

半无限-和无限平方晶格的格林函数的关系 及其应用

徐之华 范洪义¹⁾

(中国科学技术大学材料科学与工程系, 合肥 230026)

(1995 年 5 月 29 日收到)

利用半无限平方晶格的晶格格林函数的积分表达式(见:物理学报, 44(1995), 987)以及由此导出的它与无限平方晶格的晶格格林函数之间的内在关系式, 计算了半无限平方晶格的局部态密度和表面具有单点对角杂质时定域态的存在条件.

PACC: 6300; 7100; 0365

1 引 言

表面和界面物理是当今凝聚态物理学的一个活跃分支. 为了描述表面和界面对晶格物理性质的影响, 通常要采用半无限晶格模型^[1,2]. 通过计算这类半无限晶格的晶格格林函数(LGF), 可以导出系统的局部态密度和表面定域态的存在条件, 从而为表面和界面研究提供了新的途径.

在文献[3]中, 我们建立了半无限平方晶格的动力学模型, 在只取最近邻相互作用的紧束缚近似下, 采用周期性边界条件, 把系统的哈密顿量表示为

$$\begin{aligned} \hat{H}_s = & \epsilon_0 \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^s |m, n\rangle \langle m, n| + V \sum_{m=1}^{+\infty} \left[\sum_{n=1}^{s-1} (|m, n\rangle \langle m, n+1| + |m, n+1\rangle \langle m, n|) \right. \\ & \left. + |m, 0\rangle \langle m, s| + |m, s\rangle \langle m, 0| \right] \\ & + V \sum_{n=1}^s \left[\sum_{m=1}^{+\infty} (|m, n\rangle \langle m+1, n| + |m+1, n\rangle \langle m, n|) \right], \end{aligned} \quad (1)$$

式中 ϵ_0 为系统在态 $|m, n\rangle$ 上的自能, V 为相邻格点态矢之间的相互作用能, 周期性边界条件 $|m, n\rangle = |m, n+s+1\rangle$; 当 $s \rightarrow +\infty$ 时, $\hat{H}_s$ 就过渡为半无限平方晶格的哈密顿量. 从 $\hat{H}_s$ 出发, 通过矩阵格林函数方法^[4]导出格林函数 $G_s(\lambda)$, 当 $s \rightarrow +\infty$ 时它过渡为半无限平方晶格的 LGF, 其解析积分表达式为

$$\begin{aligned} & G(\lambda; m, m')_{kl} \\ & = \frac{1}{4\pi V} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{i(k-l)\varphi} \frac{[y - \sqrt{y^2 - 1}]^{m-m'}}{\sqrt{y^2 - 1}} \{1 - [2y(y - \sqrt{y^2 - 1}) - 1]^{m'}\}, \end{aligned} \quad (2)$$

¹⁾联系人.

式中 $\lambda = \sigma + i\epsilon$, σ, ϵ 为实数, $\epsilon > 0$, $\chi = (\lambda - \epsilon_0)/2V$, $y = \chi - \cos \varphi$, $m'' = \min\{m, m'\}$, $\sqrt{y^2 - 1}$ 取虚部与 $\text{Im}\{y\}$ 同号的那个根. 然而, 具体计算这些复杂的积分仍是相当困难的. 本文中设法用无限平方晶格的 LGF 来表示半无限平方晶格的 LGF, 从而能方便地借用人们对无限平方晶格 LGF 的大量研究结果^[5-7]. 把这两种表示相结合, 计算了半无限平方晶格的局部态密度, 并与无限平方晶格的情况作比较. 最后利用半无限平方晶格的 LGF 导出了当表面层有单点对角杂质时系统中表面定域态的存在条件, 并在附录中对完全椭圆积分函数的性质作了详细的说明.

2 半无限平方晶格的 LGF

利用文献[3]中的记号和结果, 可知周期性边界条件下半无限平方晶格的 LGF 为

$$G_s(\lambda; m, m+j) = \{V[(V\Delta^+)^{-1} - V\Delta^+]\}^{-1}[(V\Delta^+)^j - (V\Delta^+)^{2m+j}]. \quad (3)$$

利用文献[3]中的(26)式可以证明

$$T[V[(V\Delta^+)^{-1} - V\Delta^+]]^{-1}T^{-1} = \frac{1}{2V} \text{diag}[\lambda_0^{-1/2}, \lambda_1^{-1/2}, \dots, \lambda_s^{-1/2}]. \quad (4)$$

相应地, 周期性边界条件下全无限平方晶格的 LGF 也可用矩阵格林函数方法^[4]导出

$$G'_s(\lambda; m, m+j) = (V\Delta^+)^j G'_s(\lambda; m, m), \quad (5)$$

$$T G'_s(\lambda; m, m) T^{-1} = \frac{1}{2V} \text{diag}[\lambda_0^{-1/2}, \lambda_1^{-1/2}, \dots, \lambda_s^{-1/2}]. \quad (6)$$

以上诸式中 $\Delta^+ = G_s(\lambda; 1, 1)$, 且 $G_s(\lambda; m, m')$, $G'_s(\lambda; m, m')$ 和 T 均为 $(s+1)$ 维方阵; $\lambda_n = (\chi - \cos n\phi_0)^2 - 1$, $y_n = \chi - \cos n\phi_0$, $n = 0, 1, 2, \dots, s$; $\phi_0 = 2\pi/(s+1)$, $T_{kl} = (s+1)^{-1/2} e^{ikl\phi_0}$.

比较(4)与(6)两式可发现

$$G'_s(\lambda; m, m) = \{V[(V\Delta^+)^{-1} - V\Delta^+]\}^{-1}. \quad (7)$$

于是综合(3), (5)和(7)三式得到

$$G_s(\lambda; m, m+j) = G'_s(\lambda; m, m+j) - G'_s(\lambda; m, 3m+j). \quad (8)$$

当 $s \rightarrow +\infty$ 时, $G_s(\lambda)$ 和 $G'_s(\lambda)$ 分别过渡为半无限和全无限平方晶格的 LGF, 用分量形式把它们的关系式表示为

$$G(\lambda; m, m+j)_{kl} = G'(\lambda; m, m+j)_{kl} - G'(\lambda; m, 3m+j)_{kl}. \quad (9)$$

由于存在平移对称性, $G'(\lambda; m, n)_{kl}$ 只与 $(m-n)$ 和 $(k-l)$ 有关, 即只与两个晶轴方向的格座位置差值有关, 而与具体的 m, n, k, l 无关, 于是可把 $G'(\lambda)$ 表示为

$$G'(\lambda; m, m+j)_{kl} \equiv G_{sq}(\lambda; j, k-l). \quad (10)$$

$G_{sq}(\lambda)$ 就是文献[5, 6]所采用的表示法, sq 是 square 的词头. 相应地用 $G_{ssq}(\lambda)$ 来表示 semi-infinite square 晶格的 LGF, ssq 也是词头缩写, 由于它只在一个方向上有平移对称性, 所以除了与 $(k-l)$ 有关外, 也与另一个方向上的 m 值有关,

$$\begin{aligned} G_{ssq}(\lambda; m, j, k-l) &\equiv G(\lambda; m, m+j)_{kl} \\ &= G(\lambda; m+j, m)_{kl}. \end{aligned} \quad (11)$$

从而可把(9)式改写为

$$G_{\text{ssq}}(\lambda; m, j, k-l) = G_{\text{sq}}(\lambda; j, k-l) - G_{\text{sq}}(\lambda; 2m+j, k-l). \quad (12)$$

由于 $G_{\text{sq}}(\lambda; m, m_2)$ 都可以用完全椭圆积分函数和初等函数来表示^[5,6], $G_{\text{ssq}}(\lambda)$ 的所有矩阵元也能相应地解析表示出来, 所以(2)式那样的复杂积分表达式可以用(12)式简洁直观地表达出来, 另一方面可利用无限平方晶格 LGF 的解析性质来对 $G_{\text{ssq}}(\lambda)$ 进行解析性质的分析. 然而, 具体数值计算仍是相当繁杂的, 只能得到一些定性的结论. 但是, 把两种表示法相结合更能方便地解决若干物理问题, 这在下一节中得以体现.

3 半无限平方晶格的局部态密度

定义半无限平方晶格的局部态密度^[4]

$$\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_{mk} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G^+(\sigma; m, m)_{kk} \}, \quad (13)$$

$$\text{式中} \quad G^+(\sigma; m, m)_{kk} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G(\sigma + i\epsilon; m, m)_{kk}. \quad (14)$$

利用(13)式得到

$$\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_m \equiv \rho_{\text{ssq}}(\sigma)_{mk} = \rho_{\text{sq}}(\sigma) + \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G_{\text{sq}}^+(\sigma; 2m, 0) \}, \quad (15)$$

式中 $\rho_{\text{sq}}(\sigma)$ 为全无限平方晶格的局部态密度, 它与格座位置无关;

$$\rho_{\text{sq}}(\sigma) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G_{\text{sq}}^+(\sigma; 0, 0) \}, \quad (16)$$

$$G_{\text{sq}}^+(\sigma; 2m, 0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G_{\text{sq}}(\sigma + i\epsilon; 2m, 0). \quad (17)$$

当 m_1, m_2 比较大时, $G_{\text{sq}}(\lambda; m_1, m_2)$ 的计算是相当复杂的^[6,7], 在这里只列出 $m = 1, 2$ 时求出的局部态密度 $\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_m$,

$$\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_1 = \rho_{\text{sq}}(\sigma) + \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G_{\text{sq}}^+(\sigma; 2, 0) \}, \quad (18)$$

$$\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_2 = \rho_{\text{sq}}(\sigma) + \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G_{\text{sq}}^+(\sigma; 4, 0) \}. \quad (19)$$

根据文献[6]中的计算结果, 可以求出 $\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_m$, 但是在能带中点 $\sigma = \epsilon_0$ 处, $\rho_{\text{sq}}(\sigma)$ 和 $\text{Im} \{ G_{\text{sq}}^+(\sigma; 2, 0) \}, \text{Im} \{ G_{\text{sq}}^+(\sigma; 4, 0) \}$ 均趋于无穷大, 因而有必要直接由(2)式计算出 $\rho_{\text{ssq}}(\epsilon_0)_m$, 这时

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} y = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} (\chi - \cos \varphi) = -\cos \varphi,$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sqrt{y^2 - 1} = i \sqrt{1 - \cos^2 \varphi} = i |\sin \varphi|,$$

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ssq}}(\epsilon_0)_m &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^+(\epsilon_0; m, m)_{kk} \\ &= \frac{1}{2\pi^2 V} \int_0^\pi d\varphi \frac{1 - \cos 2m\varphi}{\sin \varphi} \end{aligned}$$

$$= \frac{2}{\pi^2 V} \sum_{j=1}^m \frac{1}{2j-1}. \quad (20)$$

于是 $\pi V \rho_{\text{ssq}}(\epsilon_0)_1 = 2/\pi$, $\pi V \rho_{\text{ssq}}(\epsilon_0)_2 = 8/3\pi$.

再来看看在能带边缘 $\sigma = \epsilon_0 \pm 4V$, 即 $\chi = (\sigma - \epsilon_0)/2V = \pm 2$ 处, 局部态密度 $\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_m$ 为多少, 这时

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} y = \pm 2 - \cos \varphi,$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sqrt{y^2 - 1} = \sqrt{(\pm 2 - \cos \varphi)^2 - 1},$$

从而由(2)式得到

$$G^+(\sigma = \epsilon_0 \pm 4V; m, m)_{kk} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G(\epsilon_0 \pm 4V + i\epsilon; m, m)_{kk}$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{4\pi V} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi (y^2 - 1)^{-1/2} \{1 - [2y(y - \sqrt{y^2 - 1}) - 1]^m\}. \quad (21)$$

不难看出上式的虚部为零, 即

$$\rho_{\text{ssq}}(\epsilon_0 \pm 4V)_m = 0. \quad (22)$$

这样, 我们分别计算了半无限平方晶格在能带中点和能带边缘处的局部态密度; 再利用文献[7]中的数值计算结果, 可将 $\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_1, \rho_{\text{ssq}}(\sigma)_2$ 图示于图 1 中, 为了比较, 也绘出了 $\rho_{\text{sq}}(\sigma)$. (由于三者关于能带中点是对称的, 故只绘出 $\sigma \geq \epsilon_0$ 的部分).

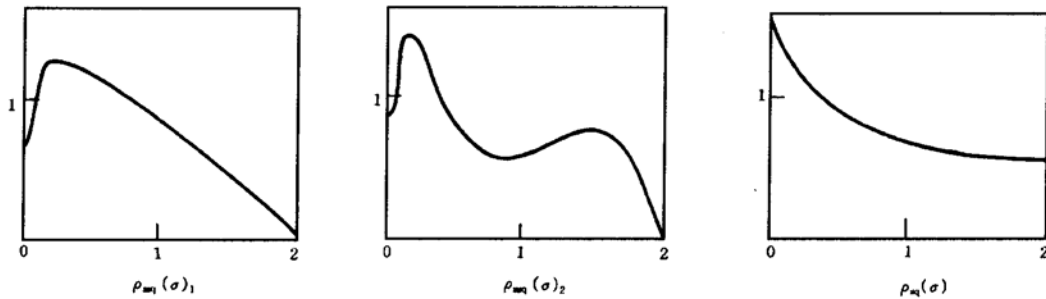


图 1 图中横坐标为 $\chi = (\sigma - \epsilon_0)/2V$, 纵坐标为 $\pi V \rho(\sigma)$

从图 1 中看出, 在能带中点 $\rho_{\text{sq}}(\sigma)$ 趋于无穷, 而 $\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_m$ 为有限值, 同时随 m 增大而增大, 当 $m \rightarrow +\infty$ 时 $\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_m$ 也趋于无穷. 在能带边缘处 $\rho_{\text{sq}}(\sigma) \neq 0$ 而 $\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_m = 0$, 即在半无限平方晶格中不存在能量为 $(\epsilon_0 \pm 4V)$ 的态. $\rho_{\text{sq}}(\sigma)$ 在能带中点不连续, 即 $\sigma = \epsilon_0$ 是其 Van Hove 奇异点^[8]; 而 $\rho_{\text{ssq}}(\sigma)_m$ 连续有限, 其一阶导数也连续, 故没有 Van Hove 奇异点. $\rho_{\text{sq}}(\sigma)$ 没有极值点, 而 $\rho_{\text{ssq}}(\sigma)$ 是有极值点的, 从而呈现某种振荡的性质.

4 表面定域态

假定在半无限平方晶格的表面上格座 l 处存在一个单点对角杂质(例如在清洁理想表面存在一个空位或替位式杂质),它对系统哈密顿量的改变可以看作是一个微扰量,

$$\hat{H}_1 = \epsilon' |1, l\rangle \langle 1, l| \equiv \mathcal{H}_1 |1, l\rangle \langle 1, l|, \quad (23)$$

$$\hat{H}_{\text{总}} = \hat{H} + \hat{H}_1, \quad (24)$$

$$\mathcal{H}_{\text{总}} = \mathcal{H} + \mathcal{H}_1, \quad (25)$$

式中 $\hat{H} = \lim_{s \rightarrow +\infty} \hat{H}_s$, $\mathcal{H} = \lim_{s \rightarrow +\infty} \mathcal{H}_s$, 注意 $\mathcal{H}_1$ 是一个半无限矩阵, 它只有一个矩阵元素不为零, $\mathcal{H}_s$ 是 $\hat{H}_s$ 在坐标表象的矩阵表示.

将 $\mathcal{H}_1$ 看作是 $\mathcal{H}$ 的微扰, 对 $\mathcal{H}_{\text{总}}$ 对应的格林函数进行展开,

$$G'_{\text{ssq}}(\lambda) \equiv (\lambda - \mathcal{H}_{\text{总}})^{-1} = G_{\text{ssq}}(\lambda) + G_{\text{ssq}}(\lambda) T G_{\text{ssq}}(\lambda), \quad (26)$$

式中 $T = \mathcal{H}_1 [I - \mathcal{H}_1 G_{\text{ssq}}(\lambda; 1, 0, 0)]^{-1}$; 注意到表面定域态(定域于表面单点杂质附近的局域态)对应于 $G'_{\text{ssq}}(\lambda)$ 能带外的孤立奇点, 而在能带外 $G_{\text{ssq}}(\lambda)$ 没有奇点, 所以表面定域态存在的条件是 T 有能带外的孤立奇点^[5,8], 即

$$\det [I - \mathcal{H}_1 G_{\text{ssq}}(\lambda; 1, 0, 0)] = 0 \quad (27)$$

有能带外的实数解.

以下求 $G_{\text{ssq}}(\lambda; 1, 0, 0)$, 由(12)式得

$$G_{\text{ssq}}(\lambda; 1, 0, 0) = G_{\text{sq}}(\lambda; 0, 0) - G_{\text{sq}}(\lambda; 2, 0). \quad (28)$$

根据全无限平方晶格的晶格格林函数的递推关系^[6]有

$$\begin{aligned} (\lambda - \epsilon_0) G_{\text{sq}}(\lambda; 0, 0) - V G_{\text{sq}}(\lambda; -1, 0) - V G_{\text{sq}}(\lambda; 1, 0) \\ - V G_{\text{sq}}(\lambda; 0, 1) - V G_{\text{sq}}(\lambda; 0, -1) = 1, \end{aligned} \quad (29)$$

$$G_{\text{sq}}(\lambda; 1, 0) = G_{\text{sq}}(\lambda; -1, 0) = G_{\text{sq}}(\lambda; 0, 1) = G_{\text{sq}}(\lambda; 0, -1), \quad (30)$$

$$\begin{aligned} (\lambda - \epsilon_0) G_{\text{sq}}(\lambda; 1, 0) - V G_{\text{sq}}(\lambda; 2, 0) - V G_{\text{sq}}(\lambda; 0, 0) \\ - V G_{\text{sq}}(\lambda; 1, 1) - V G_{\text{sq}}(\lambda; 1, -1) = 0, \end{aligned} \quad (31)$$

$$G_{\text{sq}}(\lambda; 1, -1) = G_{\text{sq}}(\lambda; 1, 1), \quad (32)$$

所以

$$\begin{aligned} G_{\text{sq}}(\lambda; 2, 0) = \left[\left(\frac{\lambda - \epsilon_0}{2V} \right)^2 - 1 \right] G_{\text{sq}}(\lambda; 0, 0) - \frac{\lambda - \epsilon_0}{4V^2} \\ - 2G_{\text{sq}}(\lambda; 1, 1). \end{aligned} \quad (33)$$

令 $z \equiv 4V/(\lambda - \epsilon_0) = 2/\chi$, 当 λ 对应于能带外的实数时, $0 < |z| < 1$, 依文献[5]知

$$G_{\text{sq}}(\lambda; 0, 0) = \frac{2}{\pi(\lambda - \epsilon_0)} F(z), \quad (34)$$

$$G_{\text{sq}}(\lambda; 1, 1) = \frac{2}{\pi(\lambda - \epsilon_0)} \left[\left(\frac{2}{z^2} - 1 \right) F(z) - \frac{2}{z^2} E(z) \right], \quad (35)$$

式中 $F(z)$, $E(z)$ 分别是第一、二类完全椭圆积分, 代入(33)式得到

$$G_{sq}(\lambda; 2, 0) = \frac{z}{2\pi V} [F(z) + \frac{4}{z^2} E(z)] - \frac{1}{Vz}. \quad (36)$$

将(34)和(36)两式代入(28)式并整理得

$$G_{ssq}(\lambda; 1, 0, 0) = \frac{1}{Vz} - \frac{2}{\pi Vz} E(z). \quad (37)$$

这样, 将(37)式代入(27)式, 得到表面定域态存在的条件是

$$1 - \epsilon' \left[\frac{1}{Vz} - \frac{2}{\pi Vz} E(z) \right] = 0 \quad (38)$$

有 $0 < |z| < 1$ 的实数解. 引入参数 $\alpha \equiv \epsilon'/V$ 和函数 $f(z) \equiv z^{-1} - \frac{2}{\pi z} E(z)$, 则(38)式转化为

$$\alpha^{-1} = f(z). \quad (39)$$

为了确定 $0 < |z| < 1$ 时, 函数 $f(z)$ 的取值范围, 先求它的一阶偏导数(参见附录 A 中的证明)

$$\begin{aligned} \frac{df}{dz} &= -\frac{1}{z^2} + \frac{2}{\pi z^2} E(z) - \frac{2}{\pi z} \left\{ -\frac{1}{z} [F(z) - E(z)] \right\} \\ &= \frac{2}{\pi z^2} [F(z) - \pi/2]. \end{aligned} \quad (40)$$

当 $|z| < 1$ 时, $F(z) > \pi/2$, 那么 $\frac{df}{dz} > 0$, 即 $f(z)$ 在区间 $(-1, 1)$ 上是单调递增的连续函数. 依据椭圆积分表^[9]有

$$f(z)_{\min} = f(-1) = 2/\pi - 1, \quad (41)$$

$$f(z)_{\max} = f(1) = 1 - 2/\pi. \quad (42)$$

于是由(39)式得到表面定域态存在的条件为

$$2/\pi - 1 < \alpha^{-1} < 1 - 2/\pi, \quad (43)$$

即

$$|\alpha| > \frac{\pi}{\pi - 2}, \quad |\epsilon'| > \frac{\pi V}{\pi - 2} \approx 1.88 V. \quad (44)$$

这样, 我们利用晶格格林函数, 求出了在表面上有单点对角杂质时表面定域态的存在条件; 为比较起见, 给出存在单点对角杂质时全无限平方晶格中局域态的存在条件. 采用同样的处理方法, 得到局域态的存在条件为

$$\beta^{-1} \equiv V/\epsilon'' = \frac{z}{2\pi} F(z) \equiv g(z) \quad (45)$$

有 $0 < |z| < 1$ 的解.

$g(z)$ 的一阶偏导数(证明参见附录 A)为

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dz} &= \frac{1}{2\pi} F(z) + \frac{z}{2\pi} \left[-\frac{1}{z^2} F(z) - \frac{1}{z^2(z^2 - 1)} E(z) \right] \\ &= \frac{1}{2\pi(1 - z^2)} E(z) > 0. \end{aligned} \quad (46)$$

可 $g(z)$ 在区间 $(-1, 1)$ 上是单调递增的连续函数, 再依据椭圆积分表^[9]不难发现这时

$g(z)$ 能取到 $(-\infty, +\infty)$ 区间上所有的值,从而方程(45)总有 $0 < |z| < 1$ 的解,不论 β^{-1} (即 ϵ'')取何值.这与文献[5]上的结果是一致的.

所以,在半无限平方晶格中, $|\epsilon|$ 要超过一个临界值才能形成表面定域态,这与全无限平方晶格没有临界值是截然不同的.这种差异在一维晶格中也存在^[10].

附录 A

完全椭圆积分函数

完全椭圆积分函数共有两类,它们的定义分别为^[9]

$$F(z) = \int_0^{\pi/2} d\theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-1/2}, \quad (\text{A.1})$$

$$E(z) = \int_0^{\pi/2} d\theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{1/2}. \quad (\text{A.2})$$

首先来求它们的一阶偏导数

$$dF(z)/dz = z \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^2 \theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-3/2}, \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} dE(z)/dz &= -z \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^2 \theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-1/2} \\ &= -\frac{1}{z} [F(z) - E(z)]. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} \text{而} \quad \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^2 \theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-1/2} &= - \int_0^{\pi/2} \sin \theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-1/2} d\cos \theta \\ &\quad \xrightarrow{\text{分部积分}} \int_0^{\pi/2} d\theta \cos^2 \theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-1/2} + \int_0^{\pi/2} d\theta z^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-3/2}, \end{aligned}$$

$$\text{所以} \quad 2 \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^2 \theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-1/2} = F(z) + \int_0^{\pi/2} d\theta z^2 \sin^2 \theta (1 - \sin^2 \theta) (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-3/2}, \quad (\text{A.5})$$

$$\text{同时} \quad \int_0^{\pi/2} d\theta z^2 \sin^4 \theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-3/2} = \frac{1}{z^2} E(z) + \frac{1}{z^2} \int_0^{\pi/2} d\theta (2z^2 \sin^2 \theta - 1) (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-3/2}. \quad (\text{A.6})$$

结合(A.4)–(A.6)三式可得

$$\int_0^{\pi/2} d\theta \sin^2 \theta (1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-3/2} = -\frac{1}{z^2} F(z) - \frac{1}{z^2(z^2 - 1)} E(z). \quad (\text{A.7})$$

将(A.7)式代入(A.3)式得

$$dF(z)/dz = -\frac{1}{z} \left[F(z) + \frac{1}{z^2 - 1} E(z) \right]. \quad (\text{A.8})$$

其次讨论 $z \rightarrow 0$ 时,它们的渐近性质,这时将 $F(z), E(z)$ 的被积函数作一阶泰勒展开得

$$(1 - z^2 \sin^2 \theta)^{-1/2} = 1 + \frac{1}{2} z^2 \sin^2 \theta \quad (z \rightarrow 0), \quad (\text{A.9})$$

$$(1 - z^2 \sin^2 \theta)^{1/2} = 1 - \frac{1}{2} z^2 \sin^2 \theta \quad (z \rightarrow 0). \quad (\text{A.10})$$

将(A.9), (A.10)两式分别代入(A.1)和(A.2)式并完成积分得到

$$F(z) = \frac{\pi}{2} + \frac{1}{8} \pi z^2, \quad E(z) = \frac{\pi}{2} - \frac{1}{8} \pi z^2 \quad (z \rightarrow 0). \quad (\text{A.11})$$

这样将(A.11)式代入(40)式即可发现: $z \rightarrow 0$ 时, $\frac{df}{dz} \rightarrow 1/4 > 0$.从而保证 $f(z)$ 在整个区间 $(-1, 1)$ 单调.

[1] D. Kalkstein and P. Soven, *Surf. Sci.*, **26**(1971), 85.

[2] 方俊鑫、陆 栋主编, 固体物理学, 第一版(下册)(上海科学技术出版社, 上海, 1981), 第 372 页.

[3] 徐之华、范洪义、徐可胜, 物理学报, **44**(1995), 987.

[4] 郑兆勃编著, 非晶固态材料引论(科学出版社, 北京, 1987), 第 222—252 页.

[5] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, 2nd Edition (Springer-Verlag, Berlin, 1983), p. 81.

- [6] T. Morita, *J. Math. Phys.*, **12**(1971), 1744.
- [7] S. Katsura and S. Inawashiro, *J. Math. Phys.*, **12**(1971), 1622.
- [8] 范洪义、徐之华, 物理学报, **43**(1994), 253.
- [9] 汪胡桢主编, 现代工程数学手册(I)(华中工学院出版社, 武汉, 1985), 第 885 页.
- [10] P. A. Pury and S. A. Cannas, *J. Phys.*, **A24**(1991), L1405.

RELATIONSHIP BETWEEN LATTICE GREEN'S FUNCTIONS FOR THE SEMI-INFINITE AND THE INFINITE SQUARE LATTICES AND ITS APPLICATION

XU ZHI-HUA FAN HONG-YI

(Department of Material Science and Engineering,
University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

(Received 29 May 1995)

ABSTRACT

Based on Ref. [3] (*Acta Physica Sinica*, **44**(1995), 987(in Chinese)), we have derived the relations between lattice Green's functions for the semi-infinite square lattice and the infinite square lattice. The partial density of states and the formation condition of the surface localized state are calculated by virtue of lattice Green's function for the semi-infinite square lattice.

PACC: 6300; 7100; 0365