

电子关联与二维晶格的不稳定性

刘 晶 南

复旦大学物理系, 上海, 200433; 中国科学技术大学结构分析开放研究实验室, 合肥, 230026

孙 鑫

复旦大学物理系, 上海, 200433; 中国科学院上海技术物理研究所红外物理国家实验室, 上海, 200083

1991 年 1 月 30 日收到

本文从电子相互作用的屏蔽库仑势出发, 构造了 Wannier 函数来计算二维不稳定晶格的能带及电子波函数, 用相关基函数理论计算了二维非均匀体系的电子关联函数, 由此研究了电子关联对二维晶格不稳定性的影响。结果表明, 二维体系与一维体系不同, 电子相互作用使晶格二聚化减弱。

PACC: 6310; 7145G

一、引 言

低维体系的晶格不稳定性一直是人们感兴趣的问题。最早 Peierls^[1] 指出, 一维体系的电-声子耦合会引起半满的晶格失稳, 产生二聚化。在此基础上考虑电子关联对二聚化的影响, 这曾是前几年国际上一直激烈争论的问题。现在经作者之一等人的工作, 这个问题已经清楚了。结论是在一维体系中, 在弱屏蔽时, 电子相互作用增强二聚化; 在强屏蔽时, 电子相互作用减弱二聚化^[2]。

在二维的情况, 电-声子的耦合也会引起半填满的晶格失稳^[3]。平面正方晶格半满带的费密面具有 Nesting 结构。晶格二聚化畸变后, 原胞面积扩大一倍, 而布里渊区缩小为原来的一半, 与费密面重合, 在费密面上打开能隙, 半填满的能带分成填满的价带和空的导带, 体系总的能量降低。考虑电子关联后, 二维晶格的畸变与电子相互作用的关系是一个复杂的多体问题。特别是高温氧化物超导体发现以后, 二维体系的电子关联问题在国际上引起了人们极大的兴趣。许多实验观测和理论计算表明, 高 T_c 超导体 $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ 表现出明显的二维特性^[4-6], Cu-O 平面是具有二维特征的正方晶格, 能带 $\text{Cu}(3d)-\text{O}(2p)$ 是半满能带, 晶格的畸变已被实验测到^[7]。实验上还发现 La_2CuO_4 中存在反铁磁序^[8]。在研究二维体系的电子关联问题中, 二维 Hubbard 模型是应用最广的模型。Hirsch 等人^[9] 从二维 Hubbard 模型出发, 选择 8 个格点的小系统, 用数值计算得到的结论是: 同一格点上的电子相互排斥作用 U , 在 U 是 $2t_0$ (t_0 是最近邻格点之间的电子跳跃积分) 左右时, 它对晶格的二聚化几乎没有影响, 且略有增加。 U 很大时 ($U > 8t_0$), 结论同一维情况类似, U 总是使二聚化减小。Mazumdar^[10,11] 对此提出了不同的看法, 他从价键方法出发讨论, 认为 U 在比较小时就应该减弱二聚化。但他只作了定性的论证, 未能给出具体

的计算结果。一些文献^[9,12,13]讨论此问题是从二维 Hubbard 模型出发,数值计算的方法是选择一个很有限的小系统(8—10个格点),正如所指出的^[9,11,12]这样的计算中会带来不可避免的有限尺度效应(finite size effect),产生很大的误差,甚至影响定性结论^[9,12]。

因此,真实的电子相互作用是增强还是减弱二维晶格的不稳定性?这个问题还不清楚。本文的目的就是要澄清这个问题。针对现有理论的缺陷,我们将从三方面来改进:1. 研究无限大的二维体系,避免有限尺度效应。2. 直接从电子相互作用屏蔽库仑势出发,避免过分简化的模型。3. 用相关基函数方法充分地包括电子关联。

二、理论方法

本文研究平面正方晶格,其哈密顿量为

$$H = H_0 + H' + \frac{1}{2} K \sum_{i,j} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j), \quad (1)$$

其中最后一项是晶格弹性能。本文主要计算一个固定的二聚化前后体系基态能量之差,不需要对二聚化 \mathbf{u}_i 求变分,因此以下的讨论不考虑弹性能一项:

设 \mathbf{X}_i 格点的原子作用于 \mathbf{x}_i 处电子的势能为 $V(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}_i)$, 则

$$H_0 = \sum_i \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) + \sum_i V(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}_i) \right], \quad (2)$$

其中 H' 是电子之间的相互作用,它是屏蔽库仑势。

$$\begin{aligned} H' &= \sum_{i,j} v(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \\ &= \sum_{i,j} \frac{U}{[1 + (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^2/a^2]^{1/2}} \exp \left[-\beta \frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}{a} \right], \end{aligned} \quad (3)$$

其中 U 表示电子相互作用强度, β 是屏蔽因子,在以下的计算中,我们取 $\beta = 1$, a 是平面晶格常数。

根据 Jastrow-Feenberg 变分理论^[14],具有相互排斥作用系统的基态波函数可一般地表示为

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = D[\varphi] \exp[u(1, 2, \dots, N)], \quad (4)$$

其中 $D[\varphi]$ 是由单电子波函数 φ_μ 组成的 Slater 行列式。 $u(1, 2, \dots, N)$ 反映了电子关联,它由变分原理确定。它可展开为

$$u(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{2!} \sum_{i,j} u_{ij} + (1/3!) \sum_{i,j,k} u_{ijk} + \dots,$$

其中 u_{ij}, u_{ijk}, \dots 是二体、三体、...的关联因子。由于半填满的情况下每个原胞平均只有一个电子,且电子之间具有排斥的相互作用,因此三个或更多的电子靠近的几率很小,只有两体的关联因子是起主要作用的,三体以上的关联因子可以略去。(4) 式可写为

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = D[\varphi] \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j} u_{ij} \right]. \quad (5)$$

设 H_0 的本征波函数是 φ_μ , 由此可以将体系的总能量表示为

$$\begin{aligned}
E &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle \\
&= \sum_{\text{occ}} \epsilon_{\mu} + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 [p(\mathbf{x}_1) - n_0] v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) [p(\mathbf{x}_2) - n_0] \\
&\quad + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 p(\mathbf{x}_1) p(\mathbf{x}_2) v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) [g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) - 1] \\
&\quad + \frac{\hbar^2}{8m} \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) [\nabla_1 u(\mathbf{x}_{12})]^2 \\
&\quad + \frac{\hbar^2}{8m} \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 \int d\mathbf{x}_3 p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) [\nabla_1 u(\mathbf{x}_{12})] [\nabla_1 u(\mathbf{x}_{13})], \tag{6}
\end{aligned}$$

其中 $g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) / p(\mathbf{x}_1) \cdot p(\mathbf{x}_2)$ 是二体电子关联函数。 $p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$ 是 n 体的分布函数。下面我们在相关基函数的理论方法下求解这个变分问题^[15]。

首先在 (5) 式中 u_{ij} 前引入参数 λ , 则分布函数 $p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n | \lambda)$ 与 λ 有关。对 λ 微分, 然后积分, 就得到如下一组积分方程:

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{x}_1 | \lambda) &= p(\mathbf{x}_1 | 0) \exp \left\{ \int_0^{\lambda} d\lambda' \int d\mathbf{x}_2 u(\mathbf{x}_{12}) p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \lambda') / p(\mathbf{x}_1 | \lambda') \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \int_0^{\lambda} d\lambda' \int d\mathbf{x}_2 \int d\mathbf{x}_3 u(\mathbf{x}_{23}) [p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3 | \lambda') / p(\mathbf{x}_1 | \lambda') - p(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3 | \lambda')] \right\}, \tag{7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \lambda) &= p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | 0) \exp \left\{ \lambda' u(\mathbf{x}_{12}) + \int_0^{\lambda} d\lambda' \int d\mathbf{x}_3 [u(\mathbf{x}_{12}) + u(\mathbf{x}_{23})] \right. \\
&\quad \cdot p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3 | \lambda') / p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \lambda') \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \int_0^{\lambda} d\lambda' \int d\mathbf{x}_3 \int d\mathbf{x}_4 u(\mathbf{x}_{34}) [p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4 | \lambda') \right. \\
&\quad \left. - p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \lambda') p(\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4 | \lambda')] / p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \lambda') \right\}, \tag{8}
\end{aligned}$$

其中 $p(\mathbf{x}_1 | 0), p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | 0)$ 是无相互作用的密度分布和二体分布函数, 可由 $D[\varphi]$ 直接求出。

上面已指出, 三体和多体关联比二体小得多, 因而三体、四体的分布函数 $p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3), p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4)$ 可以用卷积近似, 展开为二体关联函数 $g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 的泛函^[15, 16]。经过这种切断, (7), (8) 式变为封闭的方程组, 可以数值解出。

现在再来考察 $u(\mathbf{x}_{ij})$ 的形式。(5) 式表明 $\exp\left[\frac{1}{2} u(\mathbf{x}_{ij})\right]$ 是电子 i 与 j 的两体波函数, 具有排斥势 $v(\mathbf{x}_{ij})$, 由此从 WKB 方法可知

$$u(\mathbf{x}_{ij}) = -\eta [v(\mathbf{x}_{ij})]^{1/2}, \tag{9}$$

其中 η 是变分参数, 由总能量极小确定。

我们选取 (2) 式中的 $V(\mathbf{x} - \mathbf{X}_l)$ 为平面圆筒势阱的模型, 采用一套构造 Wannier 函数的方法来计算体系的能带及单电子波函数。具体的计算方法及其与平面波法的比较, 我们将另文详细讨论, 这里只利用其结果。

我们所研究的二聚化形式如图 1 所示。电-声子相互作用引起晶格失稳。原来的平面正方晶格分成 A 和 B 两套次晶格, B 相对于 A 沿负 y 轴方向有一个二聚化位移 u_0 。

以构造的 Wannier 函数为表象, H_0 可表示成二次量子化形式. 经过一次傅氏变换及一次么正变换, 可以得到对角化的能谱为

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\varepsilon_0^2(\mathbf{k}) + \varepsilon_1^2(\mathbf{k})}, \quad (10)$$

其中±号分别对应导带和价带.

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = 2t_0 \cdot \cos k_x a + (t_1 + t_1') \cos k_y a,$$

$$\varepsilon_1(\mathbf{k}) = (t_1 - t_1') \sin k_y a,$$

其中 t 是格点之间的电子跳跃积分,

$$t_0 = \int W_{Ax, Ay}(\mathbf{r}) h_e W_{Ax+1, Ay}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r},$$

$$t_1 = \int W_{Ax, Ay}(\mathbf{r}) h_e W_{Ax, Ay+1}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r},$$

$$t_1' = \int W_{Ax, Ay}(\mathbf{r}) h_e W_{Ax, Ay-1}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}.$$

上面各式中的 $W_l(\mathbf{r})$ 就是我们构造的 l 格点的 Wannier 函数,

$$h_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_l V(\mathbf{r} - \mathbf{X}_l)$$

是单电子的哈密顿量.

从傅氏变换及么正变换得到体系的布洛赫波函数为

$$\begin{aligned} \phi_k^v(\mathbf{r}) &= \beta_k \phi_k^i(\mathbf{r}) + i\alpha_k \phi_k^v(\mathbf{r}), \\ \phi_k^c(\mathbf{r}) &= \alpha_k \phi_k^i(\mathbf{r}) - i\beta_k \phi_k^v(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (11)$$

其中

$$\begin{aligned} \phi_k^v(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_A} W_A(\mathbf{r}) + \sum_B e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_B} W_B(\mathbf{r}) \right] \\ \phi_k^c(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_A} W_A(\mathbf{r}) - \sum_B e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_B} W_B(\mathbf{r}) \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

(11) 式中的变换系数

$$\alpha_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon_0(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right]}, \quad \beta_k = -\frac{\varepsilon_1(\mathbf{k})}{|\varepsilon_1(\mathbf{k})|} \sqrt{\frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varepsilon_0(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right]}.$$

考虑半填满能带的情况, 即电子只占据价带. 无相互作用时, 即 Hartree-Fock 的密度分布和二体关联函数为

$$\rho_{\text{HF}}(\mathbf{r}) = 2 \sum_{\mathbf{k}(\text{occ})} |\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = 2 \sum_{\mathbf{k} \in \text{B.Z.}} |\phi_{\mathbf{k}}^v(\mathbf{r})|^2, \quad (13)$$

$$g_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{|\rho_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}{\rho_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1)\rho_{\text{HF}}(\mathbf{r}_2)}, \quad (14)$$

其中

$$\rho_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 2 \sum_{\mathbf{k} \in \text{B.Z.}} \phi_{\mathbf{k}}^{v*}(\mathbf{r}_1) \phi_{\mathbf{k}}^v(\mathbf{r}_2). \quad (15)$$

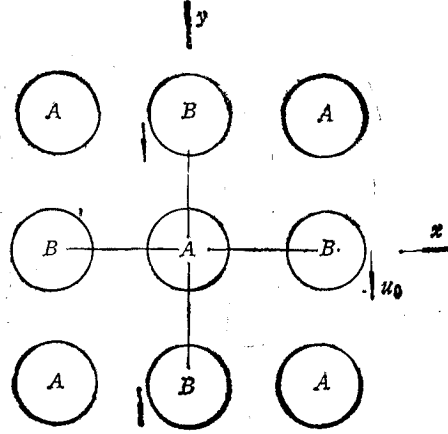


图 1

显然 $\rho_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = \rho_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1)$, 因此对 Hartree-Fock 二体关联函数有

$$g_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = 0.5, \quad (16)$$

且由 (16) 式可知

$$g_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) < 1. \quad (17)$$

当 $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ 很大时, $\rho_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow 0$, $g_{\text{HF}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow 1$.

将 (11), (12) 式代入 (13), (14), (15) 式, 可得 Hartree-Fock 的密度分布和二体关联函数.

至此, 已建立了一套完整的方法, 可将 Hartree-Fock 的结果作为初始条件代入 (7), (8) 式的积分方程中求得考虑电子关联的影响后的密度分布和关联函数, 再代入 (6) 式中可求得体系的总能量. 对变分参量 η 求总能量的极小, 就可得到体系的基态能量.

三、计算结果与讨论

引言中提及, 目前争议集中在电子相互作用 U 是 $2t_0$ 附近(中等强度)的晶格稳定性, 因而我们研究 $U = t_0, 2t_0$ 的情况, 计算二聚化位移 $u_0 = 0$ 和 $u_0 = 0.048 \text{ \AA}$ ($a = 2.56 \text{ \AA}$, 圆筒势阱半径 $b = 0.8 \text{ \AA}$) 时, 体系的基态能量之差

$$\Delta\varepsilon = E(u_0 = 0) - E(u_0 = 0.048 \text{ \AA}).$$

由此可知电子相互作用是增强还是减弱二聚化. 在具体计算过程中, 为了使计算量很大的二维体系的计算简化, 做如下近似. 关联函数必须满足归一条件:

$$\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}) = -1,$$

其中 $h(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}) = g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}) - 1$, 是短程的切断因子. 因此在计算中可以用以下近似公式化简一些 h 的高次项的计算:

$$\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}) \approx - \int d\mathbf{r} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}).$$

如图 2 和图 3 所示, 我们得到了考虑电子关联之后的二体关联函数及二聚化前后的

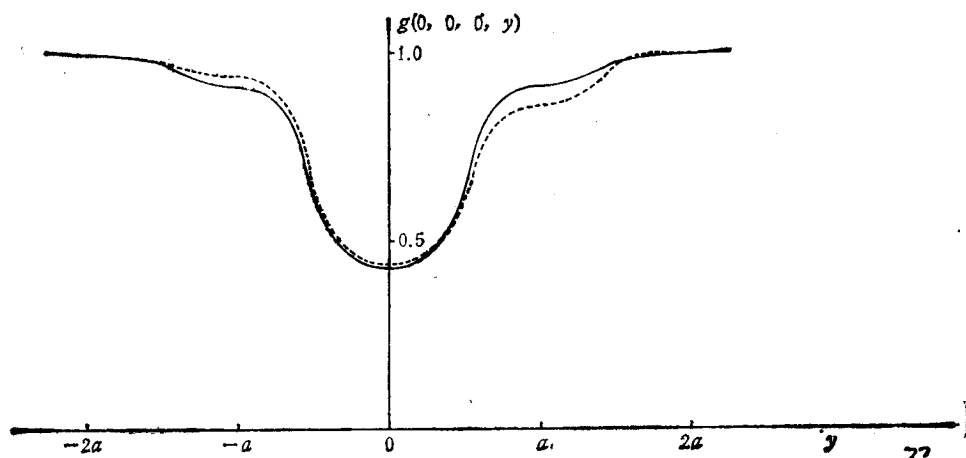


图 2 实线表示二聚化前的关联函数; 虚线表示二聚化后的关联函数

能量差。在图 2 中,以 $U = 2t_0, r_1 = 0, r_2 - r_1 = y$ 为例示出了二聚化前后的 $g(r_1, r_2 - r_1)$ 。从 g 的行为上可以看到,当二电子非常接近时, g 可小于 Hartree-Fock 的值 0.5, g 是振荡的,在某些点 g 可略大于 1, 当二电子相距很远时, $g \rightarrow 1$ 。没有二聚化时, g 相对于 $y = 0$ 点是上下对称的。有了二聚化形变后, 电子的密度分布随晶格的二聚化形变而改变, 因此可以看到 g 的对称性被破坏, 下边相对疏远的电子, 其关联函数比上边相对密集的电子的 g 更快地驱向于 1 (参阅图 1 的二聚化形式)。

图 3 表示二聚化前后体系基态能量差 $\Delta\varepsilon$ 与电子相互作用强度 U 的关系。可以看出, 当 $U = 0$ 时, $\Delta\varepsilon = \Delta\varepsilon_0$, 是电-声子的耦合在费密面上打开能隙, 使体系能量在有二聚化时下降了。当 $U = t_0$ 与 $2t_0$ 时, 可以看到 $\Delta\varepsilon$ 变小, 呈下降的趋势。这意味着电子相互作用是抑制二聚化形变的。

在一维情况, 当屏蔽不是太强(与现在二维一样)时, 电子相互作用在 $U = t_0, 2t_0$ 附近是增强二聚化的, 只有当 U 很大 ($> 8t_0$) 后, 才使二聚化减弱。因此在 $U = t_0, 2t_0$ 附近, 我们的结果表明二维体系电子关联对二聚化的影响与一维的情况是不一样的。

造成这一差异的原因是在一维体系中, 相邻格点上电子自旋相反排列, 但晶格无畸变所形成的自旋密度波 (SDW) 没有长程序, 在 $U = t_0, 2t_0$ 附近, SDW 的作用不是很强, 电子的自旋排列基本上是无规律的, 晶格的二聚化所形成的价键交错波 (BOW) 的不稳定性起主要作用, 因此电子相互作用是增强二聚化的。在 U 很大时 ($U > 8t_0$), SDW 不稳定性所起的作用超过了 BOW, 因此 U 开始减弱二聚化, 体系趋于 SDW 所形成的反铁磁状态。

在二维情况, 当 U 很大时, 结论与一维的情况类似, 体系也是趋向于反铁磁状态, 它使体系更加稳定。

在 $U = t_0, 2t_0$ 附近, 二维与一维的情况不同, 这是由于在半填满的二维体系中, 可以存在长程的反铁磁序^[7], 电子趋向于按照相邻格点自旋相反、晶格无畸变的 SDW 形式排列, SDW 的不稳定性所起的作用抑制了二维晶格畸变所形成的 BOW, 因此电子相互作用是减弱二聚化的。

至此, 我们用建立的模型及构造 Wannier 函数的方法, 从完全的电子相互作用屏蔽库仑势出发, 用相关基函数理论计算得到了电子关联函数, 在此基础上计算体系基态能量, 得出了电子关联减弱二维晶格畸变的结论。

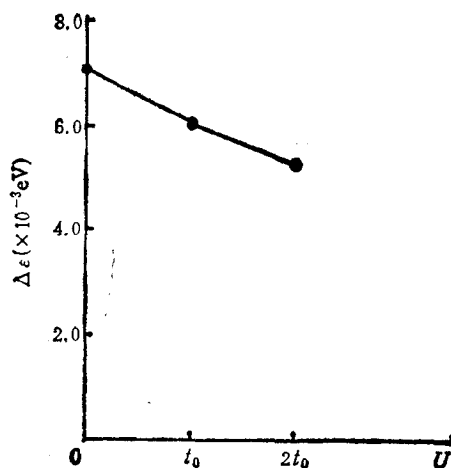


图 3 二聚化前后体系的基态能量差

[1] R. E. Peierls, Quantum Theory of Solids, Clarendon, Oxford, (1955), Chap. 5.

[2] Chang-qin Wu, Xin Sun and Keiichiro Nasu, Phys. Rev. Lett., 59(1987), 831.

- [3] 帅志刚、吴长勤、孙鑫, 低温物理学报, **10**(1988), 253.
[4] M. Sato *et al.*, *Solid State Commun.*, **62**(1987), 85.
[5] L. F. Mattheiss, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1028.
[6] Jaejun Yu, A. J. Freeman and J. H. Xu, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1035.
[7] J. D. Jorgensen *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1024.
[8] D. Vaknin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 2802.
[9] Sanyee Tang and J. E. Hirsch, *Phys. Rev.*, **B37**(1987), 9546.
[10] S. Mazumdar, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 7190.
[11] S. Mazumdar, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 12324.
[12] Sanyee Tang and J. E. Hirsch, *Phys. Rev.*, **B33**(1989), 12327.
[13] F. C. Zhang, P. Prelovsek, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 1569.
[14] E. Feenberg, *Theory of Quantum Fluids, Pure and Applied Physics Series Vol. 31, Academic, New York*, (1969).
[15] S. Chakravarty, and C. Woo, *Phys. Rev.*, **B13**(1976), 4815.
X. Sun, M. Farjam and C. Woo, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 5599;
冯伟国, 复旦大学博士论文.
[16] F. Wu and M. Chien, *J. Math. Phys.*, **11**(1970), 1912.
[17] J. E. Hirsch, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 4403.

ELECTRON CORRELATION AND TWO-DIMENSIONAL LATTICE INSTABILITY

LIU JING-NAN

Department of Physics, Fudan University, Shanghai, 200433;

Laboratory of structure analysis research, University of Science and Technology of China, Hefei, 230026

SUN XIN

Department of Physics, Fudan University, Shanghai, 200433;

National Laboratory of Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica, Shanghai, 200083

(Received 30 January 1991)

ABSTRACT

Starting from the screened Coulomb electron interaction, the energy band and electron wave function of two-dimensional unstable lattice system are calculated by using the Wannier function. The effect of electron correlation on two-dimensional lattice instability is studied by means of the electron correlation function. Our results show that the electron interaction reduces the two-dimensional lattice dimerization, which is different from the one-dimensional case.

PACC: 6310; 7145G