无公度体系若干数值计算研究

马珂

摘要

无公度体系的 Anderson 局域化现象与量子输运密切相关，其对于材料的导电性具有重要影响。对于这种体系，以往的数值方法或利用超胞将其转化为周期体系，或利用紧束缚模型近似。然而，两种方法均有局限性。本文我们将基于一种全新的倒空间算法，即无公度体系的平面波方法，对一类无相互作用体系的局域化性质进行数值研究。特别地，我们会利用反比参与率、Wigner 函数等探讨局域态与延展态之间的转变规律。同时，对于非线性无公度体系，为了克服自洽场迭代不易收敛的问题，我们将利用归一化的梯度流对 Bose-Einstein 凝聚的基态解进行数值计算。

关键词：无公度体系，平面波方法，Anderson 局域化，归一化的梯度流