学校编码：10384　　　　　　　　　　　　　　　　　　分类号__密级__
学号：19820120153893　　　　　　　　　　　　　　　　　　UDC___

厦门大学

博　士　学　位　论　文

低维无序系统的能量输运

Energy transport in low-dimensional disordered systems

汪剑津

指导教师姓名：赵 鸿 教 授
专　业 名 称：理 论 物 理
论文提交日期：2016 年 5 月
论文答辩时间：2016 年 6 月
学位授予日期：2016 年　 月

答辩委员会主席：__
评阅人：__

2016 年　月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范（试行）》。

另外,该学位论文为(　　　　　　　　　　　　　　　　)课题(组)的研究成果，获得（　　　　　　　　　　）课题（组）经费或实验室的资助，在（　　　　　　　　　　）实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明。)

声明人（签名）：

年　　月　　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（　　）1.经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于　　年　　月　　日解密，解密后适用上述授权。

（　　）2.不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

摘 要

本论文研究低维无序系统的热传导以及能量输运性质，重点探索局域化和非线性相互作用所起的作用和引起的效应，揭示非线性作用对局域化的影响，特别是其引起的解局域化的机制和过程。我们发现对称与非对称相互作用都会引起一维局域化系统解局域化，但是它们对于系统的热传导行为以及解局域化的过程的影响有着定性的不同。相较于对称的相互作用来说，不对称的相互作用表现出更强的解局域化能力，而且在解局域化区域，不对称的相互作用的系统表现出正常的热传导；而对称的相互作用的系统的热传导依然是反常的。为了理解两种相互作用引起的解局域化过程的细节，我们进一步研究了无非线性相互作用条件下完全局域化的无序系统，随着非线性相互作用的增加，其有限温度下能量涨落的弛豫行为，发现能量涨落的扩散是正常的但涨落的分布却是非高斯的。这一特殊的现象这些年来已经被发现和研究，但是仅限于一些限制性扩散系统中的粒子扩散，我们的发现表明这种扩散行为具有普遍性，不仅粒子，能量等物理量同样也会在特殊情况下存在这样的行为。我们同时对这一现象的机理给出了明确的解释。本文还研究了无序系统中的流关联有限尺寸效应以及模式能量均分问题，并且得到了一些初步的结果。发现无序系统中有非常强的有限尺寸效应，而且这种效应跟局域化有着直接的关联。

关键词：能量输运；安德森局域化；非线性。

Abstract

This thesis focuses on the research about the properties of heat conduction and energy transport in the low-dimensional disordered systems. The emphasis is to explore the interactions between localization and nonlinearity as well as its effects. Our aims here are to reveal the influences on the localization brought by nonlinear interactions, especially the mechanisms and processes of delocalization induced by the nonlinear interactions. We find that both the symmetric interactions and asymmetric interactions can lead to delocalization in one-dimensional localized systems, however their influences are qualitatively different both on the heat conduction behaviour of the systems and the processes of delocalization. As compare to the symmetric interactions, the asymmetric interactions possess a more strong ability of delocalization. Furthermore in the region of delocalization, the systems with asymmetric interactions reveal normal heat conduction while it is abnormal in the systems with symmetric interactions. To understand the specifics of the delocaization's process of the two kinds of interactions, we further researched the relaxation behaviour of energy fluctuations of a system at finite temperature which is totally localized without nonlinear interactions. We find that the diffusion of energy fluctuations is normal but its distributions are Non-Gaussian. This special phenomenon has been found and learned in recent years. But it is only restricted to the diffusion of particles in the confined systems. Our findings indicate that this diffusion behaviour is general, this special behaviour can not only be found in the diffusion of particles, but also in the diffusion of other physical quantities such as energy in some special conditions. Meanwhile, we clarify a clear mechanism to this phenomenon. In addition, we also studied the finite-size effects of current correlations and energy equipartition of modes in disordered systems and some preliminary results have been obtained. We find that the disordered systems exhibite a strong finite-size effect and it is related to the localization directly.

Key Words: Energy Transport; Anderson Localization; Nonlinearity.

目 录

Table of Contents

第一章 基本背景

本章主要介绍我们在研究中需要了解的一些基本知识。主要包括 Anderson 局域化，声子局域化，移动边，以及低维系统热传导的研究。最后是本论文的章节安排介绍。

1.1 Anderson 局域化

Anderson 局域化是一种强局域化现象。它表示的是在一维无序的介质中电子波函数的振幅随着离振动中心距离的增加而指数的衰减，其衰减的特征长度 ξ 被称为 Anderson 局域化长度，用它可以来度量一个态（或者说波函数，振动模式）局域化的强弱。Anderson 局域化意味着电子的波函数被局限在系统内的一个很小的范围内，当没有足够的能量去驱动电子在这些局域态之间跳转的话系统是不能导电的，此时系统表现为绝缘体。由于这一现象最早是由 Anderson 于 1958 年研究电子在无序介质中的传播时发现的[1]，因此这一现象也被后人称为 Anderson 局域化。Anderson 及其合作者 Vleck，Mott 也因此于 1977 年被授予了诺贝尔物理学奖，以表彰他们在凝聚态物理方面做出的突出贡献。

1.1.1 Anderson 紧致模型

局域化理论是在研究材料的电输运性质中发展起来的。Anderson 运用了一个单电子模型去研究电子在无序介质中的传播，并由此发现了电子波函数的局域化。这里所谓的无序指的是电子在介质的不同地方体验到的势函数是杂乱无章的。Anderson 用于研究的简化模型也被称为 Anderson 紧致模型[1]。发展到现在已经 50 多年过去了，针对 Anderson 紧致模型的推导已发展出了很多方法[2-6]。下面就介绍一种推导上简单，而且图像清晰的方法[6]。

考虑一个晶格系统，其电子波函数满足的薛定谔方程具有如下形式：

$$[-\frac{1}{2m}\nabla^2+\sum_n u_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)]\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})=E\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

其中已令 $\hbar=1$。u_n 是原子的势函数它是一个随机函数，该系统的无序性就是由这个物理量来引入的。它表征的是电子在传播过程中感受到的背景势能的无序

性。$\mathbf{r}_n$ 是晶格中原子的平衡位置。从方程里可以看到该模型是不考虑电子之间的相互作用势能的，也就是说该模型是个单电子模型。

假设每个原子上的电子波函数是相互独立的，因此波函数 $\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})$ 就可以近似的写成各个原子上的电子波函数的叠加[6]:

$$\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})=\sum_n \psi_n \chi_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) \tag{1.2}$$

函数 $\chi_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)$ 是第 n 个原子上的电子波函数，ψ_n 是它的振幅。$\chi_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)$ 满足单原子的薛定谔方程：

$$[-\frac{1}{2m}\nabla^2+u_n]\chi_n=\varepsilon_n\chi_n \tag{1.3}$$

其中物理量 ε_n 是第 n 个原子上的电子本征能量。对于导体来说，每个原子上的电子波函数必须得重叠。而所有这些信息都包含在函数 χ_n 中。

把方程（1.2）代入到方程（1.1），并利用方程（1.3），经过化简整体得到：

$$\sum_n\left[\varepsilon_n-E+\sum_{p\neq n}u_p(\mathbf{r}-\mathbf{r}_p)\right]\psi_n\chi_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)=0 \tag{1.4}$$

用 χ_m^* 乘以方程（1.4）的左边并在整个构形空间积分得到关于振幅 ψ_n 的方程：

$$\sum_n\left[(\varepsilon_n-E)A_{m,n}+\sum_{p\neq n}B_{m,p,n}\right]\psi_n=0 \tag{1.5}$$

其中系数 $A_{m,n}$ 以及 $B_{m,p,n}$ 为：

$$A_{m,n}=\int d\mathbf{r}\chi_m^*(\mathbf{r}-\mathbf{r}_m)\chi_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) \tag{1.6a}$$

$$B_{m,p,n}=\int d\mathbf{r}\chi_m^*(\mathbf{r}-\mathbf{r}_m)u_p(\mathbf{r}-\mathbf{r}_p)\chi_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) \qquad (p\neq n) \tag{1.6b}$$

方程（1.5）和（1.6）对任何形式的势函数 u_n 都成立。系数 A 和 B 的取值依赖于势函数 u_n 的选择。

为了求解方程（1.5），假设电子波函数是被紧紧的束缚在每个原子上的很小的范围内的。在这种情况下每个原子上的电子波函数 χ 之间的重叠就可以忽略了。于是 $A_{m,n}$ 就可以用 Kronecker delta 函数 $\delta_{m,n}$ [7]来近似。这也就是 Anderson

紧致模型的含义。对于 $B_{m,p,n}$，在 $p \neq n$ 以及波函数 χ 紧致假设的条件下只有当 $m = p$ 并且原子 n 是原子 m 的最近邻的情况下它才有有限的值。也就是说只有在这种情况下，物理量 $B_{m,m,m+\mathbf{e}}$ 在方程（1.5）中才起到作用。其中 $\mathbf{e}$ 表示最近邻的矢量。最后假定 $B_{m,m,m+\mathbf{e}}$ 是个常量并设为 V。它的物理意义是电子从一个点跳转的另一个点时所需越过的势垒。因此也称为跳转势能。再把 A 和 B 代入到方程（1.5）中就得到：

$$\varepsilon_n \psi_n + V \sum_{\mathbf{e}} \psi_{n+\mathbf{e}} = E\psi_n \tag{1.7}$$

这样我们就得到了 Anderson 的紧致模型[1]。

为了方程看起来简洁，通常人们会把跳转势能 V 给重整掉得到：

$$\varepsilon_n \psi_n + \sum_{\mathbf{e}} \psi_{n+\mathbf{e}} = E\psi_n \tag{1.8}$$

这个时候方程（1.8）中的 ε_n 和 E 就跟方程（1.7）中的不一样了，是没有量纲的。因此在理论处理以及数值分析的时候就会方便的多。考虑一维的情形，方程（1.8）中的求和项就只含邻近的左右两项，因此有：

$$\varepsilon_n \psi_n + \psi_{n-1} + \psi_{n+1} = E\psi_n \tag{1.9}$$

可以把它写成矩阵的形式：

$$\boldsymbol{\varepsilon\psi} = E\boldsymbol{\psi} \tag{1.10}$$

其中矩阵 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 只有对角线上以及亚对角线上的矩阵元不为 0，其他的元素都为 0。并且对角线上的元素是随机的，亚对角线上的元素都为 1。由此可以看出求解 Anderson 紧致模型的问题就变成了线性代数中的求本征值与本征向量的问题了。因此我们就可以借助计算机对有限尺寸的系统进行对角化直接求出方程的本征态，从而可以直接看出它是否为局域态。至于为什么无序介质就会导致电子波函数的局域化，现在一般认为是 Coherent Backscattering 效应导致的[8]。它的意义如下：入射波在无序介质中传播的时候，由于杂质的存在会受到散射的作用，得到的散射波在传播的时候又会受到杂质的散射，得到新的散射波，这个过程周而复始不断的作用下去。在这个过程中如果在与入射波传播方向相反的方向上仍然能保持相长干涉，而在其他方向上没有的话就会形成波的局域化。