

ТЕОРЕМА ОРТОГОНАЛЬНОСТИ В 1D-ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ С ОГРАНИЧЕННЫМ СПЕКТРОМ

В.Г.Марихин

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН
142432 Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 29 апреля 1996 г.

После переработки 4 июня 1996 г.

Вычисляется перекрытие между волновыми функциями основного состояния одномерного электронного газа с гамильтонианами \hat{H}_0 и $\hat{H}_0 + \hat{V}$, где $\hat{V} = V\delta(x)$ – потенциал примеси. Показано, что в пределе бесконечно большого потенциала величина перекрытия обращается в нуль по закону $M^{-1/8}$ при $M \rightarrow \infty$, где M – число заполненных уровней, в то время как в случае малого потенциала это перекрытие мало отличается от единицы. Установлена связь между величиной перекрытия и поведением плотности состояния вблизи энергии Ферми (статистика уровней). В свете полученных результатов обсуждается возможность линеаризации спектра и проведения процедуры бозонизации.

PACS: 05.30.Ch, 71.10.Fx

В 1967 г. Андерсон доказал так называемую теорему ортогональности: матричный элемент вида $\langle \Psi_N^0 | \Psi_N^{0imp} \rangle$ стремится к нулю по закону $\exp(-(\delta^2/2\pi)^2 \log N)$ при $N \rightarrow \infty$, в случае линейного закона дисперсии электронов [1]. Здесь $|\Psi_N^0\rangle$ и $|\Psi_N^{0imp}\rangle$ – N -частичные волновые функции электронного газа без примеси и с одной примесью, соответственно, δ – фаза s -рассеяния потенциала примеси. В процессе вычисления, однако, возникли естественные трудности связанные, с неограниченностью линейного спектра, а значит, и с выбором основного состояния системы. Чтобы преодолеть эту трудность, необходимо сначала провести вычисления для системы с конечным набором состояний, а затем перейти к термодинамическому пределу ($N \rightarrow \infty$).

В данной работе эти вычисления сначала будут проведены в общем случае произвольного электронного спектра, а затем доведены до численного ответа в конкретном случае одномерного электронного газа со спектром

$$\epsilon = 2 \cos(2\pi k/N), \quad k = 0 \dots N - 1.$$

Получим сначала общую формулу для перекрытий волновых функций в случае произвольного спектра. Введем обозначения: пусть a и b – собственные значения, а $|a\rangle$ и $|b\rangle$ – собственные функции операторов \hat{H}_0 и $\hat{H}_0 + \hat{V}$, соответственно, так что $\hat{H}_0|a\rangle = a|a\rangle$, $(\hat{H}_0 + \hat{V})|b\rangle = b|b\rangle$. Пусть в точку с координатой нуль помещена примесь с потенциалом v , тогда $\hat{V} = v|0\rangle\langle 0|$. Одночастичные матричные элементы в этом случае имеют вид

$$\langle a|b\rangle = v \frac{\langle a|0\rangle\langle 0|b\rangle}{b - a}.$$

Перекрытие многочастичных волновых функций выражается через $\langle a|b\rangle$:

$$D_N \equiv \langle \Psi_N^0 | \Psi_N^{0imp} \rangle = \langle a_N \dots a_2 a_1 | b_1 b_2 \dots b_N \rangle = \det \langle a_i | b_j \rangle =$$

$$= \det(v \frac{\langle a_i | 0 \rangle \langle 0 | b_j \rangle}{b_j - a_i}), \quad (1)$$

$$i, j = 1, 2, \dots, N.$$

Второе равенство в (1) получается в представлении вторичного квантования путем подстановки $|a_1 a_2 \dots a_N \rangle = a_1^+ a_2^+ \dots a_N^+ |\text{vacuum} \rangle$ и последовательной коммутации операторов b и a^+ . Воспользуемся формулой Коши (см. [1]) для вычисления D_N :

$$\det\left(\frac{1}{b_i - a_j}\right) = \frac{\prod_{i>j}^N (a_i - a_j) \prod_{i>j}^N (b_i - b_j)}{\prod_{i,j=1}^N (b_i - a_j)},$$

$$\ln |D_N| =$$

$$= \sum_{m=1}^N \ln |\langle a_m | b_m \rangle| + \sum_{i>j}^N [\ln |a_i - a_j| + \ln |b_i - b_j| - \ln |b_i - a_j| - \ln |a_i - b_j|]. \quad (2)$$

Формула (2) верна для любого спектра и любого начального и конечного состояний. Подставив $a_i = i, b_i = i + \delta$, и вычислив $\langle a_i | b_i \rangle = \sin \delta$, где δ — фаза s -рассеяния примеси, нетрудно воспроизвести результат Андерсона для линейного спектра: $\ln |D_N| \sim -(\delta^2/2\pi^2) \ln N$ в главном приближении по N .

Произведем также формальный переход к непрерывному пределу в (2). Действительно, пусть $\delta\rho(\epsilon) = \rho(\epsilon) - \rho_0(\epsilon)$ — изменение плотности состояний при внесении примеси. Тогда

$$\ln |D(v)D(-v)| = - \int_{\epsilon > \epsilon_F} d\epsilon \int_{\epsilon' < \epsilon_F} d\epsilon' \Delta\rho(\epsilon)\Delta\rho(\epsilon') \ln |\epsilon - \epsilon'|. \quad (3)$$

Выражение (3) расходится при произвольном $\Delta\rho$ и надо различать два случая.

1. Выражение $\Delta\rho(\epsilon)\Delta\rho(\epsilon') \rightarrow 0$ достаточно быстро при $|\epsilon - \epsilon'| \rightarrow \infty$. В этом случае интеграл в (3) конечен и нет "катастрофы ортогональности".
2. Фазы рассеяния $\delta(\epsilon)$ обращаются в нуль только вблизи краев спектра и интеграл расходится (то есть при конечном числе N заполненных состояний ведет себя как $-\ln N$).

Следует отметить, что выражение (3) можно непосредственно усреднять по беспорядку, так как оно по-существу аналогично свободной энергии. Пусть, например, \hat{H}_0 — гамильтониан электронного газа с беспорядком, тогда добавление еще одной примеси приведет, с одной стороны, к изменению плотности состояний, с другой стороны, это изменение связано с перекрытием волновых функций посредством (3). По-видимому, верен факт, что в присутствии беспорядка коррелятор $\langle \Delta\rho(\epsilon)\Delta\rho(\epsilon') \rangle$ должен спадать к нулю при $|\epsilon - \epsilon'| \gg 1/\tau$, где τ — время рассеяния, то есть при $\tau E_F \gg 1$ мы имеем случай конечного D_∞ . Автору неизвестно доказательство этого утверждения, которое, по-видимому, аналогично тому факту, что корреляции плотности спадают экспоненциально на длине свободного пробега, однако из него немедленно следует критерий усредняемости системы: если D_∞ конечно, то можно усреднять по беспорядку.

Перейдем теперь к конкретному вычислению D_N для случая одномерного электронного газа с ограниченным спектром. Рассмотрим замкнутую цепочку из M узлов, на которой помещено N бесспиновых фермионов, описываемых гамильтонианом

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i^\dagger, \quad c_{N+1} \equiv c_1. \quad (4)$$

Легко видеть, что уровни энергии системы есть

$$a_j = 2 \cos\left(\frac{2\pi j}{M}\right).$$

Пусть $\hat{V} = v c_0^\dagger c_0$, тогда нетрудно получить также и уровни энергии возмущенной системы $b_j = Q_j + Q_j^{-1}$, где величины Q_j удовлетворяют уравнению

$$Q^M = \frac{Q - Q^- + v}{Q - Q^- - v};$$

вычислив также $\langle a_i | b_i \rangle$ и подставив в (3), можно вычислить D_N . Оценки показывают, что при очень малом потенциале, $v \ll 1$, $D_N \sim 1$, а при $v \sim 1$ логарифмическая расходимость остается, то есть $D_\infty = 0$. В случае ограниченного спектра фазы рассеяния сильно зависят от энергии и нельзя получить просто ответ, выраженный через один параметр δ . Ситуация сильно упрощается в физически интересном унитарном пределе ($v \rightarrow \infty$). Действительно, тогда $b_j = 2 \cos(\pi(2j + 1)/M)$; подстановка в (3) дает

$$D_N = \prod_{j=1}^N \frac{2}{N} \frac{t_{2j-1} t_{2j+1}}{t_{2j-1/2} t_{2j+1/2}} \frac{l_j}{l_{j+1/2}}, \quad (5)$$

здесь

$$l_j = 2 \sin(\pi j/M), \quad t_j = \prod_{k=1}^j l_k, \quad t_{j+1/2} = \prod_{k=0}^j l_{k+1/2}.$$

В термодинамическом пределе $M \rightarrow \infty$ и в случае больших N имеем

$$D_N \sim N^{-1/8}.$$

Полученный результат означает, что в случае системы без примесей "катастрофа ортогональности" имеет место даже при рассмотрении ограниченного спектра. С одной стороны, ответ для $\langle \Psi^0 | \Psi^{0imp} \rangle$ не зависит (в главном приближении по N) от конкретного вида обрезания в чистом случае, с другой стороны в "грязном" случае учет локализованных состояний вблизи дна зоны приводит к уменьшению эффективной ширины зоны, то есть области энергий, где изменение плотности состояния существенно (см. (3)), а значит, может осуществляться сценарий без катастрофы ортогональности (см. выше). Естественно, что такое влияние локализованных состояний сильно зависит от поведения электронного спектра вблизи дна зоны.

Обращение в нуль амплитуды $\langle \Psi^0 | \Psi^{0imp} \rangle$ в термодинамическом пределе приводит к важным особенностям при переходе к непрерывным моделям. Пусть потенциал примеси адиабатически включается со временем:

$$\hat{V} = v(t) |0\rangle \langle 0|, \quad v(-\infty) = 0, \quad v(\infty) = v$$

тогда $\langle \Psi^0 | \Psi^{0imp} \rangle = \langle \Psi^0 | S(\infty) | \Psi^0 \rangle$ [2]. Здесь $S(\infty)$ – матрица эволюции при переходе к представлению взаимодействия оператора \hat{V} [3]. Теория возмущения становится неприменимой при $|S(\infty)| \rightarrow 0$. Аналогичная ситуация имеет место в квантовой электродинамике: в топологически нетривиальных полях амплитуда перехода вакуум – вакуум обращается в нуль при снятии ультрафиолетового обрезания, что приводит, в частности, к выводу о несохранении аксиального тока (см. [4]). Этот вывод непосредственно переносится и на теорию одномерных металлов, в частности, на модель с гамильтонианом (4): рассмотрим случай ферми-газа с наполовину заполненной зоной – для модели (4) это означает, что состояния с $Q = e^{i\phi}$, $-\pi/2 < \phi < \pi/2$ – заняты. Можно линеаризовать спектр электронов вблизи точек $\phi_{L,R} = \pm\pi/2$ и рассматривать состояния ψ_L и ψ_R независимо. С этой точки зрения, аксиальный ток, а именно, $j = |\psi_R|^2 - |\psi_L|^2$ должен сохраняться. Однако состояния L и R перемешиваются вблизи дна зоны и ток не сохраняется, что следует из того факта, что амплитуда $\langle S(\infty) \rangle \rightarrow 0$. Было бы интересно проследить за появлением такой квантовой аномалии для модели (4) с произвольным потенциалом примесей.

В заключение автор благодарит М. В. Фейгельмана за полезные обсуждения, В. П. Минеева за постоянное участие и помощь в работе, а также фонд INTAS грант 1010-СТ93-0023 за финансовую поддержку.

-
1. P.W.Anderson, Phys. Rev. 164, 352 (1967).
 2. Л.С.Левитов, *Сборник задач по диаграммной технике*, ИТФ, Черноголовка, 1992.
 3. А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, М.: Физматгиз, 1962.
 4. А.М.Поляков, *Калибровочные поля и струны*, ИТФ, Черноголовка, 1995. A.M.Polyakov, *Gauge Fields and Strings*, Harwood Academic Publishers, Chur, Switzerland, 1987.