

态密度的卷积律及维度性¹⁾

赵 宝 华 郑 兆 勃

(东北工学院物理系) (中国科学技术大学物理系)

1986 年 11 月 25 日收到

提 要

本文从统计物理的基本观点出发,给出了不同维度的态密度之间,或系统与子系统的态密度之间,存在卷积规律的比较一般的条件及证明. 并分析了自由粒子和简单立方晶格紧束缚近似模型从一维向二维、三维转变过程中态密度的变化规律.

一、引 言

系统的态密度,描写了系统本征态分布的特性,是反映体系物理性质的最基本的信息之一. 它直接与体系的热力学性质相联系,跃迁过程的几率,散射振幅等也取决于初态与终态的态密度. 因此,人们对态密度进行了大量的研究工作. 但这些研究工作都着眼于研究各种体系态密度本身的特性及它与体系物理性质上的相互联系等. 就我们所知,很少有文献涉及不同体系的态密度之间的联系. 我们总结并提出了态密度的卷积规律^[1]: 对一类量子体系,例如自由电子体系,简单立方晶格紧束缚近似模型等,它们的态密度具有下述规律:

$$\rho_3(E) = \rho_2(E - x) * \rho_1(x), \quad (1)$$

$$\rho_2(E) = \rho_1(E - x) * \rho_1(x), \quad (2)$$

其中*代表卷积积分. $\rho_3(E)$, $\rho_2(E)$, $\rho_1(E)$ 分别表示三维、二维、一维体系的态密度.

这一规律揭示了这类量子体系态密度之间的内在联系. 它不仅把高维体系的态密度由低维体系的态密度表示出来,而且可以用来研究不同维度体系的物理性质的区别与联系.

本文则进一步从统计物理的观点提出了较为一般的卷积规律存在的充分条件,并给出了一般的证明.

近十年来,低维凝聚态物理取得了一系列新的发展. 一、二维凝聚态中的基本相互作用与三维体系是相同的. 但是,低维体系可以具有某些三维体系所没有的现象. 其原因是空间维度性通过运动学或动力学的过程决定了凝聚态的物理性质. 比如,人们已经知道维度决定了低能激发态的态密度,使得一、二、三维体系具有不同的序和相变^[2],但是,人们只注意到了这些态密度的区别,以及由它们导致的物理性质的差异,而利用态密度的

1) 本文是作者们作为访问学者在瑞典林彻平大学物理与测量工程系完成的.

卷积规律却可分析系统由低维向高维的变化过程。而搞清这一变化过程有利于更深入地探讨由低维向高维逐渐转变时系统物理性质发生变化的根据。我们正是从这一思想出发,利用态密度的卷积规律分析了自由粒子和简单立方晶格紧束缚近似模型这两种最常见的基本物理系统的态密度由低维向高维的变化规律。

二、态密度卷积规律的一个充分条件

若一个系统,取其体积为 1,其能量为

$$E = E(x_i, y_j), \quad (3)$$

其中

$$x_i \quad i = 1, 2, 3, \dots, n,$$

$$y_j \quad j = 1, 2, 3, \dots, m$$

均为系统的广义坐标或广义动量。它可分为两个子系统,其能量分别为

$$E_1 = E_1(x_i), \quad E_2 = E_2(y_j), \quad (4)$$

且有

$$E(x_i, y_j) = E_1(x_i) + E_2(y_j), \quad (5)$$

则

$$\rho(E) = \rho_1(E_1) * \rho_2(E_2). \quad (6)$$

证明如下: 由 (4) 和 (5) 式

$$\nabla E = \sum_i \frac{\partial E}{\partial x_i} \hat{x}_i + \sum_j \frac{\partial E}{\partial y_j} \hat{y}_j = \sum_i \frac{\partial E_1}{\partial x_i} \hat{x}_i + \sum_j \frac{\partial E_2}{\partial y_j} \hat{y}_j, \quad (7)$$

$$\nabla E_1 = \sum_i \frac{\partial E_1}{\partial x_i} \hat{x}_i, \quad \nabla E_2 = \sum_j \frac{\partial E_2}{\partial y_j} \hat{y}_j, \quad (8)$$

其中 $\hat{x}_i, \hat{y}_j$ 分别表示 x_i, y_j 方向的单位矢量。由于在系统相空间中 $\hat{x}_i$ 与 $\hat{y}_j$ 是正交的, 所以

$$\nabla E_1 \cdot \nabla E_2 = \sum_{ij} \frac{\partial E_1}{\partial x_i} \frac{\partial E_2}{\partial y_j} \hat{x}_i \cdot \hat{y}_j = 0. \quad (9)$$

这就是说 ∇E_1 与 ∇E_2 是正交的。因此

$$|\nabla E_1|^2 + |\nabla E_2|^2 = \sum_i \left(\frac{\partial E_1}{\partial x_i} \right)^2 + \sum_j \left(\frac{\partial E_2}{\partial y_j} \right)^2 = |\nabla E|^2. \quad (10)$$

用 $\rho(E), \rho_1(E_1), \rho_2(E_2)$ 分别表示原系统和两个子系统的态密度, 则有

$$\rho(E) = \int_{S_E} \frac{dS}{|\nabla E|}, \quad \rho_1(E_1) = \int_{S_{E_1}} \frac{dS_1}{|\nabla E_1|}, \quad \rho_2(E_2) = \int_{S_{E_2}} \frac{dS_2}{|\nabla E_2|}, \quad (11)$$

其中 S_E, S_{E_1}, S_{E_2} 分别表示相空间中能量为 E, E_1 和 E_2 的等能面。则

$$\rho_1(E_1) * \rho_2(E_2) = \int \rho_1(E_1) \rho_2(E_2) dE_2 = \int \rho_1(E - E_2) \rho_2(E_2) dE_2. \quad (12)$$

把 (11) 式代入 (12) 式有

$$\rho_1(E_1) * \rho_2(E_2) = \iint_{S_{E_1}} \frac{dS_1}{|\nabla(E - E_2)|} \int_{S_{E_2}} \frac{dS_2}{|\nabla E_2|} dE_2. \quad (13)$$

必须注意: (1) 在该积分过程中能量 E 为一个常数. 也就是说, 整个积分过程是在能量为 E 的等能面上进行. (2) 由于积分中 E_2 要在整个 $E_2 \leq E$ 的所有可能取值范围内变化, 则 E_1 , 即 $E - E_2$ 也就在 $E_1 \leq E$ 的所有可能取值范围内变化, 因此积分范围实际包括了能量为 E 的各种可能方式, 即该积分不但在能量为 E 的等能面上进行, 而且是在能量为 E 的整个等能面上进行.

以 $dE_{1\perp}$ 和 $dE_{2\perp}$ 分别表示 E_1 和 E_2 等能面法线方向的增量, 则有

$$dE_{1\perp} \perp dE_{2\perp}, \quad (14)$$

又有

$$dE_1 = |\nabla E_1| dE_{1\perp}, \quad dE_2 = |\nabla E_2| dE_{2\perp}, \quad (15)$$

取

$$dE' = \sqrt{(dE_{1\perp})^2 + (dE_{2\perp})^2} = \sqrt{\frac{(dE_1)^2}{|\nabla(E - E_2)|^2} + \frac{(dE_2)^2}{|\nabla E_2|^2}}, \quad (16)$$

由 (5) 式有

$$dE = dE_1 + dE_2. \quad (17)$$

由于积分中 E 为常数, 则有 $dE = 0$, 即

$$dE_1 = -dE_2. \quad (18)$$

代入 (16) 式得

$$dE' = \frac{|\nabla E|}{|\nabla E_1| |\nabla E_2|} dE_2.$$

由此求出 dE_2 , 代入 (13) 式可得

$$\begin{aligned} \rho_1(E_1) * \rho_2(E_2) &= \iint_{S_{E_1}} \frac{dS_1}{|\nabla E_1|} \int_{S_{E_2}} \frac{dS_2}{|\nabla E_2|} \frac{|\nabla E_1| |\nabla E_2|}{|\nabla E|} dE' \\ &= \int \frac{1}{|\nabla E|} \int_{S_{E_1}} dS_1 \int_{S_{E_2}} dS_2 dE'. \end{aligned} \quad (19)$$

取

$$dS = \int_{S_{E_1}} dS_1 \int_{S_{E_2}} dS_2 dE',$$

则 dS 为 $(m+n)-1$ 维的积分元即是 $m+n$ 维相空间中的一个面元. 这样可把 (19) 式写成曲面积分的形式

$$\rho_1(E_1) * \rho_2(E_2) = \int_{S_E} \frac{dS}{|\nabla E|} = \rho(E). \quad (20)$$

这样就证明了态密度的卷积规律.

从这个证明中可以看到: 只要一个系统它可以分为两个子系统, 且在系统与子系统的能量之间满足关系

$$E = E_1 + E_2,$$

且 E_1, E_2 可独立取值, 则该系统的态密度可以表示为这两个子系统的态密度的卷积.

在使用 $\mathbf{k}$ 空间方法求解固体问题时, 能量 E 与波矢 $\mathbf{k}$ 的关系即色散关系. 由这部分

的证明可知,如果色散关系可写成

$$E(\mathbf{k}) = E_1(k_x) + E_2(k_y) + E_3(k_z),$$

则有

$$f(E) = f_1(E_1) * f_2(E_2) * f_3(E_3).$$

其中 $f(E)$, $f_1(E_1)$, $f_2(E_2)$, $f_3(E_3)$ 分别表示能量为 E , E_1 , E_2 , E_3 时的态密度.

再有一个具体例子,即在统计物理中最常见的一类系统. 它们的总能量可写为

$$E = \sum_{i=1}^N A_i x_i^2 \quad (21)$$

的形式. 其中 x_i 表示广义坐标或广义动量. 自由粒子系统和简谐振子系统等都属这一类. 不失一般性,我们可以设 x_i 连续取值. 在系统相空间中很容易求出这类系统的态密度为

$$\rho(E) = \frac{\pi^{N/2} E^{\frac{N}{2}-1}}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right) \prod_{i=1}^N A_i^{1/2}}, \quad (22)$$

其中 E 为该系统的总能量, N 为其相空间的总维数.

$$\Gamma\left(\frac{N}{2}\right) = \int_0^\infty e^{-x} x^{\frac{N}{2}-1} dx$$

是 Γ 函数. 显然,这个系统可将相空间维数分为 L 和 l 的两个子系统. 因此有

$$N = L + l; \quad E = E_1 + E_2, \quad (23)$$

$$E_1 = \sum_{i=1}^L A_i x_i^2; \quad E_2 = \sum_{k=1}^l A_k x_k^2. \quad (24)$$

为了方便,我们可以认为

$$\begin{aligned} x_j &= x_i & i &= 1, 2, 3, \dots, L; & x_k &= x_i & i &= L+1, L+2, \dots, N. \\ A_j &= A_i & & & A_k &= A_i & & \end{aligned}$$

这两个子系统的态密度分别为

$$\rho_1(E_1) = \frac{\pi^{L/2} E_1^{\frac{L}{2}-1}}{\Gamma\left(\frac{L}{2}\right) \prod_{i=1}^L A_i^{1/2}}; \quad \rho_2(E_2) = \frac{\pi^{l/2} E_2^{\frac{l}{2}-1}}{\Gamma\left(\frac{l}{2}\right) \prod_{k=1}^l A_k^{1/2}}. \quad (25)$$

现在讨论它们的卷积:

$$\begin{aligned} \rho_1(E_1) * \rho_2(E_2) &= \int_0^E \rho_1(E - E_2) \rho_2(E_2) dE_2 \\ &= \frac{\pi^{(L+l)/2} E^{(L+l)/2-1}}{\Gamma\left(\frac{L}{2}\right) \Gamma\left(\frac{l}{2}\right) \prod_{i=1}^{L+l} A_i^{1/2}} B\left(\frac{l}{2}, \frac{L}{2}\right), \end{aligned} \quad (26)$$

其中

$$B\left(\frac{l}{2}, \frac{L}{2}\right) = \int_0^1 (1-x)^{\frac{L}{2}-1} x^{\frac{l}{2}-1} dx$$

为 B 函数. 利用 B 函数与 Γ 函数的关系

$$B\left(\frac{l}{2}, \frac{L}{2}\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{l}{2}\right)\Gamma\left(\frac{L}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{l}{2} + \frac{L}{2}\right)},$$

可得

$$\rho_1(E_1) * \rho_2(E_2) = \frac{\pi^{N/2} E^{\frac{N}{2}-1}}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right) \prod_{i=1}^N A_i^{1/2}} = \rho(E). \quad (27)$$

可见这类系统它们的态密度可表示为两个子系统的态密度的卷积。

三、从低维系统向高维系统的过渡

本节利用态密度的卷积规律, 具体分析了自由粒子和简单立方紧束缚近似模型从一维向二维、三维的转变过程中, 态密度的变化情况。

1. 自由粒子

对一维自由粒子, 我们可以视为一维无限深势阱其宽度 $L_1 \rightarrow \infty$ 时的极限。对宽度为 L_1 的一维无限深势阱, 其本征能量为

$$E_{1n} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_1^2}{2mL_1^2} \quad n_1 = 1, 2, 3, \dots,$$

其中 $\hbar = h/2\pi$, m 为粒子质量。为了方便, 可取 $\hbar = 1$, $m = 1$, 则有

$$E_{1n} = \frac{\pi^2 n_1^2}{2L_1^2}. \quad (28)$$

其态密度可写为

$$\rho_1(E_1) = \frac{1}{L_1} \sum_{n_1=1}^{\infty} \delta(E_1 - E_{1n}) = \frac{1}{L_1} \sum_{n_1=1}^{\infty} \delta\left(E_1 - \frac{\pi^2 n_1^2}{2L_1^2}\right). \quad (29)$$

当 $L_1 \rightarrow \infty$ 时, 变数 $n^2/L_1^2 = x$ 为一个连续变量。把上面对 n_1 的求和改为积分有

$$\rho_1(E_1) = \frac{1}{L_1} \int_0^{\infty} \delta\left(E_1 - \frac{\pi^2}{2} x\right) \frac{L_1}{2} \frac{1}{\sqrt{x}} dx = \frac{1}{\sqrt{2} \pi \sqrt{E_1}}. \quad (30)$$

这就是一维自由粒子的态密度^[3]。

对二维自由粒子, 我们可以视为一个在 x 方向宽度为无限大而 y 方向宽度为 L_2 的无限深的势阱中运动的粒子当 $L_2 \rightarrow \infty$ 时的极限情况。而把由一维自由粒子向二维自由粒子的过渡看成是 L_2 由小变大直至无穷的过程。从而分析在这个过程中, 态密度的变化情况。其哈密顿量为

$$H_2 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + V(y), \quad (31)$$

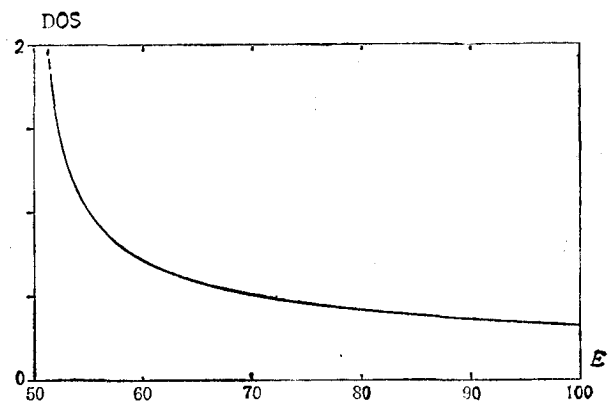
其中

$$\begin{cases} V(y) = 0 & -\frac{L_2}{2} \leq y \leq \frac{L_2}{2}, \\ V(y) = \infty & \text{其它.} \end{cases} \quad (32)$$

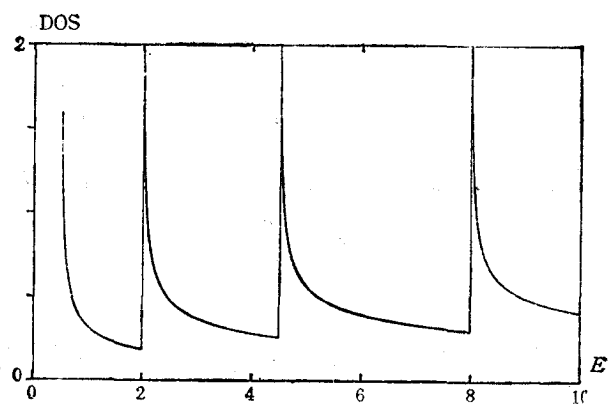
应有

$$E_z = E_1 + E_y, \quad (33)$$

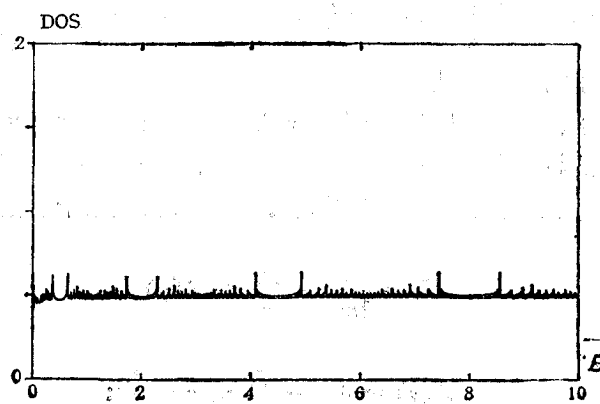
其中 E_z, E_1, E_y 分别表示 $H_z, H_1 = \frac{p_x^2}{2m}$ 和 $H_y = \frac{p_y^2}{2m} + V(y)$ 的本征能量。显然, 该系



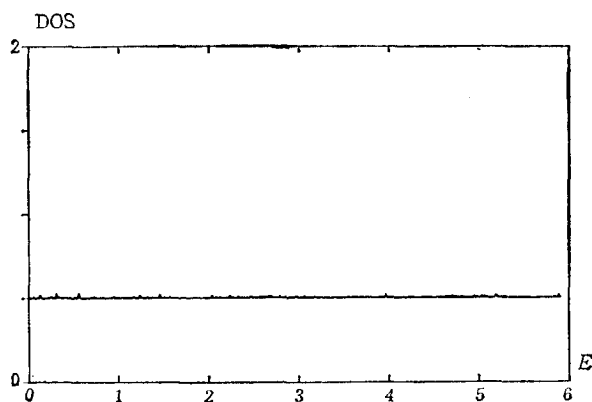
(a) $L_z = 0.1\pi$



(b) $L_z = \pi$



(c) $L_z = 100\pi$

(d) $L_2 = 5000\pi$ 图 1 在宽度为 $L_x = \infty, L_y = L_2$ 的二维无限深势阱中运动的粒子的态密度 (DOS) 随能量 E 变化曲线

统满足态密度卷积规律的使用条件,因此有

$$\rho_2(E_2) = \rho_1(E_1) * \rho_y(E_y) = \rho_1(E_2 - E_y) * \rho_y(E_y), \quad (34)$$

其中 $\rho_1(E_1)$ 表示能量为 E_1 的自由粒子的态密度, $\rho_y(E_y)$ 表示宽度为 L_2 的 y 方向的一维无限深势阱的态密度,则

$$\begin{aligned} \rho_2(E_2) &= \frac{1}{\sqrt{2} \pi L_2} \int \frac{1}{\sqrt{E_2 - E_y}} \sum_{n_y} \delta\left(E_y - \frac{\pi^2 n_y^2}{2L_2^2}\right) dE_y, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2} \pi L_2} \sum_{n_y} \frac{1}{\sqrt{E_2 - \frac{\pi^2 n_y^2}{2L_2^2}}} \quad n_y = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (35)$$

必须注意到 E_2 确定以后,由于 (33) 式的要求,使得对 n_2 的求和不能到无限大,必须满足

$$E_2 \geq \frac{\pi^2 n^2}{2L_2^2}. \quad (36)$$

与前面相同,当 $L_2 \rightarrow \infty$ 时,对 n_2 的求和变为积分,但积分上限必须按 (36) 式来确定. 这样可得

$$\rho_2(E_2) = \frac{1}{2\pi}. \quad (37)$$

这与用其它方法直接求出的二维自由粒子的态密度完全相同^[3]. 但这里给出的 (35) 式却确切地描述了一维自由粒子向二维自由粒子过渡过程中态密度的变化规律. 图 1(a) 至(d) 给出了由 (35) 式直接得到的 L_2 取值分别为 $0.1\pi, \pi, 100\pi, 5000\pi$ 情况下的态密度的曲线. 从图 1 中可以清楚地看出,在 L_2 增大的过程中 $\rho_2(E_2)$ 向二维自由粒子态密度变化的过程.

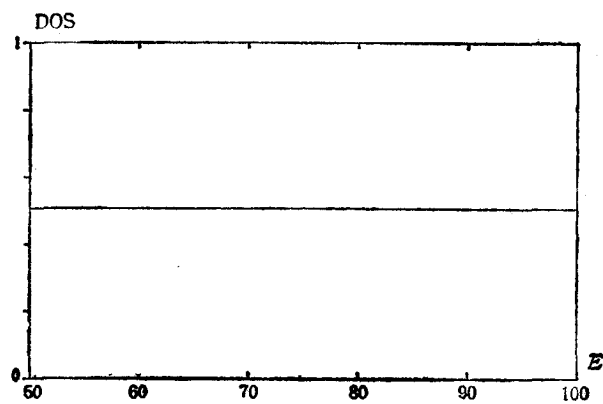
对于由二维自由粒子向三维自由粒子的变化过程,可以做完全类似的讨论. 即把三维自由粒子视为在 x, y 方向宽度为无限大,而 z 方向宽度为 L_3 的无限深势阱中运动的粒子当 $L_3 \rightarrow \infty$ 时的极限. 其哈密顿量为

$$H_3 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + V(z), \quad (38)$$

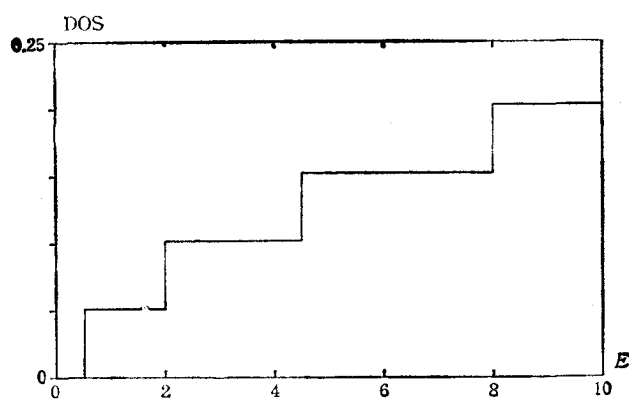
其中

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| < \frac{L_3}{2}; \\ \infty & \text{其它,} \end{cases} \quad (39)$$

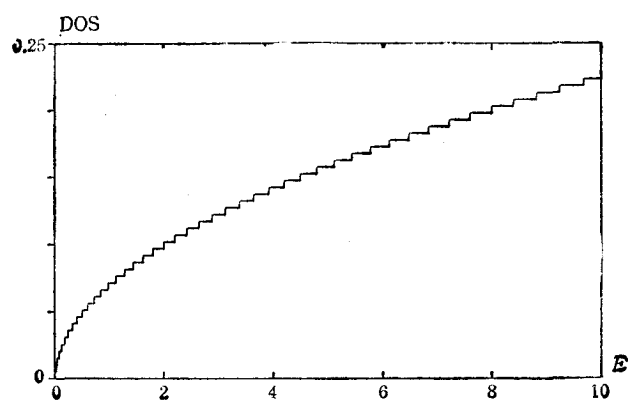
$$E_3 = E_2 + E_z. \quad (40)$$



(a) $L_3 = 0.1\pi$

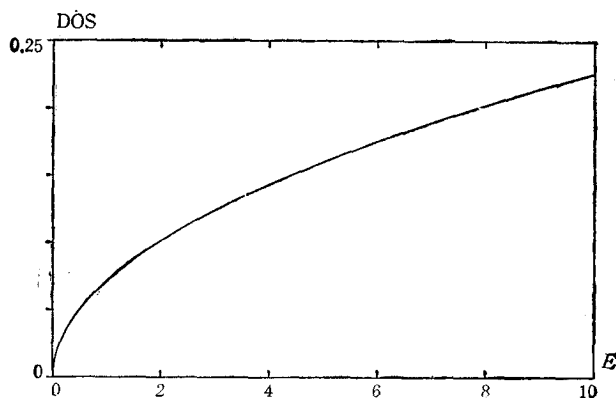


(b) $L_3 = \pi$



$\hbar^2/2m$

(c) $L_3 = 10\pi$

(d) $L_3 = 100\pi$ 图 2 在宽度为 $L_x = L_y = \infty, L_z = L_3$ 的三维无限深势阱中运动的粒子的态密度 (DOS) 随能量 E 变化曲线

$$\begin{aligned}\rho_3(E_3) &= \rho_2(E_2) * \rho_z(E_z) = \rho_2(E_3 - E_z) * \rho_z(E_z) \\ &= \frac{1}{2\pi L_3} \int_0^{E_3} \sum_{n_z} \delta\left(E_z - \frac{\pi^2 n_z^2}{2L_3^2}\right) dE_z, \quad n_z = 1, 2, 3, \dots,\end{aligned}\quad (41)$$

其中 E_3, E_2, E_z 分别表示 $H_3, H_2 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m}$ 和 $H_z = \frac{p_z^2}{2m} + V(z)$ 的本征能量, $\rho_3(E_3), \rho_2(E_2), \rho_z(E_z)$ 分别为相应的态密度, 可得

$$\rho_3(E_3) = \frac{1}{2\pi L_3} \sum_{n_z=1}^N 1. \quad (42)$$

其中 N 为小于 $\frac{L_3}{\pi} \sqrt{2E_3}$ 的最大整数. 当 $L_3 \rightarrow \infty$ 时, 有

$$\rho_3(E_3) = \frac{1}{\sqrt{2} \pi^2} \sqrt{E_3}. \quad (43)$$

这正是三维自由粒子的态密度^[3]. 与前面相同, (42) 式则给出了由二维自由粒子向三维自由粒子过渡过程中的态密度的变化规律的确切描述. 图 2(a) 至 (d) 给出了由 (42) 式直接得出的 L_3 的取值分别为 $0.1\pi, \pi, 10\pi, 100\pi$ 情况下的态密度的曲线.

把图 1(a) 至 (d) 和图 2(a) 至 (d) 的变化过程相比较, 可以清楚地看出由于 (42) 式中不包含发散的因素, 因此使得从二维向三维的过渡情况与从一维到二维的过渡情况之间存在着明显的差异.

2. 简单立方紧束缚近似模型

哈密顿量为

$$H = \sum_i t_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle \langle j|. \quad (44)$$

对于晶格, $t_i = t_0, i = 1, 2, \dots$. 只考虑第一近邻相互作用

$$\begin{cases} t_{ij} = V & i, j \text{ 为第一近邻;} \\ t_{ij} = 0 & \text{其它情况.} \end{cases} \quad (45)$$

在文献[1]中我们已经证明这类体系的态密度满足卷积规律,即

$$\rho_3(E) = \int \rho_2(E-x)\rho_1(x)dx, \quad (46)$$

$$\rho_2(E) = \int \rho_1(E-x)\rho_1(x)dx, \quad (47)$$

其中 $\rho_1(E)$, $\rho_2(E)$, $\rho_3(E)$ 分别为一维、二维、三维体系的态密度.

同样对于 M 条无穷长的链构成的二维多链体系,以及由 M 个无穷大的平面构成的多层面体系,态密度也满足卷积规律,即

$$\rho_{2M}(E) = \int \rho_1(E-x)\rho_{1M}(x)dx, \quad (48)$$

其中 $\rho_{2M}(E)$ 是 M 条一维链体系的态密度.

$$\rho_1(E_i) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{4V^2 - E^2}}, \quad (49)$$

$$\rho_{1M}(E) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \delta(E - E_i). \quad (50)$$

E_i 是矩阵 X 的 M 个本征值. X 为 $M \times M$ 维的矩阵,且

$$X = \begin{bmatrix} t_0 & V & & 0 \\ V & t_0 & V & \\ & V & t_0 & V \\ 0 & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (51)$$

当 M 逐渐由小变大至无穷时可以看出态密度是怎样由一维逐渐向二维转变. 且有

$$\rho_2(E) = \lim_{M \rightarrow \infty} \rho_{2M}(E). \quad (52)$$

同样对 M 个无限大的多层面结构有

$$\rho_{3M}(E) = \int \rho_2(E-x)\rho_{1M}(x)dx. \quad (53)$$

当 M 逐渐由小变大直至无穷时同样可以看出态密度是怎样逐渐向三维转变的. 且有

$$\rho_3(E) = \lim_{M \rightarrow \infty} \rho_{3M}(E). \quad (54)$$

在图 3(a) 至 (c) 中示出了 M 取值为 5, 50, 1000 时由 (48) 式作出的态密度. 在图 4(a) 至 (c) 中示出了 M 取值为 5, 50, 500 时由 (53) 式作出的态密度. 从图 3 和图 4 中可明显看出: 当一维向二维转变时, 态密度是一维态密度与 δ 函数的卷积, 含有 $2M-1$ 个子带有 $2M$ 个 Van Hove 奇异点, 且 Van Hove 奇异点表现为态密度发散. 当 $M \rightarrow \infty$ 时, $2M$ 个 Van Hove 奇异点消失, 转变为二维态密度图, 只剩下三个 Van Hove 奇异点. 其中带边两个表现为态密度一阶微商不连续, 带中一个表现为态密度发散. 这也说明尽管从图上看当 M 足够大时多链体系态密度的背底已具有二维态密度的形态, 但是当

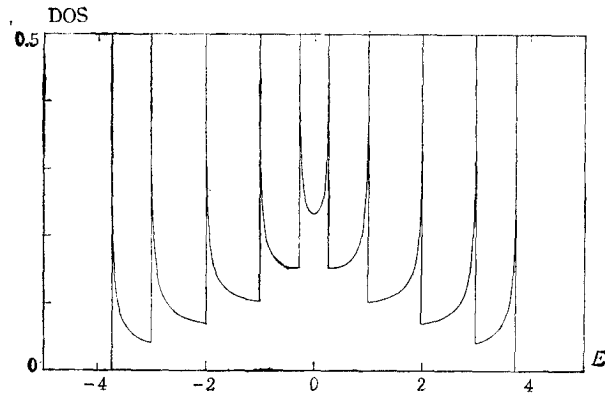
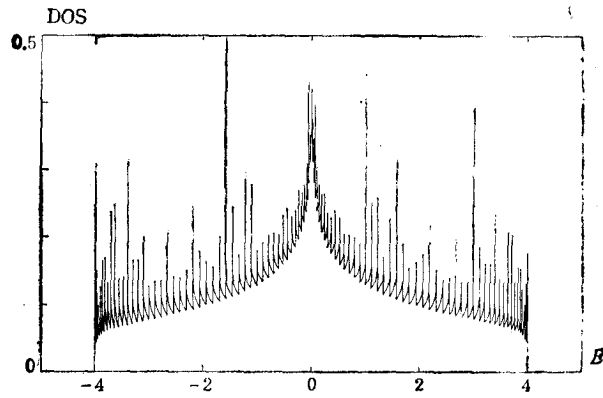
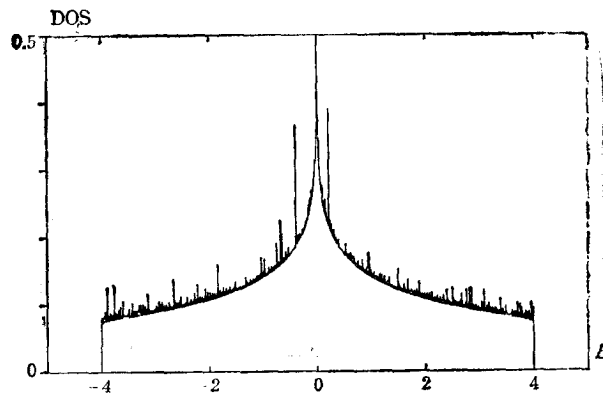
(a) $M = 5$ (b) $M = 50$ (c) $M = 1000$

图3 M 条无限长链的简单立方晶格紧束缚近似模型, 只考虑最近邻相互作用时态密度 (DOS) 随能量 E 变化曲线

$M \rightarrow \infty$ 时才真正发生由一维向二维的转变。同样可以讨论二维到三维的变化, 所不同的是 M 个面的多层体系有 M 个 Van Hove 奇异点表现为态密度发散, 且有 $2M$ 个 Van Hove 奇异点表现为态密度一阶微商不连续。当 $M \rightarrow \infty$ 时转化为三维体系的态密度, 只

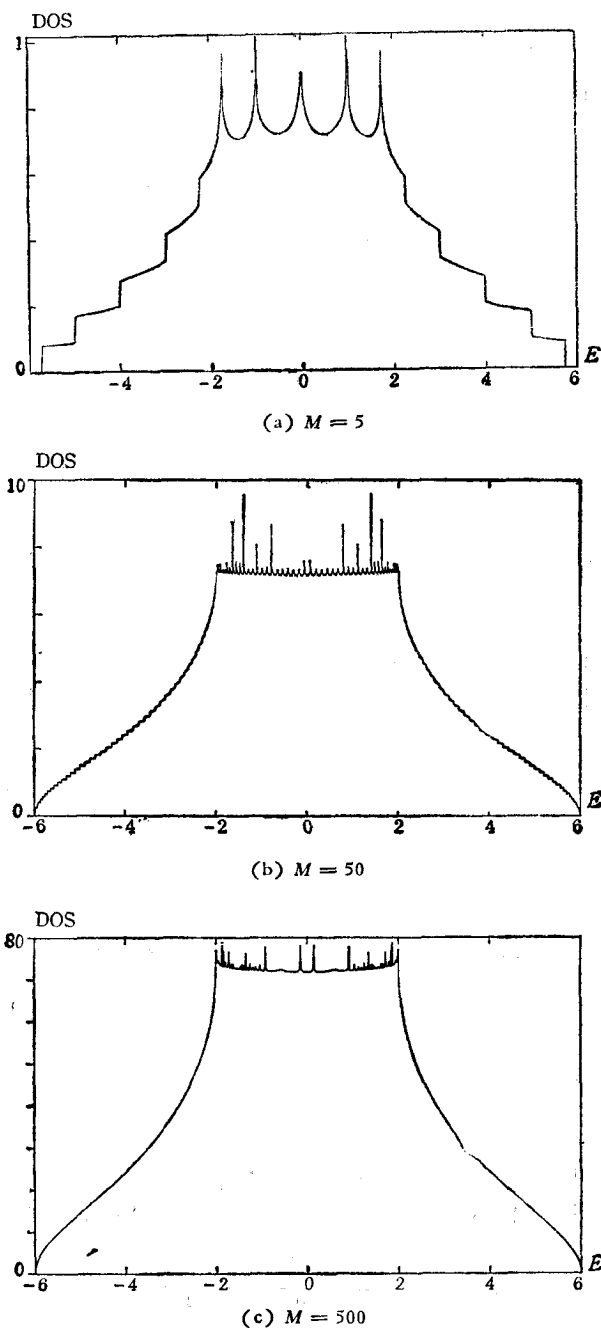


图 4 M 个无限大平面构成的简单立方晶格紧束缚近似模型, 只考虑最近邻相互作用时态密度 (DOS) 随能量 E 变化曲线

有两个 Van Hove 奇异点表现为态密度的一阶微商不连续。

衷心地感谢邀请我们访问瑞典林彻平大学的赵光安教授, 以及该校物理与测量工程系对我们的热情接待和所提供的科研条件。

参 考 文 献

- [1] Zheng Zhao-bo, Zhao Bao-hua, to be published.
- [2] 孙鑫, 物理学进展, 5(1986), 467.
- [3] E. N. Economou, Greens Functions in Quantum Phsics. Spring-Verlag Berlin Heidelberg New York, (1979).

THE CONVOLUTION LAW AND THE DIMENSIONALITY OF THE DENSITY OF STATES

ZHAO BAO-HUA

(Department of Physics, Northeast University of Technology, Shenyang)

ZHENG ZHAO-BO

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

ABSTRACT

From the basic principles of statistical physics, we have obtained the more general conditions that the convolution law of the density of states of the system and its subsystems or that of the high-dimensional system and low-dimensional system is satisfied. We also analysed the transition of densities of states from the 1-dimension to the 3-dimension in the free electron and tight-binding periodic systems.