Письма в ЖЭТФ, том 63, вып.2, стр.83 - 88 © 1996г. 25 января

ИНТЕГРИРУЕМАЯ ЦЕПОЧКА ЭЛЕКТРОНОВ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ФОНОНАМИ

*М.Е.Журавлев, В.А.Иванов, В.В.Ачкасов**

*Институт общей и неорганической химии РАН
117907 Москва, Россия*

**Центральный научно-исследовательский институт машиностроения
141070 Калининград Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 9 декабря 1995 г.

Построена точная волновая функция цепочки электронов, взаимодействующих с локальными фононами. Рассчитаны энергия основного состояния и щель в спектре электронных возбуждений.

PACS 63.20.Kr; 71.10+x; 71.27.+a

В последнее время неоднократно исследовалась фазовая диаграмма моделей типа молекулярного кристалла Холстейна [1] различной размерности [2–4]. Несмотря на длительную историю изучения, точное решение не построено даже для одного электрона в цепочке, взаимодействующего в каждом узле с локальными фононами. В настоящей работе мы строим точную волновую функцию системы сильносвязанных с решеткой электронов (в том числе коррелированных), взаимодействующих в каждом узле с локальными фононами. Перескок электронов между соседними узлами промодулирован так, что позволяет получить точное решение, причем электронная амплитуда удовлетворяет уравнениям Бете-анзаца для одномерной модели Хаббарда с притяжением, проинтегрированной в [5]. Мы начнем наше рассмотрение с диагонализации одноузельного гамильтониана, затем при помощи полученных волновых функций построим волновую функцию цепочки и рассчитаем энергию основного состояния и щель в спектре электронных возбуждений.

Рассмотрим сильно связанные с решеткой электроны, которые взаимодействуют в каждом узле с локальными эйнштейновскими фононами частоты Ω. Перескок электронов между ближайшими соседями i и j промодулирован множителем, зависящим от фононных импульсов, гамильтониан задачи имеет вид

$$H = -t \sum_{<ij>\sigma} c^{+}_{i\sigma} c_{j\sigma} \exp\{i\frac{g}{\Omega}(\hat{p}_i - \hat{p}_j)\} +$$
$$+ \sum_i \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2} + \frac{\Omega \hat{q}_i^2}{2} - \frac{\Omega}{2}\right) - g\sum_i (n_i^{\uparrow} + n_i^{\downarrow})\hat{q}_i - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \tag{1}$$

или

$$H = -t \sum_{<ij>\sigma} c^{+}_{i\sigma} c_{j\sigma} \exp\{i\frac{g}{\sqrt{2}\Omega}(a_j - a_j^{+} - a_i + a_i^{+})\} +$$
$$+ \Omega \sum_i a_i^{+} a_i - g\sum_i (n_i^{\uparrow} + n_i^{\downarrow})(a_i^{+} + a_i) - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}, \tag{2}$$

где $c_{i\sigma}^{+}$ – оператор рождения электрона в i-ом узле с проекцией спина σ, a_i^{+} – оператор рождения фонона в i-ом узле.

Вначале рассмотрим одноузельную часть гамильтониана, описывающего взаимодействие локальных фононов с электронами в одном узле:

$$H_0 = \Omega a^+ a - g(a^+ + a)(n^{\uparrow} + n^{\downarrow}). \tag{3}$$

Напомним собственные функции и собственные значения гамильтониана (3). В отсутствие электронов собственная функция H_0 совпадает с собственной функцией гармонического осциллятора:

$$F^{(n)} = (a^+)^n|0>, \qquad |0>=|0>^{el}|0>^{ph}, \tag{4}$$

ее собственные значения $E^{(n)} = n\Omega$.

Для одного электрона с проекцией спина σ ищем волновую функцию в виде

$$F_\sigma = c_\sigma^+ \Phi_\sigma(a^+)|0> . \tag{5}$$

Для фононной части $\Phi_\sigma(a^+)|0>^{ph}$ получаем следующее уравнение:

$$\left[\Omega\left(a^+ - \frac{g}{\Omega}\right)\left(a - \frac{g}{\Omega}\right) - \frac{g^2}{\Omega}\right]\Phi_\sigma(a^+)|0>^{ph} = E\Phi_\sigma(a^+)|0>^{ph} . \tag{6}$$

С учетом коммутатора $[a - g/\Omega,\ a^+ - g/\Omega] = [a, a^+] = 1$ находим волновую функцию для n фононов:

$$\Phi_\sigma^{(n)}(a^+) = (a^+ - \frac{g}{\Omega})^n|\bar{0}>^{ph},$$

где $|\bar{0}>^{ph}$ удовлетворяет уравнению $(a - g/\Omega)|\bar{0}>^{ph} = 0$, в явном виде

$$|\bar{0}>^{ph} = \exp\{\frac{g}{\Omega}(a^+ - a)\}|0>^{ph} = \exp\{-\frac{g^2}{2\Omega^2}\}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{g^m(a^+)^m}{\Omega^m m!}|0>^{ph} . \tag{7}$$

В осцилляторном представлении у функции $|\bar{0}>^{ph}$ основного состояния смещено положение равновесия:

$$\bar{\psi}_{(0)} \sim \exp\{-\frac{1}{2}(x - \frac{g\sqrt{2}}{\Omega})^2\}.$$

Энергия основного состояния электрона с n фононами

$$E_\sigma^{(n)} = n\Omega - \frac{g^2}{\Omega}. \tag{8}$$

В случае двух электронов на узле волновую функцию ищем в виде

$$F_2 = c_\uparrow^+ c_\downarrow^+ \Phi_2(a^+)|0> . \tag{9}$$

Фононную часть находим, как и выше, с точностью до замены g на $2g$. Соответственно получим:

$$\Phi_2^{(n)}(a^+) = (a^+ - \frac{2g}{\Omega})^n|\bar{\bar{0}}>^{ph}, \qquad (a - \frac{2g}{\Omega})|\bar{\bar{0}}>^{ph} = 0, \tag{10}$$

и вместо (8) получаем, что энергия основного состояния узла с двумя электронами и n фононами есть:

$$E_2^{(n)} = n\Omega - \frac{4g^2}{\Omega}. \tag{11}$$

Слагаемое $n\Omega$ можно рассматривать как чисто фононный вклад в энергию (см. (4)), тогда, сравнивая $E_2^{(n)}$ и $2E_\sigma^{(n)}$, видим, что на узле эффективно возникает притяжение разноспиновых электронов с энергией $2g^2/\Omega$.

Для цепочки электронов волновую функцию ищем в виде

$$F = \sum_{x_1,\ldots x_{N_e},\sigma} f(x_1, \ldots, x_{N_e}; \sigma) \prod_{k=1}^{N_e} c^+_{x_k\sigma_k} \Phi(a_1^+, \ldots, a_N^+; x_1, \ldots, x_{N_e}) |0>^{ph} |0>^{el}. \tag{12}$$

Здесь

$$|0>^{ph} = \prod_{m=1}^{N} |0>^{ph}_m, \qquad |0>^{el} = \prod_{m=1}^{N} |0>^{el}_m,$$

N_e – число электронов в цепочке, N – число узлов; аргументом σ электронной амплитуды f обозначены спиновые переменные. Мы увидим, что f удовлетворяет уравнению для электронной амплитуды модели Хаббарда с отрицательной (притяжение) хаббардовской энергией $U = -2g^2/\Omega$ и в дальнейшем опускаем спиновые переменные в аргументах функции f. Отметим, что фононная амплитуда Φ зависит от координат электронов. Покажем, что, выбирая для данной конфигурации электронов в цепочке фононную часть волновой функции в виде произведения одноузельных волновых функций в соответствии с концентрацией электронов на узел, для электронной части f получим уравнения одномерной модели Хаббарда с притяжением. Одноузельная часть гамильтониана (2) действует на волновую функцию (12) следующим образом:

$$[\Omega \sum_l a_l^+ a_l - g \sum_l (n_l^\uparrow + n_l^\downarrow)(a_l^+ + a_l) - \mu \sum_{l,\sigma} n_{l,\sigma}]F =$$

$$= \Omega \sum_l a_l^+ a_l F - g \sum_l \sum_{x_1,\ldots,x_{N_e}} f(x_1, \ldots, x_{N_e}) \sum_{j=1}^{N_e} \prod_{k=1}^{N_e} \delta_{lx_j} c^+_{x_k\sigma_k} (a_l^+ + a_l) \times$$

$$\times \Phi(a_1^+, \ldots, a_N^+, x_1, \ldots, x_{N_e}) |0>^{el} |0>^{ph} -$$

$$-\mu \sum_l \sum_{x_1,\ldots x_{N_e}} f(x_1, \ldots, x_{N_e}) \sum_{j=1}^{N_e} \prod_{k=1}^{N_e} \delta_{lx_j} c^+_{x_k\sigma_k} (a_l^+ + a_l) \Phi(a_1^+, \ldots, a_N^+, x_1, \ldots, x_{N_e}) |0>^{el} |0>^{ph} =$$

$$= \sum_l \sum_{x_1,\ldots x_{N_e}} f(x_1, \ldots, x_{N_e}) \prod_{k=l}^{N_e} c^+_{x_k\sigma_k} [\Omega(a_l^+ - g \sum_{j=1}^{N_e} \delta_{lx_j}/\Omega)(a_l - g \sum_{j=1}^{N_e} \delta_{lx_j}/\Omega) -$$

$$-g^2(\sum_{j=1}^{N_e}\delta_{lx_j})^2/\Omega]\Phi(a_1^+,...,a_N^+,x_1,...,x_{N_e})|0>^{el}|0>^{ph} -$$

$$-\mu\sum_l\sum_{x_1...x_{N_e}} f(x_1,...,x_{N_e})\sum_{j=1}^{N_e}\prod_{k=1}^{N_e} c^+_{x_k\sigma_k}\delta_{lx_j}\times$$

$$\times\Phi(a_1^+,...,a_N^+,x_1,...,x_{N_e}|0>^{el}|0>^{ph} . \qquad (13)$$

Вспоминая диагонализацию одноузельного гамильтониана, ищем фононную часть Φ волновой функции в виде

$$\Phi_n(a_1^+,...,a_N^+,x_1,...,x_{N_e})\prod_{l=0}^{N}|0>_l^{ph}=\prod_{l=l}^{N}(a_1^+-\frac{g}{\Omega}\sum_j\delta_{lx_j})^n\times$$

$$\times\exp\{-\frac{1}{2}\frac{g^2(\sum_j\delta_{lxj})^2}{\Omega^2}\}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{g^m(\sum_j\delta_{lx_j})^m}{m!}(a_l^+)^m|0>_l^{ph} . \qquad (14)$$

Здесь индекс n фононной амплитуды означает, что рассматривается волновая функция с n "смещенными" фононами.

Покажем, что число "смещенных" фононов n является хорошим квантовым числом - коммутирует с гамильтонианом. Коммутация

$$\hat{n}_j^{ph}=\exp\{-\frac{g}{\Omega}(n_{j\sigma}+n_{j\bar{\sigma}})(a_j-a_j^+)\}a_j^+a_j\exp\{\frac{g}{\Omega}(n_{j\sigma}+n_{j\bar{\sigma}})(a_j-a_j^+)\}$$

с одноузельной частью гамильтониана (2) очевидна. Проверим коммутацию $\hat{n}_j^{ph}$с туннельной частью, а именно, коммутаторы $[c_{j\sigma}^+\exp\{-\frac{g}{\Omega}(a_j-a_j^+)\},\ \hat{n}_j^{ph}]$, $[c_{j\sigma}^+\exp\{-\frac{g}{\Omega}(a_j-a_j^+)\},\ \hat{n}_j^{ph}]$. В случае, когда на узле j нет электронов, $n_{j\sigma}=0$, равенство нулю коммутаторов тривиально. Когда же число электронов с фиксированным спином $n_{j\sigma}=1$, коммутативность указанных величин проверяется непосредственно:

$$c_{j\sigma}\exp\{\frac{g}{\Omega}(a_j-a_j^+)\}\exp\{-\frac{g}{\Omega}(1+n_{j\bar{\sigma}})(a_j-a_j^+)\}a_j^+a_j\exp\{\frac{g}{\Omega}(1+n_{j\bar{\sigma}})(a_j-a_j^+)\}=$$

$$=c_{j\sigma}\exp\{-\frac{g}{\Omega}n_{j\bar{\sigma}}(a_j-a_j^+)\}a_j^+a_j\exp\{\frac{g}{\Omega}n_{j\bar{\sigma}}(a_j-a_j^+)\}\exp\{\frac{g}{\Omega}(a_j-a_j^+)\}=$$

$$=\exp\{-\frac{g}{\Omega}n_{j\bar{\sigma}}(a_j-a_j^+)\}a_j^+a_j\exp\{\frac{g}{\Omega}n_{j\bar{\sigma}}(a_j-a_j^+)\}c_{j\sigma}\exp\{\frac{g}{\Omega}(a_j-a_j^+)\} .$$

Аналогично доказывается равенство нулю и второго коммутатора.

Подставляя (14) в (13), видим, что действие одночастичной части гамильтониана на волновую функцию системы может быть записано как

$$H_{on-site}F=\sum_{x_1...x_{N_e}}\{f(x_1,...,x_{N_e})(N\Omega n-\mu N_e-\frac{g^2}{\Omega}N_e)-$$

$$-\frac{2g^2}{\Omega}\sum_{p<s}\delta_{x_p x_s}f(x_1,...,x_{N_e})\}\prod_{k=1}^{N_e}c^+_{x_k\sigma_k}|0>^{el}\Phi|0>^{ph}. \qquad (15)$$

Таким образом, фононная амплитуда волновой функции осталась без изменений в результате действия диагональной в узельном представлении части гамильтониана, а действие ее на электронную амплитуду волновой функции эквивалентно действию хаббардовского члена с $U=-2g^2/\Omega$ и смещению химического потенциала. Действие туннельной части гамильтониана сводится для f к обычным трансляциям

$$-t\sum_{k=1}^{N_e}f(...x_{k-1}...)+f(...x_{k+1}...),$$

а из-за модулирующего множителя фононная часть имеет такие же аргументы, как и волновая функция, на которую подействовали $H_{on-site}$.

Точное решение для одномерного ферми-газа с притяжением [5] позволяет найти энергию основного состояния нашей системы. Воспользовавшись результатами работы [5], получаем, что для малой плотности электронов $(N_e/N)/(2g^2/\Omega t)\ll 1$ энергия основного состояния

$$E=Nn\Omega-2tN_e-\frac{g^4N_e}{4t\Omega^2}(1+O(\frac{N_e^2\Omega^2t^2}{4N^2g^4})). \qquad (16)$$

В противоположном пределе $(N_e/N)/(2g^2/\Omega t)\gg 1$ энергия основного состояния равна

$$E=Nn\Omega-2tN_e+\frac{\pi^2N_e^3}{12N^3}-\frac{g^2N_e^2}{\Omega N^2}-\frac{g^2N_e^2\ln(N_e\Omega t/Ng^2)}{4\Omega N^2\pi^2}(1+O\ln^{-1}(N_e\Omega t/2Ng^2)). \qquad (17)$$

Щель в спектре электронных возбуждений, которая для малых плотностей электронов есть энергия связи электронной пары, в случае малой плотности электронов $(N_e/N)/(2g^2/\Omega t)\ll 1$ равна

$$\Delta E=\frac{g^4}{2\Omega^2t}(1+O((\frac{N_e}{N})^3/(2g^2/\Omega t)^2)). \qquad (18)$$

В противоположном пределе $(N_e/N)/(2g^2/\Omega t)\gg 1$

$$\Delta E=4g\sqrt{e^{-1}t/\Omega}(\frac{N_e}{N})^{3/2}\exp(\pi^2\alpha_0)\exp(-\pi^2N_e\Omega t/2Ng^2). \qquad (19)$$

где $\alpha_0\approx 0.11$ [5].

Заметим, что предложенная схема построения точного решения не изменилась бы, если бы мы рассматривали цепочку коррелированных в каждом узле электронов с энергией Хаббарда I. В этом случае эффективное одноузельное взаимодействие электронов оказалось бы равным $I-\frac{2g^2}{\Omega}$. При $I=\frac{2g^2}{\Omega}$ электроны оказывались бы эффективно некоррелированными, а при больших значениях I электроны испытывали бы отталкивание несмотря на взаимодействие с фононами, так что для вычисления энергии основного состояния и щели в спектре возбуждений необходимо воспользоваться результатами работ [6,7].

Авторы благодарны А.А.Овчинникову и В.Я.Кривнову за ценное обсуждение результатов работы. Авторы (М.Е.Ж. и В.А.И.) благодарны Российской научно-технической программе "Фуллерены и атомные кластеры" (проект 96149) за поддержку. В.А.И. благодарен Министерству образования, науки и культуры Японии.

---

1. T.Holstein, Ann. Phys. **8**, 325 (1958).
2. S.Ciuchi, F.de Pasquale, C.Masciovecchio, and D.Feinberg, Europhys. Lett. **24**, No7, 575 (1995).
3. F.Marsiglio, Physica **C244**, 21 (1995).
4. D.Ihle, H.Fehske, J.Loos, and U.Trapper, Physica **C235-240**, 2363 (1994).
5. В.Я.Кривнов, А.А.Овчинников, ЖЭТФ **67**, 1568 (1974).
6. E.Lieb and F.Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
7. А.А.Овчинников, ЖЭТФ **57**, 2137 (1969).