

一维非周期 Thue-Morse 链中电子的量子扩散

夏道澄^{1,2}, 童培庆¹

(1. 南京师范大学物理科学与技术学院, 南京 210097)

(2. 扬州教育学院物理系, 扬州 225002)

[摘要] 研究了一维紧束缚电子在 TM 势场中运动的量子扩散行为, 分析了体系能谱的特征, 数值计算了本征能量的 Thouless 指数, 自关联函数 $\langle \alpha(t) \rangle$ 及均方位移 $\langle \alpha^2(t) \rangle$. 发现体系中电子的本征态在 λ 较小时, 存在扩展态, 随着 λ 的增加, 体系中本征态出现局域态. 对体系的长期行为进行分析发现, 在初始阶段, 随着 λ 的变化, 体系中电子的扩散行为也不同. λ 较大时, 体系中的电子局域在一定范围内运动, $\langle \alpha(t) \rangle \sim t^0$, $\langle \alpha^2(t) \rangle \sim t^0$; 当 λ 较小时, 体系中电子的扩散速度各不相同. 一段时间后, 对应不同 λ 值, 体系的扩散速度相差不大, $\langle \alpha(t) \rangle \sim t^\beta$, $0 < \beta < 1$, $\langle \alpha^2(t) \rangle \sim t^{-\delta}$, $0 < \delta < 1$.

[关键词] 非周期系统, 扩展态, 局域态

[中图分类号] O413; [文献标识码] A; [文章编号] 1001-4616(2001)01-0055-04

0 引言

非周期体系中电子的动力学行为与本征态及能谱之间的关系近来引起了广泛的关注, 在介于随机的 Anderson 模型和周期的 Bloch 模型之间的非公度及准周期势场中运动的电子, 其本征态特征与哈密顿量参数的关系比较复杂, 电子本征态存在局域态、扩展态及临界态. 局域态是由于系统的非周期性, 而扩展态则取决于不同的准周期系统的结构的量子效应, 其扩展行为与能谱的关系也各不相同.

描述一维准周期势场中运动电子的紧束缚近似的薛定谔方程通常可表示为:

$$(E - V_n)\Psi_n = t(\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1}) \quad (1)$$

上式只考虑 n 格点最近邻的相互作用, 其中 V_n 为在位势, $V_n = \lambda V(n)$, t 为最近邻格点间跳跃势, 即邻近格点的相互作用势. 若相邻两电子间的平均距离与外势场的周期之比 σ 不是有理数, 则相应的状态是非公度的. 若势场 V_n 具有周期性, σ 为有理数, 该模型即为 Bloch 模型, 电子本征态波函数是布洛赫函数. 若势场 V_n 为随机值, 电子运动是局域化的, 即为 Anderson 模型.

一维非周期 Thue-Morse 模型是一类简单典型的离散势场^[1], 一条 TM 链可从两个字母 A 和 B 开始, 按照 $A \rightarrow AB$ 和 $B \rightarrow BA$ 的规则构成, 其中字母 A 和 B 代表 A 原子和 B 原子. 研究发现体系中电子的本征态在 λ 较小时, 存在扩展态; 随着 λ 的增加, 体系中本征态出现局域态^[2,3], 能谱为康托集. 对体系的长期行为进行分析发现, 在初始阶段, 随着 λ 的变化, 体系中电子的扩散行为也不同. λ 较大时, 体系中的电子局域在一定范围内运动; 当 λ 较小时, 体系中

收稿日期 2000-06-08

基金项目 江苏省自然科学基金资助项目(BK97105)

作者简介 夏道澄, 1963 —, 南京师范大学物理科学与技术学院硕士研究生, 主要从事凝聚态物理的学习与研究.

万方数据

电子的扩散速度各不相同.一段时间后,对应不同 λ 值,体系的扩散速度趋向一致,局域态首先出现在能带的边缘.

1 本征态和能谱

利用传输矩阵数值计算电子本征能量,方程(1)用矩阵方程(2)代替:

$$\begin{pmatrix} \Psi_{n+1} \\ \Psi_n \end{pmatrix} = T(n,E) \begin{pmatrix} \Psi_n \\ \Psi_{n-1} \end{pmatrix}$$

(2)

其中

$$T(n,E) = \begin{pmatrix} E - \lambda V(n) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(3)

传输矩阵的定义为^[4]

$$T_N(E) = \prod_{n=1}^N T(n,E)$$

(4)

图 1 为不同 λ 值的电子本征态的能谱.从图中可以看出,当 λ 较小时,能谱是连续的,随着 λ 的增大,能谱成为康托集,出现 6 个子能带,体系中存在局域态和扩展态.

为了研究本征态的性质,我们数值计算一维非周期 TM 模型中电子本征态的 Thouless 指数.本征能量 E_i 的 Thouless 指数 $\chi(E_i)$ 为局域化长度的倒数 $1/\xi$,定义为

$$\chi(E_i) = \int \ln |E_i - E_j| \rho(E_j) dE_j = \frac{1}{N} \sum_{j \neq i} \ln |E_i - E_j|$$

(5)

其中 $\rho(E)$ 为态密度.一个长为 N 的链中,若 Thouless 指数与 $1/N$ 为同一量级,则本征态为扩展态或临界态,否则本征态为局域态.

图 2 描绘了 $\lambda = 0.5, 1.0, 2.0, 3.0$ 的本征能量 E 的 Thouless 指数 γ . $\lambda = 0.5$ 时,体系存在扩展态,并在能带边缘出现局域态,存在迁移率边,随着 λ 的增大,体系中局域态和扩展态共存.

2 电子的动力学行为

为研究系统中电子的动力学行为,我们计算了初始局域化的电子波包在体系中随时间的演化及自关联函数.描述系统状态的含时薛定谔方程为:

$$i \frac{d\Psi_n}{dt} = \Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} + \lambda V(n) \Psi_n$$

(6)

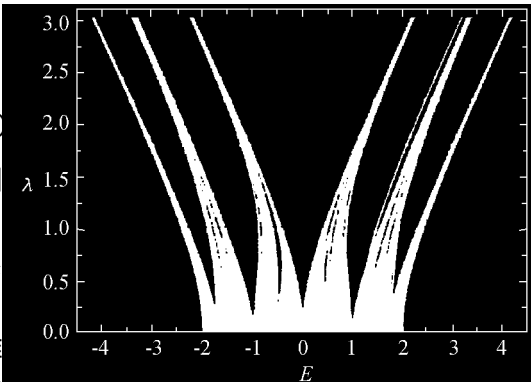


图 1 对应不同 λ 值的电子能谱

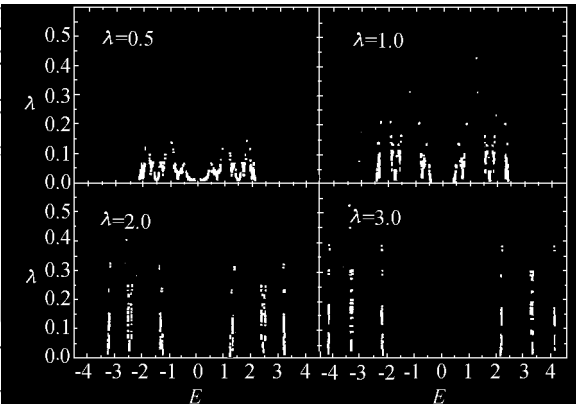


图 2 $\lambda = 0.5, 1.0, 2.0, 3.0$ 时本征能量的 Thouless 指数

假设波包的初始状态为处于系统中心($n = n_0$)的局域态,即初始条件为

$$|\Psi_n(t=0)| = \delta_{n, n_0} \quad (7)$$

用均方位移 $\sigma^2(t)$ 来描述电子波包的扩散行为^[5], $\sigma^2(t)$ 可由下式定义:

$$\sigma^2(t) = \sum_{n=1}^N (n - \bar{n})^2 |\Psi_n(t)|^2 \quad (8)$$

均方位移 $\sigma^2(t)$ 反映了波包扩散的宽度. 用四阶龙格-库塔法对薛定谔方程(6)进行数值积分得到态函数, 从而计算 σ^2 , 边界条件选为自由边界条件 $\Psi_0 = \Psi_{N+1} = 0$.

从图3中可以看出体系在初始时对应 λ 的取值不同, 波包的运动行为也不相同. 当 $\lambda = 3.0$ 时, 体系的初始阶段处于定域状态, 波包呈不规则的变化 $\sigma^2(t) \sim t^0$; $\lambda = 0.5$ 时, 波包的宽度随时间不断增加, 体系处于扩展态. 经过一段时间后, 对应 λ 的不同取值, 系统中都存在扩展态与局域态, 波包的扩散速度也趋于一致, $\ln(\sigma^2)$ 与 $\ln(t)$ 呈线性关系 $\sigma^2(t) \sim t^\beta$, $0 < \beta < 1$.

自关联函数 $\alpha(t)$ 定义为^[6]

$$\alpha(t) = \frac{1}{t} \int_0^t P(t') dt' \quad (9)$$

其中 $P(t) = |\Psi_{n_0}(t)|^2$, $\alpha(t)$ 反映 t 时刻, 在初始位置 n_0 处找到电子概率的时间平均.

图4给出对应于不同 λ 值的 $\alpha(t)$ 与 t 的双对数关系, 当 $\lambda = 3.0$ 时, 初始时刻体系的本征态主要为局域态, $\alpha(t) \sim t^0$, 一段时间以后, 具有指数衰减, 即 $\alpha(t) \sim t^{-\delta}$, $0 < \delta < 1$; 当 $\lambda = 0.5$ 时, 体系中局域态与扩展态共存, $\alpha(t) \sim t^{-\delta}$, $0 < \delta < 1$. 在经历一定的时间后, 不同 λ 的各体系中, 扩展态与局域态共存.

3 结论

本文研究了一维非周期 Thue-Morse 势场中电子运动的本征能谱及其动力学行为, 计算和分析结果表明: 体系在初始时对应 λ 的不同取值, 波包的运动行为也不相同, λ 较大时, 体系中的电子局域在一定范围内运动 $\sigma^2(t) \sim t^0$, $\alpha(t) \sim t^0$; 当 λ 较小时, 体系中电子的扩散速度各不相同. 经过一段时间后, 对应 λ 不同取值的系统中都存在扩展态与局域态, 波包的扩散速度也趋于一致 $\sigma^2(t) \sim t^\beta$, $0 < \beta < 1$, $\alpha(t) \sim t^{-\delta}$, $0 < \delta < 1$.

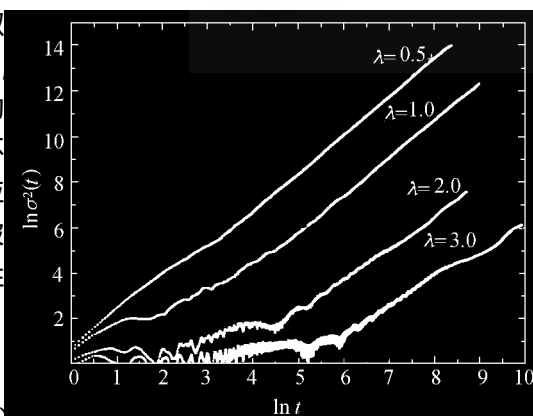


图3 均方位移 $\sigma^2(t)$ 与时间 t 的双对数关系

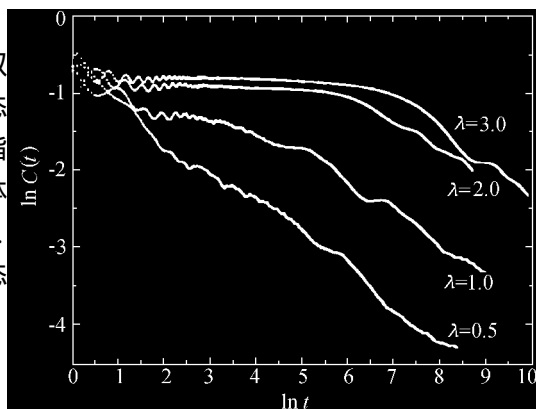


图4 自关联函数 $\alpha(t)$ 与时间 t 的双对数关系

[参考文献]

- [1] Arunava Chakrabarti ,Karmakar S N ,Moitra R K. Role of a New Type of Correlated Disorder in Extended Electronic States in the Thue-Morse Lattice[J]. Phys Rev Lett ,1995 ,74 :1403.
- [2] Arunava Chakrabarti ,Karmakar S N ,Moitra R K. Renormalization-group analysis of extended electronic states in one-dimensional quasiperiodic lattices[J]. Phys Rev B ,1994 ,50 :13276.
- [3] Das Sarma S ,Song He ,Xie X C. Mobility Edge in a Model One-Dimensional Potential[J]. Phys Rev Lett ,1988 ,61 :2144.
- [4] Hisashi Hiramoto ,Mahito Kohmoto. New Localization in a Quasiperiodic System[J]. Phys Rev Lett ,1989 ,62 :2714.
- [5] Ketzmerick R ,Petschel G ,Geisel T. Slow Decay of Temporal Correlations in Quantum Systems with Cantor Spectra [J]. Phys Rev Lett ,1992 ,69 :695.
- [6] Geisel T ,Ketzmerick R ,Petschel G. New Class of Level Statistics in Quantum Systems with Unbounded Diffusion[J]. Phys Rev Lett ,1991 ,66 :1651.
- [7] Casati G ,Chirikov B. Quantum Chaos :Between order & disorder[M]. London : Cambridge University Press ,1995. 633—659.
- [8] 顾雁. 量子混沌[M]. 上海 :上海科技教育出版社 ,1996. 96—112.

Quantum Diffusion of Electron in the Thue-Morse Lattice

Xia Daocheng^{1 2} ,Tong Peiqing¹

(1. College of Physical Science and Technology ,Nanjing Normal University ,Nanjing 210097 ,PRC)

(2. Department of Physics ,Yangzhou Educational Institute ,Yangzhou 225002 ,PRC)

Abstract The electronic energy spectra and dynamics of a one-dimensional aperiodic tight-binding system like the TM lattice have been studied. By numerical calculations and analyzing the results ,we find that the states in the system are localized at the initial time with a large value of λ , $\rho(t) \sim t^0$ and $\alpha(t) \sim t^0$. For the long-time behavior ,there exist extended states and localized states coexist in every systems with various value of λ , $\rho(t) \sim t^\beta$ $0 < \beta < 1$, $\alpha(t) \sim t^{-\delta}$ $0 < \delta < 1$,and localized states at the band edge and extended states in the middle of the bands.

Key words aperiodic system ;extended state ;localized state

[责任编辑 :丁蓉]