

УДК 538.975

©1994

ТОЧНАЯ ДВУХЧАСТИЧНАЯ ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ЦЕПОЧКИ ХАББАРДА

В.Л.Булатов, И.Ю.Данилов

При помощи техники координатного анзаца Бете получена волновая функция системы двух частиц для модели Хаббарда. Получены выражения для энергетического спектра состояний системы в случае полубесконечной цепочки. Описаны два различных типа таммовских состояний.

Системы квазиодномерных проводников и полимеров [1] могут описываться моделью Хаббарда. В этой модели рассматривается цепочка атомов, каждый из которых может нести переменное число частиц спина $S = 1/2 : 0, 1$ или 2. Предполагается, что энергия взаимодействия отлична от нуля только тогда, когда две частицы находятся на одном атоме и, как следствие, в синглетном состоянии.

При изучении свойств многочастичных систем обычно решают задачу в конечной области с выбранными из соображений удобства периодическими граничными условиями (например, в [2,3]). Этот метод постановки граничных условий неудовлетворителен, так как при устремлении размеров системы к бесконечности информация о поверхностных эффектах полностью теряется. Более того, при изучении конечной системы атомы на концах цепочки занимают выделенное положение в ряду других атомов системы. Этот факт можно учесть, вводя в гамильтониан системы два дополнительных члена, из-за которых энергия взаимодействия первого и последнего атомов системы с находящимися на них частицами отличается от энергии взаимодействия других атомов с находящимися на них частицами.

В предлагаемой работе используется гамильтониан с дополнительным взаимодействием только на первом атоме системы. Рассматривается случай двух частиц. Этими частицами считаются электроны, но результаты легко обобщаются на случай электрона и дырки. В разделе 1 получены общий вид волновой функции и уравнения Янге-Бете для конечной системы. В разделе 2 изучаются связанные состояния для полубесконечной цепочки атомов.

При решении задачи использовался координатный анзац Бете аналогично работе [4] (одномерный Бозе-газ).

1. Уравнения Янге–Бете

Вторично-квантованный гамильтониан модели имеет вид

$$H = -t \sum_{i=1}^n (b_{i-1,\sigma}^+ b_{i,\sigma} + b_{i+1,\sigma}^+ b_{i,\sigma}) - V \sum_{i,\sigma} (b_{i,\sigma}^+ b_{i,\sigma} b_{i,\sigma}^+ b_{i,\sigma}) - U \sum_{\sigma} b_{1,\sigma}^+ b_{1,\sigma}. \quad (1a)$$

Здесь n -число атомов цепочки; b_i^+, b — операторы рождения и уничтожения Ферми-частиц спина $1/2$; $i, i+1, i-1$ пробегает значения от 1 до n .

Переписывая гамильтониан через матричные элементы, будем иметь

$$H_{l,m,l',m'} = -t \left((\delta_{l',l+1} + \delta_{l,l'-1}) \delta_{m,m'} + (\delta_{m,m'+1} + \delta_{m-1,m'}) \delta_{l,l'} \right) - \\ - V \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \delta_{l,m} - U \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \{ \delta_{l,1} + \delta_{m,1} \}, \quad (1b)$$

где $l, m, l', m', l-1, m-1, l'+1, m'+1$ пробегает значения от 1 до n .

В (1a), (1b) V описывает взаимодействие частиц между собой; $V > 0$ (отталкивание) соответствует случаю, когда наши частицы являются просто электронами; $V < 0$ (притяжение) соответствует электрону и дырке; U описывает взаимодействие частиц с первым атомом поверхности. Первые два слагаемые в гамильтониане (1a), (1b) есть матричные элементы перескока. Мы в дальнейшем будем считать $t = 1$; δ — символ Кронекера.

Мы будем рассматривать симметричные состояния, для которых $\Phi(l, m) = \Phi(m, l)$, т.е. синглетные состояния. В случае антисимметричной орбитальной части волновой функции $\Phi(l, m)$ решение задачи становится элементарным.

Для симметричных решений будем иметь следующую систему уравнений

$$\begin{aligned} 1) \quad l > m; n > l; m > 1 & \quad - \{ \Phi(l, m+1) + \Phi(l, m-1) + \Phi(l+1, m) + \Phi(l-1, m) \} = E \Phi(l, m), \\ 2) \quad l = m; n > l > 1 & \quad - 2 \{ \Phi(m, m-1) + \Phi(m+1, m) \} - V \Phi(m, m) = E \Phi(m, m), \\ 3) \quad l > m; n > l; m = 1 & \quad - \{ \Phi(l, 2) + \Phi(l+1, 1) + \Phi(l-1, 1) \} - U \Phi(l, 1) = E \Phi(l, 1), \\ 4) \quad l = m; m = 1 & \quad - 2 \Phi(2, 1) - \{ V + E + 2U \} \Phi(1, 1) = 0, \\ 5) \quad l > m; l = n; m > 1 & \quad - \{ \Phi(n, m+1) + \Phi(n, m-1) + \Phi(n-1, m) \} = E \Phi(n, m), \\ 6) \quad l > m; l = n; m = 1 & \quad - \{ \Phi(n, 2) + \Phi(n-1, 1) \} = (E + U) \Phi(n, 1), \\ 7) \quad l = m; l = n; m > 1 & \quad - 2 \Phi(n, n-1) = (E + V) \Phi(n, n). \end{aligned} \quad (2)$$

Уравнения 5), 6) системы (2) соответствуют случаю, когда одна из частиц находится на последнем атоме системы; уравнение 7) соответствует случаю, когда на дальнем конце цепочки находятся две частицы. Уравнения 5)–7) дают граничное условие на втором конце.

Мы ищем решение в виде анзаца Бете, согласно работе [5], в области, где $l > m$

$$\Phi(l, m) = \sum_P C(\varepsilon_1, k_1, \varepsilon_2, k_2, P) \exp \{ i \varepsilon_{p1} k_{p1} l + i \varepsilon_{p2} k_{p2} m \}, \quad (3)$$

$$\varepsilon_1, \varepsilon_2 = +1, -1.$$

Анзац Бете представляет собой сумму прошедших и отраженных плоских волн с квазиимпульсами k_1 и k_2 (не обязательно вещественными). Каждая волна входит в сумму со своим коэффициентом $C(\varepsilon_1, k_1, \varepsilon_2, k_2, P)$. Сумма берется по всем перестановкам P набора чисел (1,2). Подставляя (3) в уравнения 1)–3) системы (2), получим

$$\Phi(l, m) = \sum \left(U \exp\{-i\varepsilon_1 k_1\} - 1 \right) \left(U \exp\{-i\varepsilon_2 k_2\} - 1 \right) \times \\ \times \left[1 + iV/(\sin \varepsilon_1 k_1 + \sin \varepsilon_2 k_2) \right] \varepsilon_1 \varepsilon_2 \times$$

$$\times \sum_p \left[1 + iV/(\sin \varepsilon_{P1} k_{P1} - \sin \varepsilon_{P2} k_{P2}) \right] \times \exp \{ i\varepsilon_{P1} k_{P1} l + i\varepsilon_{P2} k_{P2} m \}. \quad (4)$$

Уравнения 5)–7) системы (3) дают нам условия для квазиимпульсов. Подставляя (4) в 5)–7) системы (3) и приравнявая нулю коэффициенты при $\exp\{\pm i k_1 m\}$, $\exp\{\pm i k_2 m\}$, получим систему уравнений Янга–Бете для нашей задачи

$$\exp \{ 2i k_1 (n + 1) \} = \left(U \exp\{i k_1\} - 1 \right) \left[1 + iV/(-\sin k_1 + \sin k_2) \right] \times \\ \times \left[1 + iV/(-\sin k_1 - \sin k_2) \right] \times$$

$$\times \left\{ \left(U \exp\{i k_1\} - 1 \right) \left[1 + iV/(\sin k_1 + \sin k_2) \right] \left[1 + iV/(\sin k_1 - \sin k_2) \right] \right\}^{-1},$$

$$\exp \{ 2i k_2 (n + 1) \} = \left(U \exp\{i k_2\} - 1 \right) \left[1 + iV/(\sin k_1 - \sin k_2) \right] \times \\ \times \left[1 + iV/(-\sin k_1 - \sin k_2) \right] \times$$

$$\times \left\{ \left(U \exp\{i k_2\} - 1 \right) \left[1 + iV/(\sin k_1 + \sin k_2) \right] \left[1 + iV/(-\sin k_1 + \sin k_2) \right] \right\}^{-1}. \quad (5)$$

Затем, что можно было ввести дополнительное взаимодействие и на втором конце цепочки; тогда уравнения 5)–7) системы (3) переписываются в форме, аналогичной уравнениям 1)–4) этой системы, а уравнения Янга–Бете отличаются от 5) лишь появлением дополнительного множителя в правой части. Дополнительное взаимодействие на втором конце не дает новых классов решений.

2. Энергетический спектр системы в случае полубесконечной цепочки

Предположим, что $k_1(k_2)$ — вещественное число, тогда при переходе к пределу $n \rightarrow \infty$ (случай полубесконечной цепочки) соответствующее уравнение из системы (5) дает сплошной спектр.

Допустим теперь, что $k_1(k_2)$ лежат в верхней части комплексной плоскости. Это приводит к тому, что $|\exp\{ik_1\}| < 1$ ($|\exp\{ik_2\}| < 1$). Тогда, устремляя опять $n \rightarrow \infty$, получим из системы (5) уравнение с нулевой правой частью. Решая это уравнение и учитывая требование нормируемости волновой функции, а также условие вещественности энергии, мы сможем получить все решения задачи, отвечающие комплексным k . Проведение в жизнь этого плана приводит к утомительным выкладкам, поэтому мы ограничимся только окончательными результатами.

1) Объемные двухчастичные состояния. Это область сплошного спектра, k_1 и k_2 вещественны. Энергия больше -4 и меньше 4 . Волновая функция дается выражением (4) и соответствует свободному движению электронов по цепочке (рис. 1, зона 1).

2) Объемные связанные двухчастичные состояния. Пусть

$$\exp\{ik_1\} = \exp\{ik\}b, \quad \exp\{ik_2\} = \exp\{-ik\}b,$$

где $k \in (0, 2\pi)$, а b задается выражениями

$$b = \left[-V + (V^2 + 16 \cos\{k/2\}^2)^{1/2} \right] / 4 \cos\{k/2\}, \quad V > 0,$$

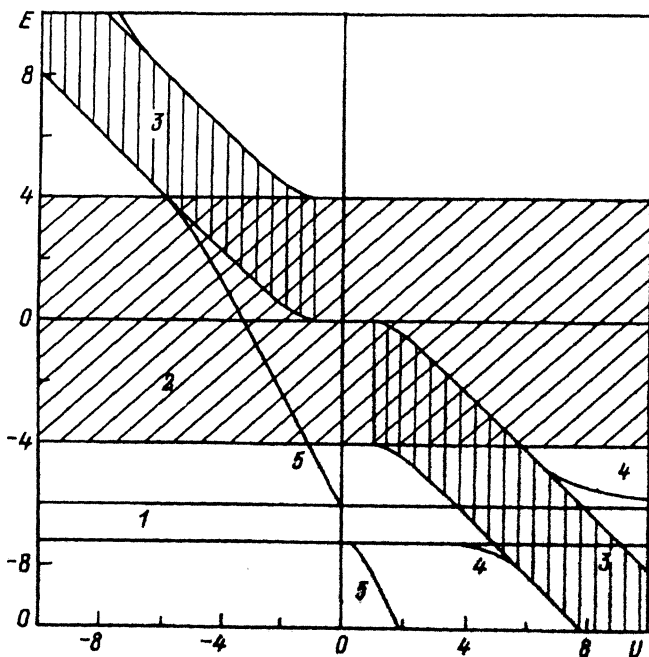


Рис. 1. Спектр системы при $V=6$.

$$b = \left[-V - (V^2 + 16 \cos\{k/2\}^2)^{1/2} \right] / 4 \cos\{k/2\}, \quad V < 0. \quad (6)$$

Волновая функция (4) переписывается как

$$\begin{aligned} \Phi(l, m) = & \left(U \exp\{ik/2\}/b - 1 \right) \left(U \exp\{ik/2\}/b - 1 \right) \times \\ & \times \left(1 + iV \operatorname{ctg} k/2 / \left(V^2 + 16 \cos^2 k/2 \right)^{1/2} \right) \times \exp\{ik/2(l-m)\} b^{l+m} + \\ & + \left(U \exp\{-ik/2\}/b - 1 \right) \left(U \exp\{ik/2\}/b - 1 \right) \times \\ & \times \left(1 - iV \operatorname{ctg} k/2 / \left(V^2 + 16(\cos k/2)^2 \right)^{1/2} \right) \times \exp\{ik/2(-l+m)\} b^{l+m} - \\ & - \left(U \exp\{ik/2\}/b - 1 \right) \left(U \exp\{ik/2\}/b - 1 \right) \times \\ & \times \left(1 + iV \operatorname{ctg} k/2 / \left(V^2 + 16(\cos k/2)^2 \right)^{1/2} \right) \times \exp\{ik/2(l+m)\} b^{l-m} - \\ & - \left(U \exp\{ik/2\}b - 1 \right) \left(U \exp\{ik/2\}/b - 1 \right) \times \\ & \times \left(1 - iV \operatorname{ctg} k/2 / \left(V^2 + 16(\cos k/2)^2 \right)^{1/2} \right) \times \exp\{-ik/2(l+m)\} b^{l-m}. \quad (7) \end{aligned}$$

Энергия дается выражениями

$$E = - [V^2 + 16 \cos^2\{k/2\}]^{1/2}, \quad V > 0,$$

$$E = [V^2 + 16 \cos^2\{k/2\}]^{1/2}, \quad V < 0. \quad (8)$$

Объемные связанные состояния соответствуют случаю, когда частицы перемещаются по цепочке как единое целое (рис. 1, зона 2). Здесь и далее волновые функции не нормированы.

3) Поверхностно-объемные состояния. Пусть

$$\exp\{ik_1\} = 1/U, \quad |\exp\{ik_2\}| = 1,$$

тогда волновая функция

$$\begin{aligned} \Phi(l, m) = & \sum_{\varepsilon=+1,-1} \left[(U \exp\{-i\varepsilon k_2\} - 1) \left(1 + iV/2 (\sin\{k_1\} + \sin\{\varepsilon k_2\}) \right) \right] \times \\ & \times \left(1 + iV/2 (\sin\{k_1\} - \sin\{\varepsilon k_2\}) \right) (1/U)^l \exp(i\varepsilon k_2 m) + \\ & + (U \exp\{-i\varepsilon k_2\} - 1) \left(1 + iV/2 (\sin\{k_1\} + \sin\{\varepsilon k_2\}) \right) \times \end{aligned}$$

$$\times \left(1 + iV/2 (-\sin(k_1) + \sin\{\varepsilon k_2\}) \right) (1/U)^m \exp(i\varepsilon k_2) \Big] \varepsilon. \quad (9)$$

Это зона сплошного спектра (рис. 1, область 3), соответствующая случаю, когда одна частица локализована около поверхности, а вторая свободно движется по цепочке

4) Поверхностные двухчастичные состояния (таммовские состояния). Возможны два типа связанных состояний двух частиц и поверхностно.

а) Поверхностное связанное двухчастичное состояние, называемое нами состоянием *B*-типа (рис. 1, кривые 5). Его волновая функция

$$\Phi(l, m) = A^l \{1/U\}^m, \quad (10)$$

где *A* дается следующими формулами:

$$A = z + [z^2 + 1]^{1/2} \quad \text{при} \quad U \in \left(-V/2 + [(V/2)^2 + 1]^{1/2}; 0 \right)$$

$$\text{и} \quad \left(-V/4 + [(V/4)^2 + 1]^{1/2}; \infty \right),$$

$$A = z - [z^2 + 1]^{1/2} \quad \text{при} \quad U \in \left(-\infty, -V/2 - [(V/2)^2 + 1]^{1/2} \right),$$

$$V < 0,$$

$$A = z - [z^2 + 1]^{1/2} \quad \text{при} \quad U \in \left(-\infty, -V/4 - [(V/4)^2 + 1]^{1/2} \right)$$

$$\text{и} \quad \left(0, -V/2 + [(V/2)^2 + 1]^{1/2} \right),$$

$$A = z + [z^2 + 1]^{1/2} \quad \text{при} \quad U \in \left(-V/2 + [(V/2)^2 + 1]^{1/2}, \infty \right) \quad (11)$$

$$2z = -V + 1/U - U. \quad (12)$$

Спектр этого состояния имеет три ветви (рис. 1, кривые 5), при $U = 0$ *B*-состояние отщепляется от зоны объемных связанных состояний, и при некоторой энергии (выражения (11)) присоединяются к

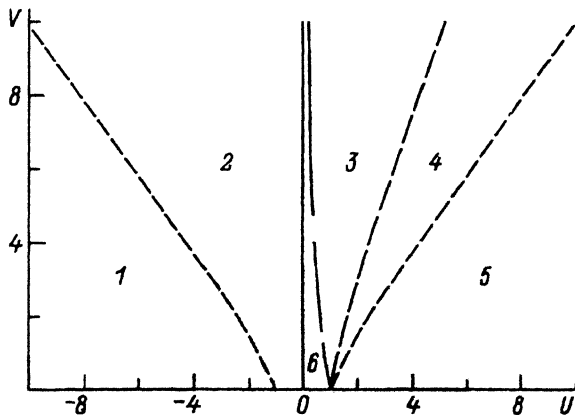


Рис. 2. Области существования *B*- и *D*-состояний на плоскости (*U*, *V*).

нижнему краю зоны поверхностно-объемных состояний при некотором $U < 0$. При этом же U от верхнего края зоны поверхностно-объемных состояний отщепляется другая ветвь спектра. Третья ветвь спектра появляется при $U > 0$ (выражения (11)).

На рис. 2 изображены области существования этого состояния на U, V -диаграмме. Единственной запрещенной зоной для B -состояний является зона b . В зоне 1 B -состояние лежит выше поверхностно-объемного, а в зоне 2 — ниже, но все же выше объемных связанных состояний. В зонах 3, 4 и 5 B -состояние по энергии лежит ниже как поверхностно-объемных состояний, так и объемных связанных.

На рис. 3 изображено распределение вероятности обнаружения частиц на узлах цепочки. На рис. 3,а ($U = -4$) B -состояние изображено вблизи точки присоединения к зоне поверхностно-объемных состояний, поэтому распределение вероятностей для B -состояний имеет вид, похожий на распределение вероятностей для поверхностно-объемных состояний (пики вдоль координатных осей). На рис. 3,с ($U = 0.6$) B -состояние изображено вблизи точки отщепления от зоны объемных связанных состояний, поэтому распределение вероятностей для B -состояний имеет вид, похожий на распределение вероятностей для объемных связанных состояний (пики по диагонали). Рис. 3,б изображает B -состояние в промежуточной точке ($U = -1$). Частицы сильно локализованы вблизи поверхности.

б) Возможно, что связанное состояние поверхности и двух частиц будет иметь иную структуру. Возникнет другое двухчастичное связанное состояние — D -типа. Если частицы отталкиваются ($V > 0$), то D -состояние существует только при притяжении поверхностью частиц ($U > 0$).

Спектр D -состояния имеет две ветви. При притяжении между частицами ($V > 0$) с ростом U от зоны объемных связанных состояний отщепляется D -состояние и затем присоединяется к нижнему краю зоны поверхностно-объемных состояний при некотором U . При этом значении U от верхнего края зоны поверхностно-объемных состояний отщепляется вторая ветвь. При $U \rightarrow \infty$ обе частицы будут сильно локализованы вблизи поверхности, D -состояние сливается с зоной связанных объемных состояний (рис. 1, кривые 4)

$$\Phi(l, m) = (U/A - 1) \left[(1/U)^l A^m + (A - 1/A) / (1/U - U) A^l (1/U)^m \right] -$$

$$-(UA - 1)(1/A)^m (1/U)^l, \quad (13)$$

$$E = -A - 1/A - U - 1/U. \quad (14)$$

Здесь

$$\exp\{ik_2\} = A, \quad \exp\{ik_1\} = 1/U \quad (|1/U| < 1),$$

A задается следующими выражениями:

$$V > 0$$

$$A = z - [z^2 + 1]^{1/2}, \quad U \in (V/2 + [(V/2)^2 + 1]^{1/2}, \infty),$$

$$A = z + [z^2 + 1]^{1/2}, \quad U \in (V/4 + [(V/4)^2 + 1]^{1/2}, V/2 + [(V/2)^2 + 1]^{1/2}),$$

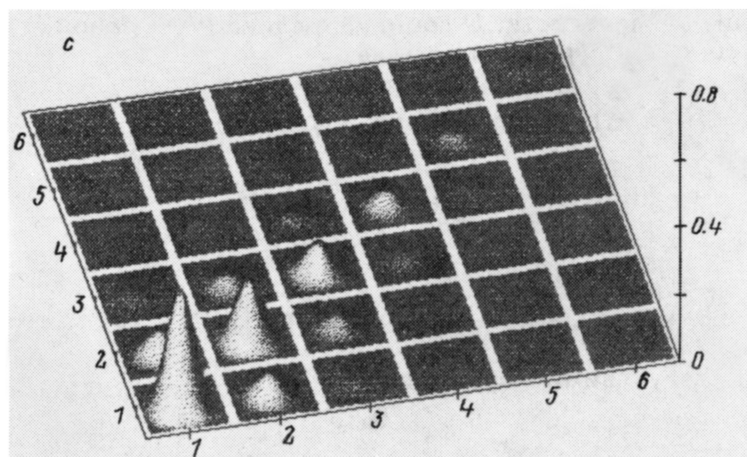
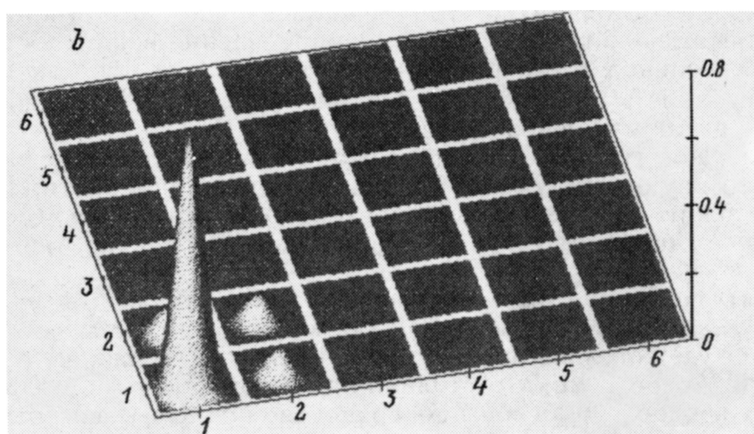
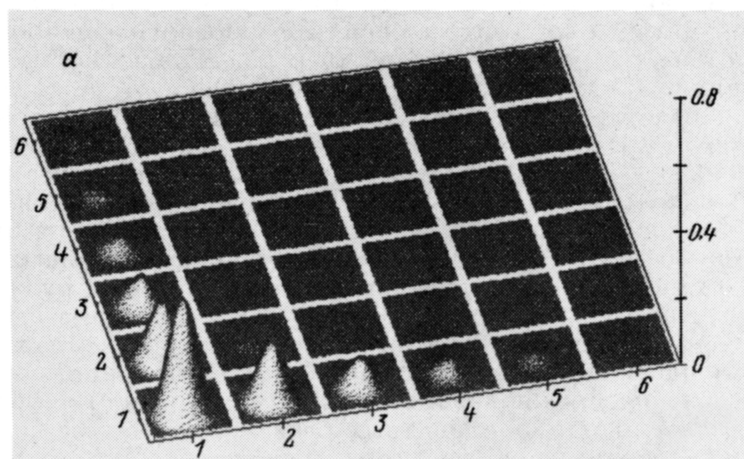


Рис. 3. Распределения вероятностей для B -состояний.

$U = -4$ (a), -1 (b), 0.6 (c). По осям отложены координаты частиц. Волновые функции нормированы здесь на единицу. Высота пика на узле соответствует вероятности обнаружения на нем частицы.

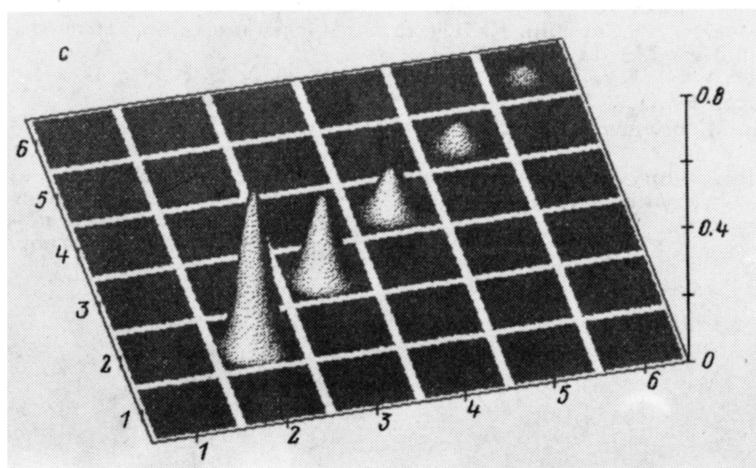
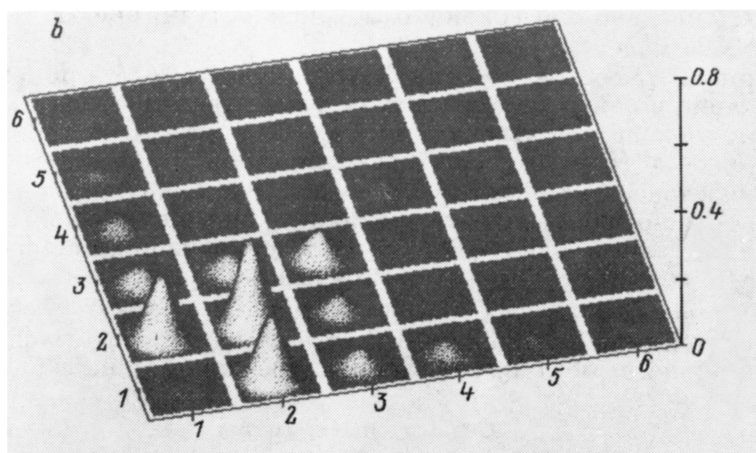
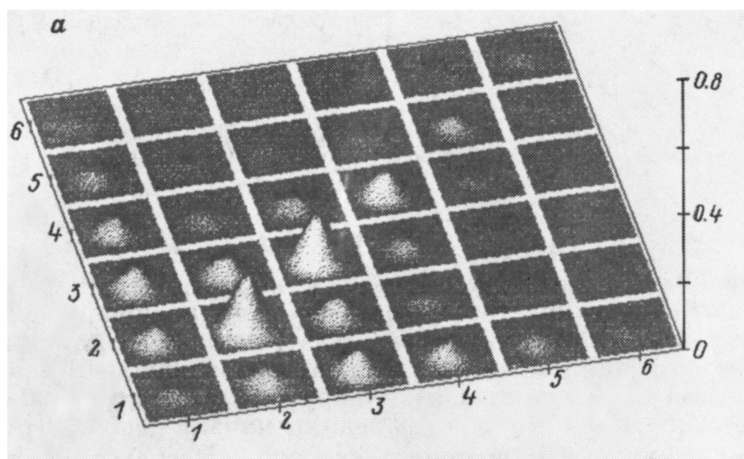


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, для D -состояний.
 $U = 2.5$ (a), 4 (b), 10 (c).

$$V < 0$$

$$A = z + [z^2 + 1]^{1/2}, \quad U \in \left(-\infty, V/2 - [(V/2)^2 + 1]^{1/2}\right),$$

$$A = z - [z^2 + 1]^{1/2}, \quad U \in \left(V/2 - [(V/2)^2 + 1]^{1/2}, V/4 - [(V/4)^2 + 1]^{1/2}\right),$$

$$2z = -V + U - 1/U. \quad (15)$$

(16)

На рис. 4 изображено распределение вероятностей нахождения частиц для D -состояния. Видно, что вероятность обнаружения частиц на первом атоме системы мала, тогда как для B -состояний вероятность обнаружения частицы на этом атоме больше, чем на остальных атомах. Максимум вероятности обнаружения частиц для D -состояний может достигаться как угодно далеко от начала цепочки (рис. 4).

Из рис. 1 видно, что дискретный спектр существует на фоне сплошного. Это связано с высокой симметрией задачи (обе частицы имеют одинаковую массу).

На рис. 2 D -состояние существует в зонах 4 и 5, причем в зоне 4 D -состояние по энергии лежит ниже зоны поверхностно-объемных состояний, а в зоне 5 — выше.

На рис. 4,а ($U = 2.5$) D -состояние изображено вблизи точки присоединения к зоне объемных связанных состояний, но близко находятся и поверхностно-объемные, поэтому значительные пики видны как вдоль диагонали, так и вдоль осей. Для рис. 4,б ситуация аналогичная. На рис. 4,с ($U = 10$) D -состояние изображено вблизи точки отщепления от зоны объемных связанных состояний ($U = \infty$), поэтому распределение вероятностей для D -состояний имеет вид, похожий на распределение вероятностей для объемных связанных состояний (пики по диагонали).

Список литературы

- [1] Jerome D., Shulz H.J. // Adv. Phys. 1982. V. 31. P. 299.
- [2] Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987.
- [3] Lieb E., Wu T.T. // Phys. Rev. Lett. 1968. V. 20. N 25. P. 1445-1449.
- [4] Булатов Вл.Л. // ТМФ. 1988. Т. 75. С. 148-157.
- [5] Годен М. Волновая функция Бете. М.: Мир, 1987.

Санкт-Петербургский государственный университет

Поступило в Редакцию
27 апреля 1993 г.
В окончательной редакции
17 сентября 1993 г.