Половина одномерной цепочки в подходе сильной связи

Евгений Аникин

6 марта 2016 г.

1 Функция Грина одномерной цепочки

Пусть в гамильтониане сильной связи есть только переходы между соседними атомами. Тогда энергия состояния с квазиимпульсом p —

$$\epsilon_p = E + 2C \cos pa \tag{1}$$

Гамильтониан же выглядит так:

$$\hat{H} = \sum_n E w_n^\dagger w_n + C w_{n+1}^\dagger w + C w_{n-1}^\dagger w \tag{2}$$

Для функции Грина в этом случае может быть получена явная формула.

$$G_0^R(\omega, m, n) = \frac{1}{N} \sum_p \frac{e^{-ip(R_m - R_n)}}{\omega - \epsilon_p + i\delta} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{-ik(m-n)}}{\omega - E - 2C \cos k + i\delta} \tag{3}$$

Последний интеграл берётся с помощью вычетов, в конечном итоге получаем ответ:

$$G_0^R(\omega, m, n) = \frac{e^{-(m-n)\kappa}}{2C \sinh \kappa}, \qquad \cosh \kappa = \frac{\omega - E}{C} \tag{4}$$

2 Примесь с бесконечной энергией

Добавим к гамильтониану возмущение

$$V = \Delta E w_0^\dagger w_0 \tag{5}$$

Функция Грина в этом случае —

$$G^R(\omega, m, n) = G_0^R(\omega, m, n) + \frac{\Delta E G_0^R(\omega, m, 0) G_0^R(\omega, 0, n)}{1 - \Delta E G_0^R(\omega, 0, 0)} \tag{6}$$

Если ΔE очень велика, то получится

$$G^R(\omega,m,n) = G_0^R(\omega,m,n) - \frac{G_0^R(\omega,m,0)G_0^R(\omega,0,n)}{G_0^R(\omega,0,0)} = \\ = \frac{e^{-|m-n|\kappa} - e^{-|m|\kappa-|n|\kappa}}{2C\sinh\kappa} \quad (7)$$

Видно, что G^R отлична от нуля только в случае, если m и n одного знака. Это значит, что левая и правая половины цепочки стали отделены друг от друга.

3 Разорванная связь

Пусть теперь возмущение

$$V = -C(w_1^\dagger w_0 + w_0^\dagger w_1) \quad (8)$$

Это приведёт к разрыву цепочки. Уравнение Дайсона для такого возмущения —

$$\mathcal{G}(\omega,m,n) = \mathcal{G}_0(\omega,m,n) - C\mathcal{G}_0(\omega,m,0)\mathcal{G}(\omega,1,n) - C\mathcal{G}_0(\omega,m,1)\mathcal{G}(\omega,0,n) \quad (9)$$

Такому же уравнению удовлетворяет и запаздывающая функция Грина.

$$G^R(\omega,m,n) = G_0^R(\omega,m,n) - CG_0^R(\omega,m,0)G^R(\omega,1,n) - \\ - CG_0^R(\omega,m,1)G^R(\omega,0,n) \quad (10)$$

Так как левая и правая части цепочки теперь никак между собой не связаны, должно быть

$$G^R(\omega,0,1) = 0 \quad (11)$$

Пользуясь этим условием, легко решить уравнение Дайсона. В процессе решения последовательно получаются выражения

$$G^R(\omega,0,0) = G^R(\omega,1,1) = \frac{e^{-\kappa}}{C} \quad (12)$$

$$G^R(\omega,n,1) = \frac{e^{-\kappa|n-1|} - e^{-(|n|+1)\kappa}}{2C\sinh\kappa} \quad (13)$$

$$G^R(\omega,n,0) = \frac{e^{-\kappa|n|} - e^{-(|n-1|+1)\kappa}}{2C\sinh\kappa} \quad (14)$$

$$G^R(\omega,m,n) = \frac{e^{-|m-n|\kappa} - e^{-(m+n)\kappa}}{2C\sinh\kappa} \quad \text{для} \quad m,n>0 \quad (15)$$

$$G^R(\omega,m,n) = \frac{e^{-|m-n|\kappa} - e^{-(|m-1|+|n-1|)\kappa}}{2C\sinh\kappa} \quad \text{для} \quad m,n<0 \quad (16)$$

$$G^R(\omega,m,n) = 0 \quad \text{для } m,n \text{ по разные стороны от нуля} \quad (17)$$

Функция Грина получается точно такая же, как в предыдущем параграфе.