

单晶固体中正电子波函数的计算*

熊 涛[†] 张 杰 陈祥磊 叶邦角 杜淮江 翁惠民

(中国科学技术大学近代物理系核固体物理实验室, 合肥 230026)

(2010 年 1 月 23 日收到; 2010 年 2 月 5 日收到修改稿)

介绍了正电子波函数计算的两种基本方法——有限差分方法(FDM)与平面波方法(PW). 并以单晶 Si 为例, 计算出正电子的波函数, 从而计算出正电子在 Si 中的密度分布; 由该正电子密度, 进一步计算出了正电子在 Si 中的体寿命. 计算结果与我们最近的实验结果(220 ps)符合得很好. 最后, 探讨了这两种方法各自的优缺点.

关键词: 正电子, 波函数

PACC: 7870B

1. 引 言

基于正电子湮灭的一些实验方法能够给出很多有价值的凝聚态物质的电子或离子结构信息^[1-4]. 然而为了更好地解释这些实验数据, 以及更好地预言正电子与物质相互作用的过程, 有必要从理论上对正电子进行定量分析. 理论计算与实验结果的符合, 不但能更好地分析实验数据, 同时也说明理论的正确性. 所以, 正电子湮灭技术也为验证多体理论的正确性提供了一种新途径.

由量子力学可知清楚了系统的波函数, 理论上讲就能知道系统的所有信息. 所以, 获得正电子在固体中的波函数就相当重要. 从正电子的波函数, 我们可以进一步计算得到正电子寿命^[5-8]、正电子亲和势^[9]、正电子能带^[10, 11]、正电子或正电子偶素功函数^[12]等, 并且这些理论计算结果可以与实验结果进行比较.

正电子入射到固体中, 当其在固体中充分热化后, 便处于 $n=1, \mathbf{k}=0$ 的基态, 其中 n 是能带指标, \mathbf{k} 是波矢. 因为计算束缚态与自由态波函数的过程相似(只是选择网格点和选取的平面波的数目不同), 所以, 本文以 Si 晶体为例, 用有限差分法(FDM)和平面波法(PW)两种方法计算了正电子自由态波函数, 进而计算了正电子自由态湮灭寿命, 计算结果与我们最近的实验结果符合得很好.

2. 计算方法

目前正电子理论计算大都采用二成分密度泛函理论(two-component density functional theory, 简记为 TCDFT)^[13], 在该理论框架下, 正电子的 Schrödinger 波函数表示为:

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_p(r) + [V_{\text{ext}}(r) + V_H^p(r) + V_{e-p}^p(r)] \psi_p(r) = \varepsilon_p \psi_p(r), \quad (1)$$

式中 V_{ext} 是原子核产生的外场, $V_H^p(r)$ 是正电子所受的 Hartree 势, $V_{e-p}^p(r)$ 是电子-正电子交换关联势.

该理论是基于独立粒子模型(independent particle model, 简记为 IPM), 即在计算正电子所感受的势中, 没有考虑正电子-正电子的相互作用^[14, 15]. 若只是考虑正电子-电子的相互作用, 表现为(1)式中的 $V_{e-p}^p(r)$ 项, 该项的计算可以从 Feynman 理论中得到^[16-18]. 考虑到电荷的正负性, 一般将(1)式写为^[19]:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 - V_H(r) + V_{\text{nuc}}(r) + u(n_e) \right] \psi_+(r) = \varepsilon_+ \psi_+(r), \quad (2)$$

(2)式中, $V_H(r)$ 是正电子所受的 Hartree 势, 即正电子所受的由电子所产生的势能, V_{nuc} 指正电子所受的由原子实产生的势能, $u(n_e)$ 是正电子-电子交换关联能, 它是电子密度的函数, 对其处理

* 国家自然科学基金(批准号:10675115)资助的课题.

[†] E-mail: xiongtao@mail.ustc.edu.cn

方式的不同,就形成不同的理论框架. 目前主要有 3 种框架——局域密度近似 (local density approximation, 简记为 LDA)^[20], 广义梯度近似 (generalized gradient approximation, 简记为 GGA)^[21], 加权密度近似 (weighted density approximation, 简记为 WDA)^[21,22]. 本文在计算正电子总势能时,采用 LDA 框架处理正电子与电子的交换关联势. 获得正电子总势能后,正电子的波

函数就可以由(2)式计算出,具体的计算,可以采用下述两种方法.

2. 1. FDM

这种方法是基于离散的 Schrödinger 方程^[23]. 需特别说明的是,在一个网格点上的 Laplace 算符 ∇^2 ,可以用邻近的 6 个网格点的函数值来表示,即正电子波函数可以写成:

$$\psi_{ijk}^{n+1} = \frac{\psi_{i+1,j,k}^n + \psi_{i-1,j,k}^n + \psi_{i,j+1,k}^n + \psi_{i,j-1,k}^n + \psi_{i,j,k+1}^n + \psi_{i,j,k-1}^n}{6 + 2mh^2(V_{ijk} - E^n)}, \quad (3)$$

(3)式中, h 是网格点间距. 正电子波函数经过迭代的过程获得. 本文以 Si 晶体为例,将晶胞分成 $24 \times 24 \times 24$ 网格点,能量收敛精度为 10^{-6} eV.

2. 2. PW

正电子入射到固体中,最后与电子湮灭成光子,绝大部分正电子是与外层电子湮灭,极少部分与核心电子湮灭(从下面的计算结果也可看出)^[24],正电子的行为与自由的正电子行为相似^[19],所以我们可以将正电子的波函数用平面波展开:

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = 1/\sqrt{N\Omega_c} \sum_{\mathbf{K}} C_{nk}(\mathbf{K}) \times \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{K})\mathbf{r}], \quad (4)$$

其中 Ω_c 是晶胞体积, $1/\sqrt{N\Omega_c}$ 是归一化系数. 将(4)式代入(2)式,经过计算可得:

$$\sum_{\mathbf{K}'} [A\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} + V(\mathbf{K} - \mathbf{K}')] C_{nk}(\mathbf{K}) = 0, \quad (5)$$

其中, $A = (\mathbf{k} + \mathbf{K})^2/2 - E_n(\mathbf{k})$, $V(\mathbf{K} - \mathbf{K}')$ 为正电子势能的 Fourier 变换. 解这个矩阵,得到系数 $C_{nk}(\mathbf{K})$,从而得到正电子波函数. 本文对 Si 晶体的计算中,使用了 300 多个平面波进行计算.

获得正电子波函数后,它的绝对值的平方即是正电子密度分布.

3. 计算结果

单晶 Si 是金刚石结构,属立方晶系. 计算时将晶胞分成 $24 \times 24 \times 24$ 网格点. 理论上讲,网格点分得越多,计算精度越大,当然所需计算时间也越多. 从我们的计算情况来看, $24 \times 24 \times 24$ 网格点的计算

情况已经足够好,与 $50 \times 50 \times 50$ 计算结果接近,而且计算时间要比 $50 \times 50 \times 50$ 的情况少很多. 计算所用参数如表 1 所示.

表 1 晶体 Si 的晶格常数与高频介电常数

物理量	参数
晶格常数/ \AA	5.43088 ^[25]
高频介电常数	12.0 ^[26]

计算得到的正电子波函数的绝对值的平方,即为正电子在晶体中的密度分布. 图 1 给出了正电子在晶体 Si 中 $\langle 100 \rangle$ 方向上的密度分布. 图 1(a) 是有限差分方法计算得到的结果,图 1(b) 是平面波方法计算得到的结果.

计算得到正电子密度后,正电子寿命就可算出^[24],计算结果见表 2.

表 2 计算所得的 Si 晶体中正电子体寿命(单位:ps)

来源	数值
FDM	224
PW	223
文献理论值	214 ^[27]
文献实验值	218 ^[28]
本文实验值	220

上表中,本文实验结果可靠性较大,因为我们实验时,仪器的分辨率是 216 ps,实验总计数 200 多万. 从表 2 可以看出,计算结果与我们实验结果符合得很好. 但无论是与其他文献的计算或实验比较,还是与我们的实验值比较,计算结果都偏大. 这是因为我们在计算时,假设正电子只与外层电子湮灭,而忽视了与内层电子的湮灭,所以使得计算所得的正电子湮灭率偏小,从而计算的正电子体寿命稍微偏大.

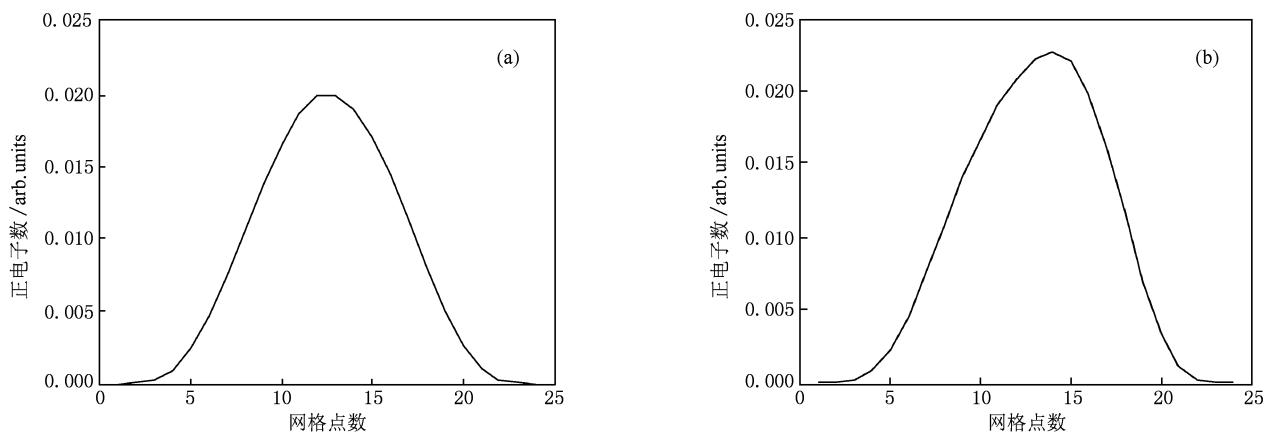


图1 $\langle 100 \rangle$ 方向上正电子密度分布 (a)FDM 计算结果,(b)PW 计算结果. 因为将晶胞分成 $24 \times 24 \times 24$ 网格点,所以,图中横坐标代表网格点数,而纵坐标代表正电子数,这里的正电子数已经归一化

4. 讨 论

FDM 和 PW 这两种计算方法都是解正电子波函数的常用方法,各有其优点和缺点. FDM 的优点是:无论是计算正电子自由态基态波函数还是束缚态基态波函数,其计算速度都较快,所以用来计算正电子体寿命或缺陷寿命比较方便,但在计算正电子能带方面就非常繁琐. PW 的优点是:在解决正电子自由态波函数时,所用平面波数目可以较少(大约 100 多个就够了,我们用了 300 多个),故计算时间可以较少;但是在计算正电子束缚态波函数时,所用平面波数目较多,计算时间大大增加,所以这种方法可以方便地计算正电子体

寿命,而计算束缚态寿命时就不是很方便. 这种方法的另一个优点就是能方便地计算正电子能带.

5. 结 论

本文以单晶 Si 为例,给出了由 FDM 与 PW 两种方法计算得到正电子波函数,继而得到正电子密度分布,然后由计算得到的正电子密度,计算出正电子体寿命,并与我们最近的实验结果符合得很好,说明这两种方法能很好地求解正电子在单晶固体中的波函数. FDM 能很好地用于正电子体寿命、空位寿命等的计算,而 PW 能方便地计算正电子体寿命、正电子能带等.

- [1] Schultz P J, Lynn K G 1988 *Rev. Mod. Phys.* **60** 701
- [2] Barbiellini B, Puska M J, Korhonen T, Harju A, Torsti T, Nieminen R M 1996 *Phys. Rev. B* **53** 16201
- [3] Hakkinen H, Makinen S, Manninen M 1990 *Phys. Rev. B* **41** 12441
- [4] Sterne P A, Kaiser J H 1991 *Phys. Rev. B* **43** 13892
- [5] Barbiellini B, Puska M J, Korhonen M, Harju A, Torsti T, Nieminen R M 1996 *Phys. Rev. B* **53** 16201
- [6] Puska M J 1991 *J. Phys.: Condens. Matter* **3** 3455
- [7] Chen X L, Xi C Y, Ye B J, Weng H M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** (in Chinese) 6695 [陈祥磊, 郗传英, 叶邦角, 翁惠民 2007 物理学报 **56** 6695]
- [8] Chen X L, Kong W, Weng H M, Ye B J 2008 *Acta Phys. Sin.* 3271 (in Chinese) [陈祥磊, 孔伟, 翁惠民, 叶邦角 2008 物理学报 **57** 3271]
- [9] Soudini B, Bensaad Z, Abid H, Doui-Aici M 2003 *Mater. Chem. Phys.* **80** 6
- [10] Benosman N, Amrane N, Mecabih S, Aourag H 2000 *Mater. Chem. Phys.* **61** 1727
- [11] Amrane N 2009 *Mater. Chem. Phys.* **114** 283
- [12] Hodges C H, Stott M J 1973 *Phys. Rev. B* **7** 73
- [13] Makhov D V, Lewis L J 2005 *Phys. Rev. B* **71** 205215
- [14] Barbiellini B, Genoud P, Jarlborg T 1991 *J. Phys.: Condens. Matter* **3** 7631
- [15] Gupta R P, Siegel R W 1980 *Phys. Rev. B* **22** 4572
- [16] Puska M J, Nieminen R M 1994 *Rev. Mod. Phys.* **66** 841
- [17] Nieminen R M, Puska M J 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 281
- [18] Boronski E, Nieminen R M 1986 *Phys. Rev. B* **34** 3820
- [19] Tang Z, Hasegawa M, Nagai Y, Saito M, Kawazoe Y 2002 *Phys. Rev. B* **65** 045108

- [20] Daniuk S, Sob M, Rubaszek A 1991 *Phys. Rev. B* **43** 2580
- [21] Rubaszek A, Szotek Z, Temmerman W M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 11285
- [22] Rubaszek A, Szotek Z, Temmerman W M 2000 *Phys. Rev. B* **61** 10100
- [23] Puska M J, Nieminen R M 1984 *Phys. Rev. B* **29** 5382
- [24] Puska M J, Corbel C 1988 *Phys. Rev. B* **38** 9874
- [25] Hubbard C R, Swanson H E, Mauer F A 1975 *J. Appl. Crystallogr.* **8** 45
- [26] Puska M J, Makinen S, Manninen M, Nieminen R M 1989 *Phys. Rev. B* **39** 7666
- [27] Panda B K, Brauer G, Skorupa W 2000 *Phys. Rev. B* **61** 15
- [28] Fuhs W, Holzhauer V, Mantl S, Richter F W, Sturm R 1978 *Phys. Status Solidi B* **89** 69

Calculation of positron wave function in the single crystal solid*

Xiong Tao[†] Zhang Jie Chen Xiang-Lei Ye Bang-Jiao Du Huai-Jiang Weng Hui-Min

(Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

(Received 23 January 2010; revised manuscript received 5 February 2010)

Abstract

In this paper, we first introduce two basic methods for calculating the positron wave function: the finite differential method and the plane wave method (PW). Then taking Si as an example, we calculate the positron wave function from the wave function, and get the positron density distribution in silicon. Then we obtain the bulk positron lifetime from the positron density. The calculation result agrees with our latest experimental result of 220 ps. At last, we discuss the respective advantages and disadvantages of the two methods.

Keywords: positron, wave function

PACC: 7870B

* Project supported the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10675115).

[†] E-mail: xiongtao@mail.ustc.edu.cn