

## 二维电子气的关联函数

熊 小 明<sup>1)</sup>

(上海工业大学物理教研室)

1988年9月8日收到

本文在少粒子体系波函数数值解的基础上讨论了强磁场中二维电子气的二体关联函数。在数值计算的意义上给出了有限集团体系二体关联函数的计算公式。

尽管理论物理工作者对二维电子气体表现出越来越浓厚的兴趣,并且大家也很清楚地知道那些令人捉摸不透的实验现象,例如,分数量子 Hall 效应以及氧化物超导体的高转变温度的特性,都是来自二维电子气的强关联作用,但是,人们却很少对二维电子气的关联函数作详细的讨论。众所周知,在多体理论中二粒子的关联函数是一个很重要的物理量。很多物理量,例如,关联能、响应函数、结构因子等,都可以从关联函数中得到。因此,关联函数的求得是多体理论中非常感兴趣的课题之一。然而,大多数关于关联函数的研究都是针对均匀电子体系。并且已经发展了不少近似计算方法<sup>[1-4]</sup>。而对于非均匀的体系,关联函数不具有平移不变性,它依赖于两个电子的位置,给计算带来很大的复杂性<sup>[5]</sup>。强磁场中的二维电子体系就是一个非均匀的电子体系。电子的密度分布不再是一个常数<sup>[6]</sup>。因此,对磁场中二维电子气的关联函数还没有一个很好的计算方法。

由于电子具有库仑长程相互作用,二维电子气体实际上是一个强关联作用的多电子体系。对这样一个体系,不仅电子的关联函数,就是象体系的基态能及基态波函数这样最基本的问题也没有一个完善的处理方法。人们首先从少数粒子的小体系出发,借助于电子计算机计算这些小集团的基态能和能隙,期望从这些少体问题的精确计算中得到一些有关多体问题的结论和启示<sup>[7-10]</sup>。二体关联函数在形式上只与两个电子的位置有关,其它电子的效应都以对其坐标求积分的形式出现。因此,本文试图从少数粒子的体系出发,在数值计算的意义上讨论这些少体系中电子的二体关联函数。

二体关联函数由多体系统的归一化波函数定义为

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{N(N-1)}{n(\mathbf{r}_1)n(\mathbf{r}_2)} \int |\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 d^2\mathbf{r}_3 \dots d^2\mathbf{r}_N, \quad (1)$$

式中  $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  是关联函数,  $n(\mathbf{r})$  是体系的电子密度。对于一个均匀体系,  $n(\mathbf{r})$  是常数,而强磁场中的二维电子体系,  $n(\mathbf{r})$  则与位置  $\mathbf{r}$  有关<sup>[6]</sup>。  $N$  是体系的电子数目。  $\mathbf{r}_i$  是第  $i$  个电子的位置矢量。  $\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  是电子体系的多体波函数。在少体问题中,  $\Phi$  可以精确地数值求解<sup>[11]</sup>,

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理分中心。

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{\{\sigma\}} \alpha_{\sigma} \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (2)$$

式中  $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  是二次量子化空间的基矢,  $\sigma$  代表  $N$  个电子角动量的某种可能的组合.  $\alpha_{\sigma}$  是二次量子化空间体系波函数的  $\Psi_{\sigma}$  分量.  $\Psi_{\sigma}$  由单粒子波函数的 Slater 行列式构成,

$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \phi_{l_1}(\mathbf{r}_1) \cdots \phi_{l_N}(\mathbf{r}_N), \quad (3)$$

$\phi_{l_i}(\mathbf{r}_i)$  是第  $i$  个电子具有角动量  $l_i$  时, 电子的单体波函数<sup>[12]</sup>,

$$\phi_l(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi l!}} \left( \frac{r}{\sqrt{2}} \right)^l e^{-r^2/4} e^{-il\theta}. \quad (4)$$

为了简单, 这里只限于第一 Landau 能级的讨论. (3) 式中  $P$  表示对  $(l_1, \dots, l_N)$  所有可能的交换. 当  $P$  为偶交换时,  $(-1)^P = 1$ . 否则,  $(-1)^P = -1$ .

把(2), (3)式代入(1)式中, 并且引入产生和湮灭算符  $c_i^{\dagger}$  及  $c_i$ <sup>[11]</sup>, 则关联函数可表示为

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{n(\mathbf{r}_1)n(\mathbf{r}_2)} \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{\sigma'\}} \alpha_{\sigma}^* \alpha_{\sigma'} \cdot \sum_{i,j=1}^N \sum_{i',j'=1}^N \phi_{l_i}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{l_j}^*(\mathbf{r}_2) \cdot \phi_{l_{i'}}(\mathbf{r}_1) \phi_{l_{j'}}(\mathbf{r}_2) \langle \sigma | c_{l_i}^{\dagger} c_{l_j}^{\dagger} c_{l_{i'}} c_{l_{j'}} | \sigma' \rangle. \quad (5)$$

不失一般性, 取  $\mathbf{r}_2$  在极轴上, 此时  $\theta_2 = 0$ . 把(4)式的单体波函数  $\phi_l(\mathbf{r})$  及电子的密度函数  $n(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}_1) &= N \int |\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 d^2\mathbf{r}_2 \cdots d^2\mathbf{r}_N \\ &= \sum_{\{\sigma\}} |\alpha_{\sigma}|^2 \sum_{i=1}^N \phi_{l_i}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{l_i}(\mathbf{r}_1) \end{aligned} \quad (6)$$

代入(5)式可得

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{\sigma'\}} \alpha_{\sigma}^* \alpha_{\sigma'} \sum_{i,j=1}^N \sum_{i',j'=1}^N \langle \sigma | c_{l_i}^{\dagger} c_{l_j}^{\dagger} c_{l_{i'}} c_{l_{j'}} | \sigma' \rangle \\ &\quad \cdot (l_i! l_j! l_{i'}! l_{j'}!)^{-1/2} \tilde{r}_1^{l_i+l_j} \tilde{r}_2^{l_{i'}+l_{j'}} \cdot e^{i(l_i-l_{i'})\theta_1} \\ &\quad / \left[ \sum_{\{\sigma\}} |\alpha_{\sigma}|^2 \sum_{i=1}^N l_i!^{-1} \tilde{r}_1^{2l_i} \cdot \sum_{\{\sigma'\}} |\alpha_{\sigma'}|^2 \sum_{j=1}^N l_j!^{-1} \tilde{r}_2^{2l_j} \right], \end{aligned} \quad (7)$$

式中  $\tilde{r} = r/\sqrt{2}$ .

至此, 在数值计算的基础上得到了强磁场中二维电子气的二体关联函数. 通过少体问题哈密顿量的数值对角化, 可得到体系的波函数, 从而给出  $\alpha_{\sigma}$  和  $|\sigma\rangle$ . 因此, 可求出关联函数  $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  的数值结果. 下面对(7)式的某些特殊情况作些讨论:

1. 在数值计算中, (7)式可进一步简化. 首先注意到, 交换  $\sigma$  与  $\sigma'$ , 相当于对  $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  取复共轭. 因此, (7)式分子中对  $\{\sigma'\}$  的求和可减少近一半的工作量. 其次, 在对  $(i, j)$  及  $(i', j')$  的求和中, 也只需对  $i < j$  及  $i' < j'$  求和. 如果把(7)式的分子部分记

为  $M(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , 则

$$M(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \text{Re} \left\{ \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{\sigma'\} \leq \{\sigma\}} \alpha_{\sigma}^* \alpha_{\sigma'} \sum_{i < j} \sum_{i' < j'} \langle \sigma | c_{i_i}^{\dagger} c_{i_i'}^{\dagger} c_{i_j'} c_{i_j} | \sigma' \rangle \right. \\ \left. \cdot (l_i! l_j! l_{i'}! l_{j'}!)^{-1/2} \eta_{l_i l_j l_{i'} l_{j'}} (2 - \delta_{\sigma, \sigma'}) \right\}, \quad (8)$$

式中  $\text{Re}(\dots)$  表示取实部.

$$\eta_{l_i l_j l_{i'} l_{j'}} = (\tilde{r}_{i_i}^{l_i+l_{i'}} \tilde{r}_{j_j}^{l_j+l_{j'}} + \tilde{r}_{i_i}^{l_i+l_{i'}} \tilde{r}_{j_j}^{l_j+l_{j'}}) \cos(l_i - l_{i'}) \theta_i \\ - (\tilde{r}_{i_i}^{l_i+l_{i'}} \tilde{r}_{j_j}^{l_j+l_{j'}} + \tilde{r}_{i_i}^{l_i+l_{i'}} \tilde{r}_{j_j}^{l_j+l_{j'}}) \cos(l_j - l_{j'}) \theta_j. \quad (9)$$

2. 当  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$  时, 即,  $\tilde{r}_1 = \tilde{r}_2 = \tilde{r}$ ,  $\theta_i = 0$ . 从(9)式中可以看出,  $\eta_{l_i l_j l_{i'} l_{j'}} = 0$ . 所以, 关联函数等于零.

3. 当  $\mathbf{r}_2 = 0$  时, 关联函数(7)式的分子与分母中都出现随  $\tilde{r}_2 \rightarrow 0$  的因子. 当  $\mathbf{r}_1 \neq 0$  时, 这些因子可相互消去.

$$g(\mathbf{r}_1, 0) = \text{Re} \left\{ \sum'_{\{\sigma\}} \sum'_{\{\sigma'\} \leq \{\sigma\}} \alpha_{\sigma}^* \alpha_{\sigma'} \sum_{i=2}^N \sum_{j'=2}^N \langle \sigma | c_{i_i}^{\dagger} c_{i_i'}^{\dagger} c_{i_j'} c_{i_j} | \sigma' \rangle \right. \\ \left. \cdot (l_i! l_{j'}!)^{-1/2} \tilde{r}_{i_i}^{l_i+l_{i'}} (2 - \delta_{\sigma, \sigma'}) \right\} \\ \Bigg/ \left[ \sum_{\{\sigma\}} |\alpha_{\sigma}|^2 \sum_{i=1}^N l_i!^{-1} \tilde{r}_i^{2l_i} \cdot \sum'_{\{\sigma'\}} |\alpha_{\sigma'}|^2 \right], \quad (10)$$

式中  $\sum'_{\{\sigma\}}$  表示求和中只对含有  $l_0$  角动量的组态求和, 而  $l_0$  是在一切可能的组态中, 最小的单粒子角动量.

4. 如果取体系的波函数  $\Phi$  为 Laughlin 波函数<sup>[13]</sup>,

$$\Phi(z_1, \dots, z_N) = \left\{ \prod_{i < k} (z_i - z_k)^m \right\} e^{-\sum_i |z_i|^2/4} \\ = \Sigma A(m_1, \dots, m_N) z_1^{m_1} z_2^{m_2} \dots z_N^{m_N} e^{-\sum_i |z_i|^2/4}, \quad (11)$$

式中  $z_i$  是电子位置的复坐标.  $m$  是一给定奇数,  $1/m$  代表体系的 Landau 能级填充因子. 式中求和是对所有  $m_i$  进行的, 它们都可从 0 取到某一由粒子数  $N$  和  $m$  决定的确定值.  $m_i$  之间应满足  $\sum_i m_i = m N(N-1)/2$  的关系. 事实上,  $m_i$  代表  $i$  电子的角动量. (11) 式明显地包含了费密子的泡利不相容原理. 对于粒子数  $N$  不大的体系, 系数  $A(m_1, \dots, m_N)$  可以用解析方法求出来, 从而给出(2)式中  $\alpha_{\sigma}$  的数值. 尽管计算系数  $A$  比较复杂, 但这样可省去求解  $\alpha_{\sigma}$  的计算工作量. 因此, 对于粒子数  $N$  不大的体系可采用 Laughlin 波函数.

[1] D. Pines, *Elementary Excitations in Solids*, Benjamin, New York, (1964).

[2] S. Chakravarty and C. W. Woo, *Phys. Rev.*, **B13**(1976), 4815.

[3] D. M. Ceperley, *Phys. Rev.*, **B18**(1978), 3126.

[4] K. Utsumi and S. Ichimaru, *Phys. Rev.*, **B22**(1980), 1522.

[5] X. Sun, T. Li, M. Farjam and C. W. Woo, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 3913.

- [6] 熊小明、周世勋, 物理学报, **37**(1988), 511.
- [7] R. B. Laughlin, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 3383.
- [8] S. M. Girvin and T. Jach, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 4506.
- [9] W. Lai, K. Yu, Z. Su and L. Yu, *Solid State Comm.*, **52**(1984), 339.
- [10] K. Takano and A. Isihara, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 1399.
- [11] 熊小明、周世勋, 物理学报, **36**(1987), 1630.
- [12] 熊小明、周世勋, 物理学报, **36**(1987), 935.
- [13] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1395.

## THE CORRELATION FUNCTION OF TWO DIMENSIONAL ELECTRON GAS

XIONG XIAO-MING

(Physics Division, Shanghai University of Technology)

### ABSTRACT

The correlation function of two dimensional electron gas with the presence of a strong perpendicular magnetic field has been studied on the basis of the wave function in small system. A formula of the correlation function of a finite cluster has been obtained for numerical calculation.