Конфайнмент электронных состояний на хаббардовской цепочке

© А.Н. Кочарян, А.С. Саакян

Ереванский физический институт,
375000 Ереван, Армения
Государственный инженерный университет Армении,
375009 Ереван, Армения

(Поступила в Редакцию 4 ноября 1997 г.)

Перераспределение электронов на $1D$-решетке, возникающее из-за хаббардовского отталкивания, приводит к возникновению эффективного двухчастичного взаимодействия с линейным по разности координат потенциалом. Найдена двухчастичные волновые функции и спектр электронов в узкой зоне.

1. В связи с исследованием высокотемпературной проводимости в последние годы возрос интерес к двухчастичной задаче на низкоразмерной конечной и бесконечной решетках в рамках моделей типа [1–3]. Это связано с попытками выхода за пределы слабой связи и применения непертурбативных методов в теории. В настоящей работе решена аналогичная задача с помощью точных двухчастичных $1D$-хаббардовских волновых функций, найден эффективный потенциал взаимодействия двух электронов, который оказывается линейным по разности их координат. Решено уравнение Шредингера для двух электронов, взаимодействующих посредством этого потенциала. Волновые функции выражаются через функции Бесселя, а энергетический спектр имеет эквидистантный характер.

В работе [4] рассмотрена подобная задача; волновые функции найдены из проведения аналогии между уравнением Шредингера и рекуррентными соотношениями для функций Бесселя, а соображения, приводящие к уравнению для нахождения собственных значений задачи, вызывают сомнения. В [5] на основе анализа соотношений (22) сделан правильных вывод об эквидистантности энергетического спектра. В нашей работе использована одна из модификаций метода Лифшица [6] нахождения собственных значений задачи.

2. Избыточная плотность заряда, возникающая из-за перераспределения электронов на цепочке, равна

$$\Delta\rho = -|e| \int\limits_0^{p_{\mathrm{F}}} \left[\left|\Psi(n_1, n_2)\right|^2 - \left|\Psi_0(n_1, n_2)\right|^2 \right] dp, \qquad (1)$$

где $\Psi(n_1, n_2)$ — двухчастичная $1D$-хаббардовская волновая функция, $\Psi_0(n_1, n_2)$ — волновая функция двух свободных синглетных электронов, p_{F} — Ферми-квазиимпульс.

Двухчастичную хаббардовскую волновую функцию выберем в виде [7]

$$\Psi(n_1, n_2) = \exp\bigl((iQ/2)(n_1+n_2)\bigr) \cos\bigl(p|n_1-n_2|-\delta\bigr), \qquad (2)$$

где Q — квазиимпульс центра масс, p — относительный квазиимпульс двух электронов, n_1, n_2 — векторы $1D$-решетки (в дальнейшем постоянную решетки положим равной единице), δ — фаза рассеяния, определяемая выражением

$$\delta = \operatorname{arctg} \frac{\eta}{\sin p}, \qquad \eta = \frac{U}{4t\cos(Q/2)}, \qquad (3)$$

U — энергия хаббардовского взаимодействия.

Расчет эффективного взаимодействия проведен в простейшем случае $U = +\infty$. Подставив (2) в (1) и проинтегрировав по p, получим ($\delta = \pi/2$)

$$\Delta\rho = |e| \frac{\sin 2p_{\mathrm{F}}n}{2n}, \qquad n = |n_1 - n_2|. \qquad (4)$$

Потенциал поля избыточного распределения заряда (4) определяется из решения конечно-разностного уравнения Пуассона

$$\Delta^2\varphi = -02\pi|e| \frac{\sin 2p_{\mathrm{F}}n}{n}, \qquad (5)$$

и имеет следующий вид:

$$\varphi(n) = -2\pi|e|p_{\mathrm{F}}n + \frac{\pi|e|}{\sin^2 p_{\mathrm{F}}} \frac{\sin(2p_{\mathrm{F}}n - 2p_{\mathrm{F}})}{2n}. \qquad (6)$$

Основным в выражении (6) является первый член. В дальнейшем при решении уравнения Шредингера мы учтем только его. Итак, перераспределение электронов должно привести к конфайнменту электронных состояний. Энергия взаимодействия двух электронов

$$U(n) = \alpha n, \qquad \alpha = 2\pi e^2 p_{\mathrm{F}}. \qquad (7)$$

Величину α можно оценить, исходя из связи p_{F} с концентрацией электронов, полагая, что электроны представляют собой $1D$-идеальный газ. Тогда вблизи половинного заполнения $\alpha \sim 12\pi^2\varepsilon_0 x$, где ε_0 — энергия кулоновского взаимодействия на соседних узлах решетки, x — концентрация электронов.

3. Уравнение Шредингера для двух частиц на цепочке имеет вид

$$\begin{aligned} &-T\bigl[\Psi(n_1+1, n_2)\bigr] + T\bigl[\Psi(n_1-1, n_2) \\ &+\Psi(n_1, n_2+1) + \Psi(n_1, n_2-1)\bigr] \\ &+\alpha|n_1-n_2|\Psi(n_1, n_2) = E\Psi(n_1, n_2). \end{aligned} \qquad (8)$$

Представим его решение в виде

$$\Psi_j = (n_1, n_2) = \exp\bigl((iQ/2)(n_1+n_2)\bigr) \times \sum_k \exp\bigl(ik(n_1-n_2)\bigr)\Psi_j(k,Q), \quad (9)$$

где $j = 1, 2$ соответственно для областей $n_1 < n_2$ и $n_1 > n_2$.

Параметризуем собственные значения задачи

$$E = -4T\cos(Q/2)\,\mathrm{ch}\,p. \quad (10)$$

Тогда, подставив (9) в (8), с учетом (10) придем к следующим уравнениям:

$$4T\cos\frac{Q}{2}(\cos k - \mathrm{ch}\,p)\Psi_j(k,Q) = \mp i\alpha\frac{d\Psi_j}{dk}, \quad (11)$$

где верхний знак в правой части соответствует $j = 1$, а нижний — $j = 2$. Интегрируя уравнение (11), получим

$$\Psi_j(k,Q) = c\exp(\pm iz\sin k \mp i\nu k),$$

$$Z = \frac{4T}{\alpha}\cos(Q/2), \qquad \nu = z\,\mathrm{ch}\,p \quad (12)$$

или, совершив переход в узельное представление с помощью (9), придем окончательно к следующей волновой функции:

$$\Psi(n_1,n_2) = c\exp\bigl((iQ/2)(n_1+n_2)\bigr)J_{\nu+||n_1-n_2|}(z), \quad (13)$$

где $J_\mu(z)$ — функция Бесселя первого рода.

Волновая функция (13) удовлетворяет следующему асимптотическому соотношению: $\Psi(n_1,n_2) \to 0$, $|n_1-n_2| \to \infty$.

4. Для нахождения спектра задачи заметим, что

$$c = \Psi(k=0) = \sum_{n=0}^{\infty}\Psi(n). \quad (14)$$

Тогда, суммируя обе части равенства

$$\Psi(n_1-n_2) = cJ_{\nu+|n_1-n_2|}(z) \quad (14a)$$

по (n_1,n_2), придем к следующему уравнению для определения спектра:

$$\sum_{n=1}^{\infty}J_{\nu-n}(z) = J_\nu(z). \quad (15)$$

Введя обозначение

$$\varphi_\nu(z) = \int_0^z J_\nu(z)dz, \quad (16)$$

перепишем уравнение (15) в следующем виде [8]:

$$\varphi_{\nu+1}(z) - \varphi_\nu(z) = 0. \quad (17)$$

Введем оператор трансляции по индексу ν,

$$\varphi_{\nu+1}(z) = \exp\left(\frac{d}{d\nu}\right)\varphi_\nu(z). \quad (18)$$

Это можно сделать, если ν на зависит от z.

Тогда уравнение (17) примет вид

$$\exp\left(\frac{d}{d_\nu}\right)\varphi_\nu(z) = \varphi_\nu(z), \quad (19)$$

или

$$\varphi_\nu(z) - \exp\left(-\frac{d}{dn}\right)\varphi_\nu(z) = 0, \quad (20)$$

так что

$$\varphi_{\nu-1}(z) - \varphi_{\nu+1}(z) = 0. \quad (21)$$

Учитывая рекуррентное соотношение для функций Бесселя

$$J_{\mu+1}(z) - J_{\mu-1}(z) = 2\frac{d}{dz}J_\mu(z), \quad (22)$$

перепишем уравнение (21) в виде

$$J_\mu(z) = 0. \quad (23)$$

Итак, собственные значения задачи являются решениями уравнения (23).

Рассмотрим область значений $z \ll 1$, соответствующую предельно узкой зоне электронов. Тогда уравнение (23) примет вид

$$\frac{z^\nu}{\Gamma(\nu+1)} = 0, \quad (24)$$

решения которого суть

$$\nu = -(m+1), \qquad m = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots\ . \quad (25)$$

Учитывая этот результат, наряду с уравнением (24) следует рассмотреть уравнение

$$J_{-\nu}(z) = 0. \quad (26)$$

обладающее в предельном случае $z \ll 1$ решениями

$$\nu = (m+1). \quad (27)$$

Для выяснения границ спектра используем приближение $z \ll 1$ в волновых функциях (12)

$$\Psi(n_1-n_2) = \frac{\exp\left(-\frac{|n_1-n_2|}{R}\right)}{\Gamma\bigl(\nu+|n_1-n_2|+1\bigr)}, \quad (28)$$

откуда с учетом (25) и (27) следует, что $m \leqslant |n_1-n_2|$.

Таким образом, энергетический спектр системы

$$E = \pm\alpha(m+1) \quad (29)$$

ограничен снизу (для $m > |n_1-n_2|$ волновая функция тождественно обращается в нуль).

Выражение (28) описывает связанное состояние двух электронов в узкой зоне, причем спадание волновой функции на больших расстояниях происходит быстрее экспоненциального, поэтому величину R нельзя интерпретировать как радиус связанного состояния. Система обладает сновным состоянием, а "непрерывная часть" спектра отсутствует. Нижний знак в уравнении (29) в соответствии с (19) отвечает сильно возбужденным состояниям. Следует отметить, что в рассматриваемом приближении энергетические уровни зависят от ширины зоны $4T$.

В работах [9,10] показано, что в антиферромагнитноупорядоченной решетке вблизи половинного заполнения возникает конфайнмент дырок, причем этот результат не зависит от размерности решетки. Полученный в настоящей работе эффективный потенциал взаимодействия (7) получен только для одномерной решетки и имеет отталкивательный характер, так что связывание обусловлено конечностью ширины энергетической зоны электронов.

Список литературы

[1] G. Bednorz, K.A. Muller. Z. Phys. **B64**, 189 (1986).
[2] L. Chen, Ch. Mei. Phys. Rev. **B39**, 9006 (1989).
[3] S.-J. Dong, Ch.N. Yang. Rev. Math. Phys. **28**, 146 (1989).
[4] I. Gallinar, D.C. Mattis. J. Phys. **A186**, 2583 (1985).
[5] Б.Н. Захарьев. ЭЧАЯ **23**, 1387 (1992).
[6] И.М. Лифшиц. ЖЭТФ **17**, 1076 (1947).
[7] А.Н. Кочарян, А.С. Саакян. Тр. 29 Совещ. по физике низких температур. Казань (1992). С. 131.
[8] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции. Наука, М. (1974). Т. 2.
[9] Л.Н. Булаевский, Д.И. Хомский. ЖЭТФ **52**, 1603 (1967).
[10] Л.Н. Булаевский, Э.Л. Нагаев, Д.И. Хомский. ЖЭТФ **54**, 1562 (1968).