Краевые состояния в одномерной цепочке

Евгений Аникин

13 марта 2016 г.

В этом листке я искал краевые состояния у двух разных полубесконечных цепочек. Одна из них состоит из различных атомов, соединённых одинаковыми связями. Другая, наоборот, — из одинаковых атомов, но с разными связями. В результате получилось, что у цепочки первого типа краевого состояния нет, а у цепочки второго типа его наличие зависит от типа разорванной связи.

1 Цепочка с разными связями

1.1 Бесконечная в обе стороны цепочка

Рассмотрим цепочку из атомов, где связи между атомами чередуются по величине.

$$H = \sum_n t_1(a_n^\dagger b_n + a_n b_n^\dagger) + t_2(a_{n+1}^\dagger b_n + a_{n+1} b_n^\dagger) \tag{1}$$

После такого же преобразования Фурье, как и в предыдущем случае, гамильтониан примет вид

$$H = \sum_p (t_1 e^{-\frac{ipa}{2}} + t_2 e^{\frac{ipa}{2}}) a_p^\dagger b_p + (t_1 e^{\frac{ipa}{2}} + t_2 e^{-\frac{ipa}{2}}) a_p b_p^\dagger \tag{2}$$

Собственные значения гамильтониана —

$$E_p^{1,2} = \pm\epsilon_p = \pm|t_1 e^{\frac{ipa}{2}} + t_2 e^{-\frac{ipa}{2}}| = \pm\sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos pa} \tag{3}$$

Введём обозначение

$$e^{i\phi} = \frac{t_1 e^{-\frac{ipa}{2}} + t_2 e^{\frac{ipa}{2}}}{\sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos pa}} \tag{4}$$

Тогда гамильтониан диагонализуется преобразованием

$$\begin{pmatrix} a_p \\ b_p \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_p \\ y_p \end{pmatrix} \tag{5}$$

Отсюда получаются выражения для функций Грина в импульсном представлении:

$$G_0^R(\omega, p, A, A) = G_0^R(\omega, p, B, B) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\omega - \epsilon_p + i\delta} + \frac{1}{\omega + \epsilon_p + i\delta}\right) \tag{6}$$

$$G_0^R(\omega, p, A, B) = \frac{1}{2}\left(\frac{e^{i\phi}}{\omega - \epsilon_p + i\delta} - \frac{e^{i\phi}}{\omega + \epsilon_p + i\delta}\right) \tag{7}$$

$$G_0^R(\omega, p, B, A) = \frac{1}{2}\left(\frac{e^{-i\phi}}{\omega - \epsilon_p + i\delta} - \frac{e^{-i\phi}}{\omega + \epsilon_p + i\delta}\right) \tag{8}$$

Здесь аргументы A, B соответствуют операторам a_p и b_p.

1.2 Полубесконечная цепочка

Как и в прошлый раз, введём возмущение $V = \Delta E a_0^\dagger a_0$, где ΔE очень велико. Это приведёт к совершенно такому же, как и раньше, уравнению Дайсона. Решение уравнения Дайсона —

$$G^R(\omega, m, s, n, s') = G_0^R(\omega, m, s, n, s') - \frac{G_0^R(\omega, m, s, 0, A) G_0^R(\omega, 0, A, n, s')}{G_0^R(\omega, 0, A, 0, A)}, \quad s, s' = A, B \tag{9}$$

Уровни энергии даются, как видно, нулями функции $G_0^R(\omega, 0, A, 0, A)$, а волновая функция связанного состояния пропорциональна $G_0^R(\omega, m, s, 0, A)$.

В нашем случае, как нетрудно убедиться, этот уровень энергии — $E = 0$. Действительно, подставим $\omega = 0$ в (6). Получается

$$G_0^R(\omega, p, A, A) = -\frac{1}{2\epsilon_p} + \frac{1}{2\epsilon_p} = 0 \tag{10}$$

Отсюда следует, что функции Грина в узельном представлении, составленные из операторов a, обращаются в нуль для всех m, n, и, таким образом, волновая функция связанного состояния равна нулю во всех узлах a (на мой взгляд, это довольно удивительно).

Чтоы найти волновую функцию в узлах b, вычислим функцию Грина $G_0^R(0, m, B, 0, A)$.

$$G_0^R(0, m, B, 0, A) = -\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{-ik(m+\frac{1}{2})} e^{-i\phi}}{\epsilon_p} = -\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{t_1 e^{-ikm} + t_2 e^{-ik(m+1)}}{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos k} \tag{11}$$

Сделаем сдвиг переменной интегрирования $k \to k + \pi$. Получится

$$G_0^R(0, m, B, 0, A) = (-1)^{m+1} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{t_1 e^{-ikm} - t_2 e^{-ik(m+1)}}{t_1^2 + t_2^2 - 2t_1 t_2 \cos k} \tag{12}$$

Последний интеграл берётся, как и в прошлом листке. Полюс определяется уравнением

$$\cos k = \frac{1}{2}\left(\frac{t_1}{t_2} + \frac{t_2}{t_1}\right) \tag{13}$$

Для определённости будем считать, что $t_1 > t_2$. Тогда

$$k = \pm i \log \frac{t_1}{t_2} \tag{14}$$

После несложных преобразований получим

$$G_0^R(0, m, B, 0, A) = \begin{cases} (-1)^{m+1} \frac{t_2^m}{t_1^{m+1}} & \text{при} \quad m \geq 0 \\ \quad 0 \quad \text{при} & m < 0 \end{cases} \tag{15}$$

Получается, что при $t_1 > t_2$ краевое состояние есть только у правой половины цепочки. Его волновая функция —

$$\psi(n, B) = \sqrt{1 - \left(\frac{t_2}{t_1}\right)^2} \left(\frac{t_2}{t_1}\right)^n \tag{16}$$

2 Цепочка с одинаковыми связями

2.1 Бесконечная цепочка

Рассмотрим цепочку с чередующимися потенциалами атомов и одинаковыми связями.

$$H = \sum_n \xi(a_n^\dagger a_n - b_n^\dagger b_n) + t a_n^\dagger (b_n + b_{n-1}) + t a_n (b_n^\dagger + b_{n-1}^\dagger) \tag{17}$$

Сделаем преобразование Фурье:

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum e^{-ipan} a_p \tag{18}$$

$$b_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum e^{-ipa(n+\frac{1}{2})} b_p \tag{19}$$

После преобразования Фурье гамильтониан примет вид

$$H = \sum_p \xi(a_p^\dagger a_p - b_p^\dagger b_p) + 2t \cos\frac{pa}{2} a_p^\dagger b_p + 2t \cos\frac{pa}{2} a_p b_p^\dagger \tag{20}$$

Гамильтониан, таким образом, задаётся матрицей

$$\begin{pmatrix} \xi & 2t\cos\frac{pa}{2} \\ 2t\cos\frac{pa}{2} & -\xi \end{pmatrix} \tag{21}$$

Собственные значения энергии —

$$E_p = \pm\epsilon_p = \pm\sqrt{\xi^2 + 4t^2\cos^2\frac{pa}{2}} \tag{22}$$

Введём обозначение $\cos\alpha = \xi/\epsilon_p$. Тогда матрица гамильтониана запишется в виде

$$\epsilon_p \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ \sin\alpha & -\cos\alpha \end{pmatrix} \tag{23}$$

Это — матрица отражения, и её собственные векторы очевидны: $(\cos\frac{\alpha}{2}, \sin\frac{\alpha}{2})$ и $(-\sin\frac{\alpha}{2}, \cos\frac{\alpha}{2})$. Гамильтониан можно теперь диагонализовать преобразованием

$$\begin{pmatrix} a_p \\ b_p \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \cos\frac{\alpha}{2} & -\sin\frac{\alpha}{2} \\ \sin\frac{\alpha}{2} & \cos\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_p \\ y_p \end{pmatrix} \tag{24}$$

Оператор x_p рождает состояние с положительной энергией, а y_p — с отрицательной. После этого легко вычислить функции Грина операторов a_p, b_p, они получаются такими:

$$G_0^R(\omega, p, A, A) = \frac{\cos^2\frac{\alpha}{2}}{\omega - \epsilon_p + i\delta} + \frac{\sin^2\frac{\alpha}{2}}{\omega + \epsilon_p + i\delta} \tag{25}$$

$$G_0^R(\omega, p, A, B) = G_0^R(\omega, p, B, A) = \frac{\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2}}{\omega - \epsilon_p + i\delta} + \frac{\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2}}{\omega + \epsilon_p + i\delta} \tag{26}$$

$$G_0^R(\omega, p, B, B) = \frac{\sin^2\frac{\alpha}{2}}{\omega - \epsilon_p + i\delta} + \frac{\cos^2\frac{\alpha}{2}}{\omega + \epsilon_p + i\delta} \tag{27}$$

Каждое из двух слагаемых в уравнениях выше происходит от функций Грина $\langle T_\tau\, x_p(\tau)x_p^\dagger(\tau')\rangle$, $\langle T_\tau\, y_p(\tau)y_p^\dagger(\tau')\rangle$.

Функции Грина (25) – (27) можно переписать в более удобном виде:

$$G_0^R(\omega, p, A, A) = \frac{\omega + \xi}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \tag{28}$$

$$G_0^R(\omega, p, A, B) = \frac{2t\cos pa}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \tag{29}$$

$$G_0^R(\omega, p, B, B) = \frac{\omega - \xi}{\omega^2 - \epsilon_p^2 + i\delta} \tag{30}$$

2.2 Полубесконечная цепочка

Как и раньше, введём возмущение $V = \Delta E a_0^\dagger a_0$. Уровни энергии снова будут определяться уравнением $G_0^R(\omega, 0, A, 0, A) = 0$. Имеем

$$\begin{aligned} G_0^R(\omega, 0, A, 0, A) = \int_{-\pi}^{\pi}\frac{dk}{2\pi}\frac{\omega + \xi}{\omega^2 - \epsilon_k^2 + i\delta} = \\ = \int_{-\pi}^{\pi}\frac{dk}{2\pi}\frac{\omega + \xi}{\omega^2 - \xi^2 - 2t^2 - 2t^2\cos pa + i\delta} \end{aligned} \tag{31}$$

Интеграл обращается в ноль при $\omega = -\xi$, на границе непрерывного спектра. Внутри запрещённой зоны, то есть в области $|\omega| < \xi$, интеграл строго отрицателен. Отсюда можно заключить, что в этом случае граничного состояния не существует: никаких новых полюсов у функции Грина не возникло.