# Локализованное состояние в подходе сильной связи

Евгений Аникин

5 марта 2016 г.

## 1 Гамильтониан в подходе сильной связи

Гамильтониан для электронов в решётке можно записать так:

$$H = \sum_p \epsilon_p a_p^\dagger a_p, \tag{1}$$

Здесь $a_p$ — оператор уничтожения частицы в состоянии с квазиимпульсом $p$ и энергией $\epsilon_p$. В периодическом потенциале можно ввести новый базис из состояний, волновые функции которых называются функциями Ванье. Определим новые операторы уничтожения $w_n$:

$$w_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{-ipR_n} a_p \tag{2}$$

Выразив $a_p$ через $w_n$, можно получить гамильтониан в приближении сильной связи:

$$H = \sum_k E\, w_k^\dagger w_k + \sum_{k \neq l} C_{k-l}\, w_k^\dagger w_l \tag{3}$$

Энергии частиц выражаются через новые коэффициенты $E$, $C_n$ таким образом:

$$\epsilon_p = E + \sum_{n \neq 0} C_n e^{ipR_n} \tag{4}$$

В дальнейшем нам потреуются функции Грина в узельном представлении, определённые через операторы $w_n(t)$. Например, мацубаровская функция Грина —

$$\mathcal{G}_0(\omega_n, R_m - R_n) = \frac{1}{N} \sum_p \frac{e^{-ip(R_m - R_n)}}{i\omega_n - E_p}. \tag{5}$$

Аналогично, запаздывающая функция Грина —

$$G_0^R(\omega, R_m - R_n) = \frac{1}{N} \sum_p \frac{e^{-ip(R_m - R_n)}}{\omega - E_p + i\delta}. \tag{6}$$

## 2 Примесный атом

Добавим к исходному гамильтониану возмущение:

$$V = \Delta E w_0^\dagger w_0 \tag{7}$$

Это соответствует примесному атому, находящемуся в начале координат. Чтобы найти новую функцию Грина, нужно решить уравнение Дайсона, которое в данном случае примет вид

$$\mathcal{G}(\omega_n, m, n) = \mathcal{G}_0(\omega_n, m, n) + \Delta E \mathcal{G}_0(\omega_n, m, 0)\mathcal{G}(\omega_n, 0, n) \tag{8}$$

Решение этого уравнения —

$$\mathcal{G}(\omega_n, m, n) = \mathcal{G}_0(\omega_n, m, n) + \frac{\Delta E \mathcal{G}_0(\omega_n, m, 0)\mathcal{G}_0(\omega_n, 0, n)}{1 - \Delta E \mathcal{G}_0(\omega_n, 0, 0)} \tag{9}$$

Заменяя здесь $i\omega$ на $\omega + i\delta$, найдём запаздывающую функцию Грина.

$$G^R(\omega, m, n) = G_0^R(\omega, m, n) + \frac{\Delta E G_0^R(\omega, m, 0) G_0^R(\omega, 0, n)}{1 - \Delta E G_0^R(\omega, 0, 0)} \tag{10}$$

Полюса запаздывающей функции Грина определяют энергетический спектр системы. Здесь полюса — это решения уравнения

$$\Delta E G_0^R(\omega, 0, 0) = 1, \tag{11}$$

то есть

$$\frac{\Delta E}{N} \int \frac{\rho(\epsilon)\, d\epsilon}{\omega - \epsilon + i\delta} = 1 \tag{12}$$

Кроме того, зная запаздывающую функцию Грина, можно найти волновую функцию связанного состояния. Предположим, что мы диагонализовали возмущённый гамильтониан и нашли набор собственных состояний $|\lambda\rangle$. Тогда функция Грина $G^R$ —

$$G^R(\omega, m, n) = \sum_\lambda \psi_\lambda(m)\psi_\lambda^*(n) \frac{1}{\omega - E_\lambda + i\delta} \tag{13}$$

Сравнивая (10) и (13), получим, что

$$\psi_\Lambda(n) \propto G_0^R(E_\Lambda, n, 0) \tag{14}$$

### 2.1 Слабосвязанное состояние в трёхмерной решётке

Предположим, что $E_\Lambda$ близко к нижней границе зоны, а $\epsilon_p = \frac{p^2}{2m} + o(p^2)$. Положим для удобства $p_0^2 = -2mE_\Lambda$.

Тогда имеем:

$$\psi_\Lambda(n) \propto \frac{V}{N} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{e^{ipR_n}}{p_0^2 + p^2 + o(p^2)} \tag{15}$$

Здесь интегрирование ведётся по зоне Бриллюэна. Однако, если $R_n \gg a$, $p_0^{-1} \gg a$, то основной вклад в интеграл вносит область малых $p$. Поэтому можно считать, что

$$\psi_\Lambda(n) \propto \frac{V}{N} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{e^{ipR_n}}{p_0^2 + p^2}, \tag{16}$$

где интеграл берётся по всем $p$. Такой интеграл можно взять, сначала перейдя в полярные координаты, а затем — с помощью вычетов. Ответ получается такой:

$$\psi_\Lambda(n) \propto \frac{e^{-p_0 R_n}}{R_n} \tag{17}$$

## 2.2 Сильносвязанное состояние

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

$$\psi_\Lambda(n) \propto \frac{V}{N} \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d} \frac{e^{ipR_n}}{E_\Lambda - \epsilon_p} \approx \frac{V}{N} \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d} \frac{e^{ipR_n}}{E_\Lambda} \left(1 + \frac{\epsilon_p}{E_\Lambda}\right) \tag{18}$$

Тогда $\psi_\Lambda(0) \approx 1$, а $\psi_\Lambda(n) \approx \frac{C_n}{E_\Lambda}$, где $C_n$ — коэффициенты из (3). Таким образом, если $C_n$ отличны от нуля только для ближайших атомов, то волновая функция для всех остальных атомов обращается в нуль (в этом приближении).