Письма в ЖЭТФ, том 39, вып. 3, стр. 134 – 136 *10 февраля 1984 г.*

О ПАЙЕРЛСОВСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В ОДНОМЕРНЫХ ФЕРМИ-СИСТЕМАХ СО СЛАБЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

В.Я.Кривнов, А.А.Овчинников

Рассмотрена задача о пайерлсовской неустойчивости в одномерных ферми-системах со слабым взаимодействием и наполовину заполненной зоной. Показано, что влияние взаимодействия на пайерлсовский переход существенно различно в модели бесспиновых частиц и в модели частиц со спином.

Согласно известной теореме Пайерлса [1] одномерный металл неустойчив относительно искажений решетки. Из этой теоремы вытекает ряд важных следствий для теории одномерных систем [2]. В частности, на ней основана концепция солитонов как особого рода возбужденных состояний полиацетилена [3].

Необходимо, однако, отметить, что вывод Пайерлса относился к системе невзаимодействующих электронов. Хотя в дальнейшем неоднократно предпринимались попытки учесть влияние взаимодействия на пайерлсовскую неустойчивость, основанные на различных приближенных методах [4] или результатах численных расчетов конечных цепочек [5,6], этот вопрос не решен окончательно и к настоящему времени.

В данной работе проблема пайерлсовской неустойчивости будет рассмотрена для двух моделей слабовзаимодействующих ферми-частиц: бесспинового решеточного ферми-газа с гамильтонианом:

$$\hat{H} = - \sum_{-\pi < k < \pi} \cos k\, a_k^+ a_k + i\delta \sum_{-\pi < k < \pi} \sin k\, a_k^+ a_{k+\pi} +$$

$$+ (g/2N) \sum \cos q\, a_{k_1+q}^+ a_{k_2-q}^+ a_{k_2} a_{k_1} \qquad (1)$$

и модели Хаббарда:

$$\hat{H} = - \sum_{k,\sigma} \cos k\, a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + i\delta \sum_{k,\sigma} \sin k\, a_{k\sigma}^+ a_{k+\pi\sigma} +$$

$$+ (g/N) \sum a_{k_1+q\,\alpha}^+ a_{k_1\alpha} a_{k_2-q\beta}^+ a_{k_2\beta} . \qquad (2)$$

Будет исследован случай наполовину заполненной зоны, для которого, согласно теореме Пайерлса, происходит удвоение периода цепочки. Входящая в (1) величина δ является параметром деформации. Отметим также, что гамильтониан (1) может быть выражен через спиновые операторы и, таким образом, описывать спин-пайерлсовскую систему с анизотропным взаимодействием.

Задача исследования неустойчивости одномерной системы относительно деформации цепочки сводится к нахождению зависимости энергии основного состояния E_0 от δ. Поскольку энергия упругости решетки $E_{\text{упр}} = \kappa\, \delta^2/2$ (κ – безразмерный коэффициент упругости), деформация энергетически выгодна, если величина

$$\epsilon(\delta) + E_{\text{упр}} \qquad (\epsilon(\delta) = E_0(\delta) - E_0(0))$$

имеет минимум при $\delta \neq 0$. Для $g = 0$ $\epsilon(\delta) \sim \delta^2 \ln \delta$ и ясно, что имеется минимум при $\delta << 1$. Это утверждение и составляет теорему Пайерлса.

Анализ ряда теории возмущений по g для энергии основного состояния (1) и (2) показывает, что в n-том порядке ведущий вклад в $\epsilon(\delta)/\delta^2 \sim g^n \ln^{n+1} \delta$ ($\delta << 1$). Ниже мы кратко опишем способ суммирования таких наиболее расходящихся членов ряда теории возмущений. Обычно предполагается, что приближение, соответствующее учету лишь таких вкладов, справедливо, если $g << 1$ (слабое взаимодействие).

Оказывается, что вклады в $\epsilon(\delta) \sim \delta^2 g^n \ln^{n+1} \delta$ вносят диаграммы "паркетного" типа, имеющие пару линий, соответствующих "аномальным" спариваниям $< a_k^+ a_{k+\pi} >$

$$< a_k^+ a_{k+\pi} > = i\delta \sin k / 2\epsilon(k); \quad \epsilon(k) = (\cos^2 k + \delta^2 \sin^2 k)^{1/2},$$

Сумма таких диаграмм выражается через вершинную часть $\gamma(k_1\sigma_1, k_2\sigma_2; k_3\sigma_3, k_4\sigma_4)$ ($k = (k, \omega)$, σ – спиновый индекс):

$$\epsilon(\delta) = -i\,(8\pi^2)^{-1} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \sum_{k_1 k_2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2\, G(k_1, \omega_1) G(k_2, \omega_2) . \gamma(k_1\sigma_1, k_2\sigma_2;$$

$$k_1 + \pi\,\sigma_1\, k_2 + \pi\,\sigma_2) \qquad (3)$$

$G(k, \omega)$ – гриновская функция, соответствующая аномальному спариванию.

Входящая в (3) вершинная часть должна быть найдена в паркетном приближении. Таким образом, нахождение суммы наиболее расходящихся диаграмм энергии сводится к вычислению суммы паркетных диаграмм вершинной части. Общая схема суммирования таких диаграмм хорошо известна [7, 8]. В [7, 9] указанное приближение использовалось для исследования возможных состояний одномерных систем. Совокупность всех диаграмм вершинной части может быть разбита на четыре класса [7]: диаграммы γ_1, приводимые от k_1, k_2 к k_3, k_4 (т.е. диаграммы, которые можно разделить на две части, содержащие k_1, k_2 и k_3, k_4, разрезав диаграмму по двум внутренним линиям); γ_2, приводимые от k_1, k_3 к k_2, k_4; γ_3, приводимые от k_1, k_4 к. k_2, k_3 и неприводимые (в качестве такой выбирается вершинная часть первого порядка). Главный логарифмический вклад в (3) вносит область интегрирования по импульсам k_1, $k_2 \cong \pm\pi/2$. В соответствии с этим существенно поведение $\gamma(k_1\sigma_1, k_2\sigma_2; k_3\sigma_3, k_4\sigma_4)$ лишь при импульсах $\cong \pm\pi/2$. Можно показать, исходя из (3), что $\epsilon(\delta)$ следующим образом выражается через γ_1, γ_2 и γ_3:

$$\epsilon(\delta) = (i\delta^2/4\pi^2)\sum_{\sigma_1\sigma_2}\int_0^\Phi dt_1\int_0^\Phi dt_2\ \{\gamma_1^{+--+}(\min(t_1,t_2)) - \gamma_3^{++--}(\min(t_1,t_2)) +$$

$$+\gamma_2^{+--+}(t_1,t_2,\Phi) - \gamma_2^{++--}(t_1,t_2,\Phi)\}, \qquad (4)$$

где знаки $\pm$ соответствуют импульсам $\pm\pi/2$, $\Phi = -\ln\delta$ и в (4) мы перешли к логарифмическим переменным $t_i = -\ln(\delta k_i)$. Как видно из (4), γ_1^{+--+} и γ_3^{++--} являются функциями одной переменной (известная в теории паркетных уравнений ситуация, когда все импульсы, от которых зависит γ одного порядка), а γ_2^{+--+} и γ_2^{++--} – функции трех переменных.

Нахождение функций γ, входящих в (4) сводится к решению системы нелинейных интегральных уравнений. Опуская промежуточные выкладки (соответствующие вычисления будут опубликованы), приведем окончательные выражения для $\epsilon(\delta)$ с учетом члена нулевого порядка по g. Для модели (1):

$$\epsilon(\delta) = -(\delta^2/4g)(\exp(2g\Phi/\pi) - 1). \qquad (5)$$

Для модели Хаббарда

$$\epsilon(\delta) = -(\delta^2\Phi/\pi)\,|1 - (g\Phi/\pi)|^{-1/2}. \qquad (6)$$

Как следует из (5), при $\delta \ll 1$ для бесспинового ферми-газа $\epsilon(\delta) = (-4g)^{-1}\delta^{2-2g/\pi}$ и деформация энергетически выгодна, если $g > 0$, в случае притяжения система устойчива относительно пайерлсовского перехода. В модели Хаббарда $\epsilon(\delta)$ расходится при $\delta_0 = \exp(-\pi/|g|)$. С другой стороны, энергия основного состояния (2) должна быть величиной конечной при $\delta = \delta_0$. Наличие особенности в (6) связано с приближенным характером вычислений и свидетельствует о том, что функция $\epsilon(\delta)/\delta^2$ имеет минимум при $\delta = \delta_0(g)$. Определение характера особенности $\epsilon(\delta)$ при $\delta = \delta_0(g)$ требует учета непаркетных диаграмм. Во всяком случае, система устойчива относительно перехода в пайерлсовское состояние, если $|\epsilon(\delta_0)/\delta_0^2|$ будет меньше $\kappa/2$.

Литература

1. *Пайерлс Р.* Квантовая теория твердых тел, М., 1956.
2. *Булаевский Л.Н.* УФН, 1975, **115**, 263.
3. *Su W.P., Schrieffer J.R., Heeger A.J.* Phys. Rev. Lett., 1979, **42**, 1698.
4. *Horsch P.* Phys. Rev., 1981, **B24**, 7351.
5. *Kivelson S., Heim D.E.* Phys. Rev., 1982, **B26**, 4278.
6. *Mazumdar S., Dixit S.N.* Phys. Rev. Lett., 1983, **51**, 292.
7. *Бычков Ю.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* ЖЭТФ, 1966, **50**, 738.
8. *Roulet B., Gavoret J., Noziers P.* Phys. Rev., 1969, **178**, 1072.
9. *Дзялошинский И.Е., Ларкин А.И.* ЖЭТФ, 1971, **61**, 791.

Институт химической физики
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
19 декабря 1983 г.