

# 具有不可共度势的掺杂一维体系中 波函数的计算

汪洁英

曾建中

(北京师范大学物理系)

(美国北卡罗莱纳大学物理系)

1983年9月13日收到

## 提 要

本文将单点杂质引入到不可共度势一维体系中,用格林函数方法推导了杂质状态的能级和波函数.发现当杂质处在不可共度势变化较快的位置时,杂质能级的变化也较大.杂质状态的波函数是略有波动的指数衰减函数.讨论了杂质对带内状态波函数的影响,发现以杂质点为对称的体系中,具有偶宇称的状态波函数,在杂质的附近,振幅有相当大的下降.在对杂质点无对称性的体系中,在杂质的附近,产生一个振幅的阶跃.

## 一、引 言

近年来,对不可共度 (incommensurate) 体系的研究,无论在理论上和实验上都已经做了不少工作<sup>[5,9]</sup>,并指出了这种体系在技术应用方面的可能性,例如高温超导和电荷密度波等<sup>[5-8]</sup>.所谓不可共度体系是指在体系中存在两个以上的周期,例如有周期  $a, b \cdots$  而周期之间的比值 ( $a/b$  等) 是无理数.周期之一可以是属于基本的晶格点阵的,而另外的周期可以来源于另一个晶格的点阵或外场.例如,气体原子被吸附在晶体的衬底上(氮吸附在石墨上),构成一个二维的不可共度体系.又如  $\text{Hg}_3\text{AsF}_6$ , 在低温下,水银链构成一个通常的三维晶格,它和  $\text{AsF}_6$  的晶体是不可共度的,从而形成了一个三维的不可共度体系.这种体系介于晶体和有序体系之间,比晶体复杂,又比有序体系简单.在能带结构上,它的特征是在宽带之外,分裂成一系列越来越细的窄带.(见文献[4]中图2和图4).凡是属于窄带的波函数都是比较局域化的,此种波函数受杂质的影响应该特别大,所以研究杂质对它的作用,对于将来这种体系的实际应用,必有贡献.文献[4]曾经从格林函数的研究证明了宽带和窄带的格林函数之收敛性有很大的不同,在窄带中的复数能量 ( $E + i\epsilon$ ) 的格林函数收敛极慢,这给寻找带边指出了方向,在本文中,我们第一次将杂质引入到不可共度体系中,并特别研究了它的极窄带的波函数,使我们明显地看到杂质对波函数和能带的影响.为了便于叙述,在第二节中,我们先把基本的理论方法介绍一下,在第三节中再具体给出含杂质时的波函数的计算和杂质能级的计算.

## 二、方 法

### 1. 哈密顿

我们采用简单的一维模型体系. 设晶格常数为  $a$ , 在此一维晶格上加一个外场,

$$V = V_0 \cos\left(\frac{2\pi}{b} na\right),$$

$b$  为外场的周期, 为简单起见, 令  $a/b = q/2\pi$ . 并在第  $l$  格点上加杂质势  $V_l$ , 于是, 体系哈密顿量可以写成

$$\begin{aligned} H_{n,n} &= V_0 \cos(q \cdot n) + V_l \delta_{n,l}, \\ H_{n,n+1} &= H_{n+1,n} = 1, \\ H_{m,n} &= 0 \quad \text{此外,} \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $q$  和  $\pi$  的比是一个无理数, 所以势  $V_0 \cos(q \cdot n)$  是和原来晶格点阵不可共度的.

### 2. 格林函数

应用文献[3]的方法,  $H$  的格林函数的对角元为

$$R_{n,n} = (z - H_{n,n} - \Sigma_n)^{-1}, \quad (2)$$

其中  $z$  为复能量平面,  $z = E + i\varepsilon$ ,  $\Sigma_n$  为局域自能项, 它可表示为

$$\Sigma_n = \Delta_{n+1}^+ + \Delta_{n-1}^-, \quad (3)$$

其中  $\Delta_n^\pm$  是由循环关系给出的,

$$\Delta_n^\pm = (z - H_{n,n} - \Delta_{n\pm 1}^\pm)^{-1}. \quad (4)$$

连续应用(4)式, 则  $\Delta_n^\pm$  可用连分数来表示, 例如:

$$\Delta_1^+ = \frac{1}{A_1 - \frac{1}{A_2 - \frac{1}{A_3 \dots}}}, \quad (5)$$

其中  $A_n \equiv z - H_{n,n}$ . 下面为了简单起见, 暂时用  $\Delta_n$  代表  $\Delta_n^+$ . 对  $\Delta_n^-$  的做法类似, 只是  $n$  从  $-1, -2, \dots, -\infty$ .

### 3. $x/y$ 方法

在文献[2]中, 曾用  $x/y$  方法来研究连分数(5)式的收敛性, 并用叠代过程来求得  $\Delta_1$ , 在数值上是稳定的. 令  $\Delta_1^{(n)}$  是第  $n$  级上被切断的连分数. 在  $x/y$  方法中,  $\Delta_1^{(n)}$  满足如下的循环关系:

$$\Delta_1^{(n)} = (x_n/y_n) \Delta_1^{(n-1)}, \quad (6)$$

其中  $x_n = A_n - x_{n-1}^{-1}$ ,  $y_n = A_n - y_{n-1}^{-1}$ . (7)

$x, y$  和  $\Delta_1$  的开始值为

$$x_2 = A_2, \quad y_2 = A_2 - A_1^{-1} \quad \text{和} \quad \Delta_1^{(1)} = A_1^{-1}. \quad (8)$$

在文献[2]中,  $\Delta_1^{(n)}$  的收敛定义如下:

$$\left| \frac{\Delta_1^{(n)} - \Delta_1^{(n-1)}}{\Delta_1^{(n-1)}} \right| = |x_n \cdot y_{n-1}^{-1} - 1| < \delta. \quad (9)$$

对满足此条件的  $n = N$  称为“收敛长度”。 $\Delta_1^{(n)}$  的收敛值表示为  $\Delta_1(E + i\varepsilon, \delta)$ ,  $\Delta_1$  的值最终收敛到一个“双极限值”, 即

$$\Delta_1(E) = \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ \delta \rightarrow 0}} \Delta_1(E + i\varepsilon, \delta). \quad (10)$$

#### 4. 波函数求法

下面我们用 D-W-W<sup>[3]</sup> 方法, 由  $\Delta$  直接求出波函数, 应该指出原来 D-W-W 讨论的是有限体系, 现在我们讨论的是无限体系, 这一推广是直接的, 但现在的本征函数是复变函数.

我们用  $u_n(E)$  表示能量为  $E$  的状态在第  $n$  格点的振幅, 则  $u_n(E)$  满足下面一系列方程:

$$-u_{n-1} + A_n u_n - u_{n+1} = 0. \quad (11)$$

设相邻的两个  $u_n$  服从如下的关系:

$$u_n = s_n u_{n-1}. \quad (12)$$

将(12)式代入(11)式, 就得到

$$s_n = (A_n - s_{n+1})^{-1}. \quad (13)$$

$s_n$  的递推公式(13)和  $\Delta_n^+$  的递推公式(4)是形式相同的, 可见  $s_n$  正比于  $\Delta_n^+$ , 从  $u_0$  开始, 重复应用(12)式, 得到相对振幅

$$b_n \equiv \frac{u_n}{u_0} = \Delta_1^+ \Delta_2^+ \cdots \Delta_n^+. \quad (14)$$

同样可求出

$$b_n \equiv \frac{u_{-n}}{u_0} = \Delta_{-1}^- \Delta_{-2}^- \cdots \Delta_{-n}^-. \quad (15)$$

对于无限体系中的状态,  $\Delta$  都是复变函数, 所以, (14)和(15)式给出的是复振幅  $b_n$ .

实轴上、下的复数能量的振幅  $b_n(E \pm i\varepsilon)$  是对应于相反的传播方向的波, 所以振幅的通解应为

$$u_n = A b_n + B b_n^*. \quad (16)$$

应用在含杂质的体系上时,  $A$  和  $B$  应由波函数在杂质位置上连接条件所确定的.

### 三、杂质对波函数的影响

以杂质格点  $l$  为基准点, 先求得

$$b_{l \pm r} = \frac{u_{l \pm r}}{u_l} = \Delta_{l \pm 1}^\pm \Delta_{l \pm 2}^\pm \cdots \Delta_{l \pm r}^\pm, \quad (17)$$

$b_{l \pm r}$  的计算是从杂质格点左、右两相邻格点  $l - 1$  和  $l + 1$  开始, 沿着相反的方向, 分别做到  $-\infty$  和  $+\infty$ , 其中唯独不包括杂质格点本身的  $b_l$ , 杂质的影响体现在连接条件中, 即

$$u_{l-1} - A_l u_l + u_{l+1} = 0.$$

如令  $u_l = 1$ , 则

$$u_{l-1} - A_l + u_{l+1} = 0. \quad (18)$$

在文献[4]中, 曾经研究了  $\Delta_n$  的收敛性, 发现  $\Delta_n$  的虚数部分的收敛情况在带内和带

外是很不同的,在带内,  $\Delta_n$  收敛很慢,在带外则很快收敛为零。所以实际上可作为实变函数来处理。下面我们将分别计算杂质对带内状态波函数的影响,以及它在带外所产生的杂质能级的状态波函数。

### 1. 带内

1) 杂质位于  $l = 0$  的情况 因为哈密顿量的对称性,其本征函数或为奇宇称,或为偶宇称。对奇宇称的情况,因为  $n = 0$  点的振幅要保持为零,  $V_1$  对它将不产生影响,所以不必去考虑它,只需讨论偶宇称的情况。这时,因为  $\Delta_n^+ = \Delta_{-n}$ , 所以

$$b_n = b_{-n} = \Delta_1 \Delta_2 \cdots \Delta_n. \quad (19)$$

设通解为

$$u_n = Ab_n + Bb_n^*, \quad (20)$$

$$\text{令} \quad A = \frac{C}{2} e^{-i\delta}, \quad B = \frac{C}{2} e^{+i\delta}, \quad (21)$$

其中  $C$  和  $\delta$  为常数,把  $\Delta_n$  写成  $|\Delta_n| e^{i\varphi_n}$ . 将  $A, B$  和(19)式代入(20)式,求得

$$u_n = C |\Delta_1 \Delta_2 \cdots \Delta_n| \cos(\varphi_1 + \varphi_2 + \cdots + \varphi_n - \delta), \quad (22)$$

$$u_1 = C |\Delta_1| \cos(\varphi_1 - \delta). \quad (23)$$

现在,可用连接条件(18)式来确定常数  $C$  和  $\delta$ , 因为  $u_{-1} = u_1$ , 得到

$$u_1 = \frac{A_0}{2} = \frac{E - V_0 - V_1}{2}. \quad (24)$$

另一方面,

$$u_0 = Ab_0 + Bb_0^* = A + B = 1, \quad (25)$$

又由(21)式,得到

$$A + B = C \cos \delta. \quad (26)$$

所以

$$C = \frac{1}{\cos \delta}. \quad (27)$$

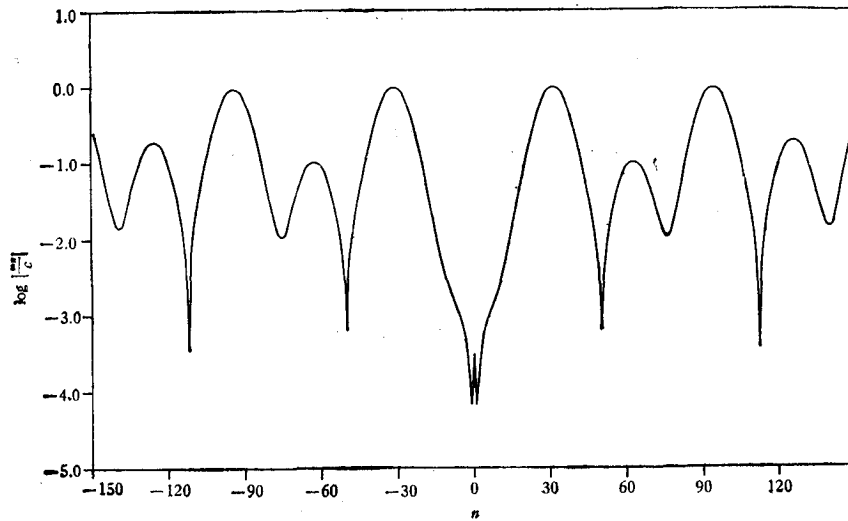


图1 杂质位于  $l = 0$  时的波函数曲线

从(23),(24)和(27)式,经过简单计算,得到

$$\tan \delta = -\frac{V_1}{2|\Delta_1| \sin \varphi_1}. \quad (28)$$

当  $E = 2.05805$ ,  $V_0 = 0.1$  和  $q = 0.2$  时,我们求得  $|\Delta_1| = 0.97903$ ,  $\varphi_1 = -0.00023$ , 将  $|\Delta_1|$ ,  $\varphi$ , 和  $V_1 = 1.5$  代入上式,得到  $\delta = 1.5705$ , 然后由(22)式求出  $u_n$ . 此时波函数曲线如图 1.

从图 1 和图 2 的比较中,可以看到在  $n = 0$  处加上杂质势  $V_1$ , 因为波函数有一个相移  $\delta = 1.57021 - \pi/2$ , 使  $n = 0$  附近的振幅有个大的下降,同时全部都应有一定的改变(乘上因子  $1/\cos \delta$ ),在我们给定的数据下,  $\cos \delta \sim 1$ , 所以,除  $n = 0$  点附近外,别处振幅变化极小.

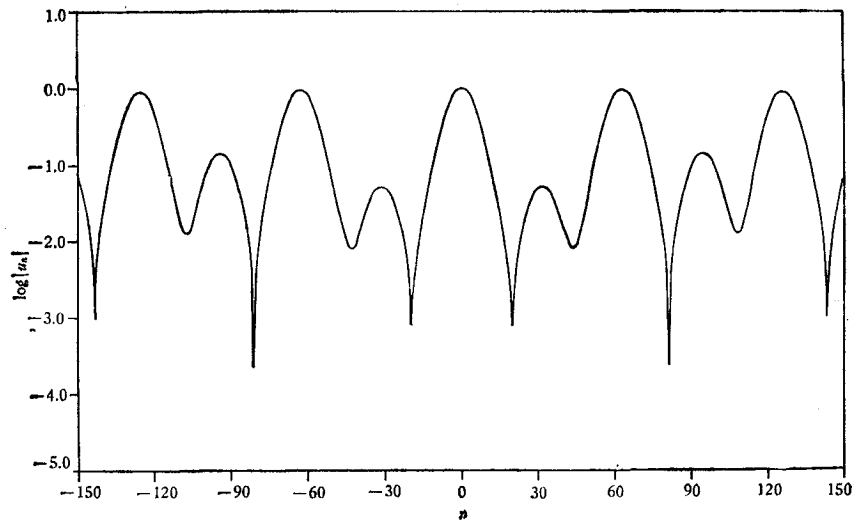


图 2 无杂质时的波函数曲线

2) 杂质位于  $l \neq 0$  的情况 这时,因为哈密顿量失去了对杂质位置  $n = l$  点的对称性,所以要分别计算杂质左右两边的振幅.

通解可写成如下形式:

$$\begin{aligned} u_n &= A_+ b_n + B_+ b_n^* & n > l, \\ u_n &= A_- b_n + B_- b_n^* & n < l, \end{aligned} \quad (29)$$

其中

$$A_{\pm} = \frac{C_{\pm}}{2} e^{-i\delta_{\pm}}, \quad B_{\pm} = \frac{C_{\pm}}{2} e^{i\delta_{\pm}}. \quad (30)$$

利用连接条件(18)式,并令  $u_l = 1$ ,

则有

$$\begin{aligned} A_+ + B_+ &= 1, & A_+ + B_+ &= C_+ \cos \delta_+; \\ A_- + B_- &= 1, & A_- + B_- &= C_- \cos \delta_-. \end{aligned} \quad (31)$$

经过简单计算,得到

$$u_{l+r} = \frac{1}{\cos \delta_+} |\Delta_{l+1}^+ \Delta_{l+2}^+ \cdots \Delta_{l+r}^+| \cos(\varphi_{l+1} + \varphi_{l+2} + \cdots + \varphi_{l+r} - \delta_+),$$

$$u_{l-r} = \frac{1}{\cos \delta_-} |\Delta_{l-1}^- \Delta_{l-2}^- \cdots \Delta_{l-r}^-| \cos(\varphi_{l+1} + \varphi_{l+2} + \cdots + \varphi_{l+r} - \delta_-), \quad (32)$$

假定杂质左边 ( $n < l$ ) 的函数为

$$u_{l-r} = |\Delta_{l-1}^- \Delta_{l-2}^- \cdots \Delta_{l-r}^-| \cos(\varphi_{l-1} + \varphi_{l-2} + \cdots + \varphi_{l-r} - \delta_-),$$

即假定  $\delta_- = 0$ , 则由连接条件(18)式得到

$$\tan \delta_+ = \frac{-V_1}{|\Delta_{l+1}^+| \sin \varphi_{l+1}}. \quad (33)$$

将求出的  $\delta_+$  代入(32)式, 就得到  $u_{l+r}$ .

为了使图形位置适当, 我们这样选择坐标: 横轴表示格点位置  $n$ , 杂质势  $V_1$  放在  $l = -100$  格点上. 当  $E = 2.05805$ ,  $V_1 = 1.5$ ,  $V_0 = 0.1$ ,  $q = 0.2$  时, 我们求得  $|\Delta_{l+1}^+| = 1.23489$ ,  $\varphi_{l+1} = -0.000715$  和  $\delta_+ = 1.57021$ , 进而算出  $u_n$ . 图 3 就是由此画出的波函数曲线. 我们看到, 在杂质位置附近不再出现陷坑, 而出现一个明显的阶跃, 而在杂质的位置上出现一个小扰动.

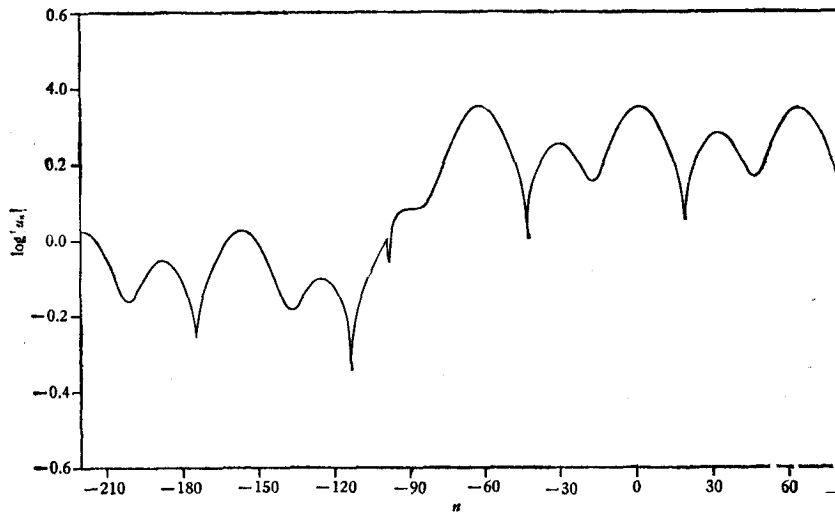


图 3 杂质位于  $l = -100$  时的波函数曲线

## 2. 带外

在一系列窄带之外, 还存在几个分立的杂质能级. 如前所述, 带外波函数  $b_n$  是个实变函数, 所以

$$u_n = Ab_n + Bb_n^* = Cb_n \quad n \neq l, \quad (34)$$

$$u_l = Cb_l. \quad (35)$$

同样, 我们令  $u_l = 1$ , 则  $C = 1$ ,  $u_{l-1}$ ,  $u_l$  和  $u_{l+1}$  满足连接条件(18)式, 即

$$\Delta_{l+1}^+(E) + \Delta_{l-1}^-(E) - E + V_0 \cos(q \cdot l) + V_1 = 0. \quad (36)$$

解(36)式, 可定出杂质能级的能量值  $E$ .

将杂质放在  $l = 0$  的格点上, 求出靠近能量最高的窄带的一个杂质能级,  $E = 2.59828$ , 图 4 是根据(34)和(35)式所画出的杂质状态的波函数曲线, 我们得到的是  $\log |u_n|$  随

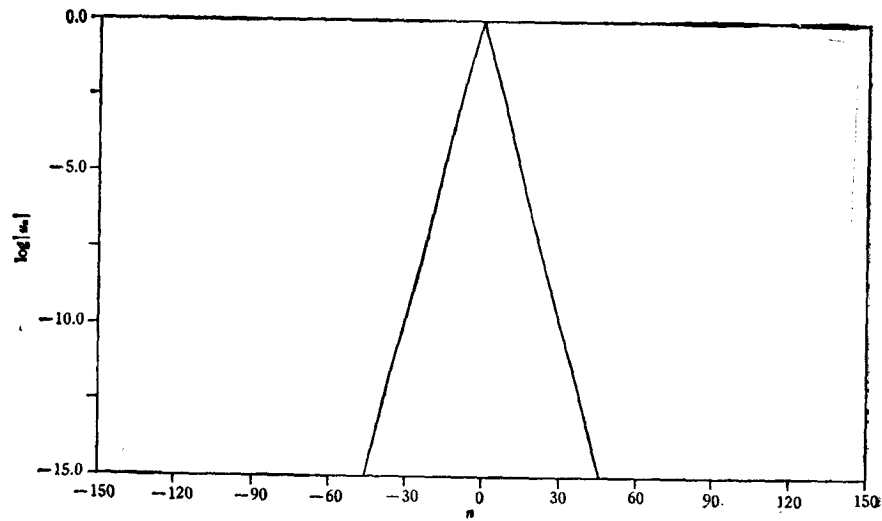
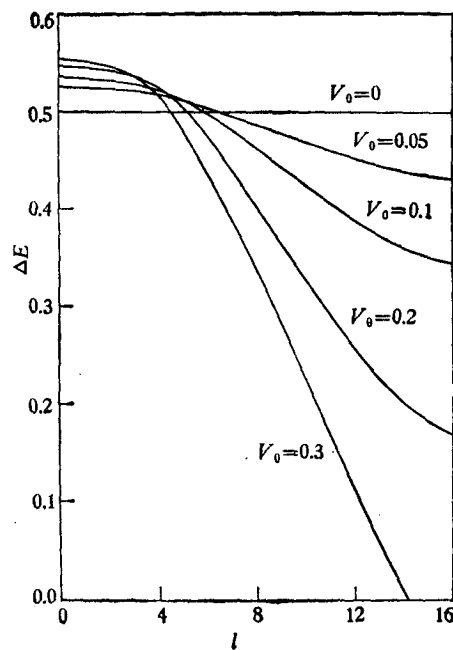
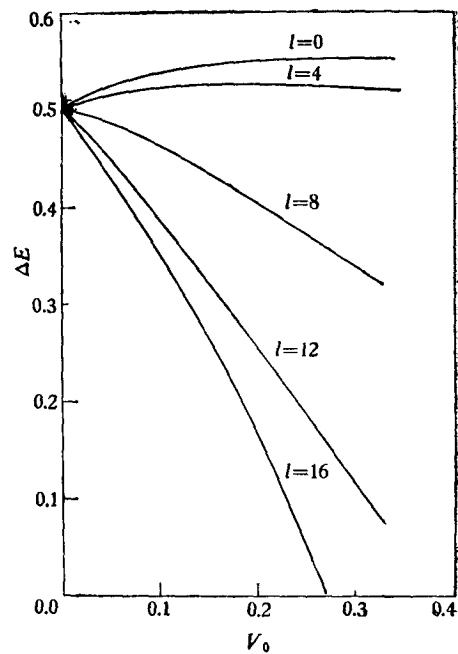


图4 杂质状态波函数曲线

图5  $\Delta E$  随杂质位置  $l$  变化的曲线图6  $\Delta E$  随  $V_0$  变化的曲线

$n \rightarrow \pm \infty$  而沿着略有波动的斜线趋向于零的图形, 图中只画了  $n$  从  $-46$  到  $+46$  的一段, 其余部分  $\log |u_n|$  均小于  $-15$ , 不再继续画出, 可见杂质状态波函数是在杂质格点附近随指数下降的一个局域态。

从(35)式可以看出, 杂质能级  $E$  是随  $V_0$  的大小和杂质的位置而变化的, 利用这个关系, 我们可以在实验中测量对一定杂质分布的体系的吸收光谱, 从而得出最高的杂质能级与它附近的窄带带边的能量差  $\Delta E$ , 从而推算出体系的不可共度势。我们在下面提供两

组曲线可供实验参考。

选定  $V_0$ , 将杂质分别投放在  $l = 0, 4, 8, 12$  和  $16$  的格点上, 首尾两个位置分别为  $V_0 \cos(q \cdot n)$  取最大值和接近最小值的位置。图 5 为  $\Delta E$  随杂质位置  $l$  变化的曲线, 其中五条曲线分别对应  $V_0 = 0, 0.05, 0.1, 0.2$  和  $0.3$  的情况。由这些曲线, 我们可以在一定的  $V_0$  下, 从杂质按位置分布求出杂质按  $\Delta E$  的分布。

图 6 为选定杂质位置(五条曲线分别对应着不同的杂质位置:  $l = 0, 4, 8, 12$  和  $16$ ),  $\Delta E$  随  $V_0$  变化的情况。

由这些曲线可看出, 当杂质处在不可共度势变化较快处, 杂质能级变化也较大。

### 参 考 文 献

- [ 1 ] K. S. Dy, S. Y. Wu and C. Wongtawatnugool, *J. Phys. C*, **12** (1979), L141.
- [ 2 ] K. S. Dy, S. Y. Wu and C. Wongtawatnugool, *J. Phys. C*, **14** (1981), L781.
- [ 3 ] K. S. Dy, S. Y. Wu and T. Spratlin, *Phys. Rev. B*, **20**(1979), 4237.
- [ 4 ] K. S. Dy and T. C. Ma, *J. Phys. C*, **15** (1982) 6971.
- [ 5 ] P. Bak, *Rep. Prog. Phys.*, **45** (1982), 587.
- [ 6 ] B. Dörner, *Structure Phase Transition I*, ed. K. A. Müller, and H. Thomas, (1981), 93.
- [ 7 ] H. Fröhlich, *Proc. Roy. Soc. London A*, **223** (1954), 296.
- [ 8 ] R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Oxford Press, (1955), 108.
- [ 9 ] R. Pynn, *Nature* **281** (1979), 433.

## CALCULATION OF WAVE FUNCTION OF A SINGLE IMPURITY IN A ONE DIMENSIONAL SYSTEM WITH INCOMMENSURATE LATTICE POTENTIAL

WANG JIE-YING

(Department of Physics, Beijing Normal University)

KIAN SENG-DY

(Department of Physics and Astronomy, University of North Carolina, Chapel Hill, U. S. A.)

### ABSTRACT

We study the effect of a single impurity in a one dimensional system with incommensurate lattice potential. The energy level and the wavefunction of the impurity state is derived with the Green's function technique. The energy level is found to be very sensitive to the impurity position in the region where the incommensurate potential is varying rapidly. The wavefunction of the impurity state decays exponentially with small oscillation of the amplitude. We also consider the effect of the impurity on the states in the band. For a system that is symmetric about the impurity, we find a large reduction of the amplitude of the wavefunction with even parity in the vicinity. For a system that is asymmetric about the impurity, a step-wise increase in the amplitude occurs at the impurity.