Двухчастичные корреляции на $1D$-решетке в присутствии постоянного магнитного поля

© А.С. Саакян

Государственный инженерный университет Армении,
375009 Ереван, Армения

E-mail: root@yeriac.arminco.com

(Поступила в окончательном виде 4 ноября 1999 г.)

Решена задача двух частиц, взаимодействующих посредством хаббардовского потенциала на $1D$ конечной решетке в присутствии постоянного однородного магнитного поля. Найдены точные волновые функции, построено и исследовано уравнение для спектра энергий. Показана возможность перехода синглет–триплет под действием поля.

1. Учет корреляций между частицами важен для понимания многих эффектов в многочастичных системах. Некоторые модели, позволяющие учесть эти корреляции, обладают в $1D$ случае точными решениями в термодинамическом пределе [1–3]. Существуют, однако, ситуации, когда переход к термодинамическому пределу некорректен (например, в случае конечного числа частиц), поэтому возникает необходимость решения задачи на ограниченной решетке. Актуальность этого показывает, в частности, недавнее обнаружение атомных кластеров родия, обладающих сильным ферромагнетизмом, чего нет в массивных образцах [4]. Исследование двухчастичной задачи на ограниченной решетке актуально для выяснения механизмов высокотемпературной сверхпроводимости, построения эффективных двухчастичных взаимодействий в многочастичной системе, анализа магнитных свойств сильнокоррелированных систем [5–8].

В настоящей работе рассмотрено поведение двух взаимодействующих частиц ($U > 0$) на конечной $1D$-решетке в присутствии постоянного однородного магнитного поля. Рассмотренная здесь простая модель позволяет получить точные решения для двухчастичных состояний и исследовать энергетический спектр, зависящий от напряженности магнитного поля.

2. Гамильтониан системы выберем в виде

$$H = \sum_{n\sigma} \varepsilon_{0\sigma} a^+_{n\sigma} a_{n\sigma} - \gamma H \sum_n \left(a^+_{n\uparrow} a_{n\uparrow} - a^+_{n\downarrow} a_{n\downarrow}\right) - t \sum_{nl\sigma} a^+_{n+l\sigma} a_{n\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\substack{nn' \\ \sigma\sigma'}} \delta_{nn'} \delta_{\sigma,-\sigma'} a^+_{n\sigma} a_{n\sigma} a^+_{n'\sigma'} a_{n'\sigma'}. \quad (1)$$

Здесь σ — спиновый индекс, $\varepsilon_{0\sigma}$ — центры зон, $2t$ — ширина энергетических зон, одинаковая для обоих частиц, U — амплитуда хаббардовского взаимодействия. В дальнейшем будем считать, что член, соответствующий спин-магнитному взаимодействию, включен в первое слагаемое (1) и что сделано переобозначение $\varepsilon_0\sigma \mp \gamma H \to \varepsilon_{0\sigma}$. Итак, энергетические зоны разнесены и расстояние между центрами зон равно $\varepsilon_{01} - \varepsilon_{02}$. Совершим в гамильтониане (1) преобразование

$$b_{n1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a_{n\uparrow} \pm a_{n\downarrow}\right). \quad (2)$$

В результате получим

$$H = -t \sum_{nls} b^+_{n+ls} b_{ns} + g \sum_{ss'n} \delta_{s,-s'} b^+_{ns} b_{ns'} + \frac{U}{2} \sum b^+_{ns} b_{ns} b^+_{ns'} b_{ns'} \delta_{s,-s'}, \quad (3)$$

где s, s' — псевдоспиновые индексы, отсчет энергии ведется от значения $\varepsilon = 1/2(\varepsilon_{01} + \varepsilon_{02})$; $g = 1/4(\varepsilon_{01} - \varepsilon_{02})$.

Итак, приходим к картине двух взаимно рассеивающихся псевдосинглетных фермионов в зоне; при этом в системе присутствует своеобразная гибридизация на одном узле решетки, зависящая от магнитного поля.

Двухчастичные состояния гамильтониана (3) представим в виде разложения в пространстве чисел заполнения

$$|2\rangle = \sum_{\substack{ss' \\ nn'}} \Psi(s, n; s', n')\, b^+_{n,s} b^+_{n',s'} |0\rangle, \quad (4)$$

где Ψ — первичноквантованная двухчастичная волновая функция. Действуя оператором (3) на состояние (4), придем к уравнению Шредингера

$$\begin{aligned} &- t\left(\Delta_1^2 + \Delta_2^2\right)\Psi(n_1, s_1; n_2, s_2) \\ &+ g \sum_s \Big[\Psi(n_1, s; n_2, s_2)\delta_{s,-s_1} + \Psi(n_1, s_1; n_2, s)\delta_{s,-s_2}\Big] \\ &+ U\delta_{n_1,n_2}\delta_{s_1,-s_2}\Psi(n_1, s_1; n_2, s_2) = E\Psi(n_1, s_1; n_2, s_2), \end{aligned} \quad (5)$$

где $\Delta^2_{1,2}$ — конечноразностные операторы II порядка по переменным $n_{1,2}$. Распишем уравнения (5) в явном виде

$$\begin{aligned} &-t(\Delta_1^2 + \Delta_2^2)\Psi_1(n_1, n_2) + U\delta_{n_1,n_2}\Psi_1(n_1, n_2) \\ &\qquad + g\big[\Psi_3(n_1, n_2) + \Psi_4(n_1, n_2)\big] = E\Psi_1(n_1, n_2), \\ &-t(\Delta_1^2 + \Delta_2^2)\Psi_2(n_1, n_2) + U\delta_{n_1,n_2}\Psi_2(n_1, n_2) \\ &\qquad + g\big[\Psi_3(n_1, n_2) + \Psi_4(n_1, n_2)\big] = E\Psi_2(n_1, n_2), \\ &-t(\Delta_1^2 + \Delta_2^2)\Psi_3(n_1, n_2) \\ &\qquad + g\big[\Psi_1(n_1, n_2) + \Psi_2(n_1, n_2)\big] = E\Psi_3(n_1, n_2), \\ &-t(\Delta_1^2 + \Delta_2^2)\Psi_4(n_1, n_2) \\ &\qquad + g\big[\Psi_1(n_1, n_2) + \Psi_2(n_1, n_2)\big] = E\Psi_4(n_1, n_2). \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $\Psi_{1,2}(n_1, n_2)$ — волновые функции, соответствующие псевдосинглетному состоянию, а $\Psi_{3,4}(n_1, n_2)$ — псевдотриплетному.

Уравнения (6) можно переписать в матричном виде

$$-t\hat{\Delta}^2\hat{\Psi} + \hat{g}\hat{\Psi} + \hat{U}\Psi = \hat{E}\hat{\Psi}, \tag{7}$$

где $\hat{\Delta}^2 = (\Delta_1^2 + \Delta_2^2)\hat{I}$, $\hat{I}$ — единичная матрица 4×4, $\hat{U} = U\delta_{n_1,n_2}\hat{I}$, $\hat{E} = E\hat{I}$,

$$\hat{g} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & g & g \\ 0 & 0 & g & g \\ g & g & 0 & 0 \\ g & g & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Решение уравнения (7) представим в виде

$$\hat{\Psi} = e^{iQ/2(n_1+n_2)} \sum_k \hat{\Psi}(k,Q)\, e^{ik(n_1-n_2)}, \tag{9}$$

где Q — квазиимпульс центра масс двух частиц, k — затравочный квазиимпульс относительного движения, $\hat{\Psi}(k,Q)$ — фурье-образ вектор-столбца (8); здесь и в дальнейшем полагаем, что выполняются циклические граничные условия, так что $k = 2\pi n/N$, $n = 0, 1, \ldots, N-1$.

Подставим (9) в (7) и после преобразований получим

$$\hat{\Psi}(k,Q) = -\big(\hat{L} + \hat{g} - \hat{E}\big)\hat{\tau},$$

$$\hat{L}(k,Q) = L(k,Q)\,\hat{I},$$

$$L(k,Q) = -2t\big[\cos(k+Q/2) + \cos(k-Q/2)\big], \tag{10}$$

а вектор-столбец $\hat{\tau}$ определяется из условия согласования

$$\hat{\tau} = -\sum_k \big(\hat{L} + \hat{g} - \hat{E}\big)^{-1}\hat{U}\hat{\tau}. \tag{11}$$

Условием существования ненулевого решения системы (11) является равенство нулю детерминанта

$$\det\Big\|\hat{I} + \sum_k \big(\hat{L} + \hat{g} - \hat{E}\big)^{-1}\hat{U}\Big\| = 0. \tag{12}$$

В результате условие (12) приводит к следующим уравнениям для определения собственных значений задачи (уравнения Лифшица–Янга):

$$\frac{1}{N}\sum_k \left[\frac{1}{L(k,Q) - E - 2g} + \frac{1}{L(k,Q) - E + 2g}\right] = -\frac{2}{U}, \tag{13}$$

$$\frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{L(k,Q) - E} = -\frac{1}{U}. \tag{14}$$

Решая систему однородных уравнений (11), получим

$$\tau_2 = \frac{1 + UA}{UB}\tau_1, \qquad \tau_{3,4} = UC(\tau_1 + \tau_2), \tag{15}$$

где

$$A = \frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{L(k,Q) - E}\left\{1 + \frac{2\eta^2}{[L(k,Q) - E]^2 - 4g^2}\right\},$$

$$B = \frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{L(k,Q) - E}\,\frac{2\eta^2}{[L(k,Q) - E]^2 - 4g^2},$$

$$C = -\frac{1}{N}\sum_k \frac{\eta}{[L(k,Q) - E]^2 - 4g^2}. \tag{16}$$

Как легко заметить, условие существования ненулевых решений (12) или, что то же самое, уравнений (13)–(14) имеет вид

$$U(A \pm B) = -1. \tag{17}$$

С учетом (15)–(16) волновые функции $\Psi_{1,2}(n_1, n_2)$ приобретают следующий вид:

$$\Psi_{1,2}(n_1,n_2) = e^{iQ/2(n_1+n_2)}\Bigg\{\mp\frac{U}{2N}(\tau_1 - \tau_2)\sum_k \frac{e^{ikn}}{L(k,Q) - E} - \frac{U}{4N}(\tau_1 + \tau_2)\sum_k \left[\frac{e^{ikn}}{L(k,Q) - E - 2g} + \frac{e^{ikn}}{L(k,Q) - E + 2g}\right]\Bigg\}. \tag{18}$$

На решениях уравнения (17) мы получаем

$$\tau_2 = -\tau_1, \qquad \tau_{3,4} = 0, \tag{19}$$

и окончательно

$$\Psi_{1,2}(n_1,n_2) = \mp\frac{U\tau}{N}\sum_k \frac{e^{ikn}}{L(k,Q) - E}\, e^{iQ/2(n_1+n_2)},$$

$$\Psi_{3,4}(n_1,n_2) = 0. \tag{20}$$

Постоянная τ находится из условия согласования, определяемого уравнением (8) работы [6], и имеет вид

$$\tau = U\left(1 + \frac{U}{N}\sum_k \frac{1}{L(k,Q) - E}\right)^{-1}. \tag{21}$$

Таким образом, волновые функции двухчастичных состояний по внешнему виду совпадают с полученными в работе [6], однако собственные значения E определяются из уравнения (13).

Если попытаться определить собственные значения из уравнения (14), то получим, что при $U = +\infty$ t-матрица $U\tau_3$ расходится, т. е. состояния, определяемые уравнением (14), нефизичны.

Параметризуем собственные значения задачи следующим образом:

$$E = -4t\cos Q/2\cos p. \tag{22}$$

Тогда

$$\Psi(n_1,n_2) = e^{iQ/2(n_1+n_2)}\begin{cases} \cos\big[p(n_1 - n_2) - \delta\big], & n_1 < n_2 \\ \cos\big[p(n_1 - n_2) + \delta\big], & n_1 > n_2, \end{cases} \tag{23}$$

а фаза рассеяния

$$\delta = \operatorname{arctg}\frac{U}{2t\sin p\cos Q/2}. \tag{24}$$

Для исследования уравнения (13) заметим, в частности, что в области $|\cos p| < 1 - \eta$ $(\eta < 1)$ оно приводится к виду

$$\frac{\operatorname{ctg}\frac{Np_1}{2}}{\sin p_1} + \frac{\operatorname{ctg}\frac{Np_2}{2}}{\sin p_2} = \frac{2t}{U}\cos Q/2,$$

$$\cos p_{1,2} = \cos p \pm \eta, \qquad \eta = \frac{g}{2t\cos Q/2} \tag{25}$$

методом, аналогичным изложенному в работе [6].

Знаменатель $\sin p_1$ в выражении в левой части уравнения (25) обращается в ноль при $p_0 = \arcsin\sqrt{\eta(2-\eta)}$; разложим его в ряд по степеням $p - p_0$. Тогда

$$p = \frac{2\pi n}{N} + \frac{2}{N}\,\mathrm{arctg}\,\frac{U}{2^{11/3}t\sqrt{p-p_0}}. \qquad (26)$$

В дальнейшем полагаем параметр η малым ($\eta \ll 1$) и, кроме того, учтем, что при подстановке $p = p_0$ выражение (26) переходит в

$$p_0 = \frac{2\pi n}{N} + \frac{\pi}{N}, \qquad (27)$$

и поскольку выражение (26) верно в окрестности p_0, с большой степенью точности его можно переписать как

$$p = \frac{2\pi n}{N} + \frac{\pi}{N} - \frac{2^{11/3}t}{\pi N U}\sqrt{\pi^2/N^2 - 2\eta}. \qquad (28)$$

Из выражения (27) следует, что при значениях параметра $\eta = \pi^2/2N^2$ частицы приобретают твердую сердцевину — фаза рассеяния становится равной $\delta = \pi/N$, а волновая функция $\Psi_{1,2}$ —

$$\Psi_{1,2}(n_1, n_2) \sim \sin\frac{\pi}{N}(n_1 - n_2). \qquad (29)$$

Значениям параметра p (28) соответствует энергия основного состояния двухчастичной системы

$$E = -4t\cos\frac{\pi}{N} - \frac{32}{N^2}\frac{t^2}{U}\sqrt{\pi^2/N^2 - 2\eta}. \qquad (30)$$

В области $\eta \gg 1$ из суммы (13) непосредственно получается $E = \varepsilon_0 - 2\gamma H$, а намагниченность системы $M = 2\gamma$. Таким образом, ясно, что переход, описываемый выражениями (28) и (30), соответствует переходу в триплетное состояние.

Отметим, что описанный здесь синглет-триплетный переход происходит при любом конечном значении хаббардовского взаимодействия. Случай $U = +\infty$ следует рассмотреть отдельно.

Отметим также, что каноническое преобразование (2) не перепутывает четные и нечетные решения — это следует из коммутативности гамильтонианов (1) и (3) с оператором четности, что позволяет говорить не о псевдо-, а об истинных синглетном и триплетном состояниях.

Список литературы

[1] T.D. Lee, C.N. Yang. Phys. Rev. **113**, 1406 (1959).
[2] C.N. Yang. Phys. Rev. Lett. **19**, 1312 (1967).
[3] E.H. Lieb, F.Y. Wu. Phys. Rev. Lett. **64**, 1445 (1968).
[4] L. Chen, Ch. Mei. Phys. Rev. **B39**, *13*, 9006 (1989).
[5] L.A. Bloomfield, A.I. Cox, I.C. Louderback. Bull. Am. Phys. Soc. **39**, 540 (1994).
[6] А.Н. Кочарян, А.С. Саакян. ФТТ **40**, *2*, 366 (1998).
[7] А.Н. Кочарян, А.С. Саакян. ФТТ **40**, *4*, 761 (1998).
[8] A.N. Kocharian, G.R. Reich, A.S. Saakian. Physica **B206–207**, 732 (1995).