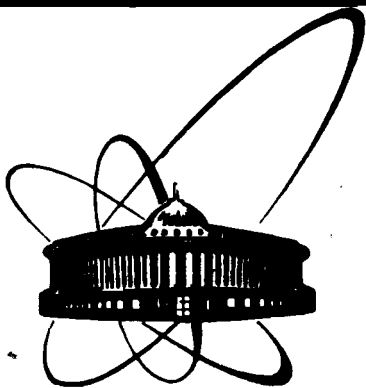


89-635



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

X 944

P17-89-635

Я. Хронек

**НОВЫЙ МЕТОД НАХОЖДЕНИЯ РЕШЕНИЙ
ДИСКРЕТНОЙ МОДЕЛИ ПАЙЕРЛСА**

1989

Хорошо известно, что физические характеристики одно- и квазиодномерных систем, рассчитанные на основе дискретных моделей, наиболее правильно соответствуют имеющимся экспериментальным данным^{/1,2,3/}. С другой стороны, не менее хорошо известны те трудности, которые связаны с решением разностных уравнений (см., например,^{/4/}). В связи с этим представляет интерес появление любого метода, позволяющего решить хотя бы определенный класс дискретных моделей. Один из таких методов предлагается в данной работе.

В серии работ^{/4,5/} была сформулирована и исследована точно решаемая дискретная модель пайерсовского диэлектрика. Она является специфическим обобщением известной модели Си, Шриффера и Хигера^{/3/}. Для нахождения солитонных возбуждений применялся относительно сложный (по крайней мере для физиков) математический аппарат, основанный на элементах алгебраической геометрии.

Основной задачей данной работы является разработка гораздо более простого подхода к изучению дискретной модели Пайерлса. Идея этого метода восходит к работе И.М.Кричевера^{/6/}, а также к работе^{/7/}, в которой исследовалась нестационарная континуальная модель одномерного металла.

Напомним коротко дискретную модель (подробнее см.^{/4/}). Рассматривается одномерная цепочка молекул, находящихся в точках X_n . На каждые N молекул приходится $N_e \leq 2N$ бесспиновых электронов (спин учитывается множителем 2). Гамильтониан системы имеет вид

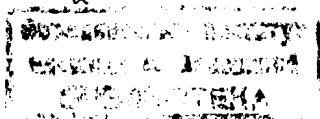
$$\mathcal{H} = \sum_n t_{n,n+1} (a_{n+1}^+ a_n + a_n^+ a_{n+1}) + U(x_n, v_n), \quad (I)$$

где a_n^+ (a_n) - операторы рождения (уничтожения) электрона на узле n , $t_{n,n+1}$ - интеграл перескока, через $U(x_n, v_n)$ мы обозначили потенциальную энергию взаимодействия электронов с атомами решетки (см. ниже). v_n представляет собой локальный потенциал внутри молекулярных деформаций. В данной модели решетка рассматривается в адиабатическом приближении и налагаются периодические граничные условия:

$$a_n = a_{n+N}, \quad a_n^+ = a_{n+N}^+, \quad v_n = v_{n+N}.$$

Основное состояние системы определяется из условия минимума функционала энергии:

$$\mathcal{W} = \sum_x E_x + U(x_n, v_n). \quad (2)$$



Здесь E_x - это уровни энергии электронов, и суммирование производится по занятым состояниям. Волновые функции (собственные функции) вводятся следующим образом^{2/}:

$$|\Psi_x\rangle = \sum_n \Psi_n^x a_n^+ |0\rangle.$$

Тогда амплитуды Ψ_n^x удовлетворяют разностным уравнениям, полученным из

$$\mathcal{H}|\Psi_x\rangle = E_x |\Psi_x\rangle. \quad (3)$$

Таким образом, задача на собственные значения для оператора \mathcal{H} (I) принимает вид разностного оператора Шредингера^{4/}:

$$c_n \Psi_{n+1}^x + c_{n-1} \Psi_{n-1}^x + v_n \Psi_n^x = E_x \Psi_n^x. \quad (4)$$

Здесь фермионные амплитуды Ψ_n^x ортонормированы и удовлетворяют условию полноты:

$$\sum_m \Psi_m^x \Psi_m^\beta = \delta_{x,\beta}, \quad \sum_x \Psi_n^x \Psi_m^x = \delta_{x,m}; \quad (5)$$

величины x в (5) - это подходящий индекс для N собственных векторов гамильтониана. Через c_n мы переобозначили интеграл перескока, удовлетворяющий так же, как и Ψ_n^x , периодическому условию $c_n = c_{n+N}$, $\Psi_n^x = \Psi_{n+N}^x$, ($c_n = \exp(x_n - x_{n+1})$).

Для потенциальной энергии взаимодействия между молекулами с учетом внутримолекулярных деформаций $U(x_n, v_n)$ был в^{4/} предложен следующий вид:

$$U(x_n, v_n) = \frac{\lambda_1}{2} \sum_n v_n^2 + \lambda \sum_n c_n^2. \quad (6)$$

Здесь λ, λ_1 - константы упругости. Заметим, что модель (4), (6) допускает точные решения только при выполнении условия $\lambda = \lambda_1$ (или $\lambda_1 = 0$).

Проблему нахождения основного состояния приведенной выше модели удобно сформулировать как вариационную задачу, в которой v_n, c_n и Ψ_n^x играют роль независимых переменных. Тогда вариация W по Ψ_n^x приводит к (4), а вариация по c_n и v_n приводит к уравнениям самосогласования:

$$\sum_n \left(\sum_{E \in \mu} \Psi_n^+(E) \Psi_n(E) + \lambda_1 v_n \right) = 0, \quad (7)$$

$$\sum_n \left(\sum_{E \in \mu} \left(\Psi_{n+1}^+(E) \Psi_n(E) + \Psi_n^+(E) \Psi_{n+1}(E) \right) + 2\lambda c_n \right) = 0.$$

Здесь μ - химический потенциал электронов, и вместо x мы ввели другую переменную E (энергетическая). Как и ранее, суммирование производится только по занятым состояниям. Соответствующие решения уравнений (4), (7) с необходимыми результатами из спектральной теории разностного оператора Шредингера приведены в^{4/}. Здесь мы только коротко напомним основные свойства оператора \mathcal{H} . Для произвольных c_n и v_n спектр состоит из $q \leq N+1$ зон. Обозначим через e_i границы зон спектра ($i=1, 2, \dots, 2q+2$). Пусть $e_1 < e_2 < \dots < e_{2q+2}$, тогда интервалы $[e_{2j-1}, e_{2j}]$, $1 \leq j \leq q+1$ определяют разрешенные зоны, т.е. электронный спектр состоит из $q+1$ разрешенных зон, которые разделены q запрещенными зонами. Границы зон e_i определяют риманову поверхность Γ ^{4/}:

$$y^2 = R(E), \quad R(E) = \prod_{i=1}^{2q+2} (E - e_i).$$

Для произвольного набора точек e_i построенный оператор \mathcal{H} будет квазипериодическим. Чтобы выделить чисто периодические операторы и получить явные формулы для v_n и c_n , введем важное понятие дифференциала квазимпульса^{4/}. По определению dp - это дифференциал вида

$$i(dp(E)) = \left(\bar{E} + \sum_{k=1}^{q-1} s_k \bar{E}^{q-k} \right) \frac{dE}{\sqrt{R(E)}}, \quad (8)$$

нормированный условием $\int_{e_{2j-1}}^{e_{2j}} dp = 0$, выражающим тот факт, что в запрещенной зоне нет занятых состояний.

В данной работе рассмотрим только такие \mathcal{H} , для которых в пределе бесконечной цепочки спектр состоит из конечного числа запрещенных зон ($N \rightarrow \infty, q = \text{const}$). В таком случае можно заменить суммирование по состояниям на интеграл по формуле

$$\sum_{E \in \mu} \dots \longrightarrow \frac{N}{2\pi} \oint_{\Gamma_\mu} \dots dp(E),$$

где через Γ_μ мы обозначили контур, охватывающий все занятые зоны. В этом приближении уравнения самосогласования (7) принимают вид

$$\oint_{\Gamma_\mu} \Psi_n^+(E) \Psi_{n+1}(E) v(E) dE + \lambda c_n = 0, \quad (9)$$

$$\oint_{\Gamma_\mu} \Psi_n^+(E) \Psi_n(E) v(E) dE + \lambda_1 v_n = 0. \quad (10)$$

Здесь мы обозначили $v(E) = dp/dE$.

Для решения уравнений самосогласования (9), (10) мы воспользуемся методом, предложенным Кричевером в работе /6/. При этом мы бы могли полностью следовать названной выше работе /6/ и сконструировать блоховские волновые функции электронов $\Psi_n(E)$ с помощью тета-функций Римана $\theta(u_1, u_2, \dots, u_4)$, построенных по поверхности Γ в виде /6/

$$\Psi_n(E) = \sum_{m=1}^M \alpha_m(n) \exp\left(in \int_{e_1}^E c/p(E')\right) \frac{\theta(A(E) + nU + \xi_m)}{\theta(A(E) + \xi_m)}, \quad (II)$$

здесь $\theta(u_1, \dots, u_4)$ - тета-функция Римана, $2\pi U$ - вектор θ -периодов абелева дифференциала второго рода с нулевыми a -периодами; векторы ξ_m равны $K - A(\gamma_1) - \dots - A(\gamma_{q-1} - 1 + m)$, где $A: \Gamma \rightarrow J(\Gamma)$ - отображение Абеля и K - вектор римановых констант (более подробно см., например, /6/). Для нахождения M коэффициентов $\alpha_m(n)$ в формуле (II) необходимо задать M линейных уравнений (например, /6/):

$$\Psi_n(E)|_{x_j} = \sum_{i=1}^M \Psi_n(x_i) C_{ji}.$$

Однако выбор волновых функций $\Psi_n(E)$ в написанном выше виде привел бы при нахождении физически интересных решений M -солитонного типа ($M \geq 2$) к неприятной процедуре сложивания дополнительных зон ($q > 2$) /8, 9/. Чтобы избежать этого, мы построим $\Psi_n(E)$, не прибегая к использованию тета-функций высших родов ($q > 2$).

Перед тем как привести явный вид $\Psi_n(E)$, заметим, что исследование уравнений (9), (10) модели можно упростить введением эллиптической параметризации кривой Γ /4/. Для римановой поверхности кривой Γ функции $R(E) = \prod_{i=1}^4 (E - e_i)$ введем параметр $z(E)$,

$$z(E) = \int_{e_1}^E dE [R(E)]^{-1/2} \quad (I2)$$

Полупериоды этого эллиптического интеграла равны

$$\omega = - \int_{e_1}^{e_2} \frac{dE}{\sqrt{R(E)}}; \quad \omega' = - \int_{e_2}^{e_3} \frac{dE}{\sqrt{R(E)}}. \quad (I3)$$

Формула (I2) устанавливает взаимно однозначное соответствие между точками Γ и точками z плоскости с точностью до сдвигов на 2ω , $2\omega'$. Эллиптическая функция $E(z)$, определенная (I2), имеет полюсы в точках $\pm z_0$ ($z_0 = z(-\infty)$). Обращение интеграла дается формулой /10/

$$E(z) = \zeta(z + z_0) - \zeta(z - z_0) + A,$$

где $\zeta(z)$ - дзета-функция Вейерштрасса /10/. Параметры ω, ω', A, z_0 заменяют параметры e_i в соответствии с рисунком I.

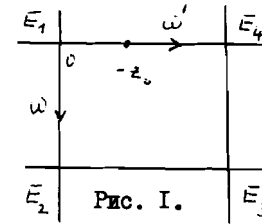


Рис. I.

$$e_1 = E(0), \quad e_2 = E(\omega), \\ e_3 = E(\omega + \omega'), \quad e_4 = E(\omega').$$

Данная эллиптическая параметризация позволяет записать $\Psi_n(E)$ в более удобном для дальнейшего виде, а именно, предположим, что Ψ_n имеет вид

$$\Psi_n(z) = b_n \frac{\sigma^n(z + z_0)}{\sigma^n(z - z_0)} \prod_{i=1}^M \frac{\sigma(z - x_i(n))}{\sigma(z - x_i)} \quad (I4)$$

Для того чтобы $\Psi_n(z)$ была doubly-periodической, необходимо и достаточно, чтобы числа нулей (с учетом кратности) числителя и знаменателя были равны. Следовательно,

$$-nz_0 + x_i(n) = nz_0 + x_i.$$

Кроме того, известно /4/, что для каждого значения E имеются две блоховские функции. Сама функция $\Psi_n(E)$ является однозначной на алгебраической кривой Γ . При $E \rightarrow \infty$ $\Psi_n(E)$ имеет две асимптотики $\Psi_n^{(\pm)}(E)$ на двух листах римановой поверхности Γ . Легко проверить, что

$$\Psi_n^{(\pm)}(E) = b_n^{\pm} \cdot E^{\pm n} \left\{ 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \xi_k^{(\pm)} \cdot E^{-k} \right\}, \quad (I5)$$

т.е. $\Psi_n(E)$ имеет полюс n -го порядка на одном листе и нуль n -го порядка на другом. Подставив (I5) в (4), нетрудно получить

$$b_n^{\pm} = e^{\pm nx_n}, \quad \xi_1^{(+)}(n) - \xi_1^{(+)}(n+1) = v_n, \quad \xi_1^{(-)}(n) - \xi_1^{(-)}(n-1) = v_n.$$

Функция $E(z)$ в окрестности точки $z = z_0$ имеет вид

$$E(z) = - \frac{1}{z - z_0} + O(z - z_0).$$

Теперь мы можем перейти к исследованию уравнений самосогласования (9), (10). Следуя /6/, зададим M комплексных чисел x_i и матрицу $M \times M$, c_{ij} . (Пусть, кроме того, элементы матрицы удовлетворяют следующему условию: $c_{ij} = -c_{ji}^*$). Эти величины играют роль параметров конструкции.

Для определения M параметров необходимо задать M условий. По причине, которая станет понятной ниже, выберем эти условия в виде

$$\text{зад } \Psi_n(z) \nu(z) = \sum_{j=1}^M c_{ij} \Psi_n(x_j^*) \quad (I6)$$

Кроме того заметим, что совершенно аналогично работе^{/6/} можно доказать условие полноты собственных функций $\Psi_n(z), \Psi_n^*(z)$

$$\delta_{(n-m)} = \oint_{\Gamma} \Psi_n^+(z) \Psi_m(z) \nu(z) dz - 2\pi i \sum_{i=1}^M c_{ii} \Psi_n^+(x_i) \Psi_m(x_i^*) \quad (I7)$$

т.е. имеется вклад как непрерывного, так и дискретного спектров.

Следующий шаг состоит в рассмотрении интеграла I вдоль замкнутого контура Γ_μ (определение Γ_μ см. выше):

$$I = \oint_{\Gamma_\mu} \Psi_n(z) \Psi_{n+1}(z) F(z) \nu(z) dz \quad (I8)$$

Здесь $F(z)$ функция вида $F(z) = \ln \left[\frac{z}{z-\omega} \right] + \gamma/2 + \gamma_0$,

где γ, γ_0 - некоторые константы. Из (I8) следует, что подынтегральное выражение имеет особенности в точках x_i, x_i^* и при $z \rightarrow z_0$ (т.е. $E \rightarrow \infty$). Применяя к (I8) теорему о вычетах, при выполнении условия (I6), получим

$$\int_0^\omega \nu(z) \Psi_n^+(z) \Psi_{n+1}(z) dz = i\gamma c_n \quad (I9)$$

$$F(x_i) - F(x_j^*) = i\pi (v_i \delta_{ij} - n_0) \quad (20)$$

где v_i - это числа заполнения n -го локального уровня ($v=0,1,2$), δ_{ij} - символ Кронекера, n_0 - произвольное целое число.

Совершенно аналогично поступим при решении уравнения (I0). Единственным отличием является то, что вместо $F(z)$ возьмем другую функцию

$$G(z) = \ln \left[\frac{z}{z-\omega} \right] + \tilde{\gamma}/2 + \tilde{\gamma}_0 \quad (21)$$

где $\tilde{\gamma}_0, \tilde{\gamma}$ - произвольные константы. Тогда вместо (I9), (20) получаем

$$\int_0^\omega \Psi_n^+(z) \Psi_n(z) \nu(z) dz = i\tilde{\gamma} v_n \quad (21)$$

$$G(x_i) - G(x_j^*) = i\pi (v_i \delta_{ij} - n_0) \quad (22)$$

Далее мы подробно проанализируем только случай $M=1$. Тогда, подставив в (20) и (22) функции $F(z)$ и $G(z)$ в виде (I8), (21), мы убеждаемся в том, что эти условия совместимы лишь при выполнении ра-

венства $\tilde{\gamma} = \gamma$. Так как, в свою очередь, константа $\tilde{\gamma}$ связана с константой λ в функционале энергии (2) соотношением $i\tilde{\gamma} = \pi\lambda/2$, мы видим, что модель (2), (6) допускает точные решения только для значения констант $\lambda_1 = \lambda$.

Рассмотрим теперь уравнения сшивки (20) для односолитонной деформации, когда они имеют вид (точки x_i расположены на окружности)

$$\ln \left[\frac{x^* - \omega}{x - \omega} \cdot \frac{x}{x^*} \right] + \gamma \left[\frac{1}{x^*} - \frac{1}{x} \right] = i\pi (v_1 - n_0).$$

Решить это уравнение в явном виде не представляется возможным, и поэтому ограничимся случаем $|\omega/x| \ll 1$. Тогда с точностью до членов порядка $O(|\omega/x|^2)$ мы имеем

$$(\omega_1 - \gamma) \cdot \ln \psi = \pi f (v_1 - n_0) \quad (23)$$

С учетом того, что ω является чисто мнимой величиной (I3) и, кроме того, γ связана с вещественной константой λ из функционала энергии (2) соотношением $i\gamma = \pi\lambda/2$ (см. (9) и (I9)), мы видим, что уравнение имеет решение лишь, если $n_0 = 0, 1, 2$ для значения числа заполнения локального уровня $v_1 = 0, 1, 2$, соответственно. Отсюда немедленно следует, что должно выполняться соотношение $\omega = \gamma$ (т.е. $\omega = \pi\lambda/2i$).

Теперь коротко остановимся на условиях, определяющих остальные параметры ω, ω', A, z_0 . Одним из таких будет уравнение, фиксирующее "плотность электронов" в системе

$$\frac{1}{2\pi} \int_{e_1}^{e_2} \nu(E) dE = \rho = \text{const}, \quad \int_{e_2}^{e_3} dp = 0 \quad (24)$$

Подставив в (24) явные выражения для $\nu(E)$ и dp (см. (8), после некоторых вычислений получим $z_0 = (\rho/2 - 1)\omega'$.

Кроме этого имеем еще в нашем распоряжении условие (I6), позволяющее определить параметр A . После стандартных вычислений с эллиптическими функциями (см., например, ^{/8/}) оно примет вид

$$\omega (A + \zeta(2z_0)) = i\pi + \eta(\rho - 2)\omega'$$

Для того чтобы получить явное выражение для смещения $u_n = x_{n+1} - x_n$ и потенциала внутримолекулярной деформации ψ_n , используем методику работы ^{/4/}. А именно, рассмотрим разложение $\Psi_n(z), (\Psi_n(E))$ в окрестности точек $\pm z_0, (E \rightarrow \pm\infty)$. Тогда в пределе слабой связи $|\omega/x| \ll 1$ для ψ_n и u_n получаем следующие выражения (см. также ^{/4/})

$$u_n \approx \sin\left(\frac{\pi f}{2}\right) \cdot \sin[\pi f(n-m_c)] \cdot \exp\left(-\pi \lambda \cdot \sin\left(\frac{\pi f}{2}\right)\right), \quad (25)$$

$$U_n = -\frac{4}{\pi f \lambda} \left| \frac{\omega}{\omega'} \right| \frac{\partial u_n}{\partial n}$$

Здесь m_c - произвольное, не обязательно целое число, что отражает непрерывное вырождение основного состояния.

В заключение мы еще раз отметим, что целью данной работы явилось описание нового метода решения определенного класса дискретных моделей пайерлсовского диэлектрика, предложенных в работах [4, 5]. Основные особенности применения данного метода проиллюстрированы при получении простейшего односолитонного решения (25). Более подробное исследование разностных уравнений одномерного диэлектрика (также в случае $U_n = 0$, когда необходима некоторая модификация метода) будет проведено в следующей публикации.

Считаю своим приятным долгом выразить глубокую признательность И.М.Кричеверу за многочисленные полезные дискуссии.

Литература

1. A.J.Heeger, S.Kivelson, J.R.Schrieffer, W.P. Su. Rev.Mod.Phys. 1988, v. 60, N 3, p. 781-850.
2. J.Malek, S.L.Drechsler, E.Heiner, R.Kahnt. Phys.stat.sol. (b) v. 147, 1988, p. 281-295.
3. W.P. Su, J.R.Schrieffer, A.J.Heeger. Phys.Rev. 1980, B22, p. 2099-2113.
4. С.А.Бразовский, И.Е.Дзялошинский, И.М.Кричевер, ЖЭТФ 1982, т. 83, вып. I(7), с. 389-415.
5. И.Е.Дзялошинский, И.М.Кричевер, ЖЭТФ, 1983, т. 85, вып. II, с. 1771-1789.
6. И.М.Кричевер. Функциональный анализ и его приложения. 1986, т. 20, вып. 3, с. 42-54.
7. И.Е.Дзялошинский, И.М.Кричевер, Я.Хронек. ЖЭТФ, 1988, т. 94, вып. 7, с. 344-354.
8. С.И.Матвеев, ЖЭТФ, 1984, т. 87, вып.5(II), с. 1784-1792.
9. Я.Хронек. ЖЭТФ, 1987, т. 92, вып. 5, с. 1822-1827.
10. Г.Бейтмен, А.Эрдей. Высшие трансцендентные функции, т. 3, М.: Наука 1967, гл. 13.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 сентября 1989 года.

Хронек Я. P17-89-635
Новый метод нахождения решений
дискретной модели Пайерлса

Предложен новый метод нахождения решений класса дискретных моделей Пайерлса с экспоненциальным взаимодействием между атомами цепочки.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Hronek J. P17-89-635
A New Method of Solving Discrete
Peierls Models

A new approach is proposed to solve a class of discrete Peierls models with the exponential interaction between atoms of a chain.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989