

再构复层系统的能态

郑 伟 谋

(中国科学院理论物理研究所)

1980 年 2 月 13 日收到

提 要

再构复层系统能态问题已由 Muda 和 Hanawa^[1]作了处理。本文采用对一维链问题行之有效的另一种不同方法,较简捷地推得了相同的结果。

有序再构复层系统的能态,是表面物理中比较重要而典型的一个问题,文献[1]处理了这个问题。本文用不同的方法较简捷地获得了结果。

选取在平行于表面的方向上二维为布洛赫态、在垂直于表面的方向上一维为旺尼尔态的混合轨道表象后,对于给定的晶面波矢 $k_{\parallel}$,复层系统可化为一维链问题来处理,它相当于束缚端半无限链[图 1(a)]。

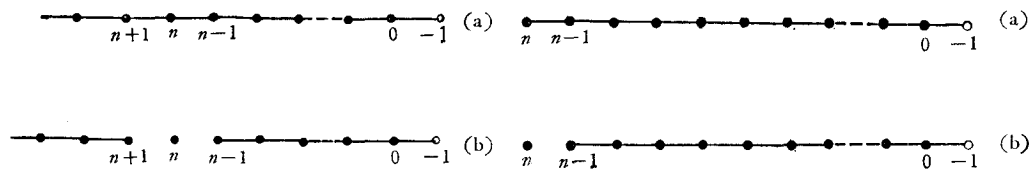


图 1

图 2

自表面开始顺序记链上各格点为 $-1, 0, 1, 2, \dots$, 设 $n+1, n$ 之间及 $n, n-1$ 之间的连接被切断的断链系统[图 1(b)] 为无微扰系统, 半无限链[图 1(a)] 本身取作微扰系统, 相应的格林算符分别记 $g^{(n)}$ 和 $G, g^{(n)}$ 的上角标 (n) 记在第 n 格点两侧断链, 取格点紧束缚轨道为基, 则

$$G_{nn} = g_{nn}^{(n)} + g_{nn}^{(n)}(V_{01}G_{n+1,n} + V_{10}G_{n-1,n}), \quad (1a)$$

$$G_{n+1,n} = g_{n+1,n+1}^{(n)}V_{10}G_{nn}, \quad (1b)$$

$$G_{n-1,n} = g_{n-1,n-1}^{(n)}V_{01}G_{nn}. \quad (1c)$$

以上各矩阵元下角标记格点标, 如 $G_{nm} = \langle n | G | m \rangle$, $|n\rangle, |m\rangle$ 为格点 n 及 m 的紧束缚轨道态, V_{01} 为哈密顿量的 01 矩阵元, 记

$$g_{n+1,n+1}^{(n)} = g_{nn}^{(n-1)} = \dots \equiv G_0, \quad g_{nn}^{(n)} = g_{n-1,n-1}^{(n-1)} = \dots \equiv g_0, \quad V_{01} = V_{10} \equiv \gamma. \quad (2)$$

由 (1a), (1b) 和 (1c) 式, 可解得

$$G_{nn} = [(g_0)^{-1} - G_0\gamma^2 - g_{n-1,n-1}^{(n)}\gamma^2]^{-1}. \quad (3)$$

上式只在 $n \geq 1$ 时成立, $n = 0$ 的情形在下面另作讨论。

以下求 $g_{nn}^{(n+1)}$ 的递推关系. 考虑 -1 至 n 的有限链系统[图 2(a)] 为微扰系统, 相应的无微扰系统取作 $n-1$ 和 n 之间切断的断链系统[图 2(b)]. 为了习惯起见, 重新标记相应的格林算符为 G^I 及 g^I , 于是

$$G_{nn}^I = g_{nn}^I + g_{nn}^I V_{10} G_{n-1,n}^I, \quad G_{n-1,n}^I = g_{n-1,n-1}^I V_{01} G_{nn}^I$$

可解得

$$G_{nn}^I = [(g_{nn}^I)^{-1} - \gamma^2 g_{n-1,n-1}^I]^{-1}.$$

此式用前面所用的符号重新写下, 就是所求的递推关系式, 即

$$g_{nn}^{(n+1)} = [(g_0)^{-1} - \gamma^2 g_{n-1,n-1}^{(n)}]^{-1}. \quad (4)$$

最后讨论 $n=0$ 的情形. 再构复层第一布里渊区是衬底晶面二维第一布里渊区的子区, 即衬底的第一布里渊区是复层的非约化区. 设它含有 m 个复层约化区, 记复层第一区的波矢为 $k_{||}$, 则衬底第一区可表为 $k_{||} + K_h$, K_h 为复层倒格矢, 可取 m 个值 (包括零), 记作 $K_0 (=0), K_1, K_2, \dots, K_{m-1}$. 混合轨道态记作 $|n, k_{||} + K_h\rangle$. 取定 n, n' 和 $k_{||}$ 后, 由算符 A 的矩阵元 $\langle n, k_{||} + K_h | A | n', k_{||} + K_h \rangle$ 构成的 $m \times m$ 矩阵记作 $A_{nn'}$, 单位矩阵记作 I , 作完全类似于得到(3)和(4)式时的推导, 例如此时 (1a) 式写作

$$G_{00} = g_0 I + g_0 (\gamma G_{10} + V_{0,-1} G_{-1,0}), \quad (1a')$$

最后可得

$$G_{00} = g_0 [(1 - g_0^2 \gamma^2) I - g_0 V_{0,-1} g_{-1,-1}^{(0)} V_{-1,0}]^{-1}, \quad (5)$$

$$g_{00}^{(1)} = g_0 [I - V_{0,-1} g_{-1,-1}^{(0)} V_{-1,0}]^{-1}, \quad (6)$$

其中

$$g_{-1,-1}^{(0)} = \langle -1, k_{||} | g^{(0)} | -1, k_{||} \rangle \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}_{m \times m}.$$

至此已导出格林函数的全部关系式, 由之出发可作进一步的讨论.

参 考 文 献

- [1] Y. Muda and T. Hanawa, *Surface Science*, **66**(1977), 145.

ELECTRONIC STATES IN SYSTEMS WITH RECONSTRUCTED OVERLAYERS

ZHENG WEI-MOU

(Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The electronic states in systems with reconstructed overlayers have been treated by Y. Muda and T. Hanawa^[1]. By means of a different method which is very effective for one-dimensional chain problems and through a simpler derivation the same results are obtained.