Двухчастичные состояния в $2D$-модели Хаббарда

© А.С. Саакян

Государственный инженерный университет Армении,
375009 Ереван, Армения

E-mail: root@yeriac.arminco.com

(Поступила в окончательном виде 4 ноября 1999 г.)

Предложено точное решение задачи двух синглетных электронов (бесспиновых бозонов), взаимодействующих посредством потенциала хаббардовского типа на ограниченной квадратной решетке. Построены точные двухчастичные состояния и энергетический спектр.

1. В связи с поиском механизмов высокотемпературной сверхпроводимости [1], исследованием магнитных свойств сильнокоррелированных электронных систем [2], а также проблемы нулевых дефектонов в адсорбированных монослоях He^3–He^4 на поверхности графита [3] существует интерес к двухчастичной проблеме на низкоразмерной ограниченной решетке. Свойства этих систем исследуются в рамках решеточных моделей с δ-взаимодействием (модели хаббардовского типа, модель решеточных бесспиновых бозонов и т. д.) [4,5]. Знание точных двухчастичных состояний в рамках этих моделей позволяет исследовать эффективное двухчастичное взаимодействие в многочастичной системе и в связи с этим возможную перестройку основного состояния системы [6]. Точные двухчастичные состояния известны только на $1D$ ограниченной решетке [7], а для $2D$-решетки точные результаты отсутствуют. В работе [8] двухчастичные состояния на $1D$ и $2D$ ограниченных хаббардовских решетках исследованы вариационным методом, а в [9] исследованы связанные состояния на $2D$- и $3D$-решетках, однако использованный подход Лифшица в случае высших размерностей не приводит к точным результатам.

В настоящей статье рассмотрена задача двух хаббардовских электронов (δ-взаимодействующих бесспиновых бозонов) на квадратурной решетке $N \times N$. Построены точные двухчастичные состояния и энергетический спектр. Полагается, что решетка свернута в тор, что обеспечивает выполнение циклических граничных условий.

2. В системе центра масс уравнение Шредингера для двух частиц на квадратной решетке имеет вид

$$-t(\Delta_x^2 + \Delta_y^2)\Psi(x,y) + U\delta_{x0}\delta_{y0}\Psi(x,y) = E\Psi(x,y), \quad (1)$$

где t — амплитуда туннелирования, U — амплитуда δ-взаимодействия, $\Delta_{x,y}^2$ — конечноразностные операторы II порядка, x, y — компоненты $2D$ дискретного радиус-вектора относительного движения.

В дальнейшем будем считать, что собственные значения параметризованы следующем образом:

$$E = -4t(\cos p_1 + \cos p_2). \quad (2)$$

Разобьем координатную плоскость на четыре области: I ($x < 0$, $x < 0$), II ($x > 0$, $y > 0$), III ($x < 0$, $y > 0$), IV ($x > 0$, $y < 0$) и будем искать волновую функцию в виде суперпозиции плоских волн в каждой из четырех областей

$$\Psi_{\mathrm{I}}(x,y) = A_1 e^{i(p_1x+p_2y)} + A_2 e^{-i(p_1x+p_2y)} + A_3 e^{i(p_1x-p_2y)} + A_4 e^{-i(p_1x-p_2y)},$$
$$\Psi_{\mathrm{II}}(x,y) = B_1 e^{i(p_1x+p_2y)} + B_2 e^{-i(p_1x+p_2y)} + B_3 e^{i(p_1x-p_2y)} + B_4 e^{-i(p_1x-p_2y)},$$
$$\Psi_{\mathrm{III}}(x,y) = C_1 e^{i(p_1x+p_2y)} + C_2 e^{-i(p_1x+p_2y)} + C_3 e^{i(p_1x-p_2y)} + C_4 e^{-i(p_1x-p_2y)},$$
$$\Psi_{\mathrm{IV}}(x,y) = D_1 e^{i(p_1x+p_2y)} + D_2 e^{-i(p_1x+p_2y)} + D_3 e^{i(p_1x-p_2y)} + D_4 e^{-i(p_1x-p_2y)}. \quad (3)$$

На волновые функции (3) следует наложить условия

$$\Psi_{\mathrm{I}}(-x,-y) = \Psi_{\mathrm{II}}(x,y), \quad \Psi_{\mathrm{III}}(-x,-y) = \Psi_{\mathrm{IV}}(x,y), \quad (4)$$

поскольку состояния Ψ являются также собственными функциями оператора четности.

Из условия (4) и выражений (3) следует, что

$$B_2 = A_1, \quad B_1 = A_2, \quad B_4 = A_3, \quad B_3 = A_4,$$
$$D_2 = C_1, \quad D_1 = C_2, \quad D_4 = C_3, \quad D_3 = C_4. \quad (5)$$

Учтем также, что на границах областей волновые функции должны совпасть

$$\Psi_{\mathrm{I}}(0,y) = \Psi_{\mathrm{IV}}(0,y); \quad \Psi_{\mathrm{III}}(0,y) = \Psi_{\mathrm{IV}}(0,y);$$
$$\Psi_{\mathrm{I}}(x,0) = \Psi_{\mathrm{III}}(x,0); \quad \Psi_{\mathrm{II}}(x,0) = \Psi_{\mathrm{IV}}(x,0), \quad (6)$$

так что в результате

$$A_1 + A_4 = C_2 + C_3, \quad A_1 + A_3 = C_1 + C_3,$$
$$A_2 + A_3 = C_1 + C_4, \quad A_2 + A_4 = C_2 + C_4. \quad (7)$$

Из этих условий, в частности, следует совпадение волновых функций (3) в нуле.

Подстановка выражений (3) в уравнение (1) с учетом параметризации (2) приводит к следующим уравнениям:

$$\left[-\frac{\eta}{2}-i(\sin p_1+\sin p_2)\right]A_1 + \left[-\frac{\eta}{2}+i(\sin p_1+\sin p_2)\right]A_2 + \left[-\frac{\eta}{2}-i(\sin p_1-sin p_2)\right]A_3 + \left[-\frac{\eta}{2}+i(\sin p_1-sin p_2)\right]A_4=0, \quad (8)$$

$$\left[-\frac{\eta}{2}-i(\sin p_1-\sin p_2)\right]C_1 + \left[-\frac{\eta}{2}+i(\sin p_1-\sin p_2)\right]C_2 + \left[-\frac{\eta}{2}-i(\sin p_1+sin p_2)\right]C_3 + \left[-\frac{\eta}{2}+i(\sin p_1+sin p_2)\right]C_4=0,$$

$$\eta=\frac{U}{2t}. \quad (9)$$

Введем векторы

$$n_i\left(-\frac{\eta}{2}-i(\sin p_1+\sin p_2), -\frac{\eta}{2}+i(\sin p_1+\sin p_2), -\frac{\eta}{2}-i(\sin p_1-\sin p_2), -\frac{\eta}{2}+i(\sin p_1-\sin p_2)\right),$$

$$a_i(A_1,A_2,A_3,A_4), \quad b_i(C_3,C_4,C_1,C_2).$$

Тогда уравнения (8) и (9) принимают вид

$$n_ia_i=0, \quad n_ib_i=0, \quad (10)$$

откуда следует, что векторы a_i и c_i линейно зависимы

$$c_i=\lambda a_i. \quad (11)$$

Добавив к соотношению (11) условие равенства волновых функций (3) в нуле, получим $\lambda=1$, и тогда условия (7) выполняются автоматически.

Совершим в уравнениях (8) и (9) комплексное сопряжение. Тогда легко заметить, что

$$A_2^*=\mu A_1, \quad A_1^*=\mu A_2, \quad A_3^*=\mu A_4, \quad A_4^*=\mu A_3, \quad (12)$$

откуда следует

$$|A_1|^2=|A_2|^2, \quad |A_3|^2=|A_4|^2, \quad |\mu|^2=1. \quad (13)$$

Представим их как

$$A_1=|A_1|e^{i\varphi_1}, \quad A_2=|A_1|e^{i\varphi_2}, \quad A_3=|A_3|e^{i\varphi_3}, \quad A_4=|A_3|e^{i\varphi_4}, \quad \mu=e^{i\varphi_0}. \quad (14)$$

Тогда уравнения (8) и (9) переписываются в виде

$$\alpha|A_1|\cos\left(\delta_1+\varphi_1+\frac{\varphi_0}{2}\right) + \beta|A_2|\cos\left(\delta_2+\varphi_2+\frac{\varphi_0}{2}\right)=0, \quad (15)$$

где

$$\alpha,\beta=\left[\frac{\eta^2}{4}+(\sin p_1\pm\sin p_2)^2\right]^{1/2},$$

$$\delta_{1,2}=-\mathrm{arctg}\,\frac{\eta}{2}(\sin p_1\pm\sin p_2). \quad (16)$$

Уравнению (15) можно удовлетворить, полагая

$$\varphi_{1,2}=-\delta_{1,2}-\frac{\varphi_0}{2}+\frac{\pi}{2} \quad (17)$$

и выбрав $\varphi_0=\pi$, чтобы выполнилось граничное условие

$$\lim_{\substack{U\to\infty\\ x,y\to 0}}\Psi(x,y)=0, \quad (18)$$

означающее, что при бесконечном отталкивании две частицы не могут попасть в один узел решетки.

Тогда волновые функции (3) принимают вид

$$\Psi_{\mathrm{I,II}}=|A_1|\cos(p_1x+p_2y\mp\delta_1)+|A_3|\cos(p_1x-p_2y\mp\delta_2),$$

$$\Psi_{\mathrm{III,IV}}=|A_1|\cos(p_1x-p_2y\mp\delta_1) + |A_3|\cos(p_1x+p_2y\mp\delta_2). \quad (19)$$

Здесь мы переобозначили произведения $\alpha|A_1|$ и $\beta|A_3|$ через $|A_{1,3}|$.

Далее заметим, что при перестановке параметров p_1 и p_2 получаются новые двухчастичные состояния, соответствующие тем же собственным значениям

$$\Psi'_{\mathrm{I,II}}=|A'_1|\cos(p_2x-p_1y\mp\delta_1)+|A'_3|\cos(p_2x-p_1y\pm\delta_2),$$

$$\Psi'_{\mathrm{III,IV}}=|A'_1|\cos(p_2x-p_1y\mp\delta_1) + |A'_3|\cos(p_2x+p_1y\pm\delta_2), \quad (20)$$

где учтено, что

$$\delta_1(p_2,p_1)=\delta_1(p_1,p_2), \quad \delta_2(p_2,p_1)=-\delta_2(p_1,p_2). \quad (21)$$

Тогда общее решение уравнения (1) следует представить в виде суперпозиции двухчастичных состояний (19) и (20)

$$\Psi(x,y)=\Psi(p_1x;p_2y)+\Psi(p_2x;p_1y). \quad (22)$$

Наложим на волновую функцию (21) условие

$$\Psi_{\mathrm{I}}(y,-x)=\Psi_{\mathrm{IV}}(x,y), \quad \Psi_{\mathrm{II}}(y,-x)=\Psi_{\mathrm{III}}(x,y),$$

$$\Psi_{\mathrm{III}}(y,-x)=\Psi_{\mathrm{I}}(x,y), \quad \Psi_{\mathrm{IV}}(y,-x)=\Psi_{\mathrm{II}}(x,y). \quad (23)$$

Соотношения (23) связаны со следующим обстоятельством: поворот координатных осей на угол $\theta=\pi/2$ не должен менять состояний системы, тогда поворот на $2\theta=\pi$ приводит к (4) (Это связано с симметрией квадратной решетки).

Тогда непосредственной проверкой можно убедиться, что $|A_1| = |A_1'|$, $|A_3| = |A_3'|$. Далее при преобразовании $p_1 \to -p_1$ или $p_2 \to -p_2$ волновая функция должна переходить в себя. Это ограничение обусловлено ее однозначностью в каждой из четырех координатных областей. Оно дает $|A_1| = |A_3|$, так что окончательно с точностью до произвольного сомножителя для $\Psi(x, y)$ получаем

$$\Psi_{\mathrm{I,II}} = \cos(p_1x + p_2y \mp \delta_1) + \cos(p_1x - p_2y \mp \delta_2) + \cos(p_2x + p_1y \mp \delta_1) + \cos(p_2x - p_1y \pm \delta_2),$$

$$\Psi_{\mathrm{III,IV}} = \cos(p_1x - p_2y \mp \delta_1) + \cos(p_1x + p_2y \mp \delta_2) + \cos(p_2x - p_1y \mp \delta_1) + \cos(p_2x + p_1y \pm \delta_2). \quad (24)$$

Итак, двухчастичные состояния представляются в виде суперпозиции стоячих волн, в то время как на бесконечной решетке они выражаются через функции Бесселя [10]. На наш взгляд, представляется интересным осуществить связь полученных здесь состояний (24) с (16) из работы [10] при условии устремления постоянной решетки к нулю или размеров решетки к бесконечности.

На состояния (24) следует наложить циклические граничные условия. Для этого заметим, что (24) можно представить в виде

$$\Psi = \Psi_{\mathrm{I}}\theta(-x)\theta(-y) + \Psi_{\mathrm{II}}\theta(x)\theta(y) + \Psi_{\mathrm{III}}\theta(-x)\theta(y) + \Psi_{\mathrm{IV}}\theta(x)\theta(-y), \quad (25)$$

где $\theta(x)$ — функция Хевисайда.

Тогда совершенно очевидно, что

$$\Psi_{\mathrm{I}}(x+N, y+N) + \Psi_{\mathrm{II}}(x+N, y+N) + \Psi_{\mathrm{III}}(x+N, y+N) + \Psi_{\mathrm{IV}}(x+N, y+N) = \Psi_{\mathrm{II}}(x, y), \quad (26)$$

из (24) и (26) получаем следующие уравнения на $p_{1,2}$:

$$p_1 = \frac{\delta_1 + \delta_2}{2N} + \frac{\pi(n+m)}{2N},$$

$$p_2 = \frac{\delta_1 - \delta_2}{2N} + \frac{\pi(n-m)}{2N}, \quad (27)$$

где $n, m = 0, 1, \dots N-1$.

Итак, энергетический спектр полностью задается соотношениями (2) и (27).

Энергия основного состояния системы

$$E_0 = -8t \cos\frac{\delta_1}{2N} \cos\frac{\delta_2}{2N} \quad (n = m = 0). \quad (28)$$

В частности, при $U = +\infty$

$$E_0 = -8t \cos^2\frac{\pi}{4N} \quad (29)$$

или для асимптотически больших N

$$E_0 = -8t\left(1 - \frac{\pi^2}{16N^2}\right). \quad (30)$$

Вариационные расчеты, проведенные в [8], показывают, что при $N \gg 1$ энергия основного состояния представима в виде

$$E_0 = -8t\left(1 - \frac{\alpha}{N^2}\right), \quad (31)$$

где параметр α, в частности, для $U/t = 10$ меняется в пределах от 0.618 до 0.682 в зависимости от размеров решетки, а с увеличением U/t медленно растет. Полученные здесь результаты (29) и (30) показывают, что энергия истинного основного состояния ниже вариационной и, кроме того, параметр α в пределе $U = +\infty$ от размеров решетки не зависит.

Список литературы

[1] J.C. Bednorz, K.A. Müller. Z. Phys. **B64**, 189 (1986).
[2] Y. Nagaoka. Phys. Rev. **B141**, *1*, 392 (1966).
[3] M. Bretz. Phys. Rev. Lett. **38**, *2*, 501 (1977).
[4] J. Hubbard. Proc. R. Soc. **A276**, 238 (1963); **277**, 237 (1964).
[5] C.N. Yang. Phys. Rev. Lett. **19**, *4*, 1312 (1967).
[6] А.Н. Кочарян, А.С. Саакян. ФТТ **40**, *4*, 761 (1998).
[7] А.Н. Кочарян, А.С. Саакян. ФТТ **40**, *2*, 366 (1998).
[8] L. Chen, C. Mei. Phys. Rev. **B39**, *13*, 9006 (1989).
[9] Sh. Dong, Ch.N. Yang. Rev. Math. Phys. **146**, *1*, 139 (1989).
[10] Г.А. Варданян, А.С. Саакян. ЖЭТФ **88**, *3*, 1079 (1985).