

非周期势散射波函数分析方法

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)

1987 年 5 月 12 日收到

提 要

本文发展了求解非周期势散射波函数的方法。对散射波函数进行的振幅与位相分析证实了这种方法的有效性。

一、引 言

无序体系的输运特性,例如 0K 电导,直接由非周期势的散射所决定。对单链与多链体系,目前主要有两类研究方法:一类是使用 Kubo 公式计算交流、直流电导^[1,2];另一类是用迁移矩阵方法求出非周期势的总的透射系数、反射系数,然后再由 Landauer 公式计算电阻^[3]。由于电导或电阻直接与体系的特性相关,因而可以研究体系的迁移率边、相图、状态波函数的局域性等问题^[4]。

在使用迁移矩阵方法时,是在所研究的有限长的非周期势两端接上两段半无穷长的周期体系,然后考虑一平面波由负无穷入射到非周期势之后,计算反射系数和总的透射系数。在整个讨论中,把非周期势看成一个“黑盒”,不讨论在非周期势内发生的物理过程。或者说,该方法并没有求出散射波函数。

本文找出打开这一“黑盒”的方法,即求出散射波函数。从而可以在非周期势内部进行散射波函数的振幅和位相分析,给出分析非周期势散射问题的具体方法。作为实例,分析了一维二元无序链和无公度体系的散射波函数,看到在“黑盒”内部散射波函数的具体图象,获得了迁移矩阵方法得不到的许多信息。计算实例说明这一方法研究非周期势散射问题的有效性。

二、散射波函数的求解方法

由于这一方法与迁移矩阵方法有密切的联系,以下先简要介绍迁移矩阵方法。

考虑一维紧束缚近似体系,其哈密顿量为

$$H = \sum_l |l\rangle \epsilon_l \langle l| + \sum_{m \neq l} t |l\rangle \langle m| \quad l, m \text{ 为第一近邻。} \quad (1)$$

本征方程为

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle, \quad (2)$$

式中 E_n , $|\varphi_n\rangle$ 分别为第 n 个本征能量和本征波函数, $|l\rangle$ 为一组正交归一化的基矢, ε_l 为在 l 格点的能量, t 为非对角元(假设为常量)。把 $|\varphi_n\rangle$ 展开, 有

$$|\varphi_n\rangle = \sum_l b_l |l\rangle, \quad (3)$$

把 (3) 式代入 (2) 式, 有

$$tb_{l-1} + (\varepsilon_l - E_n)b_l + tb_{l+1} = 0 \quad (4)$$

或记为

$$\begin{bmatrix} b_{l+1} \\ b_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E_n - \varepsilon_l)/t & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_l \\ b_{l-1} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

令

$$P(l) = \begin{bmatrix} (E_n - \varepsilon_l)/t & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6)$$

式中 $P(l)$ 称为迁移矩阵。它把 b_l, b_{l-1} 与 b_{l+1}, b_l 联系在一起。

对于一维周期链, 有 $\varepsilon_l = \varepsilon_0 = 0$ 为常量。

有

$$b_l = Ae^{ikl} + Be^{-ikl} \quad (7)$$

式中 $k = \arccos(E_n/2t)$ 为波矢。

如果讨论如下体系: 在 l 由 2 至 3, 4, ..., N 这一段, ε_l 为变量, 即这一段为非周期势。在 $l \leq 1$ 与 $l \geq N+1$ 时有 $\varepsilon_l = 0$ 。

对这一体系有

$$b_l = Ae^{ikl} + Be^{-ikl} \quad -\infty < l \leq 1, \quad (8)$$

$$b_l = Ce^{ikl} + De^{-ikl} \quad N+1 \leq l < \infty. \quad (9)$$

在 $2 \leq l \leq N$ 时, b_{l+1}, b_l 与 b_l, b_{l-1} 由迁移矩阵相联, 所以有

$$\begin{bmatrix} b_{N+2} \\ b_{N+1} \end{bmatrix} = \left[\prod_{l=N+1} P(l) \right] \begin{bmatrix} b_1 \\ b_0 \end{bmatrix}. \quad (10)$$

由于

$$b_l = Ae^{ikl} + Be^{-ikl},$$

$$b_0 = A + B,$$

$$b_{N+1} = Ce^{ik(N+1)} + De^{-ik(N+1)},$$

$$b_{N+2} = Ce^{ik(N+2)} + De^{-ik(N+2)},$$

再定义

$$Q(N, k) = \begin{bmatrix} e^{ik(N+1)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(N+1)} \end{bmatrix} \cdot S^{-1}(k) \cdot \left[\prod_{l=N+1} P(l) \right] \cdot S(k), \quad (11)$$

式中

$$S(k) = \begin{bmatrix} e^{-ik} & e^{ik} \\ 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (12)$$

由 (10) 和 (11) 式可得到

$$\begin{bmatrix} D \\ C \end{bmatrix} = Q(N, k) \begin{bmatrix} B \\ A \end{bmatrix}. \quad (13)$$

为了计算非周期势的电阻,可设由 $-\infty$ 方向入射一平面波,其能量为 $E_n = 2t \cos k$, 当 $l \geq N+1$ 时,只有出射波,即 $D = 0$. 这样由 (13) 式有

$$|B/A|^2 = |Q_{12}(N, k)/Q_{11}(N, k)|^2, \quad (14)$$

$$|C/A|^2 = |1/Q_{11}(N, k)|^2. \quad (15)$$

总反射系数为 $r(E_n, N) = |B/A|^2$,

总透射系数为: $t(E_n, N) = |C/A|^2$.

由 Landauer 公式^[9],电阻为

$$\begin{aligned} R(E_n, N) &= r(E_n, N)/t(E_n, N) \\ &= |Q_{12}(N, k)|^2. \end{aligned} \quad (16)$$

这说明,为了计算非周期势电阻,只需由 (11) 式计算 $Q_{12}(N, k)$ 即可. 而 $Q_{12}(N, k)$ 的计算中主要为计算迁移矩阵的连乘.

显然,这一方法没有对非周期势内的散射波函数进行讨论,只计算了总的散射结果,因而无法具体分析造成这一结果的物理原因.

为了打开这一“黑盒”,需要求出非周期势内散射波函数. 我们找到两种求解方法,现分述如下.

为表述简单,令 $a_l = (E_n - \varepsilon_l)/t$, 由 $D = 0$ 及 (10) 式有

$$b_{N+1} = C e^{ik(N+1)}, \quad b_{N+2} = C e^{ik(N+2)}.$$

A 为入射波振幅,可取为 1. 由 (4) 式可得到以下 $N+1$ 个方程:

$$\begin{aligned} B(a_1 e^{-ik} - 1) - b_1 &= 1 - a_1 e^{ik}, \\ -B e^{-ik} + a_2 b_2 - b_3 &= e^{ik}, \\ -b_{l-1} + a_l b_l - b_{l+1} &= 0 \quad 3 \leq l \leq N-1, \\ -b_{N-1} + a_N b_N - C e^{ik(N+1)} &= 0, \\ -b_N + C[a_{N+1} e^{ik(N+1)} - e^{-ik(N+2)}] &= 0. \end{aligned} \quad (17)$$

在以上方程中,共有 $N+1$ 个未知数,即: B, C , 和 $b_l (2 \leq l \leq N)$, 这是一个复数方程组,因为 B, C, b_l 均为复数. 我们选用的求解方法为解复数方程组的列主元消去法. 解出了 B, C, b_l 之后,即可求出透射系数、反射系数和电阻. 而 b_l 即为散射波函数的分量,因为选取了 $D = 0$, 其中包含了振幅和位相.

另一个方法是先应用迁移矩阵方法,计算出 $Q(N, k)$, 由于有

$$\begin{aligned} Q_{11}(N, k)B + Q_{12}(N, k) &= 0, \\ Q_{12}(N, k)B + Q_{11}(N, k) &= C. \end{aligned} \quad (18)$$

可求出

$$B = -Q_{12}(N, k)/Q_{11}(N, k), \quad (19)$$

$$C = 1/Q_{11}(N, k). \quad (20)$$

其中利用了性质: $|Q(N, k)| = 1$.

这样,在方程组 (17) 中, B, C 已求出,余下了 $N-1$ 个方程和 $N-1$ 个未知数 b_l . 这个方程组与包含 B, C, b_l 的 $N+1$ 个方程的方程组不同之处在于,它的实部与虚部可以完全分开,且分开后的两个方程组都是实三对角型. 而这类实三对角型方程组有非常快的求解方法. 例如可用追赶法.

这两个方法不同之处仅在于:前一方法直接求解复联立方程组;而后一方法是应用迁移矩阵方法求出 B, C 之后,再求 b_i . 由于后一方法在求出 B, C 之后的方程组易于求解,尽管它第一步使用了迁移矩阵方法,但总的来看,仍比第一个方法快. 计算实例对比说明,两种方法得出的解完全相同,而第二种方法速度快,且可以计算较大的体系. 本文中以下的计算结果均采用第二种方法.

三、非周期势散射波函数的振幅与位相分析

我们计算了如下体系的散射波函数:该体系哈密顿量为(1)式. $N = 500$, ε_i 仅取 0 和 $+w$ 两个值, $\varepsilon_i = w$ 的位置即为“杂质”所在位置. 杂质浓度为 0.1. 先用迁移矩阵方法计算 500 个不同构型的电阻,选取两个构型,其中构型 I 电阻较小;构型 II 电阻较大. 分别计算这两个构型的散射波函数. 计算数据列于表 1.

图 1(a) 和图 2(a) 的上边为构型 I, II 示意图. 尖峰位置为杂质所在位置. 构型图下边的三个图表示 w 分别为 $-0.02, -0.1, -0.5$ 时不同格点位置处的 $\Delta\varphi/\Delta n$, $\Delta n = 1$ 为相邻格点坐标差, $\Delta\varphi$ 为相邻格点散射波函数的位相差. 从这些图可以看到:当 w 绝对值由小变大时, $\Delta\varphi/\Delta n$ 的变化幅度加大. 这是由于杂质的强度加大,散射强烈,每一次散射引起的相移加大. 还可看到在每一个杂质所在的位置上(图中由向下尖峰表示),其 $\Delta\varphi/\Delta n$ 发生一次明显的跳变. 而在杂质之间, $\Delta\varphi/\Delta n$ 变化十分平缓. 这当然可以解释为是杂质的强烈散射的结果. 但从另一方面看,我们计算出的散射波函数,是入射波进入非周期势之后,每遇到一个杂质即被散射,同时形成透射波、反射波. 这许多

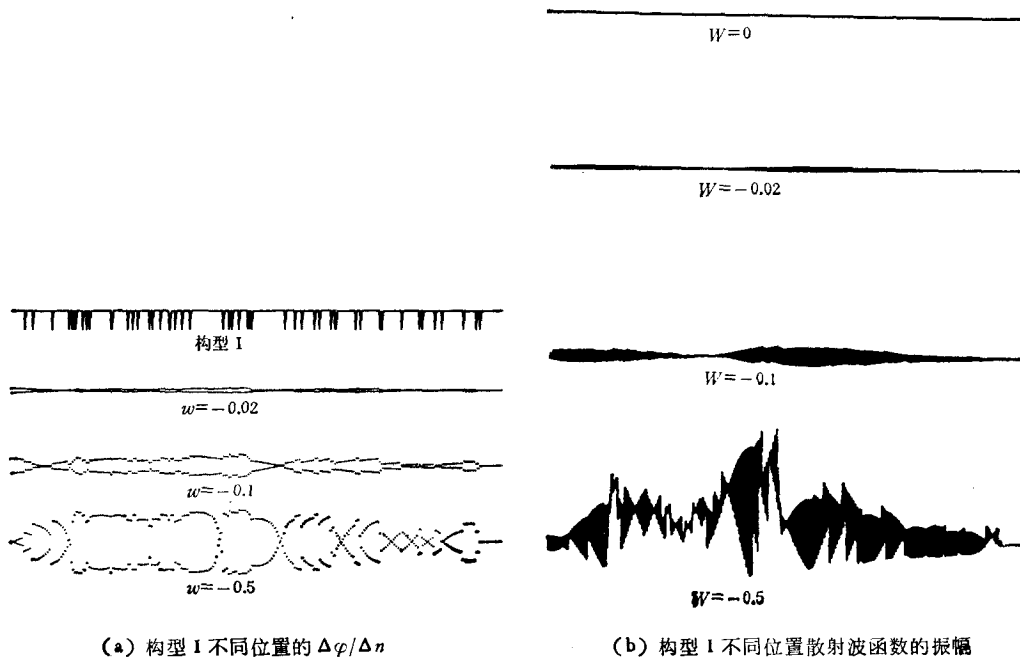


图 1

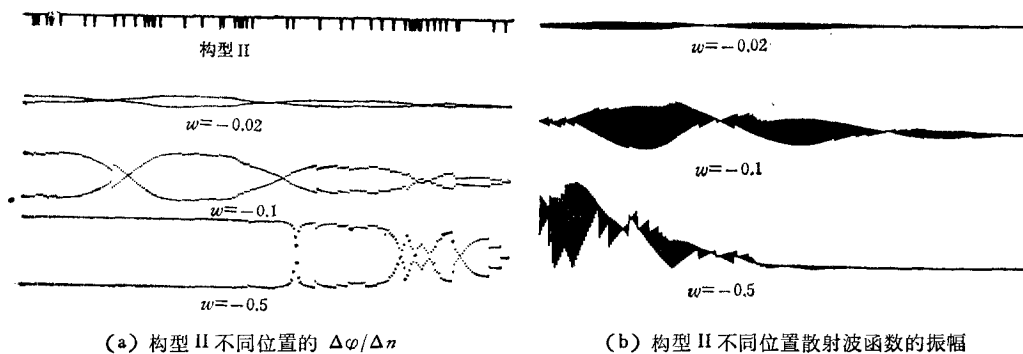


图 2

表 1 构型 I, II 散射波函数的计算数据

	杂质强度 w	能 量 E	电 阻 R
构 型 I	0.0	-0.012516	0
	-0.02	-0.014308	0.002509
	-0.1	-0.021651	0.034559
	-0.5	-0.063763	0.019386
构 型 II	-0.02	-0.014756	0.007334
	-0.1	-0.023306	0.433227
	-0.5	-0.058057	3338.137165

次的反射波、透射波最终相互干涉而形成我们求出的散射波函数。而我们的计算结果指出,在这个散射波函数上,每一个杂质的散射效果仍然十分明显,表现为 $\Delta\varphi/\Delta n$ 的跳变。

众所周知,波的干涉,取决于波的位相。

图 1(b) 和图 2(b) 示出构型 I 和 II 在 w 取 $-0.02, -0.1, -0.5$ 时的散射波函数的振幅。从图中可看出,当 w 的绝对值加大时,散射波函数的振幅起伏加大。显然,这是每一次散射加大的结果。值得注意的是,构型 I 的电阻小,而构型 II 的电阻大。但对比它们的散射波函数可以看到,散射波函数振幅的起伏都很大,所不同的是构型 I 散射波函数出射端的振幅与入射端振幅相差较小,即透射大,因此电阻小。这说明杂质的浓度相同,强度 (w) 相同。当杂质位置不同时,电阻的大小取决于体系总的干涉结果。而电阻小的构型并不是散射波函数本身在非周期势内起伏小,仅仅是它引起的相移,在多次反射、透射波干涉之后,使出射波振幅减小得较少。应该指出,散射波函数这一特点与取 $D \neq 0$ 的本征波函数不同。我们可以求出零边界条件,或周期性边界条件下的本征波函数。电阻大的构型,本征波函数的局域度(对有限长度 N) 较大。可用 IPR 来描述局域度, IPR 定义为

$$IPR = \left(\sum_i |b_i|^4 \right) / \left(\sum_i |b_i|^2 \right)^2. \quad (21)$$

IPR 在 $1/N$ 与 1 之间取值, IPR 越大,局域度越大。例如对构型 I, $w = -0.5$, $E = -0.063763$, $IPR = 0.003718$, $R = 0.019386$; 而对构型 II, $w = -0.5$, $E = -0.058057$,

$4PR = 0.012914$, $R = 3338.137165$. 图 3 示出这两个本征波函数的振幅, 是用 EDWW 方法计算的^[6].

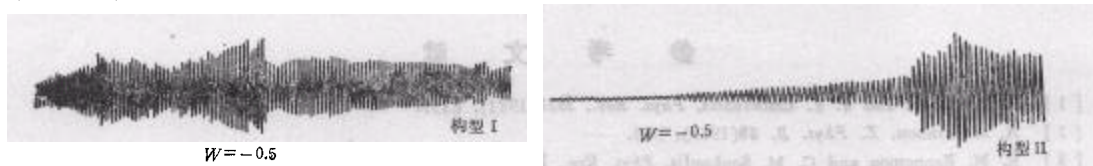


图 3 构型 I, $w = -0.5$ 与构型 II, $w = -0.5$ 的本征波函数

从图 3 中明显看出, 构型 II 的本征波函数振幅局域度大, 电阻也大.

第二个例子是无公度体系. 它的哈密顿量仍是 (1) 式形式, 但有

$$\varepsilon_l = 2\nu \cos ql, \quad (22)$$

其中 q 为分数, 取 $q = 0.7$.

以前的研究工作指出^[3], 对无穷长的这类无分度体系, 当 $\nu > 1$ 时, 所有的状态为局域态; 当 $\nu < 1$ 时, 所有的状态为延展态.

图 4 示出这一体系的散射波函数的振幅, 中间非周期势仅在 $2 \leq l \leq N$ 这一段. 在这中间 ε_l 取 (22) 式形式, 其余部分 $\varepsilon_l = 0$.

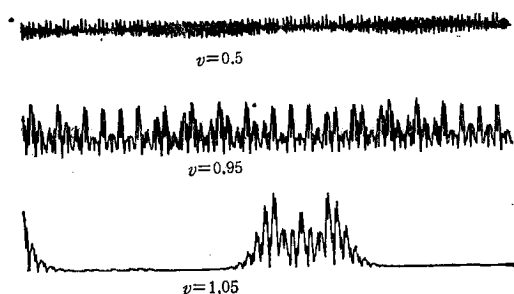


图 4 无公度体系散射波函数振幅

$$\begin{aligned} \nu = 0.95, k = 1.570995; \nu = 1.05, k = 1.567325; \\ \nu = 0.5, k = 1.577184 \end{aligned}$$

显然, 当 $\nu < 1$ 时, 散射波函数振幅具有准周期性. 当 $\nu > 1$ 时, 振幅呈无规起伏状态, 经过一段之后, 很快地衰减. 当 $\nu = 0.95$ 时, 电阻 $R = 0.187957$ 变为 $\nu = 1.05$ 时的 $R = 1112578.2$. 过去使用迁移矩阵方法对这一体系进行过十分仔细的研究^[3,4]. 以确定这类体系的迁移率边, 但是都没有看到过在非周期势内散射波函数的具体图象. 而我们的这一计算实例明确指出, 是由于不同的干涉效应, 引起的散射波函数振幅呈现两种不同的特性.

总之, 本文找出了求解非周期势散射波函数的有效方法, 可以对非周期体系进行振幅与位相分析. 这一方法与由本文作者之一郑兆勃所发展的求解本征波函数的方法^[6], 都是研究非周期体系输运特性的有效手段.

感谢赵光安教授邀请我们去瑞典进行访问, 并提供了对本研究工作的支持; 感谢与刘有延博士的许

多有益的讨论;感谢瑞典林彻平大学物理与测量工程系对我们的热情接待和提供的各种科学研究计算条件。

参 考 文 献

- [1] R. C. Albers and J. E. Gubernatis, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 6357.
- [2] A. Mackinnon, *Z. Phys. B*, **59**(1985), 385.
- [3] E. N. Economou and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev.*, **B46**(1981), 618.
- [4] Y. Y. Liu and K. A. Chao, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 5247.
- [5] R. Landauer, *Phil. Mag.*, **21**(1970), 863.
- [6] Z. B. Zheng, *J. Phys. C*, **19**(1986), L689.

SCATTERING WAVE FUNCTION ANALYSIS METHODS IN APERIODIC POTENTIAL

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

New methods for obtaining the scattering wave functions of an aperiodic potential are developed. The analysis of amplitude and phase of scattering wave functions demonstrates the efficiency of these methods.