

耦合平行链的模型研究

王怀玉

烟台大学物理系, 烟台 264005

1992 年 12 月 8 日收到

本文针对基因密码携带者脱氧核糖核酸(DNA)的分子结构,构造了一些简单的可解模型,研究其电子谱,讨论其物理性质.

PACC:7120

一、引 言

在固体物理学中,对一维周期结构已有了很详细的理论^[1].一般是采取紧束缚方法(这主要根据具体研究的对象系统而定),用格林函数^[2]求其格点态密度,研究其电子结构与振动结构.在实际的材料中也发现了有近一维的结构,可运用此理论.

本文研究的是两条周期一维链,它们相互平行且有耦合.这既不是一维也不是二维模型,所以必须单独予以研究.这个模型决不是空想出来的,而是有实际对应物.众所周知,携带基因密码的 DNA 的结构为双螺旋链^[3].先只看其中一个主链,它呈螺旋管形状.主链上为脱氧核糖与磷酸基交替排列的严格的周期结构.由于螺旋管的直径为 10Å 的数量级,而螺旋管的长度(对不同的生物来说)有 $10^4 - 10^{10}\text{Å}$ 的数量级,这一结构的研究与一维长直周期链的研究等价.证明如下:以管长方向为 Z 方向,管径为 R ,螺旋线在柱面上,柱面上的 Laplace 算符为 $\Delta = \nabla^2 = \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$. 对于螺旋线来说,应是一维运动,只有一个变量.螺旋的角度与 Z 方向有一正比关系, $Z = a\varphi$, 所以 $\Delta = \frac{1}{R^2} = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$, 其中 $\frac{1}{R^2} = \frac{1}{R_0^2} + \frac{1}{a^2}$, $\theta = R_0\varphi$. 角度 θ (或 φ) 的取值范围为 $-\infty$ 至 $+\infty$. 可见与一维长直线 $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 的形式相同.研究螺旋线上电子的运动,与研究直线上电子运动的方法完全一样.因此把耦合双螺旋链的研究归为耦合平行链的研究, DNA 中两条主链完全相同.本文只考虑两条平行链完全相同的情况.

DNA 中双链之间的耦合是通过四种碱基的配对来实现的.它们是腺嘌呤、鸟嘌呤、胞嘧啶和胸腺嘧啶,或简称 A, G, C, T. 只有 A-T 和 C-G 两种配对方式,但其排列的顺序规则至今尚不清楚.本文先研究一些简单的耦合模型,给出后续工作必要的基础.

二、耦合模型

采用紧束缚描述,写出各种结构下的单电子格林函数,即可由此得到格点态密度.

1. 无耦合平行链

首先必须回顾一维长直周期链的情况^[2]. 紧束缚哈密顿量为

$$H = \sum_i (\epsilon |i\rangle \langle i| + t |i\rangle \langle i+1| + t |i+1\rangle \langle i|), \quad (1)$$

$|i\rangle$ 为格点态. 布洛赫态 $|k\rangle$ 可以格点态展开为

$$|k\rangle = \sum_j \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ika_j} |j\rangle, \quad (2)$$

a 为晶格常数, $a_j = ja$ 为第 j 个格点的位置. 不同格点的态之间不交选

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}. \quad (3)$$

$|k\rangle$ 正好是(1)式的本征态, 其能谱为

$$E(k) = \epsilon + 2t \cos ka. \quad (4)$$

格林函数

$$g(Z) = \frac{1}{Z - H} = \sum_k \frac{|k\rangle \langle k|}{Z - E(k)} = \sum_{ij} g^{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (5)$$

其中

$$g^{ij} = \sum_k \frac{\exp[ika(i-j)]}{Z - E(k)}, \quad (6)$$

其非对角矩阵元

$$g(i, j, Z) = \langle i | g(Z) | j \rangle = g^{ij} \quad (7)$$

为电子从 i 格点到 j 格点的传播几率幅^[4]. 对角矩阵元

$$g(i, i, Z) = g^{ii} = g_0 \quad (8)$$

则为 i 格点的格林函数, 其虚部分的格点态密度. 它们的表达式为^[2]

$$g_0 = \pm \frac{1}{\sqrt{(Z - \epsilon)^2 - 4t^2}}, \quad (9)$$

$$g^{ij} = g_0 \rho_{\pm}^{|i-j|} \quad (10)$$

其中 $\rho_{\pm}$ 是指方程 $\rho^2 - 2x\rho + 1 = 0$, $x = (Z - \epsilon)/2t$ 中取 $|\rho_{\pm}| < 1$ 的那个根, g_0 中的“ $\pm$ ”号分别对应于 ρ 的解 $\rho = x \pm \sqrt{x^2 - 1}$ 中的“ $\pm$ ”号. (10)式的物理意义是粒子从 i 格点传播至 j 格点, 与从 j 传至 i 的几率幅是相等的.

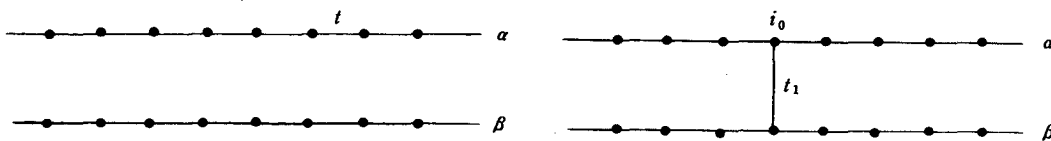


图 1

图 2

现在用 α, β 来区分两条链(见图 1). 该系统的哈密顿量为

$$H_0 = H_\alpha + H_\beta, \quad (11)$$

H_α, H_β 的形式都如(1)式. 本征集为 $\{\varphi\} = (\{\varphi_\alpha\}, \{\varphi_\beta\})$, 为两支(2)式的波函数集的直和.

本征谱也是两支 $E_\alpha(k)$ 与 $E_\beta(k)$, 都与(4)式相同. 格林函数:

$$G_0(Z) = g_\alpha(Z) + g_\beta(Z) = \sum_{ij} g^{ij} (|i_\alpha\rangle \langle j_\alpha| + |i_\beta\rangle \langle j_\beta|). \quad (12)$$

由于两条链是完全相同的,其物理量也全同,故写出矩阵元、能量这样具体的数值时,可忽略下标 α, β . 由于两条链无耦合,所以 $G_0(i_\alpha, j_\beta, Z) = 0$, 即两条链之间无传播几率. 电子只能在其中一条链上运动.

2. 单通道模型

平行链在 i_0 格点处有耦合, 见图 2. 此系统是(11)式加上微扰哈密顿量

$$H_1 = t_1(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\beta}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\alpha}|). \quad (13)$$

用微扰论求其格林函数

$$G_1 = G_0 + G_0 T_1 G_0, \quad (14)$$

$$T_1 = \sum_{n=0}^{\infty} (H_1 G_0)^n H_1. \quad (15)$$

散射矩阵算出为

$$\begin{aligned} T_1 = & \frac{t_1}{1 - g_0^2 t_1^2} (|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\beta}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\alpha}|) \\ & + \frac{g_0 t_1^2}{1 - g_0^2 t_1^2} (|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\alpha}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\beta}|). \end{aligned} \quad (16)$$

格林函数则是

$$\begin{aligned} G_1 = & G_0 + \frac{t_1}{1 - g_0^2 t_1^2} \sum_{ij} g^{i i_0} g^{i_0 j} (|i_\alpha\rangle\langle j_\beta| + |i_\beta\rangle\langle j_\alpha|) \\ & + \frac{t_0 t_1^2}{1 - g_0^2 t_1^2} \sum_{ij} g^{i i_0} g^{i_0 j} (|i_\alpha\rangle\langle j_\alpha| + |i_\beta\rangle\langle j_\beta|). \end{aligned} \quad (17)$$

矩阵元:

$$G_1(i_\alpha, j_\beta, Z) = \frac{t_1}{1 - g_0^2 t_1^2} g^{i i_0} g^{i_0 j}, \quad (18)$$

$$G_1(i_\alpha, j_\alpha, Z) = g^{ij} + \frac{g_0 t_1^2}{1 - g_0^2 t_1^2} g^{i i_0} g^{i_0 j}. \quad (19)$$

可见现在两链之间存在传播几率. 从 i_α 到 j_β 的运动显然是在 α 链上从 i 到 i_0 格点, 再由 β 链上 i_0 到 j 格点. 几率幅与 t_1 成正比(在原连续谱内). 本文中总是假定从 $i_{0\alpha}$ 到 $i_{0\beta}$ 的传播是瞬时的. 在同一链上的传播除了原单链上的传播外, 还要受到 i_0 格点的散射. 在连续谱内, 这是个二级小量.

原 G_0 的极点是(4)式. 现在 G_1 有满足 $g_0^2 t_1^2 = 1$ 的一对极点:

$$E_p = \epsilon \pm \sqrt{4t^2 + t_1^2}. \quad (20)$$

这两个能级显然是(4)式的能谱之外的孤立极点, 故有一对局域态, 其波函数集中于 $i_{0\alpha}$ 和 $i_{0\beta}$ 格点上. 这也是粒子传播时受到散射的原因. 由于散射矩阵 T 是(15)式的无穷级数之和. 包含了到 i_0 格点之间多次来回散射的所有贡献, 所以由(19)式可知, 即使从 i 到 j 的途中不经过 i_0 点, 仍要受到该局域态散射的影响. 在能量 $Z = E_p$ 处散射最强.

对局域态的计算可知, 波函数集中在 i_0

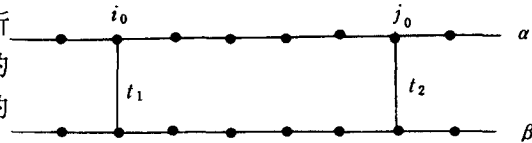


图 3

格点处,且在 $i_{0\alpha}, i_{0\beta}$ 格点上的分布几率相同. 低能量态通道两端波函数振幅相同. 高能量态 $i_{0\alpha}$ 与 $i_{0\beta}$ 波函数位相相反, 类似于同极双原子分子的成键与反键波函数.

3. 双通道模型

这是在 i_0 与 j_0 两处有耦合的模型, 见图 3. 现在的微扰哈密顿量为

$$H_2 = t_1(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\beta}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\alpha}|) + t_2(|j_{0\alpha}\rangle\langle j_{0\beta}| + |j_{0\beta}\rangle\langle j_{0\alpha}|). \quad (21)$$

计算出总的散射矩阵为

$$\begin{aligned} T_2 = & a_1(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\alpha}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\beta}|) + a_2(|j_{0\alpha}\rangle\langle j_{0\alpha}| + |j_{0\beta}\rangle\langle j_{0\beta}|) \\ & + a_3(|i_{0\alpha}\rangle\langle j_{0\alpha}| + |i_{0\beta}\rangle\langle j_{0\beta}| + |j_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\alpha}| + |j_{0\beta}\rangle\langle i_{0\beta}|) \\ & + b_1(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\beta}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\alpha}|) + b_2(|j_{0\alpha}\rangle\langle j_{0\beta}| + |j_{0\beta}\rangle\langle j_{0\alpha}|) \\ & + b_3(|i_{0\alpha}\rangle\langle j_{0\beta}| + |i_{0\beta}\rangle\langle j_{0\alpha}| + |j_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\beta}| + |j_{0\beta}\rangle\langle i_{0\alpha}|), \end{aligned} \quad (22)$$

其中系数由下述方程组决定: 令

$$A = \begin{pmatrix} 1 - g_0^2 t_1^2 & -g_1^2 t_1^2 & -2g_0 g_1 t_1^2 \\ -g_1^2 t_2^2 & 1 - g_0^2 t_2^2 & -2g_0 g_1 t_2^2 \\ -t_1 t_2 g_0 g_1 & -t_1 t_2 g_0 g_1 & 1 - t_1 t_2 (g_0^2 + g_1^2) \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$A \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_1^2 g_0 \\ t_2^2 g_0 \\ t_1 t_2 g_1 \end{pmatrix}, A \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

其中

$$g_1 = g^{i_0 j_0} = g_0 \rho_{j_0}^{i_0 - j_0}. \quad (25)$$

极点由

$$\det A = 1 \quad (26)$$

决定, 可作数值求解. 不过我们可以先看两个通道相离很远时的极端情况. 由于始终有 $|\rho_{j_0}| < 1$, 由 (25) 式知 $|i_0 - j_0| \rightarrow \infty$ 时, $g_1 \rightarrow 0$. 此时 A 的非对角元全都消失. 结合 (24) 式可知总散射矩阵简化为

$$\begin{aligned} T_2 = & \frac{t_1}{1 - g_0^2 t_1^2}(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\beta}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\alpha}|) + \frac{g_0 t_1^2}{1 - g_0^2 t_1^2}(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\alpha}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\beta}|) \\ & + \frac{t_2}{1 - g_0^2 t_2^2}(|j_{0\alpha}\rangle\langle j_{0\beta}| + |j_{0\beta}\rangle\langle j_{0\alpha}|) + \frac{g_0 t_2^2}{1 - g_0^2 t_2^2}(|j_{0\alpha}\rangle\langle j_{0\alpha}| + |j_{0\beta}\rangle\langle j_{0\beta}|). \end{aligned} \quad (27)$$

这是 i_0 与 j_0 格点各自 (16) 式的简单和. 两个通道彼此独立, 每个通道上的孤立能级及其波函数的分布也如单通道模型所讨论的.

当 $i_0 - j_0$ 有限时, 两个通道是有相互作用的. 这时局域态的能级应比 (20) 式略有位移, 但仍是连续谱之外的孤立能级. 局域波函数的分布也将略有畸变. 特别应注意的是, (23) 式的矩阵为三阶的, 所以 (26) 式应还有第三对根, 即两个通道相隔有限距离时应还有第三对局域态. 从物理学考虑, 可以设想该局域态波函数的分布为: 一部分集中在 i_0 处, 另一部分集中在 j_0 处, 剩余的在 i_0 与 j_0 之间的链上延展. 当 i_0 与 j_0 相离无穷远, 延展部分无穷长, i_0, j_0 处集中的波函数趋于零, 此局域态消失.

由 (22) 式可写出总的格林函数. 类似地, 我们可以讨论三个或更多通道的情况.

4. 梯子模型

如图 4, 每个格点之间都有耦合. 哈密顿量为

$$H = H_a + H_\beta + \sum_i t_0 (|i_a\rangle\langle i_\beta| + |i_\beta\rangle\langle i_a|). \quad (28)$$

现将此系统的波函数以无耦合链 $H_0 = H_a + H_\beta$ 的本征集为基展开:

$$|\varphi_n\rangle = \sum_k (u_{nk}|k_a\rangle + v_{nk}|k_\beta\rangle). \quad (29)$$

注意, $|k_a\rangle$ 为(2)式, 应理解为 $|\varphi_a(k)\rangle$. 计算矩阵元为

$$(k_a|H|k'_a) = E(k)\delta_{kk'}, (k_a|H|k'_\beta) = t_0\delta_{kk'}, \quad (30)$$

其中 $E(k)$ 为(4)式. 可见不同 k 的孤立键波函数在此耦合模型是不能跃迁的. 现在如果以 $k_a=k_1, k_\beta=k_1, k_a=k_2, k_\beta=k_2, \dots$ 的顺序写出哈密顿矩阵, 那么它是块对角的. 每一小块形式都相同. 第 i 子块为

$$\begin{bmatrix} (\varphi_a(k_i)|H|\varphi_a(k_i)) & (\varphi_a(k_i)|H|\varphi_\beta(k_i)) \\ (\varphi_\beta(k_i)|H|\varphi_a(k_i)) & (\varphi_\beta(k_i)|H|\varphi_\beta(k_i)) \end{bmatrix}. \quad (31)$$

得到能量本征值为

$$\epsilon_{\pm}(k) = E(k) \pm t_0. \quad (32)$$

(29)式中的指标 n 正好可以用 k 来代替. 每个 k 有两个能级, 相应有两个波函数

$$|\varphi_{\pm}(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_a(k)\rangle \pm |\varphi_\beta(k)\rangle). \quad (33)$$

形式与同极双原子分子的波函数迭加类似. 如果 $|t_0| < t$, 则连续谱在 t_0+t 与 $-t_0-t$ 的范围内. 如果 $|t_0| > t$, 则能谱分成两段, 中间出现禁带. 对于 DNA 这样的结构来说, 主链上的结合比链间结合强, 属于前一种情况. 因为 DNA 的主链本身就是一个大分子, 而链间碱基配对则是氢键结合. 格林函数

$$\begin{aligned} G(Z) &= \sum_k \left(\frac{|\varphi_-(k)\rangle\langle\varphi_-(k)|}{Z - \epsilon_-(k)} + \frac{|\varphi_+(k)\rangle\langle\varphi_+(k)|}{Z - \epsilon_+(k)} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} g_{ij}^{(0)} (|i_a\rangle\langle j_a| + |i_\beta\rangle\langle j_\beta| + |i_a\rangle\langle j_\beta| + |i_\beta\rangle\langle j_a|) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{ij} g_{ij}^{(1)} (|i_a\rangle\langle j_a| + |i_\beta\rangle\langle j_\beta| - |i_a\rangle\langle j_\beta| - |i_\beta\rangle\langle j_a|), \end{aligned} \quad (34)$$

其中 $g_{\pm}^{(0)}$ 表示(9), (10)式中的 ϵ 用 $\epsilon_{\pm}$ 代入. 计算格点态密度可知, 它是由两个错开 $2t_0$ 的单链态密度的迭加 ($|t_0| < t$), 带内出现奇点.

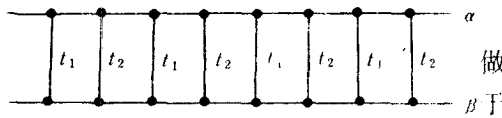


图 5

上述为简单梯子模型. 对于复式梯子模型, 做法相同. 例如如图 5, 链间耦合是 t_1, t_2 相间的. 由

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \exp[i(k - k')2ja] = \frac{1}{2} \delta_{kk'}, \quad (35)$$

因此两链之间也只有 k 相同的波函数才能耦合, 结论与上同. 只要将 $\frac{1}{2}(t_1 + t_2)$ 代替简单梯子模型中的 t_0 , 所有结果都相同. 因此对于更复杂的梯子模型, 只要存在周期性, 由于类

似(35)式的求和存在,将不会有异于简单梯子的新的物理内容.

5. 单异通道模型

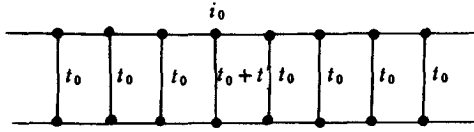
如图 6,在简单梯子上加一微扰

$$H' = t'(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\beta}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\alpha}|). \quad (36)$$

按照微扰论的步骤计算出

$$(H'G_0)^n H' = a_n(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\alpha}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\beta}|) + b_n(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\beta}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\alpha}|), \quad (37)$$

其中系数有递推关系



$$\begin{aligned} a_n &= \frac{t'}{2}(g_+ - g_-)a_{n-1} + \frac{t'}{2}(g_- + g_+)b_{n-1}, \\ b_n &= \frac{t'}{2}(g_+ - g_-)b_{n-1} + \frac{t'}{2}(g_- + g_+)a_{n-1}, \end{aligned} \quad (38)$$

图 6

与初始值

$$a_0 = 0, b_0 = t'. \quad (39)$$

可算出散射矩阵:

$$T = W_1(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\alpha}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\beta}|) + W_2(|i_{0\alpha}\rangle\langle i_{0\beta}| + |i_{0\beta}\rangle\langle i_{0\alpha}|), \quad (40)$$

W_1, W_2 的计算见附录. 实际写出格林函数时只需用到 $W_{\pm} = W_1 \pm W_2$. $g_{\pm}$ 表示(34)式中的对角元 $g_+ = g_+^i, g_- = g_-^i$. 孤立极点满足

$$g_+ t' = 1, g_- t' = -1. \quad (41)$$

解出其根为

$$E_{p+} = \epsilon_0 + t_0 \pm \sqrt{4t^2 + t'^2}, E_{p-} = \epsilon - t_0 \pm \sqrt{4t^2 + t'^2}. \quad (42)$$

这里假定 $t'^2 < t_0^2$, 上述 4 对根有两个在连续谱内, 只有下述两个才是真正的孤立极点:

$$E_{p+} = \epsilon_0 + t_0 + \sqrt{4t^2 + t'^2}, E_{p-} = \epsilon - t_0 - \sqrt{4t^2 + t'^2}. \quad (43)$$

对于局域态的讨论阵与单通道模型中局域态的讨论类似. 这里 t' 可正可负, 结论不变.

最后简单讨论双异通道模型, 就是简单梯子模型加上微扰(21)式. 可同样用微扰论, 算出散射矩阵类似于(22)式, 只是系数要从 8 阶线性方程组求出. 当双异通道相距很远时, T 矩阵也类似(27)式, 简化为两个单异通道(40)式的简单和. 孤立能级是两个单异通道的(42)式, 是从 4 对根中选出的 4 个能级, 见由(41)式得到(42)式. 由于系数矩阵是 8 阶的, 因此有 8 对根. 也就是说, 在双异通道相距有限时, 除了每个异通道各自的局域态, 另有 4 对根, 表明还应有 4 个局域态. 它们的波函数的分布应是在 $i_0, i_{0\beta}, j_{0\alpha}, j_{0\beta}$ 4 个格点上及在异通道之间的链上. 当 $|i_0 - j_0| \rightarrow \infty$, 延展部分趋于无穷长, 这些局域态消失. 进一步可继续讨论更多异通道的情况.

三、讨 论

本文由简到繁给出一些可解模型, 意图是逐渐逼近真实的 DNA 结构, 探讨其物理性质. 有关的数值分析及其更进一步的工作将在以后发表.

在这些模型中, 简单梯子模型已与实际结构相当接近. 因为在实验室中已经能够人为

地制造出 DNA 链间只有 A-T 或 G-C 一种耦合,即图 4 的情况.当然由于它不携带基因密码,在实际生物的 DNA 中不会出现.我们看到,对于一般的复式梯子模型,无论链间耦合怎样排列,只要是周期性的,则其物理表现与简单梯子模型差别不大.我们期望研究非周期的结构,例如准周期分布和无序分布,将会给出新的特点.大量链间耦合的无规分布应有其特有的综合效应.

由于两条主链是完全相同的,所以链间耦合类似于同极双原子分子中的波函数迭加.这可以从梯子模型、单通道模型与单并通道模型中的局域态的波函数的构成中反映出来.如果有 $N(N \rightarrow \infty)$ 个相同链平行耦合,那么自然就趋于二维周期结构,正如 N 个相同原子构成一维周期链一样.

双通道模型与双异通道模型中,这两个通道之间是有相互作用的.它能给出新的局域态,这是此模型的一个特点.预示着通道无规分布时确实应有新的综合效应.

本文的方法还可相应地研究该系统的振动情况.深入研究这一课题对于了解基因密码携带者的物理性质将是很有意义的.

感谢与荀坤、叶平和周丹的有益的讨论.

附录 二项式幂级数的部分和

二项式定理

$$(x+y)^n = \sum_{k=0}^n c_n^k x^k y^{n-k}. \quad (\text{A. 1})$$

现在定义

$$a_n = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor} c_n^{2k+1} x^{2k+1} y^{n-2k-1}, b_n = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} c_n^{2k} x^{2k} y^{n-2k}, \quad (\text{A. 2})$$

即 a_n 中只含二项式展开中所有 x 的奇次项, b_n 则是 x 的所有偶次项之和. 并且 $a_n + b_n = (x+y)^n$. 构造

$$a_{n+1} = a_n y + b_n x, b_{n+1} = a_n x + b_n y, \quad (\text{A. 3})$$

仍然有 $a_{n+1} + b_{n+1} = (x+y)^{n+1}$, 且 a_{n+1} 只含 x 的奇次项, b_n 只含 x 的偶次项, 故 (A. 3) 式的构造与 (A. 2) 式的定义一致. 初值

$$a_0 = 0, b_0 = 1. \quad (\text{A. 4})$$

要求

$$W_1 = \sum_{n=0}^{\infty} a_n = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{n=2i+1}^{\infty} c_n^{2i+1} x^{2i+1} y^{n-2i-1}, \quad (\text{A. 5})$$

$$W_2 = \sum_{n=0}^{\infty} b_n = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{n=2i}^{\infty} c_n^{2i} x^{2i} y^{n-2i}.$$

对 (A. 3) 式等号两边求和并用 (A. 4) 式, 得

$$W_1 = \frac{x}{(1-y)^2 - x^2}, W_2 = \frac{1-y}{(1-y)^2 - x^2}. \quad (\text{A. 6})$$

作为验证

$$W_1 \pm W_2 = \sum_{n=0}^{\infty} (\pm 1)(y \pm x)^n = \frac{\pm 1}{1 - (y \pm x)}. \quad (\text{A. 7})$$

本文总是假定级数收敛的条件已被满足, 耦合平行链模型似乎总是与 (A. 5) 式相联系. 在双通道模型中, 如果以第二个通道作为对单通道模型的微扰, 则算 T 矩阵时要用到 (A. 5) 式. 对于双异通道模, 将第二个异通道看作是对单异通道模型的微扰, 也用到 (A. 5) 式.

- [1] 方俊鑫、陆栋, 固体物理学(上册), 上海科学技术出版社, (1980).
- [2] E. N. Economou, *Green's Function in Quantum Physics*, springer-Verlag, (1979).
- [3] 沈同等编, 生物化学(上册), 高等教育出版社, 北京, (1990).
- [4] 蔡建华等, 量子统计的格林函数理论, 科学出版社, 北京, (1982).

MODEL INVESTIGATIONS OF COUPLED PARALLEL CHAINS

WANG HUAI-YU

Department of Physics, Yantai University, Yantai 264005

(Received 8 December 264005)

ABSTRACT

Some simple solvable models, which are in connection with the molecular structure of gene code carrier deoxyribonucleic acid (DNA), are constructed. Their electronic structures are investigated and their physical properties are discussed.

PACC:7120