

二维晶格中的叠套*

凌 帆

(扬州师范学院物理系,扬州 225002)

孙 鑫

(复旦大学物理系,上海 200433)

(1993 年 5 月 13 日收到)

二维半满晶格的稳定性要考虑次近邻跃迁,此时二聚化 δ 存在一个临界值 δ_0 , 同时叠套 (Nesting) 分为两种情况: 1) 当 $\delta \geq \delta_0$, 部分 Nesting, 费密面的一部分仍是平直的. 2) 当 $\delta < \delta_0$, 近似 Nesting, 费密面是弯的.

PACC: 6320K

1 引 言

多年来对低维凝聚态体系的研究,发现了许多不同于三维体系的奇特物理性,例如在具有一维链状结构的聚乙炔中,经掺杂后能使其电导率猛增十多个数量级由绝缘体转为导体,研究表明其中的载流子是一种新颖的无自旋带电孤子.另外氧化物超导体及石墨夹层材料的焙制,又发现了二维体系中奇特的物理性质,追求其原因,发现一维及二维体系的费密面和布里渊区的结构,低能激发态的态密度、电子能谱及晶格振动谱等与三维体系有着完全不同的特征,为了深入探讨其物理特性,应从研究最基本的物理过程电子和晶格间的相互作用以及对体系的不稳定性的影响着手.

对一维体系已有较为系统的研究结果^[1].近年来研究向二维体系推广,讨论了二维体系中晶格和电子的相互作用及对不稳定性影响^[2-5].但这些讨论中都只考虑了最近邻原子的相互作用,而忽略了次近邻原子的耦合作用.以正方形晶格为例:近邻与次近邻的距离之比仅为 $\sqrt{2}$,忽略了次近邻原子的作用必将会带来较大的误差,本文讨论考虑次近邻原子耦合后对晶格电子能谱,费密面,费密能级及二聚化畸变后的影响,得到了一些与前人不同的结果.

以下讨论正方形原子晶格,设晶格常数 $a = 1$, 每个原子只有一个电子.

2 理论及计算

平面正方形晶格其哈密顿量为^[6]

* 国家自然科学基金和新材料委员会基金资助的课题.

$$H = H_e + H'_e + H_I \quad (1)$$

其中,

$$H_e = - \sum_{n_x, n_y} t [a^+(n_x, n_y) a(n_x + 1, n_y) + a^+(n_x, n_y) a(n_x, n_y + 1)] + \text{h.c.}; \quad (1a)$$

$$H'_e = - \sum_{n_x, n_y} t_1 [a^+(n_x, n_y) a(n_x + 1, n_y + 1) + a^+(n_x, n_y) a(n_x + 1, n_y - 1)] + \text{h.c.}; \quad (1b)$$

$$H_I = \frac{K}{2} \sum_{ij} (u_i - u_j)^2. \quad (1c)$$

H_e 是近邻原子相互作用的电子哈密顿量, t 是紧束缚 Hopping 参数, $a^+(n_x, n_y), a(n_x, n_y)$ 分别是位于 (n_x, n_y) 位置上电子的产生算符及湮没算符. H'_e 是次近邻原子相互作用的电子哈密顿量, t_1 是次近邻的 Hopping 参数. H_I 是静态位移引起的晶格弹性能, K 是弹性系数. 以下先讨论正常晶格时的情况, 然后再讨论晶格发生二聚化畸变后的情况.

2.1 正方形晶格中的电子能谱及费密面

对(1)式中 $a^+(n_x, n_y)$ 及 $a(n_x, n_y)$ 作如下傅里叶变换:

$$a(n_x, n_y) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_x, k_y} \exp[-i(k_x n_x + k_y n_y)] c(k_x, k_y), \quad (2)$$

即可使哈密顿量 $H_e + H'_e$ 对角化,

$$H_e + H'_e = \sum E(k_x, k_y | t_1) c^\dagger(k_x, k_y) c(k_x, k_y). \quad (3a)$$

其中

$$E(k_x, k_y | t_1) = -2[t(\cos k_x + \cos k_y) + 2t_1 \cos k_x \cos k_y]. \quad (3b)$$

这就是考虑了次近邻原子耦合后正方形晶格中的电子能谱, 当 $t_1 = 0$ 时, 得

$$E(k_x, k_y) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) \quad (3c)$$

即一般文献上仅考虑最近邻原子作用时的电子能谱.

在二维动量空间中, 考虑到原子晶格中电子的动量间隔 $\Delta k_x = \frac{2\pi}{L} = \frac{2\pi}{\sqrt{Na}}$, $\Delta k_y =$

$\frac{2\pi}{\sqrt{Na}}$. 晶格中电子的总数 N 可表达成下式:

$$N = \sum_{\text{occ}} \Delta N = \iint \frac{2dk_x dk_y}{4\pi^2/N} = \frac{2N}{4\pi^2} \iint dk_x dk_y. \quad (4)$$

式中 $\sum_{\text{occ}}$ 是对所有电子占有态求和. 设费密面和 k_x 轴的交点坐标为 k_{xF} , 由(4)式得

$$\int_0^{k_{xF}} k_y(k_x) dk_x = \pi^2/2. \quad (5)$$

其中 $k_y(k_x)$ 可由(3b)式解出, 并令 $t = 1$, 则(5)式化为

$$\int_0^{k_{xF}} \arccos\left(\frac{-E/2 - \cos k_x}{1 + 2t_1 \cos k_x}\right) dk_x = \pi^2/2. \quad (6)$$

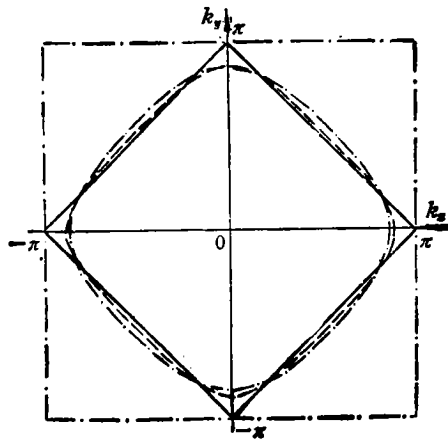


图 1 次近邻原子作用对费密面的影响 $t = 1.00$, — 为 $t_1 = 0.00, E_F = 0.00$; --- 为 $t_1 = 0.10, E_F = 0.26$; - · - 为 $t_1 = 0.20, E_F = 0.47$

采用计算机迭代方法容易求得 k_{xF} 的数值结果,由此可确定费密面的位置以及费密能级的数值。图 1 中画出了费密面随 t_1 的变化情况,当 $t_1 = 0$ 时,即只考虑最近邻的情况,费密面为正方形,费密能级 $E_F = 0$ 。

体系电子的总能量 E , 可由下式求得:

$$E(t_1) = \sum_{occ} E(k_x, k_y | t_1) = \iint_f E(k_x, k_y | t_1) \cdot \frac{2dk_x dk_y}{4\pi^2 / Na^2}$$

将 (3b) 式代入后得

$$E(t_1) = -\frac{4N}{\pi^2} \iint_{\substack{0 \leq k_x \leq k_{xF} \\ 0 \leq k_y \leq k_{xF}}} [t(\cos k_x + \cos k_y) + 2t_1 \cos k_x \cos k_y] dk_x dk_y$$

由此可求得每个电子的平均能量 $\varepsilon(t_1)$

$$\varepsilon(t_1) = E(t_1)/N = -\frac{8}{\pi^2} \left(\int_0^{k_{xF}} F_1 dk_x + \int_0^{k_{xF}} F_2 \cdot dk_x \right), \quad (7a)$$

其中

$$F_1 = \sin \{ \cos^{-1} [(-E_F/2 - \cos k_x) / (1 + 2t_1 \cos k_x)] \}, \quad (7b)$$

$$F_2 = \cos k_x \cdot F_1. \quad (7c)$$

表 1

t_1	E_F	$\varepsilon(t_1)$
0.00	0.00	-1.621
0.01	0.03	-1.621
0.05	0.14	-1.623
0.10	0.26	-1.627
0.15	0.37	-1.633
0.20	0.47	-1.641

表 1 列出了费密能级及电子的平均能量与次近邻原子不同耦合程度 t_1 时的数值计算结果。

2.2 晶格原子二聚化畸变的影响

以下讨论晶格原子沿正方形对角线方向发生二聚化畸变。如图 2 所示，二聚化引起近邻原子相对距离的改变，令 $t(\delta) = 1 \pm \delta$ ，一般 δ 是一小量。考虑到 A 组原子和 B 组原子位移的不同分别作下列变换：

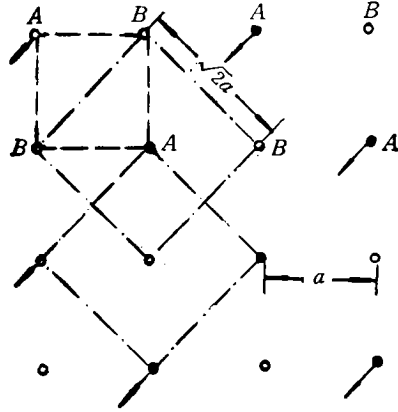


图 2 正方形晶格二聚化畸变与次晶格

$$a(n_{xA}, n_{yA}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_x, k_y} [c^v(k_x, k_y) + c^e(k_x, k_y)] \exp[-i(k_x \cdot n_{xA} + k_y \cdot n_{yA})]; \quad (8a)$$

$$a(n_{xB}, n_{yB}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_x, k_y} [c^v(k_x, k_y) - c^e(k_x, k_y)] \exp[-i(k_x \cdot n_{xB} + k_y \cdot n_{yB})]. \quad (8b)$$

$$\begin{aligned} H_0 + H'_1 = & - \sum_{k_x, k_y} \varepsilon_0(k_x, k_y | t_1) c^{+v}(k_x, k_y) c^v(k_x, k_y) \\ & + \sum_{k_x, k_y} \varepsilon_1(k_x, k_y | t_1) c^{+e}(k_x, k_y) c^e(k_x, k_y) \\ & + i \sum_{k_x, k_y} \Delta_0(k_x, k_y | \delta) [c^{+v}(k_x, k_y) c^v(k_x, k_y) \\ & - c^{+e}(k_x, k_y) c^e(k_x, k_y)]. \end{aligned} \quad (9)$$

式中，

$$\varepsilon_0(k_x, k_y | t_1) = 2(\cos k_x + \cos k_y) + 4t_1 \cos k_x \cos k_y$$

$$\varepsilon_1(k_x, k_y | t_1) = 2(\cos k_x + \cos k_y) - 4t_1 \cos k_x \cos k_y$$

$$\Delta_0(k_x, k_y | \delta) = 2\delta(\sin k_x + \sin k_y)$$

再作么正变换后能使电子哈密顿量完全对角化，对角化后的哈密顿量为

$$H_0 + H'_1 = \sum_{k_x, k_y} E_1(k_x, k_y | t_1 \delta) d^{+v}(k_x, k_y) d^v(k_x, k_y)$$

$$+ \sum_{k_x k_y} E_2(k_x, k_y | t_1, \delta) d^{+c}(k_x, k_y) d^c(k_x, k_y), \quad (10a)$$

其中

$$E_1(k_x, k_y | t_1, \delta) = -4t_1 \cos k_x \cos k_y - 2\sqrt{\delta^2 (\sin k_x + \sin k_y)^2 + (\cos k_x + \cos k_y)^2}, \quad (10b)$$

$$E_2(k_x, k_y | t_1, \delta) = -4t_1 \cos k_x \cos k_y + 2\sqrt{\delta^2 (\sin k_x + \sin k_y)^2 + (\cos k_x + \cos k_y)^2}. \quad (10c)$$

这就是考虑了次近邻原子的耦合及晶格二聚化畸变后的电子能谱, 其中 E_1 对应于价带, E_2 对应于导带。

为了便于讨论, 将动量坐标轴 k_x, k_y 逆时针旋转 $\pi/4$, 在新坐标系中价带和导带表达为

$$E_v(k'_x, k'_y | t_1, \delta) = -2t_1 (\cos \sqrt{2} k'_x + \cos \sqrt{2} k'_y) - 4 \left| \cos \frac{k'_y}{\sqrt{2}} \right| \sqrt{\delta^2 \sin^2 \frac{k'_x}{\sqrt{2}} + \cos^2 \frac{k'_x}{\sqrt{2}}}; \quad (11a)$$

$$E_c(k'_x, k'_y | t_1, \delta) = -2t_2 (\cos \sqrt{2} k'_x + \cos \sqrt{2} k'_y) + 4 \left| \cos \frac{k'_y}{\sqrt{2}} \right| \sqrt{\delta^2 \sin^2 \frac{k'_x}{\sqrt{2}} + \cos^2 \frac{k'_x}{\sqrt{2}}}. \quad (11b)$$

采用数值计算方法, 可得到相应的等能面图形, 如图 3。图中 $t = 1$, 次近邻原子的耦合

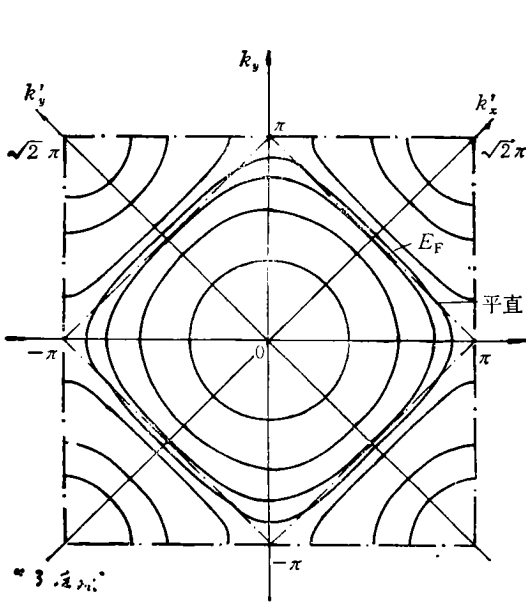


图 3 二聚化后电子的等能面及费密面
 $t = 1.0, t_1 = 0.1, \delta = 0.01,$
 $E_F = 0.26$

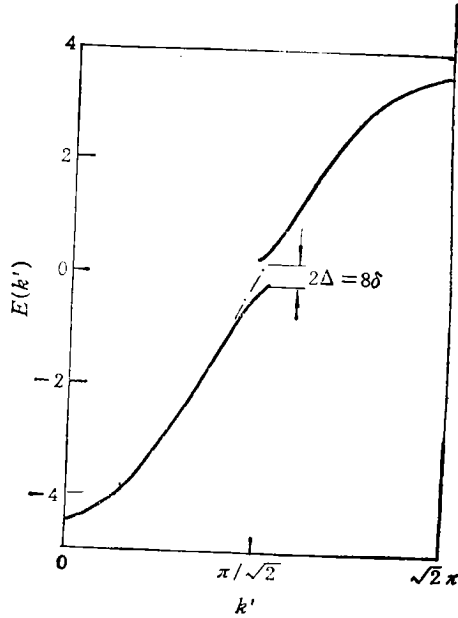


图 4 二聚化后的能带曲线 ——为对应 k'_x 轴上的能带; - · - · - 为对应 k'_y 轴上的能带。
 $t = 1.0, t_1 = 0.1, \delta = 0.05$

$t_1 = 0.1$, 二聚程度 $\delta = 0.01$, 图中看出费密面出现平直小段。

从 (11) 式解出 $k'_y = k'_y(k'_x)$ 代入 (5) 式。注意到二聚化后能级在布里渊区边界上发生分裂, 在不同的布里渊区 $k'_y(k'_x)$ 有不同的表达形式。用迭代方法确定费密面的位置。表 2 列出了考虑了次近邻原子作用及二聚化后, 费密能级的数值计算结果。

表 2

次近邻耦合 t_1	无 二 聚 化		有 二 聚 化		临 界 值	
	δ	E_F	δ	E_F	δ_0	E_F
0.01	0.00	0.03	0.05	0.03	0.008	0.03
0.05	0.00	0.14	0.05	0.15	0.039	0.15
0.10	0.00	0.26	0.05	0.27	0.073	0.29
0.15	0.00	0.37	0.05	0.38	0.105	0.42
0.20	0.00	0.47	0.05	0.48	0.138	0.54

3 讨 论

3.1 二维晶格中费密面的叠套 (Nesting)

从图 2 中可看出正方形晶格由两个次晶格 A 和 B 所套成的, 当次晶格 A 沿正方形对角线方向位移时, 畸变后的新原胞如图中用锁线表示, 新的晶格常数 $a' = \sqrt{2}a = \sqrt{2}$, 新原胞比原来的原胞扩大一倍, 新的第一布里渊区将缩小为原来的一半, 新的布里渊区边界正好和正方形费密面重合, 布里渊边界与费密面呈现完全叠套状态, 因此只考虑最近邻原子作用时费密面是完全 Nesting. 当晶格二聚化发生时将会在费密面上打开能隙, 使费密面内部能谱降低外部能谱升高, 晶格畸变将使电子总能量降低, 这就是二维晶格中的 Peierls 不稳定性^[7]。

3.2 二聚化及次近邻原子对费密面的影响

当晶格发生二聚化畸变时, 布里渊边界将移动。由 (11a) 和 (11b) 式可看出, 在新的第一布里渊区边界 $k'_x = \pi/\sqrt{2}$ 处存在能隙:

$$\Delta E = 8\delta \left| \cos \frac{k'_y}{\sqrt{2}} \right|. \quad (12)$$

并且在 k'_x 轴与布里渊区边界交点处能隙有最大值: $\Delta E_{\max} = 2\Delta = 8\delta$, 而沿布里渊区的另一对边界 $k'_y = \pm\pi/\sqrt{2}$ 处不存在能隙。图 4 画出了能谱沿 k'_x 轴和 k'_y 轴上的能带曲线, 从图 4 中可看出 $k'_x = \pi/\sqrt{2}$ 布里渊边界处存在能隙 2Δ , 而 $k'_y = \pi/\sqrt{2}$ 布里渊边界上不存在能隙, 能级是连续的, 也就是能隙只存在于原子发生位移的方向上。这是由于二聚化畸变引起晶格中晶面的移动, 从而改变了散射晶面的间隔。由 (12) 式可见二聚化能隙的大小 ΔE , 仅与二聚化程度 δ 有关, 与次近邻原子的耦合强弱 t_1 无关。

将 $k_x = \pi/2$, $k_y = \pi/2$ 代入 (3b) 式中

$$E(\pi/2, \pi/2 | t_1) = E(\pi/2, \pi/2 | 0) = 0. \quad (13)$$

这表明 t_1 为任何值时, $E = 0$ 的能级都通过 $(\pi/2, \pi/2)$ 的点, 在新坐标系中 $k'_x = \pi/$

$\sqrt{2}$, $k'_y = 0$ 的点。也就是能隙对布里渊区边界的分布是对称的,由此可确定 k'_x 轴上第一布里渊区边界处的能级应分别为 $\pm 4\delta$, 这对确定费密面位置的计算中极为重要。

3.3 临界位移 δ_0 和两类费密面

1) 临界位移与 t_1 的关系 第一布里渊区边界 $k'_x = \pi/\sqrt{2}$ 处的能隙随二聚化 δ 的加大而加大,假定这时存在一个 δ_0 。电子由低能级向高能级填充到达第一布里渊边界 $k'_x = \pi/\sqrt{2}$ 时的能级为 $E = -4\delta_0$, 由于能隙的存在余下电子只能沿 k'_y 轴方向继续填充,因为 δ_0 足够大,电子填完时费密面才达到 $E_F = 4\delta_0$, 这时已经没有电子能超越 k'_x 方向的布里渊区边界进入第二布里渊区,即全部电子被关闭在 $k'_x = \pm\pi/\sqrt{2}$ 的区域中。这时的 δ_0 值为临界值,它可用迭代 δ 的方法求得,即满足 (14a) 式的 δ 为 δ_0 。

$$\int_0^{\pi/\sqrt{2}} k'_{yF}(k'_x) dk'_x = \pi^2/2, \quad (14a)$$

其中,

$$k'_{yF}(k'_x) = \sqrt{2} \arccos \left[-\frac{1}{2t_1} \sqrt{\delta^2 \sin^2 \frac{k'_x}{\sqrt{2}} + \cos^2 \frac{k'_x}{\sqrt{2}}} + \frac{1}{2t_1} \sqrt{\delta^2 \sin^2 \frac{k'_x}{\sqrt{2}} + \cos^2 \frac{k'_x}{\sqrt{2}}} + t_1 \left(4t_1 \sin^2 \frac{k'_x}{\sqrt{2}} - 4\delta \right) \right]. \quad (14b)$$

对于确定的 t_1 就有一个 δ_0 临界值相对应,见表 2。

2) 临界位移 δ_0 和两种形状的费密面 (1) $\delta \geq \delta_0$, 对应于二聚化较大的情况,能

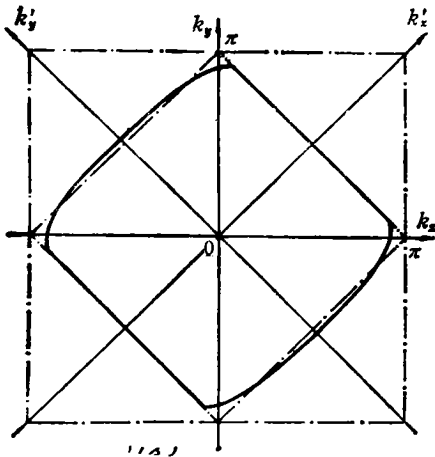


图 5 $\delta \geq \delta_0$ 临界值时二聚化后的费密面 $t = 1.0, t_1 = 0.1, \delta_0 = 0.073, E_F = 0.29$

隙 ΔE 较大,电子填充过程中无法穿越 k'_x 方向的布里渊区边界,费密面在 k'_x 方向的边界上是平直的与布里渊区边界重合,费密面呈现部分 Nesting, 如图 5。(2) $\delta < \delta_0$, 对应于二聚化较小的情况,最大能隙 $2\Delta = 8\delta$ 较小,电子沿 k'_x 轴方向填充时能穿越第一布里渊区边界处的能隙进入第二布里渊区。这时费密面形状如图 3,费密面仅有部分小段是平直的大部分是弯曲状的,费密面近似 Nesting。

从表 2 中看出,随着 t_1 的增加即次近邻原子耦合的加大,及二聚化的增大 δ 加大,将会使费密面上升,临界值 δ_0 也发生相应的改变。因而次近邻原子的耦合必然会影响到

体系总能量及体系的稳定性,关系稳定性与次近邻原子的耦合及二聚化关系等问题将另作专题讨论。

[1] 孙鑫著,高聚物中的孤子和极化子,四川教育出版社,(1987)。

[2] Sanyee. Tang, J. E. Hirsch, *Phys. Rev.*, B37(1988), 9546.

- [3] S. Mazumdar, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 12324.
- [4] Sanyee. Tang, J. E. Hirsch, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 12327.
- [5] J. N. Liu, X. Sun, R. T. Fu and K. Nasu, *Phys. Rev.*, **B46**(1992), 1710.
- [6] 孙鑫, 物理学进展, **5**(4)(1985).
- [7] 孙鑫, 物理学进展, **10**(4) (1990).

NESTING IN THE TWO-DIMENSIONAL LATTICE

Ling Fan

(Department of physics, Yangzhou Teachers college, Yangzhou 225002)

Sun Xin

(Department of physics, Fudan University, Shanghai 200433)

(Received 13 May 1993)

ABSTRACT

It is needed to include the next-nearest hopping for the instability of two-dimensional half-filled lattice. Then there exists a critical value δ_0 of the dimerization δ . When $\delta \geq \delta_0$, it is part-nesting, a part of Fermi surface is flat; whereas $\delta < \delta_0$, it is only approximate nesting, Fermi surface is curved.

PACC: 6320K