

学校代码 10530

分类号 O469

学号 202031000132

密级 公开

湘潭大学

博士学位论文

扩展 Lieb 模型中平带与无序的
相互作用性质研究

学位申请人 刘洁

指导教师 Rudolf A. Römer

学院名称 物理与光电工程学院

学科专业 物理学

研究方向 计算物理

二零二三年五月十九日

The interplay of the flat band and disorder in extended Lieb lattices

Candidate _____ Jie Liu _____

Supervisor _____ Prof. Rudolf A. Römer _____

College _____ School of Physics and Optoelectronics _____

Program _____ Physics _____

Specialization _____ Computational Physics _____

Degree _____ Doctor of Philosophy _____

University _____ Xiangtan University _____

Date _____ May 19, 2023 _____

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：刘浩

日期：2023年5月27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：刘浩

日期：2023年5月27日

导师签名：

R. A. Römer
刘浩

日期：

2023年5月27日

摘 要

晶格中波的局域化是指离散介质中不存在输运现象，人们在过去的几十年里面，对它进行了深入的研究。最值得注意的是，这种现象是由晶格中的杂质或者无序势场的存在所引起，从而导致了著名的 Anderson 局域化。然而，波的局域化也可能出现在平移不变的晶格中，其中相消干涉致使（至少一个）布洛赫能带群速度消失，导致宏观简并的本征态局域在晶格有限的格点上，此类局域态被称为紧凑的局域态 (CLS)。这些具有无色散能带（平带）的单粒子能谱被称为平带晶格。

在本文中，我们研究了二维和三维平带晶格中的格点势能无序与平带的相互作用效应。由于 Lieb 模型是最简单的平带晶格，也是实验上最容易实现的晶格模型，所以我们主要研究 Lieb 模型及其扩展模型。

首先，我们研究了二维 Lieb 模型及其扩展模型中的非关联无序效应。基于有限大小标度理论，我们发现平带处与色散带处的态确实具有完全不同的局域化性质，平带处的态似乎表现出一种类似一维情况的局域性质。然而，对于无序小至与跃迁能相当时，所有的无序仍然导致局域化。

然后，我们研究了三维 Lieb 模型及其扩展模型中的非关联格点无序效应，我们在能量一无序的相图中得到了金属—绝缘体转变曲线。我们发现三维 Lieb 模型及其扩展模型具有比简单立方晶格更低的临界无序，即 Lieb 模型更局域。此外，我们发现临界指数与标准的三维 Anderson 模型的临界指数是一致的。

最后，我们考虑有序势与无序势共存的情况，使得紧凑的局域态 (CLS) 被保留。有两个令人惊讶的结果，首先有一半的色散带上的非 CLS 态在能量上越发靠近平带能量，其行为也越发像 CLS，即更加局域在 Lieb 格点。其也导致了在 CLS 能量附近 DOS 的累积，最终导致在非常强无序下依旧存在扩展态，即出现了一个发散的迁移率边。其次，是靠近平带能量的小无序区域，出现“逆” Anderson 转变。我们也发现在较大无序区域的临界指数与标准的三维 Anderson 模型的临界指数是一致的。

我们的研究结果对平带晶格中无序与平带的相互作用研究具有重要的意义，可能为未来的信息存储器件提供新的思路，有利于推动量子存储器件设计相关领域的发展。

关键词：Anderson 局域化；平带；转移矩阵方法；能谱统计；有限大小标度理论

Abstract

Wave localization in lattices refers to the absence of transport in discrete media, and it has been intensively studied in the past decades. Most notably, this phenomenon is induced by the presence of impurities and disorder potential in the lattice — i.e. giving rise to the celebrated Anderson localization. However, wave localization may also emerge in translationally invariant lattices, where destructive interference yields the vanish of the group velocity in (at least) one of the Bloch bands, resulting in macroscopically degenerate eigenstates localized within a finite number of lattice sites. These lattices supporting dispersionless (or, flat) energy bands in the single-particle spectrum are called flat band lattices.

In this thesis, we study the impact of onsite disorder potential in 2D and 3D flat band lattices. In particular, we mainly focus on the Lieb model and its extended versions, as the Lieb lattice is simultaneously one of the simplest and one of the most experimentally achievable flat band lattices.

First, we focus on the impact of uncorrelated disorder in 2D Lieb model and its extension. Based on the Finite size scaling method, we find that states at the flat band and dispersion band indeed have completely different localization properties, with the states at the flat band exhibiting a 1D-like localization behavior. However, for disorder small enough to be comparable to the hopping energy, all disorder still leads to localization.

Then, we focus on 3D Lieb model and its extensions with uncorrelated onsite disorder, where we outline the metal-insulator transition curve in the energy disorder phase diagram. We found that the 3D Lieb model and its extended models have a lower critical disorder strength compared to the simple cubic lattice, meaning that the Lieb model is more localized. Moreover, we found that the critical exponent value is in agreement with the exponent for the standard 3D Anderson transition.

Lastly, we consider a mix of order and disorder in the Lieb models such that the compact localized states (CLS) are preserved. There are two surprising results. First, about half of the non-CLS states on the dispersion band get pushed in energy close to the energy of the CLS and become concentrated on the Lieb sites. This also leads to the accumulation of density of states (DOS) near the CLS energy, eventually resulting in the existence of extended states even under strong disorder, i.e., the emergence of a diverging mobility edge. Second, near the flat band energy and under small disorder, an “inverse” Anderson

transition occurs. We also found that the critical exponent in the large disorder regime is consistent with that of the standard 3D Anderson model.

Our research results have significant implications for the study of the interaction between disorder and flat bands in a lattice, and may provide new insights for future information storage devices, which would be beneficial in advancing the field of quantum storage device design

Keywords: Anderson localization; flat band; transfer matrix method; energy spectrum statistic; finite size scaling method

目 录

第 1 章 绪 论	1
1.1 无序系统简述	1
1.1.1 无序的类型	1
1.1.2 Anderson 局域化	2
1.1.3 态密度和迁移率边	3
1.1.4 临界指数与标度关系	5
1.1.5 局域化的标度理论	6
1.1.6 普适性	7
1.1.7 Anderson 局域化的实验观测	8
1.2 平带简介	9
1.2.1 平带和 CLS	9
1.2.2 平带的研究意义	11
1.2.3 平带在实验上的实现	11
1.3 选题意义	12
第 2 章 模型与方法	14
2.1 晶格模型	14
2.1.1 扩展的 Lieb 模型 $\mathcal{L}_d(n)$	14
2.1.2 基于 Lieb 格子 $\mathcal{L}_2(1)$ 的 Anderson 模型的 Wannier 表象	14
2.2 $\mathcal{L}_2(n)$ 与 $\mathcal{L}_3(n)$ 的 CLS 的构造	15
2.2.1 $\mathcal{L}_2(1)$ 的 CLS	15
2.2.2 $\mathcal{L}_2(2)$ 的 CLS	18
2.2.3 $\mathcal{L}_2(n)$ 的 CLS	19
2.2.4 $\mathcal{L}_3(n)$ 的 CLS	21
2.3 转移矩阵方法	23
2.4 能谱统计方法	25
2.4.1 精确矩阵对角化和稀疏矩阵对角化方法	25
2.4.2 能谱带隙比值统计方法	26
2.4.3 参与数 P 和逆参与数比 IPR	27
2.5 数值标度解析	28
2.5.1 1999 年之前的标度理论	28
2.5.2 有限大小标度理论	30

2.5.3 非线性拟合程序	32
第 3 章 二维 Lieb 模型及其扩展模型中的无序效应	33
3.1 引言	33
3.2 模型与方法	33
3.3 结果	34
3.3.1 色散关系	34
3.3.2 态密度	35
3.3.3 约化局域化长度 λ_M 与 ξ/M 关系	36
3.3.4 标度参量 $\xi(0, W)$ 与无序 W 的关系	37
3.4 总结	39
第 4 章 三维扩展 Lieb 模型的局域化, 相及相变	40
4.1 引言	40
4.2 模型与方法	40
4.3 结果	41
4.3.1 色散关系	41
4.3.2 态密度	42
4.3.3 $\mathcal{L}_3(1)$ 模型的相图	43
4.3.4 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 模型的相图	45
4.3.5 $\mathcal{L}_3(1)$ 模型临界性质的高精度确定	45
4.3.6 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 模型临界性质的高精度确定	48
4.4 总结	49
第 5 章 Lieb 模型及其扩展模型中的局域化特性	51
5.1 引言	51
5.2 结果	51
5.2.1 二维 Lieb 模型 $\mathcal{L}_2(n)$ 结果回顾	51
5.2.2 $\mathcal{L}_2(n)$ 的标度性质及不考虑高斯展宽的 DOS	52
5.2.3 三维 Lieb 模型 $\mathcal{L}_3(n)$ 结果回顾	54
5.2.4 $\mathcal{L}_3(1)$ 周期性边界条件相图以及小无序区域局域化性质	54
5.2.5 $\mathcal{L}_3(n)$ 的标度性质及不考虑高斯展宽的 DOS	56
5.3 小结	58
第 6 章 三维扩展 Lieb 模型的非传统去局域化	59
6.1 引言	59
6.2 模型与方法	59

6.3 结果	60
6.3.1 $\mathcal{L}_3(1)$ 发散的金属—局域转变	61
6.3.2 $\mathcal{L}_3(1)$ 模型基于能谱解析的金属—局域转变验证	62
6.3.3 小 E 和 W 区域的“逆”转变	67
6.3.4 $\mathcal{L}_3(1)$ 的投影几率和参与数	68
6.3.5 其它 $\mathcal{L}_3(n)$ 模型的局域化性质	69
6.4 小结	71
第7章 总结与展望	72
7.1 总结	72
7.2 展望	72
参考文献	74
致 谢	84
个人简历, 在学期间发表的学术论文及研究成果	87

第 1 章 绪 论

1.1 无序系统简述

1.1.1 无序的类型

自从 Anderson 在 1958 年提出无序的概念以来^[1], 无序系统引起了科学家们的广泛关注。众所周知, 根据 F. Bloch, R. Peierls 和 A. H. Wilson 于 20 世纪 30 年代提出的能带理论^[2-4], 波矢量 k 可以被用来标记理想周期固体系统的状态。基于晶格中的布拉伐衍射, 这一杰出的理论成功地识别了金属, 绝缘体和半导体。然而在现实生活中, 并不存在完美的材料, 他们都存在缺陷, 如杂质, 空位等, 这些缺陷破坏了这些系统的平移不变性, 这些系统也被统称为无序系统。

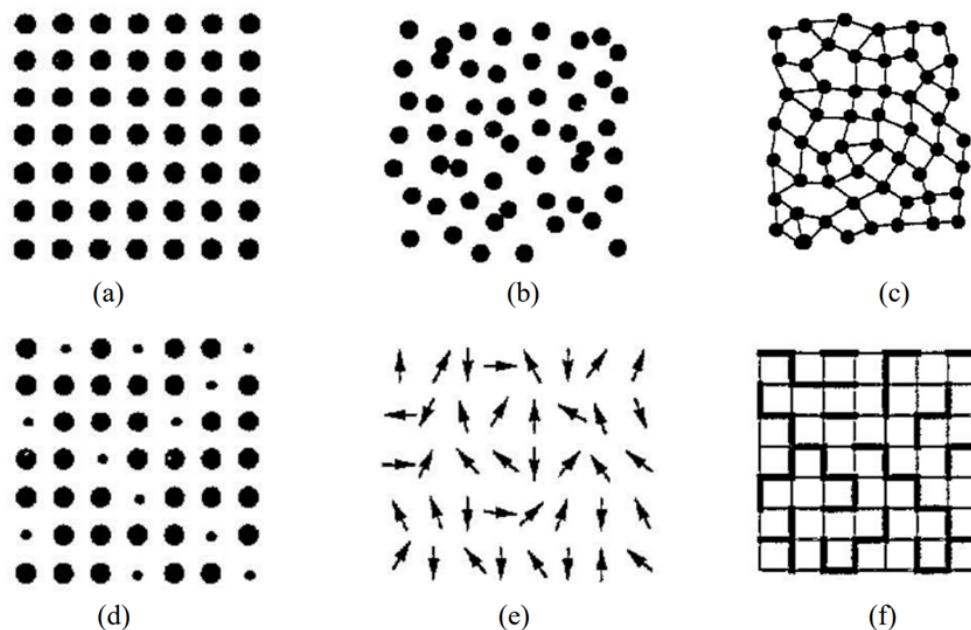


图 1.1 典型的无序系统类型, 图片来自于文献^[5]。

无序系统的种类可以根据晶体结构被破坏的方式和性质进行分类, 一般有置换无序、晶畴无序、取向无序、拓扑无序等。基于理想的二维正方晶格, 我们简单介绍几种典型的无序系统模型^[5,6], 如图 1.1 所示:

图 1.1 (a) 为理想周期的二维正方晶格系统模型, 系统中所有的原子为同一种原子, 且各原子的近邻原子数, 即配位数, 是一致的。此外, 每个原子具有相同的几何配置, 因此系统具有周期平移不变性。

图 1.1 (b) 为结构无序模型, 系统中所有的原子为同一种原子, 但其位置排列具有无规性。

图 1.1 (c) 为拓扑无序模型，原子种类相同且各原子的最近邻原子数目恒定。但各个原子之间的相对位置是随机地无序排列，该系统称为拓扑无序。

图 1.1 (d) 为成份无序模型，原子具有几何规则的排列，但是原子的种类是多样的。

图 1.1 (e) 为取向无序模型，它是由一系列指向完全随机的自旋组成的集合。

图 1.1 (f) 为动能无序模型，是一个由相同原子构成且排列规则的晶格，由于有各种不同的随机矢势而存在不同的跃迁矩阵元。

根据无序系统的不同物理性质和特征进行分类，无序系统又可以分为自旋玻璃 (Spin Glass) [7-10]，非晶态材料 (Amorphous Materials) [11-13]，高温超导体 (High-Temperature Superconductors) [14-17]，自旋液体 (Spin Liquid) [18-21] 等。

自旋玻璃是一种磁性无序系统，其中自旋在晶格上具有复杂的非周期性排列。这种系统的无序性来源于杂质，缺陷或交换耦合的随机性，导致自旋在时间和空间上表现出玻璃态的行为。非晶态材料则是没有长程有序结构的凝聚态材料。其原子或分子排列没有周期性，并且缺乏晶体的长程周期性。典型的非晶态材料包括玻璃、非晶合金和非晶聚合物等。高温超导体是一类表现出超导现象的材料，其超导转变温度高于传统超导材料。这些材料通常具有复杂的晶体结构和无序的局部结构，其中缺陷和无序性对超导性能产生重要影响。自旋液体是一种具有强关联效应的量子磁性无序系统，其中自旋在晶格上以无序的方式相互作用。自旋液体的自旋自发地保持高度量子纠缠状态，缺乏长程磁有序性。

1.1.2 Anderson 局域化

由于加入无序后的系统失去了周期性，波矢量 k 不再是一个好的量子数。所以，我们需要新的理论与技术手段来探索无序系统的性质。假设考虑一个没有电子—电子相互作用的立方格子模型，电子仅仅被无序的在位随机势散射，这被称为 Anderson 模型。在弱无序的情况下，波函数在短距离内是平面波，然而在长距离内会被随机的无序势散射。平面波在被散射之前自由运动的距离称为平均自由程。这些多重散射波，以形式

$$\Psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (1.1)$$

扩展到整个系统，被称之为扩展态。相反，在强无序的极限下，波从势阱的位置 \vec{r}_0 处以指数的形式衰减^[1,22-24]，

$$\Psi(\vec{r}) \sim \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_0|/\lambda) , \quad (1.2)$$

其中， λ 是局域化长度，其相应的态 $\Psi(\vec{r})$ 被称为局域态，如图 1.2 所示。从扩展态到局域态的转变是由无序所驱动，其诱导的金属—绝缘体转变 (MIT) 导致所有的态都

被局域，称之为 Anderson 转变。

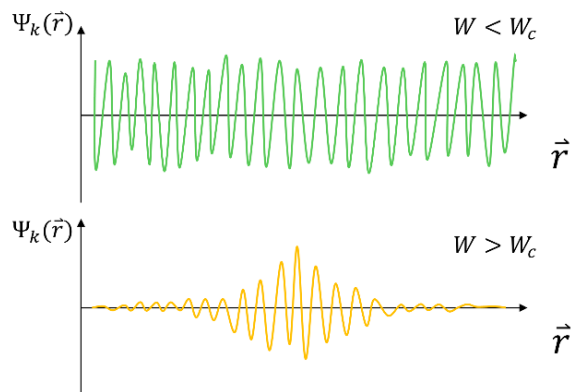


图 1.2 扩展态（上）与局域态（下）的图示。其中 W 为无序大小，而 W_c 则表示临界无序。

让我们考虑一个过程，最开始无序很弱，平均自由程 l 远远大于电子波长 λ_F （波矢 k_F 的倒数），即 $l \gg \lambda_F$ 。在这一阶段，可以假设电子被单个势散射，引起扩散运动（diffusive propagation）。电导率可以被表示成 $\sigma = e^2 D(E) \rho(E)$ ，其中 $D(E)$ 和 $\rho(E)$ 分别是扩散系数和态密度。随着增加无序，平均自由程的长度越来越小，对于某个无序，若有 $l \sim \lambda_F$ ，那么此时系统的性质会发生显著的变化。物理上，有一个 Lifshitz 准则^[25]，它声称当平均自由程 l 与强无序下的电子波长 λ_F 相当时，会发生局域化现象。

在现实生活中，由于制造技术的成熟，使处理更小尺寸结构的系统成为了可能，比如亚微米器件，即介观系统。处理这样的有限尺寸的系统让事情似乎更复杂，因此在考虑无序系统的局域化性质时必须处理系统尺寸 L ，特征长度（包括平均自由程 l ）和局域化程度 λ 之间的关系。对于弱无序下合适大小的系统，满足不等式 $l \ll L \ll \lambda$ 的情况下，电子可以扩散到整个系统，整个系统也被称为扩散区域（diffusive regime）。随着系统尺寸的增加，当系统尺寸 L 比局域化长度 λ 更大时，电子会被局域化而无法扩散。相反，如果使系统越来越小，即有 $L \ll l$ ，那么电子可以在整个系统中扩散，并且仅被几个随机势散射，这时的系统也被称为弹道区域（ballistic regime）。在扩散区域，电导公式 $\sigma = e^2 D(E) \rho(E)$ 是满足使用的，但是由于量子干涉效应在扩散区域中起着重要作用，因此需要对电导公式做一个小的修正，其导致的电导随着系统尺寸的增加呈现对数递减，这也被称为弱局域化修正。

1.1.3 态密度和迁移率边

20 世纪 20 年代，量子力学的发展使得人们开始研究实际物质中的电子行为，因此开始关注电子态密度^[26-28]的概念。在此期间，泡利提出了电子气体的基本概念，并计算了自由电子气体的能量态密度。在固体物理学的发展过程中，人们开始研究复杂晶体中的电子行为，并发现电子在晶体中的行为受到能带结构的影响。因此，人们开

始将电子态密度与能带结构相联系，并通过计算得到了材料中的电子态密度。这些计算是通过使用一些基于能带结构和量子力学的理论方法，如紧束缚模型，自洽场理论等。

为了使论点更生动，举一个简单的基于紧束缚近似的 Anderson 模型的例子。考虑一个立方晶格，最近邻格点之间的跃迁大小为 t ，其它的跃迁积分则为零。对于格点势能 ϵ_{xyz} ，服从均匀随机的分布，即 $\epsilon_{xyz} \in [-W/2, W/2]$ ，其中 W 为无序强度。在 $W = 0$ 的情况下，它恢复到干净的周期系统，其色散关系为

$$E = 2t \cos(k_x) + 2t \cos(k_y) + 2t \cos(k_z) , \quad (1.3)$$

其中波矢 $\vec{k} = k_x \vec{i} + k_y \vec{j} + k_z \vec{k}$ 。态密度 (DOS) 可以通过 $\rho(E) \sim \partial k / \partial E$ 解析得到^[29]。能谱范围为 $-6t$ 到 $6t$ ，态密度具有对称分布的形式 $\rho(E) = \rho(-E)$ 。

但是在无序存在的情况下，由于缺少平移不变性，波矢 k 不再是好量子数，不能再用能带结构来描述体系性质，也就无法获得色散关系，导致也不能通过解析的方法求得态密度。以上提到的方法都不再适用。但是态密度依旧是一种很好的描述能谱的工具，因为我们可以通过数值方法计算不同无序构型在单位能量区间内的状态数来获得态密度。

对于适当的无序，扩展态和局域态可以共存，大量的经验告诉我们局域态停留在能带的尾部，而扩展态则在能带的中心。存在一个临界能量， E_c ，将扩展态与局域态分隔开来，被称为迁移率边^[30,24]，如图 1.3 中所显示。如果费米能量 E_F 位于 $E_F < E_c$ 的区域，即能带的尾部，其波长 $\lambda_F \sim l$ ，局域化在此发生。由于费米能量附近的态都是局域的，系统变成了一个绝缘体，称为 Anderson 绝缘体，其中态密度不为零，但是电导为零。相反，如果 $E_F > E_c$ ，费米能周围的态是扩展的，系统可以被视为金属，通过改变费米能从带的尾部到带的中心，即穿过迁移率边，系统发生了从绝缘体到金属的相变。

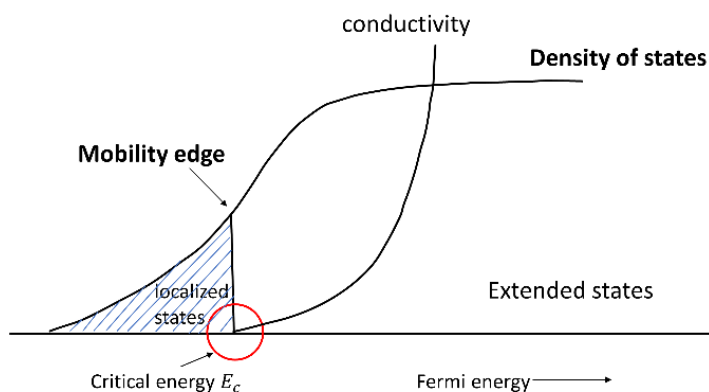


图 1.3 迁移率边的概念示意图。

实际上，在带中存在两个迁移率边， E_{cU} 和 E_{cL} ，它们分别区分扩展态和上面带尾

的局域态以及下面带尾的局域态。无序可以移动迁移率边，因为弱无序下有更多的扩展态，而强无序则有更多的局域态。无序的增强伴随着迁移率边向带中的偏移。当 $E_{cU} = E_{cL}$ 出现时，两条迁移率边在带中心重合。由于 $W > W_c$ 时，能谱中再也没有扩展态，这个相应的特殊的无序 W_c 又被称为临界无序。迁移率边 E_c ，作为无序 W 的函数，即 $E_c(W)$ ，给出了临界线，也即图 4.4 中所示的 $E - W$ 相图中区别开扩展态和局域态的线。

1.1.4 临界指数与标度关系

由于临界线可以将扩展态和局域态分开来，亦即区分金属相与绝缘体相，我们可以使用两个不同的量来分别表示临界线两侧不同区域的性质。电导 σ 和局域化长度 λ 成为候选者，在金属相一侧用电导 σ 描述输运性质，在绝缘体相一侧则用局域化长度 λ 描述局域化特性。由于金属—绝缘体转变预期属于二阶相变^[22,23,31]，临界指数表现为金属绝缘体转变（MIT）两侧金属电导和局域化长度对无序和能量的依赖形式。在金属区域，电导 $\sigma > 0$ ，而在临界点 W_c 或 E_c 电导 $\sigma = 0$ （至少对于正交类的系统是），在临界点附近的转变区域则可以表达成如下的形式

$$\sigma \sim (W_c - W)^s, \quad (1.4)$$

或者

$$\sigma \sim (E_c - E)^s, \quad (1.5)$$

相反，在转变区域局域化长度可以表示为

$$\lambda \sim (W - W_c)^{-\nu}, \quad (1.6)$$

或者

$$\lambda \sim (E - E_c)^{-\nu}, \quad (1.7)$$

在精确的临界点处，该值是发散的^[22]。

其中的 s 和 ν 之间的关系式可以通过 Wegner 标度关系确定，即 $s = (d - 2)^{[32]}$ 。标度关系^[33,34]作为凝聚态物理学和统计物理学中的一个重要概念，用于描述物质在临界点附近的物理性质。最早由以色列物理学家 Leo P. Kadanoff 于 1966 年提出^[35]。简单来说，标度关系是指一些物理量在临界点附近呈现出一种无量纲的函数关系，这种函数关系被称为标度律。例如，在二阶相变中，磁化率、比热等物理量都会在临界点附近呈现出标度律行为。而在我们的金属—绝缘体的转变中则是局域化长度或者电导呈现标度律行为。在 20 世纪 70 年代，Kenneth G. Wilson 在研究相变^[33]时提出了重整化群理论，为标度关系的研究提供了新思路 and 工具。在我们的模拟中，我们通过基于有限大小标度理论（FSS）获取这个临界指数 ν 。

1.1.5 局域化的标度理论

局域化的标度理论^[36]是基于 Thouless^[37]思想的单参量标度理论，该思想假设对于足够大的系统，当增加系统的尺寸，重新标定尺寸之后的电导不依赖于能量，无序和系统尺寸，仅仅依赖于电导本身，即

$$\beta(g) = \frac{\partial \ln g}{\partial \ln L} . \quad (1.8)$$

足够大的系统尺寸意味着系统尺寸 L 比系统中全部的特征长度都要大(如平均自由程 l , 随机势的相干长度等), 所有的微观细节都可以被视为是不相关的或无关紧要的。

然而，函数 $\beta(g)$ 具体形式是不知道的，只能从两个极限定性地描述。首先，考虑无穷大的电导，那么预期欧姆定律可以使用，即

$$g \sim \sigma L^{d-2} , \quad (1.9)$$

带入方程 1.8 可以得到 $\beta(g) = d - 2$ 。其次，考虑电导尽可能小的情况，即 $g \ll 1$ ，此时预期出现指数的局域化行为，即

$$g \sim \exp(-L/\lambda) , \quad (1.10)$$

因此， $\beta(g) \sim \ln g$ 。在电导 $g \ll 1$ 的情况下 $\beta(g) < 0$ ，即随着系统尺寸的增大电导减小。不失一般性，假设 $\beta(g)$ 总是一个连续且单调的函数。然后可以在两个极限之间进行插值，如图 1.4 所示。

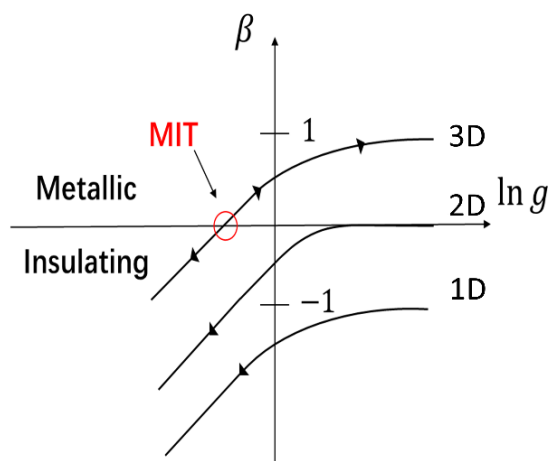


图 1.4 单参量标度假说示意图。箭头方向表示随着增加系统尺寸，流的方向。

对于 $d < 2$ ，函数 $\beta < 0$ ，表示 g 总是随着尺寸 L 的增大而减小；对于无穷大的系统，系统达到了局域区域，所有的态都是局域的，因此没有金属—绝缘体转变的出现。对于 $d = 2$ ，由于其属于临界区域，很难界定是否有相变存在,但一般认为不会出现金属—绝缘体转变，所有的态都是局域的。对于 $d > 2$ 的情况，存在一个固定点 $\beta(g_c) = 0$ ，意味着此时电导 g 与系统尺寸无关，并且保持恒定大小的值 g_c ；对于初始电导 g_i ，

如果 $g_i = g_c$ ，则电导在增加系统尺寸趋于无穷的过程中保持不变。如果初始电导 $g_i = g_c + \delta g$ （此时的 $\beta(g_c + \delta g) > 0$ ），则电导 g 最终会随着系统增大而达到金属相，与之相反的，倘若初始电导 $g_i = g_c - \delta g$ （此时的 $\beta(g_c - \delta g) < 0$ ），则电导 g 最终会随着系统增大而到达绝缘相。因此存在一个由临界点 g_c 分隔开的金属—绝缘体转变。

综上所述，基于这样一种权衡—专注于宏观尺度上某些重要特征，而忽略微观细节的标度理论是一个半定量的成功。该理论预测在时间反演不变的一维和二维系统，不存在金属绝缘体转变，而在三维等更高的系统中则会出现。

1.1.6 普适性

在临界现象的主题中，普适性是一个不可避免的问题。基于大量的实验，无论哈密顿量的微观细节如何改变，临界指数均保持不变的理念已经贯彻科研人员的心中。相反，决定普适类的则是系统的维度和对称性。当然，有一些量，比如临界无序 W_c 或者临界能量 E_c 则是依赖于微观细节，因此是非普适的。

表 1.1 Anderson 局域化中的普适性分类。

普适性分类	时间反演对称性	自旋旋转对称性	哈密顿量 H
正交类	是	-	实数, 对称的
酉类	否	是	复数, 自伴的
辛类	是	否	实数, 辛矩阵

在基于随机矩阵理论系综的 Wigner-Dyson 分类的相对应的早期分类方案中，定义了三类 Anderson 局域化的普适类，其主要考虑两种对称性，即根据时间反演对称性 (TRS) 和自旋旋转对称性 (SRS) 的存在与否分为正交类 (orthogonal)，酉类 (unitary) 和辛类 (symplectic)，细节展示在表 1.1 中。在物理学中，磁场可以破坏 TRS，而自旋轨道耦合则会破坏 SRS。举几个例子简单地说一下，对于我们通常所说的 Anderson 模型，其主要考虑无序的势能与一致的跃迁项之间的竞争，它描述了一个没有自旋的单粒子在无序晶格中的传播。由于体系此时具有时间反演对称性，因此这个情况下的 Anderson 模型就是属于正交类的。当进一步考虑跃迁项是依赖于电子的自旋取向时，此时的模型就是属于辛类的。当考虑加入一个外部磁场时，系统的时间反演对称性就被破坏，此时的系统就是酉类的。

尽管现在人们已经了解到，一套完整的随机矩阵理论除了三个 Wigner-Dyson 类之外，还包括三个手性 (chiral) 系综和四个 Bogoliubov-de Gennes 系综，并且附加的系综具有附加的对称性之一的特征，即手性或者粒子-空穴对称性^[23]。但是，其它的对称性在无序系统中不起太大作用，我们还是可以简单地使用表 1.1 中详细列出的这三个分类。

临界指数的普适性，以及对称性和维度的相关性的验证是无序系统中 Anderson 局域化的主要问题。

1.1.7 Anderson 局域化的实验观测

需要强调的是 Anderson 局域化现象不仅仅是存在于电子系统中^[38-43]，在声子^[44-46]，光波^[44,47-50]，自旋波^[51-53]，以及原子物质波^[54-56]等，甚至在经典波^[57-60]系统中均有 Anderson 局域化现象的出现。下面我们简要介绍两个分别在光子系统和原子系统中观察到的 Anderson 局域化。首先是 Tal Schwartz 等人^[50]于 2007 年基于二维光子晶体，在实验上研究了光子晶体中波的输运并且观察到了 Anderson 局域化现象，证实了 Anderson 局域化也存在于二维的光子晶体中。他们使用如图 1.5 (a) 所示的平行光导构成的六角晶格状的光子晶体作为实验体，通过调节光的折射率让其在一定的无序范围内波动，且实验过程中可以调控光导之间的横向耦合强度，让光沿着实验体的 z 轴传播的过程模拟了 Anderson 模型的时间演化过程。在实验过程中，在无序为零时，他们观察到了图 1.5 (b) 所示的呈现六角形状的模式，代表着弹道输运，通过增加无序的强度，分别依次观察到了图 1.5 (c) 所示的代表着扩散运动的模式，以及图 (d) 所示的局域化的模式。

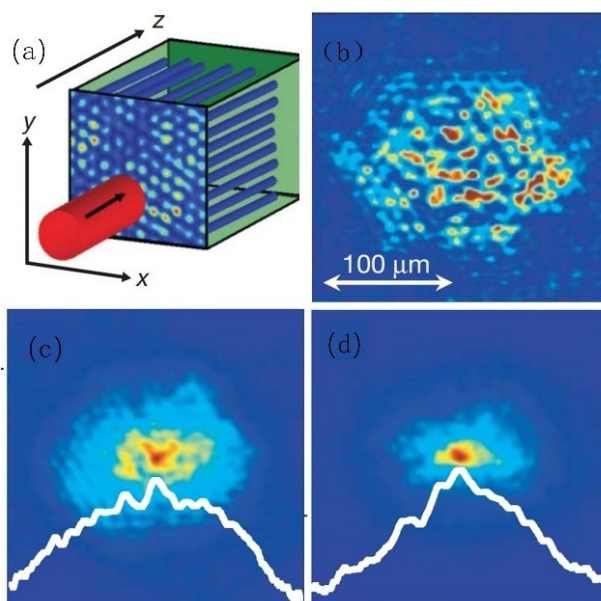


图 1.5 光子晶体中的二维 Anderson 局域化的实验观测。(a) 平行光导构成的六角晶格状的光子晶体示意图，(b) 没有无序时的情况，对应弹道输运，(c) 15%无序度，白色的线是沿着水平经过光束峰的直线在经过100个无序构型平均得到的强度对数分布图。可以用高斯函数 $I \sim \exp(-2r^2/\sigma^2)$ 进行拟合，其中 r 代表距离光束中心的距离，所以对应光的扩散运动。

(d) 45%无序度，此时白色的线可以通过指数形式 $I \sim \exp(-2|r|/\xi)$ 进行拟合，对应光的指数衰减形式的 Anderson 局域化。图文来源于文献^[50]。

次年, Juliette Billy 等人在冷原子系统中观测到的物质波的 Anderson 局域化现象。冷原子物质波能成为非常有吸引力的原因在于它能够被直接地观测到。其中大部分实验中的缺陷和原子-原子之间的相互作用可以在一定范围内被精准地控制。他们的实验结果展示在图 1.6 (a) 中, 其通过磁光阱获得了 BEC, 详细信息见图标题。波包在纵向势阱关闭之后开始演化, 随后被局域在一固定的区域, 如图 1.6 (b) 所示。图 1.6 (c) 展示了半对数坐标下的态密度分布图, 浅红色的线代表初始波包位于原点, 深红色的线则表示释放一秒之后的数据, 此时系统已接近平稳区, 蓝线为指数拟合, 展示了局域化的特性。目前, Anderson 局域化的实验结果都是定性的, 量子模拟的定量问题一直是一个难题。

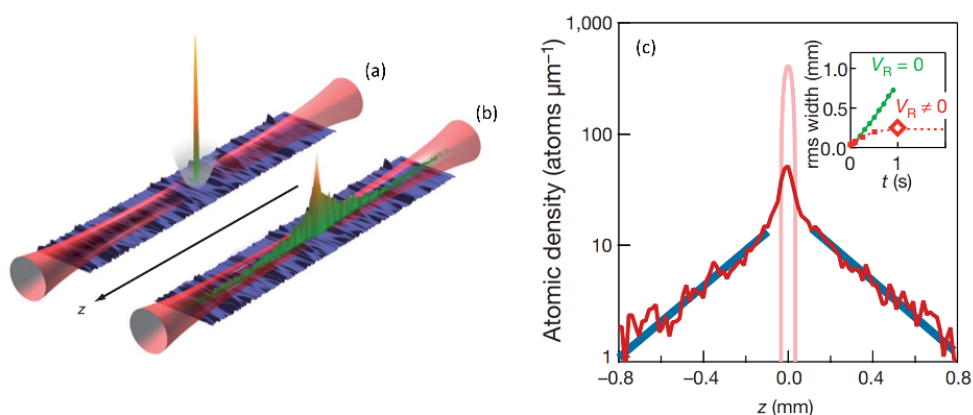


图 1.6 无序势中原子物质波的一维 Anderson 局域化的直接实验观测。(a), 一个小的玻色爱因斯坦凝聚 (BEC, 包含 1.7×10^4 个原子, 下文中为了方便称呼其为波包) 是在混合势阱中形成的, 势阱是由水平光学波导组成, 其在横向 ($x-y$ 平面) 提供一个强的约束以确保发生的是有效的一维动力学。一个松散磁性纵向阱使得波包最初位于中心的位置。振幅为 V_R 的无序势通过散斑模式实现, 如图中蓝色所示。(b) 一旦关闭纵向势阱, 波包开始自由演化, 经过长时间扩散之后最终形成一个特征的指数形式。(c) 原子密度剖面图, 浅红色的线表示初始的结果, 深红色的线代表释放一秒钟后的结果, 蓝色线为拟合的结果。在插图中, 它是扩散的均方根 (rms) 宽度与时间 t 的关系, 绿色的线表示在无序势 $V_R = 0$ 时是持续扩散的, 而当 $V_R \neq 0$ 时, 在 0.5s 之后达到平稳状态。图来源于文献^[54]。

1.2 平带简介

1.2.1 平带和 CLS

平带是一个不依赖于 k 的色散关系, 在 $k-E$ 能谱图中是一条平直的线。平带和通常的抛物线型和狄拉克线性色散关系不同, 它们的区别可以在图 1.7 中直观地看出来。

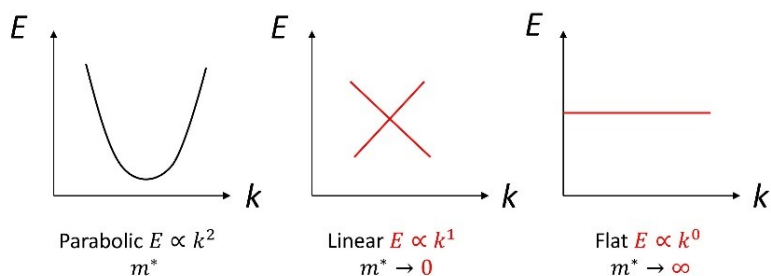


图 1.7 色散带的类型。从左至右依次为普通的抛物线型色散关系，线性色散关系（狄拉克类型），和平带色散关系。

对应于平带的本征态通常在空间上是紧凑的，即仅仅占据晶格的有限个子部分。因此，它们被称为“紧凑局域态”（compact localized states, CLS）^[61]。在图 1.8 中列出了一些一维的平带格子及其相应的 CLS，其中 CLS 占据的非零振幅的格点用黑色的小球突出显示。可以看到 CLS 仅仅占据在原胞的部分格点。图 1.8 中也展示其相应的能带结构，其中平带用红线突出显示出来。

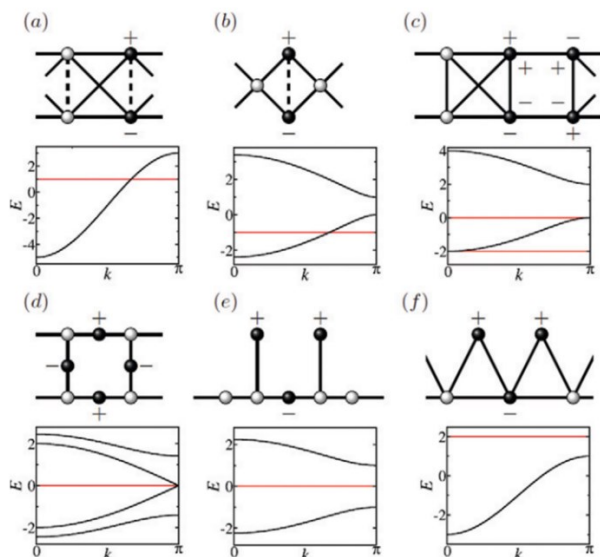


图 1.8 1D 平带格子示意图小球表示格点位置，实线代表跃迁积分 $t_{jj'} = 1$ ，虚线则代表可调节的跃迁积分 t 。黑色小球显示了具有相同振幅大小和交替符号的紧凑局域态的局域化，其它晶格具有严格的零振幅。不可约能带结构展示在每个晶格下面，其中平带用红线表示。(a) Cross-stitch 模型， $U = 1$ ，(b) diamond chain 模型， $U = 1$ ，(c) 1D pyrochlore 模型， $U = 1$ ，(d) 1D Lieb 模型， $U = 2$ ，(e) stub 模型， $U = 2$ 和 (f) sawtooth chain 模型， $U = 2$ 。图文来自于参考文献^[62]。

基于紧束缚方法，基本上有两种方法生成平带格子。一是通过对称性，二是通过微调耦合参量。最初的平带模型，诸如 Dice 格子^[63]和 Lieb 格子^[64]都是具有手性对称性的。Mielke 则基于线图（line graph）^[65]提出了新的平带模型，随后 Tasaki 也提出了通过微调耦合参量来产生具有平带结构的“装饰”格子^[66]。这几个具体的模型可以参看图 1.9。

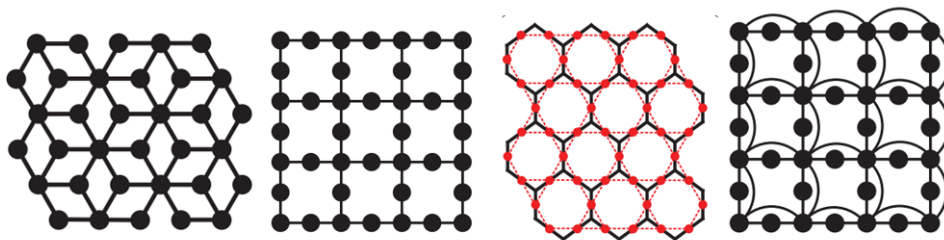


图 1.9 从左至右依次是 Dice 格子, Lieb 格子, Kagome 格子和 Tasaki 的装饰格子。其中第三幅图的黑色线表示了一个蜂窝格子, 红色点线表示的则是 Kagome 格子, 其是蜂窝结构的对偶格子。图文来自于参考文献^[67]。

随后, CLS 被用作平带的“产生器”。根据 CLS 的大小, U , 即 CLS 占据的原胞数量, 平带有不同的类型。图 1.8 的说明文字部分也相应的给出了每个模型相应的 U 值。对于 $U = 1$, 平带受到局域对称性的保护^[62], 因为它可以通过一个基的局部变化完全与晶格的其余部分解耦; 而对于 $U > 1$, 平带是通过微调耦合参量^[68]来产生的, 而不是通过局域对称性。然而, 由于基于 CLS 的构造方法, 仅仅适用于一维的格子, 因此完全推广到更高维度仍然是一个悬而未决的问题。因此需要研究出新的方法, 现在已经有一些方法已经在研究当中, 比如折纸规则 (origami rules)^[69], 寡聚体重复 (repetition of oligomers)^[70], 局域对称性 (local symmetries)^[71]和自相似构造 (self-similar constructions)^[72,73]等。

1.2.2 平带的研究意义

平带的群速度 $\nabla_k E$ 的消失, 即被镇压的动能, 使得势能愈发显著。因此, 它成为了实现强关联系统的理想平台。平带对无序和相互作用的存在很敏感, 这两者都会导致非零色散的出现。

前文已经提过, 无序可以诱导 Anderson 局域化, 并且导致相变的出现。除了无序之外, 平带的存在也会对局域化性质产生影响, 改变很多物理性质, 比如, 一维中的局域化长度^[74-76], 迁移率边^[77], “逆”Anderson 转变^[78,79]和无序诱导的拓扑相变^[80]等。在平带中粒子之间的相互作用也会诱导自发对称性破缺并且导致强关联量子相^[80-86]的出现, 这吸引了大量学者的关注。此外, 拓扑和平带的结合也是一个有趣的领域^[87,88]。

总而言之, 平带最开始作为用于解析学习多体系统^[63,64]中的铁磁基态而引入的工具, 之后被广泛用于研究大量物理现象, 例如分数量子霍尔效应^[89-91], 自旋液体^[19,92], 铁磁性^[65,93-95], 不存在无序的多体局域化^[96,97], 超导超流等^[98-104], 平带对于科研人员来说确实是很有意义的一个课题。

1.2.3 平带在实验上的实现

随着制造技术的成熟, 平带的实现有了很大的进展。对于电子平带方面, Abilio

等人在超导线网络中观测到了平带^[105]；Dorst 等人^[106]和 Slot 等人^[107]基于扫描隧道显微镜（STM）分别通过移除和添加原子独立地实现了 Lieb 晶格中的平带。随后，Li 等人^[108]则在多层硅烯结构的 kagome 晶格中观察到了平带。在光学领域，Jo 等人^[109]在 kagome 晶格中实现了平带，当然在 Lieb 格子^[110,111]中也成功实现了平带。在光子领域，基于飞秒激光读写技术（femtosecond laser-writing technique）同样实现了具有平带的光子系统^[112-115]；更多的是，基于太赫兹拟态等离子体波（terahertz spoof plasmons）也在 kagome 晶格^[116]和 Lieb^[117]晶格中观测到了平带。在相同的时间段内，也报道了基于光感应技术（optical induction technique）在 Lieb^[118]晶格和 kagome 晶格中观测到了平带。

在图 1.10 (a-c) 中，我们简单展示了 Dorst 等人^[106]基于扫描隧道显微镜（STM）所获得的一些结果。图 1.10 (b) 中的态均匀占据所有格点，对应了色散带，而 (c) 中则明显局域在 (a) 中绿色显示的格点上，对应了平带。图 1.10 (d-f) 展示了基于飞秒激光读写技术的光子系统实现，(e) 和 (f) 分别代表了平带和色散带。图 1.10 (g-h) 则是展示了光学格子的实现结果，通过调节晶格势可以获得平带。

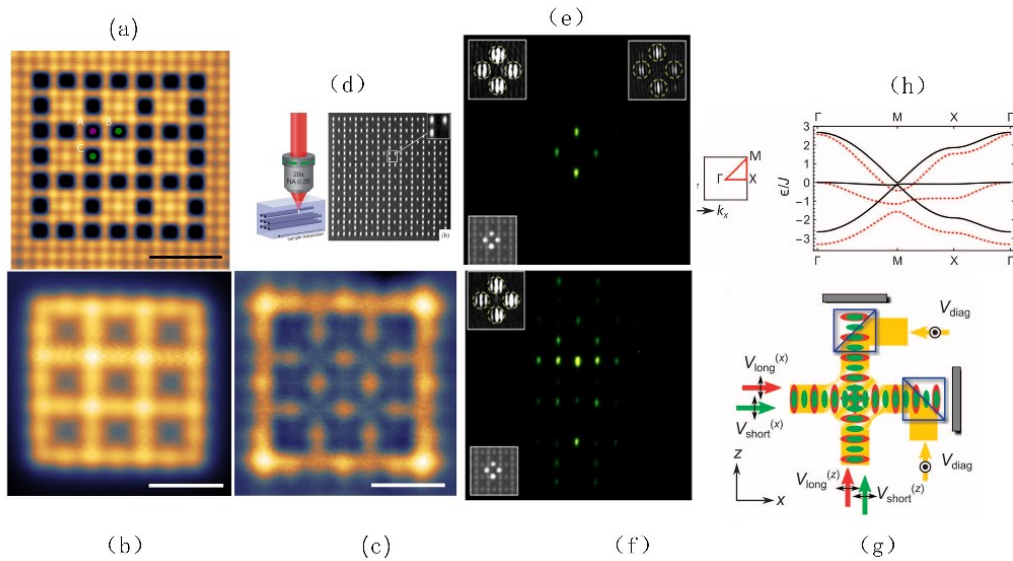


图 1.10 (a) CI 空位组成的 Lieb 晶格的形貌图，(b-c) 偏压分别为 2.85V 和 3.15V 时的 Lieb 晶格的电导映射图。(d) 飞秒激光读写技术示意图，(e) 和 (f) 分别为不同输入条件下的输出实验剖面。(g) Lieb 光学格子的实验实现，(h) 不同晶格势的能带结构。图文来自于文献 [106,111,113]。

1.3 选题意义

平带系统作为实现强关联系统的理想平台，其平带的本征态，即局域紧凑态（CLS），具有宏观的简并性，但是容易被无序与相互作用等破坏，从而产生新奇的物理现象，比如“逆”Anderson 局域化，多重分形特性，无序诱导的拓扑相变，铁

磁，超流等。

CLS 作为平带的本征态，其仅仅占据一个或几个原胞的位置，这意味着这些态局域在这些原胞里不能扩散出去。然而，平带具有高度简并的能级，它们的本征态并不是唯一的。这些态的线性组合构成的新的态也是其相应的本征态。这个新的态甚至可以占据遍布整个格子的某些特定的格点。因此对于所有的 CLS 都是局域化这一结果是违反直觉的。在 CLS 系统中引入无序之后，一方面，无序诱导了 Anderson 局域化的出现，抑制了输运。另一方面，无序也会破坏高度简并的平带，即恢复输运。如果加入一点小无序，CLS 在很大程度上被保留，即态依旧占据遍布整个格子的某些特定的格点，而此时小的无序带来的扰动是否会使得局域的 CLS 变成扩展的呢？那么自然而来的问题是，是否在二维无序系统中出现去局域化现象，或者在三维的无序系统中出现更丰富的性质。这些都是值得去研究的。

人造格子的成功制备，意味着先前的许多理论结果可以在实验中检验，新的理论工作也需要探索 and 解释。在理论上，大部分的平带晶格系统都仅仅只具有一条平带，而扩展的 Lieb 晶格可以具有多条平带，且其平带的数量可以自由控制。平带数量的增加可能会带来更加丰富的物理性质。在实验上，一方面，Lieb 晶格由于其简单的几何结构和丰富的物理性质，已经在许多实验系统中实现，包括光子系统^[112-114,117]，光学冷原子系统^[110,111]以及电子系统^[106,107]。另一方面，三维系统比二维系统具有更丰富的性质，而且从二维的 Lieb 晶格推广到三维的 Lieb 晶格也是具有可行性的。因此，Lieb 晶格是一个值得考虑的理想平带晶格模型。

此外，无序系统具有丰富的物理行为和性质，比如自旋玻璃 (Spin Glass)，非晶态材料 (Amorphous Materials)，高温超导体 (High-Temperature Superconductors)，自旋液体 (Spin Liquid) 等系统都表现出了令人惊异的现象。研究无序系统对于理解复杂性、量子相变以及凝聚态物质中的强关联效应具有重要意义。它们的研究有助于推动材料科学、凝聚态物理和量子信息等领域的发展。在此大背景下，研究无序与平带的相互作用的对于理解材料性质，揭示新物理现象和量子信息与存储器的应用等方面也具有较大意义。在理解材料性质方面，无序（如杂质、缺陷、杂化等）与平带的相互作用会对材料的电子结构和性质产生显著影响。通过研究平带与无序的相互作用，我们能够更深入地理解材料的局域化行为、电荷传输等关键物理过程。在揭示新物理现象方面，平带与无序的相互作用可能会导致一些新颖的物理现象的出现，例如“逆”Anderson 局域化、无序诱导的拓扑相变等。这些新物理现象的研究有助于推动基础物理学的发展，拓展我们对量子材料行为的理解。在量子信息与存储器方面，平带与无序的相互作用也具有重要的应用前景。研究无序对平带的影响，有助于发现新型的信息存储与处理机制。通过研究平带与无序的相互作用，可以为量子信息技术和量子计算等领域的发展提供新思路和设计指导。

第 2 章 模型与方法

2.1 晶格模型

2.1.1 扩展的 Lieb 模型 $\mathcal{L}_d(n)$

二维扩展的 Lieb 模型可以被认为是在正方形晶格的两个相邻格点之间均匀间隔地插入原子。相应的三维扩展的 Lieb 模型则可以被看成是在立方体晶格相邻的两个格点之间均匀的插入原子。符号 $\mathcal{L}_d(n)$ 代表在一个 d 维的格子（在本文中，仅考虑 $d = 2$ 和 3 ，即 $d = 2$ 的二维正方晶格与 $d = 3$ 的三维立方晶格）的相邻两格点之间等间距地插入 n 个原子，如图 2.1 所示。为了方便起见，将原始格子（立方格子或者正方格子）的格点称为 cube 格点或者 square 格点，用蓝色球标记，后来等间距插入的原子的格点称为 Lieb 格点，用红色球标记。

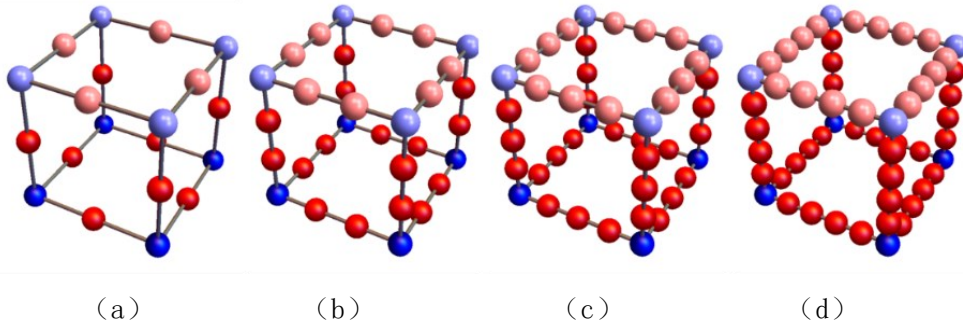


图 2.1 (a-d) Lieb 及其扩展模型 $\mathcal{L}_d(n)$ 的示意图。浅颜色的球代表二维的模型 $\mathcal{L}_2(n)$ ，浅颜色与深颜色球一起表示三维 Lieb 模型 $\mathcal{L}_3(n)$ 。蓝色的球在二维表示 square 格点，在三维表示 cube 格点，红色的球表示 Lieb 格点。(a) $\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_3(1)$ ，(b) $\mathcal{L}_2(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(2)$ ，(c) $\mathcal{L}_2(3)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ ，(d) $\mathcal{L}_2(4)$ 和 $\mathcal{L}_3(4)$ 。格点之间黑色的线是为了便于视觉观看，表示格点之间的跃迁。

2.1.2 基于 Lieb 格子 $\mathcal{L}_2(1)$ 的 Anderson 模型的 Wannier 表象

为了研究无序的影响，我们采用了 Anderson 模型。Anderson 模型^[1]是一个简单的单电子的由无序驱动导致金属—绝缘体转变的模型，其忽略的自旋轨道耦合，电子—电子之间的相互作用，以及磁场的影响。Anderson 模型的哈密顿量包含两项竞争项，一个随机的在位势能项，倾向于将粒子保持在能量最小值，另一个则是动能项，允许粒子从一个格点跃迁到另外的格点。从基于 Lieb 格子 $\mathcal{L}_2(1)$ 的 Anderson 模型的哈密顿量出发，给出如下形式，

$$H = \sum_{\vec{r}} \varepsilon_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| - \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} t_{\vec{r}\vec{r}'} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}'| \quad , \quad (2.1)$$

其中， $|\vec{r}\rangle$ 表示位于 $\mathcal{L}_2(1)$ 格点 $\vec{r} = (x, y)$ 的正交 Wannier 态， $\varepsilon_{\vec{r}}$ 是格点 $|\vec{r}\rangle$ 处的在位势能^[119]。通常，Anderson 无序是通过引入均匀随机分布的在位势能 $\varepsilon_{\vec{r}}$ ，即 $\varepsilon_{\vec{r}} \in [-W/2, W/$

2]。对于最近邻格点 \vec{r} 和 \vec{r}' 之间的跃迁积分 $t_{\vec{r}\vec{r}'}$ ，一般设置为 $t_{\vec{r}\vec{r}'} \equiv 1$ ，其它的情况则为 $t_{\vec{r}\vec{r}'} \equiv 0$ 。

在实空间的 Wannier 表象中，可以将哈密顿量写成矩阵的形式。具体来说，以尺寸 $M = 2$ 的 $\mathcal{L}_2(1)$ 为例详细阐述，且考虑硬边界条件。其中 M 代表以原胞格矢为单位的度量。 $\mathcal{L}_2(1)$ 的一个原胞中具有三个原子，因此尺寸为 $M = 2$ 的系统具有 $3 \times 2^2 = 12$ 个原子，即哈密顿量是 12×12 的矩阵，可以表示成如下形式，

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & \varepsilon_2 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & \varepsilon_3 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \varepsilon_4 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & \varepsilon_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \varepsilon_6 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_7 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & \varepsilon_8 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \varepsilon_9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & \varepsilon_{10} & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & \varepsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & \varepsilon_{12} \end{bmatrix}, \quad (2.2)$$

其中，在位格点势能 $\varepsilon_{\vec{r}}$ 服从均匀的随机分布。通过精确的对角化方法，可以获得12个本征值以及相应的12个本征态。

研究无序系统的方法基本上主要是基于对本征值和本征态的解析，比如基于本征值分析的能谱统计方法，这包含能级统计方法（ $P(s)$ ）和改进版的能级间距比率统计方法（ $P(r)$ 和 $P(|z|)$ 等），以及基于本征态分析的逆参与数（IPN）等，后面会进一步介绍。

2.2 $\mathcal{L}_2(n)$ 与 $\mathcal{L}_3(n)$ 的 CLS 的构造

为了深入地了解 $\mathcal{L}_2(n)$ 与 $\mathcal{L}_3(n)$ 的 CLS。首先通过精确的直接对角化方法考虑 $\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_2(2)$ 在小尺寸下的本征值和本征态，随后推论出其在热力学极限下的情况。其次，根据 $\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_2(2)$ 得到 $\mathcal{L}_2(n)$ 的一般化结果。接着，提供了一种构造 $\mathcal{L}_2(n)$ 的 CLS 的新方法。最后用类似的方法推导 $\mathcal{L}_3(n)$ 的情况。

2.2.1 $\mathcal{L}_2(1)$ 的 CLS

从包含有限个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$ 出发，专注其对应于平带的本征值和相应的本征态的分布。之后，可以推论出包含无穷个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$ 的本征值和本征态，即热力学极限下的情况。

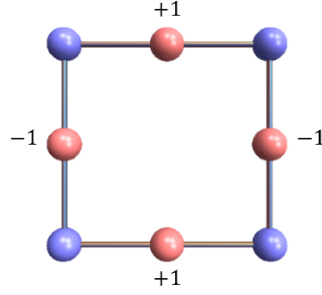


图 2.2 包含有 1 个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$ 格子, 及其本征值 $E = 0$ 的本征态的振幅的分布示意图。其中仅仅显示了非零的振幅值。

1. 含有有限个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$ 的本征值及本征态

首先, 从仅有 1 个小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$ 出发, 如图 2.2 所示。基于紧束缚方法, 其哈密顿量为

$$H = \sum_{\vec{r}} \varepsilon_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| - \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} t_{\vec{r}\vec{r}'} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}'|, \quad (2.3)$$

这里的 $|\vec{r}\rangle$ 表示 $\mathcal{L}_2(1)$ 的位于格点 $\vec{r} = (x, y)$ 的正交 Wannier 态, $\varepsilon_{\vec{r}}$ 是在位势能, 而 $t_{\vec{r}\vec{r}'}$ 则表示跃迁积分。为了方便起见, 将在位势能 $\varepsilon_{\vec{r}}$ 设为零, 最近邻之间格点的跃迁积分为 1, 而其它的则为零。

在 Wannier 表象中, 哈密顿的矩阵形式可以写成如下形式,

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & -1 & (-1) & 0 & (-1) & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ (-1) & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & (-1) \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ (-1) & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & (-1) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & (-1) & -1 & (-1) & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

其中, 括号中的 -1 表示周期性边界条件, 对于硬边界条件则为零。这里主要考虑周期性边界条件。经过精确的对角化以后我们得到了 8 个本征值和本征态。有一个能量 $E = 0$ 的本征态 $(0, 1, -1, 0, -1, 0, 1, 0)^T$, 将这些振幅绘制在图 2.2 中。显然, 在 square 格点的振幅都为零, 这是由于相邻 Lieb 格点的波在此处发生了相消干涉的原因。

进一步, 考虑包含 4 个小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$, 如图 2.3 所示。通过相同的方法获得 21 个相同的本征值和本征态。有四个简并的本征能 $E = 0$, 在图 2.3 (a-c) 中分别展示了其中三种本征态的情况。

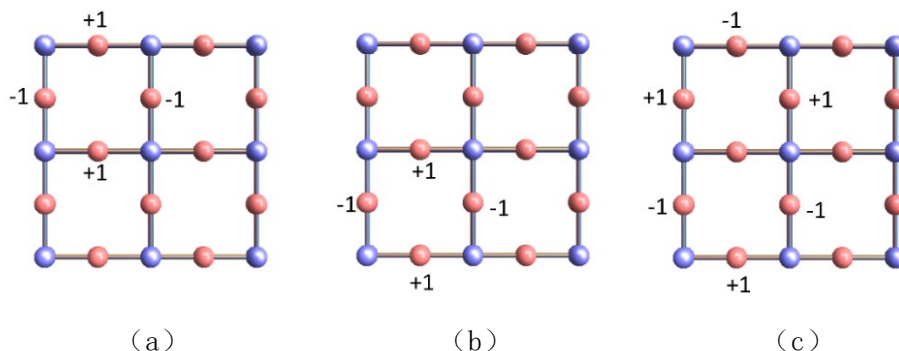


图 2.3 含有 4 个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$, 其中 (a-c) 分别是本征值 $E = 0$ 的三个本征态的振幅分布情况。为了清晰起见, 仅仅显示了非零的振幅值。

实际上, 由于本征能 $E = 0$ 是简并的, 因此它的本征态不是唯一的。举个简单的例子, 如果 H 的两个本征值 λ_1 和 λ_2 , 其相应的本征态分别为 ψ_1 和 ψ_2 。即等式 $H\psi_1 = \lambda_1\psi_1$ 和 $H\psi_2 = \lambda_2\psi_2$ 成立。当 $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ 时, 本征值 λ 是简并的。新的态 $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$ 也是 H 的本征值为 λ 的本征态, 因为

$$H\psi = H(a\psi_1 + b\psi_2) = a\lambda_1\psi_1 + b\lambda_2\psi_2 = a\lambda\psi_1 + b\lambda\psi_2 = \lambda(a\psi_1 + b\psi_2) = \lambda\psi. \quad (2.5)$$

显然, 图 2.3 (c) 所示的第三个本征态可以看成图 2.3 (a) 和 (b) 所示的两个本征态的简单叠加。然而, 可以提取出不可约的本征态, 它只占据了晶格的一个二维的小方块, 如图 2.3 (a) 和 (b) 所示。图 2.3 这样的格子有四个小方块, 分别是左上, 左下, 右上, 右下, 且正好对应了相应的四个简并 $E = 0$ 的本征能。

为了得到更多的信息, 进一步计算了包含 9 个小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$, 因此得到了 9 个 $E = 0$ 的本征值, 其相应的本征态的振幅仅仅占据 Lieb 格点, 如图 2.4 所示。

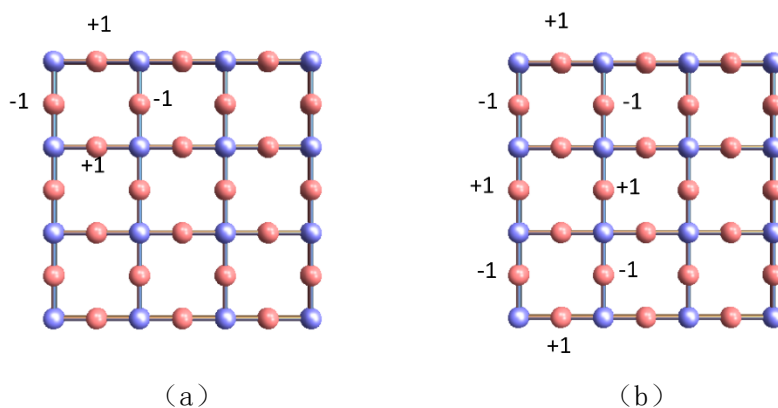


图 2.4 包含有 9 个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$ 。(a-b) 分别是本征值 $E = 0$ 的两个本征态的振幅分布情况。为了清晰起见, 仅仅显示了非零的振幅值。

2. 含有无穷多个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$ 的 CLS 的推论

由上述结果, 可以推断出在热力学极限下, $\mathcal{L}_2(1)$ 有无穷多个能量 $E = 0$ 的本征态。基于能带理论, 这些高度简并的本征能形成了一个特殊的能带, 由于其在 $k - E$ 空间

中是一条水平的直线，所以被称之为平带。它们相应的本征态也不是唯一的，但可以提取出它们不可约表示的本征态，其仅仅占据一个小方块内的 Lieb 格点。这些在实空间表示中的对应于高度简并能量的本征态被称为紧凑局域态，即 CLS。

2.2.2 $\mathcal{L}_2(2)$ 的 CLS

与 $\mathcal{L}_2(1)$ 相似，重复前面的步骤，计算包含有限个小方块的 $\mathcal{L}_2(2)$ 的本征值和本征态。再推论出热力学极限下的情况。

1. 含有有限个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(2)$ 的本征值及本征态

首先，转向仅含有 1 个小方块的 $\mathcal{L}_2(2)$ ，分别获得了一个本征值 $E = -1$ 和 $E = 1$ 的本征态，将其分别相应地绘制在图 2.5 (a) 和 (b) 中。发现本征态的振幅都仅仅在 Lieb 格点非零，在 square 格点均为零。

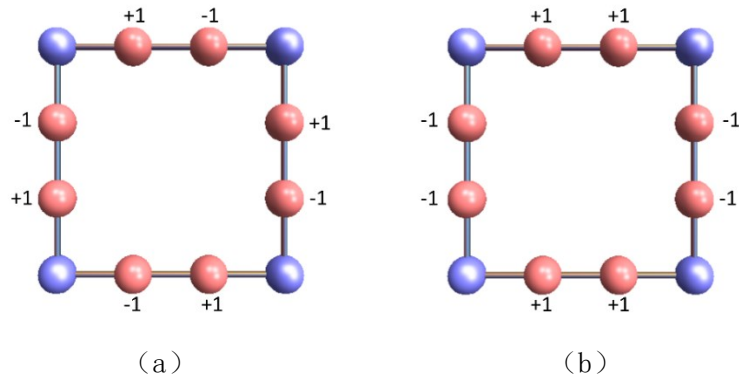


图 2.5 包含有 1 个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(2)$ 。(a-b) 分别是本征值 $E = -1$ 和 $E = 1$ 的两个本征态的振幅分布情况。为了清晰起见，仅仅显示了非零的振幅值。

此外，进一步考虑包含有 4 个小方块的 $\mathcal{L}_2(2)$ 。意料之中，分别得到 4 个 $E = -1$ 的本征值和 4 个 $E = 1$ 的本征值，其相应的本征态之一分别展示在图 2.6 (a) 和 (b) 中。

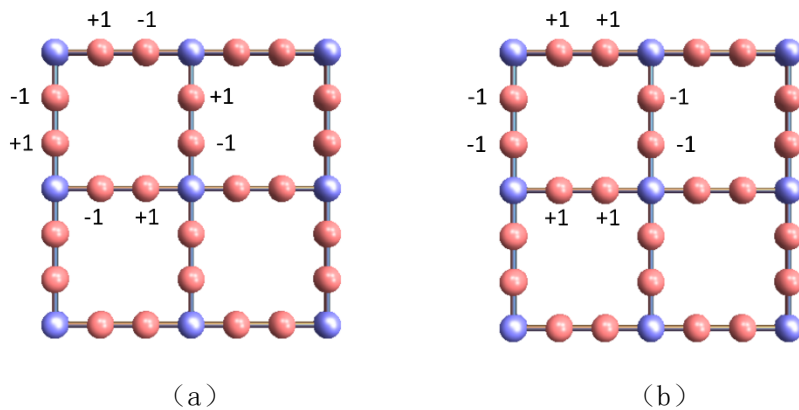


图 2.6 包含有 4 个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(2)$ 。(a-b) 分别是本征值 $E = -1$ 和 $E = 1$ 的两个本征态的振幅分布情况。为了清晰起见，仅仅显示了非零的振幅值。

2. 含有无穷多个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(2)$ 的 CLS 的推论

根据以上的结果, 推测在热力学极限下有无穷多个能量 $E = 1$ 和 $E = -1$ 的本征值, 其分别在 $k - E$ 空间形成了 $E = 1$ 和 $E = -1$ 的平带。它们相应的不可约的本征态仅仅占据在一个小方块内的 Lieb 格点上。

2.2.3 $\mathcal{L}_2(n)$ 的 CLS

显然, 基于上述结果, 可以推测对于 $\mathcal{L}_2(n)$, 有 n 个简并的平带。因此, 对于任意的 n , 存在 n 族宏观简并的局域紧凑态, 即 CLS, 所有这些态都仅仅在相应晶格的一个二维小方块内的 Lieb 格点具有振幅, 如图 2.7 所示。由于我们只考虑了 n 最大取值 4, 因此只展示了这四种情况。

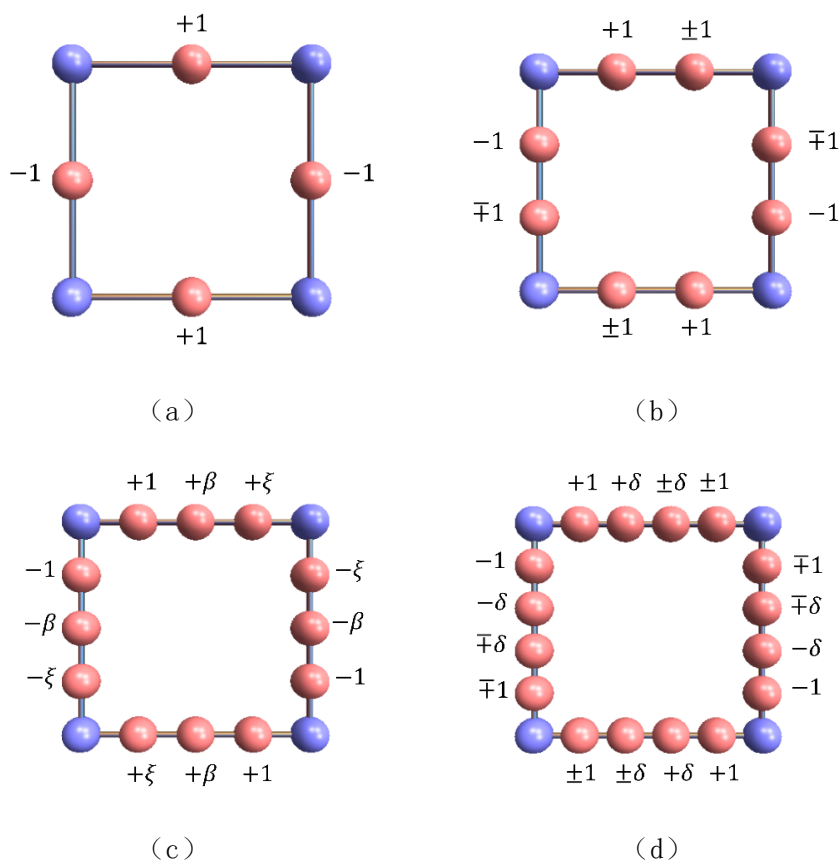


图 2.7 (a-d) 分别是仅含有一个 Lieb 小方块的 $\mathcal{L}_2(1)$, $\mathcal{L}_2(2)$, $\mathcal{L}_2(3)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$, 及相应平带处的本征态的振幅分布情况。其中相应的平带的本征能量为 (a) $E = 0$, (b) $E = \pm 1$, (c) $E = \beta = 0, \pm\sqrt{2}$, 其中对于 $\beta = \pm\sqrt{2}$, $\xi = +1$, 而对于 $\beta = 0$, $\xi = -1$, 和 (d) $E = \pm\delta$, 其中, $\delta = \frac{1}{2}(1 \pm \sqrt{5})$ 。

由于上述方法是通过直接对角化引入的, 很难在大规模系统中推广。在此基础上, 我们提出了一种新的构造任意 n 的 $\mathcal{L}_2(n)$ 的 CLS。由于 $\mathcal{L}_2(n)$ 的不可约 CLS 仅仅在晶格中的一个二维的小方块中的 Lieb 格点上具有非零振幅。因此, 这自然引导我们将注意力集中在四个相邻 square 格点围成的二维小方块内。图 2.8 (a) 的左侧的

绿色区域标记了一个这样的二维小方块，考虑一个由这个小方块任意一条边的 n 个 Lieb 格点构成的一维链，由这个链构成的孤立系统具有 n 个本征态，其中任意一个本征值为 λ_j 的本征态被标记为 $v^j = (v_1^j, \dots, v_n^j)$ ，细节见图 2.8 (a)。 $\mathcal{L}_2(n)$ 的 CLS 的构造可以通过沿着这个小方块的边循环实现，如图 2.8 (b) 详细展示了这个过程。从小方块左上角出发，沿着边顺时针旋转，构造的过程分为以下 4 个步骤，

步骤 1: 沿着上边界考虑 v^j 的振幅。因此靠近左上角 square 格点与右上角 square 格点的 Lieb 格点的振幅分别为 v_1^j 和 v_n^j ;

步骤 2: 为了确保在右上角 square 格点发生相消干涉(用黄色的闪电符号表示)，设置小方块右边界的最上面一个 Lieb 格点的振幅为 $-v_n^j$ 。右边界剩下的 $n - 1$ 个 Lieb 格点上的振幅从上往下分别依次是 $-v_{n-1}^j, -v_{n-2}^j, \dots, -v_1^j$ ，其下标是从 $n - 1$ 依次递减至 1 的自然数。

步骤 3: 与步骤 2 类似，确保右下角 square 格点发生相消干涉(用黄色的闪电符号表示)，设置下边界最右边的 Lieb 格点的振幅为 v_1^j ，右边界剩下的 $n - 1$ 个 Lieb 格点上的振幅从右往左分别依次是 $v_2^j, v_3^j, \dots, v_n^j$ ，下标是从 2 依次递增至 n 的自然数。

步骤 4: 确定左下角 square 格点发生相消干涉(用黄色的闪电符号表示)，设置左边界最下面的 Lieb 格点的振幅为 $-v_n^j$ 。左边界剩下的 $n - 1$ 个 Lieb 格点上的振幅从下往上分别依次是 $-v_{n-1}^j, -v_{n-2}^j, \dots, -v_1^j$ ，下标是从 $n - 1$ 依次递减至 1 的自然数。此时也确保了左上角的 square 格点发生相消干涉。

这个迭代程序产生了一个紧凑的能量本征态 λ_j 。由于在这个具有 n 个 Lieb 格点构成的一维链中，有 n 个不同的本征值 $\lambda_i \neq \lambda_j$ (其中 $i \neq j$) 以及相应的本征态 $\{v^i\}_{i=1}^n$ ，因此，上述构造 CLS 的过程对每一个 λ_i 实施一次，即可以重复 n 次。对于 $\mathcal{L}_2(n)$ 可以产生 n 族 CLS，因此也是 n 个平带，能量分别为 $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$ 。

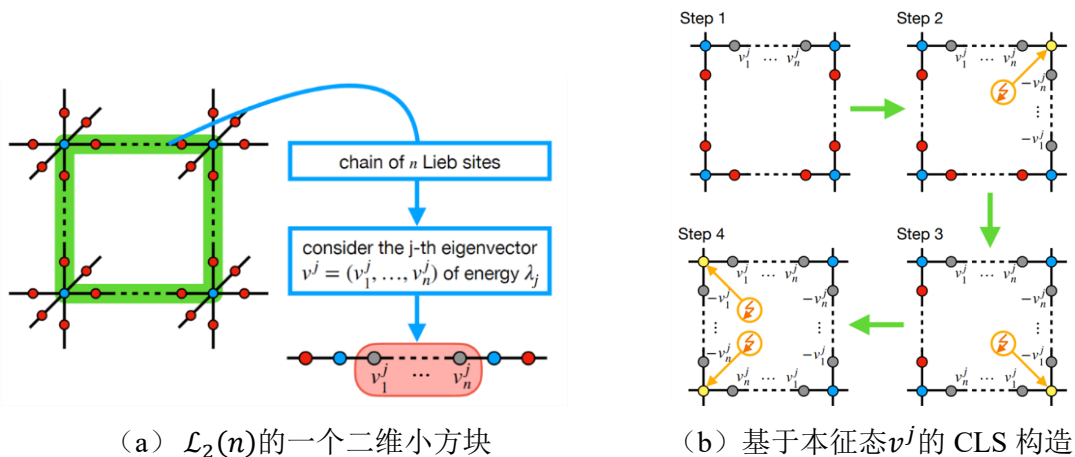


图 2.8 $\mathcal{L}_2(n)$ 的一个二维小方格子 (绿色区域) 的图示。考虑沿着小方格子的任意一条边上的在两个 square 格点间的 n 个 Lieb 格点组成的一维链，随机选择它的任意一个本征值 λ_j 及其对应的本征态 v^j ，在图中高亮显示出来。(b) 四步构造 $\mathcal{L}_2(n)$ 的 CLS，选择能量为 λ_j 的本征态 v^j ，将其绕此二维小方块循环。每一步用黄色闪电符号标记发生相消干涉的 square 格点。

2.2.4 $\mathcal{L}_3(n)$ 的 CLS

为了求 $\mathcal{L}_3(n)$ 的 CLS, 与分析 $\mathcal{L}_2(n)$ 类似, 首先考虑仅有1个 Lieb 小立方格子的 $\mathcal{L}_3(1)$ 。通过直接对角化方法计算本征值和本征态, 并解析其分布情况。随后可以外推到无穷大体系下的任意 n 的 $\mathcal{L}_3(n)$ 情况。

1. 含有有限个 Lieb 小立方格子的 $\mathcal{L}_3(1)$ 的本征值及本征态

从仅包含1个 Lieb 小立方格子的 $\mathcal{L}_3(1)$ 出发, 如图 2.9 (a) 所示, 在周期性边界条件下获得了5个 $E = 0$ 的本征值, 将其中一个本征态绘制在图 2.9 (b) 中, 其仅仅展示了从图 2.9 (a) 中截取下来的上一层原子, 由于 $E = 0$ 的这个本征态在图 2.9 (a) 中剩下来的原子上的振幅都为零。令人惊讶的是, 这个分布和二维的 $\mathcal{L}_2(1)$ 的情况完全相同。当然, 上层的位置并不特殊, 六个面是等价的, 即这5个本征态的振幅分别位于图 2.9 (a) 中任意一个二维面的 Lieb 格点, 或者是多个面的 Lieb 格点的叠加。

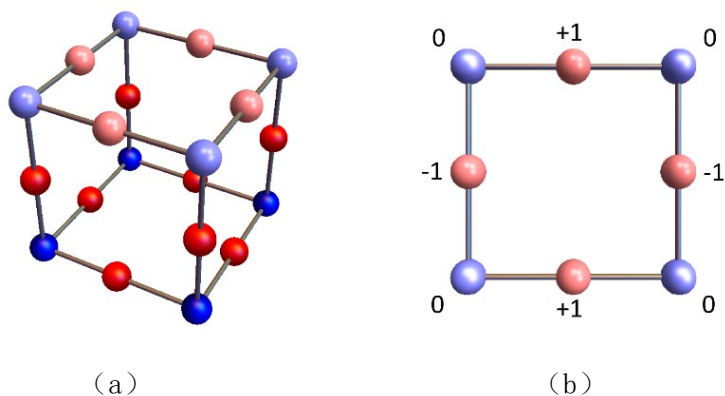


图 2.9 (a) 仅含有1个 Lieb 小立方格子的 $\mathcal{L}_3(1)$, 上层用浅红色/浅蓝色标记的原子表示一个二维的 Lieb 小方块。(b) 为图 (a) 中截取的上层浅颜色标记的原子层, 以及本征值 $E = 0$ 的一个本征态的振幅分布。由于图 (a) 中深颜色的原子上的振幅均为零, 因此仅仅只将上层原子振幅的分布展示在图 (b) 中。

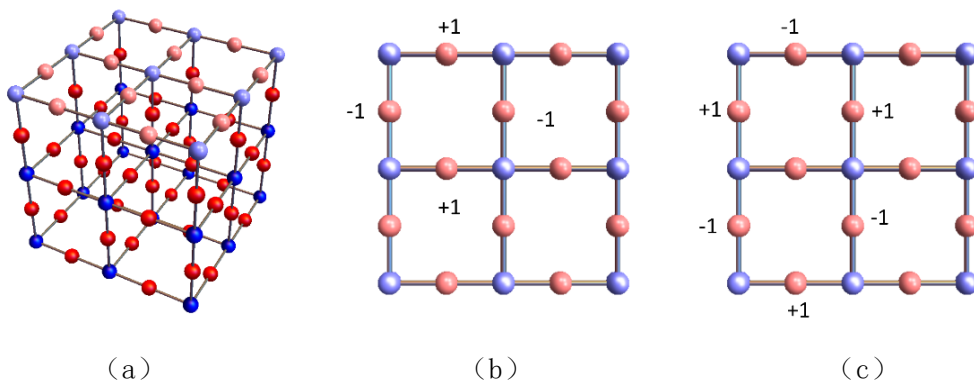


图 2.10 (a) 含有8个 Lieb 小立方格子的 $\mathcal{L}_3(1)$, 上层用浅红色/蓝色标记的原子表示一个相应的二维的 $\mathcal{L}_2(1)$ 。(b) 和 (c) 为图 (a) 中截取的上层浅颜色标记的原子层, 分别展示了本征值 $E = 0$ 的两个本征态的振幅分布。由于图 (a) 中深颜色的原子上的振幅均为零, 因此仅仅只将上层原子振幅的分布展示在图 (b) 和 (c) 中。

随后，计算包含 8 个 Lieb 小立方体的 $\mathcal{L}_3(1)$ ，如图 2.10 (a) 所示，在周期性边界条件下得到 28 个 $E = 0$ 的本征值。和图 2.9 的情况一样，图 2.10 (b) 和 (c) 是和从图 2.10 (a) 中截取的上层原子。其中两个本征态展示在图 2.10 (b) 和 (c) 中，这也和 $\mathcal{L}_2(1)$ 的情况一样。相似的，图 2.10 (a) 中有 9 个和图 2.10 (b) 和 (c) 一样的面。可以简单地推断出这 28 个本征值 $E = 0$ 的态仅仅占据一个二维的小方块或者这 9 个面的其它二维小方块的叠加态。

此外也进一步计算了仅包含一个 Lieb 小立方体的 $\mathcal{L}_3(2)$ ，如图 2.11 (a) 所示。在图 2.11 (b) 和 (c) 中分别展示了 $E = -1$ 和 $E = 1$ 的本征态，由于要展示的这两个本征态仅仅占据图 2.11 (a) 上层的一个原子层的 Lieb 格点，所以图 2.11 (b) 和 (c) 仅仅是图 2.11 (a) 的上层原子的截面。类似地，六个面是等价的。图 2.11 (b) 和 (c) 和图 2.5 (a) 及 (b) 展示的相应的二维情况完全一样。

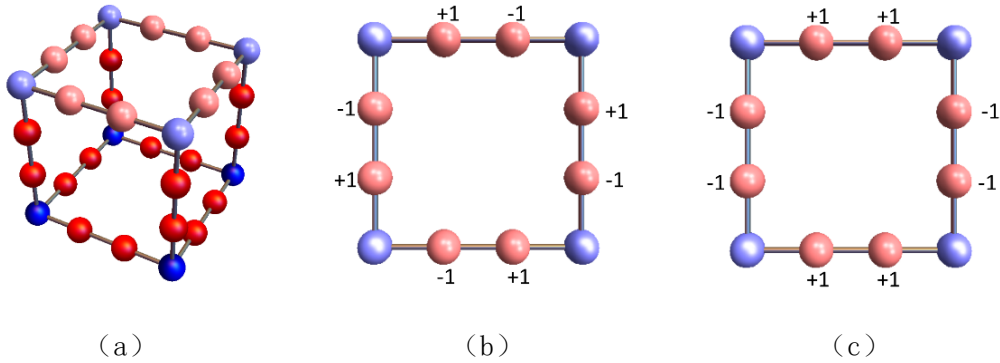


图 2.11 (a) 仅含有 1 个 Lieb 小立方体的 $\mathcal{L}_3(2)$ ，上层用浅红色/蓝色标记的原子表示一个相应的二维的 $\mathcal{L}_2(2)$ 。(b-c) 为图 (a) 中截取的上层浅颜色标记的原子层，分别展示了本征值 $E = -1$ 和 $E = 1$ 的两个本征态的振幅分布。由于图 (a) 中深颜色的原子上的振幅均为零，因此仅仅只将上层原子振幅的分布展示在图 (b-c) 中。

2. 含有无穷多个 Lieb 小立方体的 $\mathcal{L}_3(n)$ 的 CLS 的推论

因此，基于目前的结果，可以简单地得出如下的推论结果。可以基于 $\mathcal{L}_2(n)$ 来求解 $\mathcal{L}_3(n)$ 的 CLS，即任意选取一个 $\mathcal{L}_3(n)$ 的一个面，将问题转换为 $\mathcal{L}_2(n)$ 的问题，然后重复之前的步骤求取 CLS。

值得说明的是， $\mathcal{L}_3(n)$ 和 $\mathcal{L}_2(n)$ 之间是有区别的，对于任意的 n ， $\mathcal{L}_3(n)$ 有 n 个双重简并的平带，而 $\mathcal{L}_2(n)$ 则是有 n 个一重简并的平带。因此，对于任意的 n ，存在 $2n$ 族宏观简并的 CLS，它们均在一个二维的小格子的 Lieb 具有非零振幅。由于 $\mathcal{L}_3(n)$ 的每个原胞中含有 $3n + 1$ 个原子，因此它拥有 $3n + 1$ 条布洛赫能带。考虑一个每条边含有 N 个原胞立方体的 $\mathcal{L}_3(n)$ 的立方状格子，每一条带拥有 N^3 个态。这样考虑的一个 $\mathcal{L}_3(n)$ 格子可以支持 $3N^3$ 个 CLS，即和含有的二维小方块的数量一致。然而，很容易得出，其中 N^3 个 CLS 是剩下的态的线性组合，产生了 $2N^3$ 个能量为 λ_j 的不可约的 v^j 。因此，这些态在 $\mathcal{L}_3(n)$ 的双重简并的本征能 $E = \lambda_j$ 处形成了两个平带。对于含有 n 个 Lieb 格

点的一维链，其存在 n 个 $\lambda_i \neq \lambda_j$ 的本征值以及其相应的本征态 $\{v^i\}_{i=1}^n$ ，这种构造方法可以重复 n 次，即对于 $\mathcal{L}_3(n)$ 产生 n 族 CLS，更准确地说是 n 个双重简并的平带。

2.3 转移矩阵方法

转移矩阵方法（TMM）作为计算无序系统局域化长度的数值迭代方法，得到了广泛的应用。该方法有两个优点，一是不需要计算波函数，这可以避免大尺寸的数值计算。二是可以在计算开始之前控制和选择精度。该方法通过高度优化的矩阵矢量计算，根据系统单粒子定态薛定谔方程，考虑电子沿着固定横截面（线）为 M^2 （ M ）的准一维棒（条）转移。迭代获得自平均量一局域化长度 $\lambda_M(E, W)$ 的估计值，之后定义一个无量纲的约化局域化长度 $\Lambda_M = \lambda_M(E, W)/M$ ，可以理解为以宽度 M 为单位长度的局域化长度。在经过足够的矩阵向量计算之后，如果误差在可接受的范围内，则被认为是收敛的。这里的足够意味着电子在纵向方向上（沿着棒/条带的方向）转移的次数 \tilde{M} ，即矩阵适量计算的次数，一般为 $\tilde{M} > 10^7 - 10^9$ ，即 $\tilde{M} \gg M$ ^[120,121]。

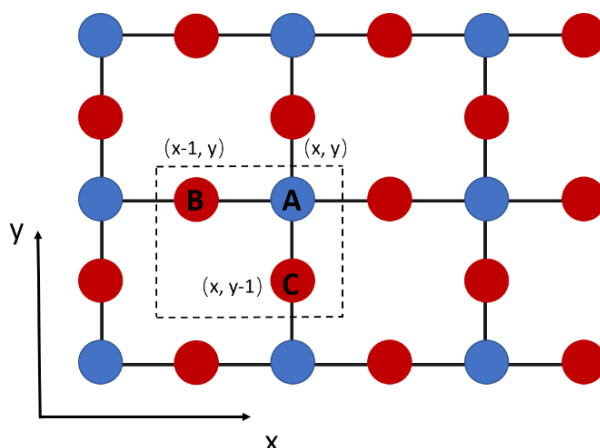


图 2.12 Lieb 模型 $\mathcal{L}_2(1)$ 图示。图中虚线所围的原子 A, B 和 C 构成了一个原胞，且用括号标记了其相应的坐标。黑实线表示的是近邻原子之间的跃迁。 y 方向为横截面方向， x 方向为纵向传播方向。

为了让解释更加具体，以模型 $\mathcal{L}_2(1)$ 作为例子。从 Wannier 表象下的定态薛定谔方程 $H\Psi = E\Psi$ 作为出发点，其中哈密顿量 H 表示为方程 2.3。图 2.12 画出 $\mathcal{L}_2(1)$ 的一个示意图，如果将一个原胞中的原子 A, B 和 C 分别用坐标 (x, y) , $(x - 1, y)$ 和 $(x, y - 1)$ 标记。则在原子 A, B 和 C 上的波函数振幅分别满足如下方程形式，

$$E\psi_{x,y}^A = \varepsilon_{x,y}\psi_{x,y}^A - t\psi_{x-1,y}^B - \psi_{x+1,y}^B - t\psi_{x,y-1}^C - t\psi_{x,y+1}^C, \quad (2.6)$$

$$E\psi_{x,y}^B = \varepsilon_{x,y}\psi_{x,y}^B - t\psi_{x-1,y}^A - t\psi_{x+1,y}^A, \quad (2.7)$$

$$E\psi_{x,y}^C = \varepsilon_{x,y}\psi_{x,y}^C - t\psi_{x,y-1}^A - t\psi_{x,y+1}^A, \quad (2.8)$$

其中格点势能 $\varepsilon_{x,y}$ 服从随机均匀分布 $[-W/2, W/2]$, t 是跃迁强度, E 表示能量。

通过用 ψ^A 表示 $\psi_{x,y}^C$, 方程 2.8 可被表示为 $\psi_{x,y}^C = (-t\psi_{x,y-1}^A - t\psi_{x,y+1}^A)/(E - \varepsilon_{x,y})$, 再将 $\psi_{x,y}^C$ 的表达式插入方程 2.6, 可以得到

$$\begin{aligned} \psi_{x+1,y}^B = & \left(\frac{\varepsilon_{x,y} - E}{t} \frac{t}{\varepsilon_{x,y-1} - E} - \frac{t}{\varepsilon_{x,y+1} - E} \right) \psi_{x,y}^A - \psi_{x-1,y}^B - \frac{t}{\varepsilon_{x,y-1} - E} \psi_{x,y-2}^A \\ & - \frac{t}{\varepsilon_{x,y+1} - E} \psi_{x,y+2}^A. \end{aligned} \quad (2.9)$$

将其写成以下矩阵的形式,

$$\begin{pmatrix} \psi_{x+1,y}^B \\ \psi_{x,y}^A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{O}_{x,y} & -\mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{x,y}^A \\ \psi_{x-1,y}^B \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

其中, $\tilde{O}_{x,y} = \frac{\varepsilon_{x,y} - E}{t} - \left(\frac{t}{\varepsilon_{x,y-1} - E} + \frac{t}{\varepsilon_{x,y+1} - E} \right) - \Pi_2 \left(\frac{t}{\varepsilon_{x,y-1} - E} + \frac{t}{\varepsilon_{x,y+1} - E} \right)$, Π_2 是在 y 方向上相邻 A 原子之间跃迁。然后, 对 y 求和, 即对于一个给定的切面 (即固定的 x), 将切片上所有 A 原子的振幅以矩阵形式表示, 标记为 ψ_x^A , 因此可以获得矩阵方程 2.10 的一般通用形式, 用 $T_{A \rightarrow B}$ 来标记波矢量振幅沿着 x 轴方向从格点 A 转移到格点 B , 这个通用形式可以表示为

$$\begin{pmatrix} \psi_{x+1}^B \\ \psi_x^A \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{A \rightarrow B} \begin{pmatrix} \psi_x^A \\ \psi_{x-1}^B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{S}_{x,y} & -\mathbf{1}_M \\ \mathbf{1}_M & \mathbf{0}_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_x^A \\ \psi_{x-1}^B \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

其中, $\tilde{S}_{x,y} = \left(\frac{\varepsilon_{x,y} - E}{t} - \frac{t}{\varepsilon_{x,y-1} - E} - \frac{t}{\varepsilon_{x,y+1} - E} \right) \mathbf{1}_M - \left(\frac{t_y}{\varepsilon_{x,y-1} - E} + \frac{t_y^\dagger}{\varepsilon_{x,y+1} - E} \right)$, $\mathbf{1}_M$ 和 $\mathbf{0}_M$ 分别是 $M \times M$ 的单位矩阵和零矩阵, t_y 也是 $M \times M$ 的矩阵,

$$t_y = t \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ (1) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

t_y^\dagger 是 t_y 的复共轭形式。 t_y^\dagger 和 t_y 是 Π_2 的一般化形式, 表示在一个固定 x 值的 y 方向上所有 A 原子之间的跃迁矩阵。在 t_y 矩阵的左下角的括号里面的 1 表示周期性边界条件, 如果为零则表示的是硬边界条件。在上述的推导中, 为了确保转移矩阵具有 $2M \times 2M$ 大小的形式, 我们将 C 原子的作用有效地重整化到有效的格点势能中, 并改变了垂直方向 (y 方向) 上的跃迁大小。方程 2.11 的左上角有一项 $\frac{\varepsilon_{x,y} - E}{t} \mathbf{1}_M \equiv$

$\text{diag}\left(\frac{\varepsilon_{x,1}-E}{t}, \frac{\varepsilon_{x,2}-E}{t}, \dots, \frac{\varepsilon_{x,M}-E}{t}\right)$ 。采用相同的步骤，方程 2.7 可以被写成如下的形式，

$$\begin{pmatrix} \psi_{x+1}^A \\ \psi_x^B \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{B \rightarrow A} \begin{pmatrix} \psi_x^B \\ \psi_{x-1}^A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\varepsilon_{x,y}-E}{t}\right) \mathbf{1}_M & -\mathbf{1}_M \\ \mathbf{1}_M & \mathbf{0}_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_x^B \\ \psi_{x-1}^A \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

其中 $\mathbf{T}_{B \rightarrow A}$ 表示波矢量振幅沿着 x 轴方向从格点 B 转移到格点 A。

简而言之，基于转移矩阵方法模拟 $\mathcal{L}_2(1)$ 模型的步骤可以表述为：首先，考虑一个长度 $\tilde{M} \gg M$ 的准一维条带，其中 M 和 \tilde{M} 分别是在 y 轴和 x 轴方向上的原胞的数量，传播方向为 x 方向，如图 2.12 所示。其次，转移矩阵的过程包含沿着 x 方向的两个不同的转移矩阵， T_{AB} 和 T_{BA} ，进行迭乘，即让这些矩阵以迭乘形式 $T_{AB}T_{AB} \dots T_{BA}T_{AB}$ 作用于初始完备态 $\psi_x^A(1) = (1, 0, \dots, 0)$ ， $\psi_x^A(2) = (0, 1, \dots, 0)$ ， \dots ， $\psi_x^A(M) = (0, 0, \dots, 1)$ 。第三，由于转移矩阵方法的数值不稳定性，会导致最小的 Lyapunov 指数 γ_{min} 信息的丢失。而所要求解的局域化长度 λ 又正好定义为最小 Lyapunov 指数 γ_{min} 的倒数，即 $\lambda = 1/\gamma_{min}$ ，因此需要至少在每 10 次矩阵迭乘之后使用一次 Gram-Schmidt 方法^[122]重整化这 M 个态，最后获得 γ_{min} ，并学习其方差累积变化，这个过程持续到 γ_{min} 达到了预期的精度为止。对于一个给定能量 E 和无序 W ，可以得到局域化长度，即 $\lambda(M, E, W) = 1/\gamma_{min}$ ^[22,123-125]。最后，由于约化局域化长度 $\Lambda_M \equiv \lambda/M$ 会被应用于有限大小标度理论中，因此需要讨论 Λ_M 的标准误差，标记为 $\Delta(\Lambda_M)$ ，其可以写成如下形式，

$$\Delta(\Lambda_M) = \Delta\left(\frac{\lambda}{M}\right) = \frac{1}{M} \Delta\lambda = \frac{1}{M} \Delta \frac{1}{\gamma_{min}} \sim \frac{1}{M} \frac{1}{\gamma_{min}^2} \Delta\gamma_{min}, \quad (2.14)$$

其中， $\Delta\gamma_{min}$ 是 γ_{min} 的标准误差。对于其它的扩展模型 $\mathcal{L}_2(n)$ 和 $\mathcal{L}_3(n)$ ，由于其构造的基本思想和 $\mathcal{L}_2(1)$ 一致，因此避免赘述不在这里讨论。详情请参考论文^[119,120]。

2.4 能谱统计方法

2.4.1 精确矩阵对角化和稀疏矩阵对角化方法

首先通过精确对角化方法来获取无序系统的本征能谱。然而，由于计算资源的限制，只能通过精确对角化方法来处理小尺寸系统。通常对于一个有 N 个粒子的系统，哈密顿量是一个 $N \times N$ 的矩阵，精确对角化方法会给出我们全部的能谱，即 N 个能量本征值。有一个数值程序 *Jadamilu*，它权衡了可求取的本征值数量与计算系统尺寸的大小，给出了更适合的方案。该程序仅仅关注于求解给定目标值附近的本征值，解得的本征值数量可以预先给定（这个值一般远远小于 N ），以此来达到在相同的机器条件下求取更大尺寸系统的目的。举例来说，如果设置目标能量和求解目标能量附近本征值的个数分别为 E_t 和 n ，其中 $n \ll N$ ，则此程序会返回 n 个靠近 E_t 的本征值，且在相

同的机器条件下，可计算的系统尺寸 N' 要远远大于 N 。更多细节可以参考^[126]。

2.4.2 能谱带隙比值统计方法

一般情况下，基于随机矩阵理论（RMT）框架，通过对量子系统的哈密顿量的能级分布进行统计分析，从而可以得到物理系统的一些局域性质。其中能级统计（ELS）已经被证实是描述金属—绝缘体转变的一个有力的工具。然而，由于在不同的能级区间内的能级间距和局部态密度 $\rho(E)$ 直接存在着直接的联系，对于不同的能级区间直接计算相邻能级间距的分布 $P(s)$ ，会得到不同的结果，这使得无法对能谱统计进行研究^[127]。因此，必须对原来的能谱执行一个展开（unfolding）程序^[128-130]。

在 2007 年，Oganesyan 和 Huse^[131]提出了一种新的统计方法，由于其不依赖于局部态密度，因此不需要执行上面所说的展开程序。考虑一个数值由小到大排列的能谱 $\{E_i\}$ ，相邻的间隙比值定义为

$$0 \leq r_i = \min(s_i, s_{i+1}) / \max(s_i, s_{i+1}) \leq 1, \quad (2.15)$$

其中， $s_i = E_i - E_{i-1}$ 。 r 值在扩展态区域服从高斯正交矩阵系综（GOE）的分布 $P(r)$ ，而在局域态区域则满足泊松分布，如图 2.13 所示。对于高斯正交矩阵系综（GOE），其数值均值 $\langle r \rangle = \int_0^1 r P(r) dr = 0.5295$ ^[131]；解析解则给出 $\langle r \rangle_{sur} = 4 - 2\sqrt{3} \approx 0.53590$ ^[132]。对于 Poisson 分布，其均值为 $\langle r \rangle_{Poi} = 2 \ln 2 - 1 \approx 0.386$ 。金属—绝缘体转变的行为映射在 r 值统计中可以表述为均值 $\langle r \rangle$ 在临界点 W_c 从 0.5295 变为 0.386。然而，在实际的计算中，由于有限大小的尺寸效应，这个变化趋势是光滑的，随着系统尺寸的增大，这个变化趋势就愈发陡峭，在热力学极限下最终变成一条垂线（垂线位置的值即表示临界无序 W_c ）。

最近的文献^[133,134]中引进的一种新的测量方法，通过定义一个扩展的带隙比值

$$|z_i| = |E_i - E_{NN}| / |E_i - E_{NNN}|, \quad (2.16)$$

其中， E_{NN} 和 E_{NNN} 分别是与 E_i 最近邻和次近邻的本征能。对于扩展态和局域态的 $|z|$ 的分布和平均值 $\langle |z| \rangle$ 也展示在图 2.13 中。平均值 $\langle |z| \rangle$ 从 $\langle |z| \rangle_{ext} = 0.5687(1)$ 到 $\langle |z| \rangle_{loc} = 0.5000(1)$ 的变化对应于金属—绝缘体的转变，其中这些值分别是通过计算 1000 个服从 GOE 分布的大小为 20000×20000 的独立随机的构型矩阵，以及 1000 个随机对角元的 20000×20000 的对角矩阵所得到的。我们也用相同的方法进一步计算了 $\langle r \rangle_{GOE} = 0.5307(1)$ ，这与 Atas 等人^[132]获得的最佳拟合值非常一致。

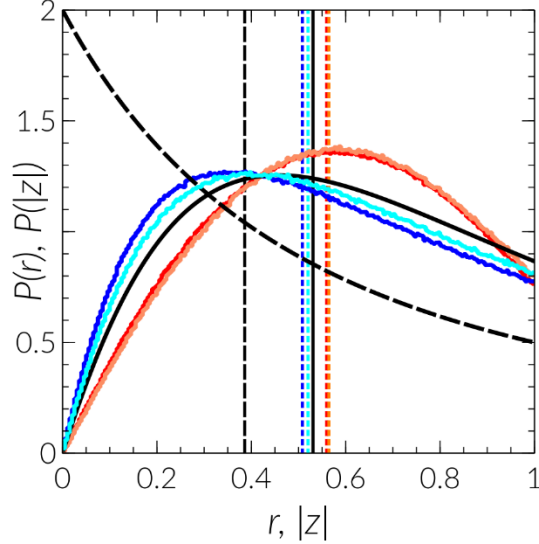


图 2.13 能级比率 r （深蓝线和浅蓝线）和 $|z|$ （深红线和浅红线）分布图。图中的数据来源于三维 Lieb 模型（Liu et al., 2020），系统大小为 44^3 个格点，每一条曲线选取大约 $\sim 8 \times 10^6$ 个比率值计算平均值。深颜色表示稍微更大的无序情况。黑色的虚线和实线分别表示精确的 $P_{Poisson}(r)$ 和假说对应的 $P_{GOE}(r)$ 。目前还没有关于 $P(|z|)$ 的预测（Luo et al., 2021）。垂直的虚线/实线是相应的平均值，精确 $P_{Poisson}(r)$ （黑色虚线）的 $\langle r \rangle$ 值，对应假说的 $P_{GOE}(r)$ （黑色实线）的 $\langle r \rangle$ 值，数值结果（深/浅蓝色）的 $\langle r \rangle$ 值以及数值结果（深/浅红色）的 $\langle |z| \rangle$ 值。图文引用自文章^[135]。

2.4.3 参与数 P 和逆参与数比 IPR

上面介绍的 r 统计和 z 统计是基于能谱的统计方法。接下来介绍一种基于本征态的测量方法。该方法也是从定态薛定谔方程出发

$$H\Psi_i = E_i\Psi_i, \quad (2.17)$$

其中 E_i 和 Ψ_i 是本征值和本征态。基于 Wannier 基矢 $|j\rangle$ 展开本征态 $\{\Psi_i\}$,

$$\Psi_i = \sum_j \psi_j^{(i)} |j\rangle, \quad (2.18)$$

其中 $\psi_j^{(i)}$ 是本征态 Ψ_i 在格点 j 的投影振幅。通过引入一个叫做参与数（ P ）的量，则逆参与比率（IPR）^[136]定义为

$$\text{IPR} = 1/P(E_i) = \sum_j |\psi_j^{(i)}|^4, \quad (2.19)$$

可以根据IPR或者 P 的值来区分扩展态和局域态。首先，考虑将 P 作为度量。对于扩展态，由于态会扩散到整个系统（假设系统的尺寸是 N ），在格点位置 j 处找到态 Ψ_i 的概率为 $|\psi_j^{(i)}|^2 \sim 1/N$ ，根据上式，此时 P 值满足方程

$$1/P(E_i) = \sum_j |\psi_j^{(i)}|^4 = \sum_j \left(\frac{1}{N}\right)^2 = \frac{N}{N^2} = \frac{1}{N}, \quad (2.20)$$

即，对于扩展态有 $P(E_i) \sim N$ 。对于局域态，在局域区域（假设区域区域的大小为 M ，其中 $0 < M \ll N$ ） $|\psi_j|^2$ 是一个有限的介于 $(0,1]$ 的数，而在局域区域之外， $|\psi_j|^2$ 则是 0。因此，对于局域态，可以得到 $P(E_i) \sim M$ 。更直观来说，参与数 P 是态占据系统的格点数；对于扩展态，由于可以占据整个整个系统地格点，所以 $P \sim N$ ，而对于局域态，由于其局限在一个小的区域，则是一个有限的数 M ，即 $P \sim M$ 。特别的是对于 $M = 1$ ，态局域在一个孤立的点。

在实际模拟中，对于足够大的系统， IPR 是区分局域态与扩展态的一个很好的度量，因为对于扩展态 $IPR \sim 0$ ，而对于局域态则满足 $0 < IPR \leq 1$ 。

2.5 数值标度解析

2.5.1 1999 年之前的标度理论

在第 1.1.4 节介绍过临界指数 ν ，在相变点附近的临界区域，其临界行为可以用无穷大系统的发散的关联长度来描述，而发散的形式由临界指数 ν 来控制，即

$$\xi_{\infty}(W) \sim |W - W_c|^{-\nu} , \quad (2.21)$$

其中 W_c 和 ν 分别代表临界无序和临界指数。临界指数普适性的存在为单参量标度理论提供了坚实的基础。为了验证单参量标度理论的有效性，临界指数的数值验证是 Anderson 局域化理论的主要工作。

众所周知，相变只在热力学极限下发生，而在实际模拟中只能得到有限大小尺寸的系统。为了解决这个矛盾，我们应用标度率，

$$X(W', bL) = F(X(W', L), b) , \quad (2.22)$$

公式中的 X 表示有限尺寸大小系统的数据，其是一个无量纲的量， b 是标度因子， W' 是一个包含无序 W 和能量 E 的复合参量。通过近似处理，即假设 X 在长度 $L' \rightarrow bL$ 的缩放过程中仅仅依赖于 X 自身，而不依赖于 L 和 W' 。那么方程 2.22 可以写成如下形式，

$$\frac{d \ln X}{d \ln L} = \chi(X) , \quad (2.23)$$

对上式方程积分后，得到

$$X(L, W') = f(L/\xi_{\infty}(W')) , \quad (2.24)$$

其中 $\xi_{\infty}(W')$ 表示无穷大尺寸系统的关联长度，且其仅依赖于 W' 而不依赖于 L 。所有不同尺寸 L 的系统的数据都可以通过以 $\xi_{\infty}(W')$ 为单位缩放而落在标度函数 f 上。

在转移矩阵的数值模拟中，一般将条带/棒的宽度 M 作为系统尺寸 L ，为方便起见

将 W' 标记为 W ，用约化局域化长度 $\Lambda(M, W)$ 代替 $X(L, W')$ ，即

$$X(L, W') = \Lambda(M, W) = \Lambda_M(W) = \lambda_M(W)/M, \quad (2.25)$$

式中的 λ_M 是局域化长度。因此约化局域化长度 Λ_M 可以写成如下形式，

$$\Lambda_M(W) = f(M/\xi_\infty(W)). \quad (2.26)$$

当使用转移矩阵方法计算 Λ_M 之后，需要使用基于最小二乘法的标度程序来拟合方程 2.26 中的参量 $\xi_\infty(W)$ 。关于这个最小二乘方法的详细信息可以参考文献^[121]。然而，由于 $\xi_\infty(W)$ 的临界点处是奇点，其舍入误差的存在似乎导致了系统误差，这意味着它只能给出低精度的结果 ν 。

当然，也可以避免拟合关联函数，直接转向对数据 Λ 进行拟合。如果展开函数 $f(x)$ 并保留前两项 $f(x) = f(0) + Cx^\alpha$ 。根据方程 2.21，我们有 $M/\xi_\infty \sim M|W - W_c|^\nu$ ，将其代入 $f(x)$ 中的变量 x ，可以得到 $f(M/\xi_\infty) = f(W_c) + CM^\alpha|W - W_c|^{\alpha\nu} = f(W_c) + CM^{1/\nu}|W - W_c|$ ，其中 $\alpha = 1/\nu$ 。相同的，我们在临界点 W_c 展开方程 2.26 并保留线性项，

$$\Lambda(M, W) = \Lambda_c + A(W - W_c)M^{1/\nu}, \quad (2.27)$$

式中 $\Lambda_c = \Lambda(W = W_c)$ 不依赖于系统尺寸 M 。基于这个方程拟合数据可以估计临界无序 W_c 和临界指数 ν 。然而，由于只考虑线性项，它限制数据只能在临界无序 W_c 的一个小范围内。

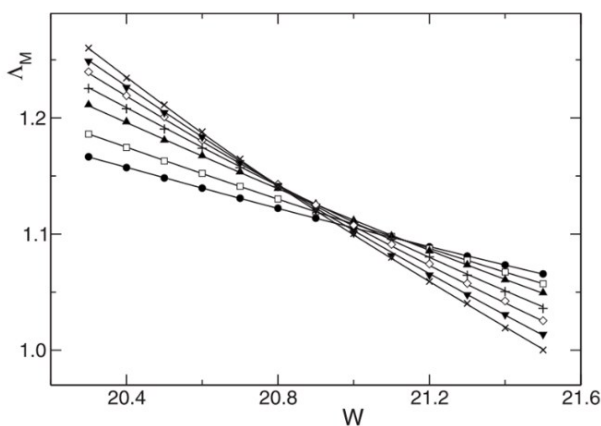


图 2.14 体心立方晶格的约化局域化长度 Λ_M 与无序 W 的示意图。其中系统尺寸 M 从3 (\cdot), 5 (\square), ..., 15 (\times)。图文应用自文献^[137]。

随着计算机性能的提升，可以获取更大尺寸系统的数据，随之出现了一个之前由于数据精度低而没有出现过的问题—交点出现了系统性的偏移。为了更具体地描述这个问题，我们从文献^[137]中截取了一个 FSS 的结果展示在图 2.14 中，可以看到，大

尺寸系统的交点较之小系统尺寸 $M = 3$ 和 $M = 5$ 的交点有了一个较大的偏移。

这个问题的出现使单参量标度理论陷入了困境。实际上，方程 2.21 中的 ν 包含两个部分，即对应于 $\nu < 0$ 的相关部分和 $\nu > 0$ 的不相关部分^[22]，分别对应于在重整化群空间中流动方向是远离固定点还是朝向固定点。不相关部分的变量是依赖于系统尺寸 M 的，在有限大小尺寸的系统起着重要作用；它们确定了 Λ 如何依赖于模型各种不同的微观细节，比如关联长度，无序分布等。单参量标度假说要求不相关变量 η 变现为如下形式

$$\eta(M) \sim M^{-\gamma} , \quad (2.28)$$

表示其在热力学极限 $M \rightarrow \infty$ 下可以被忽略，相应的 γ 是不相关指数。基于这个思想，Slevin 和 Ohtsuki^[138] 在 1999 年提出了解决上述问题的方案，这个方法至今被广泛的采用。在下一节中，将重点介绍这种方法。

2.5.2 有限大小标度理论

在他们的工作中，主要的改进在于对标度的两种修正，即考虑不相关标度变量和相关标度变量对无序的非线性依赖。基于重整化群方程^[139,34,140]，他们考虑了一个如我们前文所介绍的无量纲量 $\Lambda = \lambda/M$ 作为标度变量的函数，即

$$\Lambda = f(M/b, \chi_r b^{1/\nu}, \chi_i b^\gamma) , \quad (2.29)$$

其中 b 和 M 和之前一样分别是标度因子和条带/棒的宽度， χ_r 和 χ_i 分别是相关标度变量（relevant scaling variable）和不相关标度变量（irrelevant scaling variable）， ν 和 γ 则分别是其相应的临界指数。为了方便起见，在下文中将相关标度变量和不相关标度变量称为相关变量和不相关变量。不相关变量 χ_i 要求 $\gamma < 0$ 。通过设置长度尺度为 $b = M$ ，上式可以写成如下形式，

$$\Lambda = F(\chi_r M^{1/\nu}, \chi_i M^\gamma) , \quad (2.30)$$

其中函数 F 依赖于 f 。由于在有限尺寸 M 下 F 是一个光滑的函数，因此可以合理地假设 F 能够根据不相关变量 χ_i 进行泰勒展开，

$$\Lambda = \sum_{n=0}^{n_I} \chi_i^n M^{n\gamma} F_n(\chi_r M^{1/\nu}) , \quad (2.31)$$

上式中的函数 F_n 仅依赖于 χ_r 而不依赖于 χ_i 。对于 $n = 0$ 的一项， F_0 恢复到传统的标度行为，即没有考虑不相关变量和非线性。对于 $n > 0$ 的其它项，由于存在因子 $\chi_i^n M^{n\gamma}$ ，表示其考虑了不相关变量的影响。进一步根据相关变量 χ_r 来展开函数 F_n ，则可以得到

$$F_n(\chi_r M^{1/\nu}) = \sum_{m=0}^{n_R} \chi_r^m M^{m/\nu} F_{nm} . \quad (2.32)$$

非线性的考量可以通过根据无量纲的无序 $w = (W_c - W)/W_c$ 展开相关变量 χ_r 和不相关变量 χ_i 来引入，即

$$\chi_r(w) = \sum_{n=1}^{m_R} b_n w^n, \quad \chi_i(w) = \sum_{n=0}^{m_I} c_n w^n, \quad (2.33)$$

W_c 表示临界无序， $|w|$ 则是对距离临界无序远近的一种度量。 $|w|$ 的值越小，则表示越靠近临界无序 W_c 。为了固定绝对标度，我们设置 $b_1 = c_0 = 1$ 。

通过设置 $n_R = 1$, $m_R = 1$, $n_I = 0$ 和 $m_I = 0$ ，可以回到方程 2.27 的情形，即不考虑非线性和依赖于系统尺寸的不相关项。为了在大的无序 W 范围内拟合数据，考虑非线性并通过设置 $n_R \geq 2$ 和 $m_R \geq 2$ 来产生适当的拟合函数。在拟合程序中，拟合参数的个数由 $N_p = (n_I + 1)(m_R + 1) + m_R + m_I + 2$ 给出。将方程 2.31 改写成如下形式，可以清晰的看到由不相关变量 ($\chi_i > 0$) 引起的修正项的性质，

$$\Lambda = F_0(\chi_r M^{1/\nu}) + \sum_{n=1}^{n_I} \chi_i^n M^{ny} F_1(\chi_r M^{1/\nu}), \quad (2.34)$$

显然存在一个由有限尺寸效应造成的系统性的偏移量，当 M 足够大时，由于 $y < 0$ ，因此这个偏移量会消失。标度行为要求将来自于不相关变量的修正项去除，

$$\Lambda_{corrected} = \Lambda - \sum_{n=1}^{n_I} \chi_i^n M^{ny} F_1(\chi_r M^{1/\nu}). \quad (2.35)$$

上式的修正项可以写成如下形式

$$\Lambda_{corrected} = F_{\pm}(M/\xi_{\infty}), \quad (2.36)$$

其中关联长度为

$$\xi_{\infty} = \xi_{\pm} |\chi_r|^{-\nu}, \quad (2.37)$$

波函数 $F_{\pm}(x) = F_0[\pm(\xi_{\pm} x)^{1/\nu}]$ 和 ξ_{\pm} 是常量。在真实的模拟中，为了得到临界参量 W_c 和 ν ，并不需要计算常数值 ξ_{\pm} 。顺便说一下，在不考虑不相关变量 χ_i 情况下，不需要考虑依赖于系统尺寸的修正项，因此有 $\Lambda = F_{\pm}(M/\xi)$ 。

将方程 2.37 中的参量 χ_r 替换为非线性展开方程 2.33，可以得到与方程 2.21 完全不同的复杂形式的关联长度。然而，如果忽略非线性，即设置 $m_R = 1$ 和 $m_I = 0$ ，则相关参数 χ_r 具有 $\chi_r \sim w$ 的形式；通过插入方程 2.37 之后，关联长度变成了简单幂律形式 $\xi_{\infty} \sim |w|^{-\nu}$ ，这与方程 2.21 的形式完全相同。

函数 F_n ，临界指数 ν 和不相关指数 y 被认为是普适的，但展开系数 $\{b_n\}$ 和 $\{c_n\}$ 则不是。

2.5.3 非线性拟合程序

非线性拟合程序被用来拟合基于方程 2.30, 2.31 和 2.32 的数据, 我们的工作基于 *Mathematica* 软件编程实现。通过最小化测量模型 Λ_{fit} 与数据 Λ_i 之间偏差的统计量 χ^2 ,

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_d} \frac{\left(\Lambda_i - \Lambda_{\text{fit}}(a_{00}, \dots, a_{n_i n_r}, b_2, \dots, b_{m_r}, c_1, \dots, c_{m_i}, W_c, \nu, y) \right)^2}{\sigma_i^2}, \quad (2.38)$$

其中 σ_i 是相应数据 Λ_i 的误差, 可以得到模型中的参量, 诸如 W_c , ν , 和 y , 以及相应参量的置信区间等。最后, 通过使用拟合优度因子 Q ^[141] 来判定拟合质量。 Q 的定义如下式

$$Q = \Gamma_Q \left(\frac{N_d - N_p}{2}, \frac{\chi^2}{2} \right), \quad (2.39)$$

其中的 Γ_Q 是不完全伽玛函数, N_d 和 N_p 分别是数据和参量的个数。实数 Q 是在区间 $[0,1]$ 中, 其中 $Q > 0.01$ 代表可接受的拟合, $Q = 1$ 表示一个完美的拟合, 不过这可能导致过拟合。拟合优度因子 $Q = 0.5$ 对应于 $N_d - N_p = \chi^2$, 表示是一个好的拟合^[141]。在我们的数值模拟中, 将所有拟合优度满足 $0.05 < Q < 0.95$, 即既不是过拟合也不是欠拟合的结果作为候选。

第3章 二维 Lieb 模型及其扩展模型中的无序效应

3.1 引言

由于许多实验上的进展^[142]，平带重新得到了新的关注。具有平带物理的系统通常对应于“工程”格子，如准一维格子^[75,143,144]，金刚石型格子^[78]，以及 Lieb 格子^[99,145,80,146-148]。

事实上，Lieb 格子，作为一个简单二维正方形格子的扩展格子，在模型学习中被用来加强磁效应^[149,94,93]。此外，狄拉克锥也是一大亮点。实际上，铜酸盐超导体的 CuO_2 平面也是一个 Lieb 晶格，有研究推测其平带与高温超导的起源有关^[100,101,99]。许多关于 Lieb 格子的理论和实验上的工作已经详细阐述在绪论部分。

在这项工作中，我们采用基于二维 Lieb 格子及其扩展格子的 Anderson 模型，研究了无序对靠近平带的色散带中局域化性质的影响^[119]。我们发现对于无序 $W \leq t$ ，Lieb 格子及其扩展格子中所有的态都是局域的。我们的结果表明，对于干净系统 ($W = 0$) 中平带位置的能级执行有限尺寸标度的局域化长度 ξ 的行为让人联想到一维系统的微扰结果。这有可能提供关于这些局域化特性的空间信息。对于干净系统 ($W = 0$) 中色散带位置的能级，相比于二维的 Anderson 模型的局域化，其显示出趋于更大的局域化长度的现象^[150]。

3.2 模型与方法

考虑一族二维 Lieb 格子 $\mathcal{L}_2(n)$ ，其中 $n = 1, 2, 3$ 和 4 。其示意图展示在图 3.1 中。哈密顿量给出如下形式

$$H = \sum_{\vec{r}} \varepsilon_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| - \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} t_{\vec{r}\vec{r}'} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}'|, \quad (3.1)$$

其中， $|\vec{r}\rangle$ 表示电子位于 $\mathcal{L}_2(n)$ 的格点 $\vec{r} = (x, y)$ 处的正交 Wannier 态，格点势能 $\varepsilon_{\vec{r}}$ 则服从无序强度为 W 的均匀随机分布，即 $\varepsilon_{\vec{r}} \in [-W/2, W/2]$ 。对于最近邻格点 \vec{r} 和 \vec{r}' ，设置它们之间的跃迁积分 $t_{\vec{r}\vec{r}'} \equiv 1$ 作为能标，其它格点之间的跃迁则为 0。

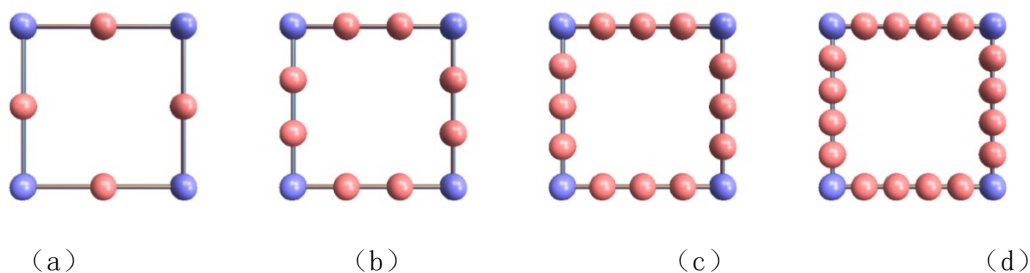


图 3.1 (a) $\mathcal{L}_2(1)$, (b) $\mathcal{L}_2(2)$, (c) $\mathcal{L}_2(3)$, 和 (d) $\mathcal{L}_2(4)$ 的模型示意图。

在本章节中,首先基于紧束缚近似的方法计算出模型 $\mathcal{L}_2(1)$, $\mathcal{L}_2(2)$, $\mathcal{L}_2(3)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 在不考虑无序情况下的色散关系。其次,考虑无序之后,采用直接对角化方法求解本征能谱,计算出相应的态密度。接着,通过转移矩阵方法求解系统的局域化长度,通过有限大小标度理论获得临界函数,临界参量等。

3.3 结果

3.3.1 色散关系

在考虑无序之前,分别对 $\mathcal{L}_2(1)$, $\mathcal{L}_2(2)$, $\mathcal{L}_2(3)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 四个模型采用紧束缚近似方法计算色散关系,结果总结在表 3.1 中。为了更直观,将色散关系绘制在图 3.2 中,显然 $\mathcal{L}_2(n)$ 具有 $n + 1$ 条色散带将 n 条平带分隔开^[151]。此外, $\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_2(3)$ 在 (k_x, k_y) 平面上具有狄拉克锥,且在特殊点与平带相接触。但是对于 $\mathcal{L}_2(2)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 却没有这样的狄拉克锥。

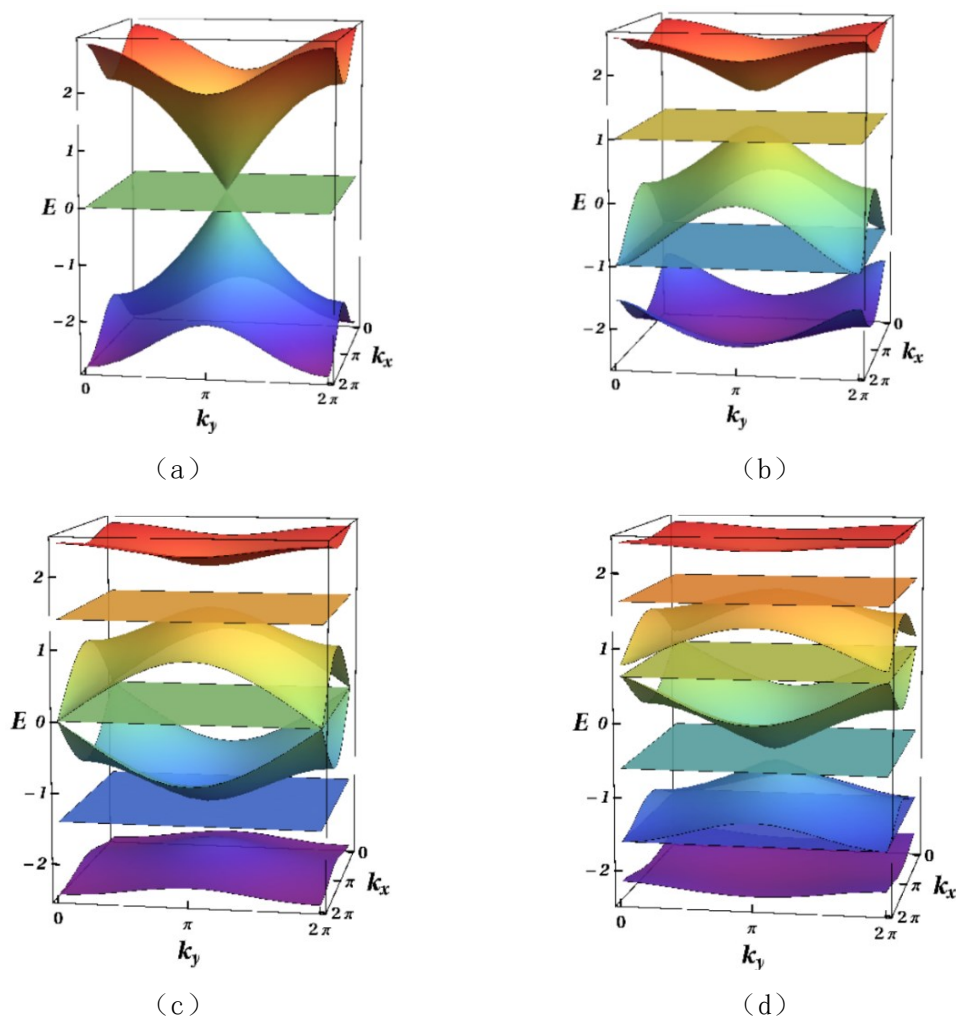


图 3.2 (a) $\mathcal{L}_2(1)$, (b) $\mathcal{L}_2(2)$, (c) $\mathcal{L}_2(3)$ 和 (d) $\mathcal{L}_2(4)$ 的色散关系图示。图中低能量的态到高能量的态用不同的颜色标记。

表 3.1 $\mathcal{L}_2(1)$ 到 $\mathcal{L}_2(4)$ 的色散关系解析结果。需要提及的是, 所示结果选择了实空间中相邻格点的距离为单位长度1, 而 k_x, k_y 是倒空间中的波矢。尽管 $\mathcal{L}_2(2)$ 的 $E_{4,5}$ 看起来有虚数部分, 但是实际上它们是实根, 因为 ρ_+ 与 ρ_- 互为复共轭, 而 ω 和 ω^2 也是。

模型	平带数	色散关系
$\mathcal{L}_2(1)$	1	$E_1 = 0$ $E_{2,3} = \pm\sqrt{4 + 2q}$
		$q = \cos k_x + \cos k_y$
$\mathcal{L}_2(2)$	2	$E_{1,2} = \pm 1$ $E_2 = \rho_+ + \rho_-$ $E_4 = \omega\rho_+ + \omega^2\rho_-$ $E_5 = \omega\rho_- + \omega^2\rho_+$
		$\omega = \frac{-1 + \sqrt{3}i}{2}$ $\rho_{\pm} = \sqrt[3]{q \pm \sqrt{q^2 - \left(\frac{5}{3}\right)^3}}$
$\mathcal{L}_2(3)$	3	$E_1 = 0$ $E_{2,3} = \pm\sqrt{2}$ $E_{4,5,6,7} = \pm\sqrt{3 \pm \sqrt{5 + 2q}}$
$\mathcal{L}_2(4)$	4	$E_{1,2,3,4} = \frac{1}{2}(\pm 1 \pm \sqrt{5})$ $E_{5,6,7,8,9} \rightarrow E^5 - 7E^3 + 9E - 2q = 0$

3.3.2 态密度

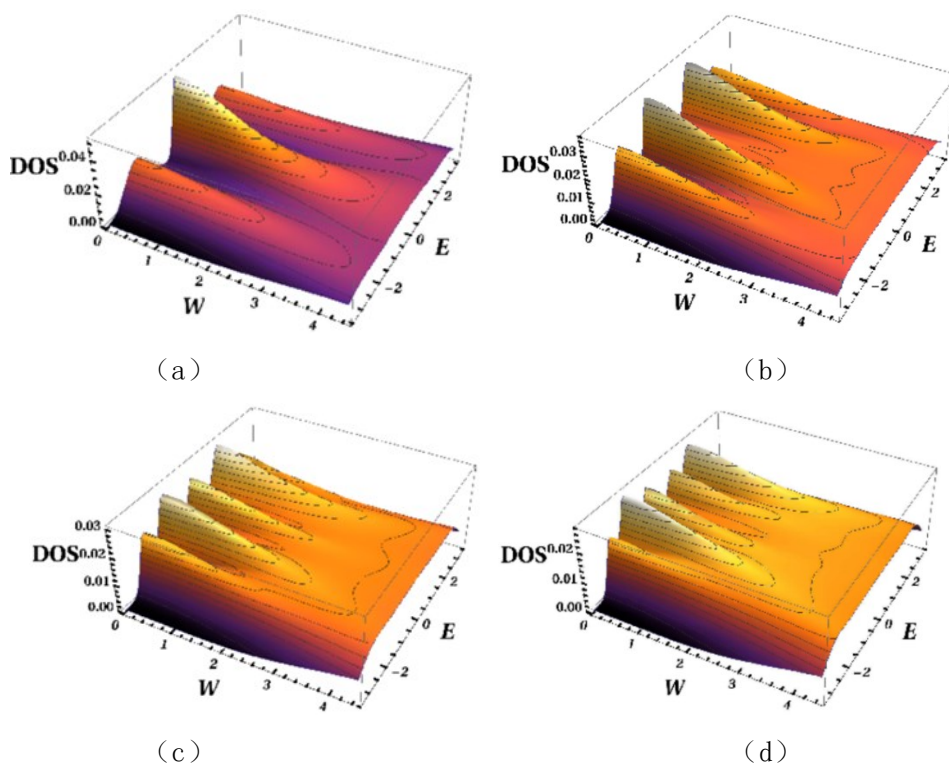


图 3.3 (a) $\mathcal{L}_2(1)$, (b) $\mathcal{L}_2(2)$, (c) $\mathcal{L}_2(3)$ 和 (d) $\mathcal{L}_2(4)$ 的光滑归一化的态密度 (DOS)。DOS 不同的数值用不同深浅的颜色显示, 其中黑色线是 DOS 等高线。

在考虑无序之后，由于空间平移对称性被破坏， k 不再是一个好量子数，体系不再具有色散关系。因此，需要采用一个新的量—依赖于无序的态密度（DOS）来代替色散关系测量能谱。对于平带，其动能为零，势能变得很显著，此时随机无序 W 占据支配地位。因此，小的无序可以破坏高度简并的平带，导致平带中的态向临近的色散带中的态靠拢合并。为了研究无序系统中平带与色散带的相互作用，通过精确的对角化方法计算了依赖于无序的 DOS，且对所有 $\mathcal{L}_2(n)$ 模型均选取了 300 个无序构型。 $\mathcal{L}_2(1)$ ， $\mathcal{L}_2(2)$ ， $\mathcal{L}_2(3)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 的系统尺寸大小 M^2 分别是 13^2 ， 10^2 ， 9^2 和 8^2 。为了获得更加光滑的 DOS，采用高斯展宽技术，结果展示在图 3.3 中。从图中可以看出，当无序 W 增加到2到3时，DOS 失去了其峰值特征。

3.3.3 约化局域化长度 Λ_M 与 ξ/M 关系

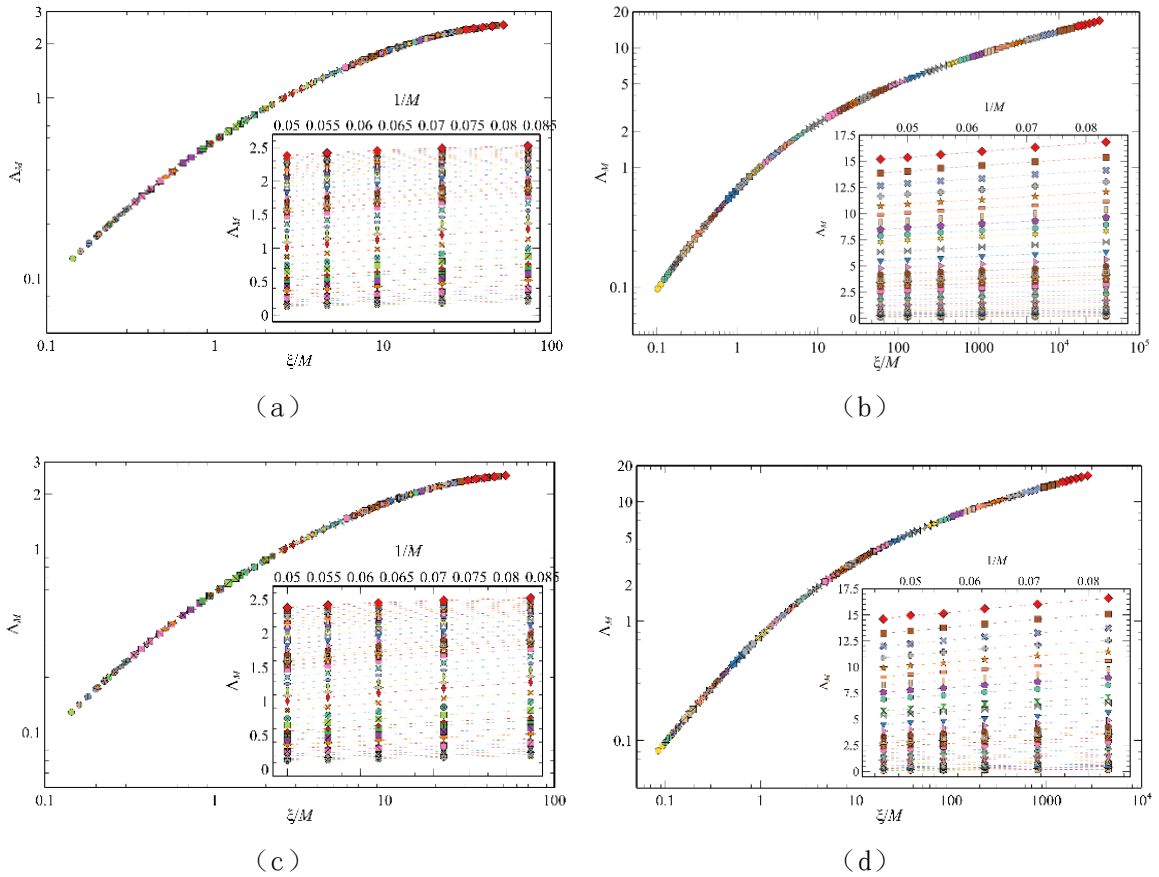


图 3.4 主图：约化局域化长度 Λ_M 与 ξ/M 的双对数图。图（a-d）分别是 $\mathcal{L}_2(1)$ 到 $\mathcal{L}_2(4)$ 相应的结果。为了便于观看，仅展示部分无序结果，分别是 $W = 1.0$ (\diamond), $1.01, \dots, 1.05$ (\square), \dots , $2.0, 2.1, 2.2, 2.4, 2.6, \dots, 10.0$ (\circ), 分别用不同的颜色与符号来区分数据。误差条在符号的大小范围内。插图：约化局域化长度 Λ_M 与 $1/M$ 的关系，数据与相应的主图一致，且颜色和符号也和其一致，虚线只是为了便于观看。

由于在能量 $E = 0$ 处， $\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_2(3)$ 都是平带，而 $\mathcal{L}_2(2)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 则是色散带。因此，对于所有的 $\mathcal{L}_2(n)$ 模型，都专注于能量 $E = 0$ ，这样可以使得直接区分无序作用下

原始平带 ($\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_2(3)$) 和原始色散带 ($\mathcal{L}_2(2)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$) 之间的局域化性质。通过转移矩阵的方法 (TMM), 计算了 $\mathcal{L}_2(1)$, $\mathcal{L}_2(2)$, $\mathcal{L}_2(3)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 在能量 $E = 0$ 处的约化局域化长度 $\Lambda_M(E, W)$ 的值, 即 $\Lambda_M(0, W)$, 且在图 3.4 中展示出来。插图中显示的是 $\Lambda_M(0, W)$ 与 $1/M$ 的函数关系式, 其中 M 是 $\mathcal{L}_2(n)$ 的横截面 (面积 M^2) 的边长, 考虑的 $\mathcal{L}_2(1)$ 的系统尺寸为 $M = 10, 12, \dots, 20$, 且其误差小于0.1%。而 $\mathcal{L}_2(2)$, $\mathcal{L}_2(3)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 的系统尺寸则为 $M = 10, 12, \dots, 22$, 其误差不大于0.2%。发现在原始平带和色散带中的态, 其所有的 $\Lambda_M(0, W)$ 都随着 M 的增加而减小, 这意味着对于足够大的 W 和 M , λ_M 值趋于饱和, 使得 Λ_M (定义为 λ_M/M) 随着 M 的增加而减小。

此外, 我们也以双对数的形式在主图中画出了 $\Lambda_M(0, W)$ 和 ξ/M 的关系。数据 Λ_M 经过比例缩放以后可以落在一条标度曲线上, 随着 M 的增加, 这条标度曲线会随之减小, 因此这也和前面讨论的插图里面展现出的结果相吻合。除此之外, 对于 $\lambda_M \ll M$, 即 $\Lambda_M \ll 1$, 注意到 $\Lambda_M \sim 1/M$ 的线性行为, 这个特征意味着强局域化 $\lambda_M \sim \lambda_\infty$ 的出现 (由于 $\Lambda_M = \lambda_M/M \sim 1/M$, 暗示着 λ_M 不再随系统尺寸变化, 即强局域化的出现)。此外, 观察到在对应于原先平带位置态的局域化长度比在原先色散带位置态的局域化长度约小一个数量级。这的确是一个合理的结果, 因为平带中的态由于缺少动能, 因此引入无序以后会变得更局域化。

3.3.4 标度参量 $\xi(0, W)$ 与无序 W 的关系

接下来, 我们在图 3.5 中给出标度参量 $\xi(0, W)$ 与无序 W 的函数关系。Thouless^[121,152]声称, 对于严格的一维无序链, $\xi(W)$ 在小无序 W 情况下服从函数形式 $\xi(W) \sim W^{-2}$, 而对于在小无序 W 情况下的二维系统, 则满足一个普适性的函数关系式 $\xi(W) = a/W^\alpha \exp(\beta W^{-\gamma})$, 其中 a 和 β 是正的, α 和 γ 则是与单位一量级相当的数^[22]。我们基于这些函数形式给出了具体的拟合形式, 在图 3.5 中给出, 拟合参量的详细细节展示在表 3.2 中。

对平带 ($\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_2(3)$) 与色散带 ($\mathcal{L}_2(2)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$) 位置处态的拟合明显给出不同的结果, 这从弱无序的情况下, $\mathcal{L}_2(2)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 的 ξ 值的量级比 $\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_2(3)$ 的要高约三个量级可以看出。对于平带处的态, 在无序为 $1 < W < 2$ 时, 简单的幂律形式 $\xi(W) \sim W^{-2}$ 可以很好的拟合我们的数据, 然而对于色散带却不凑效。在无序为 $W > 2$ 时, 平带和色散带的拟合都不尽人意。

具体来看, 拟合结果并不完美。在能量 $E = 0$ 处, 根据一维的通用形式 $\xi(W) \sim aW^{-\alpha}$ 进行拟合, 尽管得到了接近 $\alpha = 2$ 的结果, 但是系数 a 并不是105^[153]。其次, 通过在拟合公式 $\xi(W) = a/W^\alpha \exp(\beta W^{-\gamma})$ 中预先设定 $\alpha = 2$, 得到的系数 a 也不是12M^[154], 其中 M 是准一维条带宽度。由于无序 Lieb 模型 $\mathcal{L}_2(n)$ 的局域化行为确实与标准二维 Anderson 模型不同, 所以在小无序情况下缺少对 ξ 的简单拟合也是合理的。

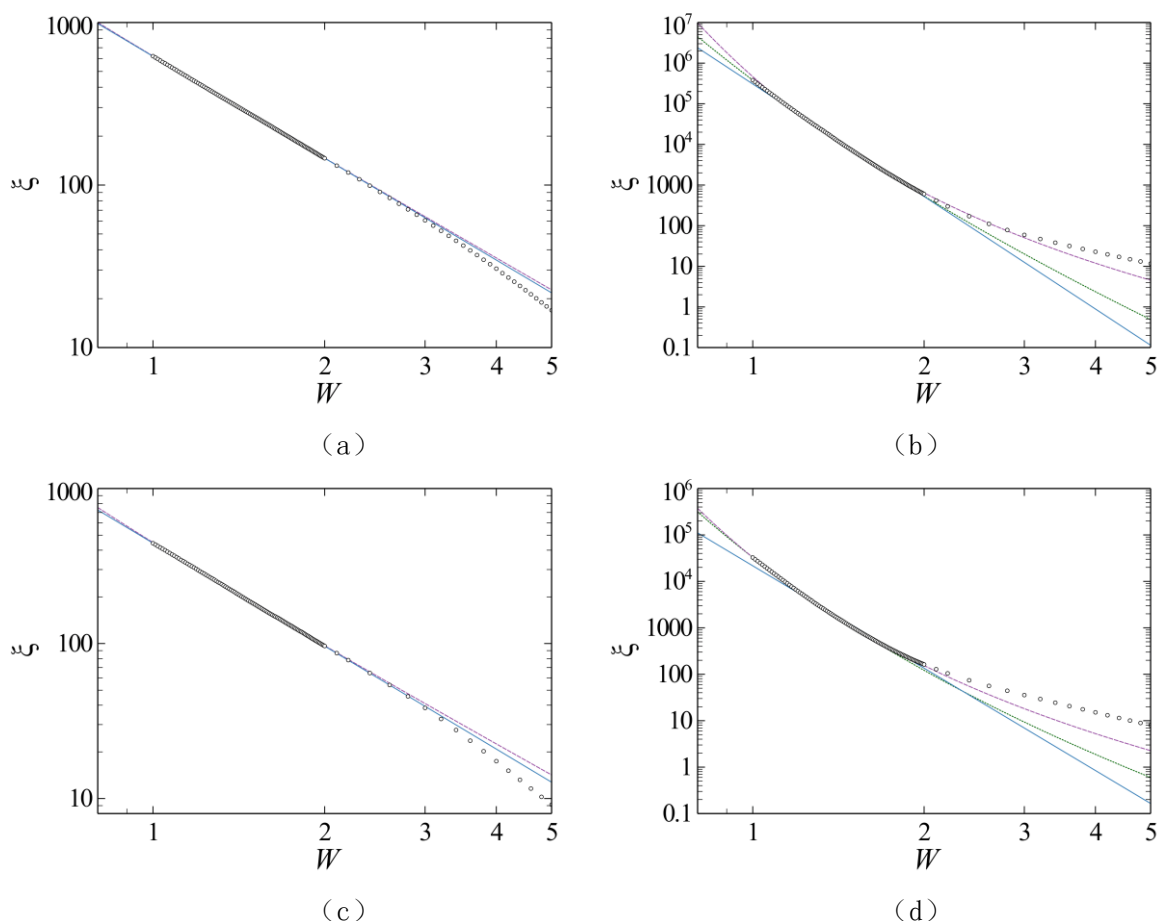


图 3.5 (a-d) 分别为 $\mathcal{L}_2(1)$ 至 $\mathcal{L}_2(4)$ 的标度参数 $\xi(0, W)$ (用 \circ 表示) 与相应的拟合函数 (线)。蓝色的实线对应于函数 $aW^{-\alpha}$, 紫色的虚线是 $aW^{-2}e^{\beta W^{-1}}$, 而绿色的虚线则是 $aW^{-\alpha}e^{\beta W^{-\gamma}}$ 。其中参数 a , α , β 和 γ 的详细信息在表 3.2 中。

表 3.2 $\mathcal{L}_2(1)$, $\mathcal{L}_2(2)$, $\mathcal{L}_2(3)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 拟合 $\xi(W)$ 的参数表, 其中 a , α , β 和 γ 是拟合系数, 基于非线性拟合程序 Levenberg-Marquardt 求解获得。

	$aW^{-\alpha}$		$aW^{-\alpha}e^{\beta W^{-\gamma}}$				$aW^{-2}e^{\beta W^{-1}}$	
	a	α	a	α	β	γ	a	β
$\mathcal{L}_2(1)$	619.1(2)	2.0816(7)					553(1)	0.117(2)
p -value	$< 10^{-10}$	$< 10^{-10}$					$< 10^{-10}$	$< 10^{-10}$
$\mathcal{L}_2(2)$	310000 (6000)	9.20 (4)	118 (2000)	5(5)	8(14)	0.7(7)	14.2(5)	10.39 (5)
p -value	$< 10^{-10}$	$< 10^{-10}$	0.94	0.26	0.56	0.27	$< 10^{-10}$	$< 10^{-10}$
$\mathcal{L}_2(3)$	444.1(3)	2.206(2)					334.9(6)	0.292(3)
p -value	$< 10^{-10}$	$< 10^{-10}$					$< 10^{-10}$	$< 10^{-10}$
$\mathcal{L}_2(4)$	21600 (800)	7.33 (7)	9(101)	3(5)	8(11)	0.8(6)	11.5(2)	7.96(3)
p -value	$< 10^{-10}$	$< 10^{-10}$	0.92	0.42	0.45	0.16	$< 10^{-10}$	$< 10^{-10}$

3.4 总结

在本章中，通过精确对角化方法和转移矩阵方法研究二维扩展 Lieb 模型的局域化性质。发现来自平带的显著 DOS 峰很快被无序破坏。通过 FSS，发现平带处的态和色散带处的态确实展现出不同的局域化性质，平带处的态似乎表现出一种类似一维情况的局域性质。然而对于无序低至 t ，所有态都是局域的。

第 4 章 三维扩展 Lieb 模型的局域化，相及相变

4.1 引言

无序系统中波的局域化现象自 1958 年首次被预测以来，在凝聚态领域引起了广泛的关注^[1]。随后 Abrahams 等人预测^[36]在不考虑磁场，自旋轨道耦合和电子—电子之间的相互作用的情况下，所有一维和二维的单粒子系统中均不存在金属—绝缘体转变。确实，我们前一章的结果也显示二维 Lieb 模型及其扩展模型在无序 $W > t$ 的条件下，所有的态都是局域的。然而，在三维空间中具有更丰富的相，平带在其中起着怎样的作用，又会引发怎样新奇的现象是一个非常有意义的课题。

目前，仅有较少的关注投入在三维平带系统^[78]或扩展的 Lieb 格子^[148,119]。此外，虽然准一维^[74,77,62,155]和二维^[156]格子中的无序先前得到了一些关注，但是相对较少的工作研究了无序对三维平带系统^[157,143,79]的影响。我们在本章中的工作，主要是基于之前二维 Lieb 模型的研究简单扩展到三维的情况，正好可以填补这一空白。在这一章中，我们主要考虑了格点势能服从均匀随机分布的三维 Lieb 模型及其扩展模型的局域化性质，首先计算了不考虑无序情况下的色散关系，以及在考虑无序情况下，求出相应的 DOS，以及能量—无序的相图，之后进一步计算相变点处大尺寸高精度的数据，最后求出普适性的临界指数和临界参量。

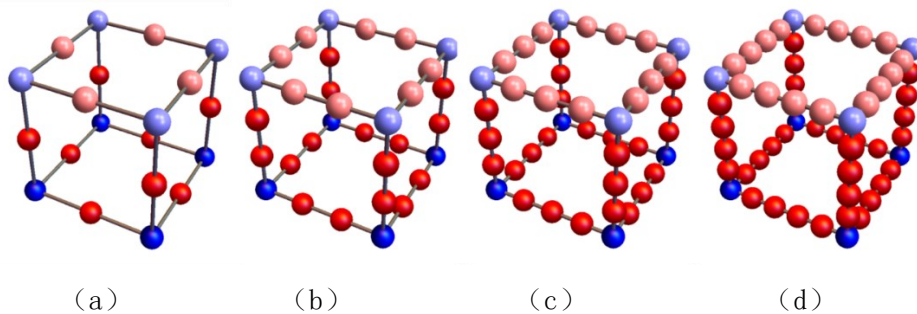
4.2 模型与方法

考虑一族三维的 Lieb 模型 $\mathcal{L}_3(n)$ ，其中 $n = 1, 2, 3$ 和 4 ，晶格模型展示在图 4.1 中。哈密顿量具有以下形式

$$H = \sum_{\vec{r}} \varepsilon_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| - \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} t_{\vec{r}\vec{r}'} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}'|, \quad (4.1)$$

其中， $|\vec{r}\rangle$ 是电子位于 $\mathcal{L}_3(n)$ 的格点 $\vec{r} = (x, y, z)$ 处的正交 Wannier 态，格点势能 $\varepsilon_{\vec{r}}$ 则服从无序强度为 W 的均匀随机分布，即 $[-W/2, W/2]$ 。对于最近邻格点 \vec{r} 和 \vec{r}' ，我们设置它们之间的跃迁积分 $t_{\vec{r}\vec{r}'} \equiv 1$ 作为能标，其它格点之间的跃迁则为 0。

在本章节中，采用与前一章基本一致的方法。首先基于紧束缚近似的方法计算出模型 $\mathcal{L}_3(1)$ ， $\mathcal{L}_3(2)$ ， $\mathcal{L}_3(3)$ 和 $\mathcal{L}_3(4)$ 在不考虑无序情况下的色散关系。其次，考虑无序之后，采用直接对角化方法求解本征能谱，计算出相应的态密度。接着，通过转移矩阵方法求解系统的局域化长度，获得能量—无序的相图。基于相图，进一步计算相变点处大尺寸高精度的数据，通过有限大小标度理论获得临界函数，临界参量等。进一步分析在不同拟合参量下的临界指数的稳定性等。

图 4.1 (a) $\mathcal{L}_3(1)$, (b) $\mathcal{L}_3(2)$, (c) $\mathcal{L}_3(3)$ 和 (d) $\mathcal{L}_3(4)$ 的模型示意图。

4.3 结果

4.3.1 色散关系

在考虑无序之前, 首先计算了 $\mathcal{L}_3(n)$ 的色散关系, 结果总结在表 4.1 中。在选取一些高对称性点形成闭环以后, 将其可视化的绘制在图 4.2 中。与二维 Lieb 模型 $\mathcal{L}_2(n)$ 的色散关系相比, 发现两者的平带能量完全相同, 除了三维 Lieb 模型是双重简并的以外。与二维 Lieb 模型一样, 每个三维的 Lieb 模型 $\mathcal{L}_3(n)$ 有 n 个平带分隔开 $n+1$ 个色散带, 且 $\mathcal{L}_3(1)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 在 (k_x, k_y, k_z) 平面有狄拉克锥在特殊点与平带正好相接触, 但是 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(4)$ 只有抛物线型的色散关系。

表 4.1 $\mathcal{L}_3(1)$ 到 $\mathcal{L}_3(4)$ 的色散关系解析结果。需要说明的是, 所示结果选择了实空间中相邻格点的距离为单位长度1, 而 k_x, k_y, k_z 是倒空间中的波矢。与 $\mathcal{L}_2(2)$ 的情况类似, 尽管 $\mathcal{L}_3(2)$ 的 $E_{6,7}$ 看起来有虚数部分, 但是实际上它们是实根, 因为 ρ_+ 与 ρ_- 互为复共轭, 而 ω 和 ω^2 也是。

模型	平带数	色散关系
$\mathcal{L}_3(1)$	2	$E_{1,2} = 0$ $E_{3,4} = \pm\sqrt{6+2q}$ $q = \cos k_x + \cos k_y + \cos k_z$
$\mathcal{L}_3(2)$	4	$E_{1,2} = 1$ $E_{3,4} = -1$ $E_5 = \rho_+ + \rho_-$ $E_6 = \omega\rho_+ + \omega^2\rho_-$ $E_7 = \omega\rho_- + \omega^2\rho_+$ $\omega = \frac{-1 + \sqrt{3}i}{2}$ $\rho_{\pm} = \sqrt[3]{q \pm \sqrt{q^2 - \left(\frac{7}{3}\right)^3}}$
$\mathcal{L}_3(3)$	6	$E_{1,2} = \sqrt{2}$ $E_{3,4} = -\sqrt{2}$ $E_{5,6} = 0$ $E_{7,8,9,10} = \pm\sqrt{4 \pm \sqrt{10+2q}}$
$\mathcal{L}_3(4)$	8	$E_{1,2,3,4,5,6,7,8} = \frac{1}{2}(\pm 1 \pm \sqrt{5})$ $E_{9,10,11,12,13} \rightarrow E^5 - 9E^3 + 13E - 2q = 0$

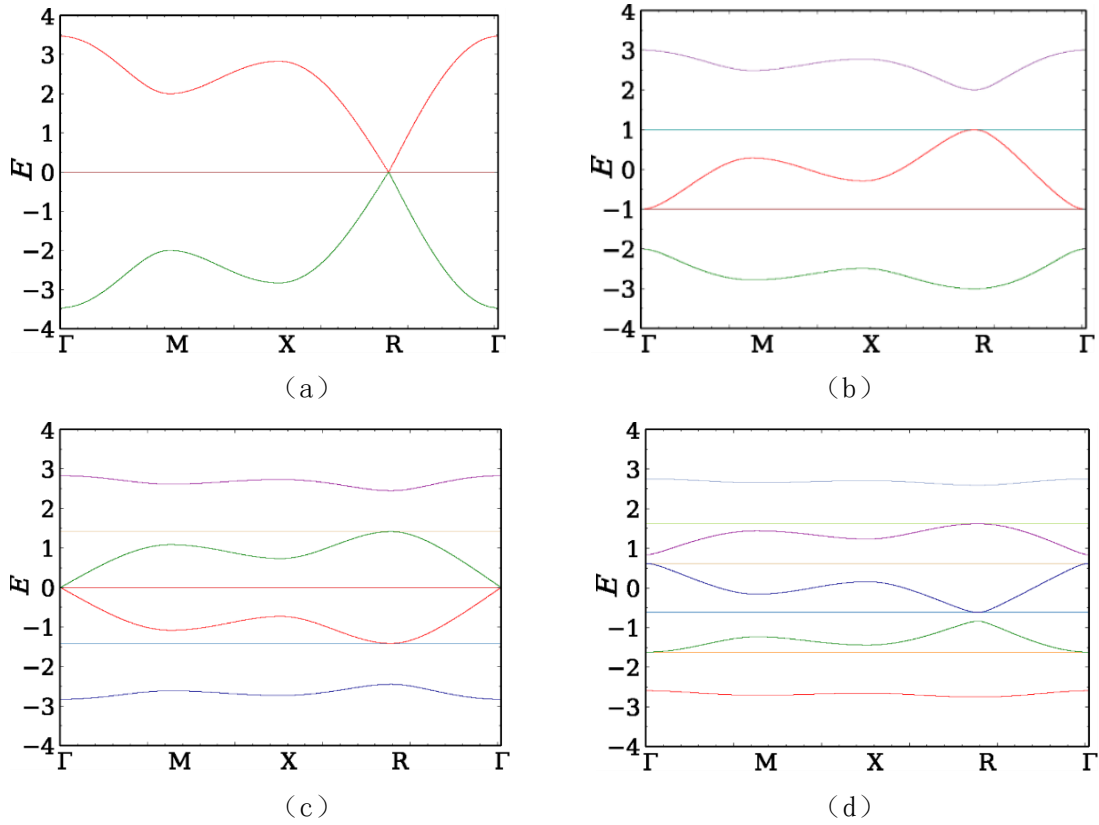


图 4.2 (a) $\mathcal{L}_3(1)$, (b) $\mathcal{L}_3(2)$, (c) $\mathcal{L}_3(3)$ 和 (d) $\mathcal{L}_3(4)$ 的色散关系 (干净没有杂质的系统)。在 (a-d) 中, 所有的情况下的平带都是双重简并的。从 (k_x, k_y, k_z) 空间的 Γ 点 $(0,0,0)$ 开始, 沿着 $(k, k, 0)$ 方向增加 k 直到到达 M 点 $(\pi, \pi, 0)$, 沿着 $(k, \pi, 0)$ 方向减小到 X 点 $(0, \pi, 0)$, 再沿着 (k, π, k) 方向增加 R 点 (π, π, π) , 最后沿着 (k, k, k) 方向回到 Γ 点 $(0,0,0)$ 。色散关系图中不同的颜色表示不同的能带。

4.3.2 态密度

现在考虑有无序的情况, 即 $W > 0$ 。通过直接对角化方法计算了 $\mathcal{L}_3(1)$, $\mathcal{L}_3(2)$, $\mathcal{L}_3(3)$ 和 $\mathcal{L}_3(4)$ 分别在小尺寸 $M^3 = 5^3, 5^3, 4^3, 4^3$ 下依赖于无序的态密度 (DOS)。为了获得清晰的结果, DOS 计算遍及 $W = 0$ 到 $W = 5.2$, 步长 0.05, 且对于 $\mathcal{L}_3(1)$, $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 考虑了 300 个无序构型, $\mathcal{L}_3(4)$ 则考虑了 100 个。为了获得更光滑的 DOS, 采用高斯展宽程序, 利用 Silverman 规则来确定能级的带宽展宽^[45], 结果展示在图 4.3 中。所有的 $\mathcal{L}_3(n)$ 模型在弱无序下, 对应于原先平带的大峰值都很显著。但是当 $W \sim 3$ 开始, 这些峰值已经合并成了一个加宽的 DOS。

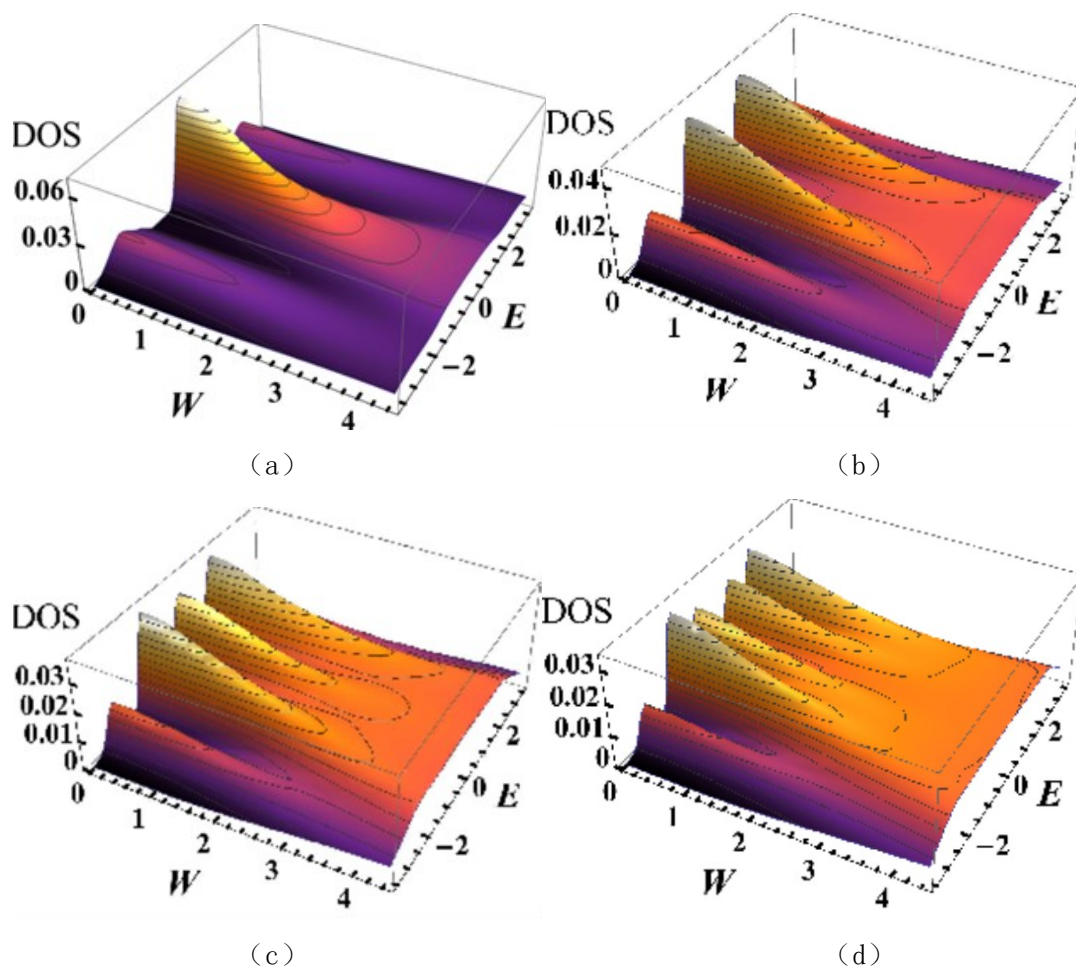


图 4.3 (a) $\mathcal{L}_3(1)$, (b) $\mathcal{L}_3(2)$, (c) $\mathcal{L}_3(3)$ 和 (d) $\mathcal{L}_3(4)$ 依赖于无序 W 的态密度 (DOS)。DOS 不同的数值用不同深浅的颜色显示, 其中黑色线是 DOS 等高线。

4.3.3 $\mathcal{L}_3(1)$ 模型的相图

基于转移矩阵方法 (TMM), 首先计算了 $\mathcal{L}_3(1)$ 的能量-无序的相图 ($E-W$ 相图), 将其展示在图 4.4 中。依据 $\Lambda(E, W)$ 在小尺寸系统 $M = 6, 8$ 和 10 下的标度行为确定了相图, 且保证了 TMM 误差满足 $\leq 0.1\%$ ^[137]。对于 $W < 1$, 由于数据波动过大, 在有限次的迭代中难以收敛, 因此 $W < 1$ 的结果已从图中省略。填充虚线的黑色小正方形(\square)表示 FSS 对大尺寸 M 的高精度估计。中间的阴影区域表示扩展的态, 而相边界外面的态则是局域的。两侧的虚线是 $W < 1$ 时相位边界的预期延续的一个直观指示。在 $E = 0$ 处的红色短垂线表示双重简并平带的位置。菱形符号(\blacklozenge)表示在 $W = 0$ 时的带边, 即 $E_{\min} = -2\sqrt{3}$ 和 $E_{\max} = 2\sqrt{3}$ 。虚线是理论的带边 $\pm(|E_{\min}| + W/2)$, 这些带边下面的态禁区用阴影所填充。插图: 在平带能 $E = 0$ 处的弱无序行为, 无序 W 小至 0.01 。条带宽度从 $M = 4$ (稀疏虚线), $M = 6$ (密集虚线), $M = 8$ (短虚线), $M = 10$ (长虚线), $M = 12$ (虚线)到 $M = 14$ (实线)。误差条由于非常小因此不显著。

在相图内部的态都是扩展的, 而相图外部则全是局域的态。如在绪论中所描述的, 在能量 $E = 0$ 的地方有一个特殊的无序 W_c , 其作为扩展行为到局域行为转变的临

界无序值。对于无序低于 W_c 的情况，扩展态与局域态共存，对于无序高于 W_c 的情况，意味着系统所有的态都是局域的，即系统是局域的。回到相图本身，显然， $\mathcal{L}_3(1)$ 的相图与标准的三维 Anderson 模型的相图性质上基本相似，尽管在带宽和在 $E = 0$ 处的临界无序不同。更详细来说，与在能量 $E = 0$ 处的传统标准 Anderson 局域化的临界无序值 $W_c = 16.0(5)^{[158]}$ 相比， $\mathcal{L}_3(1)$ 的临界无序 $W_c \sim 8$ 减小了约50%。不是特别明显的是，在 $W \leq 4$ 的带边有一个小的凹角区域，这也出现在三维 Anderson 模型^[159-162]中的行为。然而，在 $E \sim 2.75$ 且 $W \sim 6$ 的一个“肩”似乎是一个新的特征，这在通常的三维 Anderson 模型^[159,160]和其他的 Anderson 模型^[137,163]中是不存在的。

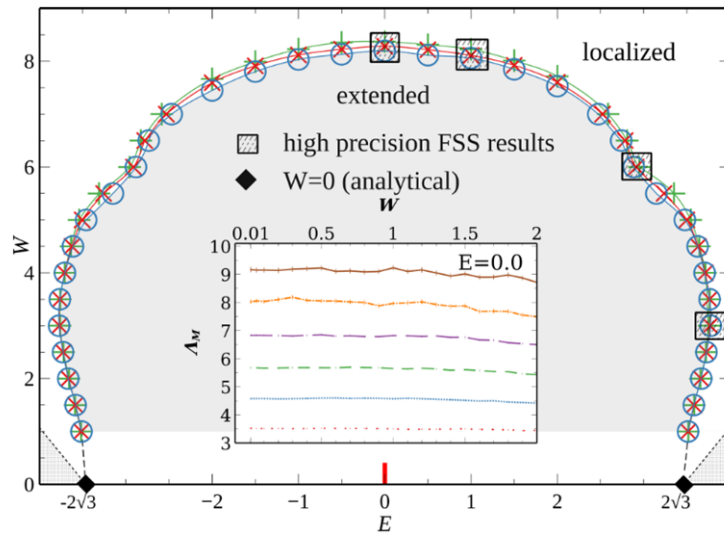


图 4.4 $\mathcal{L}_3(1)$ 的相图。三条彩色实线表示用小尺寸 M 估计的相边界的近似位置，即蓝色线和相应的符号（ \circ ）是由宽度 $M = 6$ 和 $M = 8$ 构造，红色线（和 \times ）是宽度 $M = 6$ 和 $M = 10$ 构造，绿色线（和 $+$ ）则是宽度 $M = 8$ 和 $M = 10$ 构造。

从图 4.4 中的插图中可以看出，对于平带能 $E = 0$ ，无序度低至 $W = 0.01$ ， Λ_M 值都随着 M 的增加而增加，因此，扩展态一直存在^[164,165]。

按照 $\mathcal{L}_3(1)$ 的步骤，进一步计算了 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 的相图，且将其展示在图 4.5 中。填充虚线的黑色小正方形(\square)表示在大尺寸 M 下对 Λ_M 进行高精度 FSS 的结果，其中对于宽度 $M \leq 16$ 相应的 TMM 误差 $\leq 0.1\%$ ，对于宽度 $M = 18$ ，则误差 $\leq 0.2\%$ 。中间的阴影区域表示扩展的态，而相边界外面的态则是局域的。两侧的虚线是 $W < 1$ 时相位边界的预期延续的一个直观指示。图 4.5 (a) 在 $E = \pm 1$ 和(b) 在 $E = \pm\sqrt{2}$ 处的红色短垂线表示双重简并平带的位置。菱形符号(\blacklozenge)表示在 $W = 0$ 处的最大带边，即图 4.5 (a) ± 3 和 (b) $\pm 2\sqrt{2}$ 。(a) 的插图表示在平带能 $E = 1$ 处的弱无序行为，无序 W 小至 0.01，误差条和线和图 4.4 中的一样，即条带宽度从 $M = 4$ （稀疏的虚线）到 $M = 14$ （实线）不等。我们同样基于转移矩阵方法构造相图，其数据误差 $\leq 0.2\%$ ，系统尺寸和 $\mathcal{L}_3(1)$ 的相同。由于和之前相同的原因，仅仅考虑了无序 $W \geq 1$ 的情况。和 $\mathcal{L}_3(1)$

一样，我们的模拟结果表明在能量 $E = 0$ 处具有镜像对称性，因此展示在图 4.5 中的数据是经过详细对称操作的。具体来说，选取了相对于能量 $E = 0$ 对称分布的点，通常由于随机无序的存在，这两个对称点的 Λ_M 值会不同，因此取这两个 Λ_M 的平均值并返回给这两个点。接下来，发现 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 的中心色散带的相边界也有一个凹角区域，尽管 $\mathcal{L}_3(3)$ 的情况看起来不明显。同样的，图 4.5 (a) 的插图显示了在平带能量 $E = 1$ 与低无序下的扩展态行为。

4.3.4 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 模型的相图

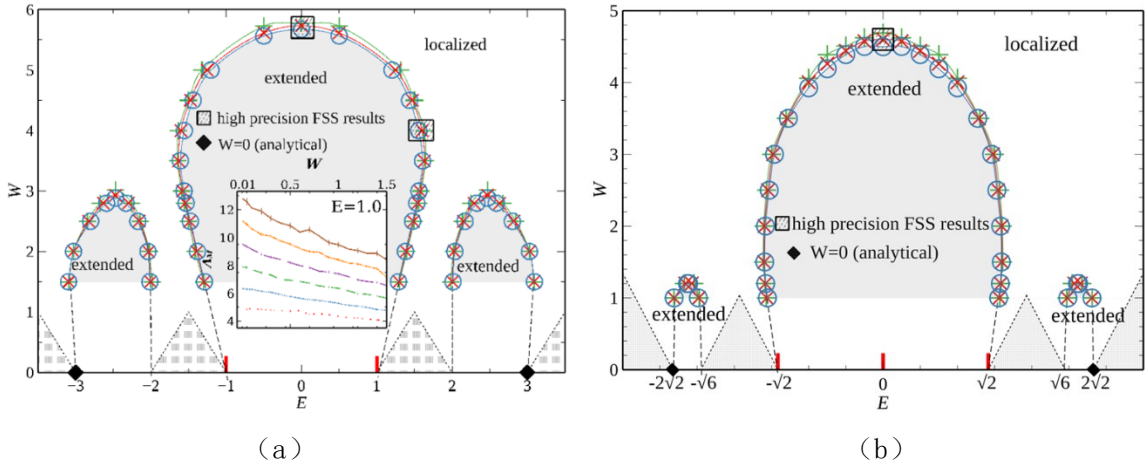


图 4.5 (a) $\mathcal{L}_3(2)$ 和 (b) $\mathcal{L}_3(3)$ 的相图。符号，线以及颜色和图 4.4 类似，即表示用小尺寸 $M = 6, 8, 10$ 估计的。

$\mathcal{L}_3(1)$, $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 的相图之间的明显差异在于， $\mathcal{L}_3(1)$ 的扩展区域是单连通的，而 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 的扩展区域是不相连的。这种差异可以被归为 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 的色散关系中能隙的存在，如图 4.2 所示。回想一下之前提到的临界无序 W_c ，我们看到立方格子的临界无序是 $W_c \sim 16.530$ ^[166]，其可以看成 $n = 0$ 的 Lieb 模型，即 $\mathcal{L}_3(0)$ 。 $\mathcal{L}_3(1)$ 的临界无序为 ~ 8.6 ， $\mathcal{L}_3(2)$ 为 ~ 5.9 ， $\mathcal{L}_3(3)$ 的则为 ~ 4.8 ，即随着 n 增加呈现下降趋势。因此，正如预期的那样，在 Lieb 模型中，随着 n 的增加，在更弱的无序下就出现扩展态的消失。

4.3.5 $\mathcal{L}_3(1)$ 模型临界性质的高精度确定

为了确定 Lieb 模型在相变边界处的临界性质，需要计算更大系统尺寸以获得可靠的 FSS。在所有的情况下，数据的系统尺寸达到 $M = 20$ ，且 TMM 误差 $\leq 0.1\%$ 。根据图 4.4 所示的相图作为粗略的参考，选出了四个特别感兴趣的点，即在带中的固定能量 $E = 0$ 以及带边的固定能量 $E = 1$ 处，作为无序 W 的函数的转变点；另外两个转变点则是考虑作为能量 E 的函数，对应于凹角区域的 $W = 3$ ^[159]，以及对应于相边界上扭结点的 $W = 6$ 。在图 4.6 中，给出了数据 $\Lambda_M(E, W)$ ，以及 FSS 结果一个典型例子对

应的标度曲线和临界参数 ξ 的变化情况。系统尺寸 M 从14（灰色+），16（深黄色 \times ），18（蓝色+），到20（紫色 \odot ）。每幅图的左半部分表示 Λ_M 与无序 W 或者能量 E 的关系，其中实线是根据等式 2.31-2.33 对数据进行拟合得到的，其中拟合系数分别为（a, b） $n_r = 3, m_r = 1$ ，（c） $n_r = 2, m_r = 1$ 和（d） $n_r = 1, m_r = 1$ 。每幅图的右半部分表示标度函数 F （实线）和标度后的数据点的关系，与相应的左半部分具有相同的 n_r 和 m_r 。上分支与下分支的标度曲线分别表示扩展态和局域态。

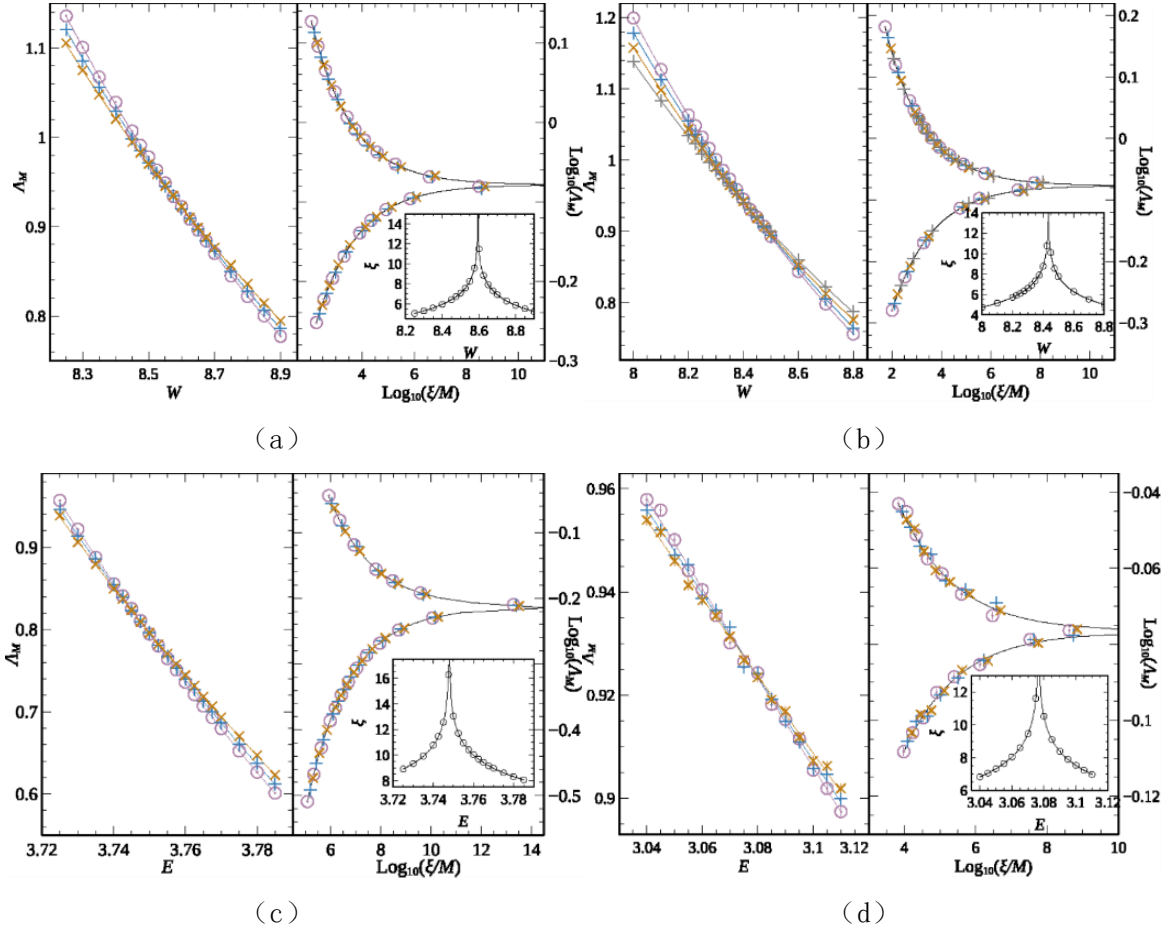


图 4.6 $\mathcal{L}_3(1)$ 在能量（a） $E = 0$ ，（b） $E = 1$ ，（c） $W = 3$ 和（d） $W = 6$ 处局域化长度 Λ_M 的 FSS 结果。插图：每个插图给出了标度参数 ξ 作为（a, b）无序 W 或者（c, d）能量 E 的函数的关系。拟合参量详见表 4.2。

在表 4.2 中，列出了图 4.6 中所示的4种情况的拟合数据，以及具有更高展开系数 n_r, m_r 的情况。基于增加展开参量的数量也得到一致的结果，表明我们的结果是稳定的。同时也进一步检查了对于固定能量和固定无序的转变，分别轻微改变拟合数据的范围 δW 和 δE ，其结果也是稳定的。值得一提的是，在平均值的计算过程中，考虑了误差的传递。举例来说，3 个量 a, b 和 c 分别具有不确定性 $\delta a, \delta b$ 和 δc ，那么定义为这 3 个量平均值的量 d ，即 $d = (a + b + c)/3$ ，其不确定性为 $\delta d = \sqrt{((\delta a)^2 + (\delta b)^2 + (\delta c)^2)/3^2}$ 。

然而不相关参量 n_i 和 m_i 并没有出现在我们的拟合中，这是由于高质量数据（大

尺寸高精度)的缺少造成的, 现有数据的准确性和尺寸大小不足以可靠地拟合不相关参量的贡献, 因此表 4.2 中展示的结果都是 $n_i = m_i = 0$, 尽管在执行 FSS 的过程中确实考虑了这些参量。此外, 发现在图 4.6 中, 在固定的无序 $W = 3$, 特别是 $W = 6$, TMM 数据的准确性变得更差。这种行为出现的原因原则上很容易理解, 因为在这些点上, DOS 有一个明显的变化, 导致了额外的修正不能被 FSS 较好地捕捉到^[167]。通常, 较大系统尺寸 M 可以减少这些变化的出现, 但是由于计算限制我们目前没法做到。

表 4.2 $\mathcal{L}_3(1)$, $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 在金属绝缘体转变处的临界参量。从左至右分别是所考虑的系统宽度 M 的范围, 固定的 E (或者 W), W 的范围 (E 的范围), 以及展开阶数 n_r 和 m_r , 临界无序 W_c (能量 E_c), 它们 95% 的置信区间 (CI), 临界指数 ν 及其 CI, 和拟合优度几率 p 。平均值包含前面三个 W_c (或 E_c) 和 ν 值的平均值, 括号中是平均值的标准误差。加粗的 W_c , E_c 和 ν 值突出显示其是图 4.6 和图 4.7 中所用的拟合。

$\mathcal{L}_3(1)$									
ΔM	E	δW	n_r	m_r	W_c	CI(W_c)	ν	CI(ν)	p
16 – 20	0	8.25 – 8.9	3	1	8.594	[8.585,8.604]	1.57	[1.49,1.65]	0.15
16 – 20	0	8.25 – 8.9	2	2	8.598	[8.586,8.610]	1.55	[1.46,1.63]	0.08
16 – 20	0	8.25 – 8.9	3	2	8.595	[8.582,8.607]	1.57	[1.48,1.66]	0.13
Averages:					8.596(4)		1.56(3)		
ΔM	E	δW	n_r	m_r	W_c	CI(W_c)	ν	CI(ν)	p
14 – 20	1	8.0 – 8.8	3	1	8.435	[8.429,8.441]	1.60	[1.54,1.65]	0.18
14 – 20	1	8.0 – 8.8	2	2	8.439	[8.432,8.447]	1.57	[1.53,1.62]	0.19
14 – 20	1	8.0 – 8.8	2	3	8.438	[8.431,8.446]	1.57	[1.53,1.62]	0.21
Averages:					8.437(3)		1.58(2)		
ΔM	W	δE	n_r	m_r	E_c	CI(E_c)	ν	CI(ν)	p
16 – 20	3	3.725 – 3.785	2	1	3.748	[3.747,3.749]	1.75	[1.68,1.82]	0.88
16 – 20	3	3.725 – 3.785	2	2	3.748	[3.747,3.749]	1.76	[1.67,1.84]	0.86
16 – 20	3	3.725 – 3.785	3	1	3.748	[3.747,3.749]	1.75	[1.68,1.82]	0.86
Averages:					3.748(1)		1.75(3)		
ΔM	W	δE	n_r	m_r	E_c	CI(E_c)	ν	CI(ν)	p
16 – 20	6	3.04 – 3.11	1	1	3.077	[3.070,3.083]	1.54	[1.08,2.01]	0.14

16 – 20	6	3.04 – 3.11	2	1	3.076	[3.069,3.082]	1.54	[1.09,1.99]	0.24
16 – 20	6	3.04 – 3.11	2	2	3.077	[3.069,3.084]	1.54	[1.07,2.00]	0.21
Averages:					3.077(3)		1.54(14)		
$\mathcal{L}_3(2)$									
ΔM	E	δW	n_r	m_r	W_c	$CI(W_c)$	ν	$CI(\nu)$	p
12,14,18	0	5.85 – 6.05	2	2	5.964	[5.958,5.969]	1.75	[1.57,1.92]	0.08
12,14,18	0	5.85 – 6.05	2	3	5.965	[5.959,5.970]	1.70	[1.51,1.89]	0.08
12,14,18	0	5.85 – 6.05	3	2	5.963	[5.956,5.971]	1.75	[1.57,1.92]	0.07
Averages:					5.964(3)		1.73(6)		
ΔM	W	δE	n_r	m_r	E_c	$CI(E_c)$	ν	$CI(\nu)$	p
10,12,14	4	1.6 – 1.8	2	1	1.704	[1.701,1.708]	1.55	[1.43,1.68]	0.18
10,12,14	4	1.6 – 1.8	1	3	1.705	[1.701,1.709]	1.56	[1.43,1.70]	0.1
10,12,14	4	1.6 – 1.8	2	2	1.703	[1.700,1.707]	1.53	[1.40,1.66]	0.2
Averages:					1.704(2)		1.55(5)		
$\mathcal{L}_3(3)$									
ΔM	E	δW	n_r	m_r	W_c	$CI(W_c)$	ν	$CI(\nu)$	p
12 – 18	0	4.7 – 4.875	2	1	4.79	[4.786,4.794]	1.63	[1.48,1.78]	0.49
12 – 18	0	4.7 – 4.875	1	2	4.791	[4.786,4.795]	1.63	[1.48,1.78]	0.47
12 – 18	0	4.7 – 4.875	2	2	4.791	[4.786,4.795]	1.63	[1.48,1.78]	0.47
Averages:					4.790(2)		1.63(5)		

4.3.6 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 模型临界性质的高精度确定

为了对 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 的局域化长度实行 FSS, 采用了与前一节相似的策略。对于系统尺寸在 $M = 16$ 以下的体系, 其 TMM 的误差保持在 $\leq 0.1\%$, 由于 $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 模型复杂性的增加, 对于最大的系统尺寸 $M = 18$ 限定其误差为 $\leq 0.2\%$ 。在图 4.7 中, 系统大小 M 是 10 (橘色 \triangleleft), 12 (蓝色 \triangleright), 14 (灰色 $+$), 16 (深黄色 \times), 18 (蓝色 $+$)。每个图的排版和图 4.6 一样, 即各个图的左半边是标度曲线 (实线) 和数据 Λ_M (符号), 右边则是标度曲线 F (线) 以数据 (符号), 插图为 ξ 。所选择的展开系数为 (a) $n_r = 2, m_r = 2$ (b) $n_r = 2, m_r = 1$ 和 (c) $n_r = 2, m_r = 1$, 如表 4.2 中粗

体标出所示。对于 $\mathcal{L}_3(2)$ ，在能量 $E = 0$ 处我们给出了一个组合图，如图 4.7 (a) 所示，左边是数据 $\Lambda_M(E = 0, W)$ 和拟合曲线（实线），右边则是展开系数为 $n_r = 2, m_r = 2$ 的标度曲线（实线）与数据 $\Lambda_M(E = 0, W)$ 。从图中很难看到数据 $\Lambda_M(E = 0, W)$ 在 W_c 有清晰的交叉点。这种情况对于数据 $\Lambda_M(E, W = 4)$ 有了明显的改善，从图 4.7 (b) 中可以看到在 $E_c \sim 1.70$ 处 Λ_M 的一个清晰的交点。对于 $\mathcal{L}_3(3)$ ，由于复杂性的进一步增加，我们只关注能量 $E = 0$ 的性质。与 $\mathcal{L}_3(2)$ 类似， $\Lambda_M(E = 0, W)$ 的交点也不太清晰，如图 4.7 (c) 所示。

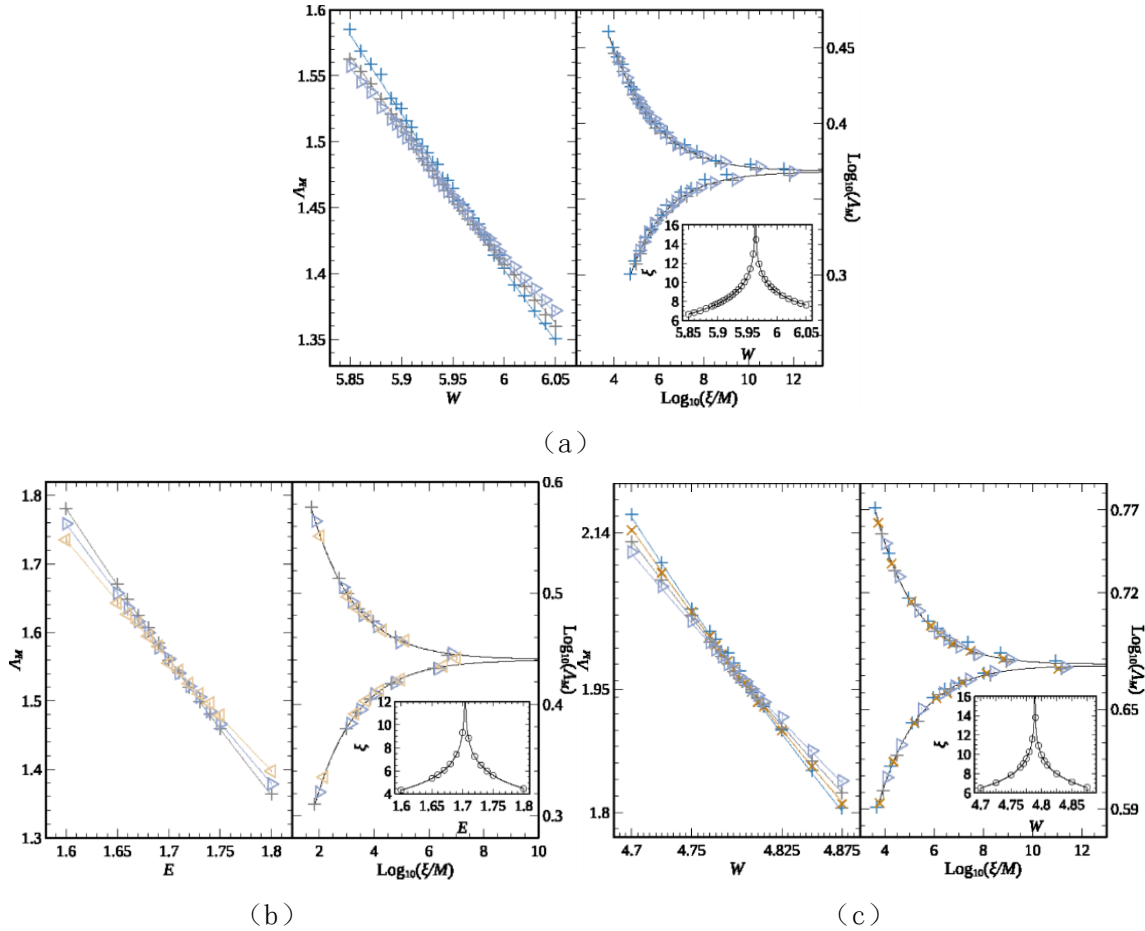


图 4.7 $\mathcal{L}_3(2)$ 在能量 (a) $E = 0$ 和 (b) $W = 4$ ，以及 $\mathcal{L}_3(3)$ 在能量 (c) $E = 0$ 处局域化长度的 FSS。

尽管如此，在所有三种情况下，FSS 结果产生了兼具稳定性与鲁棒性的拟合数据， W_c ， E_c 和 ν ，如表 4.2 所示。

4.4 总结

我们研究了存在格点势能无序的三维 Lieb 模型及其扩展模型 $\mathcal{L}_3(n)$ 的局域化性质。通过有限大小标度理论我们获得了临界无序（能量）与临界指数 ν ，将经过平均之后的临界指数 ν 总结在图 4.8 中。结果表明，这里大部分研究的 Lieb 模型在不同的

无序或能量范围内的临界指数 ν 在误差条内与普遍接受的值 $\nu = 1.590$ (1.579,1.602) 一致。其次简单立方格子的临界无序 $W_c \sim 16.5$ ，而 $\mathcal{L}_3(1)$ 的临界无序 $W_c \sim 8.6$ ， $\mathcal{L}_3(2)$ 的 $W_c \sim 5.9$ 以及 $\mathcal{L}_3(3)$ 的 $W_c \sim 4.8$ 。可以得出结论，模型 $\mathcal{L}_3(n)$ 随着 n 的增加，临界无序 W_c 依次递减。

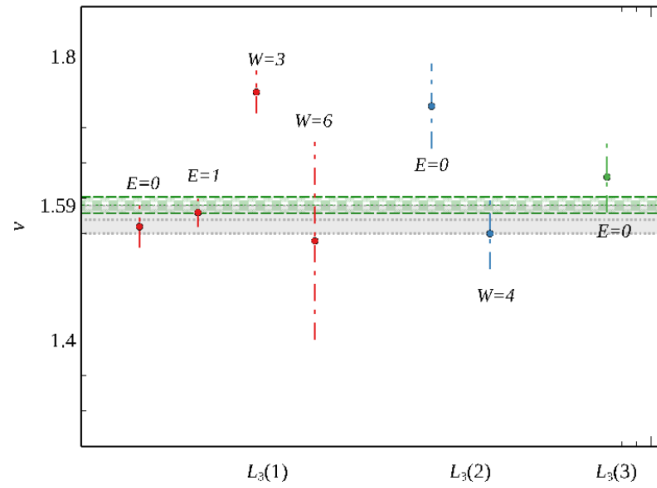


图 4.8 表 4.2 中七个平均值（及其误差）分别对应于 $\mathcal{L}_3(1)$ （红色）， $\mathcal{L}_3(2)$ （蓝色）和 $\mathcal{L}_3(3)$ （绿色）的平均临界指数 ν 的变化。绿色水平虚线表示三维 Anderson 模型中波函数通过 FSS 得到的临界指数 $\nu = 1.590(1.579,1.602)^{[166]}$ ，其中绿色的阴影部分表示表示其误差条。来自 TMM 结果的 $\nu = 1.57(2)^{[138]}$ 用灰色虚线表示，其中灰色阴影区域表示其误差条。

第 5 章 Lieb 模型及其扩展模型中的局域化特性

5.1 引言

平带系统的能带结构中平带处的态出现了宏观的简并，且其动能被有效的降低，因此哈密顿量中的另一项势能变得显著，比如多个粒子之间的相互作用等。因此平带系统也被认为是理想的强关联系统的平台，可以用来学习诸如分数量子霍尔效应，自旋液体，铁磁以及超导等。平带的本征态是宏观简并态，波函数振幅仅仅在晶格的有限个格点是有限值，其它的格点都为零，因此平带中的态被认为是局域化的^[113]。那么，被认为会破坏简并态的无序，最开始也应该会破坏局域化。所以，考虑无序之后，系统会发生什么现象是一个值得深入研究的问题。在前面两章中，我们主要学习了二维和三维 Lieb 模型及其扩展模型的局域化性质，发现在原始平带处的弱无序区域，确实具有和色散带不同的局域化性质，也得到了相应的普适性的临界参量等。

在这一章中，我们主要补充^[119,120]前两章介绍的结果。进一步研究在不考虑高斯展宽下的 DOS 结果，更直观地展示 $\mathcal{L}_2(n)$ 标度函数 Λ_M 与约化关联长度 ξ_M ，临界参量 ξ 与无序 W 的关系，改变边界条件计算三维 Lieb 模型的相图，以及进一步研究在平带附近区域，无序低至 0.01 情况下的局域化性质，最后展示了考虑不相关变量的有限大小标度结果。

5.2 结果

本章考虑的模型是 $\mathcal{L}_2(n)$ 和 $\mathcal{L}_3(n)$ ，其中 $n = 1, 2, 3$ 和 4 ，分别如图 3.1 和图 4.1 所示。哈密顿量分别由方程 3.1 和方程 4.1 给出。

在本章节中，我们采用前两章使用的方法。采用直接对角化方法求解本征能谱，计算出相应的态密度 (DOS)。其次通过转移矩阵方法求解系统的局域化长度，应用有限大小标度理论获得临界函数，临界参量等。

5.2.1 二维 Lieb 模型 $\mathcal{L}_2(n)$ 结果回顾

在第 3 章中，我们详细研究了 $\mathcal{L}_2(n)$ 的局域化性质。对小尺寸系统使用直接对角化方法，计算出态密度 (DOS)。可以看到，在无序存在的情况下，平带和色散带之间的相互作用对于 $\mathcal{L}_2(n)$ ($n = 1, 2, 3, 4$) 都是突出的。无序能迅速地破坏平带的简并度，并且使其状态与临近的色散带合并。当 $W \gtrsim 2$ 时，平带的 DOS 失去了它明显的峰值，成为了大块 DOS 的一部分。

接着使用重整化的转移矩阵方法 (TMM) 计算约化局域化长度 $\Lambda_M(E, W) = \lambda(E, W)/M$ ，其中 M 对应于准一维条带的宽度。对于所有的 $\mathcal{L}_2(n)$ ，发现在 $W \gtrsim t$ 时所

有的态都是局域的（至少在 $n = 1, 2, 3, 4$ 的情况下）。平带处态的局域化长度比色散带处态的局域化长度大约小一个数量级。我们采用传统的单参量有限尺寸标度方法来估计参数 $\xi(E, W)$ ^[158]。缩放后的 $\Lambda(E, W)/M$ 可以用标度函数的一个分支描述，对应于完全的局域化行为。在用无序 W 拟合 ξ 时，我们使用了三种拟合形式，分别为幂律形式 $\xi(W) \propto W^{-2}$ ^[121]，非普适性形式的 $\xi(W) = aW^{-\alpha} \exp(\beta W^{-\nu})$ 以及一个受约束形式的 $\xi(W) = aW^{-2} \exp(\beta W^{-1})$ 。在 $\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_2(3)$ 的平带能量 $E = 0$ 处，我们发现通常适合一维局域化的幂律形式 $\xi(W) \propto W^{-2}$ 可以很好的拟合 $1 < W < 2$ 附近的无序。然而，对于 $\mathcal{L}_2(2)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 的能量 $E = 0$ ，即位于色散带的能量，没有一个拟合给出令人信服的结果。

5.2.2 $\mathcal{L}_2(n)$ 的标度性质及不考虑高斯展宽的 DOS

1. $\mathcal{L}_2(n)$ 标度函数 Λ_M 与约化关联长度 ξ_M 的关系

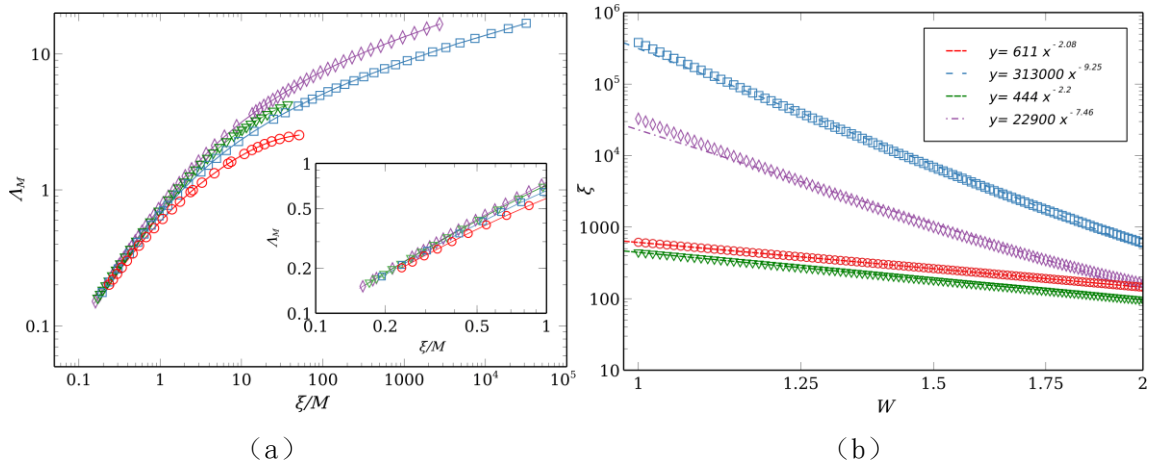


图 5.1 (a) $\mathcal{L}_2(1)$ (红色 \circ), $\mathcal{L}_2(2)$ (蓝色 \square), $\mathcal{L}_2(3)$ (绿色 ∇) 和 $\mathcal{L}_2(4)$ (紫色 \diamond) 在能量 $E = 0$ 处的约化局域化长度 $\Lambda_M(0, W)$ 。为了清晰起见，曲线包含了所有数据点，而只有 15% 的数据点（符号）表示出来。插图：小数值的约化关联长度的细节。(b) 参量 $\xi(0, W)$ 与无序 W 的关系，其中符号和颜色与 (a) 中所代表的 Lieb 格子类型完全一致。虚线表示幂律拟合函数 ax^b 。

对于 $\mathcal{L}_2(n)$ ($n = 1, 2, 3$ 和 4)，在能量 $E = 0$ 处约化局域化长度 $\Lambda_M(0, W)$ 作为缩放后的关联长度 ξ/M 的函数示意展示在图 5.1(a) 中。能量 $E = 0$ 对应于 $\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_2(3)$ 的平带， $\mathcal{L}_2(2)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 的色散带。所有的数据点 $\Lambda_M(0, W)$ 均展示局域态的行为，对大尺寸系统的较大无序区域，其标度曲线的形式表现为 $\Lambda_M(0, W) \propto \xi(0, W)/M$ 。从图 5.1(a) 的插图中可以看出，在较大无序的区域，平带和色散带的行为是相似的。

2. $\mathcal{L}_2(n)$ 标度参量 ξ 与无序 W 的关系

根据图 5.1 (a) 中的数据 $\Lambda_M(E = 0, W)$ ，在较小的无序 $t \leq W \leq 2t$ 区域计算得到的标度参量 ξ 与无序 W 的依赖关系如图 5.1 (b) 所示。我们看到 $\mathcal{L}_2(1)$ 的关联长度 ξ 的

行为与 $\mathcal{L}_2(3)$ 的相当；两者都可以用一个幂律函数很好的描述，其具体形式为 ax^b ，指数 b 近似为 $b \sim -2$ ，这与标准的一维 Anderson 模型^[121]的局域化特性类似。这可能表明，至少对于弱的无序情况而言，这些无序的平带态的局域化行为类似于一维的态的行为。另一方面，对于 $\mathcal{L}_2(2)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 在 $E = 0$ 处的色散带而言，我们发现其关联长度 ξ 的值比 $\mathcal{L}_2(1)$ 和 $\mathcal{L}_2(3)$ 大几个数量级。简单的幂律形式也不再适合，而我们看到了出现在二维 Anderson 模型中的更标准的行为^[121]，即当 $W \rightarrow 0$ 时 ξ 出现快速发散的行为。然而，对于平带能量与色散带能量处态的两种情况，拟合都不具有鲁棒性，并且具有较小的 p 值， $< 10^{-10}$ 。这表明 $\xi(W \rightarrow 0)$ 的真实形式还有待确定。

3. $\mathcal{L}_2(n)$ 不考虑高斯展宽下的 DOS

用直接对角化计算的无序平均的态密度(DOS)的结果展示在如图 5.2 中。 $\mathcal{L}_2(1)$ ， $\mathcal{L}_2(2)$ ， $\mathcal{L}_2(3)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ 的系统大小分别为 $M^2 = 13^2, 10^2, 9^2, 8^2$ 。无序从 $W = 0$ 到 $W = 5.2$ ，步长为0.05，且考虑了300个独立的随机无序构型。我们可以看到对于 $\mathcal{L}_2(1)$ ， $\mathcal{L}_2(2)$ ， $\mathcal{L}_2(3)$ 和 $\mathcal{L}_2(4)$ ，当无序到达 $W = 2$ 时，之前靠近 $W = 0$ 处平带显著的峰基本上都消失了。这与第 3 章中的高斯展宽之后的 DOS 很类似。

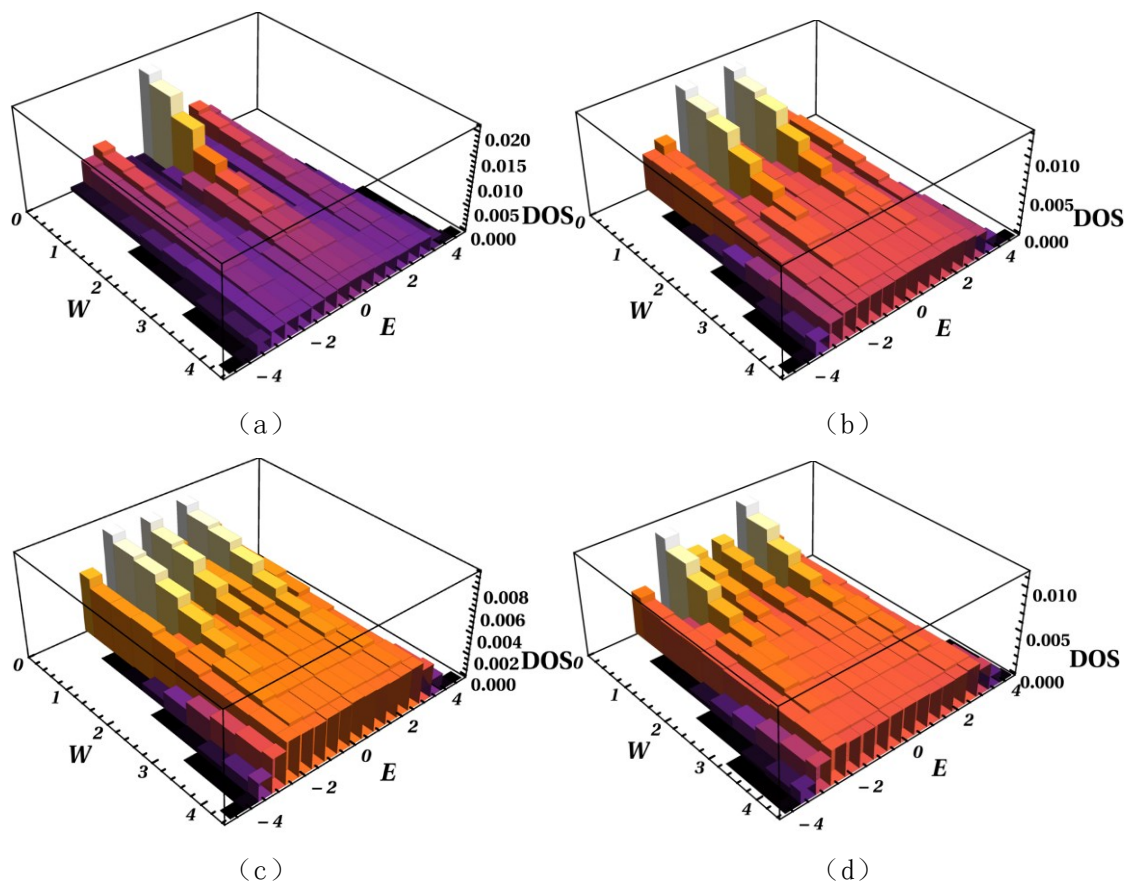


图 5.2 (a) $\mathcal{L}_2(1)$ ，(b) $\mathcal{L}_2(2)$ ，(c) $\mathcal{L}_2(3)$ 和 (d) $\mathcal{L}_2(4)$ 的 (E, W) 态密度 (DOS) 归一化柱状直方图。颜色表示不同的 DOS 值，范围从 0(深紫色)到最大值(白色)。为了表示清晰，在 (E, W) 方向选择的箱宽。

5.2.3 三维 Lieb 模型 $\mathcal{L}_3(n)$ 结果回顾

在第 4 章中，我们讨论了三维 Lieb 晶格 $\mathcal{L}_3(n)$ ($n = 1, 2, 3, 4$) 的 DOS，局域化性质和相图。显然，与二维情况的主要区别是三维的 Lieb 晶格中存在 Anderson 金属绝缘体转变 (MIT) [120]。 $\mathcal{L}_3(n)$ 的 TMM 构造细节，以及局域化长度的临界指数 ν 的有限大小标度结果也可以在参考文献 [120] 中找到。我们发现 ν 的值与目前接受的 Anderson 转变值 $\nu = 1.590(1.579, 1.602)$ [138, 166] 一致。在接下来的篇幅中，我们将详细阐述相图对边界条件的稳定性，强调相变在相图中的不同位置，解释考虑不相关变量 FSS 的可能性，并且提供没有高斯展宽的相图。

5.2.4 $\mathcal{L}_3(1)$ 周期性边界条件相图以及小无序区域局域化性质

1. $\mathcal{L}_3(1)$ 周期性边界条件下的相图

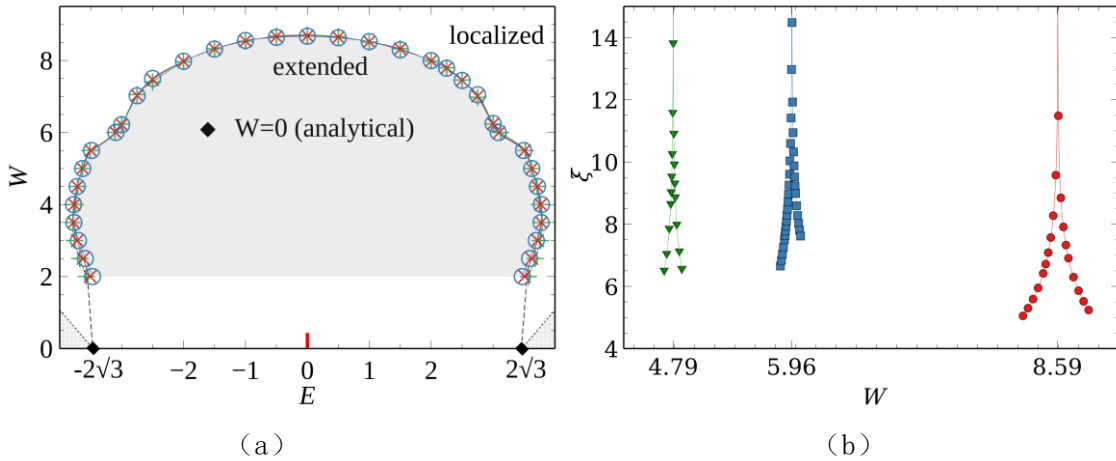


图 5.3 (a) $\mathcal{L}_3(1)$ 周期性边界条件下的相图。三条实彩线表示由小尺寸 M 估计的相边界的近似位置，即蓝色 \circ 来自宽度 $M = 4$ 和 $M = 6$ ，红色 \times 来自宽度 $M = 4$ 和 $M = 8$ ，绿色 $+$ 来自宽度 $M = 6$ 和 $M = 8$ 。(b) $\mathcal{L}_3(1)$ (红色 \circ)， $\mathcal{L}_3(2)$ (蓝色 \square) 和 $\mathcal{L}_3(3)$ (绿色 ∇) 在能量 $E = 0$ 处的标度参数 ξ 与无序 W 的关系图。展开参量 n_r ， n_i ， m_r 和 m_i 与表 5.1 中突出显示的相同。

在第 4 章中，Lieb 晶格 $\mathcal{L}_3(n)$ 的相图是在硬边界条件下计算得到的。在图 5.3(a) 中，我们现在展示了 $\mathcal{L}_3(1)$ 在周期性边界条件下的相图。每一个相是通过系统尺寸为 $M = 4$ ， $M = 6$ 和 $M = 8$ 的约化局域化长度 $\Lambda_M(E, W)$ 的标度行为在误差满足 $\leq 0.1\%$ 的条件下确定的 [137]。中间的阴影区域表示扩展的态，而相边界外面的态则是局域的。两侧的虚线是 $W < 2$ 时相位边界的预期延续的一个直观指示。在 $E = 0$ 处的红色短垂线表示双重简并平带的位置。菱形符号 (\blacklozenge) 在 $W = 0$ 时的带边，即 $E_{\min} = -2\sqrt{3}$ 和 $E_{\max} = 2\sqrt{3}$ 。虚线是理论的带边 $\pm(|E_{\min}| + W/2)$ ，这些带边下面的态禁区用阴影所填充。

将图 5.3 (a) 的相图与在硬边界条件下获得的结果进行比较，我们发现它看起来与预期非常相似，尽管扩展态区域在 E 轴上略宽。和硬边界条件类似，我们也可以在

无序 $W = 4$ 附近确定一个凹角区域，以及在 $E \sim 3$ 且 $W \sim 6$ 的地方找到一个“肩”的特性。正如预期的那样，在本文中与第 4 章中使用的小尺寸体系下适度无序平均的数据结果已经不会因为边界条件的改变而显著地改变相图。

2. 小无序区域 $0.01 \leq W \leq 2.0$ 的局域扩展转变

对于 $W < 1$ ，众所周知 TMM 的收敛速度非常慢。因此，足够小的误差的结果很难计算。通常，这不会成为一个问题，因为在三维的 Anderson 模型中， $W \rightarrow 0$ 的极限平庸地属于扩展相。然而，对于晶格 $\mathcal{L}_3(n)$ ，我们知道在 $W = 0$ 的平带能量处，我们期待紧凑的局域态（CLS）^[61,68]。因此，考察平带能在 $W < 1$ 处的局域化特性是否会从无序 $W \sim 1$ 的扩展态到更小但是有限的无序 $W > 0$ 的局域态的可能的“逆”Anderson 转变是有趣的。

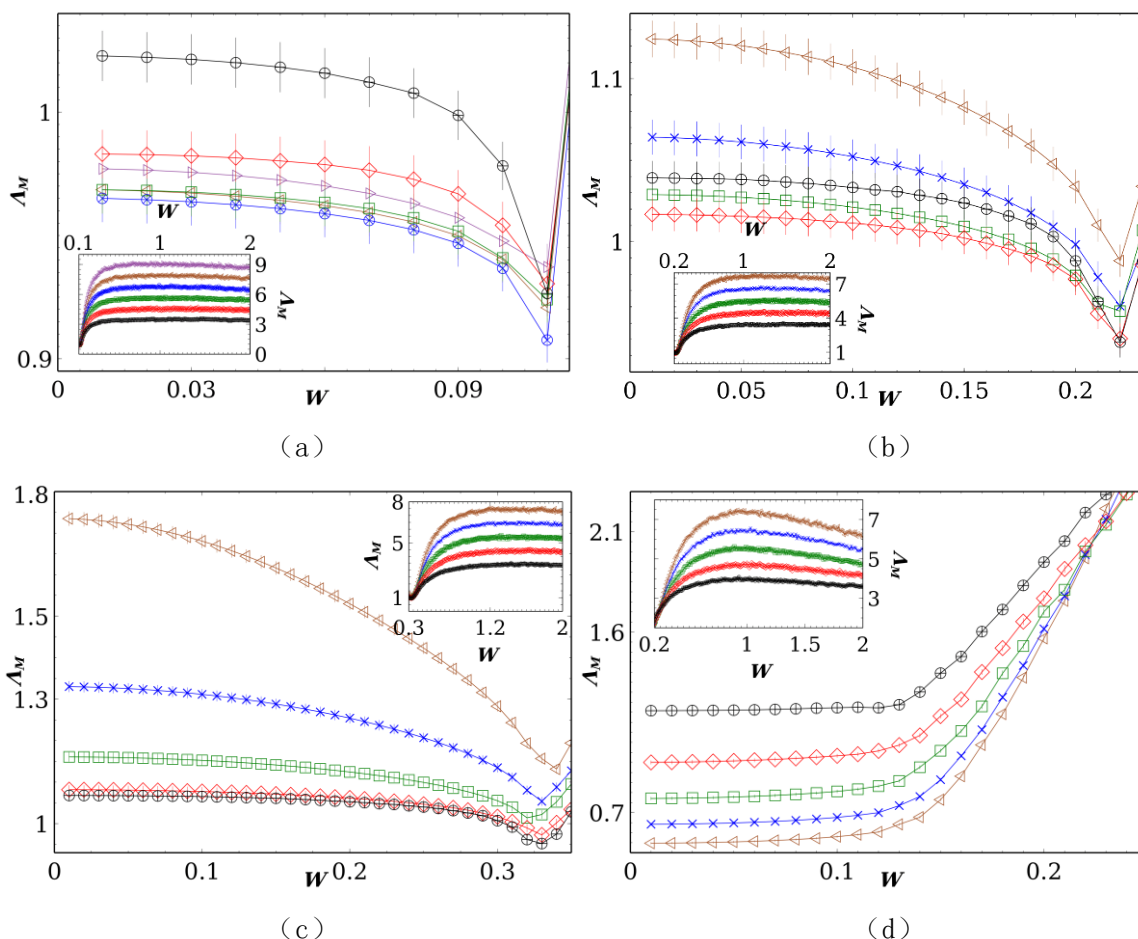


图 5.4 $\mathcal{L}_3(1)$ 在小无序 W 区域以及能量为 (a) $E = 0.05$, (b) $E = 0.1$, (c) $E = 0.15$ 以及 $\mathcal{L}_3(2)$ 在 (d) $E = 1.05$ 的 Δ_M , 其中无序小至0.01, 步长为0.01, 误差小于1.0%。系统尺寸 M 从4 (黑色 \oplus)到6 (红色 \diamond), 8 (绿色 \square), 10 (深蓝 \times), 12 (棕色 \triangleleft)以及14 (紫色 \triangleright)。误差条用实线表示。插图: 对应于主图的结果, 仅增加无序范围直到最大无序为2.0。

在第 4 章中，我们的结果表明，在 $\mathcal{L}_3(1)$ 的平带能 $E = 0$ 和 $\mathcal{L}_3(2)$ 的平带能 $E = 1$ 处， Δ_M 随着 M 的增加而增加，表现为扩展态行为，这种行为在无序小到 $W = 0.01$ 都

一直存在。在图 5.4 (a-c) 中, 通过研究平带能附近能量的局域化性质来扩充结果。对于 $\mathcal{L}_3(1)$ 的 $E = 0.05$ 处, 开始发现了局域化的行为, 例如, Λ_M 在体系大小直到 $M = 10$ 都随着 M 的增加而减小, 但是当 M 更大时, 则反转表现为扩展态行为。对于 $E = 0.1$, 扩展行为在 $M = 8$ 处就开始出现了反转, 而对于 $E = 0.15$, 仅保留扩展行为。在图 5.4 (d) 中, 可以看到 $\mathcal{L}_3(2)$ 在 $E = 1.05$ 时, Λ_M 会随着 M 的增大而减小。在 $E = 0.15$ 处出现在小无序 W 区域的局域化行为是由对应于干净系统 ($W=0$) 中 $E > 1$ 的带隙造成的。

因此可以得出结论, 在较小无序 W 情况下, 平带能的紧凑的局域化态 (CLS) 的存在确实对 Λ_M 与 M 的依赖关系有影响。对于足够大的 M , 发现直到无序小到 $W = 0.01$, 其态依旧保持扩展态行为的特性。

5.2.5 $\mathcal{L}_3(n)$ 的标度性质及不考虑高斯展宽的 DOS

1. 标度参量 $\xi(W)$ 的发散

$\mathcal{L}_3(1)$, $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 的标度参量 $\xi(W)$ 展示在图 5.3 中。可以清晰地看到临界无序 W_c 从 $\mathcal{L}_3(1)$ 的 8.59 下降到 $\mathcal{L}_3(2)$ 的 5.96 以及最后 $\mathcal{L}_3(3)$ 的 4.79。这表明对于较大 n 的 $\mathcal{L}_3(n)$, 即更多额外的原子 (如图 2.1 红色标记的原子所示), 导致更强的局域化, 因此, 会存在较小值 W_c 的金属绝缘体转变。当 $n \rightarrow \infty$ 时, 对于 $W_c(n)$ 的估计可能是一个很有趣的研究。

2. 考虑不相关变量 n_i 和 m_i 的有限大小标度结果

对于临界特性 (包括 ν) 的高精度估计, 目前最先进的方法是在有限大小标度理论分析中考虑不相关变量的贡献, 即作用以 $M^{-\gamma}$ 形式出现, 其中 $\gamma > 0$ 。然而, 这样的有限大小标度理论方法需要很大的 M 来可靠地模拟不相关变量。由于 $\mathcal{L}_3(n)$ 系统复杂性, 在第 4 章中只计算了系统尺寸 $M \leq 20$ 的值。对于这样大小尺寸的系统, 考虑不相关变量通常不会带来更好的结果。在表 5.1 中, 我们展示了有不相关变量与没有不相关变量两种情况的 FSS。我们注意到, 对于有不相关变量 γ 的情况, 尽管得到了可接受的 p 值, 但是在几乎所有的情况下, 这都会导致相关指数 ν 的误差估计增加。另外, 会发现 γ 的估计值有很大的误差, 或者 γ 的值很大。除了表 5.1 中第一个拟合情况以外, 最终估计的物理量 ν 几乎没有变化。因此, 我们得出结论, 对于可用的 Λ_M 数据, 考虑不相关变量 γ 并不一定会增加 ν 估计的准确性。这证实了在第 4 章中做出的选择。

表 5.1 $\mathcal{L}_3(1)$, $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 基于在金属绝缘体转变处的临界参量。分别列出了考虑的系统宽度 M 范围, 固定的 E (或者 W), W 的范围 (E 的范围), 以及展开阶数 n_r , n_i , m_r , m_i , 临界无序 W_c (能量 E_c), 它们 95%的置信区间 (CI), 临界指数 ν 及其 CI, 不相关参量 y 及其 CI, 和拟合优度几率 p 。置信区间以一个有效小数表示。例如, 1.6(4,8)表示 CI 为(1.4,1.8)。

$\mathcal{L}_3(1)$													
ΔM	E	δW	n_r	n_i	m_r	m_i	W_c	$CI(W_c)$	ν	$CI(\nu)$	y	$CI(y)$	p
16-20	0	8.25-8.9	3	0	1	0	8.59	(58,61)	1.6	(4,7)	0	0	0.15
16-20	0	8.25-8.9	2	1	1	1	8.71	(57,84)	1.3	(0.8,1.8)	4	(-2,10)	0.86
14-20	1	8.0-8.8	3	0	1	0	8.44	(42,45)	1.6	(5,7)	0	0	0.18
14-20	1	8.0-8.8	3	2	1	1	8.48	(45,50)	1.8	(6,9)	6.9	(6.6,7.1)	0.77
ΔM	W	δE	n_r	n_i	m_r	m_i	E_c	$CI(E_c)$	ν	$CI(\nu)$	y	$CI(y)$	p
16-20	3	3.725-3.785	2	0	1	0	3.75	(74,75)	1.7	(6,9)	0	0	0.88
16-20	3	3.725-3.785	3	2	1	2	3.75	(74,75)	1.5	(0.6,2.5)	2	(-3,8)	0.7
16-20	6	3.04-3.11	1	0	1	0	3.08	(07,09)	1.5	(1.0,2.1)	0	0	0.14
16-20	6	3.04-3.11	1	1	2	1	3.08	(06,09)	1.5	(0.7,2.4)	47	(44,50)	0.13
$\mathcal{L}_3(2)$													
ΔM	E	δW	n_r	n_i	m_r	m_i	W_c	$CI(W_c)$	ν	$CI(\nu)$	y	$CI(y)$	p
12,14,18	0	5.85-6.05	2	0	2	0	5.96	(95,97)	1.8	(1.5,2.0)	0	0	0.08
12,14,18	0	5.85-6.05	2	1	1	4	5.97	(96,98)	1.7	(1.3,2.1)	9	(2,16)	0.89
ΔM	W	δE	n_r	n_i	m_r	m_i	E_c	$CI(E_c)$	ν	$CI(\nu)$	y	$CI(y)$	p
10-14	4	1.6-1.8	2	0	1	0	1.70	(70,71)	1.6	(4,7)	0	0	0.18
10-14	4	1.6-1.8	1	1	2	1	1.72	(67,78)	1.6	(1.1,2.1)	6	(-18,31)	0.38
$\mathcal{L}_3(3)$													
ΔM	E	δW	n_r	n_i	m_r	m_i	W_c	$CI(W_c)$	ν	$CI(\nu)$	y	$CI(y)$	p
12-18	0	4.7-4.875	2	0	1	0	4.79	(78,80)	1.6	(4,8)	0	0	0.43
12-18	0	4.7-4.875	2	1	1	2	4.79	(78,80)	1.6	(4,8)	8284	(0,1)	0.11

3. $\mathcal{L}_3(n)$ 不考虑高斯展宽下的 DOS

对于使用精确对角化方法获得的本征谱, 在不考虑高斯展宽计算情况下的 DOS 展示在图 5.5。 $\mathcal{L}_3(1)$, $\mathcal{L}_3(2)$, $\mathcal{L}_3(3)$ 和 $\mathcal{L}_3(4)$ 的系统尺寸分别为 $M^3 = 5^3$, 5^3 , 4^3 和 4^3 。无序范围从 $W = 0$ 到 $W = 5.2$, 步长为0.05。由于计算时间的限制, $\mathcal{L}_3(1)$, $\mathcal{L}_3(2)$ 和 $\mathcal{L}_3(3)$ 考虑了300个无序构型, $\mathcal{L}_3(4)$ 则只考虑了100个无序构型。同样, 结果与第 4 章中考虑了高斯光滑的 DOS 非常相似。

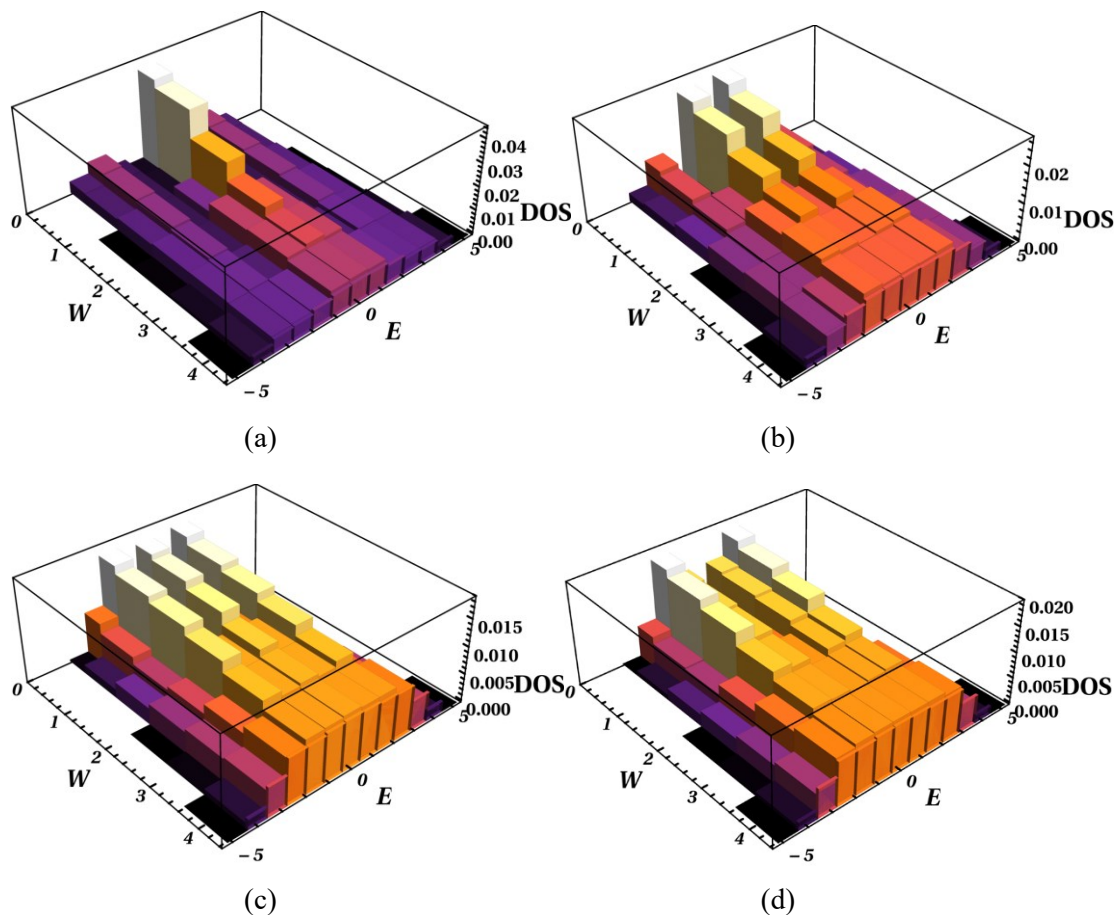


图 5.5 (a) $\mathcal{L}_3(1)$, (b) $\mathcal{L}_3(2)$, (c) $\mathcal{L}_3(3)$ 和 (d) $\mathcal{L}_3(4)$ 的 (E, W) 态密度 (DOS) 归一化柱状直方图。颜色表示不同的 DOS 值, 范围从 0(深紫色)到最大值(白色)。为了表示清晰, 在 (E, W) 方向选择的箱宽。

5.3 小结

在本章中我们研究了二维和三维扩展 Lieb 模型的局域化性质。显然, 二维和三维的 Lieb 晶格分别展现了比标准二维平方格子和三维立方格子更强的局域化。这可以通过图 2.1 中用红色标记的额外插入的原子来理解, 因为这些原子的存在, 使得运输更像是一维的, 因此也会导致更强的局域。在早期使用 TMM 计算二维 Anderson 模型时, 基本只能计算到无序 $W \sim 2$, 如参考文献^[150]中的图 (3), 但是使用 TMM 计算二维的 Lieb 模型时, 在相当小的无序 W 下依旧能够继续。小无序的 FSS 曲线详见图 5.1。

在三维情况下, 我们主要展示了近平带处的态在小无序 W 处的结果, 如图 5.4 所示。由于 $\mathcal{L}_3(n)$ 模型的复杂性, 只能计算相对较小的系统尺寸, 导致对其进行有限大小标度程序比其传统的 Anderson 模型更具挑战性。表 5.1 中展现了可以数值模拟的数据结果, 可以得出结论, 即在现有的计算精度下, 不考虑不相关标度变量的计算并不会影响结果。所有的临界指数都和传统 Anderson 普适类的值一致^[138,166]。

第 6 章 三维扩展 Lieb 模型的非传统去局域化

6.1 引言

我们之前的结果均仅限于非关联的无序系统，而无序系统中的关联效应一直是研究的热点。由于 Abrahams 等人的预测结果^[36]称局域化性质强烈地依赖于系统的维度，几何类型以及所考虑的势的性质^[22,168,23]，对于所有非关联的低维系统，所有的状态都是局域的。同时，当考虑关联无序势^[169,170]时，在一维链中会出现从扩展态到局域态的相变。

然而，空间无序并不是导致晶格中波局域化的唯一因素。在平移不变晶格结构中，最深入研究的本征态局域化的框架之一是平带系统，即由于相消干涉导致有限数量的格点上局域了大量简并单粒子本征态^[171,67,142]。这些称为紧凑的局域态（CLS）的状态形成能谱中的非色散布洛赫带 $E_j(k) = \text{常数}$ ，其能谱不依赖于动量 k 。CLS 被认为是作为信息存储应用的潜在候选者^[172]。然而，它们通常对微扰很敏感。在大多数情况下，不论多小的非关联的无序格点势能会破坏 CLS，会在平带格子中引起波的局域化^[173,74,62,75,156,79,119,174]。然而，在某些情况下，平带晶格内的局部对称性表明了格点势能中存在局部关联，这导致了类似于引用文献^[77,155]中所示的存在无序和准周期势的一维和二维晶格的反常局域化特征。

在这一章中，我们研究了一族三维扩展 Lieb 晶格在局部关联下的影响。在无关联无序的情况下，这些晶格系统从局域相到扩展相的转变依赖于能量，正如我们先前的结果所示^[120]。通过在一族三维扩展 Lieb 晶格中引入局部对称性，我们发现随着无序 W 的增强，会有一半的非 CLS 态向 CLS 态靠近^[173]，因此导致靠近平带的位置出现发散的迁移率边，而在弱无序的情况下，则出现“逆”Anderson 转变。

6.2 模型与方法

我们考虑一族三维的 Lieb 晶格 $\mathcal{L}_3(n)$ ，其中 $n = 1, 2, 3$ 和 4 ，如图 6.1 (a-d) 所示。其中用透明色的正方体圈起来的原子表示一个原胞。基于紧束缚近似方法，哈密顿量为

$$H = \sum_{\vec{r}} \varepsilon_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| - \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} t_{\vec{r}\vec{r}'} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}'|, \quad (6.1)$$

其中， $|\vec{r}\rangle$ 是电子位于 $\mathcal{L}_3(n)$ 的格点 $\vec{r} = (x, y, z)$ 处的正交 Wannier 态， $\varepsilon_{\vec{r}}$ 是格点势能。在这里我们考虑局部关联势 $\varepsilon_{\vec{r}}$ ，其既不会破坏 CLS 的存在也不会去除掉简并性，同时也提供了对于非 CLS 的可能的局域化。为了确保对于任意 n 的 Lieb 格子都有效，我们简单地选择了 Lieb 格点的格点势能 $\varepsilon_{\vec{r}}^{(L)}$ 为常数，即 $\varepsilon_{\vec{r}}^{(L)} \equiv 0$ 。同时通过在 cube 格

点上引进一个在空间上均匀变化的非关联无序，其无序强度为 W ，即 $\varepsilon_{\vec{r}}^{(c)} \in [-W/2, W/2]$ 。与之前一样，对于最近邻格点 \vec{r} 和 \vec{r}' ，我们设置它们之间的跃迁积分 $t_{\vec{r}\vec{r}'} \equiv 1$ 作为能标，其它的则为零。

在图 6.1 (e-h) 中展示的是相应模型的平带本征态—CLS 的振幅分布，由于其振幅仅仅占据在一个平面的几个格点上，其余的格点振幅均为零，因此我们仅仅展示了一个二维的格子。我们可以看到 CLS 的振幅仅仅占据在红色的 Lieb 格点上，蓝色的 cube 格点上振幅总是为零。

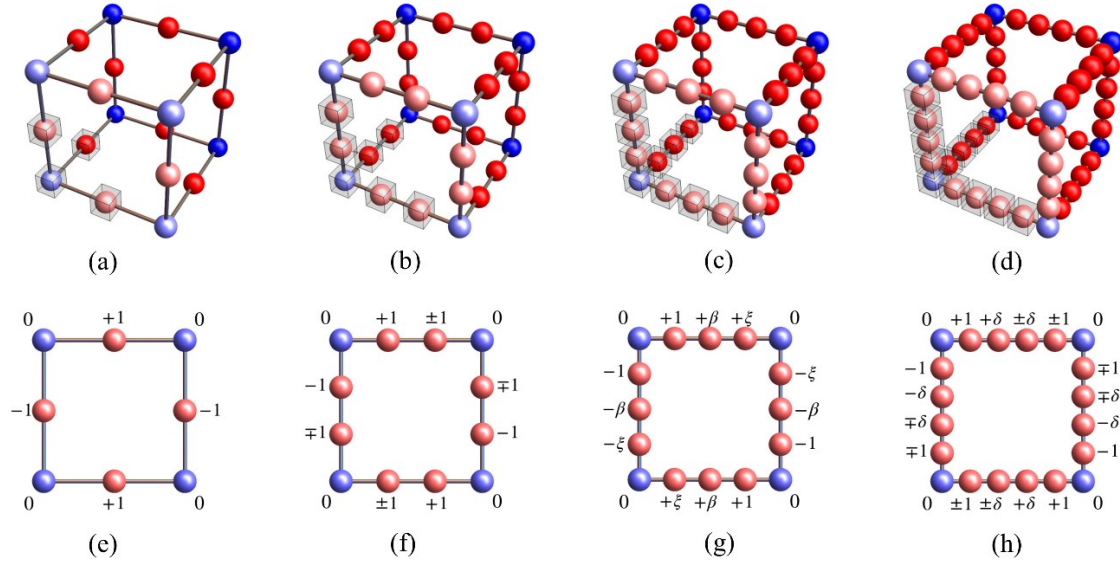


图 6.1 上方的 (a-d) 分别为模型 $\mathcal{L}_3(1)$, $\mathcal{L}_3(2)$, $\mathcal{L}_3(3)$ 和 $\mathcal{L}_3(4)$ 。其中相应的平带的本征能量为 (a) $E = 0$, (b) $E = \pm 1$, (c) $E = \beta = 0, \pm\sqrt{2}$, 其中对于 $\beta = \pm\sqrt{2}$, $\xi = +1$, 而对于 $\beta = 0$, $\xi = -1$, 和 (d) $E = \pm\delta$, 其中, $\delta = (1 \pm \sqrt{5})/2$ 。下方的 (e-h) 分别为相应平带的 CLS 的振幅分布。

在本章节中，我们使用 *Jadamilu* 程序以及直接对角化方法求解本征谱，计算出 DOS 以及参与数。应用转移矩阵方法分析系统的局域性质，获得能量与无序的相图，进一步也采用能级统计方法，直接验证了转移矩阵结果的正确性。通过有限大小标度理论获得临界函数，临界参量，以及普适性的临界指数等。

6.3 结果

在这一章节中，我们主要关注前两个代表模型，即 $\mathcal{L}_3(1)$ 和 $\mathcal{L}_3(2)$ 。注意到，由于能谱在 $E = 0$ 附近近似的镜像对称性（当然在 $\varepsilon_{\vec{r}}^{(L)} = 0$ 时是完全对称的），我们仅展示了正能量 $E \geq 0$ 的结果，尽管我们已经计算了全能谱的数据。

对于第一种情况，即 $\mathcal{L}_3(1)$ ，在 $E = 0$ 时，CLS 存在单一的宏观简并。因此，为了避免由于简并而使数值方案复杂化，我们开始研究能量 $E \neq 0$ 时，基于转移矩阵方法 (TMM) 而获得的局域化长度 A_M 。

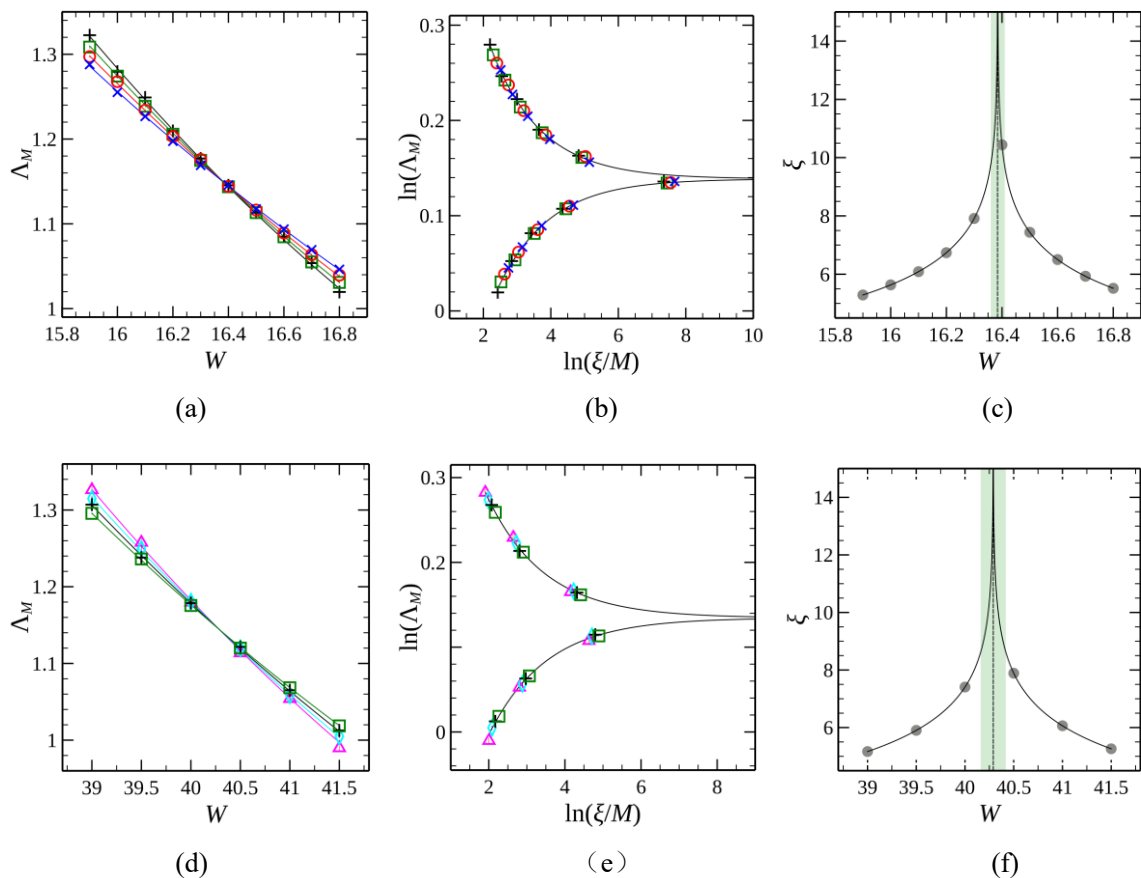
6.3.1 $\mathcal{L}_3(1)$ 发散的金属—局域转变

图 6.1 $\mathcal{L}_3(1)$ 在较大无序 W 区域的约化局域化长度 Λ_M 的有限大小标度结果。其中 $E = 1$ 和 $E = 0.4$ 的结果分别展示在 (a, b, c) 和 (d, e, f)。条形区域的面积 M^2 从 16^2 (蓝色 \times), 18^2 (红色 \circ), 其最大收敛误差为 $\leq 0.1\%$, 到 20^2 (绿色 \square), 22^2 (黑色 $+$), 其最大收敛误差为 $\leq 0.22\%$, 再到 24^2 (青色 \diamond)和 26^2 (品红 \triangle), 其最大收敛误差为 $\leq 0.5\%$ 。误差条均在符号大小范围内。标度结果的详细情况见表 6.1。

在图 6.1 中, 约化局域化长度 Λ_M 与无序 W 之间的关系, 以及对数据 (符号表示的) 所拟合的展开系数为 $n_r = 2$ 和 $m_r = 1$ 的拟合实线展示在图 6.1 (a) 和图 (d) 中。图 6.1 (b) 和图 (e) 给出了标度函数 Λ_M 和 ξ/M 的双对数图, 其中符号表示的是数据, 实线是标度函数。标度参量 ξ 作为无序 W 的函数, 以及标度 (按比例缩放) 后的数据点展现在图 6.1 (c) 和图 (f) 中, 其中垂直的线表示的是估计的临界无序 W_c 以及它们的置信区间 CI (绿色阴影区域所表示)。

局域化长度 Λ_M 在能量 $E = 1$ 处的高精度结果展示在图 6.1 (a) 中, 其中系统尺寸 M^2 从 16^2 到 22^2 。这些曲线显示了一个稳定的交点, 表明存在一个分隔开局域相与金属相的临界无序 W_c 。这样的临界转变基于有限大小标度理论 (FSS) 获得, 如图 6.1 (b, c) 所示, 产生临界无序 $W_c = 16.38(2)$ 。顺便一提, 这与立方晶格在 $E = 0$ ^[166]处的标准 Anderson 转变的临界无序 $W_c = 16.590(12)$ 大致相同。然而, 在更接近宏观简并度的地方重复相同的计算, 即 $E = 0.4$ 处, 如图 6.1 (d-f) 所示, 产生的临界转变值

$W_c \approx 40.29(7)$ 比 $E = 1$ 处的结果高的多。我们也注意到在能量 $E = 0.4$ 处的估计值 $W_c \approx 40.2$ 比在均匀无序的 $\mathcal{L}_3(1)$ 在能量 $E = 0$ 处最大的转变值^[120]高得多。

这两个结果似乎暗示了当能量靠近宏观简并的 $E = 0$ 时， W_c 会发散。因此，我们系统地估计了在区间 $0 < E \leq 1.5$ 的临界转变值 $W_c(E)$ ，即在严格不同于 $E = 0$ 的能量处，通过转移矩阵方法在最大收敛误差 $\leq 0.5\%$ 下，基于小系统尺寸 $M = 6$ 和 8 求解。得到的曲线如图 6.2(a)所示，在黄色区域内由实线连接的白色圆圈证实了 $W_c(E \rightarrow 0)$ 的发散。

6.3.2 $\mathcal{L}_3(1)$ 模型基于能谱解析的金属—局域转变验证

为了进一步验证 $W_c(E)$ 的行为并计算总体相图，我们研究了如公式 6.1 所示的哈密顿量的谱性质。图 6.2 中的数据来源于系统尺寸 $L = 4 \times 20^3$ ，且对于每一个 (E, W) ，至少考虑了100个独立的无序势能构型。对于每一个构型，计算了在目标能量 E 附近高达100个的能量本征值。基于最小的能量间距 $\Delta E = 0.05$ ，最小的无序间距 $\Delta W = 0.1$ ，自适应地选了3300个独立的 (E, W) 用于计算 DOS 和 r 值密度图。为了清晰起见，两个图中都没有显示 $E = 0$ ($\leq 10^{-10}$) 的平带态。图 6.2 (a) 中的黑线表示的是 10^3 个（虚线）和 10^4 （实线）个态的等值线，图 6.2 (b) 中红色阴影区域的线对应于 $\langle r \rangle = 0.53$ （虚线）， 0.5145 （实线）的等值线，而蓝色阴影区中的线则对应于 $\langle r \rangle = 0.4$ （虚线）和 0.38 （实线）的等值线。图 6.2 (a) 和 (b) 中的白线表示的是通过转移矩阵方法基于小尺寸体系 M 求得的转变轮廓线，两条不同的转变轮廓线根据 $M = 6$ 和 $M = 8$ 的 Λ_M 在固定的 E 减小无序 W 所出现的交点来确定，分别对应于出现局域到扩展的转变（实线）和扩展到局域的转变（虚线）行为。在图 6.2 (a) 中，这些基于小尺寸 M 估计的 (E_c, W_c) 以白色圆圈表示。

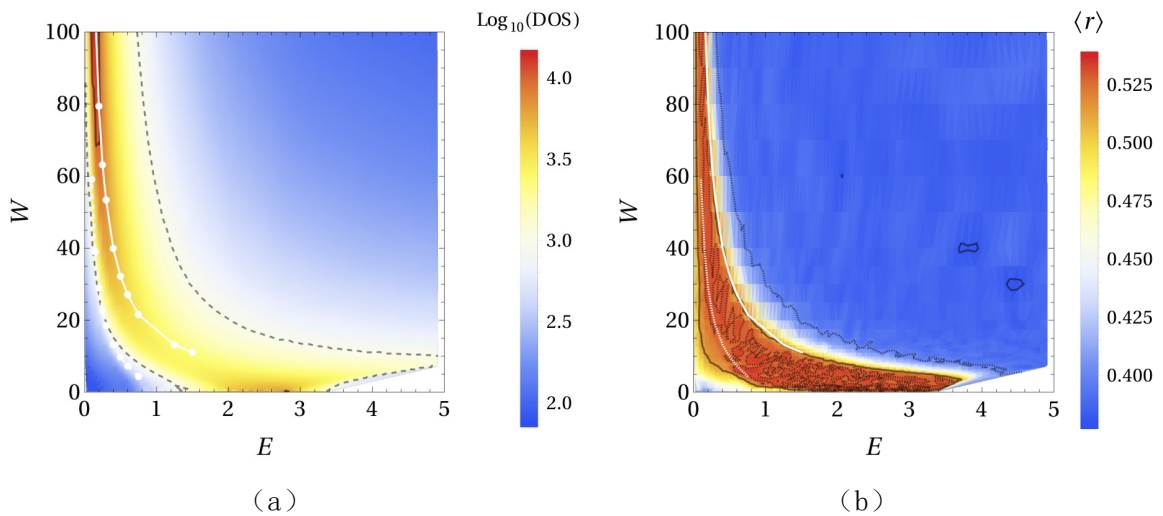


图 6.2 $\mathcal{L}_3(1)$ 依赖于能量 E 和无序 W 的 (a) DOS 和 (b) r 值。

图 6.2(a)中展示了不同无序强度 W 在 $E > 0$ 区域的 DOS，靠近宏观简并能级 $E =$

0的弱无序和强无序区域都表现出令人惊异的现象。也就是说，我们观测到(i)在 $E \leq 1$ 且 $W \rightarrow 0$ 的区域，DOS的消耗现象和(ii)在 $E \leq 1$ 且 $W \rightarrow \infty$ 区域的DOS的加强现象。

前一个观测结果(i)与这样一个事实有关，即在干净的情况下 $W = 0$ ，在 $E = 0$ 的平带通过锥形交点与剩余的色散带相接触，导致了当 $E \rightarrow 0$ 时DOS的下降，如参考文献^[120]讨论的那样。后一种观测(ii)则源于这样一个事实，即对于大的无序 W ，本征态在能量上更倾向于占据未受扰动的Lieb格点(CLS所在的位置)，而不是无序的cube格点。这在图6.3中得到了证实，其中对于不同的无序强度 W (不同符号表示)，我们展示了本征态作为能量 E 的函数在Lieb格点(红色)和cube格点(蓝色)的投影范数。为了方便观看，仅展示了无序 $W = 10$ (\circ)， $W = 20$ (\diamond)， $W = 50$ (\square)。其中无序 $W = 10$ 在Lieb格点投影的线是为了突出显示数据点是在能量间隔 $\Delta E = 0.05$ 且考虑了144个势能构型的平均。在所有的情况下，系统大小为 $L = 4 \times 20^3$ 。

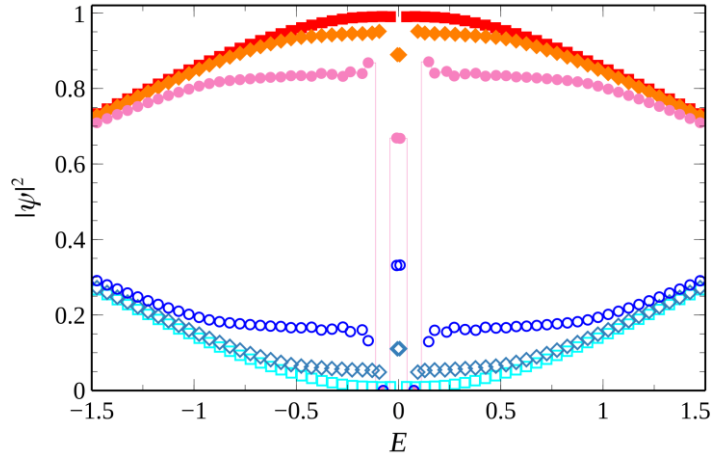


图 6.3 $\mathcal{L}_3(1)$ 的波函数在 cube 格点(蓝色, 空心符号)和 Lieb 格点(红色, 实心符号)的投影几率 $|\psi(r)|^2$ 。

当 $|E| \rightarrow 0$ ，在 Lieb 格点的相对投影范数增加(伴随的是在 cube 格点相对投影范数的减少)的趋势会随着无序 W 的增加而增加。特别是对于强无序 $W = 50$ ， $E \ll 1$ 的本征态范数几乎完全位于 Lieb 格点。 $E \neq 0$ 的本征态向 $E = 0$ 的 CLS 有效映射的这样一个过程导致了一大部分靠近宏观简并能态的能量的降低。因此，导致随着 $W \rightarrow \infty$ ，能量 $E \ll 1$ 区域 DOS 的显著增强。需要提及的是，在这些统计当中，我们排除了那些能量 $E \sim 10^{-4}$ 的本征态，去掉了简并的 CLS。然而，靠近 $E = 0$ ，每一个不同的无序势能样本，都会产生一个能量 $E \sim 10^{-2}$ 单一的本征态，这是来自于 $\langle \varepsilon_r^{(c)} \rangle_{N \rightarrow \infty} \rightarrow 0$ 导致的意外的简并态^[44]。这样的本征态导致了图 6.3 中靠近 $E = 0$ 的离群点的出现。

图 6.2 (a) 所示的 $W_c(E)$ 的发散行为是通过转移矩阵方法估算出来的。为了找到这种行为的进一步支持，我们通过稀疏矩阵对角化方法，使用独立的能谱间隙比率统计 $\langle r \rangle$ 来计算 $\mathcal{L}_3(1)$ 的完整相图。在图 6.2 (b) 中，展示了在系统尺寸 $L = 4 \times 20^3$ 下作

为 E 和 W 的函数 $\langle r \rangle$ 。结果令人信服地证实了对于 $W \gtrsim 10$ 在 $E \rightarrow 0$ 时，转变曲线 $W_c(E)$ 从扩展的 $\langle r \rangle \sim \langle r \rangle_{\text{Sur}} (\sim 0.53)$ 到局域的 $\langle r \rangle \sim \langle r \rangle_{\text{Poi}} (\sim 0.38)$ 的发散趋势。特别是，基于 r 值的转变曲线与局域化长度 Λ_M 标度行为得到的转变曲线（如图 6.2 (b) 中的白色实线所示）具有很强的一致性。此外，可以观察到，在靠近 $E = 0$ 的较小 W 区域， $\langle r \rangle$ 值比 $r \sim 0.529$ 有明显的下降，这与 DOS 消耗有关。

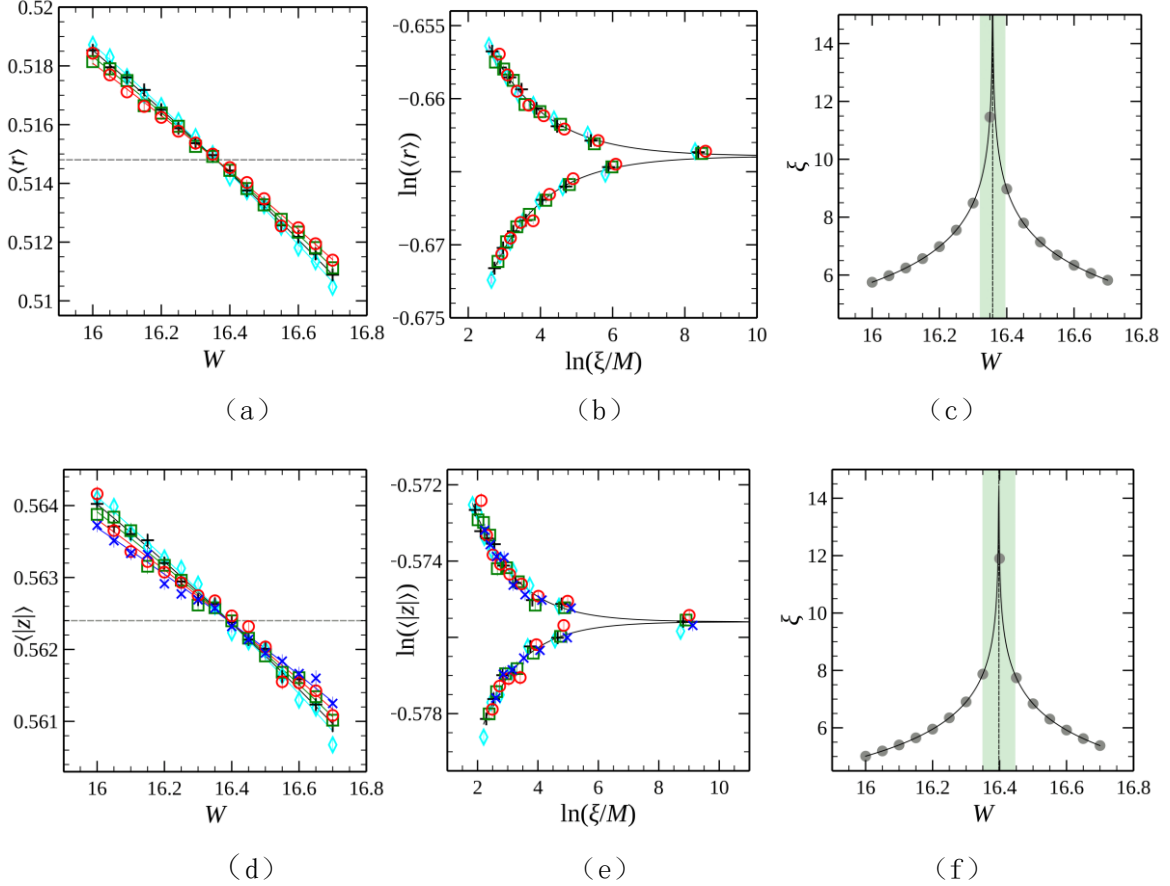


图 6.4 $\mathcal{L}_3(1)$ 分别基于统计量 (a-c) r 值和 (d-f) z 值在能量 $E = 1$ 的高无序 W 区域的有限大小标度结果。系统尺寸为 $L = 4 \times N^3$ ，其中 N 分别从 16 (蓝色 \times)，18 (红色 \circ)，20 (绿色 \square)，22 (黑色 $+$) 到 24 (青色 \diamond)。在计算 $\langle r \rangle$ 和 $\langle |z| \rangle$ 时，对于每一个 N 和 W ，我们考虑了 10000 个不同的势能构型，对于每一个势能构型选择了高达 100 个在目标能量 E 附近的能量本征值。

我们首先更深入地学习从高 E 或 W 值开始时的局域化到非局域化的转变（图 6.2 (b) 中的白色实线）。与转移矩阵方法类似，固定能量在 $E = 1$ ，学习 $\langle r \rangle(W)$ 对于不同系统尺寸 N 的行为，结果展示在图 6.4 (a-c) 中。这些测量结果进一步被基于参考文献^[133,134]中介绍的 $|z|$ 测量的能谱统计结果所证实，展示在图 6.4 (d-f) 中。

图 6.4 (a) 和 (d) 分别展示了 $\langle r \rangle$ 和 $\langle |z| \rangle$ 与无序 W 关系的数据点（符号表示），以及基于表 6.1 中的展开系数 $n_r = 2$ 和 $m_r = 1$ 对这些数据所拟合的曲线，其在图中用实线标记。图 6.4 (b) 和 (e) 分别给出了标度函数 r 值和 z 值与 ξ/M 的双对数图，以及等比例缩放后的数据点（符号表示）。标度参量 $\xi(W)$ 显示在图 6.4 (c) 和 (f) 中。垂

直的线表示的是估计的临界无序 W_c ，阴影区域则是相应的置信区间。在图 (a), (b), (d) 和 (e) 中，误差条大部分都在符号大小范围内。图 (a) 和 (d) 的水平线标记的是在临界无序 W_c 处获得的 $\langle r \rangle$ 值与 $\langle |z| \rangle$ 值，分别是 $\langle r \rangle = 0.5145$ 和 $\langle |z| \rangle = 0.5624$ 。在我们的模拟中，我们得到 $\langle r \rangle = 0.5148$ ，置信区间为 $[0.5143, 0.5153]$ ， $\langle |z| \rangle = 0.5624$ ，置信区间为 $[0.5621, 0.5627]$ 。

在图 6.4 (a-c) 中，我们显示了围绕预期转变值 $W_c \approx 16.4$ ，对于 N 从18到24时 $\langle r \rangle$ 值的 FSS 结果。我们发现用 r 统计方法计算得到的临界无序 $W_c \approx 16.36(2)$ 与用转移矩阵方法计算的临界无序 $W_c = 16.38(2)$ 非常吻合。此外，如表 6.1 所示，FSS 结果与三维 Anderson 转变的临界指数一致^[138,166]。实际上，临界指数 $\nu = 1.51$ 也和转移矩阵的结果一致。最后，我们在图 6.4 (a) 中看到值 $\langle r \rangle(W_c) = 0.5145$ ，这是图 6.4 (b) 中将局域化行为与扩展态行为分开的突出显示的等高线，再次强调了我们结果的一致性。

在图 6.4 (d) 中，我们画出了数据 $\langle |z| \rangle(W)$ 在 $E = 1$ 处， N 从16到24的相应 FSS 曲线，同样围绕预期的 $W_c \approx 16.4$ 。在图 6.4 (e-f) 中，我们展示了相关的标度函数和标度参数。这些结果尽管具有较大的误差，但是与通过 r 统计获得的结果一致，给出了一个临界转变 $W_c \approx 16.40(3)$ 。关于有限尺寸标度 (FSS) 和 Λ_M ， r 值和 $|z|$ 值的标度参量的完整细节在表 6.1 中展示了。特别是，我们注意到即使不考虑非相关修正，FSS 也是可能的。我们也执行了考虑非相关修正的 FSS，并发现符合可接受的 χ^2 统计数据。然而，没有不相关修正的 FSS 已经是稳定的，即独立于所选的无序范围，且是具有鲁棒性的，即 W_c 和 ν 在增加展开阶数 n_r 和 m_r 时的结果是不违反它们的误差边界的。因此，我们只在表 6.1 中显示了后一种情况的结果。来自 TMM 数据的 FSS 结果也是如此。

表 6.1 $\mathcal{L}_3(1)$ 在传统 (标准) Anderson 转变处的临界参量, 其中 Λ_M , r 值和 $|z|$ 值分别作为指示符。分别列出了系统大小 (对应于 Λ_M 给出了 TMM 条形区域的横截面积的宽度 M , 对于 r 值和 $|z|$ 值, 则给出了立方体的边长 N), 固定的 E , W 的范围, FSS 展开阶数 n_r 和 m_r , 以及导致的临界无序 W_c , 它们 95% 的置信区间 (CI), 临界指数 ν , 及其 CI, 和拟合优度几率 p 。平均值包含前面三个 W_c 和 ν 值的平均值, 括号中是平均值的标准误差。加粗的 W_c 和 ν 值突出显示其是图 6.1 和图 6.4 中所用的拟合。

Reduced localization length Λ_M									
M	E	δW	n_r	m_r	W_c	CI(W_c)	ν	CI(ν)	p
20,22,24,26	0.4	39.0 – 41.5	2	1	40.29	[40.16, 40.42]	1.50	[1.28, 1.73]	0.52
20,22,24,26	0.4	39.0 – 41.5	3	1	40.29	[40.15, 40.43]	1.51	[1.27, 1.75]	0.46
20,22,24,26	0.4	39.0 – 41.5	3	2	40.35	[40.14, 40.56]	1.51	[1.26, 1.76]	0.44
20,22,24,26	0.4	39.0 – 41.5	4	1	40.30	[40.16, 40.44]	1.51	[1.27, 1.75]	0.43
Averages:					40.31(4)		1.51(6)		
M	E	δW	n_r	m_r	W_c	CI(W_c)	ν	CI(ν)	p
16,18,20,22	1	15.9 – 16.8	2	1	16.38	[16.36, 16.41]	1.50	[1.37, 1.63]	0.22
16,18,20,22	1	15.9 – 16.8	3	1	16.39	[16.36, 16.41]	1.51	[1.38, 1.65]	0.19
16,18,20,22	1	15.9 – 16.8	3	2	16.41	[16.38, 16.45]	1.50	[1.37, 1.63]	0.37
16,18,20,22	1	15.9 – 16.8	4	1	16.39	[16.36, 16.42]	1.51	[1.37, 1.65]	0.18
Averages:					16.39(1)		1.51(4)		
r – Values									
N	E	δW	n_r	m_r	W_c	CI(W_c)	ν	CI(ν)	p
18,20,22,24	1	16.0 – 16.7	2	1	16.36	[16.32, 16.40]	1.51	[1.21, 1.80]	0.56
18,20,22,24	1	16.0 – 16.7	3	1	16.36	[16.31, 16.40]	1.54	[1.22, 1.86]	0.54
18,20,22,24	1	16.0 – 16.7	3	2	16.37	[16.32, 16.42]	1.55	[1.22, 1.88]	0.53
18,20,22,24	1	16.0 – 16.7	4	1	16.36	[16.31, 16.40]	1.54	[1.22, 1.86]	0.51
Averages:					16.36(2)		1.54(9)		
$ z $ – Values									
N	E	δW	n_r	m_r	W_c	CI(W_c)	ν	CI(ν)	p
16,18,20,22,	1	16.0 – 16.7	2	1	16.40	[16.34, 16.45]	1.35	[1.01, 1.68]	0.67
16,18,20,22,	1	16.0 – 16.7	3	1	16.40	[16.34, 16.45]	1.49	[1.10, 1.88]	0.75
16,18,20,22,	1	16.0 – 16.7	3	2	16.40	[16.34, 16.47]	1.47	[1.08, 1.85]	0.73
16,18,20,22,	1	16.0 – 16.7	4	1	16.40	[16.35, 16.46]	1.46	[1.09, 1.84]	0.75
Averages:					16.40(2)		1.44(10)		

6.3.3 小 E 和 W 区域的“逆”转变

如上述在讨论图 6.2 时简要提到的一样,在 $E \lesssim 1$ 且 $W \lesssim 10$ 的区域, $\mathcal{L}_3(1)$ 的 DOS 和 $E - W$ 相图显示出一个小的 $\text{DOS} \sim 10^2$ 和较小的 $\langle r \rangle \sim 0.4$ 。这些观察表明, 这些区域对应于局域态, 因此, 系统实际上可能表现出“逆”Anderson 转变, 即在某个介于 $0 < E \lesssim 1$ 固定的能量, 增加 W , 可以观察到回归扩展态的转变。为了详细研究这种可能性, 我们选择 $E = 0.4$, 再次计算作为无序 W 的函数的局域化长度 Λ_M 以及 $\langle r \rangle$ 统计量, 分别增加条的宽度 M 或者系统尺寸 N , 使 TMM 的最大收敛误差不超过0.1%。在图 6.5 中, 我们展示了结果数据。

图 6.5 (a) 是 $\mathcal{L}_3(1)$ 在能量 $E = 0.4$ 处的约化局域化长度 Λ_M 与较小无序 W 的关系, TMM 条型区域的面积为 $M^2 = 6^2$ (黄色 \circ), 8^2 (灰色 ∇), 10^2 (青色 $+$), 12^2 (品红色 \diamond), 14^2 (黑色 \triangle), 16^2 (蓝色 \times), 18^2 (红色 \circ), 20^2 (绿色 \square)。误差条都显示在符号大小之内。图 (b) 为 $\mathcal{L}_3(1)$ 在能量 $E = 0.4$ 处的 r 值与无序 W 的关系, 其中系统大小 $L = 4 \times N^3$, 从 $N = 20$ (绿色 \square), 22 (黑色 $+$), 24 (青色 \diamond), 26 (品红 \triangle), 28 (灰色 \times) 直至 30 (蓝色 \circ), 每个 (N, W) 点都考虑了10000个势能构型平均。水平的品红和红色虚线是由数值 $\langle r \rangle_{\text{Sur}}$ 和 $\langle r \rangle_{\text{Poi}}$ 给出, 分别表示扩展和局域区域。所有其它的线都仅仅只是为了便于观看。误差条大多都在符号大小的范围内, 突出了数据的可靠性。

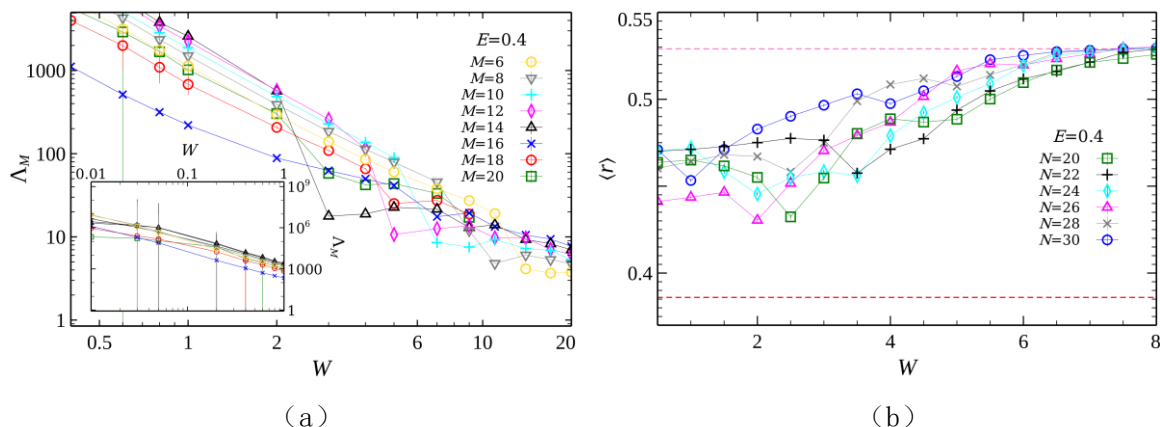


图 6.5 (a): $\mathcal{L}_3(1)$ 在能量 $E = 0.4$ 处的约化局域化长度 Λ_M 与较小无序 W 的关系。其中的插图集中在小无序 W 范围 $0.01 \leq W \leq 1$ 之内。图 (b): $\mathcal{L}_3(1)$ 在能量 $E = 0.4$ 处的 r 值与无序 W 的关系。

我们发现图 6.5 (a) 中所示的局域化长度 Λ_M 确实展现了预期的对 M 的相反依赖。对于 $W \leq 1$, 增加 M 导致 Λ_M 的减少, 而对于 $W \geq 15$, Λ_M 随着 M 增大而增大, 这些结论至少对于所研究的较大尺寸系统来说是这样。因此, 似乎确实发生了从小无序 W 的局域化行为到大无序 W 的扩展化行为的转变。然而, 我们也观测到大量的非单调行为, 例如, 对于 $M = 14$, 完全没有一个明确的交叉点作为 W_c 的估计, 标准的 FSS 技术无法捕捉到这种行为, 而且所需的“标度修正”显然超出了人们可以期望的不相

关修正的系统建模所能实现的范围^[138,175]。然而，使用仅考虑图 6.5 (a) 中系统尺寸为 $M^2 = 6^2$ 和 $M^2 = 8^2$ 所定义的交叉点，我们发现所得到的“相边界”很好的遵循图 6.5 (b) 中所示的 DOS 和 $\langle r \rangle$ 值得等值线趋势。类似地，当 $W \geq 6$ 时， $\langle r \rangle$ 值达到了 $\langle r \rangle_{\text{Sur}}$ 。对于 $W \leq 2$ ，没有达到真正的局域化 $\langle r \rangle_{\text{Poi}} (\sim 0.38)$ 。但至少，我们发现 $\langle r \rangle$ 显著下降到 ~ 0.45 。同样，对于 TMM 数据，在我们所研究的系统尺寸，没有出现明确的，不依赖于系统尺寸的转变点。

总之，接近 CLS 的宏观简并的 $E = 0.4$ 的结果表明，当 W 增加时会出现从局域到扩展的非传统的“逆”转变。这似乎类似于在弱非关联无序状态下三维全平带网络^[78,157]中所提出的“逆”转变。

6.3.4 $\mathcal{L}_3(1)$ 的投影几率和参与数

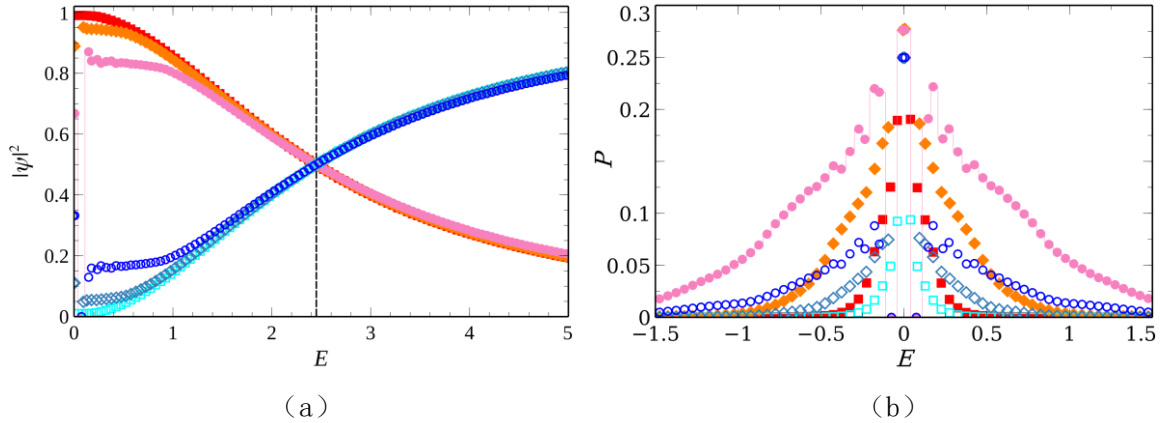


图 6.6 $\mathcal{L}_3(1)$ 的波函数在 cube 格点 (蓝色, 空心符号) 和 Lieb 格点 (红色, 实心符号) 的投影几率 $|\psi(r)|^2$ 。(b) 相对于 cube 和 Lieb 格点数的参与数。

在图 6.6 (a) 中，我们展示了和图 6.3 相同的数据，但现在考虑的是 $E \geq 0$ ，并且为了突出交点 (垂直的虚线) 在 $E \sim 2.45$ 而显示了不同的能量范围。不同的颜色分别表示 $\mathcal{L}_3(1)$ 的波函数在 cube 格点 (蓝色, 空心符号) 和 Lieb 格点 (红色, 实心符号) 的投影几率 $|\psi(r)|^2$ ，其中仅展示了无序 $W = 10$ (\circ), $W = 20$ (\diamond), $W = 50$ (\square) 的三种情况。图 6.6 (b) 是相对于 cube 和 Lieb 格点数的参与数。在图 6.6 (a) 和 (b) 中，无序 $W = 10$ 在 Lieb 格点投影的线是为了突出显示数据点是在能量间隔 $\Delta E = 0.05$ 且考虑了 144 个势能构型的平均。在所有的情况下，系统大小为 $L = 4 \times 20^3$ 。

我们发现，当 $E \sim 2.45$ 时，投影几率出现了交叉的现象。这发生在我们研究过的所有无序 W 可能中，即一直到 $W = 100$ 也是成立的。进一步研究发现，所有的 $4 \times N^3$ 个可能的态中，有 50% 的态是 CLS，25% 的态的能量随着无序 W 的增加向 CLS 能量靠近转移，而剩余的 25% 则局域化，且其能量分布扩散到整个光谱范围。图 6.6 (b) 中，相对参与数，即 $P = 1 / \sum_{l=1}^{L_{\text{max}}} |\psi(\vec{r}_l)|^4 / (L_{\text{max}})$ ，表明 $\mathcal{L}_3(1)$ 确实只在接近 CLS 能量 $E = 0$ 的地方观测到明显的 P 值。注意，这里 L_{max} 是 cube 格点数或 Lieb 格点数，即对

于 $\mathcal{L}_3(n)$ 分别是 N^3 或 $3nN^3$ 。

6.3.5 其它 $\mathcal{L}_3(n)$ 模型的局域化性质

我们现在简要地概述其他的 Lieb 格子 $\mathcal{L}_3(2)$, $\mathcal{L}_3(3)$ 和 $\mathcal{L}_3(4)$ 。对于 $\mathcal{L}_3(2)$, 我们在图 6.7 中展示 DOS, 基于 $\langle r \rangle$ 的相图以及基于转移矩阵方法的近似相边界。

图 6.7 (a) 和 (b) 的计算参量和图 6.2 的基本相同, 除了最小能量间距增加到 $\Delta E = 0.2$, 总共有1581个独立的数据 (E, W) 。为了清晰起见, 两个图中都没有显示 $E = 1$ 的平带态。图 (a) 中的黑线和图 6.2 (a) 中的一样, 即虚线和实线分别表示 10^3 和 10^4 的等值线。但是图 (b) 中的虚线和实线在红色区域分别对应于值 $\langle r \rangle = 0.53$ 和 0.5145 , 在蓝色区域则对应于 $\langle r \rangle = 0.4$ 和 0.38 。也和图 6.2 一样, 在 (a) 和 (b) 中的白线表示的是通过转移矩阵方法基于小尺寸体系 M 所估计的相边界, 两条不同的相边界分别根据 $M = 6$ 和 $M = 8$ 的 Λ_M 在固定的 E 减小无序 W 出现的交点来确定, 分别对应于出现局域到扩展的转变 (实线) 和扩展到局域的转变 (虚线) 行为。

在 $E = \pm 1$ 的 CLS 没有在图中显示, 但是通过它们周围的非 CLS 态的行为可以清楚地看到。和 $\mathcal{L}_3(1)$ 类似, 在 $E \rightarrow 1^\pm$, W 较小的区域, 也存在一个态的损耗特征。另一方面, 对于较大的 E 和 W , DOS 出现损耗现象且 $\langle r \rangle$ 值表现出局域化行为。当 $W \gtrsim 20$ 时, 出现了两个扩展区域, 它们都倾向于靠近 CLS 区域。这些结果再次得到了基于尺寸为 $M^2 = 6^2$ 和 $M^2 = 8^2$ 转移矩阵方法估算数据的支持。我们注意到, 由于没有 $E = 0$ 的 CLS 的存在, 当 W 增加, 用 $W_c \sim 16$ 标记两个区域的边界时, 我们确实看到了从扩展态到局域态的一般转变。我们还可以再次找到“逆”转变行为, 例如对于 $\mathcal{L}_3(2)$ 在 $1 \lesssim E \lesssim 2$ 区域, 增加 W 导致从局域到扩展行为的变化。

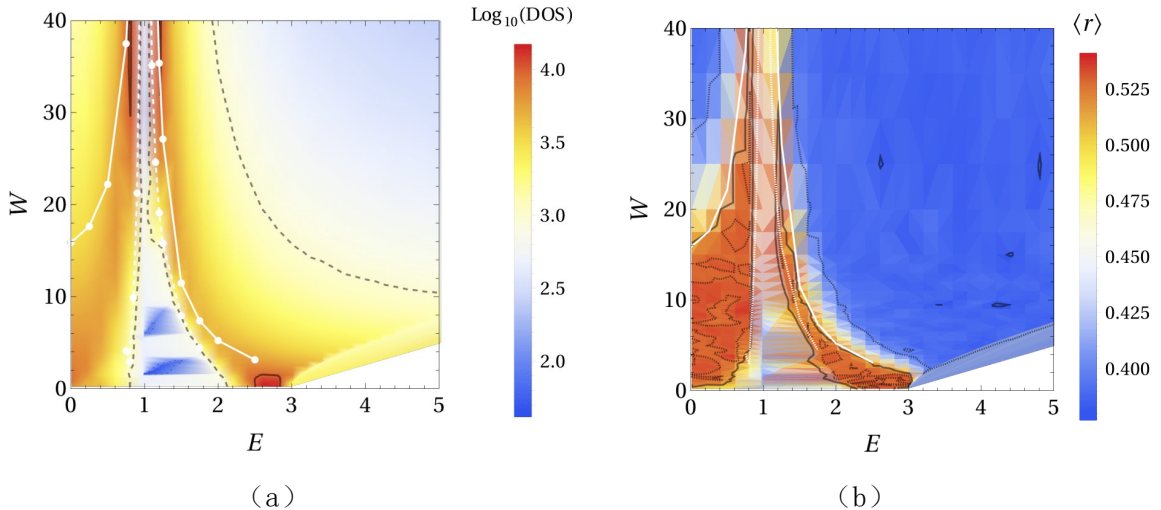


图 6.7 $\mathcal{L}_3(2)$ 依赖于能量 E 和无序 W 的 (a) DOS 和 (b) r 值。

这一趋势在 $\mathcal{L}_3(3)$ 和 $\mathcal{L}_3(4)$ 中也接连出现了, 如图 6.8 所示。最初の色散带, 当 $W = 0$ 时, 随着增加 W , 它们的部分状态会向 CLS 移动, 减少距离 CLS 能量更远的能量

的 DOS，并最终使这些态局域化。光谱相当大一部分会接近 CLS 状态的能量，随之发生的是状态更加的局域态 Lieb 格点，如 $\mathcal{L}_3(1)$ 所展现的一样。

我们在图 6.8 中绘制了 $\mathcal{L}_3(3)$ 和 $\mathcal{L}_3(4)$ 的 DOS，基于 $\langle r \rangle$ 的相图和基于 TMM 的近似相边界。和图 6.7 类似，结果总共包含有 1587 个自适应独立的数据 (E, W) 。为了清晰起见，在图 (a) 和 (b) 中， $\mathcal{L}_3(3)$ 在能量 $E = 0$ 和 $\sqrt{2}$ 的平带态，以及图 (c) 和 (d) 中， $\mathcal{L}_3(4)$ 在能量 $E = (\sqrt{5} - 1)/2 \sim 0.618$ 和 $(1 + \sqrt{5})/2 \sim 1.618$ 的平带态均未显示出来。黑色的线也和之前一样，即在图 (a) 和 (c) 中虚线和实线分别表示 10^3 和 10^4 的等高线，而在图 (b) 和 (d) 中红色区域则对应于 $\langle r \rangle = 0.53$ 和 0.5145 ，蓝色区域为 $\langle r \rangle = 0.4$ 和 0.38 。

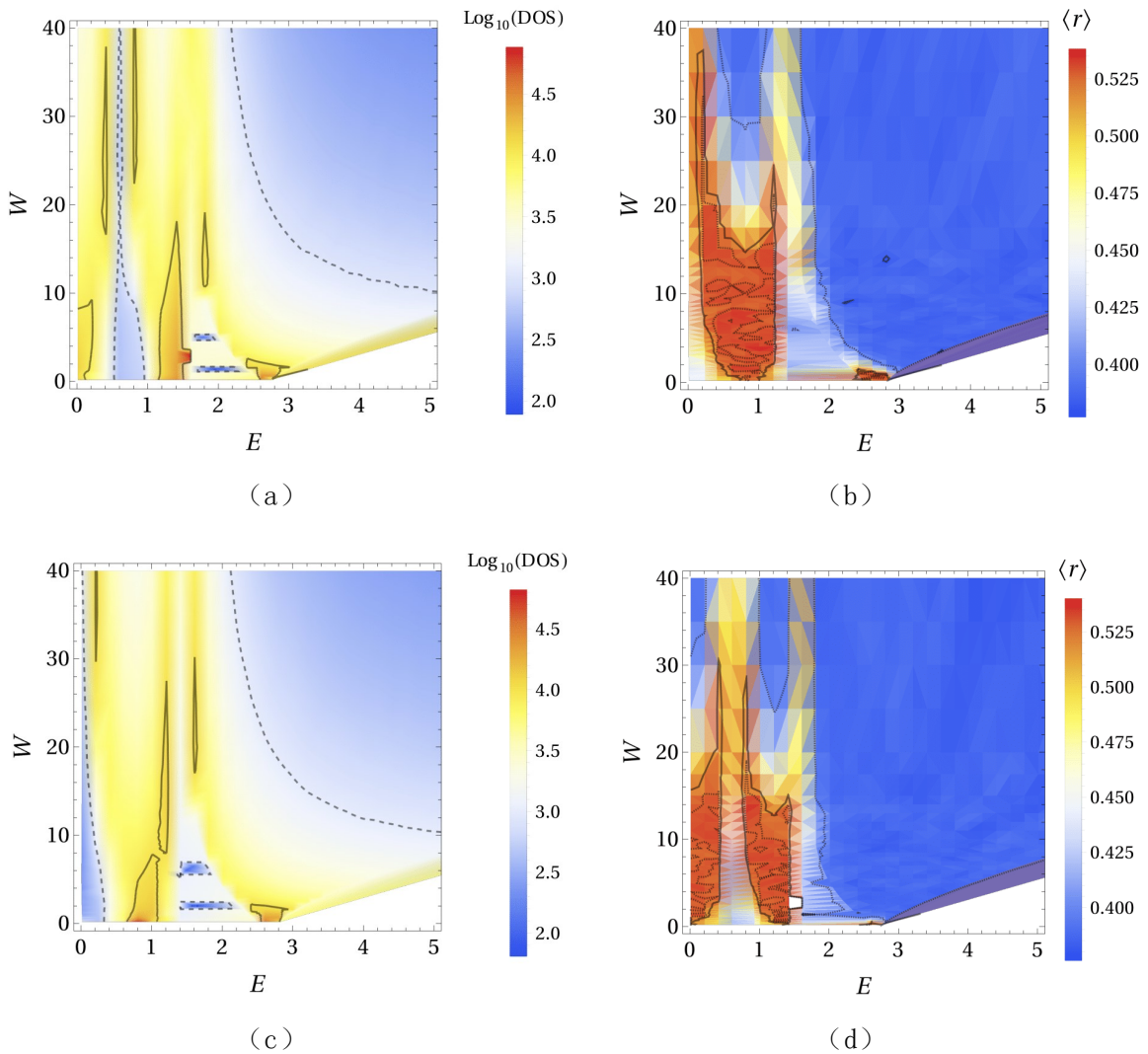


图 6.8 图 (a) 和 (b) 是 $\mathcal{L}_3(3)$ 的 DOS 和 r 值，图 (c) 和 (d) 则是 $\mathcal{L}_3(4)$ 的 DOS 和 r 值。

在 $E = \pm 1$ 处的 CLS 在图中没有显示，但是通过它们周围的非 CLS 态的行为可以清楚地看到。有一个与 $\mathcal{L}_3(1)$ 和 $\mathcal{L}_3(2)$ 一样的在 E 靠近 CLS 能量且较小无序 W 区域出现态消耗的特征。对于大无序 W ，除了接近 CLS 能量的能量外，出现了清晰的局

域化区域。在我们所研究的系统尺寸范围内，对接近 CLS 能量的区域，即使非常强的无序 W 似乎也不会抑制扩展的行为。尽管需要更好的能量分辨率来再现诸如图 6.2 中 $\mathcal{L}_3(1)$ 的精细细节，但我们还是可以在不同的能量区域中再次发现“逆”转变的行为。

6.4 小结

在这一章中，我们考虑无序的格点势能 ε_i^c 和常数势能 $\varepsilon_i^L = 0$ ，这一选择保证了可以容易地从剩下色散带中区分出来 CLS，且 CLS 在任何无序 W 下都保持不变。出现了两个明显令人惊讶的结果，一是有一半的色散带上的非 CLS 态在能量上越发靠近平带能量，其行为也越发像 CLS，即更加局域在 Lieb 格点。其也导致了在 CLS 能量附近 DOS 的累积，最终导致在非常强无序下依旧存在扩展态。第二则是靠近平带能量的小无序区域，出现“逆”Anderson 转变。

对于增加 E 或 W 发生从扩展到局域的转变，我们发现其临界指数可以像往常一样通过 FSS 提取，临界指数 ν 与三维立方格子的 Anderson 模型的临界指数值相当^[138,166]。因此，尽管相图出现大的改变，但是相边界处的临界特性没有改变。然而，当从扩展区域减小无序 W 或能量 E 时，我们没有看见一个清晰的转变特征。其相的变化似乎不遵循传统的标度理论，或者需要更大的系统尺寸才能达到要求。

总的来说，该模型呈现了一种情况：增加无序 W ，原先的 CLS 被保留，而原先的非 CLS 有一半的状态在能量和空间上都越来越靠近 CLS。由于 CLS 可能属于未来的信息存储设备相关的一类状态，因此我们的结果提出了一种方法，无序不总是破坏性的，有可能是加强了 CLS 的稳定性。

第 7 章 总结与展望

7.1 总结

本文主要研究了二维和三维 Lieb 模型及其扩展模型的局域化性质。我们的研究结果包括:

1. 对于在位势能服从均匀随机分布的二维 Lieb 模型及其扩展模型, 来源于平带的 DOS 峰被无序快速地破坏。平带处与色散带处的态确实具有完全不同的局域化性质, 平带处的态似乎表现出一种类似一维情况的局域性质。然而, 对于无序低至 $W \sim t$, 所有的态都是局域的。

2. 将上述情况推广到三维, 来源于平带的 DOS 峰也被无序快速地破坏。三维 Lieb 模型及其扩展模型具有比简单立方晶格更低的临界无序 W_c , 即 Lieb 模型更局域, 但是转变点处的临界指数并不会改变。

3. 引入关联无序之后, 即考虑一个有序与无序势的结合, 使得高简并的能级与紧凑的局域态 (CLS) 依旧存在, 同时也确保了无序的存在。结果发现 CLS 的存在似乎导致了发散的迁移率边, 以及在低无序区域的可能存在的“逆”Anderson 转变。结果表明平带的存在对临近色散带的转变点处的普适性临界指数没有影响。

4. 此外, 在上述工作的基础上, 我们进一步发现均匀随机无序对于 CLS 的增强并不是必要的, 具有较小无序的常数势就足够了。

总之, 我们的研究结果对平带晶格中无序与平带的相互作用研究具有重要的意义, 可能为未来的信息存储器件提供新的思路, 有利于推动量子存储器件设计相关领域的发展。

值得一提的是, 在我们所有的工作中, 考虑的无序类型均是服从均匀随机分布, 而没有涉及比如高斯函数分布等类型的无序分布。原因在于针对一般杂质体系, 杂质浓度和种类均具有多样性, 不能完全确定杂质符合某一特定的分布。采用 Anderson 无序 (完全随机), 一方面是参考其他学者的研究经验, 另一方面则是选取杂质服从完全随机的分布, 不给限制, 比较具有一般性, 可以代表更多种类的材料, 在实验中也比较容易实现。我们的工作也可以选择其他类型的无序分布, 一些和微观细节相关的量, 比如临界无序等会有相应的变化, 但是与系统对称性和维度等相关的结果, 比如普适性的临界指数, 则不会变化。

7.2 展望

正如前面提到的, CLS 可能属于未来的信息存储设备相关的一类状态。虽然具

有选择性高度关联的有序/无序分布的固态器件不太可能很快实现，但一个更简单的途径可能是通过光学晶格中的冷原子^[110,176,177]或者光子带隙系统^[114,113,112,115,111,178]，其中单格点势的调制已经成为了常规操作^[142]，因此我们的数值结果可能在不久的将来很快就能在实验中得到进一步的实验验证。

我们强调，在本论文中的结果均是基于均匀随机分布的对角无序获得的。而实际材料中，无序的类型不仅仅限于对角无序，非对角无序也是常见的。其次，由于纯非对角无序具有手性对称性，可以产生诸如 $E = 0$ 这样的特殊能量的有趣效应^[179-181]。这些情况如何与 Lieb 模型的平带相互作用是一个值得进一步深入研究的课题。因此，对于非对角无序的情况，也是下一步可以考虑的研究工作。

此外，由于现有资源以及时间的限制，我们考虑的均是单电子问题，且仅限于厄米系统。对于充满未知的多体问题以及非厄米问题^[182,183]的前沿领域，平带在这种背景下会产生什么样的新现象也是值得进一步探索的。

参考文献

- [1] Anderson P W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices[J]. *Physical Review*, 1958, 109(5): 1492-1505.
- [2] De R, Bo L K. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices[J]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 1931, 130(814): 499-513.
- [3] Wilson A H. The theory of electronic semi-conductors[J]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 1931, 133(822): 458-491.
- [4] Snoko D W. *Solid State Physics*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2020.
- [5] 毛晓裕. 广义二维 Lieb 晶格的电子局域性质研究[D]. 湘潭大学, 2020.
- [6] 黄昆, 韩汝琦. *固体物理学*[M]. 北京: 高等院校出版社, 2005.
- [7] Sherrington D, Kirkpatrick S. Solvable Model of a Spin-Glass[J]. *Physical Review Letters*, 1975, 35(26): 1792-1796.
- [8] Mezard M, Parisi G, Virasoro M. *Spin Glass Theory and Beyond: Vol. 9*[M]. WORLD SCIENTIFIC, 1986.
- [9] Binder K, Young A P. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1986, 58(4): 801-976.
- [10] Mézard M, Parisi G, Sourlas N, et al. Nature of the Spin-Glass Phase[J]. *Physical Review Letters*, 1984, 52(13): 1156-1159.
- [11] Drabold D A. Topics in the theory of amorphous materials[J]. *The European Physical Journal B*, 2009, 68(1): 1-21.
- [12] Málek J. Kinetic analysis of crystallization processes in amorphous materials[J]. *Thermochimica Acta*, 2000, 355(1-2): 239-253.
- [13] Berthier L, Biroli G. Theoretical perspective on the glass transition and amorphous materials[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2011, 83(2): 587-645.
- [14] Brown F C. *Photoemission Studies of High Temperature Superconductors*[M]. Commack, NY (USA); Nova Science Publishers, Inc., 1989: 305-318.
- [15] Ginsberg D M. *Physical Properties of High Temperature*[M]. *Physical Properties of High Temperature*. WORLD SCIENTIFIC, 1990.
- [16] Dagotto E. Correlated electrons in high-temperature superconductors[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1994, 66(3): 763-840.
- [17] Blatter G, Feigel'man M V., Geshkenbein V B, et al. Vortices in high-temperature superconductors[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1994, 66(4): 1125-1388.
- [18] Zhou Y, Kanoda K, Ng T K. Quantum spin liquid states[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2017, 89(2): 025003.
- [19] Savary L, Balents L. Quantum spin liquids: a review[J]. *Reports on Progress in Physics*, 2017,

- 80(1): 016502.
- [20] Yan S, Huse D A, White S R. Spin-liquid ground state of the $S = 1/2$ kagome heisenberg antiferromagnet[J]. *Science*, 2011, 332(6034): 1173-1176.
- [21] Shimizu Y, Miyagawa K, Kanoda K, et al. Spin Liquid State in an Organic Mott Insulator with a Triangular Lattice[J]. *Physical Review Letters*, 2003, 91(10): 107001.
- [22] Kramer B, MacKinnon A. Localization: theory and experiment[J]. *Reports on Progress in Physics*, 1993, 56(12): 1469-1564.
- [23] Evers F, Mirlin A D. Anderson transitions[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2008, 80(4): 1355-1417.
- [24] Lee P A, Ramakrishnan T V. Disordered electronic systems[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1985, 57(2): 287.
- [25] Lifshitz I M. Energy spectrum structure and quantum states of disordered condensed systems[J]. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 1964, 83(8): 617-663.
- [26] Dirac P A M. The quantum theory of the electron[J]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 1928, 117(778): 610-624.
- [27] Feynman R P. The Theory of Positrons[J]. *Physical Review*, 1949, 76(6): 749-759.
- [28] Kittel C. *Introduction to solid state physics*[M]. John Wiley & Sons, 2005.
- [29] Economou E N. *Green's Functions in Quantum Physics*[M]. Springer Series in Solid-State Sciences: Vol. 7. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [30] Mott N F. Electrons in disordered structures[J]. *Advances in Physics*, 1967, 16(61): 49-144.
- [31] Belitz D, Kirkpatrick T R. The Anderson-Mott transition[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1994, 66(2): 261-380.
- [32] Wegner F J. Electrons in disordered systems. Scaling near the mobility edge[J]. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter and Quanta*, 1976, 25(4): 327-337.
- [33] Wilson K G. Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture[J]. *Physical Review B*, 1971, 4(9): 3174.
- [34] Stanley H E, Ahlers G. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*[J]. *Physics Today*, 1973, 26(1): 71-72.
- [35] Kadanoff L P. Scaling laws for ising models near T_c [J]. *Physics Physique Fizika*, 1966, 2(6): 263-272.
- [36] 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.
- [37] Thouless D J. A relation between the density of states and range of localization for one dimensional random systems[J]. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1972, 5(1): 77-81.
- [38] Xiong S J, Xiong Y. Anderson localization of electron states in graphene in different types of disorder[J]. *Physical Review B*, 2007, 76(21): 214204.
- [39] Ying T, Gu Y, Chen X, et al. Crystallography: Anderson localization of electrons in single crystals: $\text{Li}_x\text{Fe}_7\text{Se}_8$ [J]. *Science Advances*, 2016, 2(2): 7.
- [40] Byczuk K, Hofstetter W, Vollhardt D. Mott-hubbard transition versus Anderson localization in

- correlated electron systems with disorder[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 94(5): 056404.
- [41] Gornyi I V., Mirlin A D, Polyakov D G. Interacting electrons in disordered wires: Anderson localization and low-T transport[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 95(20): 206603.
- [42] Furusaki A, Nagaosa N. Single-barrier problem and Anderson localization in a one-dimensional interacting electron system[J]. *Physical Review B*, 1993, 47(8): 4631-4643.
- [43] Cutler M, Mott N F. Observation of Anderson Localization in an Electron Gas[J]. *Physical Review*, 1969, 181(3): 1336-1340.
- [44] Lahini Y, Avidan A, Pozzi F, et al. Anderson localization and nonlinearity in one-dimensional disordered photonic lattices[J]. *Physical Review Letters*, 2008, 100(1): 013906.
- [45] Silverman B W. *Density Estimation for Statistics and Data Analysis*[M]. Routledge, 2018.
- [46] Flach S, Gorbach A V. Discrete breathers — Advances in theory and applications[J]. *Physics Reports*, 2008, 467(1-3): 1-116.
- [47] Segev M, Silberberg Y, Christodoulides D N. Anderson localization of light[J]. *Nature Photonics*, 2013, 7(3): 197-204.
- [48] Inose Y, Ohtsuki T, Kunugita H, et al. Anderson localization of light in a random configuration of nanocolumns[C]. *Journal of Physics: Conference Series: Vol. 193*. 2009: 12055.
- [49] Wiersma D S, Bartolini P, Lagendijk A, et al. Localization of light in a disordered medium[J]. *Nature*, 1997, 390(6661): 671-673.
- [50] Schwartz T, Bartal G, Fishman S, et al. Transport and Anderson localization in disordered two-dimensional photonic lattices[J]. *Nature*, 2007, 446(7131): 52-55.
- [51] Evers M, Müller C A, Nowak U. Spin-wave localization in disordered magnets[J]. *Physical Review B*, 2015, 92(1): 014411.
- [52] Igarashi J ichi. Anderson localization of spin waves in random Heisenberg antiferromagnets[J]. *Physical Review B*, 1987, 35(10): 5151-5163.
- [53] Bruinsma R, Coppersmith S N. Anderson localization and breakdown of hydrodynamics in random ferromagnets[J]. *Physical Review B*, 1986, 33(9): 6541-6544.
- [54] Billy J, Josse V, Zuo Z, et al. Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder[J]. *Nature*, 2008, 453(7197): 891-894.
- [55] Roati G, D'Errico C, Fallani L, et al. Anderson localization of a non-interacting Bose–Einstein condensate[J]. *Nature*, 2008, 453(7197): 895-898.
- [56] Manai I, Clément J F, Chicireanu R, et al. Experimental Observation of Two-Dimensional Anderson Localization with the Atomic Kicked Rotor[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(24): 240603.
- [57] Figotin A, Klein A. Localization of classical waves I: Acoustic waves[J]. *Communications in Mathematical Physics*, 1996, 180(2): 439-482.
- [58] Figotin A, Klein A. Localization of classical waves II: Electromagnetic waves[J]. *Communications in Mathematical Physics*, 1997, 184(2): 411-441.
- [59] Asatryan A A, Gredeskul S A, Botten L C, et al. Anderson localization of classical waves in weakly scattering metamaterials[J]. *Physical Review B*, 2010, 81(7): 075124.

- [60] Soukoulis C M, Economou E N, Grest G S, et al. Existence of Anderson Localization of Classical Waves in a Random Two-Component Medium[J]. *Physical Review Letters*, 1989, 62(5): 575-578.
- [61] Aoki H, Ando M, Matsumura H. Hofstadter butterflies for flat bands[J]. *Physical Review B*, 1996, 54(24): R17296-R17299.
- [62] Flach S, Leykam D, Bodyfelt J D, et al. Detangling flat bands into Fano lattices[J]. *EPL (Europhysics Letters)*, 2014, 105(3): 30001.
- [63] Sutherland B. Localization of electronic wave functions due to local topology[J]. *Physical Review B*, 1986, 34(8): 5208-5211.
- [64] Lieb E H. Two theorems on the Hubbard model[J]. *Physical Review Letters*, 1989, 62(10): 1201-1204.
- [65] Mielke A. Ferromagnetic ground states for the Hubbard model on line graphs[J]. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 1991, 24(2): L73-L77.
- [66] Tasaki H. Ferromagnetism in the Hubbard models with degenerate single-electron ground states[J]. *Physical Review Letters*, 1992, 69(10): 1608-1611.
- [67] Leykam D, Andreanov A, Flach S. Artificial flat band systems: from lattice models to experiments[J]. *Advances in Physics: X*, 2018, 3(1): 1473052.
- [68] Maimaiti W, Andreanov A, Park H C, et al. Compact localized states and flat-band generators in one dimension[J]. *Physical Review B*, 2017, 95(11): 115135.
- [69] Dias R G, Gouveia J D. Origami rules for the construction of localized eigenstates of the Hubbard model in decorated lattices[J]. *Scientific Reports*, 2015, 5(1): 16852.
- [70] Weimann S, Morales-Inostroza L, Real B, et al. Transport in Sawtooth photonic lattices[J]. *Optics Letters*, 2016, 41(11): 2414.
- [71] Röntgen M, Morfonios C V., Schmelcher P. Compact localized states and flat bands from local symmetry partitioning[J]. *Physical Review B*, 2018, 97(3): 035161.
- [72] Nandy A, Chakrabarti A. Engineering flat electronic bands in quasiperiodic and fractal loop geometries[J]. *Physics Letters A*, 2015, 379(43-44): 2876-2882.
- [73] Pal B, Saha K. Flat bands in fractal-like geometry[J]. *Physical Review B*, 2018, 97(19): 195101.
- [74] Leykam D, Flach S, Bahat-Treidel O, et al. Flat band states: Disorder and nonlinearity[J]. *Physical Review B*, 2013, 88(22): 224203.
- [75] Leykam D, Bodyfelt J D, Desyatnikov A S, et al. Localization of weakly disordered flat band states[J]. *The European Physical Journal B*, 2017, 90(1): 1.
- [76] Ge L. Anomalous Minimum and Scaling Behavior of Localization Length Near an Isolated Flat Band[J]. *Annalen der Physik*, 2017, 529(8): 1600182.
- [77] Bodyfelt J D, Leykam D, Danieli C, et al. Flatbands under correlated perturbations[J]. *Physical Review Letters*, 2014, 113(23): 1-5.
- [78] Goda M, Nishino S, Matsuda H. Inverse Anderson Transition Caused by Flatbands[J]. *Physical Review Letters*, 2006, 96(12): 126401.
- [79] Shukla P. Disorder perturbed flat bands: Level density and inverse participation ratio[J]. *Physical Review B*, 2018, 98(5): 054206.

-
- [80] Chen R, Xu D H, Zhou B. Disorder-induced topological phase transitions on Lieb lattices[J]. *Physical Review B*, 2017, 96(20): 205304.
- [81] Zhao A, Shen S Q. Quantum anomalous Hall effect in a flat band ferromagnet[J]. *Physical Review B*, 2012, 85(8): 085209.
- [82] Takayoshi S, Katsura H, Watanabe N, et al. Phase diagram and pair Tomonaga-Luttinger liquid in a Bose-Hubbard model with flat bands[J]. *Physical Review A*, 2013, 88(6): 063613.
- [83] Tsai W F, Fang C, Yao H, et al. Interaction-driven topological and nematic phases on the Lieb lattice[J]. *New Journal of Physics*, 2015, 17(5): 055016.
- [84] Metcalf M, Chern G W, Ventra M Di, et al. Matter-wave propagation in optical lattices: geometrical and flat-band effects[J]. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2016, 49(7): 075301.
- [85] Luo X, Yu Y. Gauge fermions with flat bands and anomalous transport via chiral modes from breaking gauge symmetry[J]. *undefined*, 2016.
- [86] Bercx M, Hofmann J S, Assaad F F, et al. Spontaneous particle-hole symmetry breaking of correlated fermions on the Lieb lattice[J]. *Physical Review B*, 2017, 95(3): 035108.
- [87] Parameswaran S A, Roy R, Sondhi S L. Fractional quantum Hall physics in topological flat bands[J]. *Comptes Rendus Physique*, 2013, 14(9-10): 816-839.
- [88] Bergholtz E J, Liu Z. Topological flat band models and fractional chern insulators[J]. *International Journal of Modern Physics B*, 2013, 27(24): 1330017.
- [89] Tang E, Mei J W, Wen X G. High-Temperature Fractional Quantum Hall States[J]. *Physical Review Letters*, 2011, 106(23): 236802.
- [90] Neupert T, Santos L, Chamon C, et al. Fractional Quantum Hall States at Zero Magnetic Field[J]. *Physical Review Letters*, 2011, 106(23): 236804.
- [91] Sun K, Gu Z, Katsura H, et al. Nearly Flatbands with Nontrivial Topology[J]. *Physical Review Letters*, 2011, 106(23): 236803.
- [92] Balents L. Spin liquids in frustrated magnets[J]. *Nature*, 2010, 464(7286): 199-208.
- [93] 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.
- [94] Mielke A, Tasaki H. Ferromagnetism in the Hubbard model[J]. *Communications in Mathematical Physics*, 1993, 158(2): 341-371.
- [95] Ramirez A P. Strongly Geometrically Frustrated Magnets[J]. *Annual Review of Materials Science*, 1994, 24(1): 453-480.
- [96] Danieli C, Andreanov A, Flach S. Many-body flatband localization[J]. *Physical Review B*, 2020, 102(4): 041116.
- [97] Kuno Y, Orito T, Ichinose I. Flat-band many-body localization and ergodicity breaking in the Creutz ladder[J]. *New Journal of Physics*, 2020, 22(1): 013032.
- [98] Miyahara S, Kusuta S, Furukawa N. BCS theory on a flat band lattice[J]. *Physica C: Superconductivity*, 2007, 460-462: 1145-1146.
- [99] 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.
- [100] Kopnin N B, Heikkilä T T, Volovik G E. High-temperature surface superconductivity in topological flat-band systems[J]. *Physical Review B*, 2011, 83(22): 220503.
- [101] Peotta S, Törmä P. Superfluidity in topologically nontrivial flat bands[J]. *Nature Communications*, 2015, 6(1): 8944.
- [102] Tovmasyan M, Peotta S, Liang L, et al. Preformed pairs in flat Bloch bands[J]. *Physical Review B*, 2018, 98(13): 134513.
- [103] Mondaini R, Batrouni G G, Grémaud B. Pairing and superconductivity in the flat band: Creutz lattice[J]. *Physical Review B*, 2018, 98(15): 155142.
- [104] Aoki H. Theoretical Possibilities for Flat Band Superconductivity[J]. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 2020, 33(8): 2341-2346.
- [105] Abilio C C, Butaud P, Fournier T, et al. Magnetic Field Induced Localization in a Two-Dimensional Superconducting Wire Network[J]. *Physical Review Letters*, 1999, 83(24): 5102-5105.
- [106] Drost R, Ojanen T, Harju A, et al. Topological states in engineered atomic lattices[J]. *Nature Physics*, 2017, 13(7): 668-671.
- [107] 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.
- [108] Li Z, Zhuang J, Wang L, et al. Realization of flat band with possible nontrivial topology in electronic Kagome lattice[J]. *Science Advances*, 2018, 4(11): 5698-5702.
- [109] Jo G B, Guzman J, Thomas C K, et al. Ultracold Atoms in a Tunable Optical Kagome Lattice[J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108(4): 045305.
- [110] 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.
- [111] 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): e1500854.
- [112] Guzmán-Silva D, Mejía-Cortés 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.
- [113] Vicencio R A, Cantillano C, Morales-Inostroza L, et al. Observation of Localized States in Lieb Photonic Lattices[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 114(24): 245503.
- [114] 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.
- [115] 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.
- [116] Nakata Y, Okada T, Nakanishi T, et al. Observation of flat band for terahertz spoof plasmons in a metallic kagomé lattice[J]. *Physical Review B*, 2012, 85(20): 205128.
- [117] Kajiwara S, Urade Y, Nakata Y, et al. Observation of a nonradiative flat band for spoof surface plasmons in a metallic Lieb lattice[J]. *Physical Review B*, 2016, 93(7): 075126.
- [118] Zong Y, Xia S, Tang L, et al. Observation of localized flat-band states in Kagome photonic lattices[J]. *Optics Express*, 2016, 24(8): 8877.

- [119] Mao X, Liu J, Zhong J, et al. Disorder effects in the two-dimensional Lieb lattice and its extensions[J]. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 2020, 124(January): 114340.
- [120] Liu J, Mao X, Zhong J, et al. Localization, phases, and transitions in three-dimensional extended Lieb lattices[J]. *Physical Review B*, 2020, 102(17): 174207.
- [121] MacKinnon A, Kramer B. The scaling theory of electrons in disordered solids: Additional numerical results[J]. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 1983, 53(1): 1-13.
- [122] Kramer B, Schreiber M. *Transfer-Matrix Methods and Finite-Size Scaling for Disordered Systems*[M]. *Computational Physics*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1996: 166-188.
- [123] Oseledets V I. A multiplicative ergodic theorem. Characteristic Ljapunov, exponents of dynamical systems[J]. *Tr. Mosk. Mat. Obs.*, 1968, 19: 179-210.
- [124] Ishii K. Localization of Eigenstates and Transport Phenomena in the One-Dimensional Disordered System[J]. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 1973, 53: 77-138.
- [125] Beenakker C W J. Random-matrix theory of quantum transport[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1997, 69(3): 731-808.
- [126] Bollhöfer M, Notay Y. JADAMILU: a software code for computing selected eigenvalues of large sparse symmetric matrices[J]. *Computer Physics Communications*, 2007, 177(12): 951-964.
- [127] 马凯鑫. 基于能级统计的安德森局域化现象研究[D]. 南京邮电大学, 2020.
- [128] Porter C E. *Statistical theories of spectra: fluctuations*[M]. New York: Academic Press, 1965.
- [129] Guhr T, Müller-Groeling A, Weidenmüller H A. Random-matrix theories in quantum physics: common concepts[J]. *Physics Reports*, 1998, 299(4-6): 189-425.
- [130] Haake F. *Quantum Signatures of Chaos: Vol. 54*[M]. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [131] Oganessian V, Huse D A. Localization of interacting fermions at high temperature[J]. *Physical Review B*, 2007, 75(15): 155111.
- [132] Atas Y Y, Bogomolny E, Giraud O, et al. Distribution of the Ratio of Consecutive Level Spacings in Random Matrix Ensembles[J]. *Physical Review Letters*, 2013, 110(8): 084101.
- [133] Sá L, Ribeiro P, Prosen T. Complex Spacing Ratios: A Signature of Dissipative Quantum Chaos[J]. *Physical Review X*, 2020, 10(2): 021019.
- [134] Luo X, Ohtsuki T, Shindou R. Universality Classes of the Anderson Transitions Driven by Non-Hermitian Disorder[J]. *Physical Review Letters*, 2021, 126(9): 090402.
- [135] Römer R A. Numerical methods for localization[Z]. *Encyclopedia of Condensed Matter Physics*. Elsevier B.V., 2022.
- [136] Mirlin A D. Statistics of energy levels and eigenfunctions in disordered systems[J]. *Physics Report*, 2000, 326(5-6): 259-382.
- [137] Eilmes A, Fischer A M, Römer R A. Critical parameters for the disorder-induced metal-insulator transition in fcc and bcc lattices[J]. *Physical Review B*, 2008, 77(24): 245117.
- [138] Slevin K, Ohtsuki T. Corrections to Scaling at the Anderson Transition[J]. *Physical Review Letters*, 1999, 82(2): 382-385.

- [139] Fisher M E. The renormalization group in the theory of critical behavior[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1974, 46(4): 597-616.
- [140] Goldenfeld N. *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*[M]. Westview Press, 2018.
- [141] G. W, Press W H, Teukolsky S A, et al. Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing.[J]. *Mathematics of Computation*, 1994, 62(205): 433.
- [142] Leykam D, Flach S. Perspective: Photonic flatbands[J]. *APL Photonics*, 2018, 3(7): 070901.
- [143] Shukla P. Disorder perturbed flat bands. II. Search for criticality[J]. *Physical Review B*, 2018, 98(18): 184202.
- [144] Ramachandran A, Andreanov A, Flach S. Chiral flat bands: Existence, engineering, and stability[J]. *Physical Review B*, 2017, 96(16): 161104.
- [145] Qiu W X, Li S, Gao J H, et al. Designing an artificial Lieb lattice on a metal surface[J]. *Physical Review B*, 2016, 94(24): 241409.
- [146] Niță M, Ostahie B, Aldea A. Spectral and transport properties of the two-dimensional Lieb lattice[J]. *Physical Review B*, 2013, 87(12): 125428.
- [147] 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.
- [148] Bhattacharya, Ankita Pal B. Flat bands and nontrivial topological properties in an extended Lieb lattice[J]. *Physical Review B*, 2019, 100(23): 235145.
- [149] Lieb E H. Two theorems on the Hubbard model[J]. *Physical Review Letters*, 1989, 62(10): 1201-1204.
- [150] Leadbeater M, Römer R A, Schreiber M. Interaction-dependent enhancement of the localisation length for two interacting particles in a one-dimensional random potential[J]. *The European Physical Journal B*, 1999, 8(4): 643-652.
- [151] Zhang D, Zhang Y, Zhong H, et al. New edge-centered photonic square lattices with flat bands[J]. *Annals of Physics*, 2017, 382: 160-169.
- [152] 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.
- [153] Kappus M, Wegner F. Anomaly in the band centre of the one-dimensional Anderson model[J]. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 1981, 45(1): 15-21.
- [154] Römer R A, Schulz-Baldes H. Weak-disorder expansion for localization lengths of quasi-1D systems[J]. *Europhysics Letters (EPL)*, 2004, 68(2): 247-253.
- [155] Danieli C, Bodyfelt J D, Flach S. Flat-band engineering of mobility edges[J]. *Physical Review B*, 2015, 91(23): 235134.
- [156] Bilitewski T, Moessner R. Disordered flat bands on the kagome lattice[J]. *Physical Review B*, 2018, 98(23): 1-6.
- [157] Nishino S, Matsuda H, Goda M. Flat-Band Localization in Weakly Disordered System[J]. *Journal of the Physical Society of Japan*, 2007, 76(2): 024709.
- [158] MacKinnon A, Kramer B. One-Parameter Scaling of Localization Length and Conductance in Disordered Systems[J]. *Physical Review Letters*, 1981, 47(21): 1546-1549.

- [159] Bulka B, Kramer B, MacKinnon A. Mobility edge in the three dimensional Anderson model[J]. *Z. Phys. B -Condensed Matter*, 1985, 60(1): 13-17.
- [160] Tomioka Y, Asamitsu A, Kuwahara H, et al. Magnetic-field-induced metal-insulator phenomena in $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ with controlled charge-ordering instability[J]. *Physical Review B*, 1996, 53(4): R1689-R1692.
- [161] Webman I, Grest G S. Dynamical behavior of fractal structures[J]. *Physical Review B*, 1985, 31(3): 1689.
- [162] Grussbach H, Schreiber M. Determination of the mobility edge in the Anderson model of localization in three dimensions by multifractal analysis[J]. *Physical Review B*, 1995, 51(1): 663-666.
- [163] Plyushchay I V., Römer R A, Schreiber M. Three-dimensional Anderson model of localization with binary random potential[J]. *Physical Review B*, 2003, 68(6): 064201.
- [164] Bergman D L, Wu C, Balents L. Band touching from real-space topology in frustrated hopping models[J]. *Physical Review B*, 2008, 78(12): 125104.
- [165] Xia S, Ramachandran A, Xia S, et al. Unconventional Flatband Line States in Photonic Lieb Lattices[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 121(26): 263902.
- [166] 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.
- [167] Cain P, Roemer R A, Schreiber M. Phase diagram of the three-dimensional Anderson model of localization with random hopping[J]. *Ann. Phys.*, 1999, 8(5): 507-510.
- [168] Brandes, Kettemann. *Anderson Localization and Its Ramifications: Vol. 630[M]*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2003.
- [169] Aubry S, André G. Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices[J]. *Ann. Israel Phys. Soc*, 1980, 3(133): 18.
- [170] Izrailev F M, Krokhin A A. Localization and the Mobility Edge in One-Dimensional Potentials with Correlated Disorder[J]. *Physical Review Letters*, 1999, 82(20): 4062-4065.
- [171] Derzhko O, Richter J, Maksymenko M. Strongly correlated flat-band systems: The route from Heisenberg spins to Hubbard electrons[J]. *International Journal of Modern Physics B*, 2015, 29(12): 1530007.
- [172] Röntgen M, Morfonios C V., Brouzos I, et al. Quantum Network Transfer and Storage with Compact Localized States Induced by Local Symmetries[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 123(8): 080504.
- [173] Chalker J T, Pickles T S, Shukla P. Anderson localization in tight-binding models with flat bands[J]. *Physical Review B*, 2010, 82(10): 104209.
- [174] Čadež T, Kim Y, Andreanov A, et al. Metal-insulator transition in infinitesimally weakly disordered flat bands[J]. *Physical Review B*, 2021, 104(18): L180201.
- [175] Rodriguez A, Vasquez L J, Römer R A. Multifractal analysis of the metal-insulator transition in the three-dimensional Anderson model. II. Symmetry relation under ensemble averaging[J]. *Physical Review B*, 2008, 78(19): 195107.
- [176] Goldman N, Urban D F, Bercioux D. Topological phases for fermionic cold atoms on the Lieb

- lattice[J]. *Physical Review A*, 2011, 83(6): 063601.
- [177] Apaja V, Hyrkäs M, Manninen M. Flat bands, Dirac cones, and atom dynamics in an optical lattice[J]. *Physical Review A*, 2010, 82(4): 041402.
- [178] Nixon M, Ronen E, Friesem A A, et al. Observing Geometric Frustration with Thousands of Coupled Lasers[J]. *Physical Review Letters*, 2013, 110(18): 184102.
- [179] Soukoulis C M, Economou E N. Off-diagonal disorder in one-dimensional systems[J]. *Physical Review B*, 1981, 24(10): 5698-5702.
- [180] Soukoulis C M, Webman I, Grest G S, et al. Study of electronic states with off-diagonal disorder in two dimensions[J]. *Physical Review B*, 1982, 26(4): 1838-1841.
- [181] Eilmes A, Römer R A, Schreiber M. The two-dimensional Anderson model of localization with random hopping[J]. *The European Physical Journal B*, 1998, 1(1): 29-38.
- [182] Ashida Y, Gong Z, Ueda M. Non-Hermitian physics[J]. *Advances in Physics*, 2020, 69(3): 249-435.
- [183] Bender C M. Making sense of non-Hermitian Hamiltonians[J]. *Reports on Progress in Physics*, 2007, 70(6): 947-1018.

致 谢

人间四月芳菲尽，山寺桃花始盛开。长恨春归无觅处，不觉转入此中来。

-----白居易

人生在世，就犹如正如白居易这首诗所写，不要在意个中曲直，命运兜兜转转或许会带来不一样的惊喜。

2013年—2023年，人生中的十年在湘大。对这片故土充满眷恋，每每想到要离开，便泪盈满眶。湘大位处郊区，因此少有城市的浮躁与喧嚣，是一片难得的净土。我很喜欢大家给她取的昵称—羊牯塘大学，很有乡村美学的感觉。湘大是一个充满历史底蕴的大学，一代又一代的老师与学生将青春与热血挥洒在这片土地上，曾经那满是黄土的校园仿佛就在眼前。

在这临近毕业之际，我首先要感谢我研究生期间的两位指导老师，Rudolf A. Römer 教授和钟建新教授。

Rudolf A. Römer 教授是我的恩师，亦师亦友的恩师。我研究生期间所习得的科研能力，皆离不开他的悉心指导。翻开电脑里面的相册，全是他远程学术指导的一笔一划。教我们学习转移矩阵方法，如何敲规范的代码，怎么用 Mendeley 管理文献，用 overleaf 写论文，甚至是怎么投稿等等细节而琐碎的小事，他都会细心地指导我们。我的老师超级厉害，他会很多技能，他也会一直保持学习先进的事物，就感觉他无所不能。在我读博士期间，短暂地出现过焦虑的情绪，事情出现转机是在一次每周固定召开小组会议上，看着他有条不紊地组织着大家聊科研与生活上遇见的问题，我的心很奇妙地突然就安定了下来。后来回想那应该就是情绪的力量吧。他是一个很细心，会照顾大家情绪的人，每次组会，如果谁的心情不好，他都会主动 cue 那个人，说趣话逗大家笑。我以前还有点敬畏他，但是现在我已经是什么都想和他说，有什么问题都找他，他就是最坚强的后盾。我想告诉所有人，他真的是一个超级超级超级 nice 的人，最近由于找工作不顺利，为了安慰我，他特意找出了厚厚的一个文件夹，说里面都是他当时的求职简历，他找了很多工作同样也被拒了很多次。当时眼泪差点就掉下来，还好忍住了。对 Rudo 的感谢不是仅仅一些文字就能表述出来的，唯有继续努力，不负他的期望，就好比他和我说的 “You always have to work hard in life, especially if you want to do scientific research!”。

钟建新教授是我如慈父般的恩师。在六年的学习生涯中，钟老师没有对哪个学生严苛地责骂过，即使我们有做的不好地方，他也是带着一种包容地规劝与建议。但是钟老师对自己要求严格，每个经过他手的事情他都会很认真的对待。他严以律己，宽

以待人的为人处世原则给了我一种榜样力量。同时，钟老师严谨高效的学术作风深深影响着我的学术观，每次课题组召开组会，他都可以很快的进入学习状态，对不同的研究领域都可以信手捏来。他的优秀是有目共睹的，是我人生进程中的榜样之一。钟老师为人谦逊，待人宽容和蔼，他常常教导我们做事情要细致，我想这也是他能这么优秀的原因所在。钟老师是早期扎根伟人故里，建设湘大的一批先驱之一，湘大的物理学也在他的带领以及一批优秀的老师与学生的共同努力下，取得了不菲的成绩。每次百度搜索钟老师，都会被他的一系列事迹与成就所震撼，何其有幸能跟着这么优秀的老师学习。

其次，我也要感谢 Carlo Danieli，他就像我的小小导师，教会了我许多科研的知识，会给我分享一些如何写论文以及学习英语的技巧，当时我才知道原来外国人也会为了英语而发愁呀！Carlo 是我见过的超级热爱物理的人之一。我记得当时说到我以后的人生规划问题，我说我想先找一份工作，他可能误以为我不会再做科研了，他当时满脸伤心，没有人和他一起做平带研究了。哈哈，当然也可能是我误会了，就当做一个美丽的误会吧！

感谢强烈要求让我在致谢部分感谢他的超哥。超哥怀有一颗赤子之心，独爱物理，不受外界世俗的影响。他在物理与数学方面有着相当扎实的理论基础，有什么学术上的问题都喜欢找他讨论，他总能给出满意的答案。而且他还热于学习新的各种知识。我记得当时写完毕业论文让他给我检查一下有没有什么笔误的地方，结果后来他一个错误都没找出来，坦言说学到了！

感谢课题组的每一位师兄师姐，之前你们在的时候，我们就仿佛有着天然庇护的小孩，你们在前面安排好了一切，我们躲在后面嬉笑追逐，无忧无虑。等我们开始成为师兄师姐，肩负起责任来时，才懂得感恩。希望你们都能平安顺遂，好好感受世界的美好！也感谢课题组的师弟师妹们的包容，谢谢你们的陪伴，祝你们好好享受科研的过程，早日达到毕业要求！

感谢我的家人默默的支持，是他们永远在后面关爱我，鼓励我，才让我有勇气继续走下去。在我疲劳胆怯想退缩的时候，家就是我的退路，回家呆几天，就可以让我续航好久，继续有了前进的力量。时光易逝，十年眨眼而过，十年前爷爷还可以帮我提行李箱送我去乘车，十年后，他连走路都需要拐杖。以前我们需要他们，以后他们需要他们。希望他们都能身体健康，平安喜乐。

以前一直坚信唯物主义，越长大越觉得世界是唯心的。心能转境，你内心觉得它是怎样的，它就是怎样的；以前一直喜欢问人生有什么意思，我们来到这个世间的意义是什么。后来慢慢地发现，人生没有意义，活在当下就是意义，带着觉知地做每一件事情就是意义。人生不过是一场体验，不必用来演绎完美，没有什么必须得到的，一切皆是你的执妄，也是痛苦的根源。得失尽在一念之间。

最后，送给自己以及大家一句话，“做回自己，安乐常在”。世间从不存在真正且唯一的法义，自我的法义唯有通过自身的实践，求索，深观和彻悟来获得。

补记：刚刚答辩完，请师弟吃完饭之后围着操场消食聊了一会儿天，谈到哲学问题，再次不免提到唯心主义。突然之间灵光一现，或许世界本身就不是二元对立的，唯物与唯心都只是站在一个面在思考问题，“物”与我心之间都必须要有 coupling 才会被我所感知。对于无力改变的外界“物”，能做的唯有减少彼此之间的 coupling。有能力的，当然是选择去改变外界这个“物”。

2023年6月17日 物理楼 517

刘 洁

个人简历，在学期间发表的学术论文及研究成果

姓名：刘洁 出生年月：1994 年 11 月

性别：女 政治面貌：中共党员

民族：汉族 籍贯：湖南省浏阳市

教育状况

湘潭大学 物理学 博士（导师：R. A. Römer, 钟建新）2017.09 – 2023.06

湘潭大学 物理学 学士 2013.09 – 2017.06

学术论文

- [1] J. Liu, C. Danieli, J. Zhong, and R. A. Römer, Unconventional Delocalization in a Family of Three-Dimensional Lieb Lattices, *Phys. Rev. B* 106, 214204 (2022). (SCI 二区, 物理类 Top)
- [2] J. Liu, X. Mao, J. Zhong, and R. A. Römer, Localization Properties in Lieb Lattices and Their Extensions, *Ann. Phys. (N. Y.)* 435, 168544 (2021). (SCI 三区)
- [3] J. Liu, X. Mao, J. Zhong, and R. A. Römer, Localization, Phases, and Transitions in Three-Dimensional Extended Lieb Lattices, *Phys. Rev. B* 102, 174207 (2020). (SCI 二区, 物理类 Top)
- [4] X. Mao, J. Liu, J. Zhong, and R. A. Römer, Disorder Effects in the Two-Dimensional Lieb Lattice and Its Extensions, *Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures* 124, 114340 (2020). (SCI 三区)

科研项目

- [1] Lieb 模型及其扩展模型的局域化性质研究, 获批日期: 2021 年, 项目来源: 湖南省研究生科研创新项目 (Postgraduate Scientific Research Innovation Project of Hunan province), 项目经费 3 万元, 项目编号 CX20210515。(主持)

部分参与学术会议

1. 中国物理学会 2022 秋季学术会议 (口头报告)
2. 湖南省物理学会学术会议 (口头报告); 湖南省第十三届研究生创新论坛 (口头报告)
3. IBS Conference on Flatbands: symmetries, disorder, interactions and thermalization (口头报告)
4. Localisation2020 (口头报告); Localisation 2022 (海报)