率分布不再变化^[23]。另外,在对系统的电导^[16,24]、局域长度^[25]等物理量进行计算时,格点数也没有产生很大的影响。因此,我们认为格点数取为 2000 时,已经能够准确地反映出系统中电子态的物理性质。同样,由于关联诱导的系统局域化向退局域化的转变大多发生在系统中心能区范围内^[26],因此,我们在计算中统一将本征能量 E 的范围取为 $[-1.5, 1.5]$ 。

4.1. 关联指数 p 对系统的影响

当关联指数 p 大于临界关联指数 $p_c = 2.0$ 时,系统中就会出现关联诱导的局域化向退局域化的转变,这一点已经被大量的文献所证实^[5,7,12,15,16]。作为比较,我们仍然在此给出了关联指数 p 不同时 Lyapunov 指数 $\gamma(E)$ 的变化情况。

图 2 给出了无序度 W 一定而关联指数 p 分别为 1.0, 2.0, 3.0 时的 Lyapunov 指数 $\gamma(E)$ 与本征能量 E 之间的变化关系。从图 2 可以看到,当 p 较小 ($p = 1.0$) 时,在所取的整个本征能量范围内, $\gamma(E)$ 均为有限值,表明系统中所有的电子态都为指数衰减形式的局域态,这是由于关联强度不够大而没有对 Anderson 局域化产生影响的结果。当 p 增大到 2.0 时,系统中出现了局域态向退局域态转变的临界状态,此时临界关联指数 $p_c = 2.0$ 。而 p 取为 3.0 时,可以很明显地看到在较大能量范围内出现了 $\gamma(E)$ 等于零的情况,此时系统中出现了大量的扩展态。

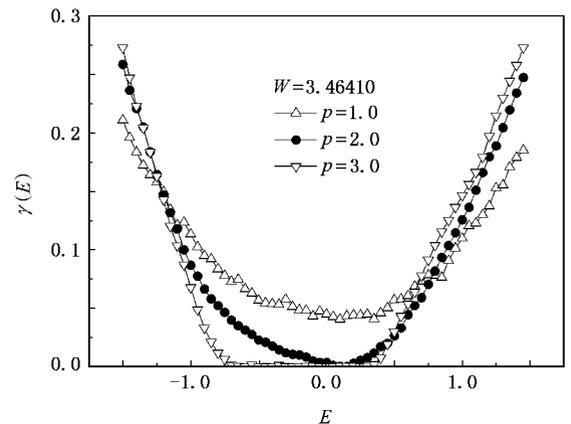


图 2 无序度 W 一定而关联指数 p 不同时 Lyapunov 指数 $\gamma(E)$ 随本征能量 E 的变化关系 $p_c = 2.0$

4.2. 无序度 W 对系统的影响

利用(3)式对系统的格点能量序列进行修正之后,无序度对局域化-退局域化转变的影响就显现出来了.

图3给出了关联指数 $p = 2.0$ 而无序度 W 不同时 Lyapunov 指数 $\chi(E)$ 随本征能量 E 的变化关系. 由于 $p = 2.0$ 时,系统中已经有扩展态的存在,而从图3可以看到,无序度 W 较小($W = 2.0$)时, Lyapunov 指数 $\chi(E)$ 在很大的本征能量范围内都等于零,这说明较小的无序度对系统中出现的退局域化状态不会产生影响,系统中仍有大量的扩展态存在.但是随着无序度的逐渐增加($W = 3.0$), $\chi(E)$ 逐渐变大,系统中出现扩展态的能量范围逐渐变小,说明此时大量的扩展态向局域态发生了转变.当扩展态完全消失时,系统中也就发生了退局域化向局域化的转变,此时的临界无序度 $W_c = 3.48$.

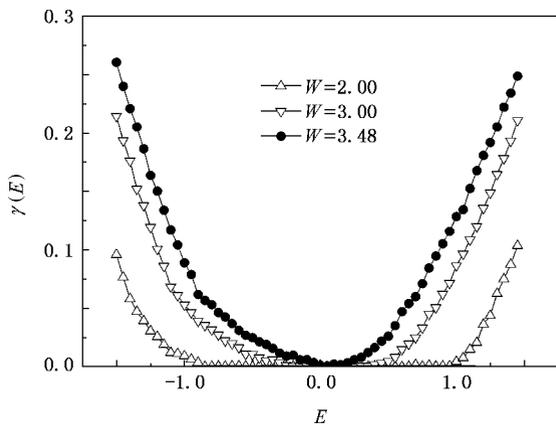


图3 关联指数 $p = 2.0$ 而无序度 W 不同时 Lyapunov 指数 $\chi(E)$ 随本征能量 E 的变化关系 $W_c = 3.48$

同样,图4、图5给出了关联指数 p 分别等于 2.5、3.0 而无序度 W 不同时 Lyapunov 指数 $\chi(E)$ 随本征能量 E 的变化关系. 对于这两种情况,也有同样的趋势发生. 随着无序度的增加,系统中的扩展态逐渐向局域态转变,退局域态逐渐消失,直到系统中所有的电子态都成为局域态. 此时系统中出现退局域化向局域化的转变,而发生这种转变的无序度临界值分别为 4.18、4.64.

4.3. 局域化-退局域化转变相图

通过以上对系统中发生局域化-退局域化转变时的临界关联指数 p_c 与临界无序度 W_c 的计算,我

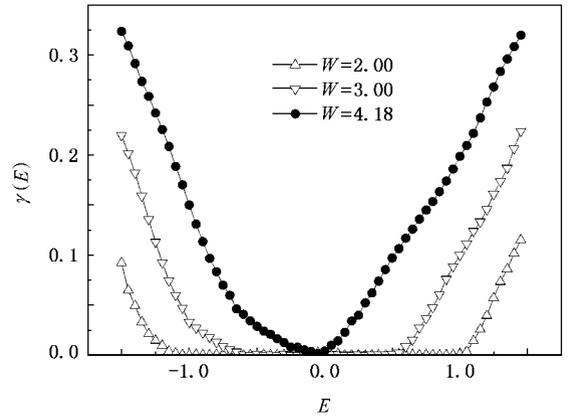


图4 关联指数 $p = 2.5$ 而无序度 W 不同时 Lyapunov 指数 $\chi(E)$ 随本征能量 E 的变化关系 $W_c = 4.18$

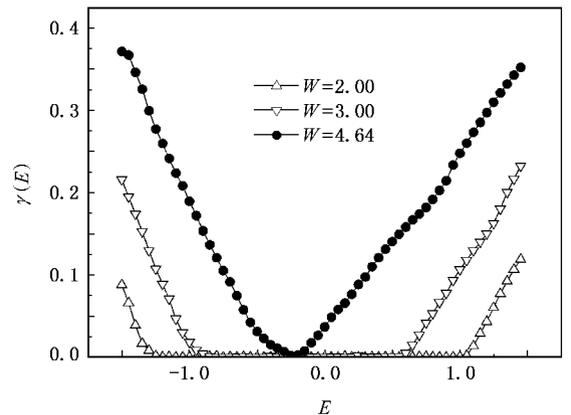


图5 关联指数 $p = 3.0$ 而无序度 W 不同时 Lyapunov 指数 $\chi(E)$ 随本征能量 E 的变化关系 $W_c = 4.64$

们在无序度 W 与关联指数 p 所形成的 $W-p$ 平面内得到了系统中局域态与扩展态互相转变的相图,如图6所示. 图6中的实心圆点代表在参数 p 与 W 的

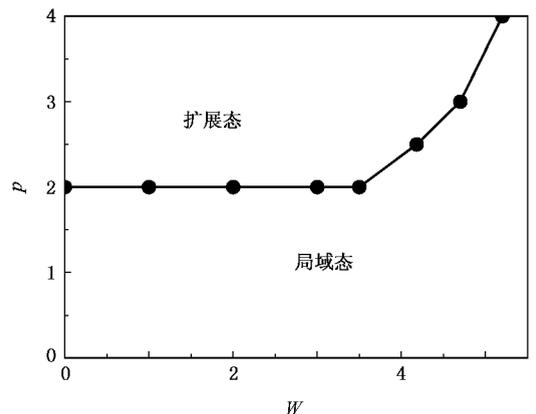


图6 在无序度 W 与关联指数 p 所形成的 $W-p$ 平面内系统中局域态与扩展态互相转变的相图

共同作用下,系统中发生局域化-退局域化转变时的临界状态点.从图 6 可以看到,当关联指数 p 大于临界关联指数 p_c ($p_c = 2.0$) 时,系统中出现了扩展态.在考虑到无序度 W 的影响后,我们发现较小的无序度不会对退局域化产生影响,系统仍处于退局域化状态,只有当无序度足够大即大于临界无序度 W_c ($W_c = 3.48$) 时,系统中才会发生无序度诱导的退局域化向局域化的转变.而且,随着关联指数 p 的增大,无序度临界值也相应地增大了.

5. 结 论

本文对系统中的格点能量序列进行了修正,引入了无序度这一参量,并利用重正化群方法对

Lyapunov 指数进行了计算.通过对结果进行分析之后,我们得到以下结论.

1) 无序度是研究一维长程关联无序系统中的电子态时必须考虑的一个重要参量,它在很大程度上影响着系统中局域化-退局域化的转变.当关联指数 p 一定而无序度 W 增大时,系统中心能区范围内由于长程关联而引起的扩展态逐渐向局域态转变,并且存在所有扩展态均转变为局域态的临界无序度 W_c . 同时当关联指数 p 增大时, W_c 也随之增大.

2) 足够大的关联强度能够使得一维长程关联无序系统中出现关联诱导的局域化向退局域化的转变,而足够大的无序度又能使得该系统中出现无序度诱导的退局域化向局域化的转变,这两种参量在系统局域化-退局域化转变中起着相反的作用.

- [1] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [2] Ashkenazy Y, Ivanov P C, Havlin S, Peng C K, Goldberger A L, Stanley H E 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1900
- [3] Stanley H E, Buldyrev S V, Goldberger A L, Havlin S, Peng C K, Simons M 1993 *Physica A* **200** 4
- [4] Sahimi M, Tajar S E 2005 *Phys. Rev. E* **71** 046301
- [5] de Moura F A B F, Lyra M L 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3735
- [6] Cheraghchi H, Fazeli S M 2006 *J. Stat. Mech.* P 11004
- [7] Zhang G P, Xiong S J 2002 *Eur. Phys. J. B* **29** 491
- [8] Carpena P, Bemaola-Galvan P, Ivanov P C, Stanley H E 2002 *Nature* **418** 955
- [9] Xiong S J, Zhang G P 2003 *Phys. Rev. B* **68** 17420
- [10] Kuhl U, Izrailev F M, Krokhin A A, Stöckmann H J 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 633
- [11] Bellani V, Diez E, Hey R, Toni L, Tarricone L, Parravicini G B, Domínguez-Adame F, Gómez-Alcalá R 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 2159
- [12] Xu H, Deng C S, Liu X L, Ma S S, Wu X Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1643 (in Chinese) [徐慧、邓超生、刘小良、马松山、伍晓赞 2007 物理学报 **56** 1643]
- [13] Liu W S, Chen T, Xiong S J 1999 *J. Phys.: Condens. Matter* **11** 6883
- [14] Lima R P A, Lyra M L, Nascimento E M, de Jesus A D 2002 *Phys. Rev. B* **65** 104416
- [15] Shima H, Nomura T, Nakayama T 2004 *Phys. Rev. B* **70** 075116
- [16] Kaya T 2007 *Eur. Phys. J. B* **55** 49
- [17] Farchioni R, Grosso G 1992 *Phys. Rev. B* **45** 6383
- [18] Liu X L, Xu H, Ma S S, Deng C S, Li M J 2007 *Physica B* **392** 107
- [19] Day R, Martino F 1981 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **29** 4247
- [20] Makse H A, Havlin S, Schwartz M, Stanley H E 1996 *Phys. Rev. E* **53** 5445
- [21] Xu H, Zeng H T 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 1666 (in Chinese) [徐慧、曾红涛 1992 物理学报 **41** 1666]
- [22] Liu X L, Xu H, Ma S S, Deng C S, Guo A M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5562 (in Chinese) [刘小良、徐慧、马松山、邓超生、郭爱敏 2006 物理学报 **55** 5562]
- [23] Xu H 1992 *Chin. J. Comp. Phys.* **9** 267 (in Chinese) [徐慧 1992 计算物理 **9** 267]
- [24] Liu X L, Xu H, Ma S S, Song Z Q, Deng C S 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2492 (in Chinese) [刘小良、徐慧、马松山、宋招权、邓超生 2006 物理学报 **55** 2492]
- [25] Liu X L, Xu H, Ma S S, Song Z Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2949 (in Chinese) [刘小良、徐慧、马松山、宋招权 2006 物理学报 **55** 2949]
- [26] Potempa H, Schweitzer L 2002 *Phys. Rev. B* **65** 201105

Effect of disorder degree on the localization-delocalization transition in one-dimensional disordered system with long-range correlations

Deng Chao-Sheng[†] Xu Hui Liu Xiao-Liang Wu Xiao-Zan

(*School of Physics Science and Technology, Central South University, Changsha 410083, China*)

(Received 17 July 2007; revised manuscript received 3 September 2007)

Abstract

In order to reveal the effect of disorder degree on the localization-delocalization transition in one-dimensional disordered system with long-range correlations, the long-range power-law correlated energy sequence was modified. By using the renormalization group method, the Lyapunov exponent characterizing the localization-delocalization transition was calculated. The results showed that, compared with the correlation exponent, the disorder degree plays an opposite role in this transition. When the correlation exponent was fixed but the disorder degree increased, the extended states, which appeared at the center of energy band due to the influence of long-range correlations, were gradually converted to localized states. When the disorder degree increased to a critical value W_c , the whole eigenstates of the system became localized states, and the critical value W_c increased with the increase of correlation exponent.

Keywords : long-range correlations, Lyapunov exponent, disorder degree, localization-delocalization transition

PACC : 7155J, 7130

[†] E-mail : csudeng@126.com