

学校代码 10530

学 号 2017215121268

分 类 号 O469

密 级 _____

湘潭大学

硕士学位论文

广义二维 Lieb 晶格的电子局域性质 研究

学 位 申 请 人 毛晓裕

指 导 教 师 钟建新 教授 R. A. Roemer 教授

学 院 名 称 物理与光电工程学院

学 科 专 业 物理学

研 究 方 向 低维凝聚态物理

二零二零年五月十日

Study on localization properties of generalized two-dimensional Lieb lattice

Candidate Xiaoyu Mao

Supervisor Professor Jianxin Zhong and Professor R.A.Roemer

College School of Physics and Optoelectronics

Program Physics

Specialization Low-dimensional Condensed Matter Physics

Degree Master of Science

University Xiangtan University

Date May 10, 2020

湘潭大学

学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的论文是本人在导师的指导下独立进行研究所取得的研究成果。除了文中特别加以标注引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写的成果作品。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律后果由本人承担。

作者签名：毛晓裕

日期：2020年6月10日

学位论文版权使用授权书


本学位论文作者完全了解学校有关保留、使用学位论文的规定，同意学校保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。本人授权湘潭大学可以将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编本学位论文。

涉密论文按学校规定处理。

作者签名：毛晓裕

日期：2020年6月10日

导师签名：



日期：2020年6月10日

摘 要

自 P. W. Anderson 于 1958 年提出电子的安德森局域这个概念之后, 人们就逐渐向无序系统电子局域化性质的研究投去了关注的目光, 无序电子系统的相关研究也逐渐成为了凝聚态物理的一个非常重要的主题。近年来, 平带 (即在整个 k 空间无色散的能带) 的研究掀起了人们的研究热潮, 一些晶格, 如: Kagome 晶格, Lieb 晶格等, 就具有这种平带特性, 而本文选择其中的 Lieb 晶格作为研究对象。Lieb 晶格目前已被证明在维格纳晶体、高温超导、光子波导阵列、玻色-爱因斯坦凝聚、光晶格中的超冷原子等中具有实验相关性。本文研究二维 Lieb 晶格及其扩展晶格中无序导致的电子局域化, 研究重点不仅仅是平带的局域特性, 也不仅只关注某一个晶体结构的输运性质, 更重要的是, 我们着重关注由于各种因素导致的无序, 在存在平带的情况下, 电子的局域化性质和有限尺寸标度行为是否会变化。

我们选取 Lieb 晶格和通过它构造出来的二维扩展 Lieb 晶格为对象, 通过使用转移矩阵方法和有限尺寸标度理论, 从理论层次上研究它们在加入无序后的电子局域化特性。我们发现, 在无序强度 $W \geq 1$ 时, Lieb 晶格及其扩展晶格中的所有态都被局域化, 这一结论符合标度理论对二维体系的预测。同时, 我们发现无序平带和无序色散带的局域性质存在明显差异。我们的结果对有序光子 Lieb 晶格系统的实验研究提供了补充, 并为之提供了 Lieb 晶格相对于无序的稳定性信息。

论文分为五个章节来对存在无序的二维 Lieb 晶格及其扩展晶格的电子局域化特性进行研究。首先, 我们对研究背景进行简要的介绍, 回顾平带的基本性质, 阐述我们的研究目的。其次, 我们通过紧束缚模型, 求解有序的二维 Lieb 模型和它的扩展模型的色散关系, 并与存在无序的系统进行对比分析。同时, 我们关注 Lieb 晶格及其扩展晶格的一些特殊性质, 主要是通过对系统哈密顿量进行直接对角化, 并结合数值方法, 对能态密度进行讨论。最后, 我们根据标准的安德森紧束缚哈密顿量, 推导出大尺度计算所需要的转移矩阵, 进而求解局域化长度, 再借助 Mathematica 科学计算软件, 结合有限尺寸标度理论的程序来研究 Lieb 晶格及其扩展晶格的局域性质。

关键词: Lieb 晶格; 有限尺寸标度理论; 转移矩阵方法; 平带

Abstract

Since P. W. Anderson proposed the concept of electronic Anderson localization in 1958, much attention has been paid to the study of localized electronic properties in disordered systems, and the disorder induced localization has gradually become a very important subject in condensed matter physics. In recent years, flat band (that is, an energy band with no dispersion in the entire k -space) has aroused a great interest in research, some lattices, such as Kagome lattice and Lieb lattice, have such flat band characteristics. This paper chooses the Lieb lattice as the research object. It has now been shown to be of experimental relevance in Wigner crystals, high-temperature superconductivity, photonic wave guide arrays, Bose-Einstein condensates, and ultra-cold atoms in optical lattices. In this paper, we study the electronic localization properties in Lieb lattice and extended Lieb lattices. Our focus is slightly different: instead of concentrating on the localization properties of the flat band states, In particular, we are interested in whether the presence of the flat band changes the localization properties and the finite-size scaling behaviour in disordered two-dimensional (2D) Lieb model and its extensions.

We study the localization properties of the 2D Lieb lattice and its extensions in the presence of disorder using transfer matrix method and finite-size scaling. We find that all states in the Lieb lattice and its extensions are localized for the disorder $W \geq 1$, which is in accordance with the prediction of scaling theory. Clear differences in the localization properties between disordered flat band and disordered dispersive bands are identified. Our results complement previous experimental studies of ordered photonic Lieb lattices and provide information about their stability with respect to disorder.

The thesis is divided into five chapters to study the localization properties of the disordered 2D Lieb lattice and its extended lattices. First, we give a brief introduction to the research background and review the basic properties of flat bands to understand our research purpose. Secondly, we use the tight-binding model to get the dispersion relationships between the ordered 2D Lieb lattice and its extended lattices, and make a comparative analysis with the disordered systems. At the same time, we pay attention to some special localization properties of the Lieb lattice and its extended lattices, mainly through direct diagonalization of the systems Hamiltonians, and other numerical methods to discuss the behaviors of density of states. Finally, we apply the standard Anderson tight-binding

Hamiltonian to derive the transfer matrix for calculating the localized length. With the help of Mathematica scientific calculation software and the program of finite size scaling theory, we study the localization properties of Lieb lattice and its extensions.

Key words: Lieb Lattice; Finite Size Scaling Theory; Transfer Matrix Method; Flat Band

目 录

第 1 章 绪论.....	1
1.1 引言	1
1.2 平带的介绍	1
1.3 Lieb 晶格的介绍	2
1.4 无序系统.....	2
1.4.1 无序系统简介.....	3
1.4.2 安德森局域.....	4
1.5 研究模型及其意义.....	5
第 2 章 基本理论与研究方法.....	7
2.1 安德森模型.....	7
2.2 转移矩阵方法	8
2.2.1 转移矩阵方法：以一维为例.....	10
2.2.2 李雅普诺夫指数 (Lyapunov exponent)	10
2.2.3 转移矩阵方法的数值不稳定性及其解决方法	11
2.3 单参数标度理论	11
第 3 章 无序对二维 Lieb 晶格性质影响的研究	14
3.1 引言	14
3.2 二维 Lieb 晶格的介绍.....	14
3.3 研究方法与过程	15
3.4 色散关系与存在无序时的态密度	16
3.5 局域化性质与有限尺寸标度理论.....	18
3.6 结论	20
第 4 章 无序对二维 Lieb 扩展晶格性质影响的研究	21
4.1 二维 Lieb 扩展晶格的介绍.....	21
4.2 研究方法与过程	21
4.3 色散关系与存在无序时的态密度	23
4.4 局域化性质与有限尺寸标度理论.....	27
4.5 结论	31
第 5 章 总结.....	33
5.1 结论	33
5.2 展望	33

参考文献.....	35
致 谢.....	40
个人简历、在学期间发表的学术论文与研究成果.....	41

第 1 章 绪论

1.1 引言

我们知道在实空间和动量空间中都能很好地对晶体系统进行量子描述^[1-2]。在完美晶格中,若我们使用动量空间进行描述会具有如下优点:晶格的所有空间信息都已经被封装在晶胞中,这样大大降低了描述这种材料的复杂性,为材料的性质研究提供了便利。晶格的性质在运用到动量空间对之进行表征时,由之产生的能带结构,它的数量、曲率、线性、填充形式和费米能级的行为都成为重要的描述因子,对确定所述系统的材料特性起着至关重要的作用。近年来,人们扩展了这种方法,用以描述能带的拓扑特性^[3-4],例如:用费米弧^[5-6]和 Weyl 点^[7]等概念来说明高度专业化的能带结构特征。

在类似的情况下,所谓的“平带”也受到了广泛的关注^[8]。之所以叫做“平带”,是因为它是在整个 k 空间中无色散的能带^[9-12]。这相当于在这些带中有效地拥有零动能,从而增强了哈密顿量中剩余的项,如势能项和相互作用项。通常而言,这种“平带”仅出现在具有特殊构造的晶格结构中,例如准一维晶格^[13-15],金刚石结构晶格^[16]和 Lieb 晶格^[17-22]。这种 Lieb 晶格最初是被用于模型研究中,以增强磁效应^[23],但现在已经证明平带与维格纳晶体^[12]、高温超导性^{[10][18]}、光子波导阵列^[24-27]、玻色-爱因斯坦凝聚^[28-29]、光学晶格中的超冷原子^[30]和电子系统^[31]等研究具有实验相关性。

我们知道,所谓的紧凑的局域态可由具有平带的晶格的本征态形成^[13],这是由于实际上为零的群速度,尽管它们在原理上是多重简并的,但它们仍旧不能参与运输^[16]。由于平带的存在依赖于特定的条件,对这些条件的轻微偏差,例如引入势能无序,原则上可以从根本上改变这些局域态的性质。事实上,先前的研究揭示了广泛的趋势,这些趋势取决于微扰的性质^[32-35]以及条带所处的环境条件^[36-39]。

在本文中,我们重点研究平带的存在是否会改变无序二维 Lieb 模型及其扩展模型中的电子局域化特性和有限大小标度行为。

1.2 平带的介绍

理解晶体中电子运动的一个核心要素是电子的能带结构,电子的能带理论为电子设备奠定了理论基础,导致了现代信息技术的诞生^[40]。一个所谓的平带,就是对应一个对波矢完全简并的能带结构,它意味着布洛赫电子具有无限大的有效质量,对应到实空间就是局域化的电子态,更直观地表述,平带就是在动量空

间中保持为零的能带。

1.3 Lieb 晶格的介绍

在固体物理的学习中,我们了解到影响晶体宏观特性的因素之一是晶体的内部组成形式,同一种原子排列成简单立方格子的形式或者是金刚石结构会具有完全不一样的物理性质。也就是说,一些特定几何形状的晶格会产生许多新颖的并且具有潜在应用价值的电子能带结构。如:蜂窝状的晶格会导致产生载流子表现为无质量狄拉克型能带结构^[41]。Lieb 晶格是三维钙钛矿的类似物^[42],我们可以从两个角度来理解其构成:其一,将它视为简单立方晶格在最近邻的两原子之间插入一个原子所构成的晶格结构;其二,视为简单立方晶格中每九个原子组成的正方格子挖掉中间的那个原子所形成的晶格结构。Lieb 晶格具有的特殊性质就在于它的能带结构:它是具有平带特性的格子,并且平带会被嵌入到狄拉克锥之间。如图 6 所示,其原胞包含三个格点(分别是格点 A, 格点 B 和格点 C),在这里的 B 和 C 位点(用红色的圆圈标志)只与其左右侧或者上下侧的两个位点相邻,而 A 位点(用蓝色的圆圈标志)能与其上下左右的四个位点相邻。Lieb 晶格的这种特殊的晶体构造引起了波的干涉,进而导致了平带中的局域态的出现。

1.4 无序系统

由固体制成的物品在生活中随处可见,理论固体物理学试图描述物质固态的所有方面,它涵盖了以下问题:为什么某些材料比其他材料坚硬,为什么存在绝缘体、导体、甚至超导体等等。关于实际应用,主要目标是探索使我们能够设计具有某些要求特性的材料。以前,大多数理论模型都假定平移不变性,这使得分析处理相对容易。这是对晶体材料的一个很好的近似,它使我们能够令人满意地描述它们的许多性能。但是,即使是半导体制备中最好的晶体也不是完美的,它们总是存在一些杂质,位错或空位等,这破坏了严格的平移对称性。即使这些似乎只是很小的修改,它们也可能对这些固体的性质产生很大影响。因此,经常需要在理论模型中引入“无序”,以便获得定性和定量的正确描述,这不仅对于描述或多或少存在缺陷的晶体材料非常重要,而且对于没有任何长程有序的非晶材料也更为重要。

在物理学中,“有序”和“无序”这两个术语分别表示在多粒子系统中存在或不存在某种对称性或相关性。在凝聚态物理中,系统通常在低温下有序,加热时,它们经历一次或几次相变,变成不太有序的状态。这种“有序-无序”转变的例子有:在居里温度以上加热使铁退磁的铁磁-顺磁转变(磁序丢失)。由此可以看出,

无序系统的定义是相对于有序系统而言的。

1958年, Anderson 在《物理评论》上发表了一篇题为“扩散在某些无规格子中的消失”的文章^[43], 这篇文章开创了物理学的一个新方向, 也使得人们对电子在无序体系中的行为特征有了初步了解。根据安德森的理论, 传导不能由局域态上的电子提供, 随系统无序强度的不断增加, 该系统中的电子态会逐渐局域化。这样, 改变系统的无序度可使系统由金属变为绝缘体。

总的来说, 无序系统可以视为原子的排布不再是完美周期的, 它整体上处于一个热力学的亚稳态, 同时, 从微观上看, 系统的结构不再具有长程有序性。

1.4.1 无序系统简介

有序周期系统的特征描述方式较为简单, 这是因为它的粒子具有长程有序的特性, 即拥有平移对称性, 但无序系统由于存在杂质、位错、空位和其他的缺陷, 无法继续沿用平移对称性的特征来进行分类。因此, 可引入一种新的方式——根据晶体结构被破坏的方式和被破坏的性质来定义无序的种类, 无序结构可分为置换无序、晶畴无序、取向无序、拓扑无序等。我们以有序的二维周期正方晶格为例, 来介绍几种典型的无序模型^[45], 如图 1 所示:

图 1(a)为有序二维周期晶格, 它由同种原子构成, 各原子的最近邻原子数是

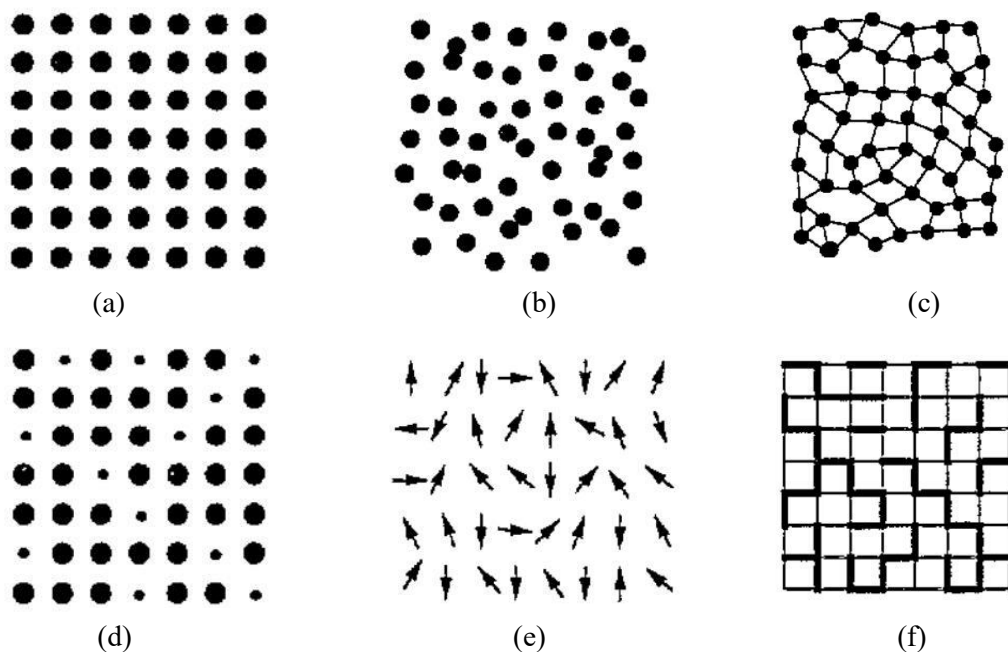


图 1 典型无序模型

一致的, 其几何配置也是相同的, 体系具有周期平移性。

图 1(b)为结构无序模型, 该模型中的原子种类相同, 但其位置是随机排列的。

图 1(c)为拓扑无序模型, 原子类型相同, 但各个原子的位置使得最近邻的数

目恒定时，该系统被称为拓扑无序。

图 1(d)为成份无序模型，原子在几何位置上的排列是有序的，但是有多种类型的原子无规则地排布在各个格点上。如图所示的为最简单的组成无序模型，两种不同类型的原子排列于理想有序晶格的位置。

图 1(e)为取向无序模型，如图所示为典型的取向无序模型，它是由一系列指向完全随机的自旋组成的集合。

图 1(f)为动能无序模型，如图所示为一个排列有规则的不同原子组成的晶格，但由于随机矢势而拥有两种不同类型的跳跃矩阵元，这是具有动能无序的系统的最简单例子。

1.4.2 安德森局域

在了解了具体存在哪些类型的无序系统之后，我们应当知道无序系统存在哪些具体的表现。在了解这些之前，我们先应当区分扩展态与局域态。

对于理想晶体而言，其势场具有周期性。按照能带理论，也就是所说的单电子近似理论，我们抛开电子之间的相互作用，将它们看作是近似独立的。在该基础上，电子的本征态是能够在系统中延展，它的本征态波函数是具有如下布洛赫函数形式：

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r}) \quad (1)$$

平面波（也就是 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ ）与晶格周期性函数（也就是 $u(\vec{r})$ ）的乘积构成了布洛赫函数，其中 \vec{k} 是共有化运动的波矢。理想晶体中电子成为共有化电子，即电子能够在整个晶体中运动，它出现在晶体各个原胞的概率是一样的，这种电子态称为扩展态（如图 2(a)中的红色曲线），扩展态的波函数分布在整个晶体之中。

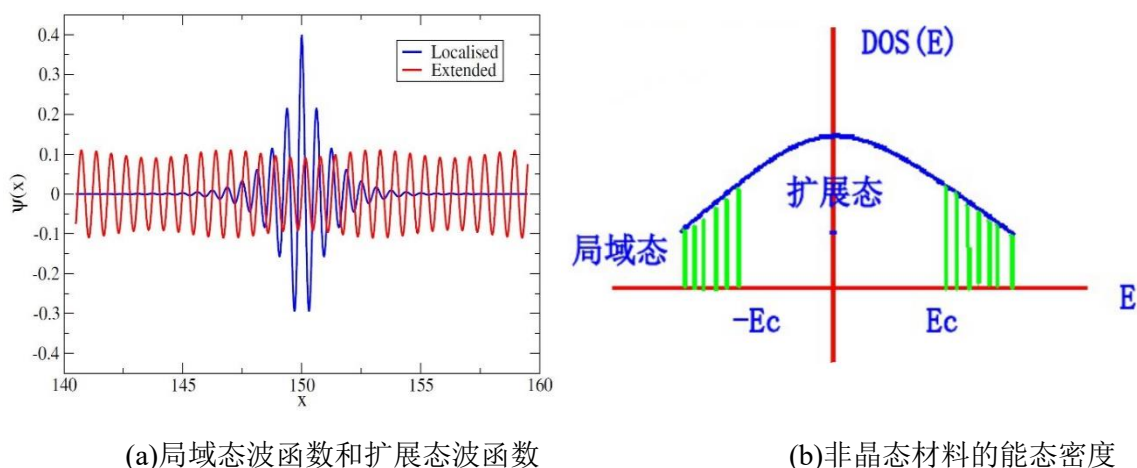
在无序程度足够强的无序系统中，由于随机的杂质或缺陷的存在，使得晶格的周期性被破坏，以至于系统不再具有长程有序性，此时系统的本征波函数不同于晶体中的本征波函数。无序系统中的本征波函数可由以下两部分组成：第一部分为扩展态波函数，它能延展在整个系统之中；另一种是局域态波函数，它不能在整个晶体中扩展，而只是局域在杂质缺陷的周围，并且局域态波函数的包络随着与中心距离的增大而衰减即电子在无序系统中特定位置的波函数将在远离该位置时呈指数形式衰减：

$$\psi(\vec{r}) = f(r)e^{-\frac{|\vec{r}|}{\lambda}} \quad (2)$$

其中， λ 为局域化长度，它描述了电子波函数的特征衰减长度， \vec{r} 是电子与特定位置的距离。它是由波函数的渐进行为定义的，是局域态（图 2(a)中蓝色曲线）扩展的一个常用度量。

由此，我们引出安德森局域。安德森局域指的是，电子在导体中传播会受到引入杂质的多重散射，进而发生干扰，当无序的强度达到某个临界值的时候，金属的导电性会随着系统中电子的运动停止而衰弱，进而，该无序系统中所有电子态都转变为局域态，即在无序介质中没有波的扩散^[43]，整体呈现出绝缘体的性质。安德森局域适用于可能存在无序的任何类型的波，例如：电磁波^[47-49]，水波^[50]，声波^[51-52]。它最初被提出是电子在无序半导体中，作为金属-绝缘体转变（MIT）的可能机制。

如图 2(b)所示,局域化在像带尾这样能态密度很小的能量范围内很强。无序很小的时候，在带的中心仍然存在扩展态。莫特提出迁移率边的概念^[53]，即在能量为 $-E_c$ 和 E_c 的位置存在两个迁移率边，用来分开带中的扩展态与带尾的局域态（阴影部分表示）。局域态区域会随着无序的增加而扩大，两个迁移率边彼此靠近，达到某个临界值而出现重叠。综上所述，我们就能知道，系统中的粒子的扩展程度可以体现在波函数的扩展程度中，而安德森局域的出现就能体现出无序系统的特征。



(a)局域态波函数和扩展态波函数

(b)非晶态材料的能态密度

图 2

1.5 研究模型及其意义

在本文中，我们的工作主要分为两个部分。

(1)我们首先从纯净的 Lieb 晶格出发，也就是理想的周期性 Lieb 晶格出发，探究它的色散关系。而实际生活中，完美的晶格会由于杂质或者缺陷的出现而表现出无序系统的特性，进而影响 Lieb 晶格的性质。本文从安德森模型出发，分别通过理论上进行推导和数值上进行模拟处理，来研究具有无序的 Lieb 晶格的局域化性质以及有限尺寸标度性质，分析系统的能态密度。

(2)同时，为了进行对比，本文中对 Lieb 晶格进行扩展，得到它的三个扩展

晶格，运用上述的处理方法对这些晶格进行研究。以此研究平带的存在对相邻色散能带在存在无序时的局域化性质的影响。

本文的主要研究内容，为之前关于纯净的不存在无序的光子 Lieb 晶格的实验研究提供了补充说明，同时也为该类研究提供了 Lieb 晶格对无序的存在具有很强的鲁棒性的信息。

第 2 章 基本理论与研究方法

2.1 安德森模型

描述无序固体中金属-绝缘体转变 (MIT) 的标准模型由安德森 (Anderson) 在 1958 年提出。安德森局域化模型描述了具有随机电势且没有任何热运动的晶格上电子的量子力学运动, 它是由无序驱动的金属-绝缘体转变的理想模型, 忽略了多体效应和相互作用, 它旨在使用高度简化的无序固体单电子图像, 为无序系统中更现实的输运理论奠定基础。在没有无序的晶体中, 即具有完美的平移对称性的晶体, 每个原子上的势能都是相同的, 电子的波函数是布洛赫波, 扩展到整个样品, 因此电子可以在系统中自由移动, 并可以通过它传输电荷或能量。安德森的工作表明, 对于足够强的无序, 波函数在空间中的特征会从扩展 (如布洛赫波) 变为局域。“局域化”意味着波函数振幅仅在系统的一小部分中才明显大于零, 导致局域化的机制是: 在不规则的势能上的量子相干背散射, 它引起波函数与其自身的相消干涉, 处于局域状态下的粒子的运动被限制在空间的一小部分。

对于晶体中的具有周期势场的原子, 由于原子逐渐靠近, 原子波函数发生交叠, 以至于形成图 3(a)中所示的能带^[54]。

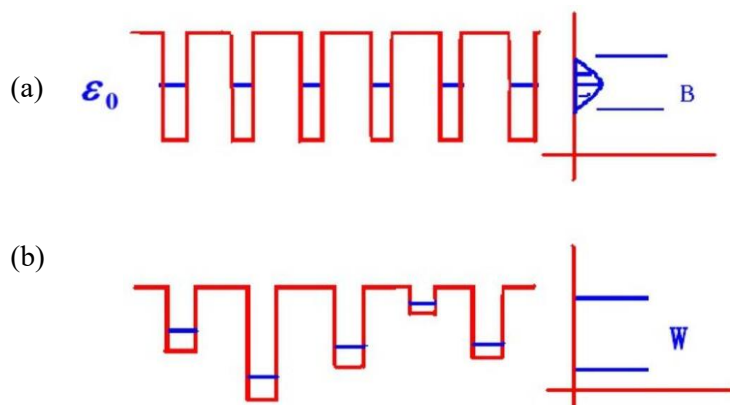


图 3 (a)每个原子只伴随有一个价电子(由一个方势阱表示), 在孤立原子的极限下, 处于原子势阱的束缚能级 ϵ_0 上, 束缚能级通过蓝色短线来表示。(b)原子位置被摆放在确定位置上, 一个位置跳跃到另一位置的束缚能级是无序的。

在图 3(b)中, 也就是安德森构建的无序模型, 由于在这个模型中不再具有晶体那样的长程有序性, 也不确定该系统中的电子会具有什么样的共同特征, 因此直接去求解单电子状态下的薛定谔方程是非常复杂和繁琐的, 所以常采用基于单电子紧束缚近似的处理方法。我们将每个格点赋予能量 ϵ_i , 将原子轨道波函数写为 $\varphi(\vec{r} - \vec{R}_i)$, \vec{R}_i 是格点 i 的格矢, 根据已知条件写出哈密顿量

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} V_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (3)$$

(i, j 为第一近邻)

对应于此哈密顿量的解是原子轨道波函数的线性组合

$$\psi(r) = \sum_i a_i \varphi(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad (4)$$

在上述单电子紧束缚的安德森模型中, 对角元 ε_i 的取值在 $-W/2$ 到 $W/2$ 之间变化, 这就是安德森模型中的无序部分, 其分布几率为:

$$\begin{cases} P(\varepsilon_i) = \frac{1}{W}, & -\frac{W}{2} \leq \varepsilon_i \leq \frac{W}{2} \\ P(\varepsilon_i) = 0, & |\varepsilon_i| > \frac{W}{2} \end{cases} \quad (5)$$

也就是说, W 的大小代表了对角无序的变化范围。设 V_{ij} 的变化范围是 $V - B/2$ 到 $V + B/2$, 其分布几率为:

$$\begin{cases} P(V_{ij}) = \frac{1}{B}, & V - \frac{B}{2} \leq V_{ij} \leq V + \frac{B}{2} \\ P(V_{ij}) = 0, & |V_{ij} - V| > \frac{B}{2} \end{cases} \quad (6)$$

上述就是本文主要使用到的理论基础, 即安德森模型^[60]。

非对角元 V_{ij} 也称为跳跃矩阵元, 表示不同的格点之间的相互影响, 只有当 i, j 为最近邻的时候才取值为常数 t , 其余的取值均为零。因此, 安德森模型实际上只考虑了对角无序的影响, 而忽略非对角无序。当系统无序强度 W 逐渐向零靠近时, 将 t 视为交叠积分, 系统又回到了最初的有序的理想晶体周期势场的情况, 进而形成能带, 带宽 $B = 2t$ 。安德森证明了在格点能 ε_i 的变化起伏达到足够大, 也就是无序度足够大的时候, 能带中只包含局域态, 这是因为在无序度足够强的时候, 相邻格点之间的 t 虽然是有限大小, 但是格点的电子态的势能差 $\varepsilon_i - \varepsilon_j$ 很大; 而相近能量的电子态之间又距离较远, 电子波函数几乎没有交叠, 所以无序较强的时候, 扩展态就无法出现。

2.2 转移矩阵方法

以一维晶体为例, 具有周期性的有序晶体来说, 由于每个格点的势能是相等的, 所以矩阵对角线上的基元是相等的。倘若只考虑最近邻近似, 则哈密顿矩阵

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \ddots & 0 & 0 \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & \ddots & 0 \\ \ddots & H_{32} & H_{33} & H_{34} & \ddots \\ 0 & \ddots & H_{43} & H_{44} & H_{45} \\ 0 & 0 & \ddots & H_{54} & H_{55} \end{bmatrix}$$

图 4 哈密顿矩阵

是三条带状系数矩阵。在非对角元的区域，矩阵的基元为零，如图 4 所示。

对于无序系统的情况，在紧束缚近似模型下，仍然将零级近似作为各个原子附近的束缚态，将其他原子的影响看成是微扰，只考虑最近邻近。那么在以为 $\{\varphi(\vec{r} - \vec{R}_m)\}$ 基的表象时，哈密顿矩阵也是带宽为 3 的带状矩阵，只是矩阵对角基元不再相等，非带区的基元也不再相等。其中，对角基元不相等的称为对角无序，非对角基元不相等的称为非对角无序。由于这些无序因素的出现，使得求解无序电子系统电子态的计算变得相当困难。

由此看出，安德森模型的内在随机性使解析求解处理变得极为困难，并且用这种方法，至少在一般情况下，似乎不可能确定波函数、局域化长度、电导率或临界指数等等。因此，数值求解方法对于安德森模型的特性研究起着重要作用，特别是在单参数标度理论的验证中。由于发散的关联长度不同，在接近临界点时，系统需要越来越大的尺寸。另一方面，可用的计算时间或主内存极大地限制了可处理系统的大小。通常，研究人员更偏向于从无限大的系统研究性质，这当然数值上是无法达到的。为了近似地表示无限大系统的性质或允许对其进行可靠的外推，系统的某个确定尺寸是必要的。但是，如果应用标准算法，这甚至可能超出当前计算机的能力。因此，有必要开发适合所考虑的矩阵 H 的特殊类型的数值方法，以达到合适的系统尺寸。可以利用的哈密顿矩阵 H 的典型特征是：对称性（对称的，埃尔米特式，辛矩阵），非零元素的特殊模式（带状矩阵）或大多数元素为零的事实（稀疏矩阵）。

因此，为了求解能反映无序系统的局域化性质的局域化长度，本文需要引进一种新的处理方式—转移矩阵方法（Transfer Matrix Method）^[55-56]。在转移矩阵方法中，长度为 L 宽度为 M 的准一维条带 ($L \gg M$) 被分割为大小为 M^{d-1} 的切片。递归地应用薛定谔方程，使得从第 $(n-1)$ 个切片和第 n 个切片的 ψ_{n-1} 和 ψ_n ，来计算第 $(n+1)$ 个切片处的波函数 ψ_{n+1} 。将薛定谔方程重新构造为转移矩阵 T_n ，并在每个切片上重复这些矩阵的乘法，即可得到“全局转移矩阵”，标记为 Γ_n ，该转移矩阵将波函数从条带的一侧映射到另一侧，局域化长度由矩阵的最小本征值决定。为了获得最小本征值并防止因本征值指数增长而引起的数值不稳定性，必须在每几次矩阵乘法之后对特征向量进行重新正交归一化，这需要花费大量时间。随着无序程度在完全扩展的二维和三维系统中减小，局域化长度变得非常大。转移矩阵方法的优点之一是，在模拟准一维系统时，该问题接近于真正的一维系统（即局域化长度比 L 小），并且所使用的矩阵仅是条带的横截面大小，比扩展的二维或三维系统的完整安德森哈密顿量小得多。本文探讨了 Lieb 晶格的两种边界条件，但主要是对硬边界条件进行研究。所谓的硬边界条件指的是，波函数在准一维条带的长边消失。而对于周期性边界条件，波函数不在长边的某一侧处消失，

而是取相对长边处波函数振幅的值作为相邻波函数振幅。

2.2.1 转移矩阵方法：以一维为例

以一维晶格为例，我们对本研究主要用到的转移矩阵方法进行简要的介绍。在一维晶格模型中，我们能得到单粒子薛定谔方程：

$$\psi_{n+1} = (E - V_i)\psi_n - \psi_{n-1} \quad (7)$$

我们将该方程式按照转移矩阵方法的思想，重新排列成矩阵形式，如下

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E - V_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (8)$$

转移矩阵 \mathbf{T}_n 在位置 $(n, n-1)$ 和 $(n+1, n)$ 之间传递波矢的振幅。通过这些转移矩阵逐个相乘，可以将波矢量从链的一端演化到另一端。

$$\begin{pmatrix} \psi_{L+1} \\ \psi_L \end{pmatrix} = \mathbf{T}_L \cdots \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix} = \mathbf{\Gamma}_L \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

由于 $\mathbf{\Gamma}_L = \prod_{n=1}^L \mathbf{T}_n$ 是一系列任意矩阵的乘积，Oseledec 定理已经证明了如下所示的极限矩阵，

$$\mathbf{\Gamma} = \lim_{L \rightarrow \infty} (\mathbf{\Gamma}_L^+ \mathbf{\Gamma}_L)^{\frac{1}{2L}} \quad (10)$$

引进对称矩阵的本征值 $\{e^{\gamma_i}\}$ 和正交归一化的本征矢 $\{u_i\}$ ，我们可以得到，

$$\lim_{L \rightarrow \infty} (u_i^+ \mathbf{\Gamma}_L^+ \mathbf{\Gamma}_L u_i)^{\frac{1}{2L}} = e^{\gamma_i} \quad (11)$$

或者是

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \|\mathbf{\Gamma}_L u_i\| = e^{\gamma_i L} \quad (12)$$

2.2.2 李雅普诺夫指数 (Lyapunov exponent)

Oseledec 定理告诉我们，由于 $\mathbf{\Gamma}_L$ 是辛矩阵，所以其本征值是成对出现的，假若存在一个正的值 γ_1 ，那么必定存在另外一个值 $\gamma_0 = -\gamma_1$ ， γ_0 和 γ_1 就是李雅普诺夫指数。当从系统的一端开始的时候，振幅可以表示成一个指数增长以及一个指数减小的函数的叠加。也就是说为正数的 γ 描述振幅沿着一维系统指数形式的增加，为负数的 γ 描述振幅以指数的形式减小。

我们定义局域化长度为系统最长的衰减长度，也就是最小的正的李雅普诺夫指数的倒数^[57]，用来描述对于一个给定能量和有序度的态所能扩展的最大距离，这也就是我们要解的局域化长度 λ 。所以局域化长度如下所示：

$$\lambda = \frac{1}{\gamma_{min}} \quad (13)$$

对(12)式等号左右支分别取对数，我们能够得到，

$$\gamma_i = \frac{1}{L} \lim_{L \rightarrow \infty} \ln \|\mathbf{\Gamma}_L u_i\|, \quad (14)$$

辛矩阵 $\mathbf{\Gamma}$ 的本征向量 u_i 也是 $\mathbf{\Gamma}_L$ 的本征向量，不过到目前为止还是未知的。我们可以用一个任意的起始的基矢 u_0 代替 u_i 来迭代(14)式。根据乘幂法，我们知道

u_0 的任意性导致了 γ_i 趋向最大的本征值 γ_{max} 。为了从最小的李雅普诺夫指数来获取局域化长度,我们从单位矩阵开始,这样可以获得所需要的本征值。但是由于辛矩阵 Γ_L 本征值的成对性质,固只要考虑该辛矩阵一半的本征值,便能获得整个系统的性质。

2.2.3 转移矩阵方法的数值不稳定性及其解决方法

以上,我们了解了转移矩阵的核心内容,介绍了如何从李雅普诺夫指数推导出系统的局域化长度。但在使用转移矩阵方法的过程中,由于需要对方程(12)的波矢量进行迭代处理,并且最开始时候的基矢是随意选取的,所以当系统长度很大的时候,我们根据乘幂法计算出来的辛矩阵的本征值会约等于最大本征值的 N 次方乘以最大本征值对应的本征矢。然而,我们求解局域化长度需要的是最小的本征值。由于每一次的矩阵迭乘将导致最大本征值的变大,那么进行多次迭乘以后,"最小本征值/最大本征值"的精度将超过我们现在普通计算机所拥有的最大精度,这将导致最小本征值的丢失。我们可以采取施密特正交化方法来保证我们可以获得所有的本征基矢,再通过归一化来保证数值的稳定。

在多次使用施密特正交化方法的过程中,将多个转移矩阵进行相乘,然后进行重新正交化处理,第一个本征矢量 u_1 将收敛到对应于最大李雅普诺夫指数 γ_{max} 的本征向量,第二个向量 u_2 收敛到第二个最大的李雅普诺夫指数的本征向量,最终是最后一个向量将接近最小的李雅普诺夫指数 γ_{min} 的本征矢,从而获得所有本征矢 $\{u_i\}$ 。由此看来,标准的正交归一化步骤的引入解决了由于在迭代过程中 $\|\Gamma_L u_i^0\|$ 的指数增长而导致发生的数值溢出问题。

2.3 单参数标度理论

基于 Thouless^[61]的思想,E. Abrahams 等人于 1979 年发展了一种用于无相互作用的电子系统,而且不存在磁场或自旋轨道耦合情况下的单参数标度理论^[62]。所谓的单参数标度理论指的是,仅存在一个特征量,即无量纲电导 g ,它控制着温度 $T = 0$ 时接近金属-绝缘体转变的临界行为。因此,当将尺寸大小为 L 的 d 维超立方体的大小更改为用标度因子 b 来表征时,进行尺度变换之后的立方体的电导率仅取决于 g 和 b ,而不分别取决于能量无序度或系统大小。无量纲电导 g 具有如下形式:

$$g(bL) = f(b, g(L)) \quad (15)$$

通过定义所谓的 β 函数:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (16)$$

可以定性地描述 g 的行为。在大电导 g 的极限下,应遵循欧姆定律,即 $g \propto L^{d-2}$,

因此 $\beta(g) = d - 2$ 。另一方面，在小电导的极限下，人们期望 $g \propto \exp(-L/\lambda)$ 和 $\beta(g) \propto \ln g$ 。进一步假设 β 是递增函数，并且保持连续单调，（如图 5 所示），可对 $d = 1, 2, 3$ （1 维，2 维，3 维）的行为进行描绘。当 $\beta < 0$ 时，电导随样本量的增加而减小，从而将系统推向局域状态； $\beta > 0$ 表示金属行为，即 g 随着 L 增大。

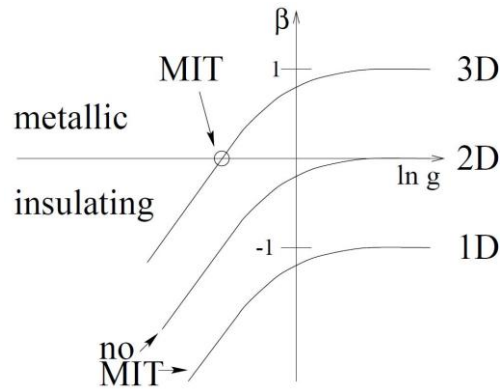


图 5 维度分别为 1, 2 和 3 的单参数标度理论的 β 函数

仅在三维中存在一个固定点 $\beta = 0$ ，在该位置电导与系统尺寸无关。该临界点将金属与绝缘区域分开，因此对应于金属-绝缘体转变。在一维和二维中， β 小于零，而 L 的增加总是导致 g 的减小。因此在热力学极限中，即对于无穷大的 L ，所有状态都被局域化，并且对于 $d < 2$ 没有金属-绝缘体转变。通过对维数 $2 < d < 3$ 的分形晶格使用安德森模型，可以从数字上证明确实 $d = 2$ 是较低的临界维度，超出该维度时，会导致无序驱动的金属-绝缘体转变^[63]。

根据重归化群的思想^[64]，我们可以从较小的子系统中拓展研究大系统的性质^[65]。我们定义无量纲的简约局域化长度 $\Lambda_M(E, W) = \lambda(E, W)/M$ 。为了从 $\Lambda_M(E, W)$ 中外推来获得无限大尺寸系统的局域化长度 ξ ^[68]，我们应用单参数标度理论假设，即

$$\Lambda_M(E, W) = f\left(\frac{\xi(E, W)}{M}\right) \quad (17)$$

作为一个数值过程，这意味着有限尺寸大小的 Λ_M 值可以按标度因子 ξ 缩放，以使所有值都坍缩到单个标度函数 f 上。我们使用最小二乘法^[69]，将参数 ξ 拟合为常数 W 的 E 函数，或更标准地拟合为常数 E 的 W 函数。然后通过以真正的局域化行为的形式拟合最大的无序度来确定 $\xi(E, W)$ ，即

$$\Lambda_M = \frac{\xi}{M} + b\left(\frac{\xi}{M}\right)^2 \quad (18)$$

我们强调，这种方法在数值上不使用泰勒展开法，也不假设任何幂律发散项，而这些项通常是研究三维安德森跃迁及其变体的标准^[70-71]。相反，由于在二维体系中没有金属-绝缘体转变，也就没有通用的函数形式来适应，因此我们必须回归到1999年以前安德森局域化的大多数研究中所做的最大化数据重叠的简单方

法^[71]。

第3章 无序对二维 Lieb 晶格性质影响的研究

3.1 引言

在物理学的研究中，晶体的组成方式和结构、外场的施加、无序的存在，还有各种粒子之间的相互作用等因素都有可能对晶体中的电子的动力学性质产生重要影响。同时，光波在具有周期性的光子晶格中进行传播时，可将其看作是电子波函数在周期势场中随着时间的演化过程^[73-77]。在这一类比关系的指导下，光波在具有周期性势场的光子晶格中的传播得到的光子带隙图，可以通过电子在周期势场中演化得到的能带结构（电子的色散关系）来进行相似处理。文献[78]中，作者通过 Lieb 晶格构造出 Lieb-5 和 Lieb-7 另外两种衍生晶格，并通过紧束缚方法来研究这两种衍生晶格的色散关系。但该文只对纯净的 Lieb-5 光子晶格和 Lieb-7 光子晶格的性质进行探究，本章则基于该文的工作，对有无序存在的标准二维 Lieb 晶格的局域化性质进行研究。

3.2 二维 Lieb 晶格的介绍

本论文的研究对象之一是二维的 Lieb 晶格，我们的出发点是基于紧束缚模型，求解它的能带结构，进而探究在存在无序的时候，会对原本具有平带性质的 Lieb 晶格产生怎样的影响。

标准的 Lieb 晶格是以正方格子为基础，在其水平方向和垂直方向上分别添

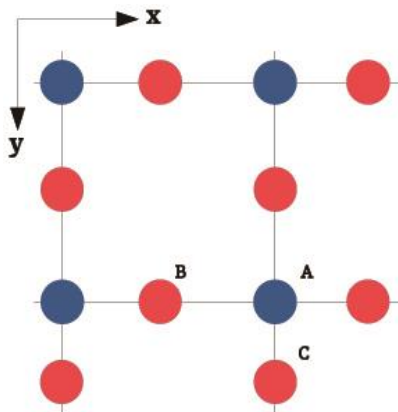


图 6 标准 Lieb 晶格 $\mathcal{L}(1)$ 的示意图。圆圈用来表示格点所在的位置，蓝色圆圈对应于简单正方晶格的原子所占据的位置，红色圆圈对应于在简单正方晶格各原子之间添加的格点位置。各个圆圈位点之间的黑色细线用来表示跳跃的关系，字母 A、B 和 C 是为了在使用转移矩阵方法时，用以说明不同种类的原子。

加一个额外的位点来放置一个原子。如图所示，我们用处于位置 A 的格点为起始位置，以处于位置 B 方向上的格点来表示添加的水平方向的格点，即 x 轴方

向；以处于位置 C 方向上的格点来表示添加的垂直方向（y 轴方向）的格点。我们使用形象的方式来描述 Lieb 晶格，记作 $\mathcal{L}(1)$ ， \mathcal{L} 作为 Lieb 的缩写，而数字 1 则表示在正方格子的两个 A 原子之间插入的原子个数，这里只有插入了一个原子，所以记为 $\mathcal{L}(1)$ 。

3.3 研究方法过程

对于标准二维 Lieb 晶格的局域化性质研究，本章主要用到的数值方法有：

(1) 对于尺寸相对较小的 Lieb 晶格组成的系统，我们对系统的哈密顿量进行直接对角化处理；(2) 对于较大的系统，使用转移矩阵方法^[79]。转移矩阵方法已经被广泛应用于处理各种无序系统的研究中^[80]，该方法是当前用于高精度地估计与参数有关的局域化长度的重要计算方法^[81]。

我们从标准的安德森紧束缚哈密顿量 H 开始，

$$H = \sum_{\vec{r}} \varepsilon_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| - \sum_{\langle \vec{r} \neq \vec{r}' \rangle} t_{\vec{r}, \vec{r}'} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}'| \quad (19)$$

在这里， $|\vec{r}\rangle$ 用来表示处于位置 $\vec{r} = (x, y)$ 位点的紧束缚态，而坐标 (x, y) 中的 x 和 y 分别用于表示在一个二维的平面中的精确位置信息，同时， $\langle \vec{r} \neq \vec{r}' \rangle$ 用来表示只存在最近邻的跳跃关系，正如图 6 所定义的那样。在安德森紧束缚哈密顿量 H 的第一项，即系统的势能项中， $\varepsilon_{\vec{r}}$ 是处于位点 \vec{r} 的位点势能，该势能随机地均匀分布在 $[-W/2, W/2]$ 区间内，由此可以用 W 来表征系统的无序强度。而在安德森紧束缚哈密顿量 H 的第二项，即系统的动能项中， $t_{\vec{r}, \vec{r}'}$ 表示一个粒子从位点 \vec{r} 跳跃到 \vec{r}' 的跳跃积分。本文仅考虑最近邻原子之间存在的跳跃，也就是说，在最近邻位点之间的跳跃，我们的跳跃积分的能量标度设为 $t_{\vec{r}, \vec{r}'} = t = 1$ ；在非最近邻位点之间的跳跃，设置跳跃积分的能量标度为 $t_{\vec{r}, \vec{r}'} = 0$ 。

针对本章的研究对象—— $\mathcal{L}(1)$ 晶格，为了从基于薛定谔方程 $H\Psi = E\Psi$ 推导出转移矩阵方法的波函数，来计算对应于该波函数的局域化长度 λ ，本文将 $\mathcal{L}(1)$ 晶格从另一个视角来处理。我们将该二维格子考虑为一个准一维的条带结构，该条带是由 A 原子和 B 原子组成的 M 条链，并且在垂直方向上，也就是图中的 (y) 方向上穿插着 M 个 C 原子；而在水平方向上，也就是图中的 (x) 方向上，也是我们进行转移矩阵操作的方向上，它所包含的 A 原子和 B 原子的数目会一直增加，直到收敛为止。将转移矩阵方法应用到 $\mathcal{L}(1)$ 晶格，我们可以得到在传输方向 (x) 方向上

$$\begin{pmatrix} \psi_{x+1,y}^B \\ \psi_{x,y}^A \end{pmatrix} = T_{A \rightarrow B} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^A \\ \psi_{x-1,y}^B \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \eta_1 \mathbf{1}_M - \frac{t_U}{\varepsilon_{x,y-1} - E} - \frac{t_U^T}{\varepsilon_{x,y+1} - E} & -\mathbf{1}_M \\ \mathbf{1}_M & \mathbf{0}_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^A \\ \psi_{x-1,y}^B \end{pmatrix} \quad (20)$$

其中,

$$\eta_1 = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_{x,y} - E}{t} - \frac{t}{\varepsilon_{x,y-1} - E} - \frac{t}{\varepsilon_{x,y+1} - E} \end{pmatrix} \quad (21)$$

这就是在传输方向(x)方向上,从格点 A 到格点 B 进行的转移矩阵方法,其中有一个 $M \times M$ 的矩阵,如下所示

$$t_U = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t & \cdots & 0 & 0 \\ & \vdots & & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & t \\ (t) & 0 & 0 & & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (22)$$

跳跃矩阵 t_U 代表着往在 (y) 方向的相邻的 C 格点跳跃关系,而矩阵中的 (t) 是用来表示在周期性边界条件的情况下,在 (y) 方向上可能的周期边界项,在本研究中,我们的转移矩阵方法主要使用的是硬边界条件,所以这一项通常为 0。我们可以注意到,在这种设置情况下,格点 C 已经有效地被重整化为有效的位点能量,并导致更改了垂直跳跃项,以至于转移矩阵的标准大小为 $2M \times 2M$, 其中的 $\mathbf{1}_M$ 和 $\mathbf{0}_M$ 分别表示大小为 $M \times M$ 的单位矩阵和零矩阵,而转移矩阵 $T_{A \rightarrow B}$ 递推出原子 A 和原子 B 之间转移波矢量的振幅。在理解了转移矩阵方法是如何作用时,我们可以同样的得到由格点 B 转移到格点 A 的转移矩阵方法,如下所示:

$$\begin{pmatrix} \psi_{x+1,y}^A \\ \psi_{x,y}^B \end{pmatrix} = T_{B \rightarrow A} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^B \\ \psi_{x-1,y}^A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\varepsilon_{x,y} - E}{t} \right) \mathbf{1}_M & -\mathbf{1}_M \\ \mathbf{1}_M & \mathbf{0}_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^B \\ \psi_{x-1,y}^A \end{pmatrix} \quad (23)$$

转移矩阵 $T_{B \rightarrow A}$ 递推出原子 A 和原子 B 之间传递波矢量的振幅。沿着转移矩阵传输的方向,也就是 (x) 轴方向,我们将这些转移矩阵依次乘起来,然后将这 M 个 Ψ 态重新正交归一化。所谓的重新正交归一化,实际上就是转移矩阵在至少每十次相乘之后,转移矩阵的列就会计算出李雅普诺夫指数 γ_i , i 从 1 取到矩阵宽度 M , 并使用施密特正交化方法并正交化处理,进而实现重新正交归一化。同时,在传输过程中我们研究它们的累积的方差的变化,直到最小的李雅普诺夫指数 γ_{min} 达到了期望的精度^[56-59] (通常我们设置精度为 0.1%), 然后中止我们的转移矩阵方法操作。在第二章中,我们可以知道局域化长度等于我们最小李雅普诺夫指数的倒数,即: $\lambda(M, W, E) = 1/\gamma_{min}$, 其中 W 为系统给定的无序强度, E 为系统给定的能量。

3.4 色散关系与存在无序时的态密度

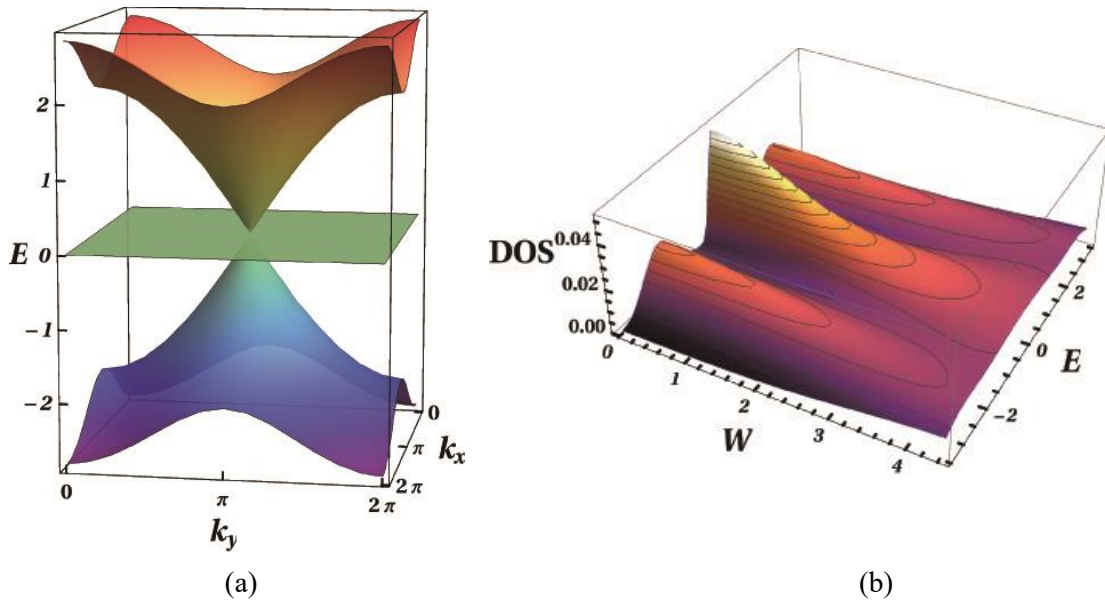


图 7 (a)为 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的能带结构，图中的颜色用于区分不同能量下的状态，从低能量下的紫色逐渐变化到高能量下的红色。(b)为经过 $Mathematica$ 平滑处理的并且归一化的 $\mathcal{L}(1)$ 晶格在不同无序强度和不同系统能量下的的能态密度（简称为 DOS 图），选取的系统宽度为 $M = 13$ ，图中的颜色用来表示能态密度的数值大小，颜色越深表示数值越小，颜色越浅表示数值越大，而图中的细线是用来表示能态密度的等值线。

为了了解无序对 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的具体影响，本文将纯净的 $\mathcal{L}(1)$ 晶格和存在无序的 $\mathcal{L}(1)$ 晶格进行对比分析。我们将先分析不存在无序的标准的 $\mathcal{L}(1)$ 晶格。在纯净的 $\mathcal{L}(1)$ 晶格中，我们能从标准的安德森模型的紧束缚哈密顿量 H 推导出该晶格的色散关系，如下所示：

$$\begin{aligned}
 E_1 &= 0, \\
 E_2 &= \sqrt{4 + 2(\cos k_x + \cos k_y)}, \\
 E_3 &= -\sqrt{4 + 2(\cos k_x + \cos k_y)}
 \end{aligned} \tag{24}$$

在这里，我们设置格点之间的单位长度为1，并且这里的 k_x 和 k_y 分别是波矢投影到 x 轴和 y 轴上得到的。在图 7(a)中展示了 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的能带结构，我们可以清晰地看到，在系统能量 E 等于0的时候有一个平带的存在，同时，在 M 点，也就是波矢量 $(k_x, k_y) = (\pi, \pi)$ 的位置附近，存在狄拉克锥。

接着，我们研究存在无序的系统，即无序强度 $W > 0$ 时的情况。显而易见， k_x 和 k_y 不再是描述系统性质的好量子数，并且加入无序后的色散关系也就失去了它们的意义。然而，像之前讨论过的那样，与零动能对应的平带将由哈密顿量中的剩余项主导，也就是随机的无序项。因此，已经即使很小的无序 W 值也可以迅速破坏平带的简并度，并且态可以开始与原始分散的相邻色散带中的态重叠。

那么,为了研究存在无序的情况下平带与色散带的相互作用,我们选取较小系统尺寸 $M^2=13^2$,通过精确的直接对角化方式求解系统的能态密度(DOS)。在我们的 $Mathematica$ 代码中,我们经过300多个样本的反复试验,最终进行平均处理后得到了能态密度。具体的态密度图如图7(b)所示,可以很清晰地看出,该态密度图中出现了三个峰。该图表明在所有情况下,平带的简并度都非常迅速地消失,并且最初的简并态迅速移入由色散带占据的能量区域。同样地,但不太明显的是,色散带的平坦区域随着无序强度 W 的增大而消失。总的来说,当无序强度 W 达到2至3的时候,即与 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的最大子带的带宽相当时,态密度的峰值特征消失。

3.5 局域化性质与有限尺寸标度理论

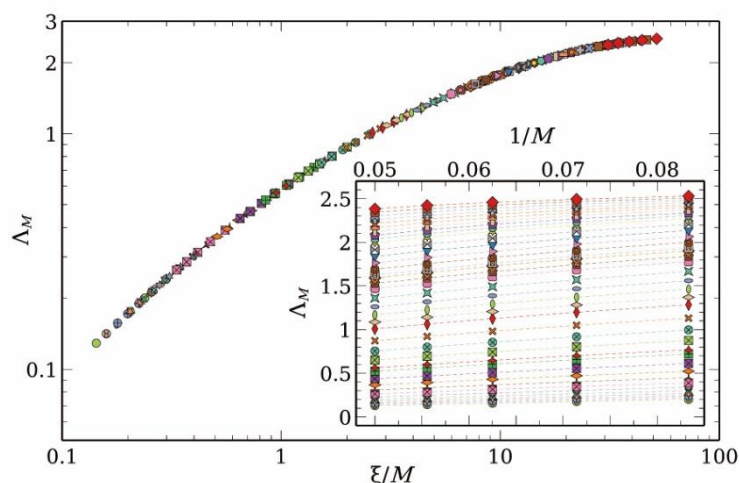


图8 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的按比例缩小的简约局域化长度 Λ_M 作为 ξ/M 的函数的双对数图。图中对应的无序强度分别为1.0(以图标菱形标示), 1.01, ..., 1.05(以图标正方形标示), ..., 2.0, 2.1, 2.2, 2.4, 2.6, ..., 10.0(以图标圆形标示), 分别用不同的颜色来加以区分。由于计算的数据过多,为了更加清晰地展示,我们将某些数据点未使用图形符号展示出来,但这不影响对整体趋势的判断。误差范围在符号大小范围之内。右下角的插图: $\mathcal{L}(1)$ 晶格的简约局域化长度 Λ_M 作为 $1/M$ 的函数,其中对不同无序强度的标示符号和颜色均与主图中的一致,虚线只是给视觉上的向导。

为了研究系统的局域化性质,我们定义简约局域化长度为 $\Lambda_M = \lambda(M, W, E)/M$,它是一个无量纲的量,其中 M 为系统的宽度, W 为系统给定的无序强度, E 为系统给定的能量。在图8中,我们给出了 $\mathcal{L}(1)$ 晶格在系统能量 $E = 0$ 时,由转移矩阵方法计算出的简约局域化长度 Λ_M 。图中展示的数据所用到的系统尺寸分别为 $M = 10, 12, \dots, 20$,我们设置的精度为0.1%,这也就导致对于每一对 (W, E) 情况下,大约需要进行 10^8 次转移矩阵的乘法。之所以在这里选择研究的是系统能量 $E = 0$ 的情况,是因为它对应于 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的平带所在位置。因此,在系统能量 $E = 0$ 的情况下,便于让我们直接研究无序对原始的平带和原始的色散带的影响。我们发现,在所有的情况下,随着系统宽度 M 的增加,对于所有的无序强度,简约

局域化长度 Λ_M 的值会随之减小，如图 8 的插图所示。这种行为是我们根据标度理论对二维体系局域态所预期的行为，也就是在标度理论的预测中，若外界是零磁场且没有自旋轨道耦合的情况下，二维晶格只要存在无序就只会有局域态。在这种局域的状态下，对于足够大的无序强度和系统尺寸，简约局域化长度 Λ_M 会逐渐饱和，从而会导致简约局域化长度 Λ_M 随着系统尺寸 M 的增大而逐渐减小。事实上，在图 8 的主图中我们可以发现所有的 $\Lambda_M(0, W)$ 数据可以按比例缩放在一根标度曲线上。这条曲线因为随着系统尺寸 M 的增大而减小，因此，这也显示了很强的局域化特征。此外，对于局域化长度 λ_M 远小于系统尺寸 M 时（ $\lambda_M \ll M$ ，即 $\Lambda_M \ll 1$ ），我们可以发现正如预期的那样，简约局域化长度 Λ_M 正比于 $1/M$ ，在 $\lambda_M \sim \lambda_\infty$ 强局域的状态下。

在图 9 中，我们展示了标度参量 $\xi(0, W)$ 对无序强度 W 的依赖性。根据

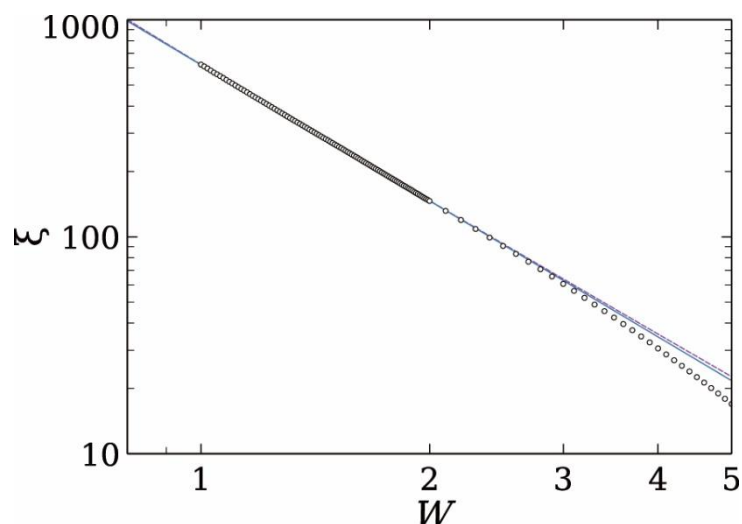


图 9 由标度理论所计算出的 $\mathcal{L}(1)$ 晶格标度参数 $\xi(0, W)$ 展示在图中空心圆点所构成的曲线，其余的线为标度参数的拟合函数曲线，分别用蓝色和紫色的实线和虚线所表示。其中，蓝色的实线对应的是形式为 $aW^{-\alpha}$ 的拟合函数，而紫色的虚线对应的是形式为 $aW^{-2}e^{\beta W^{-1}}$ 的拟合函数，参数 a ， α 和 β 的选择如表格 1 中所示。

Thouless 的研究^{[69][83]}，我们期待对于严格一维的只存在弱无序的链，其标度参量与无序强度的关系为 $\xi(W) \propto W^{-2}$ ；而对于二维的安德森模型而言，具有弱无序强度的行为遵循的是非通用的关系形式 $\xi(W) \propto aW^{-\alpha} \exp(\beta W^{-\gamma})$ ，这里 a 和 β 为正数，而 α 和 γ 为与数字 1 差不多大小的数。 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的这些拟合曲线展示在图 9 中，其中，标度参量 $\xi(0, W)$ 的最大值约为 1000，拟合曲线所对应的拟合参数均见表格 1。无序强度为 $1 \leq W \leq 2$ 时，计算数据可以很好地用简单的幂律关系 $\xi(W) \propto W^{-2}$ 进行拟合；但是，在无序强度 $W > 2$ 时，简单幂律拟合不再奏效，而由表中所给参数的两种拟合函数都处于计算出的标度参量值的上方，也不是好的拟合。人们可能会猜测，这种与一维拟合结果的明显一致性可能表明在空间中的

局域本身是沿着一维结构进行的，但是，这显然超出了转移矩阵方法能够可靠地推断的范围。我们还能观察到，拟合参数与一维系统的局域化参数 $\alpha = 2$ 的一致性并不完美；另外，对于一维系统而言， a 值在系统能量 $E = 0$ 时应为 $105^{[84]}$ ，而对于宽度为 M 的准一维条带， a 的值应当为 $12M^{[85]}$ 。很显然，从表 I 给出的拟合参数来看，这些值都不能完全符合以上数值。当然，缺少对较小无序强度 W 下标度参量 ξ 的行为的简单拟合不需要觉得奇怪，这只是简单地表明，存在无序强度的 Lieb 模型确实具有不同于标准二维安德森模型的局域行为。

Fit function	parameter	estimates	p-value
$aW^{-\alpha}$	a	619.1(2)	$< 10^{-10}$
	α	2.0816(7)	$< 10^{-10}$
$aW^{-2}e^{\beta W^{-1}}$	a	553(1)	$< 10^{-10}$
	β	0.117(2)	$< 10^{-10}$

表格 1 $\mathcal{L}(1)$ 晶格 $\xi(W)$ 的拟合函数，其中拟合参数 a ， α 和 β 由 Levenberg-Marquardt 的非线性拟合程序获得。

3.6 结论

在本章中，我们主要利用转移矩阵方法和有限尺寸标度理论来研究无序对 Lieb 晶格 $\mathcal{L}(1)$ 的局域化性质的影响，并借助 $Mathematica$ 科学计算软件对标度参数进行数据拟合。结果表明，存在无序的二维 Lieb 晶格的电子态都是局域的，并且存在无序时，平带的简并度都非常迅速地消失，并且最初的简并态迅速移入由色散带占据的能量区域；而色散带在无序强度 W 达到2至3的时候，即与 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的最大子带的带宽相当时，态密度的峰值特征消失。

第 4 章 无序对二维 Lieb 扩展晶格性质影响的研究

4.1 二维 Lieb 扩展晶格的介绍

从上述研究中，我们了解了无序对标准二维 Lieb 晶格的电子局域化性质的影响，本章作为对比分析，对扩展 Lieb 晶格的电子局域化性质进行研究。

在第 3.2 节我们有了解到标准的二维 Lieb 晶格是如何构造的，它基于正方格子，在其 x 轴和 y 轴上分别只添加一个额外的位点来放置一个原子。而在文章《新型的具有平带的边心立方光子晶格》^[78] 中，我们了解到作者已经提出了在标准的正方格子的 x 轴和 y 轴上分别具有额外添加位点的扩展 Lieb 晶格。在本文中，我们将所有的这些扩展衍生出来的晶格形象地表示为 $\mathcal{L}(n)$ ，其中， \mathcal{L} 作为 Lieb 的缩写，变量 n 表示在水平和垂直方向上增加的位点的数量。如果在水平方向和垂直方向分别增加了两个原子，记为 $\mathcal{L}(2)$ ，如图 10 所示；若在两轴上分别增加了三个原子，记为 $\mathcal{L}(3)$ ，如图 11(a)所示；若在两轴上分别增加了四个原子，记为 $\mathcal{L}(4)$ ，如图 11(b)所示。

4.2 研究方法过程

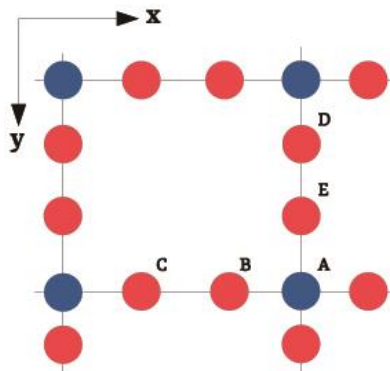


图 10 $\mathcal{L}(2)$ Lieb 晶格的示意图。圆圈用来表示格点存在的位置，蓝色圆圈对应于简单正方晶格的原子所占据的位置，红色圆圈对应于在简单正方晶格各原子之间添加的格点位置。各个圆圈位点之间的黑色细线用来表示跳跃的关系，而字母 A,B,C,D 和 E 是为了在使用转移矩阵方法时用来区分不同种类的原子。

对于扩展的二维 Lieb 晶格的局域化性质研究，本文采取与标准二维 Lieb 晶格同样的研究方法。对于尺寸相对较小的扩展二维 Lieb 晶格体系，我们对其哈密顿量进行直接对角化处理；而对于尺寸相对较大的系统则使用转移矩阵方法来处理。

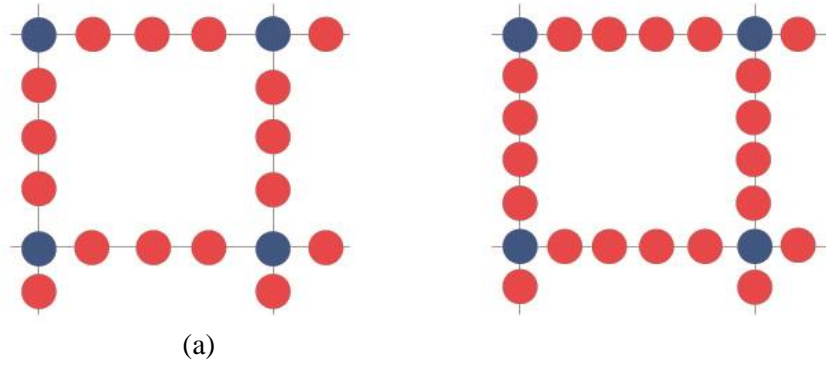


图 11 $\mathcal{L}(3)$ Lieb 晶格 (a) 和 $\mathcal{L}(4)$ Lieb 晶格 (b) 的示意图。圆圈用来表示格点存在的位置, 蓝色圆圈对应于简单正方晶格的原子所占据的位置, 红色圆圈对应于在简单正方晶格各原子之间添加的格点位置。各个圆圈位点之间的黑色细线用来表示跳跃的关系。

首先, 对扩展的 $\mathcal{L}(2)$ 晶格使用转移矩阵方法进行研究。在本文中, 为了便于转移矩阵方法的进行, 我们将该 $\mathcal{L}(2)$ 晶格也考虑为准一维的条带结构, 该条带是由 A 原子、B 原子和 C 原子组成的 M 条链, 并且在垂直方向上, 也就是图中的 (y) 方向上会穿插着 M 个 D 原子和 E 原子; 而在水平方向上, 也就是图中的 (x) 方向上, 也是我们进行转移矩阵传输的方向上, 它所包含的 A 原子, B 原子和 C 原子的数目会一直增加, 直到收敛为止。那么, 从 (x) 方向的第一个位点开始, 在传输方向 (x) 方向上, 我们可以类似地得到相应的转移矩阵方法的递推公式。如下所示是从格点 A 到格点 C 的递推公式:

$$\begin{pmatrix} \psi_{x+1,y}^C \\ \psi_{x,y}^A \end{pmatrix} = T_{A \rightarrow C} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^A \\ \psi_{x-1,y}^B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_2 \mathbf{1}_M - \tau_1 \mathbf{t}_U - \tau_2 \mathbf{t}_U^T & -\mathbf{1}_M \\ \mathbf{1}_M & \mathbf{0}_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^A \\ \psi_{x-1,y}^B \end{pmatrix} \quad (25)$$

其中,

$$\eta_2 = \frac{\varepsilon_{x,y} - E}{t} - \frac{t(\varepsilon_{x,y-2} - E)}{(\varepsilon_{x,y-2} - E)(\varepsilon_{x,y-1} - E) - t^2} - \frac{t(\varepsilon_{x,y+2} - E)}{(\varepsilon_{x,y+2} - E)(\varepsilon_{x,y+1} - E) - t^2} \quad (26)$$

$$\tau_1 = \frac{t}{(\varepsilon_{x,y-2} - E)(\varepsilon_{x,y-1} - E) - t^2} \quad (27)$$

$$\tau_2 = \frac{t}{(\varepsilon_{x,y+2} - E)(\varepsilon_{x,y+1} - E) - t^2} \quad (28)$$

同样, 我们可以得到从格点 A 到格点 C 的递推公式:

$$\begin{pmatrix} \psi_{x+1,y}^B \\ \psi_{x,y}^C \end{pmatrix} = T_{C \rightarrow B} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^C \\ \psi_{x-1,y}^A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\varepsilon_{x,y} - E}{t}\right) \mathbf{1}_M & -\mathbf{1}_M \\ \mathbf{1}_M & \mathbf{0}_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^C \\ \psi_{x-1,y}^A \end{pmatrix} \quad (29)$$

要对 $\mathcal{L}(2)$ 晶格实现完整的转移矩阵方法, 我们还需要知道从格点 B 到格点 A

的递推公式，如下所示：

$$\begin{pmatrix} \psi_{x+1,y}^A \\ \psi_{x,y}^B \end{pmatrix} = T_{B \rightarrow A} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^B \\ \psi_{x-1,y}^C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\varepsilon_{x,y} - E}{t}\right) \mathbf{1}_M & -\mathbf{1}_M \\ \mathbf{1}_M & \mathbf{0}_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^B \\ \psi_{x-1,y}^C \end{pmatrix} \quad (30)$$

和对 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的分析一样，对于 $\mathcal{L}(2)$ 晶格，在该晶格的垂直方向，格点 A 的位点能重整化和格点 A 之间的跳跃重整化已经包含了垂直方向的跳跃，尽管在结构上比 $\mathcal{L}(1)$ 显得更加复杂。在介绍了 $\mathcal{L}(1)$ 晶格和 $\mathcal{L}(2)$ 晶格的转移矩阵方法之后，按照类似的步骤，构造 $\mathcal{L}(3)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格的转移矩阵并不困难，在这里我们不再复述这些步骤。

4.3 色散关系与存在无序时的态密度

为了探究无序对 $\mathcal{L}(2)$ 晶格的具体影响，我们首先将纯净的 $\mathcal{L}(2)$ 晶格和存在无序的 $\mathcal{L}(2)$ 晶格进行对比分析。在纯净的 $\mathcal{L}(2)$ 晶格中，我们也能从标准的安德森模型的紧束缚哈密顿量 H 推导出该晶格的色散关系，如下所示：

$$\begin{aligned} E_{1,2} &= \pm 1, \\ E_3 &= \rho_+ + \rho_-, \\ E_4 &= \omega \rho_+ + \omega^2 \rho_-, \\ E_5 &= \omega \rho_- + \omega^2 \rho_+, \end{aligned} \quad (31)$$

其中 $\omega = \frac{-1+\sqrt{3}i}{2}$ ， $\rho_{\pm} = \sqrt[3]{q \pm \sqrt{q^2 - \left(\frac{5}{3}\right)^3}}$ ， $q = \cos k_x + \cos k_y$ 。

与上一章相似的处理方法，在这里，我们设置格点之间的单位长度为1，并且这里的 k_x 和 k_y 分别是波矢投影到 x 轴和 y 轴上得到的。在图 12(a)中展示了 $\mathcal{L}(2)$ 晶格的能带结构，我们可以看到， $\mathcal{L}(2)$ 晶格与 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的能带结构具有不一样的特征， $\mathcal{L}(2)$ 晶格在系统能量 E 等于0的时候并没有一个平带的存在，而是在系统能量 E 分别为 ± 1 的时候才出现两个平带，这两个平带关于能量等于0的平面对称，并且这两个平带被3个色散带给分开。

接着，我们分析无序的 $\mathcal{L}(2)$ 晶格系统，也就是，无序度 $W > 0$ 时的情况。显然， k_x 和 k_y 不再是描述系统性质的好量子数，并且加入无序后的色散关系也失去了它们的意义。然而，像之前讨论过的那样，与零动能对应的平带将由哈密顿量中的剩余项主导，也就是随机的无序项。因此，已经即使很小的无序 W 值也可以迅速破坏平带的简并度，并且态可以开始与原始分散的相邻色散带中的态重叠。那么，我们选取较小系统尺寸 $M^2=10^2$ ，通过精确的直接对角化方式求解系统的能态密度（DOS）。在我们的 $Mathematica$ 代码中，我们经过 300 多个样本的反复试验，最终进行平均处理后得到了能态密度。具体的态密度图如图 12(b)所示，可以很清晰地看出，该态密度图中出现了四个峰。与 $\mathcal{L}(1)$ 晶格类似，这说明在所有情况下，平带的简并度都非常迅速地消失，并且最初的简并态迅速移入由色散带占据的能量区域。同样地，但不太明显的是，色散带的平坦区域随着无序强度 W 的增大而消失。总的来说，当无序强度 W 达到2至3的时候，与 $\mathcal{L}(2)$ 晶格的最大子带的带宽相当时，态密度的峰值特征消失。

同样的，在纯净的 $\mathcal{L}(3)$ 晶格中，我们借助 $Mathematica$ ，也能从标准的安德

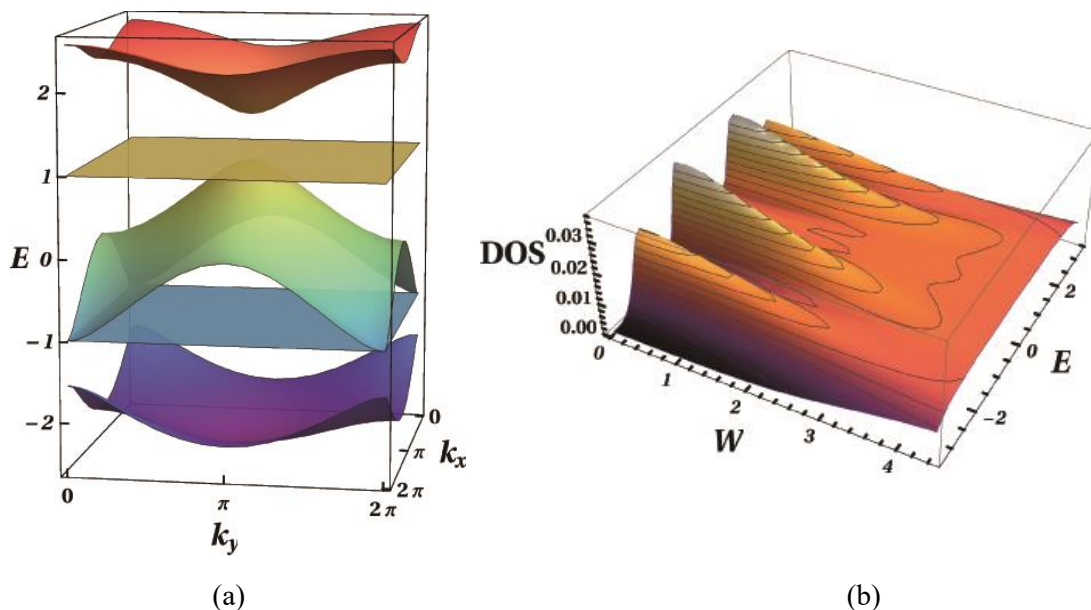


图 12 (a)为 $\mathcal{L}(2)$ 晶格的能带结构，图中的颜色为了区分不同能量下的状态，从低能量下的紫色逐渐变化到高能量下的红色。(b)为经过 $Mathematica$ 平滑处理的并且归一化的 $\mathcal{L}(2)$ 晶格在不同无序强度和不同系统能量下的能态密度（简称为 DOS 图），这里选取的系统宽度为 $M = 10$ ，图中的颜色用来表示能态密度的数值大小，颜色越深表示数值越小，颜色越浅表示数值越大，而图中的细线是用来表示能态密度的等值线。

森模型的紧束缚哈密顿量 H 推导出该晶格的色散关系，如下所示：

$$\begin{aligned} E_1 &= 0, \\ E_{2,3} &= \pm\sqrt{2}, \end{aligned} \quad (32)$$

$$E_{4,5,6,7} = \pm \sqrt{3 \pm \sqrt{5 + 2(\cos k_x + \cos k_y)}},$$

在这里，设置格点之间的单位长度为1，并且这里的 k_x 和 k_y 分别是波矢投影到 x 轴和 y 轴上得到的。在图 13(a)中展示了 $\mathcal{L}(3)$ 晶格的能带结构，我们可以看到， $\mathcal{L}(3)$ 晶格与 $\mathcal{L}(1)$ 晶格的能带结构具有类似的特征， $\mathcal{L}(3)$ 晶格在系统能量 E 等于0的时候也有一个平带的存在，而且在系统能量 E 分别为 $\pm\sqrt{2}$ 的时候还出现了另外两个平带，并且这3个平带被4个色散带给分开，同时，在特殊的位置附近，也存在狄拉克锥。

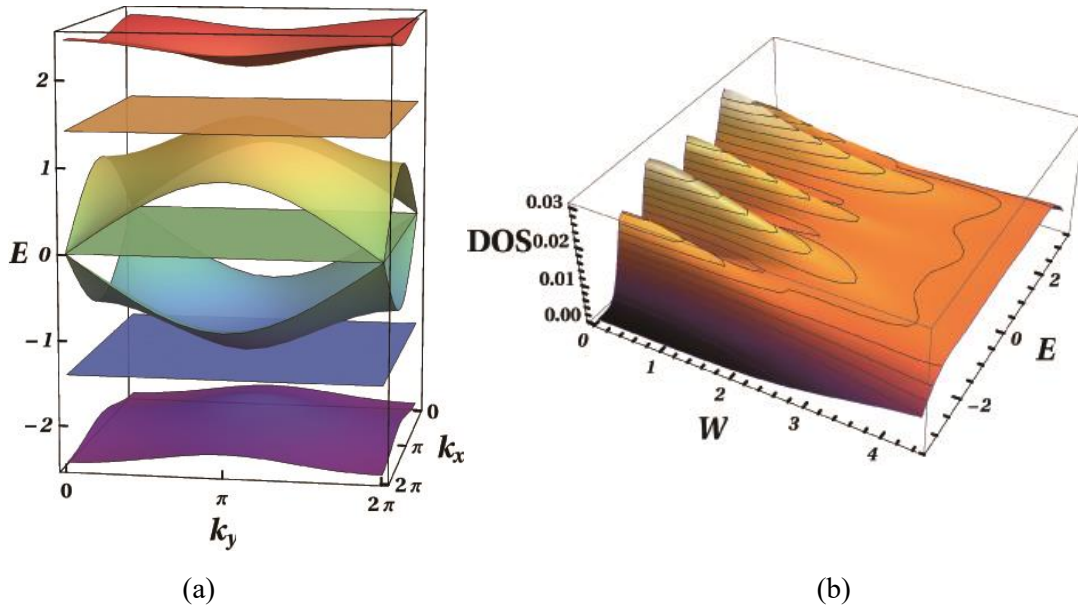


图 13 (a)为 $\mathcal{L}(3)$ 晶格的能带结构，图中的颜色用于区分不同能量下的状态，从低能量下的紫色逐渐变化到高能量下的红色。(b)为经过 $mathematica$ 平滑处理的并且归一化的 $\mathcal{L}(3)$ 晶格在不同无序强度和不同系统能量下的的能态密度（简称为 DOS 图），这里选取的系统宽度为 $M = 9$ ，图中的颜色用来表示能态密度的数值大小，颜色越深表示数值越小，颜色越浅表示数值越大，而图中的细线是用来表示能态密度的等值线。

那么，对于纯净的 $\mathcal{L}(4)$ 晶格而言，我们借助 $Mathematica$ ，也能从标准的安德森模型的紧束缚哈密顿量 H 推导出该晶格的色散关系，如下所示：

$$E_{1,2,3,4} = \frac{1}{2}(\pm 1 \pm \sqrt{5}), \quad (33)$$

这里剩下的另外五个色散带作为五阶方程的解出现，即

$$E^5 - 7E^3 + 9E - 2(\cos k_x + \cos k_y) = 0 \quad (34)$$

这个五阶方程可借助 $Mathematica$ 来数值求解。在这里，我们同样的设置格点之间的单位长度为1，并且这里的 k_x 和 k_y 分别是波矢投影到 x 轴和 y 轴上得到的。在图 14 (a) 中展示了系统宽度 M 为8的 $\mathcal{L}(4)$ 晶格的能带结构，我们可以看到，

$\mathcal{L}(4)$ 晶格与 $\mathcal{L}(2)$ 晶格的能带结构具有类似的特征， $\mathcal{L}(4)$ 晶格在系统能量 E 等于 0 的时候没有平带的存在，而且在系统能量 E 分别为 $1/2(\pm 1 \pm \sqrt{5})$ 的时候出现四个平带，它们两两关于能量为零的平面对称，并且这4个平带被5个色散带给分开。

与 $\mathcal{L}(2)$ 晶格系统类似，我们分析存在无序的 $\mathcal{L}(3)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格系统，也就是，无序度 $W > 0$ 时的情况。同样的， k_x 和 k_y 不再是描述系统性质的好量子数，并且加入无序后的色散关系也失去了它们的意义。在这两个存在无序的系统中，哈密顿量中的剩余项(也就是随机的无序项)将主要控制与零动能对应的的平带。因此，已经即使很小的无序 W 值也可以迅速破坏平带的简并度，并且态可以开始与原始分散的相邻色散带中的态重叠。类似的，对 $\mathcal{L}(3)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格，分别选取较小系统尺寸 $M^2=9^2$ 和 $M^2=8^2$ ，通过精确的直接对角化方式求解系统的能态密度(DOS)。在我们的 $Mathematica$ 代码中，我们经过 300 多个样本的反复试验，最终进行平均处理后得到了能态密度。具体的态密度图如图 13 和图 14 的(b)所示，在这两个态密度图中分别出现了五个和六个峰，与 $\mathcal{L}(1)$ 晶格类似，这表明在所有情况下，平带的简并度都非常迅速地消失，并且最初的简并态迅速移入由色散带占据的能量区域。同样地，但不太明显的是，色散带的平坦区域随着无序强度 W 的增大而消失。总的来说，当无序强度 W 达到2至3的时候，与这两个情况下的最大子带的带宽相当，态密度的峰值特征消失。

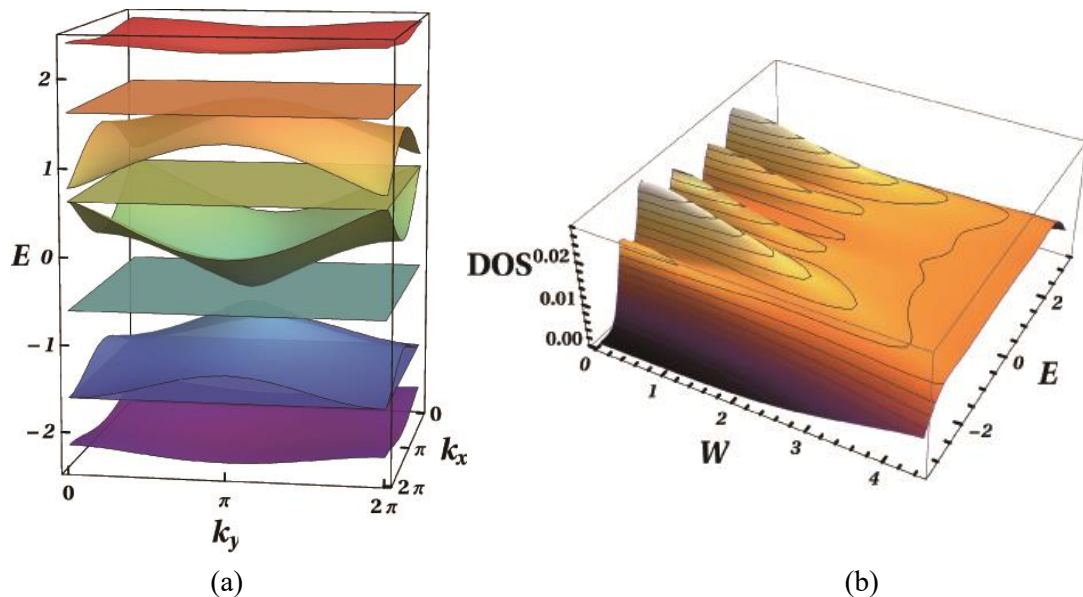


图 14 (a)为 $\mathcal{L}(4)$ 晶格的能带结构，图中的颜色用于区分不同能量下的状态，从低能量下的紫色逐渐变化到高能量下的红色。(b)为经过 $Mathematica$ 平滑处理的并且归一化的 $\mathcal{L}(4)$ 晶格在不同的无序强度和不同的系统能量下的的能态密度(简称为 DOS 图)，这里选取的系统宽度为 $M = 8$ ，图中颜色用来表示能态密度的数值大小，颜色越深表示数值越小，颜色越浅表示数值越大，而图中的细线是用来表示能态密度的等值线。

4.4 局域化性质与有限尺寸标度理论

在 3.5 章中我们已经了解到了简约局域化长的定义，为了便于直接研究无序对原始的平带和色散带的影响，作为对比，我们将 $\mathcal{L}(2)$ 晶格在系统能量 $E = 0$ 时，由转移矩阵方法计算出的简约局域化长度 Λ_M 展示在图 15 中。我们设置计算局域化长度的精度为 0.1%，同样的，这就导致对于每一对 (W, E) 情况下，大约需要进

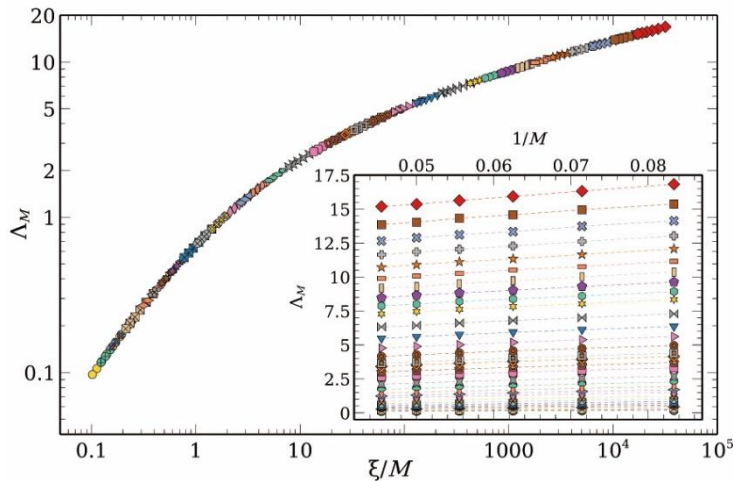


图 15 $\mathcal{L}(2)$ 晶格的按比例缩小的简约局域化长度 Λ_M 作为 ξ/M 的函数的双对数图。图中对应的无序强度分别为 1.0 (以图标菱形标示), 1.01, ..., 1.05 (以图标正方形标示), ..., 2.0, 2.1, 2.2, 2.4, 2.6, ..., 10.0 (以图标圆形标示), 分别用不同的颜色来加以区分。由于计算的数据过多, 为了更加清晰地展示, 我们将某些数据点未使用图形符号展示出来, 但这不影响对整体趋势的判断。误差范围在符号大小范围之内。右下角的插图: $\mathcal{L}(2)$ 晶格的简约局域化长度 Λ_M 作为 $1/M$ 的函数, 其中对不同无序强度的标示符号和颜色均与主图中的一致, 虚线只是给视觉上的向导。

行 10^8 次转移矩阵的乘法, 图中展示的数据所用到的系统尺寸分别为 $M = 10, 12, \dots, 20, 22$ 。观察可知, 随着系统宽度 M 的增加, 对于所有的无序强度, 简约局域化长度 Λ_M 的值会随之减小, 如图 15 的插图所示。这种行为与我们根据标度理论对二维体系局域态所预期的行为一致, 在这种局域的状态下, 对于足够大的无序强度和系统尺寸, 简约局域化长度 Λ_M 会逐渐饱和, 从而导致简约局域化长度 Λ_M 随着系统尺寸 M 的增大而逐渐减小。事实上, 在图 15 的主图中我们可以发现所有的 $\Lambda_M(0, W)$ 数据可以按比例缩放到一根标度曲线上。这条曲线因为随着系统尺寸 M 的增大而减小, 因此, 这也显示了很强的局域化特征。此外, 对于局域化长度 λ_M 远小于系统尺寸 M 时 ($\lambda_M \ll M$, 即 $\Lambda_M \ll 1$), 我们可以发现与 $\mathcal{L}(1)$ 晶格类似, 简约局域化长度 Λ_M 正比于 $1/M$, 在 $\lambda_M \sim \lambda_\infty$ 强局域的状态下。此外, 我们还能注意到, 在 $\mathcal{L}(1)$ 晶格中源自平带的态的局域化长度都比在 $\mathcal{L}(2)$ 晶格中源自原始色散带所对应的 $\Lambda_M(0, W)$ 值小将近一个数量级。

接着我们分析 $\mathcal{L}(3)$ 晶格与 $\mathcal{L}(4)$ 晶格的局域化性质,在这里我们也选取系统能量 $E = 0$ 的情形,主要是为了与先前的 $\mathcal{L}(1)$ 晶格与 $\mathcal{L}(2)$ 晶格的分析对比,我们将由转移矩阵方法计算出的简约局域化长度 Λ_M 展示在图 16 中。计算局域化长度的精度依旧设置为0.1%,同样的,这就导致对于每一对 (W, E) 情况下,大约需要进行 10^8 次转移矩阵的乘法,图中展示的数据所用到的系统尺寸分别为 $M = 10, 12, \dots, 20, 22$ 。与先前的 $\mathcal{L}(1)$ 晶格与 $\mathcal{L}(2)$ 晶格的行为类似,对于所有的无序强度,随着系统宽度 M 的增加,简约局域化长度 Λ_M 的值会随之减小,如图 16 的插图所示。与标度理论所预期的行为一致,在这种局域的状态下,对于足够大的无序强度和系统尺寸,简约局域化长度 Λ_M 会逐渐饱和,从而会导致简约局域化长度 Λ_M 随着系统尺寸 M 的增大而逐渐减小。同样的,在图 16 的主图中所有的简约局域化长度 $\Lambda_M(0, W)$ 的数据可以按比例缩放在一根标度曲线上,随着系统尺寸 M 的增大,这条曲线逐渐向下延展,因此,这也显示了很强的局域化特征。此外,对于局域化长度 λ_M 远小于系统尺寸 M 时($\lambda_M \ll M$, 即 $\Lambda_M \ll 1$),我们可以发现与 $\mathcal{L}(1)$ 晶格和 $\mathcal{L}(2)$ 晶格类似,对于 $\lambda_M \sim \lambda_\infty$ 强局域的状态下,简约局域化长度 Λ_M 正比于 $1/M$ 。观察图中的纵坐标,我们能总结出如下规律:在晶格中源自平带的态的局域化长度都比在源自原始色散带所对应的简约局域化长度 $\Lambda_M(0, W)$ 的值将近小了一个数量级。

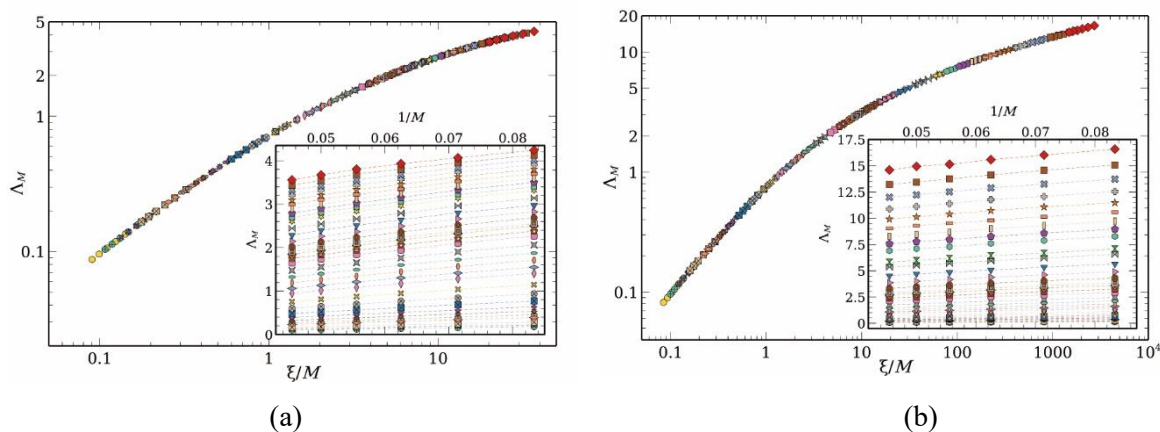


图 16 (a)和(b)分别为 $\mathcal{L}(3)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格的按比例缩小的简约局域化长度 Λ_M 作为 ξ/M 的函数的双对数图。图中对应的无序强度分别为1.0 (以图标菱形标示), 1.01, ..., 1.05 (以图标正方形标示), ..., 2.0, 2.1, 2.2, 2.4, 2.6, ..., 10.0 (以图标圆形标示), 分别用不同的颜色来加以区分。由于计算的数据过多,为了更加清晰地展示,我们将某些数据点未使用图形符号展示出来,但这不影响对整体趋势的判断。误差范围在符号大小范围之内。右下角的插图: $\mathcal{L}(3)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格的简约局域化长度 Λ_M 作为 $1/M$ 的函数,其中对不同无序强度的标示符号和颜色均与主图中的一致,虚线只是给视觉上的向导。

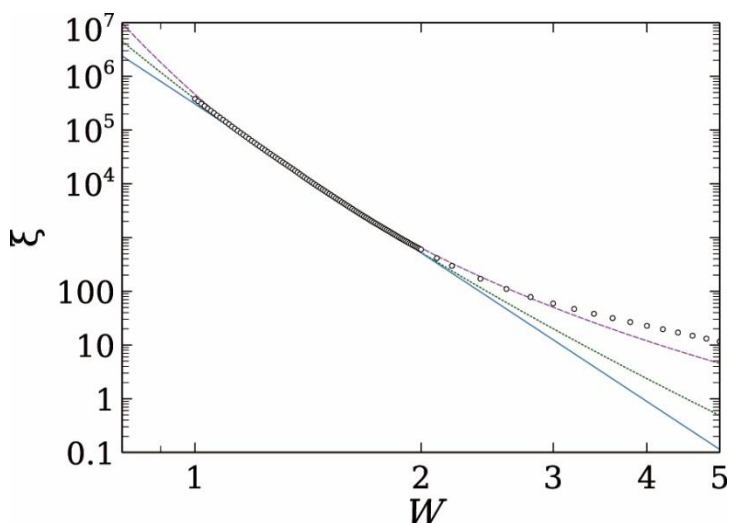


图 17 由标度理论所计算出的 $\mathcal{L}(2)$ 晶格标度参数 $\xi(0, W)$ 展示在图中空心圆点所构成的曲线,其余的线为标度参数的拟合函数曲线,分别用蓝色,紫色和绿色的实线,虚线和点状线所表示。其中,蓝色的实线对应的是形式为 $aW^{-\alpha}$ 的拟合函数,而紫色的虚线对应的是形式为 $aW^{-2}e^{\beta W^{-1}}$ 的拟合函数,绿色的点状线对应的是形式为 $aW^{-\alpha}e^{\beta W^{-\gamma}}$ 的拟合函数,参数 a , α , β 和 γ 的选择如表格 2 中所示。

在图 17 中,我们展示了标度参量 $\xi(0, W)$ 对无序强度 W 的依赖性。根据 Thouless 的研究,我们期待对于严格一维的只存在弱无序的链,其标度参量与无序强度的关系为 $\xi(W) \propto W^{-2}$;而对于二维的安德森模型而言,具有弱无序强度的行为遵循的是非通用的关系形式 $\xi(W) \propto aW^{-\alpha} \exp(\beta W^{-\gamma})$,这里, a 和 β 为正数,而 α 和 γ 为与数字 1 差不多大小的数。 $\mathcal{L}(2)$ 晶格的这些拟合曲线展示在图 17

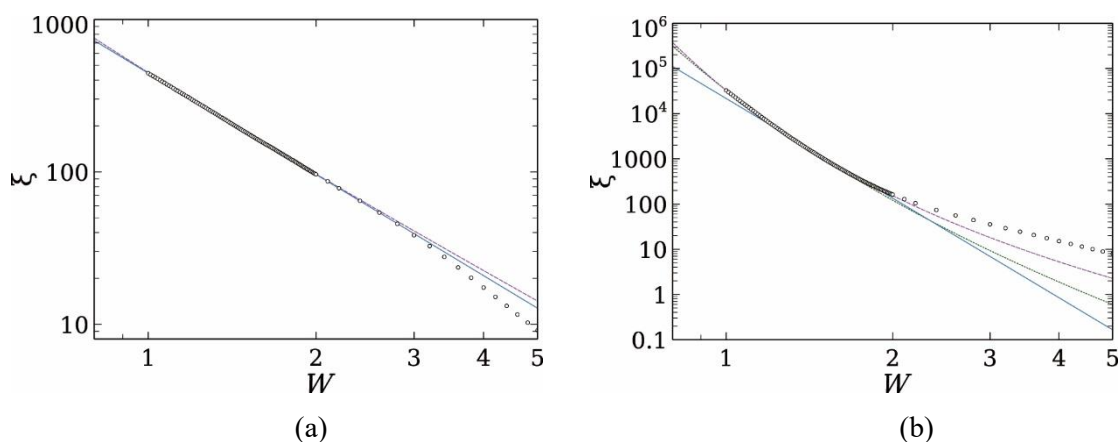


图 18 由标度理论所计算出的 $\mathcal{L}(3)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格标度参数 $\xi(0, W)$ 展示在图中空心圆点所构成的曲线,其余的线为标度参数的拟合函数曲线,分别用蓝色,紫色和绿色的实线,虚线和点状线所表示。其中,蓝色的实线对应的是形式为 $aW^{-\alpha}$ 的拟合函数,而紫色的虚线对应的是形式为 $aW^{-2}e^{\beta W^{-1}}$ 的拟合函数,绿色的点状线对应的是形式为 $aW^{-\alpha}e^{\beta W^{-\gamma}}$ 的拟合函数,参数 a , α , β 和 γ 的选择如表格 3 中所示。

中,其中,标度参量 $\xi(0, W)$ 的最大值约为 10^7 ,拟合曲线所对应的拟合参数均见

表格 2 中。在无序强度为 $1 \leq W \leq 2$ 时，计算数据可以很好地用简单的幂律关系 $\xi(W) \propto W^{-2}$ 拟合；但是，和 $\mathcal{L}(1)$ 晶格类似，在无序强度 $W > 2$ 时，简单幂律拟合不再奏效，而由表中所给参数的三种拟合函数都处于计算出的标度参量 ξ 值的下方，也不是好的拟合。人们可能会猜测，这种与一维拟合结果的明显一致性可能表明在空间中的局域本身是沿着一维结构进行的，但这显然超出了转移矩阵方法能够可靠地推断的范围。很显然，从表格 2 给出的拟合参数来看，这些值都不能足够符合以上所述。

Fit function	parameter	estimates	p-value
$aW^{-\alpha}$	a	310000(6000)	$< 10^{-10}$
	α	9.20(4)	$< 10^{-10}$
$aW^{-\alpha}e^{\beta W^{-\gamma}}$	a	118(2000)	0.94
	α	5(5)	0.26
	β	8(14)	0.56
	γ	0.7(7)	0.27
$aW^{-2}e^{\beta W^{-1}}$	a	14.2(5)	$< 10^{-10}$
	β	10.39(5)	$< 10^{-10}$

表格 2 $\mathcal{L}(2)$ 晶格 $\xi(W)$ 的拟合函数，其中拟合参数 a , α , β 和 γ 由 Levenberg-Marquardt 的非线性拟合程序获得。

Fit function	parameter	estimates	p-value
$aW^{-\alpha}$	a	444.1(3)	$< 10^{-10}$
	α	2.206(2)	$< 10^{-10}$
$aW^{-2}e^{\beta W^{-1}}$	a	334.9(6)	$< 10^{-10}$
	β	334.9(6)	$< 10^{-10}$

表格 3 $\mathcal{L}(3)$ 晶格 $\xi(W)$ 的拟合函数，其中拟合参数 a , α , β 和 γ 由 Levenberg-Marquardt 的非线性拟合程序获得。

同样的，作为对比观察分析，在图 18 中，我们分别展示了 $\mathcal{L}(3)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格的标度参量 $\xi(0, W)$ 对无序强度 W 的依赖性。我们已经知道，根据 Thouless 的

研究,我们期待对于严格一维的只存在弱无序的链,其标度参量与无序强度的关系为 $\xi(W) \propto W^{-2}$;而对于二维的安德森模型而言,具有弱无序强度的行为遵循的是非通用的关系形式 $\xi(W) \propto aW^{-\alpha} \exp(\beta W^{-\gamma})$,这里, a 和 β 为正数,而 α 和 γ 为与数字1差不多大小的数。 $\mathcal{L}(3)$ 晶格的这些拟合曲线展示在图 18 的(a)图中, $\mathcal{L}(4)$ 晶格的这些拟合曲线展示在图 18 的(b)图中,其中 $\mathcal{L}(3)$ 晶格的标度参量 $\xi(0,W)$ 的最大值约为1000,而 $\mathcal{L}(4)$ 晶格的标度参量 $\xi(0,W)$ 的最大值约为 10^7 ,拟合曲线所对应的拟合参数分别见表格 3 和表格 4。相似的,对于 $\mathcal{L}(3)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格,在无序强度为 $1 \leq W \leq 2$ 时,计算数据可以很好地用简单的幂律 $\xi(W) \propto W^{-2}$ 关系进行拟合;但是,在无序强度 $W > 2$ 时,与之前的两种晶格表现的性质类似,无法继续用简单幂律进行拟合,很显然,这些值都不能完全符合以上数值。而对比 $\mathcal{L}(1)$ 晶格和 $\mathcal{L}(2)$ 晶格,由表中所给参数的拟合函数曲线与计算出的标度参量 ξ 值的位置是类似的,也都不是好的拟合。同样的,这种行为与一维拟合结果十分一致,按照同样猜想,即二维晶格空间中的局域本身也可能是沿着一维结构进行的,但目前还无法根据我们使用的转移矩阵方法来进行证实。

Fit function	parameter	estimates	p-value
$aW^{-\alpha}$	a	21600(800)	$< 10^{-10}$
	α	7.33(7)	$< 10^{-10}$
$aW^{-\alpha}e^{\beta W^{-\gamma}}$	a	9(101)	0.92
	α	3(5)	0.42
	β	8(11)	0.45
	γ	0.8(6)	0.16
$aW^{-2}e^{\beta W^{-1}}$	a	11.5(2)	$< 10^{-10}$
	β	7.96 (3)	$< 10^{-10}$

表格 4 $\mathcal{L}(4)$ 晶格 $\xi(W)$ 的拟合函数,其中拟合参数 a , α , β 和 γ 由 Levenberg-Marquardt 的非线性拟合程序获得。

4.5 结论

在本章中,我们主要利用转移矩阵方法和有限尺寸标度理论来研究无序对 Lieb 晶格 $\mathcal{L}(2)$ 、 $\mathcal{L}(3)$ 和 $\mathcal{L}(4)$ 的局域化性质的影响,并借助 $Mathematica$ 科学计算软件对标度参数进行数据拟合。结果表明,存在无序的扩展二维 Lieb 晶格的电

子态都是局域的，并且存在无序时，平带的简并度都非常迅速地消失，并且最初的简并态迅速移入由色散带占据的能量区域；而色散带在无序强度 W 达到2至3的时候，态密度的峰值特征消失。

第 5 章 总结

5.1 结论

我们在本文中，主要研究了无序对广义二维 Lieb 晶格，即二维 Lieb 晶格及其扩展晶格 $\mathcal{L}(n)(n = 1, 2, 3, 4)$ 的电子局域化特性。

单就有序纯净的 Lieb 晶格和它的扩展晶格的色散关系而言，我们发现如下规律：每个 $\mathcal{L}(n)$ 晶格的能带结构中都存在有 n 个平带，它们被 $n + 1$ 个色散带分隔开来；此外，当 n 为奇数1和3时，在 (k_x, k_y) 平面上的特殊点，晶格的能带结构中出现狄拉克锥，而当 n 为偶数2和4时，晶格的能带结构只存在抛物线型的色散关系。

对于存在无序的四种广义 Lieb 晶格的局域化性质而言， $\mathcal{L}(1)$ 晶格和 $\mathcal{L}(3)$ 晶格的性质十分类似，且不同于 $\mathcal{L}(2)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格。对比标度长度 $\xi(0, W)$ 对无序强度 W 的依赖性，我们发现，在系统能量 $E = 0$ 的时候， $\mathcal{L}(1)$ 晶格和 $\mathcal{L}(3)$ 晶格所对应的平带所展现的行为与 $\mathcal{L}(2)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格所对应的色散带的行为明显不同。标度参量 ξ 值的绝对大小表现最为突出，在无序强度较小的情况下， $\mathcal{L}(1)$ 晶格和 $\mathcal{L}(3)$ 晶格所对应的标度参量与 $\mathcal{L}(2)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格的标度参量大约相差三个数量级。同时，在无序强度 $1 \leq W \leq 2$ 的情况下，对于 $\mathcal{L}(1)$ 晶格和 $\mathcal{L}(3)$ 晶格而言，简单幂律 $\xi(W) \propto W^{-2}$ 是比较合理的拟合方式；而在无序强度 $W > 2$ 的情况下，在这四种晶格中都没有合适的拟合结果；对于 $\mathcal{L}(1)$ 晶格和 $\mathcal{L}(3)$ 晶格而言，估算出的标度参量 ξ 值都处于拟合曲线的下方，而于 $\mathcal{L}(2)$ 晶格和 $\mathcal{L}(4)$ 晶格而言，估算出的标度参量 ξ 值都处于拟合曲线的上方。

总而言之，经过适当的有限尺寸标度理论处理后，我们发现这四种无序 Lieb 晶格的所有态都是局域态。我们的结果表明与平带相对应能量的有限尺寸标度化的局域化长度 ξ 表现出让人联想到一维微扰结果的行为，这为这些局域态的性质提供了有关的空间信息。对于与色散带相对应的能量，存在着更大的局域化长度的趋势，正如在二维安德森局域化模型所预期的那样。我们结果表明平带和色散带对于无序的干扰具有不同的特点和很强的鲁棒性，这在一定程度上解释了为何在光子 Lieb 晶格中观察到了平带和色散带之间的明显差异。

5.2 展望

本文基于紧束缚安德森模型，使用转移矩阵方法和有限尺寸标度理论方法就广义 Lieb 晶格的电子局域化性质进行了探讨，取得了一些有意义的结果。目前，我们还只对二维的广义 Lieb 晶格进行了研究，之后可将其扩展到三维，探究广

义 Lieb 晶格中三维安德森模型的金属-绝缘体转变, 可望取得更为丰富的结果, 进一步拓展对无序系统中电子局域化性质和金属-绝缘体转变的深入理解。

参考文献

- [1] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. Solid State Physics[M]. New York: Saunders, 1976: 1-799.
- [2] J. R. Hook and H. E. Hall. Solid State Physics[M]. Southern Gate: Chichester, 1991: 139-139.
- [3] Kane C L, Mele E J. Quantum Spin Hall Effect in Graphene[J]. Physical Review Letters, 2005, 95(22): 226801-226801.
- [4] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S, et al. Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells[J]. Science, 2006, 314(5806): 1757-1761.
- [5] Wan X , Turner A M , Vishwanath A , et al. Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates[J]. Physical review, 2011, 83(20):p.205101.1-205101.9.
- [6] Su-Yang, Xu, Chang, et al. Observation of Fermi arc surface states in a topological metal[J]. Science, 2015, 347(6219): 294–298.
- [7] Soluyanov A A, Gresch D, Wang Z, et al. Type-II Weyl semimetals[J]. Nature, 2015, 527(7579): 495-498.
- [8] Leykam, D., Flach, S. Perspective: Photonic flatbands[J]. APL Photonics, 2018, 3(7): 070901-1-16.
- [9] Tasaki H. From Nagaoka's Ferromagnetism to Flat-Band Ferromagnetism and Beyond An Introduction to Ferromagnetism in the Hubbard Model[J]. Progress of Theoretical Physics, 1998, 99(4): 489-548.
- [10] Miyahara S , Kusuta S , Furukawa N . BCS theory on a flat band lattice[J]. physica c superconductivity, 2007, 460-462(part-P2):1145-1146.
- [11] Bergman D L, Wu C, Balents L, et al. Band touching from real-space topology in frustrated hopping models[J]. Physical Review B, 2008, 78(12): 125104.1-125104.9..
- [12] Wu C, Bergman D L, Balents L, et al. Flat bands and wigner crystallization in the honeycomb optical lattice[J]. Physical Review Letters, 2007, 99(7): 070401.1-070401.4.
- [13] Leykam D, Bodyfelt J D, Desyatnikov A S, et al. Localization of weakly disordered flat band states[J]. European Physical Journal B, 2017, 90(1): 1-12.
- [14] Shukla P. Disorder perturbed flat bands: Level density and inverse participation ratio[J]. Physical Review B, 2018, 98(5): 054206.1-054206.14.
- [15] Ramachandran A, Andreanov A, Flach S, et al. Chiral flat bands: Existence, engineering, and stability[J]. Physical Review B, 2017, 96(16): 161104.
- [16] Goda M, Nishino S, Matsuda H, et al. Inverse Anderson Transition Caused by Flatbands[J]. Physical Review Letters, 2006, 96(12): 126401.1-126401.4.
- [17] Wenxuan Q, Shuai L, Yi Z, et al. Designing an artificial Lieb lattice on a metal surface[J]. Physical Review B, 2016, 94(24): 241409.1-241409.6.
- [18] Julku A, Peotta S, Vanhala T I, et al. Geometric Origin of Superfluidity in the Lieb-Lattice Flat Band[J]. Physical Review Letters, 2016, 117(4): 045303.1-045303.6..
- [19] Chen R, Xu D, Zhou B, et al. Disorder-induced topological phase transitions on Lieb lattices[J].

- Physical Review B, 2017, 96(20) : 205304.1-205304.7.
- [20] Niță M, Ostahie B, Aldea A, et al. Spectral and transport properties of the two-dimensional Lieb lattice[J]. Physical Review B, 2013, 87(12): 125428.1-125428.13.
- [21] Sun M, Savenko I G, Flach S, et al. Excitation of localized condensates in the flat band of the exciton-polariton Lieb lattice[J]. Physical Review B, 2018, 98(16): 161204.1-161204.5.
- [22] Bhattacharya A, Pal B. Flat bands and nontrivial topological properties in an extended Lieb lattice[J]. Physical Review B, 2019, 100(23): 235145.1-235145.9.
- [23] Lieb, E. H. Two theorems on the Hubbard model[J]. Physical Review Letters, 1989, 62(10): 1201–1204.
- [24] Ajimsha R S, Das A K, Joshi M P, et al. Quantum corrections to low temperature electrical conductivity in Dy doped ZnO thin films[J]. Thin Solid Films, 2015: 521-525.
- [25] Mukherjee S, Spracklen A, Choudhury D, et al. Observation of a Localized Flat-Band State in a Photonic Lieb Lattice[J]. Physical Review Letters, 2015, 114(24): 245504.1-245504.5..
- [26] Guzmansilva D, Mejiacortes C, Bandres M A, et al. Experimental observation of bulk and edge transport in photonic Lieb lattices[J]. New Journal of Physics, 2014, 16(6): 063061.1-063061.8.
- [27] Diebel F, Leykam D, Kroesen S, et al. Conical Diffraction and Composite Lieb Bosons in Photonic Lattices[J]. Physical Review Letters, 2016, 116(18): 183902.1-183902.5.
- [28] Baboux F, Ge L, Jacquemin T, et al. Bosonic Condensation and Disorder-Induced Localization in a Flat Band.[J]. Physical Review Letters, 2016, 116(6): 066402.1-066402.6.
- [29] Taie S, Ozawa H, Ichinose T, et al. Coherent driving and freezing of bosonic matter wave in an optical Lieb lattice[J]. Science Advances, 2015, 1(10): 1500845.1-1500845.6.
- [30] Shen R, Shao L B, Wang B, et al. Single Dirac cone with a flat band touching on line-centered-square optical lattices[J]. Physical Review B, 2010, 81(4): 041410.1-041410.4.
- [31] Slot M R, Gardenier T S, Jacobse P H, et al. Experimental realization and characterization of an electronic Lieb lattice[J]. Nature Physics, 2017, 13(7): 672-676.
- [32] Souza A M, Herrmann H J. Flat-band localization in the Anderson-Falicov-Kimball model[J]. Physical Review B, 2009, 79(15): 153104.1-153104.4.
- [33] Chalker J T, Pickles T S, Shukla P, et al. Anderson localization in tight-binding models with flat bands[J]. Physical Review B, 2010, 82(10): 104209.
- [34] Nishino S, Matsuda H, Goda M, et al. Flat-Band Localization in Weakly Disordered System[J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2007, 76(2): 024709.
- [35] Flach S, Leykam D, Bodyfelt J D, et al. Detangling flat bands into Fano lattices[J]. EPL, 2014, 105(3): 30001.
- [36] Vidal J, Doucot B, Mosseri R, et al. Interaction induced delocalization for two particles in a periodic potential[J]. Physical Review Letters, 2000, 85(18): 3906-3909.
- [37] Vidal J, Butaud P, Doucot B, et al. Disorder and interactions in Aharonov-Bohm cages[J]. Physical Review B, 2001, 64(15): 155306.
- [38] Gulacsi Z. Exact multielectronic electron-concentration-dependent ground states for disordered two-dimensional two-band systems in the presence of disordered hoppings and finite on-site random interactions[J]. Physical Review B, 2004, 69(5): 542041-5420410.

- [39] Gulacsi Z, Kampf A P, Vollhardt D, et al. Route to Ferromagnetism in Organic Polymers[J]. *Physical Review Letters*, 2010, 105(26): 266403.1-266403.4.
- [40] Liu Z, Liu F, Wu Y, et al. Exotic electronic states in the world of flat bands: From theory to material[J]. *Chinese Physics B*, 2014, 23(7) : 122-124.
- [41] Neto A H, Guinea F, Peres N M, et al. The electronic properties of graphene[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2009, 81(1): 109-162.
- [42] Weeks C, Franz M. Topological insulators on the Lieb and perovskite lattices[J]. *Physical Review B*, 2010, 82(8): 085-310.
- [43] Anderson P W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices[J]. *Physical Review*, 1958, 109(5): 1492-1505.
- [44] 刘小良. 低维无序系统电子局域性质研究[D]. 长沙: 中南大学, 2006.
- [45] 黄昆. 固体物理学[M]. 韩汝琦改编. 北京: 高等院校出版社, 1988, 10: 228-229.
- [46] 郑兆勃, 非晶固态材料引论[M]. 北京: 科学出版社, 1987: 386-432.
- [47] Wolf P E, Maret G. Weak localization and coherent backscattering of photons in disordered media[J]. *Physical Review Letters*, 1985, 55(24): 2696-2699.
- [48] Kuga Y, Ishimaru A. Retroreflectance from a Dense Distribution of Spherical Particles[J]. *Journal of The Optical Society of America A-optics Image Science and Vision*, 1984, 1(8): 831-835.
- [49] Van Albada M P, Lagendijk A. Observation of Weak Localization of Light in a Random Medium[J]. *Physical Review Letters*, 1985, 55(24): 2692-2695.
- [50] Lindelof P E, Norregaard J, Hanberg J, et al. New Light on the Scattering Mechanisms in Si Inversion Layers by Weak Localization Experiments[J]. *Physica Scripta*, 1986: 17-26.
- [51] Kirkpatrick T R. Localization of acoustic waves.[J]. *Physical Review B*, 1985, 31(9): 5746-5755.
- [52] Depollier C, Kergomard J, et al. Localisation d'Anderson des ondes dans les réseaux acoustiques unidimensionnels aléatoires[J]. In *Annales de physique*, 1986, 11(5): 457-492.
- [53] Mott N F. Electrons in disordered structures[J]. *Advances in Physics*, 1967, 50(7): 865-945.
- [54] 阎守胜. 固体物理基础[M]. 北京: 北京大学出版社, 2011: 213-321.
- [55] Mackinnon A, Kramer B. The scaling theory of electrons in disordered solids: Additional numerical results[J]. *European Physical Journal B*, 1983, 53(1): 1-13.
- [56] Kramer B, Mackinnon A. Localization: theory and experiment[J]. *Reports on Progress in Physics*, 1993, 56(12): 1469-1564.
- [57] Oseledets, V. Oseledets theorem[J]. *Scholarpedia*, 2008, 3(1): 1846-1922.
- [58] Ishii K. Localization of Eigenstates and Transport Phenomena in the One-Dimensional Disordered System[J]. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 1973, 53(53): 77-138.
- [59] Beenakker C W. Random-matrix theory of quantum transport.[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1997, 69(3): 731-808.
- [60] 郑兆勃, 非晶固态材料引论[M], 北京: 科学出版社, 1987: 0386-432.
- [61] Edwards J T, Thouless D J. Numerical studies of localization in disordered systems[J]. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1972, 5(8): 807-820.
- [62] Abrahams E, Anderson P W, Licciardello D C, et al. Scaling Theory of Localization: Absence of

- Quantum Diffusion in Two Dimensions[J]. *Physical Review Letters*, 1979, 42(10): 673-676.
- [63] Schreiber M, Grussbach H. Dimensionality dependence of the metal-insulator transition in the Anderson model of localization.[J]. *Physical Review Letters*, 1996, 76(10): 1687-1690.
- [64] Wilson K G, Kogut J B. The renormalization group and the ϵ expansion[J]. *Physics Reports*, 1974, 12(2): 75-199.
- [65] Wegner, Franz J. Electrons in disordered systems. Scaling near the mobility edge[J]. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 1976, 25.4:327-337.
- [66] Lee P A. Real-Space Scaling Studies of Localization[J]. *Physical Review Letters*, 1979, 42(22): 1492-1494.
- [67] Sarker S K, Domany E. Scaling theory of Anderson localization: A renormalization-group approach[J]. *Physical Review B*, 1981, 23(11): 6018-6036.
- [68] Leadbeater M, Römer R A, Schreiber M, et al. Interaction-dependent enhancement of the localisation length for two interacting particles in a one-dimensional random potential[J]. *European Physical Journal B*, 1999, 8(4): 643-652.
- [69] Mackinnon A, Kramer B. The scaling theory of electrons in disordered solids: Additional numerical results[J]. *European Physical Journal B*, 1983, 53(1): 1-13.
- [70] Slevin K, Ohtsuki T. Corrections to scaling at the Anderson transition[J]. *Physical Review Letters*, 1999, 82(2): 382-385.
- [71] Rodriguez A, Vasquez L J, Slevin K, et al. Multifractal finite-size scaling and universality at the Anderson transition[J]. *Physical Review B*, 2011, 84(13): 134209.1- 134209.16.
- [72] Kramer B, Mackinnon A. Localization: theory and experiment[J]. *Reports on Progress in Physics*, 1993, 56(12): 1469-1564.
- [73] Chiodo N, Valle G D, Osellame R, et al. Imaging of Bloch oscillations in erbium-doped curved waveguide arrays.[J]. *Optics Letters*, 2006, 31(11): 1651-1653.
- [74] Corrielli G, Crespi A, Valle G D, et al. Fractional Bloch Oscillations in photonic lattices[J]. *Nature Communications*, 2013, 4(1): 1555-1560.
- [75] N. Chiodo, G. Della Valle, R. Osellame, S. Longhi, G. Cerullo, R. Ramponi, P. Laporta, and U. Morgner, Imaging of Bloch oscillations in erbium-doped curved waveguide arrays[J]. *Opt. Lett.* 2006, 31: 1651-1653.
- [76] Dreisow F, Szameit A, Heinrich M, et al. Bloch-Zener oscillations in binary superlattices.[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102(7): 076802-076802.
- [77] Rechtsman M C, Zeuner J M, et al, One-Way Dirac Cones and Edge States in 2D Photonic Crystals with Broken Parity and Time-Reversal Symmetries[J]. *Nature*, 2013, 496: 196-200.
- [78] Zhang D, Zhang Y, Zhong H, et al. New edge-centered photonic square lattices with flat bands[J]. *Annals of Physics*, 2017: 160-169.
- [79] Mackinnon A, Kramer B. The scaling theory of electrons in disordered solids: Additional numerical results[J]. *European Physical Journal B*, 1983, 53(1): 1-13.
- [80] Milde F, Römer R A, Schreiber M, et al. Energy-level statistics at the metal-insulator transition in anisotropic systems[J]. *Physical Review B*, 2000, 61(9): 6028-6035.
- [81] Cheraghchi H, Fazeli S M, Esfarjani K, et al. Localization-delocalization transition in a one one-

- dimensional system with long-range correlated off-diagonal disorder[J]. *Physical Review B*, 2005, 72(17): 174-207.
- [82] Slevin K, Ohtsuki T. Corrections to scaling at the Anderson transition[J]. *Physical Review Letters*, 1999, 82(2): 382-385.
- [83] Edwards J T, Thouless D J. Numerical studies of localization in disordered systems[J]. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1972, 5(8): 807-820.
- [84] Kappus M, Wegner F. Anomaly in the band centre of the one-dimensional Anderson model[J]. *European Physical Journal B*, 1981, 45(1): 15-21.
- [85] Römer R A, Schulzbaldes H. Weak disorder expansion for localization lengths of quasi-1D systems[J]. *EPL*, 2004, 68(2): 247-253.

致 谢

三年的研究学习生活中，我得到了恩师钟建新教授和 Roemer 教授孜孜不倦教导、鼓舞以及谆谆教诲。他们以渊博的学识、严谨的治学态度以及对科研的热情深深的感染我，使我受益匪浅。研究生期间，我从动手能力，到自学能力，再到自我思考的能力都得到了很大程度的提升。在这里，我要对你们给予我最真挚的谢意。

在此，感谢从本科到研究生七年期间遇到的各位恩师，尤其是从本科就在指导我的钟建新教授，还有班主任张春小副教授，以及杨雪娟教授、唐超教授、彭向阳教授、唐翌教授、张凯旺教授、邓超生副教授、孟利军副教授、李金副教授、何朝宇副教授、肖化平副教授等，正是由于你们在我的学习生涯中提供了许多宝贵的意见才使得我有更大的进步。

同时，也十分感谢我们温暖的强大的课题组，感谢各位朝夕相处的同学在科研上和生活上给予的指导和帮助；特别感谢 507 和 513 办公室的同学们，你们的存在是生活中的快乐源泉；并且，感谢我那可爱的单纯的室友们，是你们的包容让我有了开心的宿舍生活，也让我的生活中充满美好的回忆。

在这里，还要特别得感谢从本科就一直相互学习的刘洁同学，是她那种对科研的认真刻苦、无限钻研的精神感染着我，让我对科研有了新的思考；也是她让我在世界观、人生观和价值观有了新的认知；十分感谢她七年的陪伴，感谢她在我低谷期开导我，鼓励我，也会一直记得你说的：一个人走会走得很快，两个人走会走得很远。

最后但同样重要的，要感谢我最最亲爱的家人，一直以来你们都是默默守护我成长、学习和生活的天使，你们是我坚持的动力，是你们默默的支持使得我顺利的完成学业，是你们在我低迷的时候，彷徨的时候给予我最大的力量，让我不畏惧自己将要面对的一切，谢谢你们，我爱你们。感恩我所遇到的一切！

毛晓裕

2020 年 5 月 10 日

个人简历、在学期间发表的学术论文与研究成果

1. 个人简历

本人出生于 1995.11.16

本科：2013.09-2017.06，湘潭大学，物理学；

硕士：2017.09-2020.06，湘潭大学，物理学。

2. 研究成果

- [1] **Xiaoyu Mao**, Jie Liu, Jianxin Zhong, Rudolf A. Römer. Disorder effects in the two-dimensional Lieb lattice and its extensions. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 状态：二审中，且编辑给出正面意见。SCI 暂未收录。
- [2] Jie Liu, **Xiaoyu Mao**, Jianxin Zhong, Rudolf A. Römer. Localization, phases and transitions in the three-dimensional extended Lieb lattices. *Physical Review B*. 状态：一审中，且编辑给出正面意见。SCI 暂未收录。