# Локализованное состояние в подходе сильной связи

Евгений Аникин

5 марта 2016 г.

## 1 Более аккуратное вычисление волновой функции связанного состояния

В прошлом листке были получены два выражения для функции Грина:

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

$$G^R(\omega,m,n) = \sum_\lambda \psi_\lambda(m)\psi_\lambda^*(n)\frac{1}{\omega - E_\lambda + i\delta} \tag{2}$$

Чтобы найти волновую функцию связанного состояния, нужно разложить (1) около $\omega = E_\Lambda$. Положим $\omega = E_\Lambda + \Delta\omega - i\delta$. Разложим знаменатель второго слагаемого в (1), пользуясь тем, что $\Delta E G_0^R(E_\Lambda, 0, 0) = 1$. Получим:

$$G^R(\omega,m,n) = -\frac{G_0^R(E_\Lambda,m,0)G_0^R(E_\Lambda,0,n)}{\frac{\partial G_0^R}{\partial\omega}(E_\Lambda,0,0)}\frac{1}{\omega - E_\Lambda + i\delta} + \\ + \text{нечто, регулярное при } \omega = E_\Lambda + i\delta \tag{3}$$

Отсюда легко можно получить, что

$$\psi_\Lambda(n) = \frac{G_0^R(E_\Lambda,n,0)}{\sqrt{-\frac{\partial G_0^R}{\partial\omega}(E_\Lambda,0,0)}} \tag{4}$$

### 1.1 Слабосвязанное состояние в трёхмерной решётке

Числитель (4) был найден в предыдущем листке, ответ для числителя такой:

$$G_0^R(E_\Lambda,n,0) = \frac{me^{-pR_n}}{2\pi\nu R_n}, \text{ где } \nu = \frac{N}{V} \tag{5}$$

Теперь нужно вычислить знаменатель.

$$\frac{\partial G_0^R}{\partial\omega}(\omega,0,0) = -\frac{1}{\nu}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{(\omega-\epsilon_p+i\delta)^2} \tag{6}$$

Здесь интеграл тоже можно распространить до бесконечности и взять в полярных координатах. В результате имеем

$$\frac{\partial G_0^R}{\partial \omega}(\omega, 0, 0) = -\frac{m^2}{2\pi\nu p_0} \tag{7}$$

Волновая функция —

$$\psi_\Lambda(n) = \sqrt{\frac{p_0}{2\pi\nu}}\frac{e^{-p_0 R_n}}{R_n} \tag{8}$$

Видно, что она нормирована на единицу, как это и должно быть.

## 1.2 Сильносвязанное состояние

Пусть теперь $E_\Lambda$ лежит далеко от зоны, а $\epsilon_p \sim 0$. Тогда

$$G_0^R(E_\Lambda, n, 0) = \frac{1}{\nu}\int \frac{d^d p}{(2\pi)^d}\,\frac{e^{ipR_n}}{E_\Lambda - \epsilon_p} \approx \frac{1}{\nu}\int \frac{d^d p}{(2\pi)^d}\,\frac{e^{ipR_n}}{E_\Lambda}\left(1 + \frac{\epsilon_p}{E_\Lambda}\right) \tag{9}$$

При больших $\omega$

$$G_0^R(\omega, 0, 0) \approx \frac{1}{\omega}, \tag{10}$$

поэтому

$$\frac{\partial G_0^R}{\partial \omega}(E_\Lambda, 0, 0) = -\frac{1}{E_\Lambda^2} \tag{11}$$

Пользуясь формулой 4, получим

$$\psi_\Lambda(n) \approx \frac{1}{\nu}\int \frac{d^d p}{(2\pi)^d}\,\left(1 + \frac{\epsilon_p}{E_\Lambda}\right)e^{ipR_n} \tag{12}$$

Тогда $\psi_\Lambda(0) \approx 1$, а $\psi_\Lambda(n) \approx \frac{C_n}{E_\Lambda}$, где $C_n$ — коэффициенты из гамильтониана сильной связи.