

用不变本征算符法求晶面吸附原子的振动模

张科 范承玉 范洪义

Invariant eigen-operator calculated vibration mode of lattice in the case of absorbing an atom onto crystal surface

Zhang Ke Fan Cheng-Yu Fan Hong-Yi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 170301 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20180469

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20180469>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I17>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[半无限深势阱中自旋相关玻色-爱因斯坦凝聚体的量子反射与干涉](#)

Quantum reflection and interference of spin-dependent Bose-Einstein condensates in semi-infinite potential wells

物理学报.2017, 66(23): 230301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.230301>

[横场中具有周期性各向异性的一维 XY 模型的量子相变](#)

Quantum phase transitions of one-dimensional period-two anisotropic XY models in a transverse field

物理学报.2017, 66(18): 180302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.180302>

[采用密度泛函理论与分子动力学对聚甲基丙烯酸甲酯双折射性的理论计算](#)

Theoretical calculation of the birefringence of poly-methyl methacrylate by using the density functional theory and molecular dynamics method

物理学报.2016, 65(21): 210301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.210301>

[二项-负二项组合光场态的光子统计性质及其在量子扩散通道中的生成](#)

Statistical properties of binomial and negative-binomial combinational optical field state and its generation in quantum diffusion channel

物理学报.2015, 64(8): 080303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.080303>

[相空间中对量子力学基本对易关系的积分变换及求 Wigner 函数的新途径](#)

An integral-transformation corresponding to quantum mechanical fundamental commutative relation and its application in deriving Wigner function

物理学报.2015, 64(5): 050301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.050301>

## 用不变本征算符法求晶面吸附原子的振动模\*

张科<sup>1)2)3)</sup> 范承玉<sup>1)†</sup> 范洪义<sup>2)</sup>

1) (中国科学院安徽光学精密机械研究所, 中国科学院大气光学重点实验室, 合肥 230031)

2) (中国科学技术大学研究生院科学岛分院, 合肥 230031)

3) (淮南师范学院电子工程学院, 淮南 232038)

(2018年3月17日收到; 2018年5月20日收到修改稿)

晶体表面的扩散和缺陷对晶体振动模式的影响是表面物理学研究的一个重要和基本的课题. 晶格振动的频率对应于系统的能带. 由于晶格中原子的振动不是孤立的, 并且晶格具有周期性, 所以在晶体中形成格波. 格波代表晶体中所有原子都参与的频率相同的振动, 又常称为一种振动模. 本文讨论在表面吸附位势系数  $\beta_0$  与晶体内部原子的周期位势系数  $\beta$  不同的情况下, 晶体表面吸附一个质量为  $m_0$  (与晶格原子质量  $m$  不同) 的原子以后晶格的振动模. 采用不变本征算符方法, 严格地导出此振动模为  $\omega = \sqrt{\frac{2\beta(1 - \cosh \alpha)}{\hbar m}}$ , 其中  $\alpha = \ln \left[ -\frac{m\beta_0 + m_0(-2\beta + \beta_0) + \sqrt{\beta_0} \sqrt{-4mm_0\beta + (m + m_0)^2\beta_0}}{2m_0\beta} \right]$ . 此结果表明,  $\omega$  不但取决于吸附位势与吸附原子的质量, 也与晶格原子的质量与内位势有关.

关键词: 振动模, 表面吸附位势, 不变本征算符

PACS: 03.65.-w, 42.50.-p, 63.20.-e

DOI: 10.7498/aps.67.20180469

## 1 引言

固体物理学主要研究固体的物理性质、微观结构、固体中各种粒子运动形态和规律以及晶体的振动模<sup>[1]</sup>. 从理论体系来看, 包括微观理论与宏观理论: 一方面在原子、分子水平上运用经典理论和量子理论研究固体表面的组成, 原子结构及输运现象、电子结构与运动及其对表面宏观性质的影响等; 另一方面在宏观尺度上, 从能量的角度研究一系列的表面与界面现象, 在实验的基础上建立对应的基本方程<sup>[2,3]</sup>. 近年来, 由于各种功能器件的发展, 促进了关于半导体陶瓷等各种功能材料表面与界面的研究; 又由于各种新型复合材料的发展, 对表面与界面的研究提出了新的课题. 因此, 关于各种材料表面与界面物理、化学性质的研究, 已成为当前

高科技尖端科学领域中的重要组成部分, 是一个急待开发的方向<sup>[4,5]</sup>.

表面物理与界面物理学的一个基本问题是晶体表面吸附一个原子以后晶格振动的变化情况<sup>[6]</sup>. 晶格振动是指晶体中的原子在做集体振动, 其振动的频率对应于系统的能级差(能带). 由于晶体原子间的相互作用, 原子的振动不是孤立的, 且晶格具有周期性, 并以波的形式在晶体中传播, 形成所谓的格波. 一个格波表示晶体所有原子都参与的频率相同的(简谐)振动, 常称为一种振动模. 晶体振动模的研究一直受到国内外学者的广泛关注. 中国科学技术大学基础物理中心的蒋最敏等<sup>[7]</sup>利用解动力学矩阵的方法计算了硅(111)面不同层数体系的所有表面振动模. 福州大学物理系的洪水力<sup>[8]</sup>根据分子晶体的特征, 应用空间群商群与点群同形原理, 并配合结构分析方法, 直接对  $\text{RbC}_8\text{H}_5\text{O}_4$  晶体

\* 安徽高校省级自然科学基金项目(批准号: KJ2014A236)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: cyfan@aiofm.ac.cn

中的内振动模按不可约表示相容关系进行对称性分类. 华中理工大学物理系安忠等<sup>[9]</sup>从计及了链间相互作用项的 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型出发, 讨论了相邻两条链间电子跃迁对反式聚乙炔中孤子能谱及孤子附近的局域振动模的影响. 浙江大学的李宏年等<sup>[10]</sup>对单层纳米碳管振动模的拉曼光谱进行了详细研究, 测量了单层纳米碳管的一级、二级拉曼光谱, 通过与理论值对照, 对这些谱线做了初步标定. 河北师范大学物理学院的谢尊等<sup>[11]</sup>基于扩展的二维 SSH 模型, 研究了库仑钉扎作用对聚噻吩中双空穴极化子附近的局域振动模的影响. Jumeau 等<sup>[12]</sup>对低密度聚乙烯中特定的自由基 CH<sub>2</sub> 的拉曼振动模式进行了详细研究, 确定了不同的非晶和结晶拉曼匹配. 晶格振动模的一般求解方法是以牛顿运动学方程为基础写出晶格的振动方程, 而后根据周期性条件设其有行波解代入求解<sup>[13-15]</sup>. 但是, 该方法在有表面杂质的情况下不适用, 以至于在表面吸附位势系数  $\beta_0$  与晶体内部周期位势系数  $\beta$  不同的情况下, 晶体表面吸附一个质量为  $m_0$  (与晶格原子质量  $m$  不同) 的原子以后晶格的振动模一直未见文献报道. 本文采用文献<sup>[16, 17]</sup>中提出的不变本征算符方法, 严格地推导出了这种吸附情形下晶体振动模的详细表达式, 并讨论了振动模与吸附原子质量和晶体内位势的变化关系. 本文所用方法简洁明了, 无需涉及系统的具体量子态和波函数.

## 2 不变本征算符方法

不变本征算符<sup>[18,19]</sup>(invariant eigen-operator, IEO)方法来源于量子力学的 Schrödinger 方程与 Heisenberg 方程的和谐<sup>[20,21]</sup>. Schrödinger 把  $i\hbar \frac{d}{dt}$  和哈密顿算符  $H$  看成等价, 因此在很多参考文献里  $i\hbar \frac{d}{dt}$  被称为 Schrödinger 算子. Schrödinger 方程为

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi = H\psi. \quad (1)$$

对于一个不显含时间的哈密顿量  $H \left( \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \right)$ , 其定态 Schrödinger 方程为  $H\psi = E\psi$ . 在 Heisenberg 表象中时, 一个力学量算符  $O_e$  的时间演化受 Heisenberg 方程支配, 即

$$i\hbar \frac{d}{dt} O_e = [O_e, H]. \quad (2)$$

如果算符  $\hat{O}$  满足

$$[O_e, H] = \lambda O_e, \quad (3)$$

则有

$$i\hbar \frac{d}{dt} O_e = \lambda O_e. \quad (4)$$

方程(4)可以看作是和能量本征态方程(1)“平行”的方程, 换句话说, 算符  $O_e$  在  $i\hbar \frac{d}{dt}$  的作用下是“不变量”. 这样, 如果算符  $O_e$  满足(3)式, 就称它为系统的一个“一阶”不变本征算符. 在波函数的定态本征方程中, 本征值  $E$  即代表系统的能量. 而在引入的算符本征方程中, 本征值  $\lambda$  与系统哈密顿量的本征能谱有密切关系, 它对应的是系统的能级差.

为了说明这一点, 假设  $\{|\phi_i\rangle\}$  是哈密顿量  $H$  的本征态集合, 且构成 Hilbert 空间的完备集.  $|\phi_a\rangle$  和  $|\phi_b\rangle$  是其中任意两个相邻的非简并本征态, 对应的能量本征值分别为  $E_a$  和  $E_b$ , 即

$$H|\phi_a\rangle = E_a|\phi_a\rangle, H|\phi_b\rangle = E_b|\phi_b\rangle. \quad (5)$$

再根据(3)式有

$$\begin{aligned} & {}_a\langle\phi|[O_e, H]|\phi_b\rangle \\ &= {}_a\langle\phi|(O_e H - H O_e)|\phi_b\rangle \\ &= (E_b - E_a) {}_a\langle\phi|O_e|\phi_b\rangle = \lambda {}_a\langle\phi|O_e|\phi_b\rangle. \end{aligned} \quad (6)$$

由于  $O_e$  是非零算符, 必然存在  $|\phi_a\rangle$  和  $|\phi_b\rangle$  使得  ${}_a\langle\phi|O_e|\phi_b\rangle \neq 0$ , 于是

$$\lambda = E_b - E_a = \Delta E, \quad (7)$$

即  $\lambda$  是系统的一个能级差. 例如, 一维谐振子的哈密顿量  $H_1$  为  $H_1 = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$ , 则

$$i\hbar \frac{d}{dt} a = [a, H_1] = \hbar\omega a. \quad (8)$$

所以  $a$  就是一维谐振子的哈密顿量  $H_1$  的“本征算符”, 相应的本征值为  $\omega$ , 也是系统的能级差, 这符合已知量子力学中的结果.

按照(2)式, 当做一次微商  $\frac{d}{dt}$  还不满足算符方程的话, 就再做第二次微商并再用海森伯方程, 若能下式成立,

$$\left( i\hbar \frac{d}{dt} \right)^2 O_e = [[O_e, H], H] = \lambda O_e, \quad (9)$$

此时  $O_e$  称为“二阶”不变本征算符. 由于  $\left( i\hbar \frac{d}{dt} \right)^2$  对应于  $H^2$ , 所以  $\sqrt{\lambda}$  就是两个相邻能级间的能隙.

用类似于(6)式的证法可以说明这一点,即

$$\begin{aligned} & {}_a\langle\phi|[[O_e, H], H]|\phi\rangle_b \\ &= {}_a\langle\phi|(O_e H^2 - 2HO_e H + H^2 O_e)|\phi\rangle_b \\ &= (E_b - E_a) {}_a\langle\phi|O_e|\phi\rangle_b = \lambda {}_a\langle\phi|O_e|\phi\rangle_b. \end{aligned} \quad (10)$$

当矩阵元  ${}_a\langle\phi|O_e|\phi\rangle_b \neq 0$ , 两个态的能量间隔为  $E_b - E_a = \sqrt{\lambda}$ .

对一个系统的哈密顿量  $H$ , 事先选定算符  $O_e$  作为这个系统的不变本征算符, 按照(3)式从一阶开始做试探计算, 若做一次对易子就有  $[O_e, H] = \lambda O_e$ , 那么该体系的能隙就是  $\lambda$ , 若做一次和二次都不满足算符方程, 当做  $n$  次对易计算后有

$$\left(i\hbar \frac{d}{dt}\right)^n O = [[O, H], H] \cdots, H = \lambda O, \quad (11)$$

那么该系统的能隙为  $\sqrt[n]{\lambda}$ . 另外, 若二次计算后  $O_e$  还不满足算符方程, 也许应选取其他的算符  $O'_e$  作为本征算符再做试探.

借助 IEO 方法, 充分利用海森伯方程, 则无须涉及系统的具体量子态和波函数, 就可以简捷方便地得到某些量子系统的能量本征值. 对于固体物理中有复杂周期结构的哈密顿量, 用 IEO 方法求系统的准粒子谱颇为有效.

### 3 吸附原子的晶面作为半无限原子链系统的振动模

图1所示是一个半无限原子链系统, 一边无限延伸, 另一边吸附一个原子, 质量为  $m_0$ , 它不同于原子链中的原子质量  $m$ , 只考虑相邻原子之间的相互作用, 吸附原子的作用系数为  $\beta_0$ , 内部作用系数为  $\beta$ .

如图1所示, 吸附原子后晶格的哈密顿量为 [22,23]

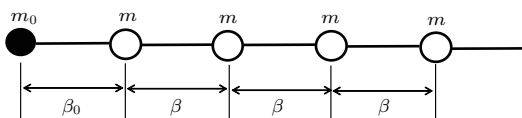


图1 吸附原子、吸附常数不同于晶体内部的半无限原子链模型

Fig. 1. The adatom and adsorption constant are different from those within the crystal of the semi-Infinite atomic chain model.

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m_0} p_0^2 + \frac{1}{2m} \sum_{n=1}^{\infty} p_n^2 + \frac{\beta_0}{2} (x_0 - x_1)^2 \\ &+ \frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (x_n - x_{n+1})^2, \end{aligned} \quad (12)$$

其中  $P_0$  是吸附原子的动量,  $P_n$  为其他原子的动量.

利用量子力学基本对易关系导出:

$$[P_0, H] = -i\hbar\beta_0(x_0 - x_1), \quad (13)$$

$$[x_0, H] = \frac{i}{\hbar m_0} p_0, \quad (14)$$

$$[x_n, H] = \frac{i}{\hbar m} p_n, \quad (15)$$

$$[p_1, H] = -i\hbar\beta_0(x_1 - x_0) - i\hbar\beta(x_1 - x_2), \quad (16)$$

$$[p_n, H] = -i\hbar\beta(2x_n - x_{n+1} - x_{n-1}), \quad (17)$$

以及

$$\begin{aligned} & [[p_0, H], H] \\ &= \frac{P_0\beta_0}{\hbar m_0} - \frac{P_1\beta_0}{\hbar m} = \frac{\beta_0}{\hbar} \left( \frac{P_0}{m_0} - \frac{P_1}{m} \right), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} & [[p_1, H], H] \\ &= \frac{\beta_0}{\hbar m} p_1 - \frac{\beta_0}{\hbar m_0} p_0 + \beta \left( \frac{p_1}{\hbar m} - \frac{p_0}{\hbar m} \right), \end{aligned} \quad (19)$$

$$[[p_n, H], H] = \frac{\beta}{\hbar m} (2p_n - p_{n+1} - p_{n-1}). \quad (20)$$

设不变本征算符的形式为

$$O = \eta p_0 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\alpha} p_n, \quad (21)$$

其中  $\eta, \alpha$  为待定, 代入本征算符方程得到

$$\begin{aligned} \hbar\lambda O &= [[O, H], H] \\ &= \left[ \left[ \eta p_0 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\alpha} p_n, H \right], H \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

利用上述对易关系, (22) 式化为

$$\begin{aligned} \hbar\lambda O &= \eta \frac{\beta_0 p_0}{m_0} - \eta \frac{\beta_0 p_1}{m} \\ &+ e^{-\alpha} \left( \frac{\beta_0 p_1}{m} - \frac{\beta_0 p_0}{m_0} + \frac{\beta p_1}{m} - \frac{\beta p_2}{m} \right) \\ &+ \sum_{n=2}^{\infty} e^{-n\alpha} \frac{\beta}{m} (2p_n - p_{n+1} - p_{n-1}), \end{aligned} \quad (23)$$

其中,

$$\begin{aligned} & \sum_{n=2}^{\infty} e^{-n\alpha} \frac{\beta}{m} p_{n-1} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(n+1)\alpha} \frac{\beta}{m} p_n \end{aligned}$$

$$= \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\beta}{m} e^{-(n+1)\alpha} p_n + e^{-2\alpha} p_1, \quad (24)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{n=2}^{\infty} e^{-n\alpha} \frac{\beta}{m} p_{n+1} \\ &= \sum_{n=3}^{\infty} e^{-(n-1)\alpha} \frac{\beta}{m} p_n \\ &= \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\beta}{m} e^{-(n-1)\alpha} p_n - e^{-\alpha} p_2. \end{aligned} \quad (25)$$

将(24)和(25)式代入(23)式得到:

$$\begin{aligned} \hbar\lambda O &= \frac{\beta_0}{m_0}(\eta - e^{-\alpha})p_0 + e^{-\alpha} \frac{\beta_0 p_1}{m} - \eta \frac{\beta_0 p_1}{m} \\ &+ e^{-\alpha} \frac{\beta p_1}{m} + \sum_{n=2}^{\infty} e^{-n\alpha} \frac{\beta}{m} 2p_n \\ &- \sum_{n=3}^{\infty} e^{-(n-1)\alpha} \frac{\beta}{m} p_n - \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(n+1)\alpha} \frac{\beta}{m} p_n \\ &= \frac{\beta_0}{m_0}(\eta - e^{-\alpha})p_0 \\ &+ \left[ \beta_0 \left( \frac{e^{-\alpha}}{m} - \frac{\eta}{m} \right) + \frac{\beta}{m}(e^{-\alpha} - e^{-2\alpha}) \right] p_1 \\ &+ \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\beta}{m} [2e^{-n\alpha} - e^{-(n+1)\alpha} - e^{-(n-1)\alpha}] p_n \\ &= \frac{\beta_0}{m_0} \left( 1 - \frac{e^{-\alpha}}{\eta} \right) \eta p_0 \\ &+ \left[ \frac{\beta_0}{m}(1 - \eta e^{\alpha}) + \frac{\beta}{m}(1 - e^{-\alpha}) \right] e^{-\alpha} p_1 \\ &+ \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\beta}{m} e^{-n\alpha} (2 - e^{-\alpha} - e^{\alpha}) p_n. \end{aligned} \quad (26)$$

比较本征算符的形式(21)式得到

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{\beta_0}{\hbar m_0} \left( 1 - \frac{e^{-\alpha}}{\eta} \right) \\ &= \frac{\beta_0}{\hbar m} (1 - \eta e^{\alpha}) + \frac{\beta}{\hbar m} (1 - e^{-\alpha}) \\ &= \frac{\beta}{\hbar m} (2 - e^{-\alpha} - e^{\alpha}). \end{aligned} \quad (27)$$

所以根据(10)式下的讨论可知, 振动模式为

$$\begin{aligned} \omega &= \sqrt{\lambda} = \sqrt{\frac{\beta}{\hbar m} (2 - e^{-\alpha} - e^{\alpha})} \\ &= \sqrt{\frac{2\beta(1 - \cosh \alpha)}{\hbar m}}. \end{aligned} \quad (28)$$

由(27)式可以连续求出:

$$\begin{aligned} \eta &= \left( 1 - \frac{\beta}{\beta_0} \right) e^{-\alpha} + \frac{\beta}{\beta_0}, \\ \frac{\beta_0}{m_0} \left( 1 - \frac{e^{-\alpha}}{\eta} \right) \end{aligned} \quad (29)$$

$$= \frac{\beta_0}{m} (1 - \eta e^{\alpha}) + \frac{\beta}{m} (1 - e^{-\alpha}). \quad (30)$$

联立解方程(29)和(30)可得:

$$\eta = \frac{m + m_0 - \frac{\sqrt{-4mm_0\beta + (m + m_0)^2\beta_0}}{\sqrt{\beta_0}}}{2m_0}, \quad (31)$$

$$\alpha = \ln \left\{ -\frac{1}{2m_0\beta} [m\beta_0 + m_0(-2\beta + \beta_0) + \sqrt{\beta_0} \sqrt{-4mm_0\beta + (m + m_0)^2\beta_0}] \right\}. \quad (32)$$

## 4 讨 论

1) 当  $\hbar = 1, m \neq m_0, \beta = \beta_0$  时, 代入(32)式, 得到

$$e^{\alpha} = 1 - \frac{m}{m_0}. \quad (33)$$

则系统的振动模式为

$$\omega = \sqrt{\lambda} = \sqrt{\frac{2\beta(1 - \cosh \alpha)}{m}}. \quad (34)$$

又由  $\alpha_0 > 0$  得出

$$\left| 1 - \frac{m}{m_0} \right| = e^{\alpha_0} > 1. \quad (35)$$

由于  $m$  和  $m_0$  都是正数, 上述不等式可以导出  $m > 2m_0$ , 这就是形成稳定振动模的吸附条件.

2) 当  $\hbar = 1, m = m_0, \beta \neq \beta_0$  时, 代入(32)式, 得到

$$e^{\alpha} = -\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 + \varepsilon}, \quad \text{其中 } \varepsilon = \frac{\beta_0 - \beta}{\beta}. \quad (36)$$

则系统的振动模式为

$$\omega = \sqrt{\lambda} = \sqrt{\frac{2\beta}{m} (1 - \cosh \alpha)}. \quad (37)$$

该结论与文献[13—15]的结果完全一致.

为了得出有意义的结果, 有  $|e^{\alpha}| > 1$ . 再代入(36)式, 得到

$$\frac{\beta_0}{\beta} > \frac{4}{3}, \quad (38)$$

这是形成稳定振动模必须的吸附条件.

为了详细研究振动模  $\omega$  与晶体内部原子的势常数  $\beta$ , 晶格原子质量  $m$ 、吸附原子质量  $m_0$  的变化关系, 我们分别绘出了相应的图形.

在图2中, 设定  $\beta_0 = 0.5, m_0 = 1$ , 做出了  $m = 0.1, 0.2, 0.3, 0.7$  四种情况下的晶格振动模  $\omega$  与作用系数  $\beta$  的变化关系. 从图中可以看出: 1) 在  $m_0$  固定的情况下,  $\omega$  随着  $\beta$  的增加而增加, 在  $\beta$  趋向

$\beta_0$  时  $\omega$  趋向无穷大; 2) 对于相同的  $\beta$  值,  $m$  值越大,  $\omega$  值越小.

在图 3 中, 设定  $\beta_0 = 0.5, \beta = 0.1$ , 做出了  $m_0 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.7$  四种情况下的晶格振动模  $\omega$  与晶格原子质量  $m$  的变化关系. 从图中可以看出: 1) 当作用系数  $\beta, \beta_0$  固定,  $\omega$  随着  $m$  的增加而减小, 最终趋于恒定值; 2) 衰减速度以及恒定值的大小随  $m_0$  的增加而降低.

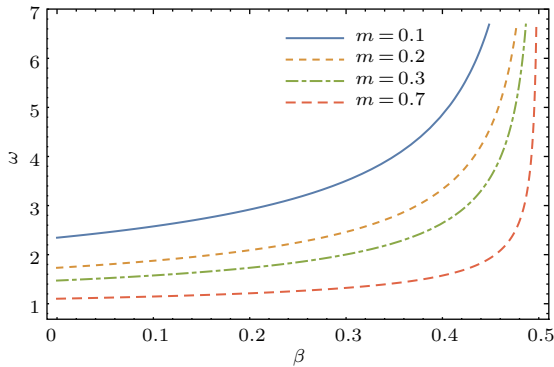


图 2 晶格振动模  $\omega$  随作用系数  $\beta$  的变化

Fig. 2. The relation between lattice vibration mode  $\omega$  and the coefficient  $\beta$ .

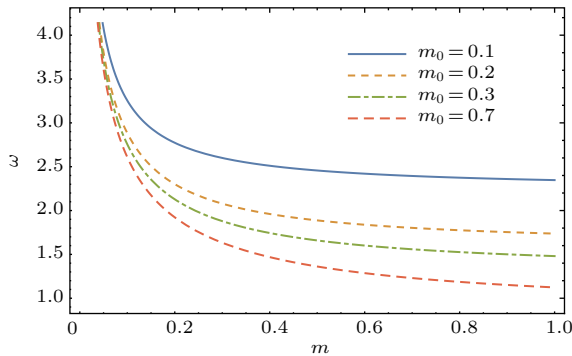


图 3 晶格的振动模  $\omega$  随晶格原子质量  $m$  的关系

Fig. 3. The relation between lattice vibration mode  $\omega$  and lattice atom mass  $m$ .

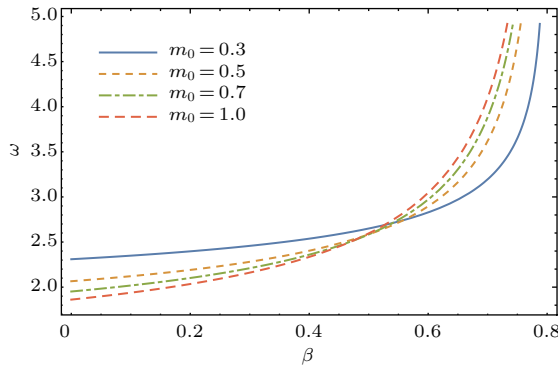


图 4 晶格的振动模  $\omega$  与吸附原子质量  $m_0$  的关系

Fig. 4. The relation between lattice vibration mode  $\omega$  and adsorbing atom mass  $m_0$ .

在图 4 中, 设定  $\beta_0 = 0.8, m = 0.3$ , 做出了  $m_0 = 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$  四种情况下的晶格振动模  $\omega$  与吸附原子质量  $m_0$  的变化关系. 从图中可以发现: 1) 当  $m, \beta_0$  固定时,  $\omega$  随着  $\beta$  的增加而增加, 当  $\beta = \beta_0$  时, 趋向于无穷大; 2) 对于不同的  $m_0$  值, 在  $\beta_0$  取较小值时,  $m_0$  越小  $\omega$  越大; 随着  $\beta_0$  的增大,  $m_0$  越小  $\omega$  越大.

## 5 结 论

采用不变本征算符方法严格推导出了晶体表面吸附一个质量为  $m_0$  (与晶格原子质量  $m$  不同) 的原子以后晶格的振动模, 而且表面吸附势常数  $\beta_0$  与晶体内部势常数  $\beta$  不同, 严格地推导出了振动模的表达式, 并分析了振动模  $\omega$  与晶体内部原子的位势  $\beta$ , 晶格原子质量  $m$ 、吸附原子质量  $m_0$  的变化关系. 发现: 1) 在  $m_0$  固定的情况下,  $\omega$  随着  $\beta$  的增加而增加, 在  $\beta$  趋向  $\beta_0$  时  $\omega$  趋向无穷大; 2) 对于相同的  $\beta$  值,  $m$  值越大,  $\omega$  值越小; 3) 当作用系数  $\beta, \beta_0$  固定,  $\omega$  随着  $m$  的增加而减小, 最终趋于恒定值; 4) 衰减速度以及恒定值的大小随  $m_0$  的增加而降低; 5) 当  $m, \beta_0$  固定时,  $\omega$  随着  $\beta$  的增加而增加, 当  $\beta = \beta_0$  时, 趋向于无穷大; 6) 对于不同的  $m_0$  值, 在  $\beta_0$  取较小值时,  $m_0$  越小  $\omega$  越大; 随着  $\beta_0$  的增大,  $m_0$  越小  $\omega$  越大.

## 参考文献

- [1] Zhu J G 2012 *Solid State Physics* (Beijing: Science Press) p3 (in Chinese) [朱建国 2012 固体物理学 (北京: 科学出版社) 第 3 页]
- [2] Wang Z H 2011 *Material Surface Engineering* (Beijing: Chemical Industry Press) p9 (in Chinese) [王兆华 2011 材料表面工程 (北京: 化学工业出版社) 第 9 页]
- [3] Xu B S, Zhu S H, Liu S C 2014 *Material Surface Engineering Technical* (Beijing: Chemical Industry Press) p11 (in Chinese) [徐滨士, 朱绍华, 刘世参 2014 材料表面工程技术 (北京: 化学工业出版社) 第 11 页]
- [4] Chen H J, Huang S Y, Zhang Z B, Liu Y H, Wang X K 2017 *Acta Chim. Sin.* **75** 560 (in Chinese) [陈海军, 黄舒怡, 张志宾, 刘云海, 王祥科 2017 化学学报 **75** 560]
- [5] Yu Z P, Wang Y, Liu X Y 2012 *Sci. China: Inform. Sci.* **42** 1644 (in Chinese) [余志平, 王燕, 刘晓彦 2012 中国科学: 信息科学 **42** 1644]
- [6] Jiang P 1991 *Physics* **20** 15 (in Chinese) [蒋平 1991 物理 **20** 15]
- [7] Jiang Z M, Wu Z Q 1988 *Acta Phys. Sin.* **37** 629 (in Chinese) [蒋最敏, 吴自勤 1988 物理学报 **37** 629]

- [8] Hong S L 1988 *Acta Phys. Sin.* **37** 1450 (in Chinese) [洪水力 1988 物理学报 **37** 1450]
- [9] An Z, Li Z J, Liu Z L, Yao K L 1994 *Acta Phys. Sin.* **43** 516 (in Chinese) [安忠, 李占杰, 刘祖黎, 姚凯伦 1994 物理学报 **43** 516]
- [10] Li H N, Xu Y B, Li H Y, He P M, Bao S N 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 273 (in Chinese) [李宏年, 徐亚伯, 李海洋, 何丕模, 鲍世宁 1999 物理学报 **48** 273]
- [11] Xie Z, An Z, Li Y C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3922 (in Chinese) [谢尊, 安忠, 李有成 2005 物理学报 **54** 3922]
- [12] Jumeau R, Bourson P, Ferriol M, Lahure F, Ponçot M, Dahoun A 2013 *Int. J. Spectrosc.* **72** 598
- [13] Michelot F 1992 *Phys. Rev. A* **45** 4271
- [14] Fan H Y 1993 *Phys. Rev. A* **47** 2379
- [15] Elliott R J, Gibson A F 1975 *Phys. Today* **28** 58
- [16] Fan H Y, Li C 2004 *Phys. Lett. A* **321** 75
- [17] Ren Y C, Fan H Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 156301 (in Chinese) [任益充, 范洪义 2013 物理学报 **62** 156301]
- [18] Fan H Y, Wu H 2005 *Mod. Phys. Lett. B* **19** 1361
- [19] Fan H Y, Wu H, Yuan H C 2011 *Invariant Eigen-Operator Method in Quantum Mechanics* (Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press) p175 (in Chinese) [范洪义, 吴昊, 袁洪春 2011 量子力学的不变本征算符方法 (上海: 上海交通大学出版社) p175]
- [20] Fan H Y, Wu H, Xu X F 2005 *Int. J. Mod. Phys. B* **19** 4073
- [21] Chen J H, Fan H Y 2010 *Mod. Phys. B* **24** 2387
- [22] Rubin R J 1963 *Phys. Rev.* **131** 964
- [23] Fan H Y, Wu H 2008 *Commun. Theor. Phys.* **49** 50

# Invariant eigen-operator calculated vibration mode of lattice in the case of absorbing an atom onto crystal surface\*

Zhang Ke<sup>1)2)3)</sup> Fan Cheng-Yu<sup>1)†</sup> Fan Hong-Yi<sup>2)</sup>

1) (Key Laboratory of Atmospheric Composition and Optical Radiation, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

2) (Science Island Branch of Graduate School, University of Science and Technology of China, Hefei 230031, China)

3) (School of Electronic Engineering, Huainan Normal University, Huainan 232038, China)

( Received 17 March 2018; revised manuscript received 20 May 2018 )

## Abstract

The influence of diffusion and defects of crystal surface on the crystal vibration mode are an important and basic subject in surface physics research. The frequency of lattice vibration corresponds to the energy band of the system. Since the vibrations of the atoms in the crystal lattice are not isolated from each other, and the crystal lattice is periodic, thereby forming a lattice wave in the crystal. The lattice wave represents that all the atoms in the crystal vibrate at an identical frequency, which is often called a vibration mode. The lattice chain model has been studied as the vibrating mode of phonon and the energy-band in solid state physics. The vibrating modes of the lattice chain model have been analyzed with the Newton equation and the Born-von-Karman boundary condition in the literature. In general, it is difficult to solve this problem due to the complex nonlinear characteristic of the interactions between the matter particles and the environment. Noting the complicity in directly diagonalizing quantum Hamiltonian operator of a long chain, we introduce the invariant eigenoperator method (IEO) for deriving the energy gap of a given crystal lattice without solving its eigenstates in the Heisenberg picture. The Heisenberg equation is as important as the Schrödinger equation. However, it has been seldom used for directly deriving the energy-gap in previous studies. Following the Heisenberg's original idea that most observable physical quantity in quantum mechanics is energy spectrum, Hong-yi Fan, one of the authors of the present paper, developed the IEO method. This method provides a natural result of combining both the Schrödinger operator and the Heisenberg equation. Using the IEO method, we study the vibration modes of crystal lattice, which are affected by absorbing an atom with mass  $m_0$ , which is different from the mass of atom in the crystal. Moreover, the attractive potential constant  $\beta_0$  of the lattice surface differs from the inner constant  $\beta$ . With the help of invariant eigen-operator method, we deduce the vibration mode  $\omega = \sqrt{\frac{2\beta(1 - \cosh \alpha)}{\hbar m}}$ , where  $\alpha = \ln \left[ -\frac{m\beta_0 + m_0(-2\beta + \beta_0) + \sqrt{\beta_0}\sqrt{-4mm_0\beta + (m + m_0)^2\beta_0}}{2m_0\beta} \right]$ . Our numerical results show that vibration mode  $\omega$  depends not only on the absorption potential and the mass of the absorbed atom, but also on the mass of the lattice atom and the inner potential. In general, by discussing the vibration modes via some numerical solutions or approximate methods, we show the relations between the system vibration modes with different parameters which describe the environment influences. These results can deepen our understanding of quantum Brownian motion and demonstrate the applicability of the IEO method.

**Keywords:** vibration modes, surface adsorption potential, invariant eigen-operator

**PACS:** 03.65.-w, 42.50.-p, 63.20.-e

**DOI:** 10.7498/aps.67.20180469

\* Project supported by the Natural Science Foundation of the Anhui Higher Education Institutions of China (Grant No. KJ2014A236).

† Corresponding author. E-mail: [cyfan@aiofm.ac.cn](mailto:cyfan@aiofm.ac.cn)