

一维自旋 $1/2$ 电子系统的 单杂质散射研究^{*}

石云龙 S.N.Nabeel 章豫梅 陈 鸿 吴 翔

(同济大学波耳固体物理研究所, 上海 200092)

(1996 年 12 月 20 日收到)

应用高斯波泛函方法, 研究了单个局域杂质对一维自旋 $1/2$ 传导电子的散射问题. 研究结果表明, 双粒子散射与单粒子散射具有同样的重要性. 由于这两种散射机制相互竞争, 形成了拉亭格液体中电荷密度波和自旋密度波的各自的重整化质量. 随着这些质量的消失, 在参量空间中出现了相界, 在不同相区中系统呈现不同的动力学行为.

PACC: 7210; 7145L

1 引 言

在一维固体中, 电子间的相互作用至关重要, 它导致强关联的基态和低激发态. 对于一维系统, 统治低能量行为的是集体模式而非费密液体的单粒子激发态, 这已在理论上得到了充分的研究^[1]. 就实际现象而言, 重要的是了解准一维晶体的输运现象, 如在电场作用下的阻抗^[2-5], 而耗散机制与缺陷对电子的散射是不可分离的. 一维固体的电子系统常被称为拉亭格液体, 以别于三维空间中的费密液体. 但在局域的散射势垒附近, 一维电子可以呈现局域的费密液体行为, 也可以呈现局域的非费密液体行为, 视电子间的作用力为斥力或引力而定. 按 Kane 和 Fisher 的研究, 在这两种情况下电子或被势垒反射, 或可穿越势垒^[6]. 用标度语言而言, 一维系统经历了从有限的局域能隙(或质量)到能隙消失的相变. 而相界的划定既依赖于电子间的相互作用, 也依赖于缺陷对电子的散射方式. 对于有自旋的电子, 单粒子散射和双粒子散射是两种最重要的形式. 本文拟用高斯波泛函方法研究在这两种机制互相竞争的情况下电子系统的低能行为, 用变分方法计算电荷密度波(CDW)和自旋密度波(SDW)的重整化局域质量, 从而在参量空间中划定相界.

2 拉亭格液体的杂质模型

考虑在一维空间中运动的带自旋的费密粒子, 其总能量可分为两部分. 第一部分描述整体空间上的拉亭格液体行为^[6],

^{*} 国家自然科学基金及山西省青年学科带头人基金资助的课题.

$$\begin{aligned}
H_L = & \sum_s v_F \int dx [\psi_{sR}^\dagger(x)(-i\nabla)\psi_{sR}(x) + \psi_{sL}^\dagger(x)(i\nabla)\psi_{sL}(x)] \\
& + g_2 \int dx [\psi_{\uparrow R}^\dagger(x)\psi_{\uparrow R}(x)\psi_{\uparrow L}^\dagger(x)\psi_{\uparrow L}(x) + \psi_{\downarrow R}^\dagger(x)\psi_{\downarrow R}(x)\psi_{\downarrow L}^\dagger(x)\psi_{\downarrow L}(x)] \\
& + g_4 \int dx [\psi_{\uparrow R}^\dagger(x)\psi_{\uparrow R}(x)\psi_{\downarrow R}^\dagger(x)\psi_{\downarrow R}(x) + \psi_{\uparrow L}^\dagger(x)\psi_{\uparrow L}(x)\psi_{\downarrow L}^\dagger(x)\psi_{\downarrow L}(x)].
\end{aligned} \quad (1)$$

在色散关系线性化后, $\psi_{sR}(x)$ 和 $\psi_{sL}(x)$ 分别表示自旋为 $s(=\uparrow, \downarrow)$ 的向右和向左运动的费密场算符. 式中 v_F 为费密速度, g_2 和 g_4 表示费密粒子间相互作用中的小动量散射部分的耦合强度.

杂质(在原点)引起的相互作用为

$$H_I = \sum_s \int v(x) \psi_s^\dagger(x) \psi_s(x) dx + \int u(x) \psi_\uparrow^\dagger(x) \psi_\uparrow(x) \psi_\downarrow^\dagger(x) \psi_\downarrow(x) dx, \quad (2)$$

其中 $v(x) = v_0 \delta(x)$ 和 $u(x) = u_0 \delta(x)$ 分别表示单粒子和自旋反平行的粒子对的短程散射势能.

采用标准的玻色化方法, 费密算符 $\psi_s(x)$ 可用相应的玻色场算符 $\phi_s(x)$ 和 $\Pi_s(x)$ 表示:

$$\psi_{s,R/L}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \exp \left\{ i \sqrt{\pi} \left[\pm \phi_s(x) - \int_{-\infty}^x \Pi_s(x') dx' \right] \right\}. \quad (3)$$

相应地, 拉亭格模型中的元激发可用相互独立的集体电荷密度涨落波 $\phi_\rho(x)$ 和自旋密度涨落波 $\phi_\sigma(x)$ 描述, 这里

$$\phi_\rho(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{\beta_\rho} \left[\phi_\uparrow(x) + \phi_\downarrow(x) + \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \right], \quad (4)$$

$$\phi_\sigma(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{\beta_\sigma} [\phi_\uparrow(x) - \phi_\downarrow(x)]. \quad (5)$$

相应的共轲动量为

$$\Pi_{\rho/\sigma} = \frac{\beta_{\rho/\sigma}}{\sqrt{4\pi}} [\Pi_\uparrow(x) \pm \Pi_\downarrow(x)]. \quad (6)$$

于是

$$H_L = \frac{v_\rho}{2} \int dx [(\nabla \phi_\rho(x))^2 + \Pi_\rho^2(x)] + \frac{v_\sigma}{2} \int dx [(\nabla \phi_\sigma(x))^2 + \Pi_\sigma^2(x)]. \quad (7)$$

这里

$$v_{\rho/\sigma} = v_F \sqrt{[1 - (g_2^2 - g_4^2 \mp 4\pi v_F g_4)/(2\pi v_F)^2]} \quad (8)$$

为 CDW(SDW)传播速度,

$$\beta_{\rho/\sigma} = \sqrt{2\pi} \left(\frac{2\pi v_F - g_2 \pm g_4}{2\pi v_F + g_2 \pm g_4} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (9)$$

为耦合常数.

由杂质引起的相互作用项(2)式中, 具有大动量传递的背散射项将是主要的. 这样, 略去粒子密度涨落, 同时只考虑局域杂质对一维传导电子的散射问题, (2)式将成为

$$H_I = - \int \delta(x) \{ \lambda \cos(\beta_\rho \phi_\rho) \cos(\beta_\sigma \phi_\sigma) + \lambda_\rho \cos(2\beta_\rho \phi_\rho) + \lambda_\sigma \cos(2\beta_\sigma \phi_\sigma) \}, \quad (10)$$

其中 $\lambda = 2v_0/(\pi\alpha)$, $\lambda_\rho = \lambda_\sigma = 2u_0/(2\pi\alpha)^2$ 为局域势垒的散射强度. 相应地, 含局域杂质的拉亭格液体的哈密顿量为

$$\begin{aligned} H &= H_L + H_I \\ &= \frac{v_\rho}{2} \int dx [(\nabla \phi_\rho(x))^2 + \Pi_\rho^2(x)] + \frac{v_\sigma}{2} \int dx [(\nabla \phi_\sigma(x))^2 + \Pi_\sigma^2(x)] \\ &\quad - \int \delta(x) \{ \lambda \cos(\beta_\rho \phi_\rho) \cos(\beta_\sigma \phi_\sigma) + \lambda_\rho \cos(2\beta_\rho \phi_\rho) + \lambda_\sigma \cos(2\beta_\sigma \phi_\sigma) \}. \end{aligned} \quad (11)$$

3 单杂质势可解模型

在求解上述耦合模型之前, 首先讨论一个具有单杂质“质量”项的可解模型^[7], 为了模拟(11)式中的局域余弦项, 取相应的哈密顿量为

$$H_0 = \sum_{j=\rho,\sigma} \int dx \left\{ \frac{v_j}{2} [(\nabla \phi_j(x))^2 + \Pi_j^2(x)] + \frac{m_j}{2} \delta(x) \phi_j^2(x) \right\}, \quad (12)$$

其中 m_j 为质量量纲参量. 为了使 H_0 对角化, 将场算符和动量算符分解为

$$\phi_j(x) = \sum_{\mu_j} \left(\frac{1}{2\epsilon_{\mu_j}} \right)^{1/2} u_{\mu_j}(x) (b_{\mu_j} + b_{\mu_j}^\dagger), \quad (13)$$

$$\Pi_j(x) = -i \sum_{\mu_j} \left(\frac{\epsilon_{\mu_j}}{2} \right)^{1/2} u_{\mu_j}(x) (b_{\mu_j} - b_{\mu_j}^\dagger), \quad (14)$$

其中 $\{u_{\mu_j}(x)\}$ 为一组正交、归一、完备的函数组, 即

$$\int u_{\mu_j}(x) u_{\nu_j}(x) dx = \delta_{\mu_j, \nu_j}. \quad (15)$$

从场算符的对易关系

$$[\phi_j(x), \Pi_j(x')] = i\hbar \delta(x - x'), \quad (16)$$

可导出

$$[b_{\mu_j}, b_{\nu_j}^\dagger] = \delta_{\mu_j, \nu_j}, \quad [b_{\mu_j}, b_{\nu_j}] = 0, \quad [b_{\mu_j}^\dagger, b_{\nu_j}^\dagger] = 0. \quad (17)$$

易验证, 当函数组 $\{u_{\mu_j}(x)\}$ 和数组 $\{\epsilon_{\mu_j}\}$ 满足下列本征方程:

$$-\frac{\partial^2 u_{\mu_j}(x)}{\partial x^2} + \frac{m_j}{v_j} \delta(x) u_{\mu_j}(x) = \epsilon_{\mu_j}^2 u_{\mu_j}(x), \quad (18)$$

即可使 H_0 对角化为

$$H_0 = \sum_{\mu_\rho} v_{\rho\epsilon_{\mu_\rho}} \left(b_{\mu_\rho}^\dagger b_{\mu_\rho} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\mu_\sigma} v_{\sigma\epsilon_{\mu_\sigma}} \left(b_{\mu_\sigma}^\dagger b_{\mu_\sigma} + \frac{1}{2} \right). \quad (19)$$

相应的基态亦可从方程

$$b_{\mu_j} |\psi(m_j)\rangle = 0 \quad (\text{对于所有的 } \mu_j) \quad (20)$$

求得. 这里按(13)和(14)式,

$$b_{\mu_j} = \int dx u_{\mu_j}(x) \left[\left(\frac{\epsilon_{\mu_j}}{2} \right)^{1/2} \phi_j(x) + i \left(\frac{1}{2\epsilon_{\mu_j}} \right)^{1/2} \Pi_j(x) \right], \quad (21)$$

其解

$$|\psi(m_j)\rangle \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \iint dx dy \phi_j(x) K_j^{-1}(x, y) \phi_j(y) \right\}, \quad (22)$$

$$|\psi(m_\rho, m_\sigma)\rangle = \prod_{j=\rho, \sigma} |\psi(m_j)\rangle \quad (23)$$

即为基态波函数. 其中(22)式中的核

$$K_j^{-1}(x, y) = \sum_{\mu_j} \epsilon_{\mu_j} u_{\mu_j}(x) u_{\mu_j}(y). \quad (24)$$

利用归一化条件, 可求得方程(18)的对称解为

$$u_{\mu_j}^s(x) = u_{\mu_j}^s(-x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos(\epsilon_{\mu_j}|x| + \phi_{\mu_j}), \quad (25)$$

$$2 \tan(\phi_{\mu_j}) = -\frac{m_j}{\epsilon_{\mu_j} v_j}. \quad (26)$$

取边界条件为 $u_{\mu_j}(\pm L) = 0$, 则

$$\epsilon_{\mu_j} L + \phi_{\mu_j} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (27)$$

其中 $2L$ 为晶体长度.

同理, 反对称解为

$$u_{\mu_j}^a(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin(\epsilon_{\mu_j} x), \quad (28)$$

其中

$$\epsilon_{\mu_j} = \frac{n\pi}{L} \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (29)$$

于是

$$\{u_{\mu_j}(x)\} = \{u_{\mu_j}^s(x)\} + \{u_{\mu_j}^a(x)\}. \quad (30)$$

由

$$|u_{\mu_j}(0)|^2 = \frac{4\epsilon_{\mu_j}^2 v_j^2}{L(4\epsilon_{\mu_j}^2 v_j^2 + m_j^2)}, \quad (31)$$

可得到在原点的核的值

$$K_j(0, 0) = \sum_{\mu_j} \frac{1}{\epsilon_{\mu_j}} |u_{\mu_j}(0)|^2 = \sum_{\mu_j} \frac{1}{\epsilon_{\mu_j} L} \left(\frac{4\epsilon_{\mu_j}^2 v_j^2}{4\epsilon_{\mu_j}^2 v_j^2 + m_j^2} \right). \quad (32)$$

过渡到连续极限中,

$$K_j(0, 0) = \frac{4}{\pi} \int_0^{\Delta} \frac{v_j^2 \epsilon_{\mu_j} d\epsilon_{\mu_j}}{4v_j^2 \epsilon_{\mu_j}^2 + m_j^2} = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{\Delta^2 v_j^2 + m_j^2}{m_j^2} \right), \quad (33)$$

其中 Δ 为上限动量截止.

4 模型的变分解与相界的确定

现在, 通过高斯泛函变分寻求哈密顿量(11)式的变分基态. 由(11), (12)和(23)式, 可得

$$\begin{aligned}
 E(m_\rho, m_\sigma) &= \langle \psi(m_\rho, m_\sigma) | H | \psi(m_\rho, m_\sigma) \rangle \\
 &= \langle \psi(m_\rho, m_\sigma) | H_0 | \psi(m_\rho, m_\sigma) \rangle + \langle \psi(m_\rho, m_\sigma) | H - H_0 | \psi(m_\rho, m_\sigma) \rangle \\
 &= E_0(m_\rho, m_\sigma) - \frac{m_\rho}{2} K_\rho(m_\rho) - \frac{m_\sigma}{2} K_\sigma(m_\sigma) \\
 &\quad - \lambda_\rho \exp[-\beta_\rho^2 K_\rho(m_\rho)] - \lambda_\sigma \exp[-\beta_\sigma^2 K_\sigma(m_\sigma)] \\
 &\quad - \lambda \exp\left[-\frac{\beta_\rho^2}{4} K_\rho(m_\rho)\right] \exp\left[-\frac{\beta_\sigma^2}{4} K_\sigma(m_\sigma)\right], \quad (34)
 \end{aligned}$$

其中

$$K_\rho(m_\rho) = K_\rho(0, 0), \quad K_\sigma(m_\sigma) = K_\sigma(0, 0). \quad (35)$$

令 $\frac{\partial E}{\partial m_\rho} = 0$, $\frac{\partial E}{\partial m_\sigma} = 0$, 并将(33)式分别代入, 可得

$$m_\rho = 2\lambda_\rho\beta_\rho^2 \left[\frac{m_\rho}{\sqrt{\Lambda^2 v_\rho^2 + m_\rho^2}} \right]^{\frac{\beta_\rho^2}{\pi}} + \frac{1}{2}\lambda\beta_\rho^2 \left[\frac{m_\rho}{\sqrt{\Lambda^2 v_\rho^2 + m_\rho^2}} \right]^{\frac{\beta_\rho^2}{4\pi}} \left[\frac{m_\sigma}{\sqrt{\Lambda^2 v_\sigma^2 + m_\sigma^2}} \right]^{\frac{\beta_\sigma^2}{4\pi}}, \quad (36)$$

$$m_\sigma = 2\lambda_\sigma\beta_\sigma^2 \left[\frac{m_\sigma}{\sqrt{\Lambda^2 v_\sigma^2 + m_\sigma^2}} \right]^{\frac{\beta_\sigma^2}{\pi}} + \frac{1}{2}\lambda\beta_\sigma^2 \left[\frac{m_\sigma}{\sqrt{\Lambda^2 v_\sigma^2 + m_\sigma^2}} \right]^{\frac{\beta_\sigma^2}{4\pi}} \left[\frac{m_\rho}{\sqrt{\Lambda^2 v_\rho^2 + m_\rho^2}} \right]^{\frac{\beta_\rho^2}{4\pi}}, \quad (37)$$

只有当能量期待值作为 m_ρ, m_σ 的函数为局域极小, 系统基态才是稳定的. 须要求

$$\frac{\partial^2 E}{\partial m_j^2} \geq 0 \quad (j = \rho, \sigma) \quad (38)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial m_\rho^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial m_\sigma^2} \geq \left(\frac{\partial^2 E}{\partial m_\rho \partial m_\sigma} \right)^2. \quad (39)$$

例如, 当 $\lambda > 0$, $\lambda_\rho = \lambda_\sigma = 0$ 时, 稳定条件(36)和(37)式给出

$$\sum_{j=\rho, \sigma} \frac{\beta_j^2}{4\pi} \leq 1. \quad (40)$$

相应地, m_ρ, m_σ 有非零值. 反之, 当 $\lambda = 0$, $\lambda_{\rho/\sigma} > 0$ 时, 稳定条件(36)和(37)式给出

$$\frac{\beta_{\rho/\sigma}^2}{4\pi} \leq \frac{1}{4}. \quad (41)$$

结果表明, 当 $\beta_{\rho/\sigma}^2 < \pi$ 时, $m_{\rho/\sigma}$ 有非零值.

当 $\lambda, \lambda_\rho, \lambda_\sigma$ 均取有限正值时, 在绝对温度 $T = 0\text{K}$ 下的单杂质问题的相图可由(36)和(37)式通过数值计算给出. 以下对典型参量值作数值计算以分析相图. 当取 $\Lambda v_\rho = \Lambda v_\sigma = 1$, $\lambda = 0.1$, $\lambda_\rho = \lambda_\sigma = 0.001$ 时, 其相图如图 1 所示. 图 1 给出按(36)和(37)式决定的具有确定 m_σ 的 $\frac{\beta_\rho^2}{4\pi} - \frac{\beta_\sigma^2}{4\pi}$ 关系曲线族. 当 $m_\sigma \rightarrow 0$ 时, 即得到自旋平面波的相界. 由(36)和(37)

式的 m_ρ 和 m_σ 的对称性可见, CDW 的相界与 SDW 的相界也是对称的. 由图 1 可见, 区域 A 对于两种密度波重整化质量大于零, 而区域 B 则 $m_\rho = m_\sigma = 0$, 其交界是两种密度波的共同相界. 区域 C 和区域 D 为混合区域, $m_\sigma = 0$, $m_\rho > 0$ 或 $m_\rho = 0$, $m_\sigma > 0$. 数值结果表明, 在区域 A, 含 $\cos(\beta_\rho \phi_\rho) \cos(\beta_\sigma \phi_\sigma)$ 的单粒子散射项是重要的, 它对 CDW 和 SDW 均有贡献. 在区域 C, 含 $\cos(2\beta_\rho \phi_\rho)$ 的双粒子散射项是重要的, 它仅对 CDW 有贡献. 而在区域 D, 含 $\cos(2\beta_\sigma \phi_\sigma)$ 的双粒子散射项是重要的, 它对 SDW 有贡献. 区域 A-区域 C, 区域 A-区域 D 相界分别表示单粒子散射和双粒子散射相互竞争的结果, 它表明基态和低激发态是强关联的, 与 $\lambda_\rho = \lambda_\sigma = 0$ 的情形有实质差异. 根据文献[6], 相图上各个区域的动力学行为是不同的, 在区域 A 中各项相互作用 λ_ρ , λ_σ 和 λ 都重整化为无穷大, 即 CDW 和 SDW 都被势垒完全反射. 反之, 在区域 B 上各相互作用都重整化为零, CDW 和 SDW 都能无阻碍地穿越势垒, 而在区域 C 和区域 D 中, 两种涨落中一种全反射, 一种穿越势垒, 此即混合相. 我们的相图与重整化群理论得到的结果定性一致, 而高斯波泛函方法能给出更多的细节, 体现此方法对探讨强耦合模型的有效性.

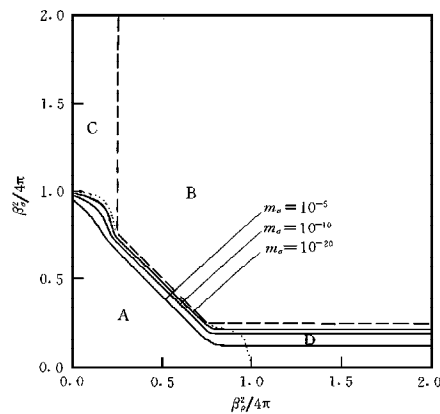


图 1 局域质量相图 实线表示 m_σ 等于常量; 虚线表示 $m_\rho = 0$ 和 $m_\sigma = 0$ 的相界. 区域 A 中 $m_\rho > 0$, $m_\sigma > 0$; 区域 B 中 $m_\rho = m_\sigma = 0$; 区域 C 中 $m_\rho > 0$, $m_\sigma = 0$; 区域 D 中 $m_\sigma > 0$, $m_\rho = 0$

- [1] J. Voit, *Rep. Prog. Phys.*, **57**(1994), 977.
- [2] C. L. Kane and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. Lett.*, **68**(1992), 1220.
- [3] A. Furusaki and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 892.
- [4] R. Egger and H. Grabert, *Phys. Rev. Lett.*, **77**(1996), 538.
- [5] M. Fabrizio *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 2235.
- [6] C. L. Kane and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev.*, **B46**(1992), 15233.
- [7] Bowei Xu and Yumei Zhang, *J. Phys.*, **A29**(1996), 7349.

STUDY ON THE SINGLE IMPURITY SCATTERING TO THE ONE-DIMENSIONAL SPIN 1/2 ELECTRONS

SHI YUN-LONG S. N. NABEEL ZHANG YU-MEI CHEN HONG WU XIANG

(*Pohl Institute of Solid State Physics, Tongji University, Shanghai 200092*)

(Received 20 December 1996)

ABSTRACT

The Gaussian wave functional method is applied to investigate the effects of the scattering of a local impurity to the one-dimensional conduction electrons, whose low energy behavior can be described by the Luttinger model. Our results show that both the single-particle scattering and pair-particle scattering are important in this case. The competition between these two scattering mechanisms gives rise to the renormalized masses for both charge and spin density waves. The vanishing of these masses depicts the phase boundaries in the parameter space, different dynamical behaviors are thus determined.

PACC: 7210; 7145L