

准一维体系的电子关联的变分计算

毛辉明¹⁾ 邵金山 汪鸿伟

江西师范大学物理系, 南昌, 330027

冯伟国 孙鑫

上海复旦大学物理系, 上海, 200433

1989年5月16日收到

对于具有库仑相互作用的准一维电子体系, 本文提出了一种新的模型, 得到了准一维体系的电子有效库仑势形式。在相关基函数理论框架下, 根据电子气的集体振荡行为, 给出该体系的多体波函数, 并得到不同密度的电子体系的关联函数和关联能, 本文得到的关联函数是恒正的, 且满足归一化条件。

PACC: 7145G; 7145N

一、引言

近年来, 准一维体系的电子关联问题已引起人们的足够重视^[1-3]。这是由于准一维体系的许多物理性质主要决定于关联函数, 由它可求得关联能和结合能、结构因子 $S(k)$ 和响应函数、中子散射截面和入射粒子的能量损失、等离子体振荡和屏蔽等等。这些物理量都可进行实验测量。

现在已发展了多种近似方法来计算准一维体系的电子关联函数 $g(z)$ 。其中主要有 STLS (Singwi, Tosi, Land and Sjölander) 自洽近似^[1,2]、相关基函数^[3]等。但是, 仔细研究上述方法, 不难看到其不足之处:

- 1) 在 r_s 足够大时会出现 $g(0) < 0$ ^[1,2];
- 2) STLS 方法不能详细描述在 z 较大时 $g(z)$ 的振荡行为^[1,2];
- 3) 不能给出归一条件的满足程度^[1-3];
- 4) 对于库仑势都是给出 z 方向傅里叶展式的系数, 不能得到明显的准一维有效库仑势形式^[1-3];
- 5) 象交换能和关联能等有关物理量未作定量计算^[1-3]。

为了克服上述方法不足之处, 完善相关基函数理论, 本文将从真实的三维体系中的电子库仑相互作用出发, 结合准一维材料的共同特征, 导出准一维体系中的有效库仑相互作用

1) 现在通讯地址: 江西省计量局。

用形式,并根据 Pines 的电子气集体振荡行为理论,在相关基函数理论框架下得到准一维体系的多体基态波函数,进而通过对实空间的关联函数积分方程的自洽迭代求解以及对系统能量的变分计算,最后给出准一维体系的电子关联函数和关联能。

二、准一维电子体系的有效哈密顿量

准一维体系可看成是一种束缚的三维体系: 电子沿 z 轴可自由运动,在径向 ξ 方向上受到势阱 $u(\xi) = \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2$ 所束缚,三维电子体系的哈密顿量可写成^[3]

$$H = \int d\mathbf{r} \phi^+(\mathbf{r}) H_0 \phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \phi^+(\mathbf{r}) \phi^+(\mathbf{r}') V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \phi(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

式中 $V(r) = e^2/r$ 是电子间的库仑相互作用,

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u(\xi) \quad \mathbf{r} = (z, \xi). \quad (2)$$

在径向束缚势能 $u(\xi)$ 的作用下,电子在径向处于束缚态 $R_a(\xi)$, 此时场算符可展开为

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k\alpha\sigma} e^{ikz} R_a(\xi) \chi_{\sigma} c_{k\alpha\sigma}. \quad (3)$$

将(3)式代入(1)式,可以得到

$$H = \sum_{k\alpha\sigma} \left(\varepsilon_a + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) C_{k\alpha\sigma}^\dagger C_{k\alpha\sigma} + \frac{1}{2L} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ \sigma_1 \sigma_2}} \sum_{\substack{a_1 a_2 \\ \alpha_1 \alpha_2}} \sum_{q \neq 0} \int dz e^{-iqz} V_{a_1 a_2 a_3 a_4}(z) \\ \cdot C_{k_1+q, \alpha_1 \sigma_1}^\dagger C_{k_2-q, \alpha_2 \sigma_2}^\dagger C_{k_3 \alpha_3 \sigma_3} C_{k_4 \alpha_4 \sigma_4}, \quad (4)$$

式中 $V_{a_1 a_2 a_3 a_4}(z)$ 为准一维体系的电子有效库仑势,

$$V_{a_1 a_2 a_3 a_4}(z) \equiv e^2 \int d\xi_1 \int d\xi_2 \frac{R_{a_1}^*(\xi_1) R_{a_2}^*(\xi_2) R_{a_3}(\xi_2) R_{a_4}(\xi_1)}{[z^2 + (\xi_1 - \xi_2)^2]^{1/2}}. \quad (5)$$

而 $\{\varepsilon_a\}$ 为对应于 $\{R_a(\xi)\}$ 的本征能量。

在本文讨论的准一维体系中,电子束缚在链 (z 轴) 附近,其尺度为玻尔半径,此时径向运动的激发态能量很高,电子很难跃迁上去,因此可只考虑径向的基态并略去指标 a , 详细的推导见附录一,此时(5)式可以近似为

$$V_\beta(|z|) = \frac{e^2}{|z|} (1 - \exp(-\beta|z|)) \quad (6)$$

式中 β 为径向对电子的屏蔽因子。

将(6)式代入(4)式,准一维电子体系的哈密顿量可简化为(将 ε_0 作为电子动能的起点)

$$H = \sum_i \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} + \frac{1}{2L} \sum_{q \neq 0} V_\beta(q) (\rho_q^\dagger \rho_q - N). \quad (7)$$

式中

$$\rho_q = \sum_i \exp(iqz_i), \quad (8)$$

$$\begin{aligned} V_\beta(q) &\equiv \int dz \exp(-iqz) V_\beta(z) \\ &= e^2 \ln \left(\frac{q^2 + \beta^2}{q^2} \right), \end{aligned} \quad (9)$$

$V_\beta(q)$ 是准一维体系的电子有效库仑势的傅氏展开式的分量。

由(9)式, 不难得到 $V_\beta(q)$ 的渐近行为,

$$V_\beta(q) \approx \begin{cases} -2e^2 \ln(q/\beta) & q \rightarrow 0; \\ e^2 \beta^2 / q^2 & q \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (10)$$

很明显(10)式与文献[2]所给出的渐近行为完全一致, 但这里得到明显的有效库仑势形式, 这是本文优越之处, 而且弥补了冯伟国和孙鑫^[3]在处理有效库仑势的不足之处。

三、相关基波函数

多电子体系的基态波函数可一般地写成如下形式^[4]:

$$\phi(z_1, z_2, \dots, z_N) = D[\varphi] \exp[U(z_1, z_2, \dots, z_N)] \quad (11)$$

式中 $D[\varphi]$ 是单电子轨道组成的 Slater 行列式, $u(z_1, \dots, z_N)$ 相对于电子的交换是对称的, 它代表了关联并可根据变分原理来确定。可将 $u(z_1, \dots, z_N)$ 分解为

$$u(z_1, \dots, z_N) = \frac{1}{2!} \sum_{i,j} u(z_i, z_j) + \frac{1}{3!} \sum_{i,j,k} u(z_i, z_j, z_k) + \dots, \quad (12)$$

式中 $u(z_i, z_j)$, $u(z_i, z_j, z_k)$... 是二体、三体... 关联因子。对于排斥相互作用, 当电子密度不很高时, 三体以及更多体的关联可忽略, 于是

$$\phi(z_1, z_2, \dots, z_N) = D[\varphi] \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i < j} u(|z_i - z_j|) \right]. \quad (13)$$

这就是 Jastrow-Feenberg 变分波函数, $u(x)$ 称为关联因子^[4,5]。

按照 Bohm-Pines 理论^[6], 存在一个最大波矢 q_c , 当 $q < q_c$ 时是集体自由度; 而 $q > q_c$ 时是单粒子自由度。通过正则变换^[7]可以得到体系的基态波函数为

$$\begin{aligned} \Psi &= D[\phi] \exp \left\{ -\frac{1}{L} \sum_{q < q_c} V_\beta(q) \frac{\rho_q^\dagger \rho_q}{2\hbar\omega_p(q)} \right\} \\ &= D[\varphi] \exp \left\{ -\frac{1}{L} \sum_{i \neq j} \sum_{q < q_c} V_\beta(q) \frac{e^{iqz_{ij}}}{2\hbar\omega_p(q)} \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

它在形式上与 Jastrow 波函数(13)式相似, 如将(13)式中的 $u(x)$ 展开,

$$u(|z|) = \frac{1}{L} \sum_q e^{iqz} C_q = \frac{1}{2\pi} \int dq e^{iqz} C_q, \quad (15)$$

$$C_q = \int dz e^{-iqz} u(|z|), \quad (16)$$

则(13)式变为

$$\phi = D[\varphi] \exp \left\{ \frac{1}{4L} \sum_q C_q (\rho_q^+ \rho_q - N) \right\}, \quad (17)$$

它与(14)式相比较, 不难得到

$$C_q = - \frac{2V_\beta(q)}{\hbar\omega_p(q)} \theta(q_c - q), \quad (18)$$

式中 $\theta(q_c - q)$ 是阶跃函数. $\omega_p(q)$ 是等离子体集体振荡频率, 根据电子集体振荡理论^[7], 将涨落密度 ρ_q 对时间连续求二次微商, 即可得到等离子体频率为

$$\omega_p(q) = \sqrt{2ne^2 \ln[(q^2 + \beta^2)^{1/2}/q] / m |q|}. \quad (19)$$

将(19)式代入(18)式, 并利用(15)式, 最后得到 $u(|z|)$ 的积分表达式

$$u(|z|) = - \frac{2}{\sqrt{\pi k_F a_B}} \int_0^\infty \cos(qz) \frac{\sqrt{\ln[(q^2 + \beta^2)^{1/2}/q]}}{q} \theta(q_c - q) dq. \quad (20)$$

上述被积函数在 $q \rightarrow 0$ 时有奇性, 这要求采用一定的极限过程, 类似文献[3], 首先将(20)式中被积函数里的 q 改为 $q + \varepsilon$,

$$u^\varepsilon(|z|) = - \frac{2}{\sqrt{\pi k_F a_B}} \int_0^\infty \cos[(q + \varepsilon)z] \frac{\sqrt{\ln\{[(q + \varepsilon)^2 + \beta^2]^{1/2}/(q + \varepsilon)\}}}{q + \varepsilon} \theta(q_c - q) dq \quad (\varepsilon \rightarrow +0). \quad (21)$$

注意到波函数(13)式有一性质, 在 $u(|z_{ij}|)$ 上加任何常数 u_0 不影响结果. 因为 u_0 的引进只使波函数改变归一化常数.

现在引进常数

$$u_0^\varepsilon = \frac{2}{\sqrt{\pi k_F a_B}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\ln\{[(q + \varepsilon)^2 + \beta^2]^{1/2}/(q + \varepsilon)\}}}{q + \varepsilon} \theta(q_c - q) dq. \quad (22)$$

于是二体关联因子可改变为

$$\begin{aligned} u(|z|) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [u^\varepsilon(|z|) + u_0^\varepsilon] \\ &= \frac{4}{\sqrt{\pi k_F a_B}} \int_0^\infty \sin^2(qz/2) \frac{\sqrt{\ln[(q^2 + \beta^2)^{1/2}/q]} \theta(q_c - q)}{q} dq, \end{aligned} \quad (23)$$

它是收敛的. 于是, 基态波函数(13)式可写成

$$\phi(z_1, z_2, \dots, z_N) = D[\varphi] F(z_1, z_2, \dots, z_N), \quad (24)$$

$$F(z_1, z_2, \dots, z_N) = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i < j} u(|z_{ij}|) \right], \quad (25)$$

式中关联因子 $u(|z_{ij}|)$ 由(23)式表示, 这样的基态波函数就是相关基波函数^[4].

四、关联函数的方程

在 F 中引进强度因子 λ ,

$$F(\lambda) \equiv \exp \left[\frac{\lambda}{2} \sum_{i < j} u(|z_{ij}|) \right], \quad (26)$$

则波函数亦为 λ 的函数,

$$\Psi(\lambda) \equiv \Psi(z_1, z_2, \dots, z_N | \lambda) = F(\lambda) D[\varphi]. \quad (27)$$

按照关联函数定义,可有

$$g(z_{12} | \lambda) = \frac{1}{n^2} \frac{N!}{(N-2)!} \int |\Psi(\lambda)|^2 dz_3 \cdots dz_N / \int |\Psi(\lambda)|^2 dz_1 \cdots dz_N. \quad (28)$$

当 $\lambda = 0$, $g(z_{12} | 0)$ 即为 Hartree-Fock 关联函数;而 $\lambda = 1$ 时,就是所求的有相互作用的关联函数. 将(28)式等号两边对 λ 求导,并利用卷积近似^[4,5,8]类似二、三维情况^[9,10],可以得到关联函数的方程为

$$g(z_{12} | \lambda) = g_{\text{HF}}(z_{12}) \exp \left\{ \int_0^\lambda d\lambda' B(z_{12} | \lambda') / g(z_{12} | \lambda') \right\}. \quad (29)$$

上式中

$$B(z_{12} | \lambda) \equiv \gamma(z_{12} | \lambda) g(z_{12} | \lambda) + 2\delta(z_{12} | \lambda) + \varepsilon(z_{12} | \lambda). \quad (30)$$

这里

$$\gamma(z_{12} | \lambda) = u(z_{12}) + 2B_{1a}(z_{12} | \lambda) + B_{2a}(z_{12} | \lambda), \quad (31)$$

$$B_{1a}(z_{12} | \lambda) = n \int dz_3 h(z_{13} | \lambda) u(z_{32}), \quad (32)$$

$$B_{2a}(z_{12} | \lambda) = n \int dz_3 h(z_{13} | \lambda) B_{1a}(z_{32} | \lambda), \quad (33)$$

而

$$\delta(z_{12} | \lambda) = n \int dz_3 h(z_{13} | \lambda) \gamma(z_{13} | \lambda) h(z_{32} | \lambda), \quad (34)$$

$$\varepsilon(z_{12} | \lambda) = n \int dz_3 h(z_{13} | \lambda) \delta(z_{32} | \lambda). \quad (35)$$

上述各一重积分的被积函数中 $h(z_{12} | \lambda)$ 由关联函数定义,

$$h(z_{12} | \lambda) \equiv g(z_{12} | \lambda) - 1. \quad (36)$$

它满足归一条件

$$-n \int dz_2 h(z_{12} | \lambda) = 1. \quad (37)$$

对于一维体系,

$$n = \frac{2k_F}{\pi} \equiv \frac{1}{r_s a_B}. \quad (38)$$

以 k_F^{-1} 作单位对(29)式中各积分式无量纲化,那么就可以进行数值求解.

五、变分能量表达式

根据(7)式,定义

$$H(\lambda) \equiv H_0 + \lambda^2 H_{\text{int}} = H_0 + H_{\text{int}}(\lambda), \quad (39)$$

式中

$$H_0 = \sum_i \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}, \quad (40)$$

$$\begin{aligned}
 H_{\text{int}}(\lambda) &= \lambda^2 H_{\text{int}} \\
 &= \lambda^2 \frac{1}{2L} \sum_{q \neq 0} V_\beta(q) (\rho_q^\dagger \rho_q - N),
 \end{aligned} \quad (41)$$

那么

$$H(\lambda)\Psi(z_1, z_2, \dots, z_N|\lambda) = E(\lambda)\Psi(z_1, z_2, \dots, z_N|\lambda), \quad (42)$$

$$\begin{aligned}
 H(0)\Psi(z_1, z_2, \dots, z_N|0) &= H_0\Psi(z_1, z_2, \dots, z_N|0) \\
 &= E_0\Psi(z_1, z_2, \dots, z_N|0).
 \end{aligned} \quad (43)$$

按定义

$$E(\lambda) = \frac{\langle \Psi(z_1, z_2, \dots, z_N|\lambda) | H(\lambda) | \Psi(z_1, z_2, \dots, z_N|\lambda) \rangle}{\langle \Psi(z_1, z_2, \dots, z_N|\lambda) | \Psi(z_1, z_2, \dots, z_N|\lambda) \rangle}. \quad (44)$$

通过对(44)式中的 λ 求导后, 又对 λ 再积分得

$$\begin{aligned}
 E(1) &= E(0) + \int_0^1 d\lambda \left(\frac{2}{\lambda} \right) \frac{\langle \Psi(\lambda) | H_{\text{int}}(\lambda) | \Psi(\lambda) \rangle}{\langle \Psi(\lambda) | \Psi(\lambda) \rangle} \\
 &= E(0) + E_{\text{xc}},
 \end{aligned} \quad (45)$$

式中

$$\begin{aligned}
 E(0) &= 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right) \int_{|k| \leq k_F} dk \theta(k_F - k) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\
 &= \frac{0.8225N}{r_s^2} (\text{Ryd}),
 \end{aligned} \quad (46)$$

$$\begin{aligned}
 E_{\text{xc}} &= \int_0^1 d\lambda \left(\frac{2}{\lambda} \right) \frac{\langle \Psi(\lambda) | H_{\text{int}}(\lambda) | \Psi(\lambda) \rangle}{\langle \Psi(\lambda) | \Psi(\lambda) \rangle} \\
 &= \int_0^1 d\lambda \frac{\lambda N}{L} \sum_{q \neq 0} V_\beta(q) [S(q|\lambda) - 1] \\
 &= Nn \int_0^1 d\lambda \int dz \lambda V_\beta(z) [g(z|\lambda) - 1].
 \end{aligned} \quad (47)$$

在 Hartree-Fock 近似下, 可得到

$$E_{\text{HF}} = E(0) + E_i \quad (48)$$

式中

$$\begin{aligned}
 E_i &= \frac{Nn}{2} \int dz V_\beta(z) [g_{\text{HF}}(z) - 1] \\
 &= -\frac{N}{r_s} \left[\beta \arctan \frac{2}{\beta} - \frac{1}{2} \ln \left[\frac{4}{4 + \beta^2} \right] + \frac{\beta^2}{8} \ln \left(\frac{\beta^2}{4 + \beta^2} \right) \right] (\text{Ryd}),
 \end{aligned} \quad (49)$$

式中 $\beta = \beta/k_F$, 并且已用到 $g_{\text{HF}}(z)$ 的表达式^[3], 根据关联能的定义

$$E_{\text{corr}} = E(1) - E_{\text{HF}}. \quad (50)$$

利用(45)和(48)式可得明显的表达式

$$E_{\text{corr}} = Nn \int_0^1 d\lambda \int dz \lambda V_\beta(z) [g(z|\lambda) - g_{\text{HF}}(z|0)]. \quad (51)$$

六、数值结果

在 IBM3031 机上,取误差为 10^{-6} ,当讨论某个确定的 $\tilde{\beta}$ 值时,选取适当的变分参数

q_c . 求解(23)式,然后利用求得的关联因子,自洽迭代求解(29)式,再利用求得的关联函数. 计算关联能(51)式,这一完整的过程耗费 CPU 仅在 0.25h 以内.

改变 q_c 值,可以定出能量极小值,从而最终给出 $q_c(r_s)$, $g(z|r_s)$, 关联能量和多体波函数.

从以上图 1—图 4 中,可以得到如下结论:

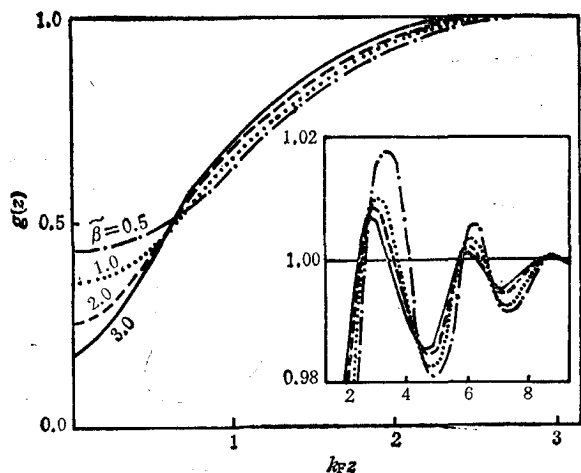


图 1 高密度电子气($r_s = 0.5$)关联函数 $g(z)$ 随 $\tilde{\beta}$ 的变化

随 $|z|$ 增大很快趋于 1,与前人在低密度电子气($r_s = 10.0$)中得到的结论定性一致^[3];

2. 随着参数 $\tilde{\beta}$ 变小,高密度的电子气($r_s = 0.5$)关联函数的量子振荡行为变得十分显著,这实际上反映了三维长程库仑作用的行为,与前人在低密度电子气($r_s = 10.0$)中得到的结论定性一致^[3];

3. 随着参数 $\tilde{\beta}$ 变大,电子气关联函数在原点处变小的趋势不一样,在同样的 $\tilde{\beta}$ 值下,低密度($r_s = 10.0$)的电子气比高密度($r_s = 0.5$)的电子气快,例如,当 $\tilde{\beta} = 2.0$ 时,关联函数 $g(0)$ 的值随不同的密度($r_s = 0.5$; 1.0; 2.3; 4.0 和 10.0)分别对应于 0.25; 0.17; 0.07; 0.0 和 0.0,如图 4 所示;

4. 当参数 $\tilde{\beta} = 1.0$ 时,随 r_s 变大,关联函数在原点处趋于零(恒正的小量),但其量子振荡行为增强:这与通常的三维电子气的结论一致^[11].

其次,还与其它理论(STLS)进行了比较,如图 5 所示,图中虚线为 Friesen 等人^[2]采用 STLS 理论得到的结果;点划线和实线分别对应本文的工作($r_s = 4.0$ 和 7.85),从图 5 中,清楚地看到:两者符合很好.而且还精确地描述了 $g(z)$ 的振荡行为,这是相关基函数实空间理论的优点.

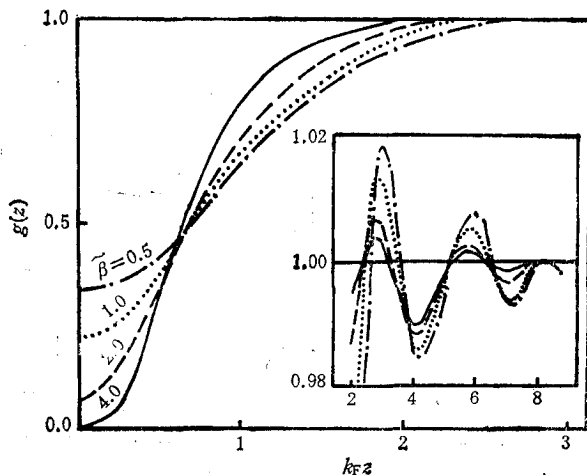


图 2 聚乙烯材料中的电子气($r_s = 2.3$)关联函数 $g(z)$ 随 $\tilde{\beta}$ 的变化

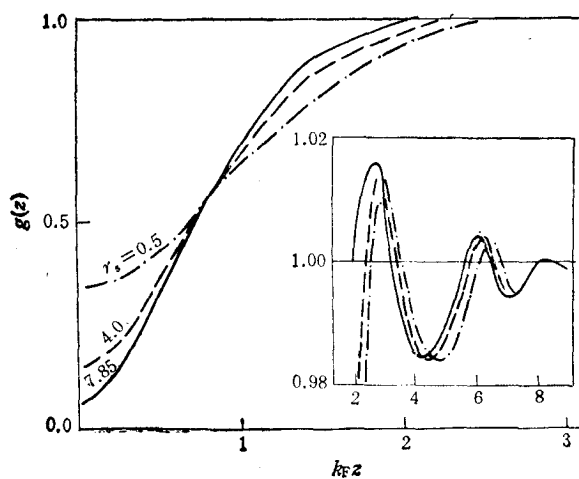


图3 当屏蔽参数 $\tilde{\beta} = 1.0$ 时,各种不同密度 ($r_s = 0.5$; 4.0 和 7.85) 的电子气关联函数 $g(z)$

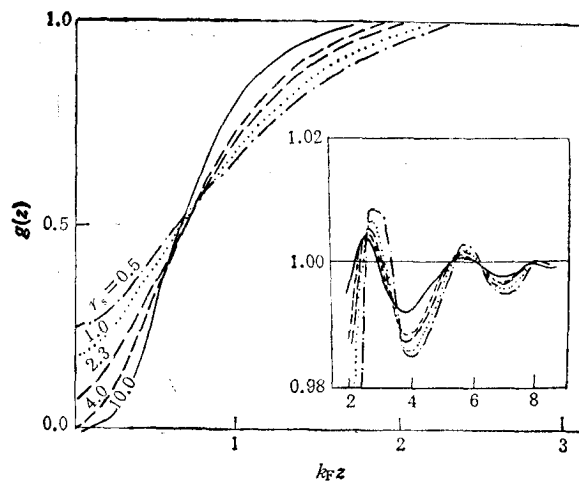
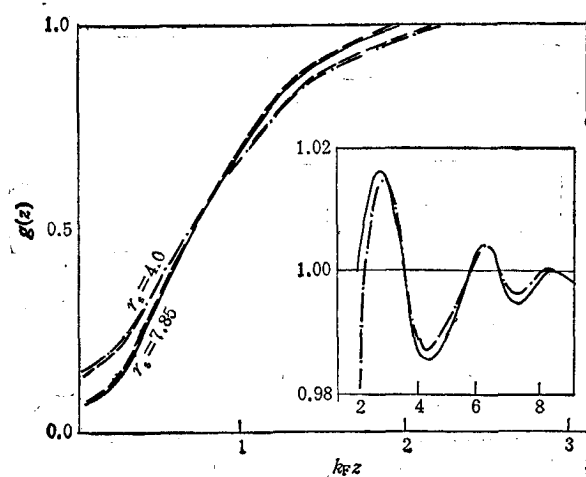


图4 当屏蔽参数 $\tilde{\beta} = 2.0$ 时,各种不同密度 ($r_s = 0.5$; 1.0; 2.3; 4.0 和 10.0) 的电子气关联函数 $g(z)$

最后,还计算了以上种种情形下的交换能和关联能,如表 1—4 所示.

表1 当 $\tilde{\beta} = 2.0$ 时,各种密度下的电子气交换能和关联能

r_s	$\tilde{\beta}$	$E_{\text{ex}}/N(\text{Ryd})$	$E_{\text{corr}}/N(\text{Ryd})$	$-n \int dz h(z)$
0.5	2.0	-3.142	-0.372	0.994
1.0	2.0	-1.571	-0.212	0.999
2.3	2.0	-0.683	-0.106	0.991
4.0	2.0	-0.393	-0.067	0.989
10.0	2.0	-0.157	-0.030	0.961

图5 $\tilde{\beta} = 1.0$ 的电子关联函数 $g(z)$ 虚线取自文献[2]表2 当 $\tilde{\beta} = 1.0$ 时,各种密度下的电子气交换能和关联能

r_s	$\tilde{\beta}$	$E_{\text{ex}}/N(\text{Ryd})$	$E_{\text{corr}}/N(\text{Ryd})$	$-n \int dz h(z)$
0.5	1.0	-2.035	-0.998	0.988
2.3	1.0	-0.442	-0.223	0.987
4.0	1.0	-0.254	-0.130	0.996
7.85	1.0	-0.130	-0.069	0.987

表3 当 $r_s = 0.5$ 时,在各种不同参数 $\tilde{\beta}$ 下的电子气交换能和关联能

$\tilde{\beta}$	r_s	$E_{\text{ex}}/N(\text{Ryd})$	$E_{\text{corr}}/N(\text{Ryd})$	$-n \int dz h(z)$
0.5	0.5	-1.209	-1.392	0.989
1.0	0.5	-2.035	-0.998	0.988
2.0	0.5	-3.142	-0.372	0.994
3.0	0.5	-3.879	-0.134	0.987

表4 聚乙炔中电子气在各种不同参数 $\tilde{\beta}$ 下的交换能和关联能

$\tilde{\beta}$	r_s	$E_{\text{ex}}/N(\text{Ryd})$	$E_{\text{corr}}/N(\text{Ryd})$	$-n \int dz h(z)$
0.5	2.3	-0.263	-0.308	0.987
1.0	2.3	-0.442	-0.223	0.987
2.0	2.3	-0.683	-0.106	0.991
4.0	2.3	-0.962	-0.069	0.985

从表 1—4 中,可以得到如下结论:

1. 当参数 β 固定为某个值时,随着 r_s 的变大,电子的交换能和关联能的绝对值是同时变小的,这与准二维电子气情形一致^[12];
2. 对于某种密度的电子气,随着参数 β 的变大,电子气的交换能的绝对值是变小的,而关联能的绝对值却变大;
3. 很好地满足了归一条件,其原因在于卷积近似下不破坏关联函数的归一条件.

附 录 一

准一维体系的电子有效库仑势的推导

准一维体系实际上可看成是一种束缚的三维体系: 电子沿 z 轴可自由运动,沿径向 ξ 方向上受到势垒 $u(\xi)$ 所约束. 为了简单起见,假设势垒 $u(\xi)$ 的形式为

$$u(\xi) = \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2. \quad (\text{A.1})$$

(A.1)式所对应的物理图象为: 在径向是各向同性材料. 根据有关量子力学知识可知,电子在径向 ξ 方向上的薛定谔方程为

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\xi}^2 + u(\xi) \right\} |\Phi_n(\xi)\rangle = \varepsilon_n |\Phi_n(\xi)\rangle. \quad (\text{A.2})$$

它实际上是一个二维的谐振子方程, (A.2) 式中的本征值为

$$\varepsilon_n = (n+1)\hbar\omega. \quad (\text{A.3})$$

由于讨论的是准一维体系,电子被束缚在 z 轴附近,其尺度为玻尔半径 a_B 的数量级. 此时,径向运动的激发态能量 $\varepsilon_n (n=1,2,\dots)$ 很高,电子很难跃迁上去,略去径向 ξ 方向的带间跃迁,仅考虑电子处于径向方向上的第一子带(即基态),由 (A.2) 式可知,其基态波函数为

$$|\Phi_0(\xi)\rangle = (2\pi b^2)^{-1/2} \exp[-\xi^2/4b^2], \quad (\text{A.4})$$

式中

$$b^2 = \hbar/(2m\omega). \quad (\text{A.5})$$

利用 (A.4) 式,不难导出准一维体系的电子有效库仑势为

$$V(z) = \frac{e^2}{(2\pi b^2)^2} \iint d\xi_1 d\xi_2 \frac{\exp[-(\xi_1^2 + \xi_2^2)/(2b^2)]}{[z^2 + (\xi_1 - \xi_2)^2]^{1/2}} \quad (\text{A.6})$$

$$= \frac{e^2}{2b} \int_0^\infty dx \frac{\exp(-x)}{[x + (z/2b)^2]^{1/2}} \quad (\text{A.7})$$

$$= \frac{e^2}{|z|} \int_0^\infty dx \frac{\exp(-x)}{[1 + 4b^2 x/z^2]^{1/2}}. \quad (\text{A.8})$$

根据 (A.7) 式,可确定 $z \rightarrow 0$ 时, $V(z)$ 的渐近行为

$$\lim_{z \rightarrow 0} V(z) = \frac{e^2}{2b} \sqrt{\pi}. \quad (\text{A.9})$$

根据 (A.8) 式,可确定 $z \rightarrow \infty$ 时, $V(z)$ 的长程渐近行为

$$\lim_{z \rightarrow \infty} V(z) = e^2/|z|. \quad (\text{A.10})$$

很明显,由 (A.7) 或 (A.8) 式来描述准一维体系的电子有效库仑势比较符合实际情况,考虑到电子束缚在链(z 轴)附近,其尺度为玻尔半径. 那么扣除电子径向库仑短程屏蔽(汤川型)的影响后,并结合 (A.9) 和 (A.10) 式,可将 (A.7) 或 (A.8) 式近似为

$$V(|z|) \approx \frac{e^2}{|z|} (1 - \exp(-\beta|z|)), \quad (\text{A.11})$$

式中 β 是径向屏蔽参数. 根据 (A.7) 或 (A.8) 式与 (A.11) 式的数值结果相比,用 (A.11) 式替代 (A.7) 或 (A.8) 式,其精度可达 10^{-3} .

根据 (A.9) 和 (A.10) 式所给定的 $V(z)$ 渐近行为,不难定出 (A.11) 式中的 β 参数为

$$\beta = \sqrt{\pi}/2b = (\pi m \omega / 2 \hbar)^{1/2}. \quad (\text{A.12})$$

从 (A.12) 式可以看出, 屏蔽因子 β 与径向的半宽参数 b 存在反比关系. 不难验证其量纲为 m^{-1} 与波矢 q 单位相同, 由此也可称之为屏蔽波矢.

- [1] V. B. campos, O. Hipolito and R. Lobo, *Phys. Stat. Solidi (b)*, 81(1977), 657.
- [2] W. I. Friesen, *et al.*, *J. Phys. C*, 13(1980), 6627.
- [3] 冯伟国、孙鑫, 物理学报, 36(1987), 1133.
- [4] F. Feenberg, *Theory of Quantum Fluids*, Academic, New York, (1969); C. W. Woo, *Physics of liquid and Solid Helium*, ch5, John wiley-interescience, (1976).
- [5] S. Charkravarty and C. W. Woo, *Phys. Rev.*, B13(1976), 4815.
- [6] D. Bohm, K. Huang and D. Pines, *Phys. Rev.*, 107(1957), 71.
- [7] D. Pines, *Elementary Excitations in Solids*, W. A. Benjamin Inc, New York, (1963).
- [8] F. Y. Wu and M. K. Chien, *J. Math. Phys.*, 11(1970), 1912.
- [9] 虞恩溪、孙鑫、钱永嘉, 低温物理学报, 8(1986), 89.
- [10] 冯伟国、孙鑫, 物理学报, 33(1984), 1719.
- [11] 冯伟国、孙鑫, 物理学报, 35(1986), 598.
- [12] 汪鸿伟、毛辉明、邵金山、冯伟国、孙鑫, 物理学报, 38(1989), 387.

VARIATIONAL CALCULATION FOR ELECTRON CORRELATIONS OF QUASI ONE-DIMENSIONAL SYSTEM

MAO HUI-MING SHAO JIN-SHAN WANG HONG-WEI

Department of Physics, Jiangxi Normal University, Nanchang, 330027

FENG WEI-GUO SUN XIN

Department of Physics, Fudan University, Shanghai, 200433

(Received 16 May 1989)

ABSTRACT

For the quasi one-dimensional electron systems with coulomb interaction, a new model is presented. The form of effective Coulomb potential is derived. Based on the correlated wave function theory, the many-body wave function is obtained on the basis of the collective oscillation behavior of the electron gas. The pair correlation functions and correlation energies of the different electron densities are obtained. The pair correlation functions obtained in this paper are positive definite and satisfy the normalization condition.

PACC: 7145G; 7145N