

分类号 _____

密级 _____

UDC _____

编号 _____

中国科学院研究生院 硕士学位论文

Hofstadter模型热力学性质的转移矩阵研究

许文虎

指导教师 _____ 向涛 研究员

_____ 中国科学院理论物理研究所

申请学位级别 _____ 硕士 _____ 学科专业名称 _____ 理论物理

论文提交日期 _____ 2008年5月 _____ 论文答辩日期 _____ 2008年5月

培养单位 _____ 中国科学院理论物理研究所

学位授予单位 _____ 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 _____ 苏刚 教授

Typeset by L^AT_EX 2_ε at June 5, 2008

With package C^ASthesis v0.1g of C_T_EX.ORG

Thermodynamical Properties of Hofstadter Model: A Transfer Matrix Study

Wen-Hu Xu

Supervisor:

Prof. Tao Xiang

Institute of Theoretical Physics

June, 2008

*Submitted in total fulfilment of the requirements for the degree of M.S.
in Theoretical Physics*

摘 要

在本论文中，我们用转移矩阵方法计算了Hofstadter模型的热力学性质。Hofstadter模型是描写二维情形下的布洛赫电子在均匀外磁场中运动的基本模型。首先，从二维无相互作用的紧束缚模型出发，通过Peierls替换，可以得到Hofstadter模型的哈密顿量。再取朗道规范，Hofstadter模型被化成分立的一维问题，并得到能量本征方程，即Harper方程。然后，我们给出了Hofstadter模型的转移矩阵方法的详细推导，给出了配分函数的解析表达式。利用该表达式，我们用数值方法求解了Hofstadter模型的自由能函数，进而得到平均能量，磁化强度和磁化率，霍尔系数等热力学性质。其中，低温下平均能量的结果与已有的结论是一致的：在给定填充数下，平均能量的最小值出现在“磁通相”(Flux phase)，即平均每个电子分配一个磁通量子。此外，与Hofstadter模型能谱(Hofstadter蝴蝶)中的分形结构一致，半满下的磁化强度和磁化率随磁场变化的曲线也呈现出分形结构，并随着温度的降低，分形结构也更加丰富。磁化率还出现了顺磁和抗磁性的振荡。顺磁的极大对应了费米面处发散的态密度，而抗磁的极大对应了费米面处态密度为零。此外，利用Streda公式，我们计算了Hofstadter模型的霍尔电导。

关键词： Hofstadter模型，转移矩阵，分形，磁化率，范-霍夫奇异性

Abstract

In this thesis, we calculate the thermodynamical properties of Hofstadter model. Hofstadter model is a fundamental two dimensional model of Bloch electrons in a homogeneous magnetic field. First, from non-interacting tight binding model and using Peierls substitution, we derive the hamiltonian of Hofstadter model. By adopting Landau gauge, the Hofstadter model is transformed into a series of discrete one-dimensional problems, of which the eigenenergy function is called Harper equation. Then, we give a detailed derivation of transfer matrix method for Hofstadter model, and obtain the analytical expression for the partition function. With this expression, we numerically calculate the free energy of Hofstadter model, and other thermodynamical properties such as average energy, magnetization and magnetic susceptibility, and Hall coefficients. The results of average energy agree with previous conclusions: with a given occupation number, the minimum average energy appears at the “flux phase”, at which one magnetic flux quanta accompanies one electron. Besides, consistent with the fractal structure in the energy spectrum of Hofstadter model, the magnetization and magnetic susceptibility with respect to magnetic field at half filling are fractal and with decreasing temperature, more complex fractal structure emerges. The susceptibility also demonstrates an oscillation between paramagnetism and diamagnetism. The local maximum paramagnetism corresponds a divergent density of states at the Fermi surface while the local maximum diamagnetism corresponds to a zero density of states at the Fermi surface. Besides, using the Streda formula, we also calculate the Hall conductance of Hofstadter model.

Keywords: Hofstadter model, transfer matrix, fractal, magnetic susceptibility, van-Hove singularity

目 录

摘要	i
Abstract	iii
目录	v
第一章 引言	1
第二章 Harper 方程	7
2.1 Peierls替换	7
2.2 紧束缚极限下的Harper方程	11
2.3 Hofstadter蝴蝶	15
2.4 Hofstadter蝴蝶的物理性质	18
第三章 Harper方程的转移矩阵方法	23
3.1 转移矩阵方法求解一维伊辛模型	23
3.2 Hofstadter模型的转移矩阵方法	25
3.3 局域转移矩阵	28
3.4 列转移矩阵	31
3.5 配分函数	35
3.6 热力学量	36
3.6.1 自由能	36
3.6.2 平均粒子数(填充数)	36
3.6.3 平均能量	37
3.6.4 磁化强度	37
3.6.5 霍尔电导	37

第四章 Hofstadter模型的热力学性质	39
4.1 有限尺寸效应	40
4.1.1 y 方向的有限尺寸效应	40
4.1.2 x 方向的有限尺寸效应	43
4.2 平均能量	46
4.3 磁化强度和磁化率	47
4.4 霍尔电导	54
第五章 结语	57
附录 A 朗道极限下的Harper方程	59
附录 B	63
附录 C	65
参考文献	67
简历	71
致谢	73

表 格

4.1	半满填充时平均能量的极小点处 ϕ 和填充数 ν 的关系。	48
4.2	图 (4.13) 中极大值点的 ϕ 值和 ϕ 的局域变量 β'	48
4.3	图 (4.13) 中极小值点的 ϕ 值和 ϕ 的局域变量 β'	50

插图

2.1	Hofstadter蝴蝶。取自文献[10]。	15
2.2	Hofstadter蝴蝶的骨架图。取自文献[10]。	16
2.3	电子态密度随 ϕ 的变化。取自文献[20]。	19
2.4	对粒子数平均的基态能随 ϕ 的变化。取自文献[20]。	20
2.5	能隙和霍尔电导。取自文献[1]。	21
4.1	y 方向的有限尺寸效应对自由能的影响。在图中选取的磁场范围内，不同尺寸下的自由能曲线基本是重合的。	41
4.2	y 方向的有限尺寸效应对磁化强度的影响。图中 ϕ 的范围与图(4.1)中的一致。	42
4.3	$\phi = 1/5$ 附近平均自由能受 y 方向有限尺寸效应的影响。在 $\phi = 1/5$ 处，有限尺寸效应会给平均自由能带来显著的误差，但是随系统 y 方向尺寸的增大，这个误差很快被消除。	42
4.4	$\phi = 1/5$ 附近磁化强度受 y 方向有限尺寸效应的影响。除了 $\phi = 1/5$ 处，其他各点的磁化强度数值受尺寸的影响极小。	43
4.5	x 方向的有限尺寸效应。当 x 方向的尺寸较小时，磁化强度有明显的振荡特征；随着尺寸增大，振荡减弱，磁化强度有收敛的趋势。	44
4.6	磁化强度的收敛。当 x 方向的尺寸大于80000时，磁化强度的数值基本不再变化。	44
4.7	格点尺寸为 50×2000 时， q 为质数541，3571和17389时磁化强度的计算结果。	45
4.8	格点尺寸为 50×80000 时， q 为质数541，3571和17389时磁化强度的数值计算结果。可以看出，磁化强度的值和 q 基本没有关系。当 $q = 17389$ 时， x 方向的80000个格点只包含了不到5个周期为17389的超晶格，但这并没有产生显著的有限尺寸效应。	46
4.9	半满情形下平均能量随磁场的变化。图中标出了几个极小值点，这些极小值点的 ϕ 值和填充数 ν 的关系满足式(4.3)，详见表(4.1)。	47

- 4.10 半满情形下磁化强度随磁场和温度的变化。从图中可以看出随着温度的降低 (β 的升高), 磁化强度的曲线出现细致的分形结构。 . 49
- 4.11 图 (4.10) 在 $\phi = 0.3$ 到 $\phi = 0.35$ 之间的局部放大图。 49
- 4.12 $\beta = 10$ 和 $\beta = 20$ 下磁化率。图中 C 标记了磁化率的部分极大值, D 标记了磁化率的部分极小值。 50
- 4.13 $\beta = 50$ 下磁化率。图中 A 标记了磁化率的部分极大值, B 标记了部分极小值。极大值和极小值处的 ϕ 值分别列在表 (4.2) 和表 (4.3) 中。 51
- 4.14 准经典图像中能带的鞍点附近的电子轨道。实线表示电子在磁场中运动的准经典轨道; 虚线表示发生磁崩溃 (Magnetic Breakdown) 后, 电子隧穿形成的轨道。本图取自文献[2]。 52
- 4.15 $\phi = 0.30$, $\phi = 0.31$ 和 $\phi = 0.33$ 时磁化率随温度的变化。在 $\phi = 0.3$ 时, 低温下是抗磁行为, 温度升高, 抗磁减弱并转变为顺磁; 在 $\phi = 0.31$ 时, 顺磁性随温度升高减弱, 但没有转变到抗磁行为; 在 $\phi = 0.33$ 时, 顺磁性受温度的影响不明显。 53
- 4.16 $\mu = 0$ 到 4, $\phi = 0$ 到 0.5 内 Hofstadter 模型部分能隙的霍尔电导。 . . 55

第一章 引言

本论文用量子转移矩阵方法计算了Hofstadter模型的热力学性质。Hofstadter模型描述的是紧束缚极限下的布洛赫电子在磁场中运动。我们只讨论二维情形。

无相互作用的二维电子气在周期性晶格和磁场共同作用下的运动是凝聚态物理学中的一个基本问题。没有磁场时，就是简单的能带模型，电子具有准动量 $\hbar k$ ，能带用色散关系 $E(k)$ 来描述。能带模型的特征时间尺度是

$$\tau_b = \frac{a}{v} = \frac{ma^2}{\hbar}. \quad (1.1)$$

其中 a 是晶格常数， v 是对应晶格动量 $\hbar k$ ， $k = 2\pi/a$ 对应的速度。没有周期性晶格时，无相互作用的二维电子气用朗道能级来描述。朗道能级是分立能级，满足

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.2)$$

其中， ω_c 是回旋共振频率， $\omega_c = eH/mc$ 。每个朗道能级是高度简并的，简并度等于穿过样品的磁通量对应的磁通量子数。这时的特征时间尺度由回旋共振频率给出，

$$\tau_l = \frac{1}{\omega_c} = \frac{mc}{eH}. \quad (1.3)$$

当周期性晶格和磁场共同作用于二维电子气时，问题就变得复杂。如果用微扰论处理，可以从两个方向出发。一方面，从能带模型出发，把磁场的作用作为微扰。在计算中，可以把哈密顿量中的矢势作为微扰项，用标准的微扰论来计算物理量；也可以把磁场的影响以Peierls替换（Peierls substitution）的形式写出来。具体来讲，Peierls替换就是用算符 $(\mathbf{p} - e/c\mathbf{A})/\hbar$ 代替能带色散关系 $E(k)$ 中的 k ，于是色散关系 $E(k)$ 变成算符，这就是能带电子在磁场中运动的有效哈密顿量。如果能带是从紧束缚模型得到的，那么我们称这为紧束缚极限，相应的模型叫做Hofstadter模型。另一方面，如果从朗道能级和波函数出发，把周期性晶格作用作为微扰，这叫做朗道极限。多数情况下只考虑同一个简并能级内的波函数在周期晶格微扰下的矩阵元。

无论是紧束缚极限还是朗道极限，当对矢势取朗道规范后，原来的二维问题都可以化成分立的一维问题，一维问题的能量本征方程是Harper方程。Harper方程的普遍形式如下，

$$c_{n-1} + c_{n+1} + 2 \cos(2\pi\alpha n + k)c_n = \epsilon c_n. \quad (1.4)$$

其中， k 是一维问题的标记，取实数； ϵ 是标度过的能量本征值（朗道极限和紧束缚下的标度方式略有不同，详见正文和附录。）。在朗道极限下， $\alpha = \phi_0/\phi$ ，其中 $\phi = Ba^2$ ， $\phi_0 = hc/e$ 是磁通量子， c_n 是能量本征波函数中朗道能级本征波函数的线性组合的系数；在紧束缚极限下， $\alpha = \phi/\phi_0$ ， c_n 是瓦尼尔函数的线性组合的系数。通过进一步的观察，可以看到， ϕ/ϕ_0 实际上也是上面提到的两个时间尺度 τ_b 和 τ_l 的比值。所以，当 α 是有理数，比如， $\alpha = p/q$ 时，Harper方程描述的是周期为 q 的超晶格问题；当 α 是无理数时，Harper方程描述的是一维准晶问题。给定磁场 B 和晶格常数 a ，就可以确定 α 的数值，进而求解Harper方程，计算能量本征值，所有的能量本征值组成能谱。能谱随 α 变化，就形成所谓的“Hofstadter蝴蝶”，它具有自相似特征的分形结构，关于它的详细描述见第一章。

下面简单介绍在紧束缚极限和朗道极限下已有的理论和实验方面的工作。

紧束缚极限下的理论主要基于对基态能量的考虑。Hofstadter最先给出了该模型的能谱[10]，即Hofstadter蝴蝶，用简洁的数学描述了它的自相似结构。后来Hasegawa等人计算了给定填充下平均基态能和磁场的关系[9]，他们发现，平均基态能的最小值出现在每个电子分配一个磁通量子的情形，他们称之为“磁通相”(Flux phase)，并且，在外磁场中，电子的总动能低于无外磁场下电子的动能，据此他们认为自由电子气的朗道抗磁理论失效，并引入了“轨道顺磁”的概念。

磁通相被用来构造二维Hubbard模型和t-J模型的基态，作为铜氧化物超导体的可能基态，这在1990年左右引起了广泛的讨论[3, 16, 24, 25]。

磁化强度和磁化率是直接反映磁场对物理系统的影响的可观测量。对于二维自由电子气，外磁场诱导出的轨道磁矩使电子气产生抗磁行为，这就是朗道抗磁性。在弱场和低温条件（ $\mu_B B \ll k_B T \ll \epsilon_F$ ）下，朗道抗磁性的磁化率可写成

$$\chi_0 = -\frac{1}{3}\mu_B^2 \rho(\epsilon_F). \quad (1.5)$$

其中， μ_B 是玻尔磁子， $\rho(\epsilon_F)$ 是费米面附近的态密度。这种抗磁性是由电子轨道运动造成的，因此也叫做轨道抗磁性。前面说到，对Hofstadter模型的计算表

明，在晶格作用下，系统有可能产生“轨道顺磁”的效应。据作者所知，轨道顺磁的效应目前还没有可靠的实验论证。但是关于轨道顺磁有两个工作值得一提，[2]和[33]，虽然这两篇文章中的计算并不是基于紧束缚模型和Peierls替换。在[2]中，作者从朗道能级出发，计算至晶格作用的二级微扰，得到在磁场中电子的动能仍然大于无磁场情形下的电子动能，并因此认为朗道的轨道抗磁理论在周期晶格的影响下仍然是正确的，并且作者将结果与用Peierls替换得到的结果比较，认为Peierls替换会引入较大的误差。在[33]，作者从能带电子波函数出发，考虑弱场极限，计算至矢势的二级微扰，得到磁化率的表达式，其中包含了能带内和带间的贡献。作者认为，当能带存在鞍点时，鞍点附近的态密度对数发散，并且鞍点附近的电子有效速度接近零，有利于形成磁崩溃（Magnetic Breakdown），电子产生与抗磁轨道方向相反的运动，于是会造成轨道顺磁性。这两个结论的出发点是不同的。在[33]中，出现轨道顺磁的一个必要条件是能带有鞍点；在[2]中，并没有考虑磁场对能带的结构的影响，实际上作者考虑的是一个很简单的晶格势场， $V(\mathbf{r}) = 2v \cos(2\pi x/a)$ ，不会产生有鞍点的能带。

朗道极限下的理论和实验工作都以二维均匀电子气的整数量子霍尔效应为背景。我们先对量子霍尔效应作简单的介绍。

在1980年，K. v. Klitzing等人在实验上发现了整数霍尔效应[11]。他们测量了磁场中的二维电子气的电导，发现横向电导（霍尔电导）随磁场变化出现一系列的平台，这些平台的电导是 e^2/h 的整数倍，对应填满的朗道能级。1982年，D. C. Tsui等人发现了分数量子霍尔效应，霍尔电导的平台出现在分数填充的朗道能级。分数量子霍尔效应和电子的库仑相互作用有关。由于本文考虑的是无相互作用模型，下面仅对整数量子霍尔效应的背景做简单介绍。

在实验上发现霍尔电导的平台是普适的现象。它对杂质不敏感，并且也不依赖于材料的特性。对此作出解释的理论工作有很多。R. B. Laughlin[15]认为规范不变性使得扩展态会贡献整数的横向电导，而局域态对横向电导没有贡献。杂质会使得原来高简并的朗道能级展宽成能带，但是展宽后的能带的两边存在迁移率边，在迁移率边之外都是局域态，迁移率边内部，能带中心附近是扩展态。当费米面落在局域态的区域内时，扩展态对霍尔电导的贡献不会受到影响。虽然Laughlin的论证很好的解释了霍尔效应的普适性，但是论证过程对边界条件的以来比较强。后来，P. Streda 从线性效应理论出发，应用久保方程，推导了二维电子气在磁场中的电导率[30]。他的推导有以下出发点：

1. 电子气的准粒子激发满足费米-狄拉克统计。
2. 只考虑弹性散射。
3. 均匀磁场垂直于二维电子气的平面。
4. 单电子哈密顿量是

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(x, y). \quad (1.6)$$

其中, $V(x, y)$ 是任意的势场。哈密顿量 (1.6) 的能谱中必须有能隙。

Streda分别推导了纵向电导和横向电导。横向电导的公式十分简洁,

$$\sigma_{xy} = ec \frac{\partial N(E)}{\partial B} \Big|_{E=E_F}. \quad (1.7)$$

其中 $N(E)$ 是能量 E 以下的态密度的积分。所以, 横向电导正比于电子的总填充数对磁场的偏导。由此出发, 很容易解释当能谱中出现能隙时, 横向电导的平台效应。

尽管Laughlin的论证[15]和Streda公式[30] 的出发点看起来很不相同, 但最终他们都得到相同的结果。这是因为霍尔电导的平台(量子化)效应本质上是因为磁场中二维电子气的“不可压缩性”(Incompressibility) [19]。不可压缩性也是分数量子霍尔效应的原因。限于篇幅, 这里不再深入讨论, 可参考文献[19]和[26]。

P.Streda的文章中对外势场 $V(x, y)$ 没有作任何限制。D.J.Thouless等人考虑了周期性的 $V(x, y)$ [31]。他们取朗道能级的本征波函数作为基函数(也就是上面提到的朗道极限), 用久保方程计算了霍尔电导。周期性晶格的作用使得朗道能级展宽, 展宽后的能谱是Hofstadter蝴蝶。他们得到了在 $\phi = Ba^2/\phi_0$ 是有理数下的能隙和霍尔电导的关系 (B 是磁场, a 是晶格常数, ϕ_0 是磁通量子。): 若 $\phi = q/p$, 则

$$g = wp + \sigma q \quad |w| \leq q/2. \quad (1.8)$$

其中, g 是自然数, w, σ 是整数。它说的是, 在给定的 $\phi = q/p$ 下, 沿着能谱从低能向高能走, 第 g 个能隙对应的霍尔电导由式 (1.8) 决定, 电导的值为 $e^2/h\sigma$ 。这个简明的结论已经为实验所证实, 同时实验也验证了朗道极限下Hofstadter蝴蝶的分形结构[1]。理论计算表明, 如果在朗道极限下的微扰论中记入不同朗道

能级间的矩阵元，Hofstadter蝴蝶的结构也会改变，相应的霍尔电导也会改变。这在实验上也已经被观测到[6]。

在紧束缚极限下，Hofstadter模型也是一个量子霍尔系统，磁场会将紧束缚模型的能带劈裂形成能隙，这些能隙也会产生横向电导的整数平台。Hofstadter模型满足Streda公式的前提，所以可以用Streda公式计算Hofstadter模型的霍尔电导。

此外，Harper方程，也是描述一维准晶格问题的能量本征方程，它也被广泛用于讨论一维准晶的金属-绝缘体相变[7, 13, 12]。

在本论文中，我们仍然从Peierls替换和紧束缚模型出发，得到描述电子在晶格和磁场共同作用下的有效哈密顿量，即Hofstadter模型，然后用转移矩阵方法，计算Hofstadter模型的自由能，通过对自由能求偏导得到其他热力学性质，包括平均能量，磁化强度和磁化率，以及霍尔电导。下面是后面各章的主要内容。

在第二章里，我们先用Peierls替换，从无相互作用的二维紧束缚模型出发，推导出Hofstadter模型的能量本征方程，Harper方程，并得到Hofstadter模型的二次量子化形式。然后，我们给出了Hofstadter模型的能谱结构，即Hofstadter蝴蝶图。Hofstadter蝴蝶具有分形结构，我们讨论了如何用简明的数学描述这种分形结构，并说明了Hofstadter蝴蝶的自迭代性质。接着，我们给出了Hofstadter模型的已知的一些物理性质，包括平均基态能的极小值和磁通相（Flux phase）以及朗道极限下的Hofstadter蝴蝶中的霍尔电导的理论和实验结果。

在第三章里，我们用量子转移矩阵方法推导了Hofstadter模型的自由能函数。在历史上，转移矩阵方法被成功的用于严格求解二维的伊辛模型[22]。Hofstadter模型是二维的量子模型，但是在采用朗道规范以后，Hofstadter模型可以化成多个分立的一维问题（实际上，一个Harper方程描述的就是这么一个一维问题。）。于是，可以期望，Hofstadter模型的有限温性质，可以用转移矩阵方法来求解。在推导过程中，通过将局域转移矩阵的二次型算符写成一个迹为零的二次型算符的指数形式，我们最终得到了配分函数的解析表达式，从而可以计算Hofstadter模型的自由能函数。值得注意的是，从配分函数的表达式可以看出，数值计算配分函数的计算量和系统的尺寸基本成线性关系，这是转移矩阵方法在处理此类问题时优于其他数值方法的一个方面。Hofstadter模型的其他热力学量，如粒子数密度，平均能量，磁化强度和磁化率，都可通过对自

由能函数求偏导得到。并且，利用Streda公式，对磁化强度求偏导，我们还可以得到Hofstadter模型的霍尔电导。

第四章给出了对Hofstadter模型的计算结果。首先我们讨论了数值计算中的有限体积效应的影响。在选取朗道规范后，二维的Hofstadter模型在一个方向上具有晶格平移对称性，而在与之垂直的方向上晶格平移对称性被破坏。我们分析了这两个方向上有限体积效应对数值结果的不同影响。同时，当穿过晶格元胞的磁通量子数 ϕ 是有理数 p/q 时，Harper方程描述的是周期为 q 个元胞的超晶格问题，于是我们讨论了 q 的取值产生的有限体积效应。之后我们计算了半满填充下系统的平均能量和磁场强度的关系，我们发现转移矩阵方法的结果与已有的结论是完全一致的。所以，在处理Hofstadter模型时，转移矩阵方法的结果是可信的。接着，我们计算了半满填充和有限温度下Hofstadter模型的磁化强度和磁化率和磁场(ϕ)的关系。我们发现，温度的降低会给磁化强度和磁化率带来细致的分形结构，实际上这从Hofstadter蝴蝶的分形结构中就能预期到。进一步，我们建立了半满的Hofstadter模型的顺磁性和抗磁性和费米面处电子态密度的关系。计算结果表明，磁化率的极大值（大于零，顺磁）和极小值（小于零，抗磁）点分别对应着费米面处态密度的发散和零值，并且把这里的轨道顺磁性和文献[33]中的轨道顺磁的准经典图像作了比较。最后，利用Streda公式，我们计算了Hofstadter模型的霍尔电导。

在最后一章里，我们对全文进行了总结。

第二章 Harper 方程

Harper方程是描写具有周期性结构的二维系统中的电子(布洛赫电子)在外加磁场作用下的运动方程。我们可以从两种极限考虑布洛赫电子在磁场中的运动,后面将这两种极限分别成为紧束缚极限和朗道极限。在紧束缚极限中,我们从二维紧束缚模型出发,把外加磁场对电子运动的影响作为微扰,得到一个简化的哈密顿量。而朗道极限则刚好相反,从外加磁场下自由电子运动的哈密顿量和波函数出发,将周期性的势场作为微扰,考虑波函数和能谱的变化。虽然出发点很不一样,但是在这两种极限下我们都可以推出相同形式的Harper方程。下面我们将注意力放在紧束缚极限,推导出Harper方程和相应的二次量子化形式的哈密顿量。紧束缚极限下的模型又被称为Hofstadter模型[10]。

2.1 Peierls替换

如何描述磁场对布洛赫电子运动的影响始终是早期的固体物理和后来的凝聚态物理学研究的基本问题之一。早期讨论这个问题的文献有很多,如[23], [14], [28], [18], [34]等。这方面的研究的一个重要的结果就是所谓的“Peierls替换”(“Peierls Substitution”)。Peierls替换是得到布洛赫电子在磁场中运动的有效哈密顿量的一种方法。

对于自由空间中的电子,为了描述磁场的影响,我们通常作如下替换:

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}. \quad (2.1)$$

箭头两边的 \mathbf{p} 都是正则动量,箭头右边的 \mathbf{A} 是矢势,它是实空间坐标的函数。Peierls替换做的事情与此类似。在无外磁场时,布洛赫电子的运动由能带的色散关系来描述: $E(\mathbf{k})$, 其中 \mathbf{k} 是晶格动量。为了得到磁场影响下的有效哈密顿量,我们将晶格动量 \mathbf{k} 作如下替换:

$$\mathbf{k} \longrightarrow \frac{1}{\hbar} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right). \quad (2.2)$$

其中箭头右边的 \mathbf{p} 是动量算符, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ 是矢势算符。这样得到的算符

$$E \left(\frac{1}{\hbar} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \right) \quad (2.3)$$

就是描写磁场中布洛赫电子运动的有效哈密顿量。

下面我们给出Peierls替换的一个简明的证明，证明过程主要来自于参考文献[18]。这个证明也包含了电场的影响。

单电子哈密顿量为：

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 + V(\mathbf{r}) + e\varphi(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

其中， \mathbf{A} 是矢势， $\varphi(\mathbf{r})$ 是标势， $V(\mathbf{r})$ 是周期性外势。波函数 ψ 满足含时薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi. \quad (2.5)$$

ψ 可以用瓦尼尔函数展开，

$$\psi = \sum_m \Psi(\mathbf{R}_m) \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} G_m \right) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m), \quad (2.6)$$

其中， \mathbf{R}_m 是格点坐标； $\Psi(\mathbf{R}_m)$ 是展开系数，后面简记为 Ψ_m ； $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$ 是格点 m 上的瓦尼尔函数，后面简记为 a_m ； G_m 是与矢势有关的积分：

$$G_m = \int_{\mathbf{R}_m}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\xi) \cdot d\xi. \quad (2.7)$$

积分沿连接 \mathbf{R}_m 和 \mathbf{r} 的直线。容易证明

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \exp \left[\frac{ie}{\hbar c} G_m \right] a_m \\ &= \exp \left[\frac{ie}{\hbar c} G_m \right] \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} (\mathbf{A} - \nabla G_m) \right)^2 a_m. \end{aligned} \quad (2.8)$$

于是，

$$\begin{aligned} H\psi &= \sum_m \Psi_m \exp \left[\frac{ie}{\hbar c} G_m \right] \\ &\quad \times \left(\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} (\mathbf{A} - \nabla G_m) \right)^2 + V + e\varphi \right) a_m. \end{aligned} \quad (2.9)$$

可以证明，

$$\nabla G_m = \mathbf{A} + \int_0^1 \lambda d\lambda (\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \times \mathbf{H}(\mathbf{R}_m + \lambda(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)). \quad (2.10)$$

利用瓦尼尔函数的局域性，可以认为 $\mathbf{r} \simeq \mathbf{R}_m$ ，所以式 (2.10) 中的叉乘项可以略去，因此，

$$H\psi = \sum \Psi_m \exp \left[\frac{ie}{\hbar c} G_m \right] \left(\frac{1}{2m} p^2 + V + e\varphi(\mathbf{R}_m) \right). \quad (2.11)$$

我们把 $p^2/2m + V$ 记为 H_0 ，这是无外加电磁场下的晶格中电子运动的哈密顿量，它的本征波函数是布洛赫波函数：

$$H_0\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = E_0(\mathbf{p}')\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

其中 $E_0(\mathbf{p}')$ 就是能带的色散关系。布洛赫波函数通过傅立叶变换与瓦尼尔函数联系起来

$$a_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p}'} \exp \left\{ -\frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{R}_m}{\hbar} \right\} \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}). \quad (2.13)$$

于是，

$$H_0 a_m = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\mathbf{p}'} E_0(\mathbf{p}') \exp \left(-\frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{R}_m}{\hbar} \right) \psi_{\mathbf{p}'}. \quad (2.14)$$

同样的， $\psi_{\mathbf{p}'}$ 也可以通过傅立叶变换用 a_m 展开，

$$\psi_{\mathbf{p}'} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_m \exp \left(\frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{R}_m}{\hbar} \right) a_m. \quad (2.15)$$

式 (2.14) 可以写成

$$H_0 a_m = \frac{1}{N} \sum_{l, \mathbf{p}'} E_0(\mathbf{p}') \exp \left(\frac{i\mathbf{p}' \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)}{\hbar} \right) a_l. \quad (2.16)$$

又因为能带的色散关系 $E_0(\mathbf{p}')$ 是 \mathbf{p}' 的周期函数，它也可以作傅立叶展开，

$$E_0(\mathbf{p}') = \sum_s B_s \exp \left(-\frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{R}_s}{\hbar} \right). \quad (2.17)$$

于是，式 (2.14) 可以进一步写成

$$\begin{aligned} H_0 a_m &= \frac{1}{N} \sum_{l, s} \sum_{\mathbf{p}'} B_s \exp \left(\frac{i\mathbf{p}' \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_s - \mathbf{R}_m)}{\hbar} \right) \\ &= \sum_s \delta_{l, m+s} a_l. \end{aligned} \quad (2.18)$$

帶入到式 (2.11) 中, 得

$$H\psi = \sum_m \Psi_m \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} G_m\right) \left[\sum_s B_s a_{m+s} + e\varphi(\mathbf{R}_m a_m) \right]. \quad (2.19)$$

将第一项的求和指标 m 变为 $m-s$, 并利用恒等式

$$\Psi(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_s) = \exp(-\mathbf{R}_s \cdot \nabla_m) \Psi(\mathbf{R}_m). \quad (2.20)$$

式 (2.11) 可以写成

$$\begin{aligned} H\psi &= \sum_m a_m \left\{ \sum_s B_s \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} G_{m-s}\right) \exp(-\mathbf{R}_s \cdot \nabla_m) \right. \\ &\quad \left. + e\varphi(\mathbf{R}_m) \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} G_m\right) \right\} \Psi(\mathbf{R}_m). \end{aligned} \quad (2.21)$$

到这里, 我们要再次利用瓦尼尔函数的局域性, 取 $\mathbf{r} \simeq \mathbf{R}_m$, 则 G_m 和 G_{m-s} 可以写成

$$G_m(\mathbf{r} = \mathbf{R}_m) = 0, \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} G_{m-s}(\mathbf{r} = \mathbf{R}_m) &= \int_0^1 d\lambda \mathbf{R}_m \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_m - (1-\lambda)\mathbf{R}_s) \\ &= \int_0^1 d\lambda \mathbf{R}_s \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_m - \lambda\mathbf{R}_s). \end{aligned} \quad (2.23)$$

将 G_m 和 G_{m-s} 代入, 得

$$\begin{aligned} H\psi &= \sum_m \left\{ \sum_s B_s \exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_0^1 d\lambda \mathbf{R}_s \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_m - \lambda\mathbf{R}_s)\right] \right. \\ &\quad \left. \times \exp(-\mathbf{R}_s \cdot \nabla_m) + e\varphi(\mathbf{R}_m) \right\} \Psi(\mathbf{R}_m). \end{aligned} \quad (2.24)$$

可以证明以下等式 (见文献[18]中的附录),

$$\begin{aligned} &\exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_0^1 d\lambda \mathbf{R}_s \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_m - \lambda\mathbf{R}_s)\right] \exp(-\mathbf{R}_s \cdot \nabla_m) \\ &= \exp\left[-i\mathbf{R}_s \cdot \left[\mathbf{p}_m - \frac{e}{c} \mathbf{A}_m\right]\right], \end{aligned} \quad (2.25)$$

其中, $\mathbf{p}_m = -i\hbar\nabla_m$, $\mathbf{A}_m = \mathbf{A}(\mathbf{R}_m)$ 。另外, 由能带的色散关系的傅立叶展开 (2.17) 可知,

$$\begin{aligned} &\sum_s B_s \exp\left\{-i\mathbf{R}_s \cdot \left[\mathbf{p}_m - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_m)\right] / \hbar\right\} \\ &= E_0 \left(\mathbf{p}_m - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_m)\right). \end{aligned} \quad (2.26)$$

代入到式 (2.24) 中, 得

$$H\psi = \sum_m a_m \left\{ E_0 \left(\mathbf{p}_m - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_m) \right) + e\varphi(\mathbf{R}_m) \right\} \Psi(\mathbf{R}_m). \quad (2.27)$$

因此, 薛定谔方程

$$\begin{aligned} H\psi &= i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &= i\hbar \sum_m a_m \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} G_m \right) \dot{\Psi}(\mathbf{R}_m) \\ &\simeq i\hbar \sum_m a_m \dot{\Psi}(\mathbf{R}_m). \end{aligned} \quad (2.28)$$

所以,

$$\sum_m a_m \left\{ E_0 \left(\mathbf{p}_m - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_m) \right) + e\varphi(\mathbf{R}_m) \right\} \Psi(\mathbf{R}_m) = i\hbar \sum_m \dot{\Psi}(\mathbf{R}_m) a_m. \quad (2.29)$$

即,

$$\left\{ E_0 \left(\mathbf{p}_m - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_m) \right) + e\varphi(\mathbf{R}_m) \right\} \Psi(\mathbf{R}_m) = i\hbar \dot{\Psi}(\mathbf{R}_m). \quad (2.30)$$

这就是布洛赫电子在外电磁场中运动的有效薛定谔方程 (或能量本征方程)。可以看出, 原来能带的色散关系中准动量 \mathbf{p} 被算符 $\mathbf{p} - e/c\mathbf{A}(\mathbf{R}_m)$ 取代, 外电势作为线性项也被直接写入到方程中。这就是所谓的“Peierls替换”。

2.2 紧束缚极限下的Harper方程

现在我们讨论紧束缚极限下布洛赫电子在外加均匀磁场中的运动, 即Hofstadter模型。利用Peierls替换, 我们可以得到一个差分方程, 即Harper方程, 它是Hofstadter模型的能量本征方程的一种形式。下面我们推导Harper方程。

无外磁场时, 无相互作用的紧束缚模型的哈密顿量是:

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(c_i^\dagger c_j + h.c. \right). \quad (2.31)$$

这里只考虑最近邻跃迁项。经过傅立叶变换, 这个哈密顿量可以对角化, 并得到能带的色散关系。考虑二维正方格点, 色散关系为:

$$E(\mathbf{k}) = 2t (\cos k_x a + \cos k_y a). \quad (2.32)$$

a 是晶格常数。在进行Peierls替换前,先对色散关系的形式稍作处理:

$$E(\mathbf{k}) = t(\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a) + \exp(ik_y a) + \exp(-ik_y a)). \quad (2.33)$$

还要确定规范。我们取朗道规范,即 $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = H(0, x, 0)$ 。作Peierls替换,

$$\begin{aligned} k_x &\rightarrow \frac{1}{\hbar} \hat{\mathbf{p}}_x, \\ k_y &\rightarrow \frac{1}{\hbar} \left(\hat{\mathbf{p}}_y - \frac{e}{c} H x \right). \end{aligned}$$

有效哈密顿量为:

$$\begin{aligned} H_{eff} = & t \exp\left(i \frac{a}{\hbar} \hat{p}_x\right) + t \exp\left(-i \frac{a}{\hbar} \hat{p}_x\right) \\ & + t \exp\left(-i \frac{e H a x}{\hbar c}\right) \exp\left(i \frac{a}{\hbar} \hat{p}_y\right) + t \exp\left(i \frac{e H a x}{\hbar c}\right) \exp\left(-i \frac{a}{\hbar} \hat{p}_y\right) \end{aligned}$$

容易看出,有效哈密顿量中包含四个平移算符。我们写实空间表象下的能量本征波函数为 $\psi(x, y)$,则能量本征方程 $H\psi(x, y) = E\psi(x, y)$ 可以写成:

$$\begin{aligned} \psi(x+a, y) + \psi(x-a, y) + \exp\left(-i \frac{e H a x}{\hbar c}\right) \psi(x, y+a) \\ + \exp\left(i \frac{e H a x}{\hbar c}\right) \psi(x, y-a) = \epsilon \psi(x, y). \end{aligned} \quad (2.34)$$

其中, $\epsilon = E/t$ 。因为我们考虑的是紧束缚模型,所以 $\psi(x, y)$ 中的是空间坐标只需考虑格点坐标,即

$$x = ma, \quad y = na. \quad (2.35)$$

并考虑到方程(2.34)中的相位项只与 x 有关, $\psi(x, y)$ 对 y 方向的依赖关系可通过傅立叶变换分离:

$$\psi(ma, na) = \exp(ikn) g(m). \quad (2.36)$$

将(2.35)和(2.36)代入本征方程(2.34),得到

$$g(m+1) + g(m-1) + 2 \cos(2\pi m\alpha - k) g(m) = \epsilon g(m). \quad (2.37)$$

这就是Harper方程。这是一个差分方程。其中,

$$\alpha = \frac{a^2 H}{2\pi(\hbar c/e)}. \quad (2.38)$$

为了用转移矩阵方法计算Hofstadter模型的热力学函数，我们需要写出二次量子化的哈密顿量。由式(2.37)不难看出，Hofstadter模型的二次量子化哈密顿量为

$$\begin{aligned} H &= \sum_k H_k \\ &= \sum_k \left[t \sum_j \left(c_{j+1,k}^\dagger c_{j,k} + c_{j,k}^\dagger c_{j+1,k} + 2 \cos(2\pi j\alpha - k) c_{j,k}^\dagger c_{j,k} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.39)$$

可以看出，原来的二维情形下哈密顿量被划分为多个分立的一维哈密顿量，每个哈密顿量用傅立叶变换(2.36)中的 k 来标记。

在朗道极限下，周期性外势场是作为微扰引入的。以朗道能级的本征波函数作为基函数，微扰论可给出形式类似的Harper方程。这里不再赘述，附录A中将稍作介绍。

Harper方程(2.37)中的参数 α 有两个物理意义。第一， α 是穿过一个元胞的磁通量子 $\hbar c/e$ 的个数；第二， α 表示该二维系统中两个时间尺度的比值。一个时间尺度是以晶格动量 $2\pi\hbar/a$ 经过一个晶格常数 a 的周期；另一个是电子在磁场 H 中作圆周运动的回旋频率 $\omega_c = eH/mc$ 的倒数。可以看到， α 是有理数还是无理数会对能谱的结构产生复杂的影响。

当 α 是有理数时，情况比较简单。设 $\alpha = p/q$ ，其中 p, q 互质，且 $p < q$ ，容易看出，

$$2\pi(j+q)\frac{p}{q} + k = 2\pi j\frac{p}{q} + k. \quad (2.40)$$

所以，原来的一维问题又进一步等效成一个元胞长度为 qa (a 是原来的晶格常数)的超晶格问题。引入傅立叶变换，

$$c_{mq+j,k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_K \exp[iKm(qa)] c_{l,k,K}, \quad (2.41)$$

$$c_{mq+j,k}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_K \exp[-iKm(qa)] c_{l,k,K}^\dagger. \quad (2.42)$$

其中， m 是超晶格中元胞的指标； l 是超晶格元胞中格点的指标， $l = 0, 1, \dots, q-1$ ； K 是超晶格的晶格动量，对应的第一布里渊区的长度为 $2\pi/q$ 。于是式(2.39)

可写成

$$H = \sum_{k,K} \begin{pmatrix} c_{0,k,K}^\dagger & c_{1,k,K}^\dagger & \cdots & c_{q-1,k,K}^\dagger \end{pmatrix} H_{k,K} \begin{pmatrix} c_{0,k,K} \\ c_{1,k,K} \\ \vdots \\ c_{q-1,k,K} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

$H_{k,K}$ 是一个 $q \times q$ 的矩阵:

$$H_{k,K} = \begin{pmatrix} M_0(k, \phi) & 1 & \cdots & 0 & \exp[-iKqa] \\ 1 & M_1(k, \phi) & 1 & \vdots & 0 \\ \vdots & 1 & \ddots & 1 & \vdots \\ 0 & \vdots & 1 & M_{q-2}(k, \phi) & 1 \\ \exp[iKqa] & 0 & \cdots & 1 & M_{q-1}(k, \phi) \end{pmatrix}. \quad (2.44)$$

其中,

$$M_j(k, \phi) = 2 \cos \left(2\pi j \frac{p}{q} - k \right). \quad (2.45)$$

$H_{k,K}$ 的右上角和左下角的指数项是由于相邻超晶格的第 $q-1$ 个格点和第 0 个格点之间的跃迁引入的依赖于超晶格的晶格动量 K 的色散。由此可见, 对于外加磁场 $\phi = p/q$ 的情况, 原来的紧束缚模型的单带劈裂成 q 个带。这自然会引入两个问题。

第一, 当 $\phi = p/q$ 取 0 到 1 之间的所有有理数时, q 是随 ϕ 剧烈振荡的函数。比如说 $\phi = 1/3$ 时, $q = 3$; 当 $\phi = 3000/10001$ 时, $q = 10001$ 。也就是说, ϕ 仅仅发生了微小的变化, 却导致了能带发生了数量可观的劈裂 (从 3 个劈裂成 10001 个)。如果这种劈裂能够产生可观测的物理效应的话, 将会使对于布洛赫电子在磁场中运动的实验观察变得无法控制。

第二, 如果 ϕ 是无理数, 超晶格的图像自然不再使用, 那么系统的能谱又将是什么样子, 它与 ϕ 是有理数的情况有何联系?

对于这两个问题, Hofstadter 通过数值计算, 提出了一个数学上还未经证明的假设, 被称作 Nesting hypothesis。通过这个假设, Hofstadter 用所谓“自迭代”的概念描述了布洛赫电子在均匀磁场中运动的能谱结构。下面我们对此作简单的介绍。

2.3 Hofstadter蝴蝶

Hofstadter用数值方法计算了在 α 为有理数下的Harper方程的解[10], 给出了系统能级随磁场变化的图像, 这个图像被称为Hofstadter蝴蝶。如图(2.1)所示, 取跃迁系数 t 为能量单位, 则图中横轴表示的能量 ϵ 范围从 -4 到 4 。纵轴

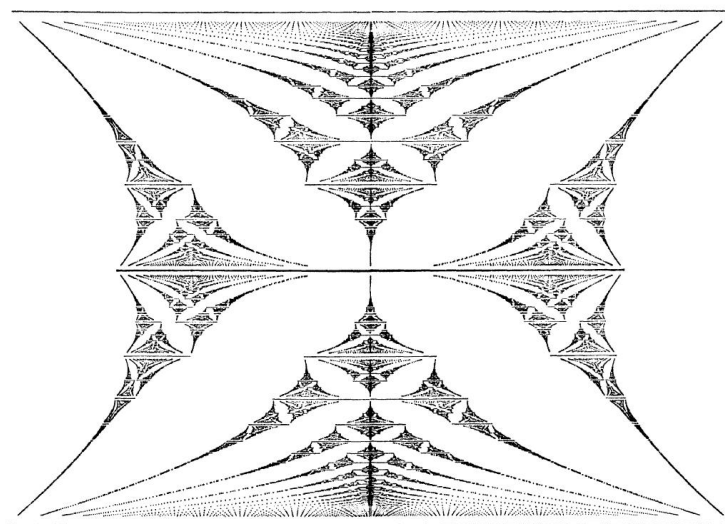


图 2.1: Hofstadter蝴蝶。取自文献[10]。

表示外磁场强度 ϕ , 取磁通量子为单位, 磁场强度的范围从0到1。从式(2.39)中可以看出, ϕ 对系统的影响是周期性的, 周期为 $\phi_p = 1$ 。因此, 我们也只需考虑这个范围内的能级结构。 ϕ 取0到1范围内的Hofstadter蝴蝶, 我们称之为一个**元胞** (cell), ϕ 称为这个元胞的**变量** (variable)。从图中还可以直接看出, Hofstadter蝴蝶关于 $\epsilon = 0$ 和 $\phi = 1/2$ 对称, 这种对称性也很容易从哈密顿量(2.39)中看出。还可以看出的是, 系统的能隙随磁场的变化是比较连续的, 但是能带随磁场的变化会发生突变。Hofstadter的Nesting假设包含了三部分, 下面分别加以说明。

Hofstadter发现, 有两类磁场强度下的能级在构造整个蝴蝶的时候是有特

殊地位的。这两种情况是：

$$\phi = \frac{1}{N} \quad \text{或} \quad \phi = 1 - \frac{1}{N}, \quad N \geq 2 \quad (2.46)$$

和

$$\phi = \frac{N}{2N+1} \quad \text{或} \quad \phi = 1 - \frac{N}{2N+1}, \quad N \geq 2 \quad (2.47)$$

Nesting假设的第一部分是说：对于情况 (2.46)，共有 N 条子能带；当 N 趋于无穷大时，子能带的带宽和带隙的比值趋于零，而且子能带在 -4 到 4 的能量范围内趋向于均匀分布。对于情况 (2.47)，当 N 趋于无穷大时，第 $N + 1$ 条能带（即位于能量范围中间的能带）的带宽趋向于 0。

下面由这些特殊情况下的能级构造 Hofstadter 蝴蝶的子元胞 (subcell) 和骨架图。从图 (2.1) 中能看出，Hofstadter 蝴蝶可以分成最大的左、中、右三个部分。对于左和右两个部分，将情况 (2.46) 所对应的能带的最外沿依次用直线连接起来。对于中间部分，将情况 (2.46) 中 $N > 2$ 的能带的最外沿和情况 (2.47) 中间能带的最外沿依次用直线连接起来。于是，我们构造了如图 (2.2) 所示的 Hofstadter 蝴蝶的骨架图。直线构成的四边形就是 Hofstadter 蝴蝶的子元胞。元胞，子元胞，变量和后面将要提到的局域变量是 Nesting 假设里的基本概念。

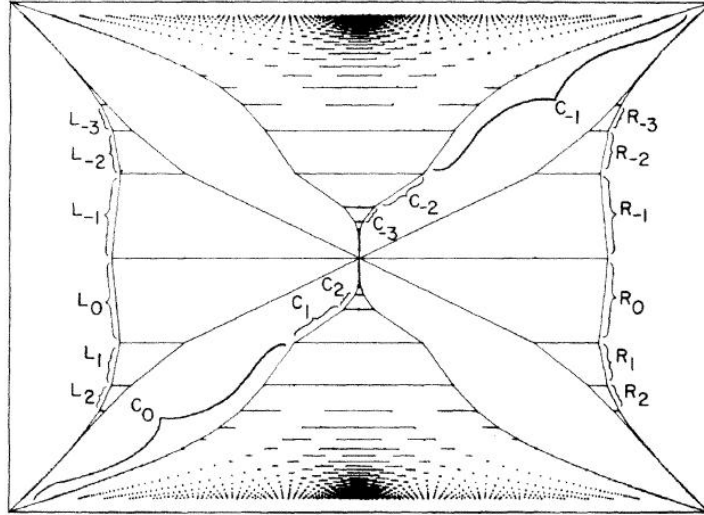


图 2.2: Hofstadter 蝴蝶的骨架图。取自文献[10]。

Nesting 假设的第二部分说的是，子元胞之外的区域都是能隙的区域。

Nesting假设的第三部分，是用迭代的方法，将整个Hofstadter蝴蝶用骨架图构造出来。为了进行迭代，Hofstadter首先对子元胞引入局域变量（local variable）的概念。初始元胞的变量用 β （也就是 ϕ ）表示，其子元胞的局域变量用 β' 表示。 β 所对应的能谱在初始元胞的左、中、右三个部分中分别经过三个子元胞。

当 $0 < \beta \leq 1/2$ 时，对于左边和右边的子元胞， β 与其对应的局域变量 β' 的关系为：

$$\beta = (N + \beta')^{-1}. \quad (2.48)$$

其中，

$$N = \left[\frac{1}{\beta} \right],$$

表示小于 β 的倒数的最大整数。我们把这种迭代叫做R（右）或L（左）变换。对于中间子元胞， β 与其对应的局域变量 β' 的关系为：

$$\begin{aligned} \beta &= \left(2 + \frac{1}{\alpha'} \right)^{-1}, \\ \beta' &= \{\alpha'\}, \quad \beta' \text{ 是 } \alpha' \text{ 的小数部分.} \end{aligned} \quad (2.49)$$

我们把这种变换叫做C（中间）变换。在后面讨论Hofstadter模型在半满情况下的磁性质时，要用到C变换。

当 $1/2 \leq \beta < 1$ 时， β' 通过 $(1 - \beta)$ 求出。

下面通过一个例子来示范这种迭代过程，并说明正是这种迭代使得随磁场剧烈变化的能带结构并不会带来物理效应上的混乱。考虑 $\beta = 5/17$ 的情况。对于左边和右边的子元胞，

$$\frac{5}{17} = (N + \beta')^{-1} = \left(3 + \frac{2}{5} \right)^{-1}. \quad (2.50)$$

于是， $\beta' = 2/5$ 。 β' 的分母是5，所以在左边和右边的子元胞中，分别有5条能带。对于中间子元胞，

$$\frac{5}{17} = \left(2 + \frac{1}{\alpha'} \right)^{-1} = \left(2 + \frac{1}{5/7} \right)^{-1}, \quad (2.51)$$

于是， $\beta' = \{5/7\} = 5/7$ 。 β' 的分母是7，所以在中间子元胞中，有7条能带。容易看出，对于 $\beta' = 2/5$ 和 $\beta' = 5/7$ ，还可以继续这种迭代，这表示在子元胞

中划分出更小的子元胞。通过简单的计算可以得到, 对于 $\beta' = 2/5$, 下一级的左、中、右子元胞的局域变量分别为 $1/2$ 、 0 和 $1/2$, 分别对应了 2、1、2 条子带; 对于 $\beta' = 5/7$, 下一级的左、中、右子元胞的局域变量分别为 $1/2$ 、 $1/3$ 和 $1/2$, 分别对应了 2、3、2 条子带。所以, $\beta = 5/17$ 下的能级结构可以表示为:

$$(2 - 1 - 2) - (2 - 3 - 2) - (2 - 1 - 2).$$

对于 β 等于其它的任一有理数, 都可进行同样的迭代过程。可以注意到, 每次迭代都使得迭代得到的子元胞的局域变量的分子或(和)分母小于迭代前的元胞的对应的变量。所以, 经过有限步之后, 都能使最终的子元胞的局域变量成为 (2.46) 的形式或 0。换句话说, 将初始元胞的骨架图缩小, 变形, 填入到它的子元胞中, 并将这个过程不断继续下去, 我们将得到所有有理数磁场下的能级分布。每次迭代对元胞内子元胞外的能隙区域都不产生任何影响, 可以看出, 数值相近但分母相差悬殊的两个有理数磁场下的能级结构中最大的一系列能隙是相等的, 数值越接近, 存在差异的能隙结构所对应的能量尺度越小。也就是说, 有理数的分母的振荡仅是数学上的效果, 并不能产生物理上的可观测效应。

下面的问题自然是对于无理数情况的外磁场(或元胞变量), 能级结构又将是什么样呢? Hofstadter 指出, 可以通过用有理数逼近的方法得到。从数学中我们知道, 任意一个无理数都可以通过用一个有理数序列逼近, 同样, 无理数下的能谱结构也可以通过逼近这个无理数的有理数序列的能谱结构来逼近。最终的结果是, 无理数磁场下能谱是一个康托集, 没有有限带宽的能带。

2.4 Hofstadter 蝴蝶的物理性质

Hofstadter 蝴蝶向人们展现了一个简单的物理模型的视觉美感, 下面的问题就是这种结构会产生什么样的物理特性, 特别是能否产生实验上可观测的物理效应。现在我们对以往这方面的工作做一个简单的回顾。

Y. Hasegawa *et al.* [9], G. Montambaux [20] 和 Y. Hasegawa *et al.* [8] 计算了 Hofstadter 模型(紧束缚极限)的态密度和基态能。图 (2.3) 中显示的是在几种 ϕ 下的电子态密度。可以看出, 对于 $\phi = 1/q$, 当 q 是大于零的偶数时, 电子态密度在 $E/t = 0$ 处是发散的; 当 q 是奇数时, 电子态密度在 $E/t = 0$ 处为零。这个特征在后面我们讨论 Hofstadter 模型的磁化率的时候要用到。

图 (2.4) 给出了 $1/3$ 填充下对粒子数平均的基态能与 ϕ 的关系。有关基态能

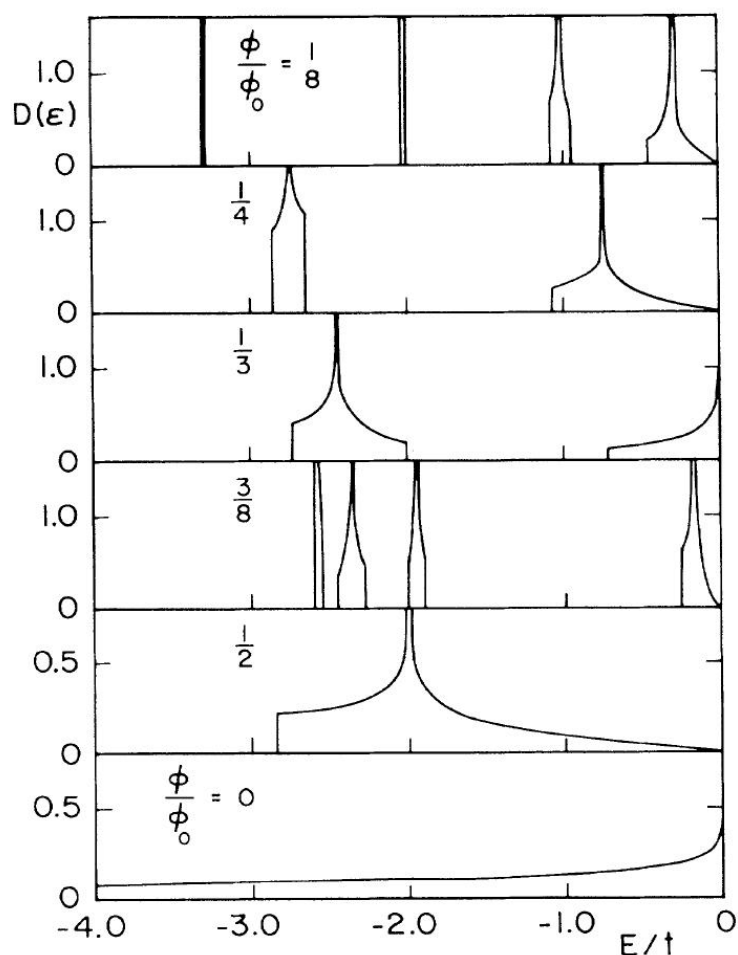


图 2.3: 电子态密度随 ϕ 的变化。取自文献[20]。

的一个重要结论是，在给定的粒子数（有时也称作填充数）下，系统的平均基态能随外磁场变化的曲线上存在很多极小点。

这些极小点的位置和对应的填充数满足关系： $\nu = M + N\phi/\phi_0$ ，其中 ν 是填充数， ϕ 是穿过一个晶格元胞的磁通，正比于磁场， $\phi_0 = hc/e$ 是一个磁通量子， M 和 N 是整数。其中，能量的最小点对应于 $\phi = \nu\phi_0$ ，也就是说，对应于每个电子分配一个磁通的状态。

D.J.Thouless等人[31]计算了朗道极限下Harper方程的输运性质。在朗道极限下，系统的能级仍然具有图（2.1）的结构，只是纵轴的标记由 ϕ/ϕ_0 换成 ϕ_0/ϕ 。D.J.Thouless等人得出在给定的磁场 ϕ/ϕ_0 下，能隙的序号 g 和该能隙贡

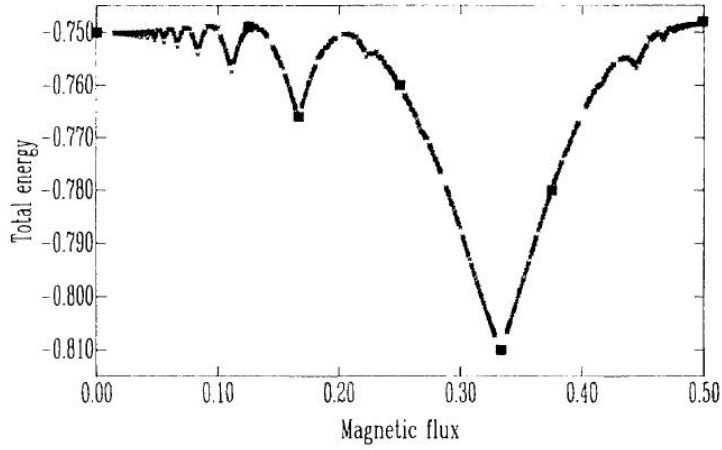


图 2.4: 对粒子数平均的基态能随 ϕ 的变化。取自文献[20]。

献的整数霍尔电导 σ (取 e^2/h 为霍尔电导的单位) 的关系可以写成一个丢番图方程:

$$g = wp + \sigma q, \quad |w| \leq \frac{q}{2}. \quad (2.52)$$

其中, g 取自然数, 是能级中能隙的序号, w 和 σ 取整数。在Hofstadter蝴蝶中, 各能隙所对应的 σ 值如图(2.5)所示。但是, 对于常规的晶体, 实验所要求磁场强度是很难达到的。常规晶体的晶格常数在几个埃的量级, 如果要使穿过一个晶格元胞的磁通量达到一个磁通量子的大小, 相应的磁场需要 10^5 个特斯拉的强度, 这在现有的实验条件下是无法实现的。但是, 超晶格可以实现大得多的晶格常数, 约为 10^2 个埃的量级, 这样, 磁场的强度就不再是问题。C. Albrecht等人[1]将超晶格产生的周期性外势场作用在二维自由电子气上, 通过测量霍尔电导, 已经观测到Hofstadter蝴蝶的结构。

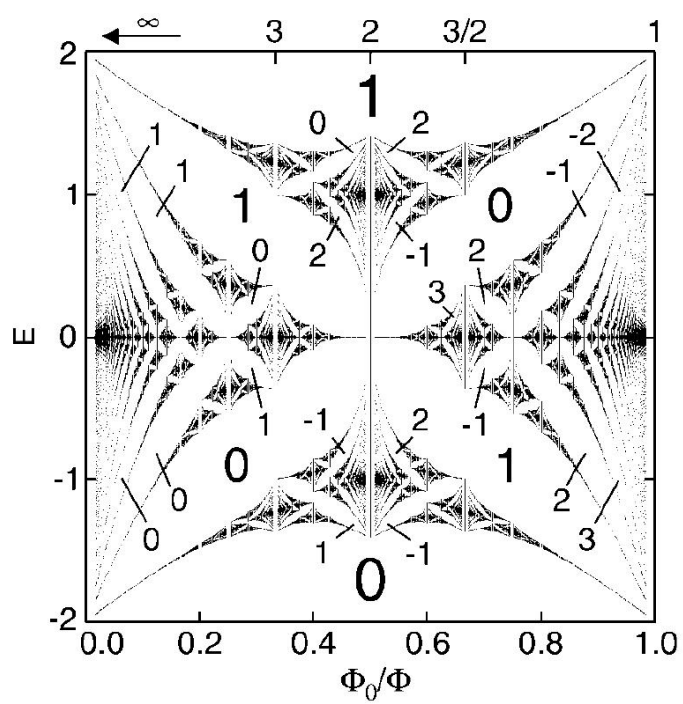


图 2.5: 能隙和霍尔电导。取自文献[1]。

第三章 Harper方程的转移矩阵方法

1944年, L. Onsager用转移矩阵方法得到了二维伊辛模型的严格解[22]。在第一章里, 我们看到, 利用Peierls替换, 我们得到二维布洛赫电子在均匀磁场中(Hofstadter模型)的能量本征方程, 即Harper方程。一个各项参数给定的Harper方程描述的是一个一维格点的问题, 也就是说, 我们把一个二维问题化成了多个分立的参数不同的一维问题。我们又知道, 对一维量子系统的热力学性质的求解可以等效为经典的二维问题。于是, 可以期望用转移矩阵的方法来求解Hofstadter模型。下面, 我们先用转移矩阵方法求解一维伊辛模型, 作为这种方法的一个简单示例。然后, 我们给出将转移矩阵方法用于Hofstadter模型的详细推导, 得到Hofstadter模型的自由能的表达式, 进而求得在不同温度和外磁场下系统的平均能量, 磁化强度, 霍尔电导等物理量。

3.1 转移矩阵方法求解一维伊辛模型

虽然严格求解二维伊辛模型是转移矩阵方法的成功范例, 但过程比较复杂。简单起见, 我们以一维伊辛模型为例, 说明转移矩阵方法的思想。

一维伊辛模型的哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mu B \sum_{i=1}^N s_i. \quad (3.1)$$

其中, 等式右边第一项只对最近邻求和。考虑周期性边界条件, $s_{N+1} = s_1$, 哈密顿量可改写成

$$H = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - \mu B \sum_{i=1}^N s_i. \quad (3.2)$$

于是, 系统的配分函数

$$\begin{aligned} Z(T, B) &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp \left\{ \beta \sum_{i=1}^N \left[J s_i s_{i+1} + \frac{1}{2} \mu B (s_i + s_{i+1}) \right] \right\} \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left\{ \beta \left[J s_i s_{i+1} + \frac{1}{2} \mu B (s_i + s_{i+1}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

引进转移矩阵 P ,

$$\langle s_i | P | s_{i+1} \rangle \equiv \exp \left\{ \beta \left[J s_i s_{i+1} + \frac{1}{2} \mu B (s_i + s_{i+1}) \right] \right\}, \quad (3.4)$$

因为 $s_i = \pm 1$, 于是,

$$\begin{aligned} P &= \begin{pmatrix} \langle 1 | P | 1 \rangle & \langle 1 | P | -1 \rangle \\ \langle -1 | P | 1 \rangle & \langle -1 | P | -1 \rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \exp(\beta(J + \mu B)) & \exp(J) \\ \exp(-J) & \exp(\beta(J - \mu B)) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

由于已经采用了周期性边界条件, 配分函数就可以写成转移矩阵的连乘再求迹。

$$\begin{aligned} Z(T, B) &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \langle s_1 | P | s_2 \rangle \langle s_2 | P | s_3 \rangle \cdots \langle s_N | P | s_1 \rangle \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \langle s_1 | P^N | s_1 \rangle \\ &= \text{Tr}(P^N) \\ &= \lambda_+^N + \lambda_-^N. \end{aligned} \quad (3.6)$$

其中, λ_{\pm} 是转移矩阵 P 的本征值, 可以从 (3.5) 中直接求出,

$$\lambda_{\pm} = \exp(\beta J) \left\{ \cosh(\beta \mu B) \pm [\cosh^2(\beta \mu B) - 2 \exp(-2\beta J) \sinh(2\beta J)]^{1/2} \right\}. \quad (3.7)$$

容易看出, $\lambda_+ > \lambda_-$, 所以, 在热力学极限下, 配分函数可写成

$$\begin{aligned} Z(T, B) &= \lim_{N \rightarrow \infty} (\lambda_+^N + \lambda_-^N) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lambda_+^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \lambda_+^N. \end{aligned} \quad (3.8)$$

所以, 系统单位体积的自由能为

$$\begin{aligned} f(T, B) &= -\frac{1}{N} kT \ln Z \\ &= -kT \ln \lambda_+. \end{aligned} \quad (3.9)$$

也就是说, 系统单位体积的自由能正比于这里的 2×2 的转移矩阵的较大的本征值的对数。

需要注意，我们在得出这个简单的解析解的时候，用到了系统平移对称性，即转移矩阵 P 不依赖于空间坐标。对于不具有平移对称性的系统，我们仍然可以定义上面的转移矩阵，这时转移矩阵依赖于空间坐标，配分函数也仍然可以写成转移矩阵的连乘的迹。虽然可能无法得到自由能的简单的解析表达式，但是可以看到，配分函数的计算量与系统的尺寸成线性关系。也就是说，通过采用转移矩阵方法，我们可以计算其他数值方法无法达到的系统尺寸。这是转移矩阵方法的一个明显优势。

3.2 Hofstadter模型的转移矩阵方法

在第一章里，我们已经看到，采用朗道规范，通过Peierls替换，我们将二维的Hofstadter模型化成分立的一维问题，每个一维问题用一个Harper方程描述。等效的二次量子化哈密顿量是

$$\begin{aligned} H &= \sum_k H_k \\ &= \sum_k \left[t \sum_j \left(c_{j+1,k}^\dagger c_{j,k} + c_{j,k}^\dagger c_{j+1,k} + 2 \cos(2\pi i\alpha - k) c_{j,k}^\dagger c_{j,k} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

其中， k 可以看成是标记一维问题的指标，它来自于二维系统中具有平移对称性的方向上的傅立叶变换， k 的取值范围是0到 2π ； t 是跃迁常数， α 是穿过格点元胞磁通量子的个数。由于三角函数的周期性，我们只需考虑 α 从0到1范围内的情况。

下面我们暂时只考虑 k 对应的一维问题，即仅考虑哈密顿量

$$H = t \sum_x \left(c_{x+1}^\dagger c_x + c_x^\dagger c_{x+1} + \left(2 \cos(2\pi x\phi - k) - \frac{\mu}{t} \right) c_x^\dagger c_x \right) \quad (3.11)$$

其中，我们省略了式(3.10)中的产生湮灭算符下标中的 k 指标，并且格点的指标用 x 表示。为了计算热力学性质，我们采用巨正则系统，在哈密顿量中写入了化学势项。

首先, 我们将哈密顿量 (3.11) 按照奇偶格点分成两部分,

$$H_k = H_{even} + H_{odd}, \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} H_{even} &= \sum_{x=even} t \left(c_x^\dagger c_{x+1} + c_{x+1}^\dagger c_x + \left(2 \cos(2\pi x \phi - k) - \frac{\mu}{t} \right) c_x^\dagger c_x \right) \\ &= \sum_i h(2i, 2i+1), \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} H_{odd} &= \sum_{x=odd} t \left(c_x^\dagger c_{x+1} + c_{x+1}^\dagger c_x + \left(2 \cos(2\pi x \phi - k) - \frac{\mu}{t} \right) c_x^\dagger c_x \right) \\ &= \sum_i h(2i-1, 2i). \end{aligned} \quad (3.14)$$

则 H_{even} (H_{odd}) 求和中的各项都是相互对易的。这个一维问题的配分函数是

$$Z = \text{Tr} [\exp(-\beta H_k)]. \quad (3.15)$$

利用Trotter-Suzuki分解, 配分函数可以写成

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}(e^{-\beta H_k/M})^M \\ &= Z_M + O(\epsilon^2), \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} Z_M &= \text{Tr} \left(e^{-\beta H_{even}/M} e^{-\beta H_{odd}/M} \right)^M \\ &= \text{Tr} \left(e^{-\epsilon H_{even}} e^{-\epsilon H_{odd}} \right)^M. \end{aligned} \quad (3.17)$$

其中, $\epsilon = \beta/M$ 。插入Fock空间的完全性关系,

$$\mathbf{1} = \sum_{\{n\}} |\{n\}\rangle \langle \{n\}|,$$

其中求和取遍实空间中的所有构型; $|\{n\}\rangle = |n_0\rangle \otimes |n_1\rangle \dots$, n 的下标表示实空间坐标。于是,

$$\begin{aligned} Z_M &= \sum_{\{n^0\}, \{n^1\}, \dots, \{n^{2M-1}\}} \langle \{n^0\} | e^{-\epsilon H_{even}} | \{n^1\} \rangle \langle \{n^1\} | e^{-\epsilon H_{odd}} | \{n^2\} \rangle \\ &\quad \times \langle \{n^2\} | e^{-\epsilon H_{even}} | \{n^3\} \rangle \langle \{n^3\} | e^{-\epsilon H_{odd}} | \{n^4\} \rangle \times \dots \\ &\quad \times \langle \{n^{2M-2}\} | e^{-\epsilon H_{even}} | \{n^{2M-1}\} \rangle \langle \{n^{2M-1}\} | e^{-\epsilon H_{odd}} | \{n^0\} \rangle. \end{aligned} \quad (3.18)$$

其中, $\{n^0\}, \{n^1\}, \dots$ 的上标是沿虚时间 (温度) 方向上的指标。因为 $H_{\text{even}} (H_{\text{odd}})$ 中的各项都是相互对易的, Z_M 可以继续展开,

$$\begin{aligned}
Z_M &= \sum_{i=0}^{M-1} \prod \langle \{n^{2i}\} | e^{-\epsilon H_{\text{even}}} | \{n^{2i+1}\} \rangle \langle \{n^{2i+1}\} | e^{-\epsilon H_{\text{odd}}} | \{n^{2i+2}\} \rangle \\
&= \sum_{i=0}^{M-1} \prod \langle \{n^{2i}\} | \prod_{j=0}^{N/2-1} e^{-\epsilon h(2j, 2j+1)} | \{n^{2i+1}\} \rangle \\
&\quad \times \langle \{n^{2i+1}\} | \prod_{j=0}^{N/2-1} e^{-\epsilon h(2j+1, 2j+2)} | \{n^{2i+2}\} \rangle \\
&= \sum_{i=0}^M \prod_{j=0}^{N/2-1} \langle n_{2j}^{2i} n_{2j+1}^{2i} | e^{-\epsilon h(2j, 2j+1)} | n_{2j}^{2i+1} n_{2j+1}^{2i+1} \rangle \\
&\quad \times \langle n_{2j+1}^{2i+1} n_{2j+2}^{2i+1} | e^{-\epsilon h(2j+1, 2j+2)} | n_{2j+1}^{2i+2} n_{2j+2}^{2i+2} \rangle. \tag{3.19}
\end{aligned}$$

从这往后, 我们用上标和字母 i 来标记虚时间轴上的坐标, 用下标和字母 j 来标记实空间的坐标。在虚时间方向上, 我们采用边界条件: $|\{n^{2M}\}\rangle = |\{n^0\}\rangle$ 。

下面引入依赖于实空间坐标的转移算符,

$$\langle n_{2j}^{2i}, 1 - n_{2j}^{2i+1} | t_{2j, 2j+1} | 1 - n_{2j+1}^{2i} n_{2j+1}^{2i+1} \rangle = \langle n_{2j}^{2i} n_{2j+1}^{2i} | e^{-\epsilon h(2j, 2j+1)} | n_{2j}^{2i+1} n_{2j+1}^{2i+1} \rangle, \tag{3.20}$$

$$\langle n_{2j+1}^{2i+1}, 1 - n_{2j+1}^{2i+2} | t_{2j+1, 2j+2} | 1 - n_{2j+2}^{2i+1} n_{2j+2}^{2i+2} \rangle = \langle n_{2j+1}^{2i+1} n_{2j+2}^{2i+1} | e^{-\epsilon h(2j+1, 2j+2)} | n_{2j+1}^{2i+2} n_{2j+2}^{2i+2} \rangle. \tag{3.21}$$

这样写保证了转移算符也是保持粒子数守恒的算符。交换式 (3.19) 中乘积的顺序, 得

$$\begin{aligned}
Z_M &= \sum_{j=0}^{N/2-1} \prod_{i=0}^{M-1} \langle n_{2j}^{2i}, 1 - n_{2j}^{2i+1} | t_{2j,2j+1} | 1 - n_{2j+1}^{2i}, n_{2j+1}^{2i+1} \rangle \\
&\quad \times \langle n_{2j+1}^{2i+1}, 1 - n_{2j+1}^{2i+2} | t_{2j+1,2j+2} | 1 - n_{2j+2}^{2i+1}, n_{2j+2}^{2i+2} \rangle \\
&= \sum_{j=0}^{N/2-1} \prod_{i=0}^{M-1} \left(\prod_{i=0}^{M-1} \langle n_{2j}^{2i}, 1 - n_{2j}^{2i+1} | t_{2j,2j+1} | 1 - n_{2j+1}^{2i}, n_{2j+1}^{2i+1} \rangle \right) \\
&\quad \times \left(\prod_{i=0}^{M-1} \langle n_{2j+1}^{2i+1}, 1 - n_{2j+1}^{2i+2} | t_{2j+1,2j+2} | 1 - n_{2j+2}^{2i+1}, n_{2j+2}^{2i+2} \rangle \right) \\
&= \sum_{j=0}^{N/2-1} \prod_{i=0}^{M-1} \left(\prod_{i=0}^{M-1} \langle \tilde{n}_{2j}^{2i}, \tilde{n}_{2j}^{2i+1} | t_{2j,2j+1} | \tilde{n}_{2j+1}^{2i}, \tilde{n}_{2j+1}^{2i+1} \rangle \right) \\
&\quad \times \left(\prod_{i=0}^{M-1} \langle \tilde{n}_{2j+1}^{2i+1}, \tilde{n}_{2j+1}^{2i+2} | t_{2j+1,2j+2} | \tilde{n}_{2j+2}^{2i+1}, \tilde{n}_{2j+2}^{2i+2} \rangle \right) \\
&= \sum_{j=0}^{N/2-1} \prod_{i=0}^{M-1} \langle \{ \tilde{n}_{2j} \} | T_{2j,2j+1} | \{ \tilde{n}_{2j+1} \} \rangle \langle \{ \tilde{n}_{2j+1} \} | T_{2j+1,2j+2} | \{ \tilde{n}_{2j+2} \} \rangle.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

我们已经改变了求和指标: $\tilde{n}_{2j}^{2i} = n_{2j}^{2i}$ and $\tilde{n}_{2j}^{2i+1} = 1 - n_{2j}^{2i+1}$ 。 $T_{2j,2j+1}$ 和 $T_{2j+1,2j+2}$ 叫做列转移算符, 它们的矩阵形式叫做列转移矩阵。于是, 配分函数可以写成

$$Z_M = \text{Tr} [T_{0,1} T_{1,2} T_{2,3} \dots T_{N-1,0}]. \tag{3.23}$$

从式 (3.22) 中可以看出, 列转移算符的矩阵元可以写成算符 $t_{2j,2j+1}$ 的矩阵元的乘积。我们把 $t_{2j,2j+1}$ 叫做局域转移算符, 它们的矩阵形式叫做局域转移矩阵。下面我们先处理局域转移矩阵。

3.3 局域转移矩阵

首先, 我们需要如下恒等式

$$\begin{aligned}
\exp(\alpha \sigma_z + \beta \sigma_x) &= \cosh(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}) + \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sinh(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}) \sigma_z \\
&\quad + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sinh(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}) \sigma_x.
\end{aligned} \tag{3.24}$$

这个恒等式的证明在附录B中给出。

下面我们想要给出局域转移算符的二次量子化形式。首先计算 $h(i, i+1)$ 矩阵元，

$$\begin{aligned}\langle 1, 1 | h(i, i+1) | 1, 1 \rangle &= 2t_{ik}, \\ \langle 0, 0 | h(i, i+1) | 0, 0 \rangle &= 0, \\ \langle 1, 0 | h(i, i+1) | 1, 0 \rangle &= 2t_{ik}, \\ \langle 1, 0 | h(i, i+1) | 0, 1 \rangle &= t, \\ \langle 0, 1 | h(i, i+1) | 1, 0 \rangle &= t, \\ \langle 0, 1 | h(i, i+1) | 0, 1 \rangle &= 0.\end{aligned}$$

其中，左矢和右矢沿用式(3.21)中等号右边的习惯，即左矢表示在虚时间轴上同一时刻的相邻两格点上的构型，右矢表示沿虚时间轴下一时刻的相邻两格点上的构型。 $t_{ik} = t(\cos(2\pi i\phi - k) - \mu/2)$ 在后面将一直使用。 $h(i, i+1)$ 保持粒子数守恒，所以在总粒子数不相等的态矢量间的矩阵元为0。

在总粒子数为1的子空间中， $h(i, i+1)$ 的矩阵形式为

$$\begin{aligned}h_{i,i+1} &= \begin{pmatrix} 2t_{ik} & t \\ t & 0 \end{pmatrix} = t_{ik} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + t_{ik} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= t_{ik} \cdot \mathbf{1} + t_{ik} \cdot \sigma_z + t \cdot \sigma_x.\end{aligned}\quad (3.25)$$

利用恒等式(B.1)，我们可以直接计算出 $h(i, i+1)$ 的指数算符的矩阵形式。为了使表达式简洁，我们先约定如下记号：

$$\begin{aligned}\alpha_{ik} &= -\epsilon t_{ik}, \\ \beta &= -\epsilon t, \\ \gamma_{ik} &= \sqrt{(\alpha_{ik})^2 + \beta^2}, \\ c_{ik} &= \cosh \gamma_{ik}, \\ s_{ik} &= \sinh \gamma_{ik}, \\ u_{ik} &= \frac{-\epsilon t}{\gamma_{ik}} s_{ik}, \\ w_{ik} &= \frac{-\epsilon t_{ik}}{\gamma_{ik}} s_{ik}, \\ v_{ik} &= \exp(\alpha_{ik}).\end{aligned}$$

于是, 由恒等式 (B.1) 可知, $h(i, i+1)$ 的指数算符在总粒子数为1的子空间中的矩阵形式为

$$\exp \left[-\epsilon \tilde{h}_{i,i+1} \right] = v_{ik} (c_{ik} + w_{ik} \sigma_z + u_{ik} \sigma_x).$$

在总粒子数为2和0的子空间中的非零矩阵元是

$$\begin{aligned} \langle 1, 1 | \exp [-\epsilon h(i, i+1)] | 1, 1 \rangle &= (v_{ik})^2, \\ \langle 0, 0 | \exp [-\epsilon h(i, i+1)] | 0, 0 \rangle &= 1; \end{aligned}$$

然后, 根据局域转移算符矩阵元的定义 (3.21), 可以得到局域转移算符的非零矩阵元为

$$\begin{aligned} \langle 1, 1 | t_{i,i+1} | 1, 1 \rangle &= \langle 1, 0 | \exp [-\epsilon h(i, i+1)] | 0, 1 \rangle = v_{ik} u_{ik}, \\ \langle 1, 0 | t_{i,i+1} | 1, 0 \rangle &= \langle 1, 0 | \exp [-\epsilon h(i, i+1)] | 1, 0 \rangle = v_{ik} (c_{ik} + w_{ik}), \\ \langle 0, 1 | t_{i,i+1} | 1, 0 \rangle &= \langle 0, 0 | \exp [-\epsilon h(i, i+1)] | 0, 0 \rangle = 1, \\ \langle 1, 0 | t_{i,i+1} | 0, 1 \rangle &= \langle 1, 1 | \exp [-\epsilon h(i, i+1)] | 1, 1 \rangle = (v_{ik})^2, \\ \langle 0, 1 | t_{i,i+1} | 0, 1 \rangle &= \langle 0, 1 | \exp [-\epsilon h(i, i+1)] | 0, 1 \rangle = v_{ik} (c_{ik} - w_{ik}), \\ \langle 0, 0 | t_{i,i+1} | 0, 0 \rangle &= \langle 0, 1 | \exp [-\epsilon h(i, i+1)] | 1, 0 \rangle = v_{ik} u_{ik}. \end{aligned}$$

于是我们可以写出局域转移算符的二次量子化形式,

$$\begin{aligned} \frac{t_{i,i+1}}{u_{ik} v_{ik}} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (c_{ik} + w_{ik})/u_{ik} & v_{ik}/u_{ik} & 0 \\ 0 & v_{ik}^{-1}/u_{ik} & (c_{ik} - w_{ik})/u_{ik} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= 1 + \left(\frac{c_{ik}}{u_{ik}} - 1 \right) (n_1 - n_2)^2 + \frac{w_{ik}}{u_{ik}} (n_1 - n_2) + \frac{v_{ik}^{-1}}{u_{ik}} c_2^\dagger c_1 + \frac{v_{ik}}{u_{ik}} c_1^\dagger c_2. \end{aligned} \quad (3.26)$$

可以证明, (3.26) 可以写成一个算符的指数算符的形式,

$$\frac{t_{i,i+1}}{u_{ik} v_{ik}} = \exp \left(x_{ik}^1 c_1^\dagger c_2 + x_{ik}^2 c_2^\dagger c_1 + x_{ik}^3 (n_1 - n_2) \right). \quad (3.27)$$

其中各项系数满足,

$$\begin{aligned} \cosh x_{ik} &= \frac{c_{ik}}{u_{ik}}, \\ \frac{\sinh x_{ik}}{x_{ik}} x_{ik}^1 &= \frac{v_{ik}}{u_{ik}}, \\ \frac{\sinh x_{ik}}{x_{ik}} x_{ik}^2 &= \frac{v_{ik}^{-1}}{u_{ik}}, \\ \frac{\sinh x_{ik}}{x_{ik}} x_{ik}^3 &= \frac{w_{ik}}{u_{ik}}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$(x_{ik})^2 = x_{ik}^1 x_{ik}^2 + (x_{ik}^3)^2.$$

我们在附录C中给出详细的证明。

3.4 列转移矩阵

下面我们推导列转移矩阵。

首先考虑第偶数个列转移矩阵, 它的矩阵元可以写成局域转移矩阵的矩阵元的连乘,

$$\begin{aligned} \prod_{i=0}^{M-1} \langle n_{2j}^{2i} n_{2j+1}^{2i} | e^{-\epsilon h(2j, 2j+1)} | n_{2j}^{2i+1} n_{2j+1}^{2i+1} \rangle &= \prod_{i=0}^{M-1} \langle n_{2j}^{2i}, 1 - n_{2j}^{2i+1} | t_{2j, 2j+1} | 1 - n_{2j+1}^{2i}, n_{2j+1}^{2i+1} \rangle \\ &= \prod_{i=0}^{M-1} \langle \tilde{n}_{2j}^{2i}, \tilde{n}_{2j}^{2i+1} | t_{2j, 2j+1} | \tilde{n}_{2j+1}^{2i}, \tilde{n}_{2j+1}^{2i+1} \rangle. \end{aligned}$$

利用式 (3.27), 我们可以写出列转移矩阵的算符形式,

$$\begin{aligned} T_{2i, 2i+1} &= t_{2i, 2i+1}^{0,1} t_{2i, 2i+1}^{2,3} t_{2i, 2i+1}^{4,6} \cdots t_{2i, 2i+1}^{2M-2, 2M-1} \\ &= (u_{2i, k} v_{2i, k})^M \exp \left[\sum_{l=0}^{M-1} \begin{pmatrix} c_{2l}^\dagger & c_{2l+1}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2i, k}^3 & x_{2i, k}^1 \\ x_{2i, k}^2 & -x_{2i, k}^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{2l} \\ c_{2l+1} \end{pmatrix} \right]. \end{aligned}$$

其中, t 算符的下标表示实空间坐标, 上标表示虚时间坐标。指数中产生算符和湮灭算符的下标 $2l$ 和 $2l+1$ 是虚时间坐标。由式 (3.28) 可知, 产生湮灭算符的系数矩阵

$$\begin{pmatrix} x_{2i, k}^3 & x_{2i, k}^1 \\ x_{2i, k}^2 & -x_{2i, k}^3 \end{pmatrix}$$

不依赖于虚时间坐标，即不依赖于 l 。我们可以沿虚时间方向作傅立叶变换，

$$\begin{aligned} C_q^\dagger &= \begin{pmatrix} c_{q,1}^\dagger \\ c_{q,2}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{l=0}^{M-1} \exp(iqR_l) \begin{pmatrix} c_{2l}^\dagger \\ c_{2l+1}^\dagger \end{pmatrix}, \\ C_q &= \begin{pmatrix} c_{q,1} \\ c_{q,2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{l=0}^{M-1} \exp(-iqR_l) \begin{pmatrix} c_{2l} \\ c_{2l+1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

于是，列转移矩阵可以写成，

$$\begin{aligned} T_{2i,2i+1} &= (u_{2i,k} v_{2i,k})^M \exp \left[\sum_q C_q^\dagger \begin{pmatrix} x_{2i,k}^3 & x_{2i,k}^1 \\ x_{2i,k}^2 & -x_{2i,k}^3 \end{pmatrix} C_q \right] \\ &= (u_{2i,k} v_{2i,k})^M \prod_q \otimes \exp \left[C_q^\dagger \begin{pmatrix} x_{2i,k}^3 & x_{2i,k}^1 \\ x_{2i,k}^2 & -x_{2i,k}^3 \end{pmatrix} C_q \right]. \end{aligned}$$

其中， \otimes 表示由 q 标记的不同Fock空间的直乘。可以看到，傅立叶变换对系数矩阵没有影响，所以，在 q 标记的Fock空间中，算符

$$C_q^\dagger \begin{pmatrix} x_{2i,k}^3 & x_{2i,k}^1 \\ x_{2i,k}^2 & -x_{2i,k}^3 \end{pmatrix} C_q \quad (3.29)$$

的矩阵形式仍然是

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (c_{2i,k} + w_{2i,k})/u_{2i,k} & v_{2i,k}/u_{2i,k} & 0 \\ 0 & v_{2i,k}^{-1}/u_{2i,k} & (c_{2i,k} - w_{2i,k})/u_{2i,k} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

下面我们考虑第奇数个列转移矩阵。首先定义平移算符

$$P_T c_l P_T^{-1} = c_{l+1}. \quad (3.31)$$

平移算符对系数矩阵不产生任何作用。于是,

$$\begin{aligned}
T_{2i-1,2i} &= T_{2i-1,2i}^{1,2} T_{2i-1,2i}^{3,4} T_{2i-1,2i}^{5,6} \cdots T_{2i-1,2i}^{2M-1,0} \\
&= (u_{2i-1,k} v_{2i-1,k})^M \\
&\quad \times \exp \left[\sum_{l=1}^M \begin{pmatrix} c_{2l-1}^\dagger & c_{2l}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2i-1,k}^3 & x_{2i-1,k}^1 \\ x_{2i-1,k}^2 & -x_{2i-1,k}^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{2l-1} \\ c_{2l} \end{pmatrix} \right] \\
&= (u_{2i-1,k} v_{2i-1,k})^M \\
&\quad \times \exp \left[\sum_{l=0}^{M-1} P_T \begin{pmatrix} c_{2l}^\dagger & c_{2l+1}^\dagger \end{pmatrix} P_T^{-1} \begin{pmatrix} x_{2i-1,k}^3 & x_{2i-1,k}^1 \\ x_{2i-1,k}^2 & -x_{2i-1,k}^3 \end{pmatrix} P_T \begin{pmatrix} c_{2l} \\ c_{2l+1} \end{pmatrix} P_T^{-1} \right] \\
&= (u_{2i-1,k} v_{2i-1,k})^M \\
&\quad \times \exp \left[P_T \sum_q \begin{pmatrix} c_{q,1}^\dagger & c_{q,2}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2i-1,k}^3 & x_{2i-1,k}^1 \\ x_{2i-1,k}^2 & -x_{2i-1,k}^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{q,1} \\ c_{q,2} \end{pmatrix} P_T^{-1} \right] \\
&= (u_{2i-1,k} v_{2i-1,k})^M \\
&\quad \times \exp \left[\sum_q P_T \begin{pmatrix} c_{q,1}^\dagger & c_{q,2}^\dagger \end{pmatrix} P_T^{-1} \begin{pmatrix} x_{2i-1,k}^3 & x_{2i-1,k}^1 \\ x_{2i-1,k}^2 & -x_{2i-1,k}^3 \end{pmatrix} P_T \begin{pmatrix} c_{q,1} \\ c_{q,2} \end{pmatrix} P_T^{-1} \right].
\end{aligned} \tag{3.32}$$

平移算符对算符 $c_{q,1}^\dagger$ 和 $c_{q,2}^\dagger$ 的作用是

$$\begin{aligned}
P_T \begin{pmatrix} c_{q,1}^\dagger \\ c_{q,2}^\dagger \end{pmatrix} P_T^{-1} &= \sum_{l=0}^{M-1} \frac{1}{\sqrt{M}} \exp(iqR_l) P_T \begin{pmatrix} c_{2l}^\dagger \\ c_{2l+1}^\dagger \end{pmatrix} P_T^{-1} \\
&= \sum_{l=0}^{M-1} \frac{1}{\sqrt{M}} \exp(iqR_l) \begin{pmatrix} c_{2l+1}^\dagger \\ c_{2l+2}^\dagger \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \sum_{l=0}^{M-1} 1/\sqrt{M} \exp(iqR_l) c_{2l+1}^\dagger \\ \sum_{l=0}^{M-1} 1/\sqrt{M} \exp(-iq) \exp(iqR_{l+1}) c_{2(l+1)}^\dagger \end{pmatrix} \\
&= \sum_{l=0}^{M-1} \frac{1}{\sqrt{M}} \exp(iqR_l) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \exp(-iq) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{2l}^\dagger \\ c_{2l+1}^\dagger \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \exp(-iq) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{q,1}^\dagger \\ c_{q,2}^\dagger \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

代入到 (3.32) 中, 得

$$\begin{aligned}
T_{2i-1,2i} &= (u_{2i-1,k} v_{2i-1,k})^M \\
&\exp \left[\sum_q \begin{pmatrix} c_{q,1}^\dagger & c_{q,2}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \exp(-iq) \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2i-1,k}^3 & x_{2i-1,k}^1 \\ x_{2i-1,k}^2 & -x_{2i-1,k}^3 \end{pmatrix} \right. \\
&\quad \left. \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \exp(iq) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{q,1} \\ c_{q,2} \end{pmatrix} \right] \\
&= (u_{2i-1,k} v_{2i-1,k})^M \\
&\quad \times \exp \left[\sum_q \begin{pmatrix} c_{q,1}^\dagger & c_{q,2}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -x_{2i-1,k}^3 & e^{-iq} x_{2i-1,k}^2 \\ e^{iq} x_{2i-1,k}^1 & x_{2i-1,k}^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{q,1} \\ c_{q,2} \end{pmatrix} \right] \\
&= (u_{2i-1,k} v_{2i-1,k})^M \\
&\quad \times \prod_q \otimes \exp \left[\begin{pmatrix} c_{q,1}^\dagger & c_{q,2}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2i-1,k}^{3'} & x_{2i-1,k}^{1'} \\ x_{2i-1,k}^{2'} & -x_{2i-1,k}^{3'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{q,1} \\ c_{q,2} \end{pmatrix} \right].
\end{aligned}$$

我们已经重写了系数矩阵, 使它回到式 (3.26) 的形式。根据式 (3.28), 可以写出

$$\exp \left[\begin{pmatrix} c_{q,1}^\dagger & c_{q,2}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2i-1,k}^{3'} & x_{2i-1,k}^{1'} \\ x_{2i-1,k}^{2'} & -x_{2i-1,k}^{3'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{q,1} \\ c_{q,2} \end{pmatrix} \right]$$

的矩阵形式:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (c_{2i-1,k} - w_{2i-1,k})/u_{2i-1,k} & \exp(-iq) v_{2i-1,k}^{-1}/u_{2i-1,k} & 0 \\ 0 & \exp(iq) v_{2i-1,k}/u_{2i-1,k} & (c_{2i-1,k} + w_{2i-1,k})/u_{2i,k} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

3.5 配分函数

下面我们可以写出一维系统的配分函数,并且恢复标记一维问题的指标 k 。

$$\begin{aligned}
 Z_k &= \text{Tr} [T_{0,1} T_{1,2} T_{3,4} \dots T_{N-1,0}] \\
 &= \text{Tr} \left[\prod_{i=0}^{N/2-1} T_{2i,2i+1} T_{2i+1,2i+2} \right] \\
 &= \text{Tr} \left\{ \prod_{i=0}^{N/2-1} (u_{2i,k} v_{2i,k})^M \prod_q \otimes \exp \left[C_q^\dagger \begin{pmatrix} x_{2i,k}^3 & x_{2i,k}^1 \\ x_{2i,k}^2 & -x_{2i,k}^3 \end{pmatrix} C_q \right] \right. \\
 &\quad \left. (u_{2i+1,k} v_{2i+1,k})^M \prod_q \otimes \exp \left[C_q^\dagger \begin{pmatrix} x_{2i+1,k}^{3'} & x_{2i+1,k}^{1'} \\ x_{2i+1,k}^{2'} & -x_{2i+1,k}^{3'} \end{pmatrix} C_q \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

又因为,矩阵的直乘的迹等于矩阵的迹的乘积,所以

$$\begin{aligned}
 Z_k &= \prod_{i=0}^{N/2-1} (u_{2i,k} v_{2i,k})^M (u_{2i+1,k} v_{2i+1,k})^M \\
 &\quad \times \prod_q \text{Tr} \left\{ \prod_{i=0}^{N/2-1} \exp \left[C_q^\dagger \begin{pmatrix} x_{2i,k}^3 & x_{2i,k}^1 \\ x_{2i,k}^2 & -x_{2i,k}^3 \end{pmatrix} C_q \right] \right. \\
 &\quad \left. \times \exp \left[C_q^\dagger \begin{pmatrix} x_{2i+1,k}^{3'} & x_{2i+1,k}^{1'} \\ x_{2i+1,k}^{2'} & -x_{2i+1,k}^{3'} \end{pmatrix} C_q \right] \right\}
 \end{aligned}$$

代入指数算符的矩阵形式 (3.30) 和 (3.33), 有

$$Z_k = \prod_{i=0}^{N/2-1} (u_{2i,k} v_{2i,k})^M (u_{2i+1,k} v_{2i+1,k})^M \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned}
 &\times \prod_q \left\{ 2 + \text{Tr} \left[\prod_{i=0}^{N/2-1} \begin{pmatrix} (c_{2i,k} + w_{2i,k})/u_{2i,k} & v_{2i,k}/u_{2i,k} \\ v_{2i,k}^{-1}/u_{2i,k} & (c_{2i,k} - w_{2i,k})/u_{2i,k} \end{pmatrix} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \times \begin{pmatrix} (c_{2i+1,k} - w_{2i+1,k})/u_{2i+1,k} & \exp(-iq) v_{2i+1,k}^{-1}/u_{2i+1,k} \\ \exp(iq) v_{2i+1,k}/u_{2i+1,k} & (c_{2i+1,k} + w_{2i+1,k})/u_{2i+1,k} \end{pmatrix} \right] \right\}. \quad (3.35)
 \end{aligned}$$

可以看到,在计算配分函数 Z_k 时,一维链的延伸通过一个 2×2 的矩阵乘法就能完成,也就是说,在计算热力学性质的时候,计算复杂度和系统的尺寸几

乎是简单的线性关系。我们知道，通常系统的尺寸的增加会使得系统的自由度数目以指数的形式增加，比如对于 N 个格点组成的自旋 S 的系统，希尔伯特空间的基矢个数是 $(2S + 1)^N$ 。虽然通过一些对称性的考虑，能够大大缩减数值模拟中的基矢个数，但是所能计算的系统的尺寸还是受到很大的限制。这里，通过转移矩阵方法，我们在很大程度上脱离了这种限制，能够模拟 10^5 量级的格点模型，并有效地消除了有限体积效应。当然，可以看到，这种计算复杂度和系统尺寸的线性关系得以实现的关键，是式(3.26)中的变换，即我们将一个二次型算符化成一个二次型算符的指数形式。这种变换并不是对任意的格点模型都适用的，甚至不是对任意的一维格点模型都适用的。但是，在处理Hofstadter模型时，转移矩阵的确是一种有效的方法。

3.6 热力学量

下面我们给出Hofstadter模型的热力学函数的表达式。

3.6.1 自由能

用 f 表示单位体积的自由能， L 表示系统的尺寸， $L = L_x \times L_y$ ， L_y 表示在具有晶格平移对称性的方向上的系统尺寸， L_x 表示一维问题的尺寸，则

$$\begin{aligned} f &= -\frac{1}{L\beta} \ln Z \\ &= -\frac{1}{L_y\beta} \sum_k \frac{1}{L_x} \ln Z_k \\ &= -\frac{1}{L\beta} \sum_k \ln \{Tr_k [\exp(-\beta(H_k))]\}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

因为我们考虑巨正则系综，所以在哈密顿量 H_k 中已经考虑了化学势的贡献。

$$H_k = t \sum_x \left(c_{k,x+1}^\dagger c_{k,x} + c_{k,x}^\dagger c_{k,x+1} + \left(2 \cos(2\pi x\phi - k) - \frac{\mu}{t} \right) c_{k,x}^\dagger c_{k,x} \right) \quad (3.37)$$

3.6.2 平均粒子数（填充数）

这里的平均粒子数指的是总粒子数对系统体积的平均，也就是粒子数密度。在巨正则系综中，平均粒子数可以通过对化学势求偏导得到

$$n = - \left(\frac{\partial f}{\partial \mu} \right)_{H,T}. \quad (3.38)$$

等号右边的下标表示偏微分是在保持外磁场 H 和温度 T 不变的条件下作的。

3.6.3 平均能量

这里的平均能量指的是总能量对粒子数的平均。直接对配分函数的对数作 β 的偏导（保持磁场 H 和化学势 μ 不变），

$$\begin{aligned}\langle E \rangle - \mu \langle N \rangle &= \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right)_{H, \mu} \\ &= \left(\frac{\partial (L\beta f)}{\partial \beta} \right)_{H, \mu}.\end{aligned}$$

其中， $\langle E \rangle$ 是总能量， $\langle N \rangle$ 是总粒子数。于是，

$$\langle e \rangle - \mu \langle n \rangle = \left(\frac{\partial (\beta f)}{\partial \beta} \right)_{H, \mu}. \quad (3.39)$$

其中， $\langle e \rangle$ 和 $\langle n \rangle$ 分别是能量密度和粒子数密度。于是，平均能量 $E_{average}$ 的表达式为

$$E_{average} = \frac{\langle e \rangle}{\langle n \rangle} = \left(\frac{\partial (\beta f)}{\partial \beta} \right)_{H, \mu} + \mu. \quad (3.40)$$

3.6.4 磁化强度

单位体积的磁化强度的定义是

$$m = - \left(\frac{\partial f}{\partial H} \right)_{\mu, T}. \quad (3.41)$$

在均匀外磁场下，磁场强度正比于通过元胞的磁通量 $\phi = Ha^2/\phi_0$ （取磁通量子为单位）。在后面的数值计算中，我们实际计算的是下面的物理量

$$m' = \frac{m\phi_0}{a^2} = - \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right)_{\mu, T}. \quad (3.42)$$

3.6.5 霍尔电导

P. Streda在1982年给出了计算二维系统中霍尔电导的一个公式[30]：

$$\frac{1}{ec}\sigma = \frac{1}{\phi_0} \left(\frac{\partial n}{\partial \phi} \right)_{\mu, T}. \quad (3.43)$$

其中, σ 是系统的霍尔电导, 若以 e^2/h 为电导单位, 则

$$\sigma = \frac{e^2}{h} l, \quad l \text{ 是整数。} \quad (3.44)$$

利用麦克斯韦关系, 有

$$-\left(\frac{\partial m'}{\partial \mu}\right)_{\phi, T} = \frac{1}{ec} \phi_0 \sigma = l. \quad (3.45)$$

第四章 Hofstadter模型的热力学性质

我们用转移矩阵方法计算了Hofstadter模型的热力学性质。用上一章里给出的公式，我们计算了Hofstadter模型的平均自由能 f 在不同的热力学参量（温度 T ，化学势 μ ，磁场 H ）下的数值，通过对自由能求偏导得到热力学量。这一章首先讨论了计算中的有限体积效应；然后，给出平均能量，并与已有的结论作比较，验证了转移矩阵方法的有效性；接着计算了Hofstadter模型的磁化强度和磁化率，还有霍尔电导。

开始之前，先对数值计算中参数的选取和相关问题作必要的讨论。

我们计算的是如下的哈密顿量的热力学性质

$$\begin{aligned} H &= \sum_k H_k \\ &= \sum_k \left[t \sum_j \left(c_{j+1,k}^\dagger c_{j,k} + c_{j,k}^\dagger c_{j+1,k} + 2 \cos(2\pi i\phi - k) c_{j,k}^\dagger c_{j,k} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.1)$$

计算中涉及到下面几个参数：

1. 跃迁常数 t ，我们把它取为1，作为能量单位。
2. k 。前面已经提到，取朗道规范以后，二维Hofstadter模型在一个方向上具有晶格平移对称性（记为 y 方向），通过傅立叶变换，我们将Hofstadter模型化为分立的一维问题（沿 x 方向）。 k 是 y 方向的准动量，可以用来标记一维问题。 k 的取值范围是0到 2π 内的一系列分立值。
3. 正整数 M ，这是进行Trotter-Suzuki分解时，对有限温度 β 作的划分，并引入参数 $\epsilon = \beta/M$ 。 ϵ 给出了Trotter-Suzuki分解的误差：

$$Z = Z_M + O(\epsilon^2). \quad (4.2)$$

我们把误差项写成 $O(\epsilon^2) \sim CZ_M \epsilon^2$ ， C 是误差项前因子，并用泰勒展开式 $\ln(1+x) \simeq x$ ，就可以估计自由能的计算误差，

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{\beta} \ln Z \\ &\simeq F_M - \frac{1}{\beta} \epsilon^2. \end{aligned}$$

因此，如果要在不同热力学参量下的计算结果具有相同的精度，就要使 ϵ 的量级保持不变。在后面的计算中，我们取 $\epsilon = 0.02$ 或 0.05 。

4. 热力学参量：磁场 H ，温度 T ，化学势 μ 。这些是变量。在数值计算中，我们直接使用使用的是

$$\phi = \frac{Ha^2}{\phi_0}, \quad a \text{ 是晶格常数, } \phi_0 = \frac{hc}{e} \text{ 是磁通量子。}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad k_B \text{ 是玻尔兹曼常数。}$$

化学势 μ 不另作处理。其中， ϕ 的取值范围是从0到1。

我们是通过自由能函数求偏导来计算平均能量，霍尔电导，磁化强度等热力学性质的，但是自由能函数的光滑性并不是显而易见的被保证的。实际上，Hofstadter蝴蝶的分形结构使得零温下系统的自由能函数的光滑性几乎被完全破坏了，比如说，在给定的粒子数下，自由能函数随变量 ϕ 是一个处处连续但处处不可导的函数（我们并不能给出严格的数学证明，但从Hofstadter蝴蝶的结构来看这是一种很合理的情况）。为了能对自由能函数求偏导，我们认为，有限温度能够抹平零温下自由能函数的不光滑性。另一方面，Hofstadter模型的能谱的分形结构使得能谱没有特征的能量尺度，这给数值计算中温度的选取带来一定复杂性。但可以看到，在某一温度下计算的热力学量反映的是与该温度能量尺度相近的能隙的性质。

下面，我们给出计算结果并作讨论。

4.1 有限尺寸效应

我们分别讨论沿 x 和 y 方向上的有限尺寸效应。先讨论 y 方向上的有限尺寸效应。

4.1.1 y 方向的有限尺寸效应

当Hofstadter模型化成式(4.1)的形式后，可以推论， y 方向上的有限尺寸效应对计算平均自由能的影响是很小的。当 ϕ 是有理数时， k 标记的一维哈密顿量描述的是一维超晶格；当 ϕ 是无理数时，一维哈密顿量描述的是一维准晶格。无论是哪一种情况，当磁场 ϕ 取定之后，不同 k 所标记的一维哈密顿量的对角项都

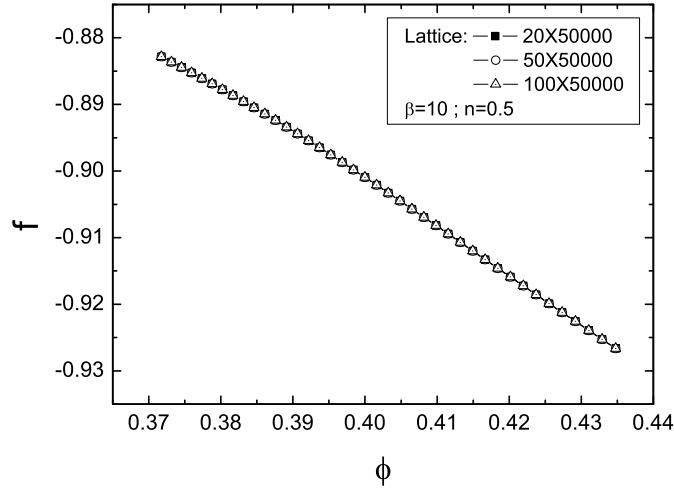


图 4.1: y 方向的有限尺寸效应对自由能的影响。在图中选取的磁场范围内,不同尺寸下的自由能曲线基本是重合的。

有相同的周期, k 只是提供了一个初始相位,在热力学极限下,这个初始相位对系统的热力学性质不应产生显著的影响。也就是说,在式(4.1)中,一维哈密顿量对配分函数的贡献是等权重的。因此, y 方向上的有限尺寸效应是很小的。下面我们给出计算结果进行论证。

图(4.1)和(4.2)给出的是 $\phi = 10/23$ 附近的自由能和磁化强度。图中的方框给出了其他参数的值。图例后的数字表示格点的尺寸,第一个数字表示沿 y 方向的尺寸,第二个数字表示沿 x 方向的尺寸; β 表示温度,在这里 $\beta = 10$; n 表示平均占据数,在这里 $n = 0.5$,即半满情况。若不特殊说明,在后面的插图中,我们都按照这些规则给出相应的参数。

在图(4.1)和(4.2)中,沿 x 方向的格点数取为50000,这个尺寸已经消除了 x 方向上的有限尺寸效应。从图(4.1)和(4.2)不难看出, y 方向的尺寸对计算结果的影响很小,自由能的曲线基本是重合的,而磁化强度也仅在 $\phi = 0.4$ 附近稍有差别。

下面再给出 $\phi = 1/5$ 附近的计算结果。

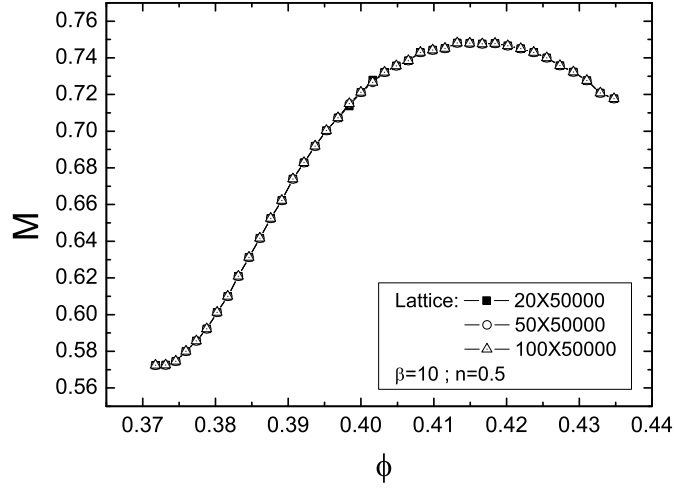


图 4.2: y 方向的有限尺寸效应对磁化强度的影响。图中 ϕ 的范围与图 (4.1) 中的一致。

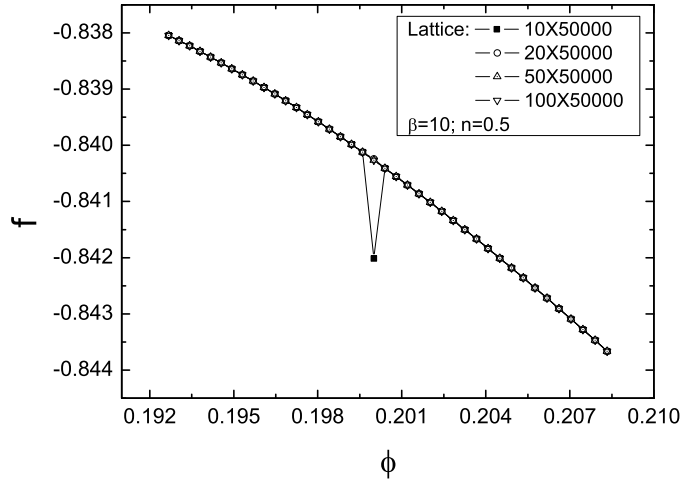


图 4.3: $\phi = 1/5$ 附近平均自由能受 y 方向有限尺寸效应的影响。在 $\phi = 1/5$ 处, 有限尺寸效应会给平均自由能带来显著的误差, 但是随系统 y 方向尺寸的增大, 这个误差很快被消除。

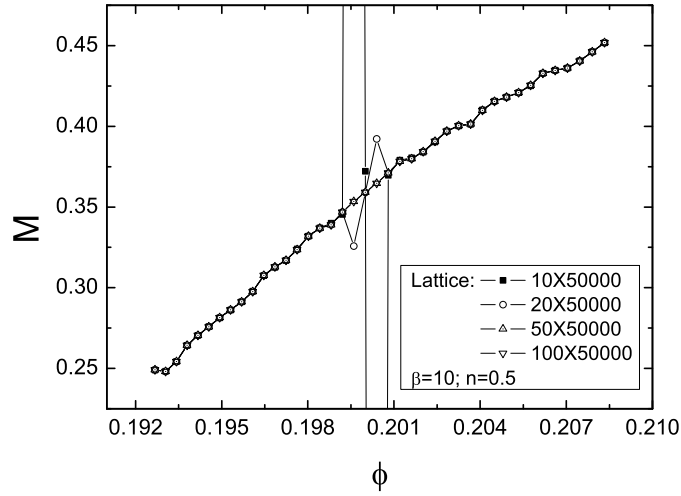


图 4.4: $\phi = 1/5$ 附近磁化强度受 y 方向有限尺寸效应的影响。除了 $\phi = 1/5$ 处, 其他各点的磁化强度数值受尺寸的影响极小。

可以看到, 在 $\phi = 1/5$ 处, y 方向的有限尺寸效应比较明显, 在自由能和磁化强度的计算中都带来了明显的误差。但也可以看到, 这个误差随着 y 方向尺寸的增大很快被消除。实际上, y 方向的有限尺寸效应只是破坏了 $\phi = 1/5$ 这一点的自由能函数的解析性。如果将图(4.3)中的点取得更密, 可以发现, 有限尺寸效应并没有在 $\phi = 1/5$ 附近产生一个尖峰, 而是仅在 $\phi = 1/5$ 这一点带来误差。我们推测, 这种有限尺寸效应与出现在某些特殊的 q 和 k 的取值, 虽然这些特殊的 q 和 k 的关系并不容易找到。数值计算关心的是如何判断 y 方向上的有限尺寸效应是否被消除。通过上面的计算结果, 我们认为, 当类似 $\phi = 1/5$ 处的这种单点上的不解析性不再出现时, y 方向上的有限尺寸效应就已经被消除。

4.1.2 x 方向的有限尺寸效应

下面我们讨论沿 x 方向的有限尺寸效应。

从图(4.5)中可以看出, x 方向的有限尺寸效应和 y 方向的明显不同。热力学函数的解析性并没有被破坏, 但是显示出更多的能隙的特征: 对于 10×500 的格点, 磁化强度随 ϕ 的曲线显示出强烈的振荡, 我们将这些振荡归结为有限尺寸带来的能隙, 并不能反映Hofstadter模型本身的性质。随着 x 方向尺寸的增加,

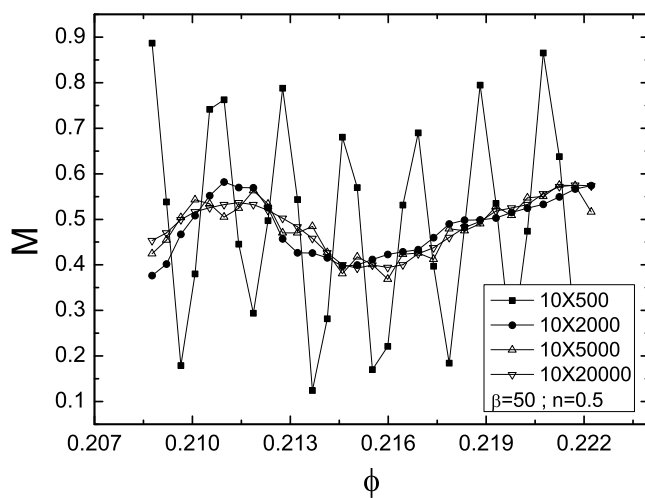


图 4.5: x 方向的有限尺寸效应。当 x 方向的尺寸较小时, 磁化强度有明显的振荡特征; 随着尺寸增大, 振荡减弱, 磁化强度有收敛的趋势。

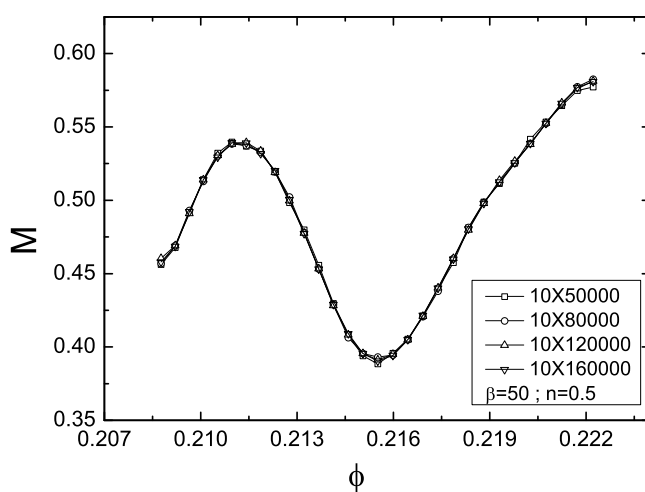


图 4.6: 磁化强度的收敛。当 x 方向的尺寸大于 80000 时, 磁化强度的数值基本不再变化。

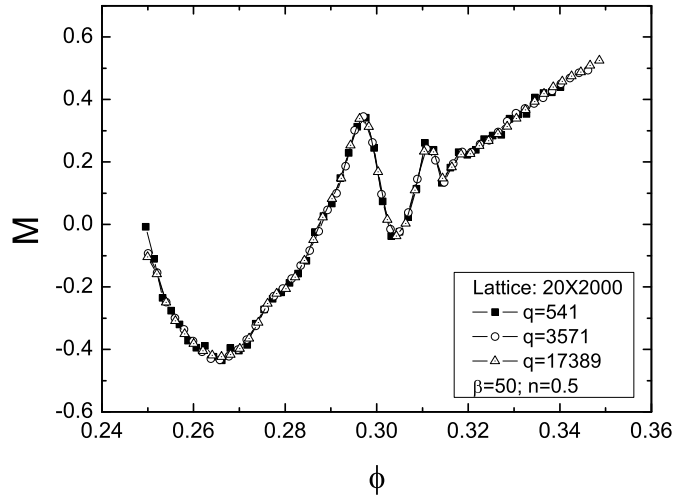


图 4.7: 格点尺寸为 50×2000 时, q 为质数541, 3571和17389时磁化强度的计算结果。

这些振荡的强度和频率都迅速降低。当格点尺寸增加到 10×5000 和更大时, 可以明显看到磁化强度曲线的收敛。图(4.6)中给出的是对 10×50000 和更大的尺寸的格点的计算结果, 磁化强度的收敛是显而易见的。

在上面给出的结果中, x 方向上格点的尺寸大概达到50000的量级时热力学函数就已经收敛, 或者说 x 方向上的有限尺寸效应已经被消除。这个收敛尺寸主要由参数 $\beta = 1/(k_B T)$ 决定的。尺寸有限的系统总是有有限大能隙 e_g , 尺寸越大, 有限尺寸效应带来 e_g 就越小。当 $e_g \ll k_B T$ 时, 有限尺寸对系统热力学性质的计算就不会产生显著的影响。

下面从另一个方面讨论有限尺寸效应。在计算中, ϕ 的取值都是有理数 p/q 的形式, 所以实际上处理的都是超晶格问题。于是, 一个自然的问题是收敛尺寸是否依赖于 q 。比如说, $q \sim 10$ 时, 50000个格点包含了 10^3 个超晶格; 当 $q \sim 10^4$ 时, 50000个格点只包含几个超晶格, 于是, 自然的推测是在这两种情况下有限尺寸效应会很不一样, 尽管 $q \sim 10$ 和 $q \sim 10^4$ 可能对应了几乎相等的 ϕ 。下面的结果表明, 收敛尺寸不依赖于 q 。

图(4.7)和(4.8)中方框里的图例后面表面了相应曲线上的点对应的 q 值。我们计算了 q 等于541, 3571和17389的情况。541, 3571和17389都是质数。可以

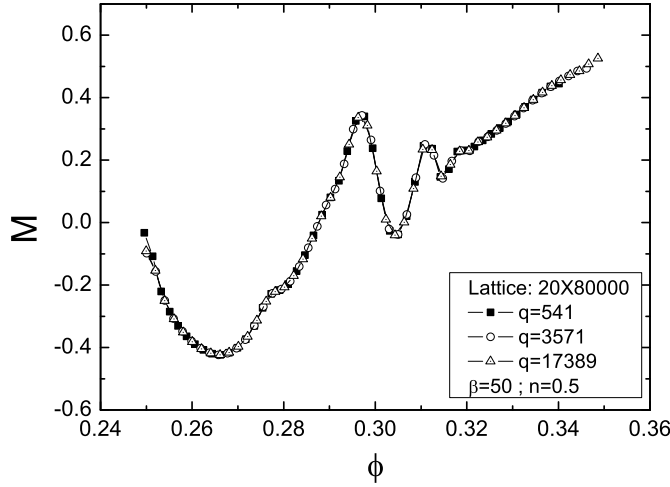


图 4.8: 格点尺寸为 50×80000 时, q 为质数541, 3571和17389时磁化强度的数值计算结果。可以看出, 磁化强度的值和 q 基本没有关系。当 $q = 17389$ 时, x 方向的80000个格点只包含了不到5个周期为17389的超晶格, 但这并没有产生显著的有限尺寸效应。

看到, 在相同的尺寸下, 不同的 q 下得到的磁化强度并没有明显的差别。

4.2 平均能量

前面提到过, 文献[9], [20] 和[8]中计算了Hofstadter模型在给定占据数下的平均基态能随 ϕ 变化的曲线, 并且当 ϕ 等于平均占据数时平均基态能有最小值。在有限温下, 对自由能求偏导可以得到系统的平均能量。下面我们给出Hofstadter模型在半满下平均能量的计算结果, 并说明, 当温度足够低时, 平均能量的行为与上述文献中的结论是一致的。

图 (4.9) 是平均能量的计算结果。从图中可以看到, 平均能量的最小值出现在 $\phi = 1/2$ 处, 并且与第二章中的图 (1.3) 类似, 曲线还包含一系列的极小值点 (用K 标记), 这些极小点满足

$$\nu = M + N\phi \quad M, N \in \mathbb{Z} \quad (4.3)$$

表 (4.1) 中给出各个极小点处的 ϕ 值和相应的 M, N 的值。

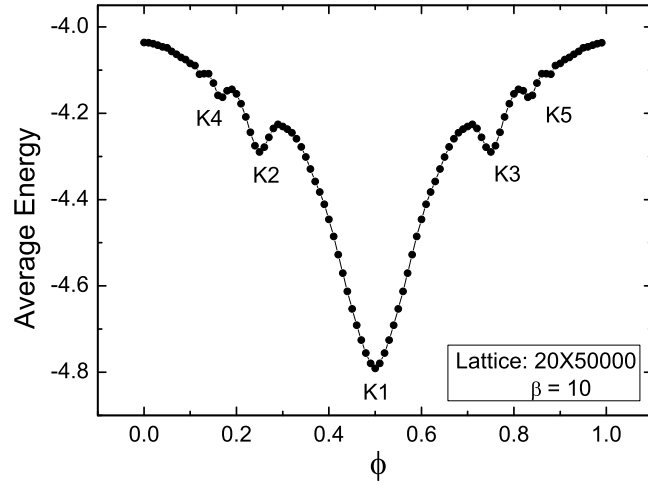


图 4.9: 半满情形下平均能量随磁场的变化。图中标出了几个极小值点, 这些极小值点的 ϕ 值和填充数 ν 的关系满足式 (4.3), 详见表 (4.1)。

当然, 由于有限温度的影响, 在基态能曲线中的其他极小值点, 在图 (4.9) 中已经被有限温抹掉, 无法辨别出来。

4.3 磁化强度和磁化率

磁化强度是反映磁场中的物理系统的性质的最直接的可观测量, 并能提供系统的电子结构的关键信息。比如说, 磁场中的金属样品, 其磁化强度随磁场做 de Hass-van Alphen 振荡, 给出金属中费米面结构的信息。

下面我们给出 Hofstadter 模型在半满情形下的磁化强度随 ϕ 变化的计算结果并做讨论。

图 (4.10) 中显示了 $\beta = 10$, $\beta = 20$ 和 $\beta = 50$ 三种温度下磁化强度从 $\phi = 0.25$ 到 $\phi = 0.5$ 的变化。可以清楚地看出, 随着 β 的增大 (温度的降低), 磁化强度显现出更加细致的结构。从 Hofstadter 蝴蝶的分形结构来看, 这个结果并不令人惊讶。在较高的温度下, 远小于温度能量尺度的能隙被热涨落覆盖, 磁化强度感觉不到能隙的存在, 于是显示出光滑的结构。当温度降低, 热涨落小于能隙的尺度, 低能激发受到能隙的压制, 于是磁化强度出现细致结构。图 (4.11) 是

	ϕ	M	N
K1	1/2	0	1
K2	1/4	0	2
K3	3/4	-1	2
K4	1/6	0	3
K5	5/6	2	3

表 4.1: 半满填充时平均能量的极小点处 ϕ 和填充数 ν 的关系。

	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	A8
ϕ	2/7	4/13	6/19	8/25	8/23	6/17	4/11	5/13
β'	2/3	4/5	6/7	8/9	1/7	1/5	1/3	2/3

表 4.2: 图 (4.13) 中极大值点的 ϕ 值和 ϕ 的局域变量 β'

图 (4.10) 的局部放大图, 可以更清晰的看出磁化强度随温度降低的变化。

下面我们给出计算磁化率的计算结果。图 (4.12) 中是在 $\beta = 10$ 和 $\beta = 20$ 下的磁化率随 ϕ 变化的曲线。

图 (4.12) 用字母和数字标记了 $\beta = 20$ 的磁化率曲线上极大值 (用C 标记) 和极小值 (用D 标记)。

图 (4.13) 中是在 $\beta = 50$ 下的磁化率随 ϕ 变化的曲线。图 (4.13) 中, A标记磁化率的极大值, B标记的是磁化率的极小值。

可以看到, 和磁化强度一样, 随着温度的降低, 磁化率曲线也显现出细致的结构。磁化率的极大值随着温度降低变大; 在 ϕ 的一定范围内 (比如 $\phi = 0.28 - 0.33$ 和 $\phi = 0.34 - 0.40$), 磁化率振荡的次数也随温度降低而增加。下面我们说明, 在图 (4.12) 和图 (4.13) 中, 磁化率的极大值和极小值和 $\mu = 0$ 处的态密度有直接的关系。首先我们给出图 (4.13) 中磁化率的极大值点和极小值点的 ϕ 值。

表 (4.2) 和 (4.3) 中的局域变量 β' 是用第二章第三节中讨论Nesting假设时引入的C变换由 ϕ 的值计算出来的。可以看到, 对于磁化率的极值点, β' 都具有 $1/q$ 或 $1 - 1/q$ 的形式。具体来说, 对于磁化率的极大值点, q 都是奇数; 对于磁化率的极小值点, q 都是偶数。当 $\beta' = 1/q$ 或 $1 - 1/q$ 时, β' 所属的子元胞中有 q 条子带。当 q 奇数时, 有一条子带跨过 $\mu = 0$, 并且在 $\mu = 0$ 处的态密度发散;

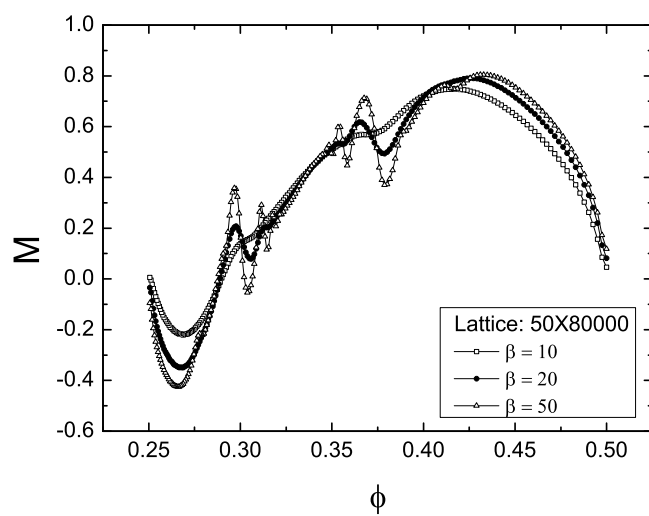


图 4.10: 半满情形下磁化强度随磁场和温度的变化。从图中可以看出随着温度的降低 (β 的升高), 磁化强度的曲线出现细致的分形结构。

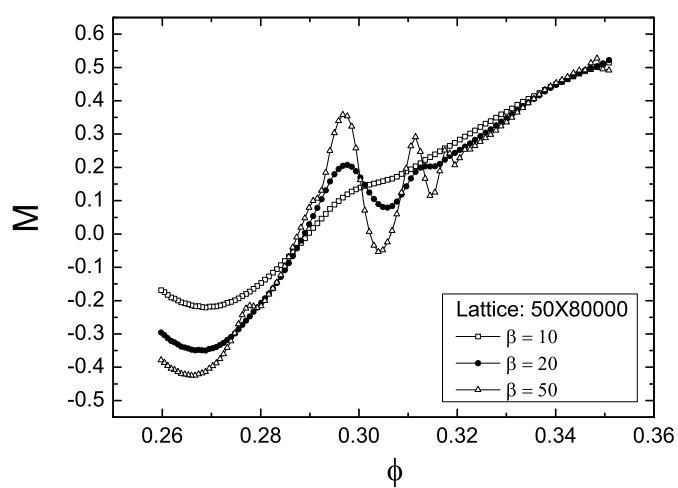


图 4.11: 图 (4.10) 在 $\phi = 0.3$ 到 $\phi = 0.35$ 之间的局部放大图。

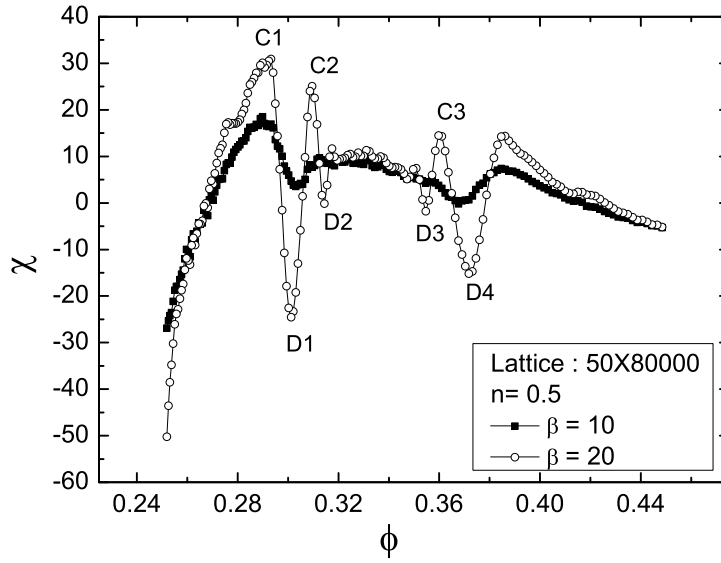


图 4.12: $\beta = 10$ 和 $\beta = 20$ 下磁化率。图中C标记了磁化率的部分极大值, D标记了磁化率的部分极小值。

	B1	B2	B3	B4	B5	B6	B7
ϕ	3/10	5/16	7/22	7/20	5/14	3/8	7/18
β'	3/4	5/6	7/8	1/6	1/4	1/2	3/4

表 4.3: 图 (4.13) 中极小值点的 ϕ 值和 ϕ 的局域变量 β'

当 q 是偶数时, 中间的两条子带相接于 $\mu = 0$ 点, 态密度在 $\mu = 0$ 处为零。同时, 在图 (4.13) 中, 极大值对应磁化率的正值, 是顺磁行为; 极小值对应磁化率的负值, 是抗磁行为。所以, 结论是, Hofstadter模型在半满填充下, 随着磁场 (ϕ) 的变化, 当态密度在化学势 μ 处发散时, 磁化率极大, 顺磁; 当态密度在 $\mu = 0$ 处为零时, 磁化率极小, 抗磁。

有限温度会“抹掉”磁化率曲线上的一些极大值和极小值, 这是由于这些极值点所处的子带宽度接近或小于温度的能量尺度。比较图 (4.12) 和图 (4.13) 可以看到, 在较高温度 $\beta = 20$ 下, 磁化率的极值点的个数减少, 并且极值点处磁化率的绝对值也比低温下磁化率的绝对值小。此外, 因为上面的结论是从数值计算的结果中得到的, 所以, 表 (4.2) 和 (4.3) 中的极值点处的 ϕ 值是不能直

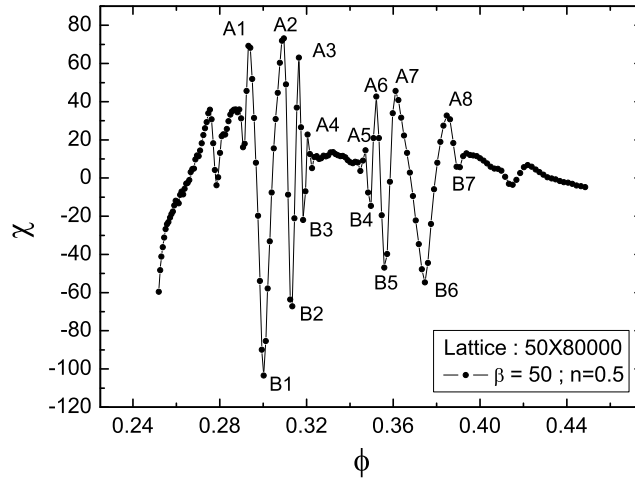


图 4.13: $\beta = 50$ 下磁化率。图中A标记了磁化率的部分极大值, B标记了部分极小值。极大值和极小值处的 ϕ 值分别列在表(4.2)和表(4.3)中。

接从数值结果中得到的, 比如 $\phi = 2/7, 4/13$ 这些点。严格来说, 在这些极值点出, ϕ , 磁化率和态密度的关系是从数值结果中推测出来的。

可以看到, 从紧束缚极限出发, 电子在二维周期性晶格和均匀磁场的共同作用下, 能产生轨道顺磁的特征。在引言中已经提到, 在[2]中, 作者用能带电子的准经典图像给出了轨道顺磁的一种机制, 下面将上面的结果和[2]中的结论作一下比较。

在[2]中, 轨道顺磁性来自能带的鞍点附近的贡献。在准经典图像中, 能带电子在磁场中的运动由下面的方程决定[4]

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}), \\ \frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} &= -\frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

其中, \mathbf{v} 是电子波包的群速度, 也就是电子的准经典速度, $E(\mathbf{k})$ 是能带的色散关系。由于洛伦兹力不做功, 所以电子将沿能带上的等能面运动。如果能带有鞍点, 则鞍点附近的电子轨道如图(4.14)示,

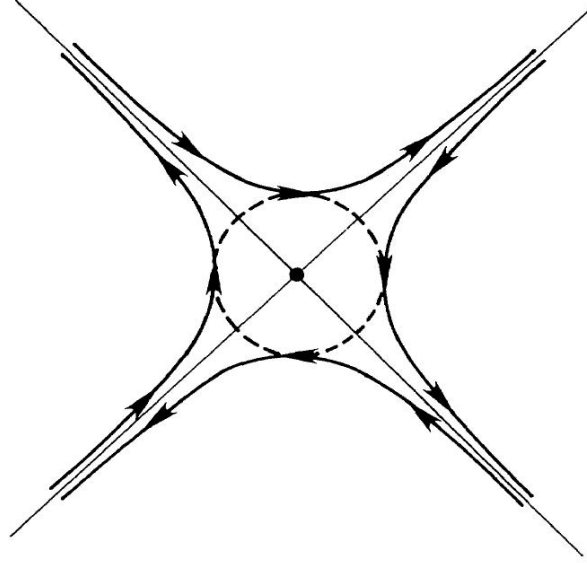


图 4.14: 准经典图像中能带的鞍点附近的电子轨道。实线表示电子在磁场中运动的准经典轨道；虚线表示发生磁崩溃（Magnetic Breakdown）后，电子隧穿形成的轨道。本图取自文献[2]。

图（4.14）中实线表示电子沿等能面运动的轨道。在鞍点附近，电子的速度接近零，能量相近，于是电子将有较大的几率在实线表示的几个等能面轨道间发生隧穿，形成图中虚线所示的轨道，这就是所谓的“磁崩溃”（Magnetic Breakdown）[17]。可以看到，磁崩溃之后电子的轨道与等能面轨道方向相反，产生顺磁性的轨道磁矩。同时，在鞍点附近， $|\nabla_k E(\mathbf{k})|$ 为零，于是态密度有范-霍夫奇异性，这会强烈的放大顺磁轨道对整个系统的总磁矩的贡献。

在这里，准经典描述要求以下两个条件。第一，磁场是弱场，不会对能带结构产生显著的影响。第二，电子波包的尺寸要远大于晶格常数，这样才能将电子近似作为经典粒子处理。因此，准经典图像不适用于描述图（4.12）和图（4.13）中观察到的轨道顺磁行为，也就是Hofstadter模型在强场下的顺磁行为。首先，磁场已经对能带结构产生显著的影响，在顺磁性极大的 ϕ 处，有限温度不可能消除能谱中分形结构的影响；其次，Hofstadter模型的出发点是紧束缚模型，电子的基函数是局域的瓦尼尔函数，电子不能作为经典粒子来考虑。

但是，和[2]中一致，在Hofstadter模型中，费米面处的电子态密度的奇异性伴随着轨道顺磁性的产生。对Hofstadter模型在一些有理数 ϕ 下的能带计算表明，

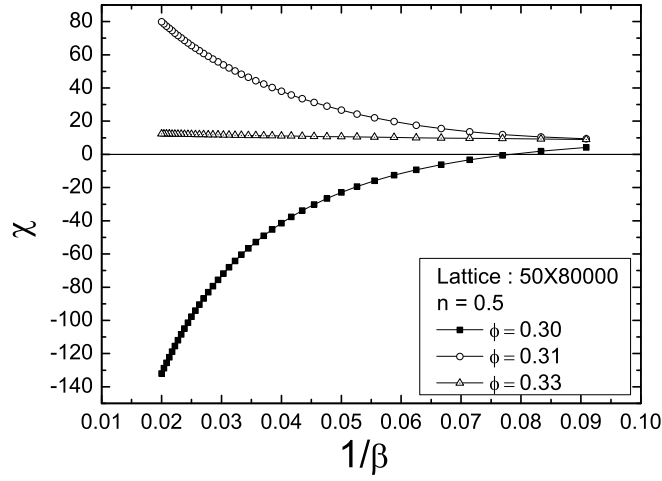


图 4.15: $\phi = 0.30$, $\phi = 0.31$ 和 $\phi = 0.33$ 时磁化率随温度的变化。
在 $\phi = 0.3$ 时, 低温下是抗磁行为, 温度升高, 抗磁减弱并转变为顺磁;
在 $\phi = 0.31$ 时, 顺磁性随温度升高减弱, 但没有转变到抗磁行为;
在 $\phi = 0.33$ 时, 顺磁性受温度的影响不明显。

这种奇异性也是范-霍夫奇异性。不过, 这里的范-霍夫奇异性是因为强磁场对能带的影响。在半满情形下, 当 ϕ 的分母是奇数时 (相应的局域变量 β' 的分母也是奇数), 则费米面处的态密度具有范-霍夫奇异性; 当 ϕ 的分母是偶数时 (相应的局域变量 β' 的分母也是偶数), 则费米面处的态密度是零。在准经典图像中, 范-霍夫奇异性是能带自身的行为, 不受磁场的影响, 磁场的作用是提供了准经典的电子波包的动力学。

总之, 在强磁场下Hofstadter模型的轨道顺磁性是不能简单的用准经典图像来描述的。

下面简单讨论磁化率随温度的变化。图 (4.15) 中是三种情况的 ϕ 下磁化率随温度 ($1/\beta$) 的变化。其中, $\phi = 0.3 = 3/10$ 在低温下给出抗磁性 ($\chi < 0$), 它对应了图 (4.13) 中的一个极小值点, 随着温度升高, 抗磁性降低, 并逐渐转变成顺磁性 ($\chi > 0$); $\phi = 0.31$ 靠近 $\phi = 4/13$, 后者对应磁化率的一个极大值点, $\phi = 0.31$ 在低温下给出顺磁性, 随着温度升高顺磁性降低, 但始终保持顺磁性不变; $\phi = 0.33$ 处在图 (4.13) 磁化率比较平缓的区域, 它靠近 $\phi = 1/3$, 温度的变化对这里的磁化率影响很小。

4.4 霍尔电导

上一章的最后一节给出了计算霍尔电导的Streda公式。P. Streda为了解释整数量子霍尔效应，应用线性响应理论计算了二维电子气在均匀磁场中的电导率[30]。

取 e^2/h 为电导单位，Streda公式可以写成

$$\sigma = \left(\frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right)_{\mu, T} \right)_{\phi, T}. \quad (4.5)$$

其中， μ 是化学势， ϕ 是穿过晶格元胞的磁通量子数， T 是温度， f 是单位体积的自由能，它是 μ ， ϕ 和 T 的函数。在讨论Hofstadter模型时，自由能 f 具有如下的对称性[5]：

$$\begin{aligned} f(T, \mu, \phi) &= f(T, \mu, \phi) \\ &= f(T, \mu, 1 + \phi) = \mu + f(T, -\mu, \phi). \end{aligned} \quad (4.6)$$

根据这些对称性，可以直接得到霍尔电导 $\sigma(T, \mu, \phi)$ 的如下性质：

$$\begin{aligned} \sigma(\mu, \phi) &= -\sigma(\mu, 1 - \phi), \\ \sigma(\mu, \phi) &= -\sigma(-\mu, \phi). \end{aligned}$$

下面我们给出在化学势 $\mu = 0$ 到4， $\phi = 0$ 到0.5范围内，Hofstadter模型中部分能隙对应的霍尔电导。见图(4.16)。

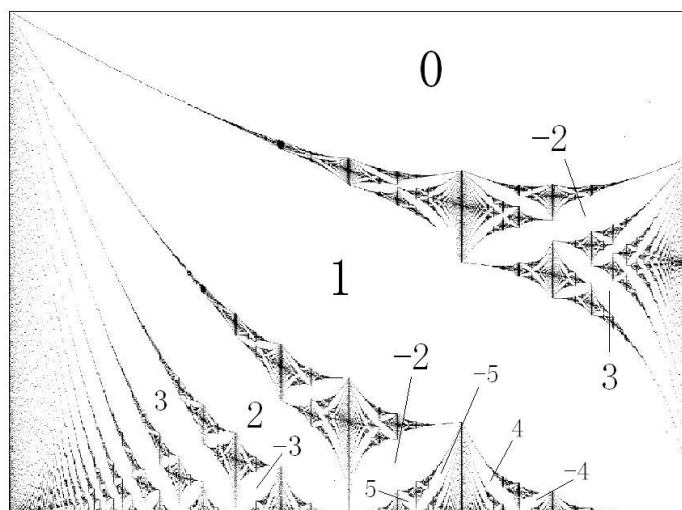


图 4.16: $\mu = 0$ 到 4, $\phi = 0$ 到 0.5 内 Hofstadter 模型部分能隙的霍尔电导。

第五章 结语

我们用量子转移矩阵方法计算了Hofstadter模型的热力学性质，以下是我们的主要结论。

1. 量子转移矩阵方法可以给出Hofstadter模型的配分函数的解析表达式。当然，这个解析表达式比较复杂，需要通过数值计算才能给出配分函数和其他热力学量的值。但是，表达式的形式比较简单，并且所需的数值计算量与系统的尺寸成简单的线性关系，于是，可以计算其他数值方法无法达到的系统尺寸，并能够有效的消除有限尺寸效应的影响。对平均基态能，霍尔电导等物理量的计算结果与已有的结论是一致的。因此，量子转移矩阵方法可以有效地处理Hofstadter模型。此外，量子转移矩阵方法还很容易推广到其他类似问题，比如一维准晶体，一维无序模型等。
2. 我们计算了半满填充下Hofstadter模型的磁化强度、磁化率和温度、磁场的关系。与高温情形相比，低温下磁化强度和磁化率随磁场变化的曲线会产生细致的分形结构。这和Hofstadter蝴蝶的图像是一致的。虽然我们对磁化强度的特征很难给出定量的描述，但我们在磁化率曲线中发现了简单的特征。首先，磁化率呈现出在顺磁性和抗磁性之间的振荡。随着温度的降低，振荡的频率会变大，这是系统的分形特征的体现；同时，磁化率的振幅也会变大，表示温度降低会同时带来更强的顺磁性或抗磁性。在磁化率的极大值处的 ϕ （穿过晶格元胞的磁通量子数）值，在作了迭代变换之后，它所在的最小的子元胞内对应的局域变量 β' （等于 $1/q$ 或 $1 - 1/q$ ）的 q 是奇数，于是对应的能谱在费米面（ $\mu = 0$ ）处的态密度是发散的；在磁化率的极小值处的 ϕ 值，它在最小的子元胞内的局域变量 β' 的 q 是偶数，对应的能谱在费米面处的态密度是零。我们将Hofstadter模型在强场下的轨道顺磁性和准经典图像下的轨道顺磁性作了比较，说明Hofstadter模型的轨道抗磁性不能用准经典图像描述。

附录 A 朗道极限下的Harper方程

在本附录中，我们概括性的给出朗道极限下Harper方程的推导。这里的推导主要来自文献[29]。

电子在二维势场和磁场中运动的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(x, y), \quad (\text{A.1})$$

对二维势场作傅立叶展开，

$$V(x, y) = V_0 \sum_{r,s} v_{r,s} \exp \left(2\pi i \left(\frac{rx}{a} + \frac{sy}{b} \right) \right), \quad (\text{A.2})$$

其中， a 和 b 分别是傅立叶展开中沿 x 和 y 的周期。

取朗道能级的本征波函数作为基函数，在坐标表象下，基函数写成

$$\langle x, y | \nu, \theta \rangle = N \exp \left(i \frac{y}{b} \theta \right) \Psi_\nu \left(\frac{x}{l} + \frac{\theta l}{b} \right), \quad (\text{A.3})$$

其中， $l = \sqrt{\hbar/(eB)}$ 是具有长度量纲的特征量；

$$\Psi_\nu(z) = \exp \left(-\frac{z^2}{2} \right) H_\nu(z), \quad (\text{A.4})$$

$H_\nu(z)$ 是 ν 阶厄米多项式； $\nu = 0, 1, 2, \dots$ 是标记朗道能级的量子数； $\theta \in \mathcal{R}$ 是标记朗道能级内部简并的基函数的量子数。哈密顿量 (A.2) 中的第一项的矩阵元是

$$\langle \mu, \varphi | \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 | \nu, \theta \rangle = \hbar \omega_c \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \delta_{\mu,\nu} \delta_{\varphi,\theta}, \quad (\text{A.5})$$

$\omega_c = eB/m$ 是回旋频率。二维势场的傅立叶分量的矩阵元是

$$\begin{aligned} & \langle \mu, \varphi | v_{r,s} \exp \left(2\pi i \left(\frac{rx}{a} + \frac{sy}{b} \right) \right) | \nu, \theta \rangle \\ &= P_{\mu\nu}(r, s) \exp \left(-i \frac{\Phi_0}{\Phi} r \varphi \right) \delta_{\varphi, \theta + 2\pi s}, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

其中，

$$\begin{aligned} P_{\mu\nu} &= v_{r,s} e^{irs\pi(\Phi_0/\Phi)} e^{-u/2} \left(\frac{\nu!}{\mu!} \right)^{1/2} \left(\pi \frac{\Phi_0}{\Phi} \right)^{(\mu-\nu)/2} \\ &\quad \times (s\alpha^{-1} + ir\alpha)^{\mu-\nu} L_\nu^{\mu-\nu}(u), \quad \mu \geq \nu \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

或,

$$P_{\mu\nu} = v_{r,s} e^{irs\pi(\Phi_0/Phi)} e^{-u/2} \left(\frac{\mu!}{\nu!} \right)^{1/2} \left(\pi \frac{\Phi_0}{\Phi} \right)^{(\nu-\mu)/2} \times (-s\alpha^{-1} + ir\alpha)^{\nu-\mu} L_{\mu}^{\nu-\mu}, \quad \nu \geq \mu \quad (\text{A.8})$$

其中, $L_{\mu}^{\nu}(u)$ 是Laguerre多项式, $\alpha = \sqrt{b/a}$, $u = \pi(r^2\alpha^2 + s^2\alpha^{-2})\Phi_0/\Phi$, $\Phi_0 = hc/e$ 是磁通量子, $\Phi = abB$ 具有磁通量的量纲。

令 $\theta = 2\pi n + \vartheta$, n 是整数, $\vartheta \in [0, 2\pi)$, 于是哈密顿量 (A.2) 以 ϑ 作矩阵元的指标时是对角的。将朗道能级的基函数作线性组合,

$$|j, \vartheta\rangle = \sum_{\nu, n} a_n^{\nu}(j, \vartheta) |\nu, n, \vartheta\rangle. \quad (\text{A.9})$$

带入到薛定谔方程中, 得到能量本征方程,

$$\mathbf{A}_n a_n + \sum_{s \neq 0} \mathbf{T}_{n,s} a_{n+s} = \frac{E}{\hbar\omega_c} a_n, \quad (\text{A.10})$$

其中,

$$a_n = (a_n^0, a_n^1, \dots, a_n^{\nu}, \dots), \quad (\text{A.11})$$

\mathbf{A}_n 和 $\mathbf{T}_{n,s}$ 是矩阵,

$$A_n^{\mu\nu} = (\nu + 1/2)\delta_{\nu,\mu} + K \frac{\Phi_0}{\Phi} \sum_r P_{\mu\nu}(r, 0) e^{-ir(2\pi n + \vartheta)(\Phi_0/\Phi)}, \quad (\text{A.12})$$

以及

$$T_{n,s}^{\mu\nu} = K \frac{\Phi_0}{\Phi} \sum_r P_{\mu\nu}(r, -s) e^{-ir(2\pi n + \vartheta)(\Phi_0/\Phi)}, \quad (\text{A.13})$$

$K = 2\pi mabV_0/\hbar^2$ 。

可以看到, 外势场 $V(x, y)$ 将所有的朗道能级的本征波函数混合起来。为了得到Harper方程, 我们将问题简化。首先, 我们取周期性的外势场,

$$V(x, y) = \frac{V_0}{4} \left[\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \right], \quad (\text{A.14})$$

并且只考虑最低朗道能级内部的简并基函数之间的混合。于是, 方程 (A.10) 可化为

$$a_{n+1} + a_{n-1} + 2 \cos\left[(2\pi n + \vartheta) \frac{\Phi_0}{\Phi}\right] a_n = \tilde{E} a_n, \quad (\text{A.15})$$

其中, \tilde{E} 是重新标度过的能量本征值,

$$\tilde{E} = \frac{E - \hbar\omega_c(\nu + 1/2)}{P_{\nu,\nu}(1, 0)V_0}. \quad (\text{A.16})$$

所以我们得到了朗道极限下的Harper方程 (A.15)。它和我们在紧束缚极限下的Harper方程在形式上是一致的, 唯一的不同就是, 在这里, 磁场的影响出现在余弦函数的宗量的分母上。所以, 朗道极限下的能谱结构也是Hofstadter蝴蝶。

我们还可以进一步考虑不同朗道能级间的耦合对能谱的影线。限于篇幅, 这里不再赘述, 文献[29] 对此作了比较详尽的论述。

附录 B

我们给出以下恒等式的证明。

$$\begin{aligned}\exp(\alpha\sigma_z + \beta\sigma_x) &= \cosh\left(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right) + \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sinh\left(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right) \sigma_z \\ &\quad + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sinh\left(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right) \sigma_x.\end{aligned}\quad (\text{B.1})$$

其中, σ_x 和 σ_z 是泡利矩阵。

证明:

$$\begin{aligned}\exp(\alpha\sigma_z + \beta\sigma_x) &= \exp\left(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}\sigma_z + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}\sigma_x\right)\right) \\ &= \exp\left(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\sigma'_z\right)\end{aligned}$$

令:

$$\begin{aligned}\cos\theta &= \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}, \sin\theta = \frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}, \\ \sigma'_z &= \cos\theta\sigma_z + \sin\theta\sigma_x \\ &= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}\end{aligned}$$

设 $|1'\rangle$ 和 $|-1'\rangle$ 分别是 σ'_z 的对应本征值1和-1的本征矢, 则

$$|1'\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}; \quad |-1'\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

于是,

$$\begin{aligned}|1\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}|1'\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|-1'\rangle, \\ |-1\rangle &= \sin\frac{\theta}{2}|1'\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|-1'\rangle.\end{aligned}$$

下面我们就可以直接计算 $\exp(\alpha\sigma_z + \beta\sigma_x)$ 在泡利表象下的矩阵元。例如，

$$\begin{aligned}
 \langle 1 | \exp(\alpha\sigma_z + \beta\sigma_x) | 1 \rangle &= \cos^2 \frac{\theta}{2} \exp(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}) + \sin^2 \frac{\theta}{2} \exp(-\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}) \\
 &= \frac{\cos \theta + 1}{2} \exp(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}) + \frac{1 - \cos \theta}{2} \exp(-\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}) \\
 &= \cosh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + \cos \theta \sinh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \\
 &= \cosh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sinh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}.
 \end{aligned}$$

同样有，

$$\begin{aligned}
 \langle 1 | \exp(\alpha\sigma_z + \beta\sigma_x) | -1 \rangle &= \frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sinh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \\
 \langle -1 | \exp(\alpha\sigma_z + \beta\sigma_x) | 1 \rangle &= \frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sinh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \\
 \langle -1 | \exp(\alpha\sigma_z + \beta\sigma_x) | -1 \rangle &= \cosh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} - \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sinh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}.
 \end{aligned}$$

所以，

$$\begin{aligned}
 \exp(\alpha\sigma_z + \beta\sigma_x) &= \cosh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sinh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \sigma_z \\
 &\quad + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \sinh \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \sigma_x.
 \end{aligned}$$

证明完毕。

附录 C

我们要证明算符

$$A = x_1 c_1^\dagger c_2 + x_2 c_2^\dagger c_1 + x_3 (n_1 - n_2)$$

的指数算符可以写成

$$e^A = 1 + (\cosh x - 1) (n_1 - n_2)^2 + \frac{\sinh x}{x} A.$$

证明：

首先我们要用到下面几个关系：

$$\begin{aligned} c_1^\dagger c_2 c_2^\dagger c_1 &= n_1 (1 - n_2), & c_1^\dagger c_2 (n_1 - n_2) &= -c_1^\dagger c_2, \\ c_2^\dagger c_1 c_1^\dagger c_2 &= n_2 (1 - n_1), & c_2^\dagger c_1 (n_1 - n_2) &= c_2^\dagger c_1, \\ (n_1 - n_2) c_1^\dagger c_2 &= c_1^\dagger c_2, & (n_1 - n_2) c_2^\dagger c_1 &= -c_2^\dagger c_1. \end{aligned}$$

于是，

$$A^2 = x^2 (n_1 - n_2)^2,$$

其中，

$$x^2 = x_1 x_2 + x_3^2.$$

从而，

$$\begin{aligned} A^3 &= A^2 A = x^2 (n_1 - n_2)^2 A \\ &= x^2 A. \end{aligned}$$

用归纳法容易证明，

$$(n_1 - n_2)^{2m} = (n_1 - n_2)^2,$$

其中 m 是大于等于1的整数。直接把指数算符 e^A 做展开，

$$\begin{aligned}
 e^A &= 1 + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \dots \\
 &= 1 + A + \frac{1}{2!}x^2(n_1 - n_2)^2 + \frac{1}{3!}x^2A + \frac{1}{4!}x^4(n_1 - n_2)^2 + \frac{1}{5!}x^4A + \dots \\
 &= 1 + \left(\frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 + \dots\right)(n_1 - n_2)^2 + \left(1 + \frac{1}{3!}x^2 + \frac{1}{5!}x^4 + \dots\right)A \\
 &= 1 + (\cosh x - 1)(n_1 - n_2)^2 + \frac{\sinh x}{x}A \\
 &= 1 + (\cosh x - 1)(n_1 - n_2)^2 + \frac{\sinh x}{x} \left(x_1 c_1^\dagger c_2 + x_2 c_2^\dagger c_1 + x_3(n_1 - n_3)\right)
 \end{aligned}$$

证明完毕。

参考文献

- [1] C. Albrecht, J. H. Smet, K. von Klitzing, D. Weiss, V. Umansky, and H. Schweizer. Evidence of hofstadter's fractal energy spectrum in the quantized hall conductance. *Phys. Rev. Lett.*, 86(1):147–150, Jan 2001.
- [2] A. S. Alexandrov and H. Capellmann. Orbital diamagnetism of two-dimensional electrons. *Phys. Rev. Lett.*, 66(3):365–368, Jan 1991.
- [3] P. W. Anderson, B. S. Shastry, and D. Hristopulos. Class of variational singlet wave functions for the hubbard model away from half filling. *Phys. Rev. B*, 40(13):8939–8944, Nov 1989.
- [4] Ashcroft, Neil W. and Mermin, N. David. *Solid State Physics*. 世界图书出版公司北京公司, 北京, 2004.
- [5] O. Gat and J. E. Avron. Magnetic fingerprints of fractal spectra and the duality of hofstadter models. *New J. Phys.*, 5(44):1–8, May 2003.
- [6] M. C. Geisler, J. H. Smet, V. Umansky, K. von Klitzing, B. Naundorf, R. Ketzmerick, and H. Schweizer. Detection of a landau band-coupling-induced rearrangement of the hofstadter butterfly. *Phys. Rev. Lett.*, 92(25):256801, Jun 2004.
- [7] D. R. Grempel, Shmuel Fishman, and R. E. Prange. Localization in an incommensurate potential: An exactly solvable model. *Phys. Rev. Lett.*, 49(11):833–836, Sep 1982.
- [8] Y. Hasegawa, Y. Hatsugai, M. Kohmoto, and G. Montambaux. Stabilization of flux states on two-dimensional lattices. *Phys. Rev. B*, 41(13):9174–9182, May 1990.

- [9] Y. Hasegawa, P. Lederer, T. M. Rice, and P. B. Wiegmann. Theory of electronic diamagnetism in two-dimensional lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 63(8):907–910, Aug 1989.
- [10] Douglas R. Hofstadter. Energy levels and wave functions of bloch electrons in rational and irrational magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 14(6):2239–2249, Sep 1976.
- [11] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45(6):494–497, Aug 1980.
- [12] Mahito Kohmoto. Metal-insulator transition and scaling for incommensurate systems. *Phys. Rev. Lett.*, 51(13):1198–1201, Sep 1983.
- [13] Mahito Kohmoto, Leo P. Kadanoff, and Chao Tang. Localization problem in one dimension: Mapping and escape. *Phys. Rev. Lett.*, 50(23):1870–1872, Jun 1983.
- [14] Walter Kohn. Theory of bloch electrons in a magnetic field: The effective hamiltonian. *Phys. Rev.*, 115(6):1460–1478, Sep 1959.
- [15] R. B. Laughlin. Quantized hall conductivity in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 23(10):5632–5633, May 1981.
- [16] P. Lederer, D. Poilblanc, and T. M. Rice. Superconductivity from commensurate flux phases. *Phys. Rev. Lett.*, 63(14):1519–1522, Oct 1989.
- [17] Lifshitz, E. M. and Pitaevskii, L. P. . *Statistical Physics Part 2*. 世界图书出版公司北京公司, 北京, 1999.
- [18] J. M. Luttinger. The effect of a magnetic field on electrons in a periodic potential. *Phys. Rev.*, 84(4):814–817, Nov 1951.
- [19] A. H. MacDonald. Introduction to the physics of the quantum hall regime. *arxiv: cond-mat*, 9410047, Oct 1994.

-
- [20] G. Montambaux. Comment on “theory of electronic diamagnetism in two-dimensional lattices”. *Phys. Rev. Lett.*, 63(15):1657, Oct 1989.
- [21] V. Nikos Nicopoulos and S. A. Trugman. Comment on “theory of electronic diamagnetism in two-dimensional lattices”. *Phys. Rev. Lett.*, 64(2):237, Jan 1990.
- [22] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65(3-4):117–149, Feb 1944.
- [23] R. Peierls. *Z. Physik*.
- [24] D. Poilblanc, Y. Hasegawa, and T. M. Rice. Numerical study of flux phases in the t-j model. *Phys. Rev. B*, 41(4):1949–1957, Feb 1990.
- [25] Didier Poilblanc and Yasumasa Hasegawa. Staggered flux phases in the t-j model. *Phys. Rev. B*, 41(10):6989–6993, Apr 1990.
- [26] Prange, R. E. and Girvin, S. M. . *The Quantum Hall Effect*. Springer-Verlag World Publishing Corp., Beijing, 1992.
- [27] P. Skudlarski and G. Vignale. Electronic diamagnetism in a three-dimensional lattice. *Phys. Rev. B*, 43(7):5764–5768, Mar 1991.
- [28] J. C. Slater. Electrons in perturbed periodic lattices. *Phys. Rev.*, 76(11):1592–1601, Dec 1949.
- [29] D. Springsguth, R. Ketzmerick, and T. Geisel. Hall conductance of bloch electrons in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 56(4):2036–2043, Jul 1997.
- [30] P Streda. Theory of quantized hall conductivity in two dimensions. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 15:L717–L721, Aug 1982.
- [31] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49(6):405–408, Aug 1982.

- [32] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard. Two-dimensional magneto-transport in the extreme quantum limit. *Phys. Rev. Lett.*, 48(22):1559–1562, May 1982.
- [33] G. Vignale. Orbital paramagnetism of electrons in a two-dimensional lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 67(3):358–361, Jul 1991.
- [34] Gregory H. Wannier. Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields. *Rev. Mod. Phys.*, 34(4):645–655, Oct 1962.

简 历

基本情况

许文虎，男，山东省泰安市人，1984年2月出生，未婚，中国科学院理论物理研究所硕士研究生。

教育状况

2002年9月至2006年7月，清华大学物理系，本科，专业：数学物理基础科学。

2006年9月至2008年6月，中国科学院理论物理研究所，硕士研究生，专业：理论物理。

工作经历

无。

研究兴趣

凝聚态物理。

联系方式

通讯地址：北京市 2735 信箱，中科院理论物理研究所

邮编：100190

E-mail: xuwh02@gmail.com

致 谢

首先我要感谢我的导师向涛研究员。向老师总能在复杂的问题中找到最关键和本质的因素，并用简洁通俗的语言表达出来，让我受益匪浅。向老师对学生的关心和理解也让我非常感动。

感谢覃绍京老师和罗洪刚老师，他们总有极大的耐心，为我答疑解惑。

感谢师兄陆汉涛和郭成，两位是我入所最早认识的师兄，一直以来，在生活，学习和工作各方面都热情向我提供经验和帮助。

感谢师姐杨丽平和师弟秦明普。本论文的完成离不开他们的帮助，尤其是杨丽平提出了很多指导性的建议，和他们的讨论也帮助我澄清了很多基本概念。

除了上面几位师兄师姐师弟，我还要感谢凝聚态组里的其他兄弟姐妹：封晓勇，陈巧妮，魏忠超，马锋杰，胡时杰，李淑明，司铁岩，张学峰，江进武，王智慧，对物理的热情和执着让我们走到一起，也让我难忘在凝聚态组的这两年。

感谢一起在大运村生活的董辉，陈卫，石弢等同学，他们为枯燥的大运村生活带来无尽的乐趣。

还要感谢理论所的郭玲老师和王丽老师，没有她们的帮助，我不可能顺利完成学业。

最后感谢我的父母。养育之恩无以为报，一个谢字也远不足万一。虽然这篇硕士毕业论文可能微不足道，但我还是要把它献给我的父母。