

УДК 530.145

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ ОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМ<sup>1</sup>*Кривнов В. Я., Овчинников А. А.*

Рассмотрен вопрос о вычислении корреляционных функций, описывающих пространственную структуру одномерных систем. Проанализированы различные подходы к этой проблеме. Приведены примеры использования корреляционных функций для интерпретации экспериментальных данных по рассеянию рентгеновских лучей и нейтронов и для оценки температур переходов в квазиодномерных системах.

Библиография — 41 ссылка.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

I. Введение	1251
II. Корреляционные функции континуальной модели ферми-газа	1252
III. Решеточный ферми-газ	1258
IV. Примеры использования корреляционных функций	1259

## I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в связи с тем, что удалось синтезировать интересные квазиодномерные объекты, как например, высокопроводящие донорно-акцепторные комплексы на основе тетрацианхинодиметана (TCNQ) [1], полиацетилен, допированный донорами или акцепторами [2] и т. д., практическая важность одномерной физики стала очевидной. Известно, что одномерные системы обладают целым рядом особенностей, которые резко отличают их от трехмерных. Это приводит, в частности, к тому, что, несмотря на относительную простоту одномерных систем по сравнению с трехмерными, хорошо разработанные приближенные методы решения трехмерных задач оказываются зачастую неприменимы к задачам одномерным, и развитие одномерной физики потребовало разработки новых методов.

Хотя квантовые одномерные системы привлекали внимание теоретиков еще в довоенные годы, интенсивное и последовательное изучение одномерных систем, в значительной мере стимулированное успехами в их синтезе, было начато в 60-х годах. В этот период, который охватывает примерно 10—15 лет, усилия теоретиков в основном были направлены на разработку методов расчета энергетических характеристик одномерных систем — таких, как энергия основного состояния, спектры возбуждений и т. д., а также термодинамики одномерных систем. В результате этих исследований были найдены приближенные способы расчета энергий, использующие специфический вариационный метод и позволяющие получать значение энергии одномерных систем с высокой степенью точности [3]. Кроме того, для ряда одномерных моделей удалось получить точные результаты методом, восходящим еще к работам Бете [3]. Весьма полезным оказалось и численное изучение систем с конечным числом частиц [4].

Итогом всех этих работ явилось понимание важности и своеобразия корреляционных эффектов в одномерных системах и разработка эффективных способов их учета. Несмотря на то, что ряд вопросов, касающихся определения энергетических характеристик (например, аккуратный учет эффектов электрон-фононного взаимодействия, в частности, вопрос о так называемом пайерлсовском переходе [5]), к настоящему

<sup>1</sup> Настоящий и последующие обзоры составлены на основе пленарных докладов XII Всесоюзного совещания по органическим полупроводникам (октябрь 1982 г.).

времени остается невыясненным, тем не менее можно считать, что в основном указанная выше проблема была решена, и более актуальной стала задача другого рода, а именно, вычисление корреляционных функций одномерных систем.

Корреляционные функции — это различного рода средние значения по волновым функциям системы, характеризующие ее пространственную структуру и, кроме того, определяющие ее отклики на различного рода внешние возмущения, в частности, описывающие процессы рассеяния системой рентгеновских лучей или нейтронов. Информация, содержащаяся в корреляционных функциях, значительно богаче той, которую можно получить из знания энергетического спектра или термодинамики системы. Можно привести и соответствующий экспериментальный пример — наиболее точные результаты, позволившие определить степень переноса заряда в квазиодномерных донорно-акцепторных кристаллах типа TTF—TCNQ (TTF — тетратиофульвален), были получены из спектров диффузного рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов [6, 7]. Необходимо, однако, отметить, что задача вычисления корреляционных функций является значительно более сложной, чем задача вычисления энергий. Связано это, прежде всего, с тем, что для вычисления корреляционных функций необходимо знать волновые функции системы, и, если, например, вариационный метод дает неплохие результаты при вычислении энергий, то получающиеся при этом волновые функции весьма далеки от точных. Даже упомянутый выше метод Бете, позволяющий получать точные значения энергий, для вычисления волновых функций оказывается непригодным. Перечисленные трудности и объясняют тот факт, что за задачу вычисления корреляционных функций одномерных систем всерьез взялись сравнительно недавно, хотя имеются примеры некоторых специальных модельных систем (весьма немногочисленные), для которых получены точные результаты [8, 9]. Исследования, относящиеся к первому этапу, нашли свое отражение в ряде прекрасных обзоров и монографий (см., например, [10]) и хорошо знакомы не только теоретикам, но и экспериментаторам; однако задача вычисления корреляционных функций, которая довольно интенсивно изучается в течение последних 6—8 лет, еще далека от полного решения, а в литературе отсутствует достаточно подробный обзор работ по этой проблеме. Поскольку подходы, применяемые для решения этой проблемы, нередко основаны на ряде труднопроверяемых и не вполне обоснованных предположений, то среди специалистов, занимающихся ею, нет единого мнения относительно справедливости получаемых различными авторами результатов. Цель данной работы — обзор последних достижений в этой области и анализ полученных к настоящему времени результатов.

## II. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ КОНТИНУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ФЕРМИ-ГАЗА

Основное внимание в дальнейшем будет уделено двум конкретным корреляторам (корреляционным функциям): так называемой одночастичной матрице плотности  $\rho(R)$ , определяемой интегралом

$$\rho(R) = \rho \int \Psi^*(R, x_2, \dots, x_N) \Psi(0, x_2, \dots, x_N) dx_2 \dots dx_N$$

( $\Psi(x_1, \dots, x_N)$  — волновая функция системы, зависящая от координат частиц  $x_1, \dots, x_N$ ) и парной корреляционной функции  $G(R, t)$ :

$$G(R, t) = \langle \rho(0, 0) \rho(R, t) \rangle$$

где  $\rho(R, t)$  — зависящий от времени  $t$  оператор плотности, а угловые скобки означают статистическое усреднение. Функция  $G(R, t)$  определяет вероятность нахождения какой-либо частицы системы на расстоянии  $R$  от данной в момент времени  $t$ . В частности, при  $t=0$  и нулевой температуре ( $T=0$ ) можно записать:

$$G(R, 0) = \rho^2 \int \Psi^*(0, R, x_3, \dots, x_N) \Psi(0, R, x_3, \dots, x_N) dx_3 \dots dx_N$$

Коррелятор  $\rho(R)$  интересен, в частности, тем, что его фурье-образ  $n(k)$  является функцией распределения частиц по импульсам  $k$  при  $T=0$ . Наряду с коррелятором  $G(R, t)$  важную роль играет его фурье-образ — динамический форм-фактор  $S(k, \omega)$  ( $\omega$  — частота) [11], определяющий вероятность рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей. При этом нас в основном будет интересовать поведение указанных корреляторов при больших расстояниях и временах.

Характерной особенностью одномерных систем является отсутствие дальнего порядка даже при  $T=0$ , хотя, впрочем, здесь имеются исключения, о которых будет сказано ниже. Это означает, что значения корреляторов убывают с расстоянием, и определение закона этого убывания является одной из задач теории. Другими словами, имеются асимптотические зависимости  $\rho(R) \sim R^{-\kappa}$  и  $G(R, 0) \sim R^{-\alpha}$ , и необходимо найти  $\kappa$  и  $\alpha$ , которые иногда называют критическими индексами.

Хотелось бы вкратце остановиться на одном аспекте, касающемся отсутствия дальнего порядка в одномерных системах. Это — проблема одномерной сверхпроводимости. Иногда в литературе встречаются утверждения о том, что одномерная сверхпроводимость невозможна именно из-за отсутствия дальнего порядка. При этом проводится аналогия с трехмерным бозе-газом, где сверхтекучесть связана с наличием фазового перехода в состоянии с бозе-конденсатом, в котором матрица плотности (вернее, ее недиагональные элементы) не обращаются в нуль при  $R \rightarrow \infty$ . Не говоря уже о том, что утверждение о невозможности одномерной сверхпроводимости из-за отсутствия дальнего порядка не было никем доказано строго, следует отметить, что в одномерных системах могут существовать метастабильные состояния с отличным от нуля током. Хотя фазовые переходы при  $T \neq 0$  в одномерных системах невозможны, и эти метастабильные состояния не являются состояниями с дальним порядком, однако время их жизни может оказаться очень большим: состояния с отличным от нуля током и бестоковые состояния разделены высокими активационными барьерами, и вероятность перехода из первого состояния во второе, как показывают соответствующие расчеты [12], очень мала.

К настоящему времени имеются два основных подхода к проблеме вычисления корреляционных функций. В работе [13] было высказано предположение о том, что поведение корреляционных функций одномерных ферми-систем, которые и будут рассматриваться ниже, на больших расстояниях определяется длинноволновыми бесщелевыми возбуждениями звукового характера (именно они, кстати, и ответственны за нарушение дальнего порядка). Учитывая только такие возбуждения и пренебрегая всеми другими, удается найти явный вид корреляционных функций.

Другой подход к проблеме вычисления корреляторов связан с линеаризацией квадратичного спектра фермионов, т. е. с заменой  $k^2/2m$  на  $v_F k$  ( $m$  — масса фермиона,  $v_F$  — фермиевская скорость) и введением двух сортов частиц — при  $k=k_F$  и при  $k=-k_F$  ( $k_F$  — импульс Ферми, связанный с плотностью частиц  $\rho$  соотношением  $k_F = \pi\rho$ ). В рамках полученной таким образом «линейной модели» соответствующие вычисления удается провести точно [14—16].

Найденные с помощью этих двух подходов корреляционные функции качественно совпадают; их характерными особенностями являются спад по степенному закону на больших расстояниях и непрерывная зависимость соответствующих критических индексов от константы электрон-электронного взаимодействия. При оценке обоих подходов необходимо отметить следующее: гипотеза об определяющей роли звуковых возбуждений не является строго обоснованной. Более того, как будет показано дальше, асимптотическое поведение парной корреляционной функции может определяться особенностями структурного фактора  $S(k)$  при  $k=2k_F, 4k_F$  и т. д. и, следовательно, не быть связанным с возбуждениями звукового типа. Что же касается подхода, использующего линеаризацию квадратичного спектра фермионов, то наиболее серьезным его недостат-

ком является отсутствие необходимой симметрии полной волновой функции системы, связанное с введением двух сортов частиц, которое не может быть оправдано, например, в смысле разложения различных физических величин по малой константе взаимодействия.

Как видно из сказанного выше, оба подхода базируются на хотя и правдоподобных, но труднодоказуемых предположениях. В нашей работе по расчету корреляционных функций [17] развита своеобразная теория возмущений, где в качестве нулевого приближения используется невзаимодействующий ферми-газ, причем нахождение поправок к корреляционным функциям представляет собой регулярную процедуру. Суть предложенного нами метода заключается в следующем. Рассмотрим одномерную систему из  $N$  частиц, для простоты бесспиновых, на отрезке  $[0, L]$ . Гамильтониан этой континуальной модели ферми-газа имеет вид:

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + g \sum_{i \neq j}^N V(x_i - x_j) \quad (1)$$

Здесь  $V(x)$  — потенциал взаимодействия, который предполагается произвольным,  $g$  — константа взаимодействия. Как уже говорилось ранее, основная трудность, возникающая при вычислении корреляторов, состоит в том, что неизвестен вид волновых функций этой системы. Мы исходили из следующего представления для волновой функции основного состояния:

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \Psi_0(x_1, \dots, x_N) \cdot \exp[\Phi(x_1, \dots, x_N)] \quad (2)$$

Здесь  $\Psi_0$  — волновая функция системы без взаимодействия (детерминант Слейтера), являющаяся антисимметричной относительно перестановки координат частиц, а  $\Phi(x_1, \dots, x_N)$  — симметричная функция.

Подстановка  $\Psi$  в уравнение Шредингера приводит к уравнению для  $\Phi$ . Поскольку функция  $\Phi$  является симметричной, соответствующее уравнение представляет собой по существу гамильтониан бозе-частиц. Такая «бозонизация» ферми-задачи имеет ряд интересных следствий, на которых мы здесь останавливаться не будем. Оказывается, что  $\Phi$  имеет следующий вид:

$$\Phi = \sum_{i,j} \Phi_2(x_i - x_j) + \sum_{i,j,l} \Phi_3(x_i - x_j, x_j - x_l) + \dots \quad (3)$$

т. е. представляет собой разложение по двух-, трех- и т. д. частичным функциям. Обнаружено также, и это является чрезвычайно важным обстоятельством, что основную роль в определении корреляционных свойств системы играет двухчастичная функция  $\Phi_2(x)$ . Более того, асимптотика корреляторов на больших расстояниях определяется асимптотикой фурье-образа  $\Phi_2(x)$  — функции  $\sigma_2(k)$  при  $k \rightarrow 0$ .

Таким образом, показано, что детальная информация о волновой функции не является необходимой для определения наиболее существенных корреляционных свойств системы, и задача получения корреляторов сводится к нахождению асимптотики функции  $\sigma_2(k)$  и последующему вычислению соответствующих средних величин. Хотя каждая из этих задач является довольно сложной, все же они значительно проще исходной. Как показывают наши расчеты [18], асимптотическая зависимость функции  $\sigma_2(k)$  при  $k \rightarrow 0$  имеет вид:

$$\sigma_2(k) = \pi(c_0 - c)/2c_0 |k| \quad (4)$$

где  $c$  и  $c_0$  — скорости звука в системе с взаимодействием и в системе с  $V(x) = 0$  соответственно. Напомним, что скорость звука входит в выражение для энергии возбуждения:  $\epsilon(k) = c|k|$  при  $k \rightarrow 0$ . Определенная таким образом скорость звука совпадает с найденной из термодинамических соображений.

Рассмотрим теперь матрицу плотности  $\rho(R)$ . Для ее вычисления был разработан специальный диаграммный метод [17], позволивший найти

вид асимптотической зависимости  $\rho(R)$  при больших значениях  $R$ . Оказывается, что

$$\rho(R) = \sin(k_F R) / (\pi R k_F)^\kappa; \quad \kappa = (c_0^2 + c^2) / 2cc_0 \quad (5)$$

Поскольку  $c = c(g)$ , критический индекс  $\kappa$  меняется непрерывным образом в зависимости от  $g$ . Такое поведение  $\kappa$  является вообще характерным для одномерных квантовых систем. Как уже упоминалось ранее, фурье-образ  $\rho(R)$  — функция  $n(k)$  — является функцией распределения частиц по импульсам. Наиболее интересной особенностью функции  $n(k)$  является отсутствие скачка при  $k = k_F$ :

$$n(k) = \frac{1}{2} \{1 + \text{sign}(k_F - k) |k - k_F|^{\kappa-1}\}; \quad \kappa - 1 = (c - c_0)^2 / 2cc_0 \quad (6)$$

Скачок в распределении частиц по импульсам отсутствует уже при сколь угодно малых значениях  $g$ , чем одномерные системы резко отличаются от трехмерного поведения. Как было показано авторами работ [19, 20], в трехмерном случае при  $g \neq 0$  скачок сохраняется, хотя и не равен 1.

Качественно подобные результаты были получены и в рамках линейной модели [8]. Следует заметить, однако, что критический индекс  $\kappa$  в линейной модели имеет другое значение, причем для некоторых потенциалов взаимодействия, в частности  $\delta$ -образного, линейная модель дает неправильное значение  $\kappa$  даже при  $g \rightarrow 0$ .

Остановимся теперь на рассмотрении другого коррелятора — парной корреляционной функции  $G(R, t)$  и ее фурье-образа — функции  $S(k, \omega)$ . Рассмотрение этого коррелятора удобно начать с изучения некоторого предельного случая: сильного отталкивания между электронами. В этом случае интересующий нас коррелятор может быть вычислен точно. Такое рассмотрение, во-первых, позволяет провести сравнение с результатами, полученными в рамках линейной модели, и, во-вторых, оказывается весьма полезным для определения вида парной корреляционной функции при произвольных значениях константы взаимодействия.

Будем рассматривать системы, определяемые гамильтонианом (1). Фигурирующий в нем потенциал  $V(x)$  может быть, например, степенной функцией или иметь вид  $V(x) = \exp(-\gamma|x|)$  ( $\gamma^{-1}$  — радиус взаимодействия). Возможность точного рассмотрения такой системы при  $g \rightarrow \infty$  и достаточно низких температурах связана с хорошо известным фактом — образованием вигнеровского кристалла с постоянной решетки  $a = 1/\rho = L/N$  [18]. Производя замены переменных

$$x_n = na + \xi_n$$

и разлагая потенциальную энергию до членов, квадратичных по  $\xi_n$ , получим гамильтониан системы гармонических осцилляторов с дальноводством, который обычным образом сводится к гамильтониану системы невзаимодействующих фононов.

Их спектр определяет энергию элементарных возбуждений ферми-газа. Эти возбуждения (рис. 1) имеют звуковой характер при малых значениях импульса ( $q \rightarrow 0$ ):

$$\omega(q) = c|q|; \quad c = a \left( 2g \sum_{n=1}^{\infty} V''(na) n^2 \right)^{1/2} \quad (7)$$

и периодичны с периодом  $2k_F$ , что является вообще характерным для одномерных систем.

Что касается волновых функций исходной системы, то в этом пределе (при  $g \rightarrow \infty$ ) они сводятся к хорошо известным осцилляторным функциям, а вычисление  $G(R, t)$  сводится к взятию гауссовых интегралов. Выражение для  $G(R, t)$  имеет довольно громоздкий вид [18] и здесь приводиться не будет. Рассмотрим некоторые частные случаи этой формулы. При  $t = 0$  и  $T = 0$  функция  $h(R) = G(R, 0) - \rho^2$  имеет вид:

$$h(R) = 2\rho^2 \sum_{s=1}^{\infty} \cos(2k_F s R) (R_0)^{-3/4 s^2}; \quad \mu = 2k_F / c \quad (8)$$

Асимптотическое поведение этого коррелятора при  $R \rightarrow \infty$  определяется первым членом этой суммы (при  $s=1$ )

$$h(R) = 2\rho^2 \cos(2k_F R) \cdot (R\rho)^{-2\mu} \quad (9)$$

т. е. критический индекс  $\alpha = 4k_F/c$ . Как видно из формулы (9), при  $T = 0$  значение  $h(R)$  падает с расстоянием по степенному закону, причем показатель степени зависит от  $g$ . Оказывается, что при  $T \neq 0$  функция  $h(R)$  уменьшается по экспоненциальному закону, и радиус корреляции  $\sim T^{-1}$ .

Рис. 1. Спектр элементарных возбуждений одномерного ферми-газа

Рис. 2. Зависимость  $S(k, \omega)$  от  $\omega$  при фиксированном значении  $k$ . Сплошная кривая  $T=0$ , штриховая кривая  $T \neq 0$

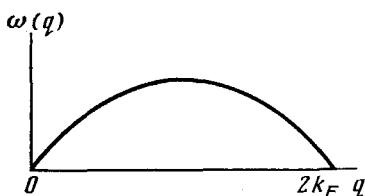


Рис. 1

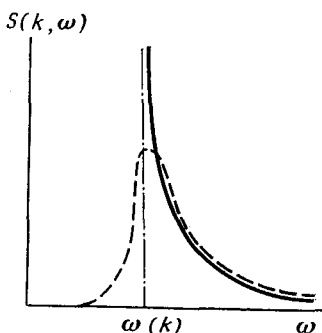


Рис. 2

Отметим в связи с формулой для  $h(R)$  следующее обстоятельство. Как уже упоминалось ранее, для некоторых специальных потенциалов  $V(x)$  и некоторых частных значений  $g$  коррелятор  $h(R)$  был вычислен точно (речь здесь идет о модели с потенциалом взаимодействия  $V(x) = x^{-2}$  — так называемой модели Сазерленда [21—24]). Известна для этих специальных случаев и скорость звука  $c$ . Если подставить эти значения  $c$  в формулу (9) для  $h(R)$ , то окажется, что она совпадает со всеми известными точными ответами. Кроме того,  $h(R)$  может быть вычислена в пределе малых  $g$  с помощью метода, использованного нами при вычислении матрицы плотности. Соответствующее сравнение [19] показывает, что формула для  $h(R)$  справедлива и в этом случае. Эти факты позволяют предположить, что выражение для  $h(R)$  справедливо при всех  $g > 0$  и  $T=0$ , если фигурирующая в этой формуле скорость  $c$  является точной скоростью звука.

Таким образом, асимптотическое поведение как  $h(R)$ , так и  $\rho(R)$  известны, если известна скорость звука  $c$ . Задача вычисления  $c$  является значительно более простой, чем задача вычисления корреляторов, поскольку  $c$  является, так сказать, энергетическим параметром системы, для вычисления которого существуют методы, дающие хорошее приближение. Кроме того, для ряда моделей величина  $c$  известна точно. При изменении  $g$  от 0 до  $\infty$  значение  $\alpha$  меняется от 2 до 0. Интересно сравнить полученное выражение для  $h(R)$  с соответствующим выражением для линейной модели. Последнее также описывает степенное падение коррелятора при  $R \rightarrow \infty$ , но с другим показателем степени, который совпадает с найденным нами лишь при малых  $g$ .

Фурье образ  $G(R, t)$  — динамический структурный фактор  $S(k, \omega)$  — определяет вероятность рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей. На рис. 2 показан график  $S(k, \omega)$  как функция  $\omega$  при фиксированном значении  $k$ . Как видно из рис. 2, функция  $S(k, \omega)$  имеет особенность при  $\omega \rightarrow \omega(k)$  для всех  $g > 0$  при фиксированном  $k$ , ( $S(k, \omega)|_{g=0} = \text{const}$ ), причем эта особенность подчиняется степенной зависимости с показателем  $1 - \alpha/2$ . При  $T \neq 0$  особенность сглаживается, и  $S(k, \omega)$  имеет максимум при  $\omega = \omega(k)$  (штриховая кривая на рис. 2).

Представляет интерес рассмотреть коррелятор  $S(k)$  — статический структурный фактор, определяющий вероятность упругого рассеяния рентгеновских лучей и являющийся фурье-образом коррелятора  $h(R)$ .

На рис. 3 и 4 изображены графики функции  $S(k)$  при  $T=0$  и при  $T \neq 0$  соответственно для некоторых значений  $g$  в модели Сазерленда. При  $T=0$  функция  $S(k)$  расходится степенным образом при  $k \rightarrow 2k_F n$ , и справедливо выражение:  $S(k) = |k - 2k_F n|^{\alpha n^2 - 1}$ . Количество пиков, т. е. количество  $n$  точек, при которых имеется расходимость функции, удовлетворяет неравенству:  $c > 4k_F n^2$ , т. е. с увеличением  $g$  число пиков возрастает. Отметим также, что ведущий член асимптотики функции  $h(R)$  определяется особенностью  $S(k)$  при  $k = 2k_F$ . Особенности  $S(k)$  при

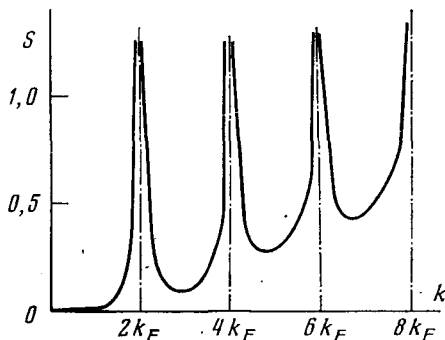


Рис. 3

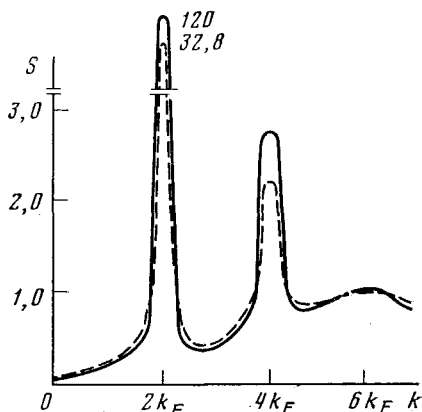


Рис. 4

Рис. 3. Зависимость  $S(k)$  в модели Сазерленда для  $g = 2 \cdot 10^4$  и  $T = 0$  [18]

Рис. 4. Зависимость  $S(k)$  в модели Сазерленда для  $g = 200$ . Сплошная кривая —  $k_B T / \rho^2 = 3/5$ , штриховая кривая —  $k_B T / \rho^2 = 3$ . Цифрами на рисунке указаны высоты пиков при  $k = 2k_F$  [18]

$k = \pm 4k_F, \pm 6k_F$  и т. д. соответствуют следующим членам разложения ( $s = 2, 3$  и т. д.) в формуле (8). Следует отметить, что особенности функции  $S(k)$  при  $k = \pm 2k_F n$  с  $n \geq 2$  в линейной модели оказываются «потерянными». При  $T \neq 0$  особенности функции  $S(k)$  сглаживаются, и значение  $S(k)$  конечно при всех  $k$ , причем

$$S(0) = 2k_B T / c^2; \quad S(2k_F n) = \text{cth}(2\pi^2 n^2 k_B T / c^2) \quad (10)$$

С ростом температуры высоты пиков уменьшаются. Показано, что зависимость  $S(k)$ , изображенная на рис. 4, характерна не только для низких температур, когда справедливо наше рассмотрение, но и в высокотемпературном пределе, где может быть использовано классическое приближение. Соответствующие расчеты [25, 26] показывают, что функция  $S(k)$  имеет максимумы при  $k = 2k_F n$ , и с ростом  $n$  высота пиков уменьшается. Эти расчеты были использованы для объяснения экспериментальных данных работы [26] по диффузному рассеянию рентгеновских лучей линейными цепочками атомов ртути в квазиодномерной системе  $\text{Hg}_{3-6}\text{AsF}_6$ . Полученная экспериментально зависимость  $S(k)$  подобна изображенной на рис. 4 и находится в хорошем согласии с вычисленной в работах [25, 26]. Как следует из выражений для  $h(R)$  и  $S(k)$ , со структурной точки зрения взаимодействующий ферми-газ близок скорее к одномерному твердому телу, чем к жидкости.

Сформулируем основной вывод, следующий из проведенного выше рассмотрения корреляторов одномерного взаимодействующего ферми-газа. Корреляционные функции на больших расстояниях при  $T = 0$  падают по степенному закону, причем показатель степени простым образом выражается через скорость звука. Для вычисления скорости звука существуют хорошо разработанные методы, для ряда моделей эта скорость известна точно. Что касается методов расчета корреляторов, основанных либо на сведении к линейной модели, либо на использовании гипотезы о преобладающем влиянии звуковых возбудений на форми-

рование особенностей корреляторов, то оба эти метода, предсказывая функционально правильные зависимости асимптотик корреляторов, для вычисления критических индексов оказываются корректными лишь при малых  $g$ ; по-видимому, только в этой области значений  $g$  и справедлива описанная выше процедура линеаризации.

Сравнительно недавно автором работы [27] был предложен еще один подход к проблеме вычисления корреляторов. Основываясь на предположениях, близких по существу к гипотезе авторов работы [13], он свел задачу к осцилляторной и получил для корреляторов выражения, идентичные нашим.

### III. РЕШЕТОЧНЫЙ ФЕРМИ-ГАЗ

До сих пор наше рассмотрение относилось к континуальной модели одномерного ферми-газа. Более реалистичной модельной системой является решеточный ферми-газ. Эта модель описывает систему  $N$  взаимодействующих электронов, которые находятся на  $M$  центрах, при  $N \rightarrow \infty$  и  $M \rightarrow \infty$ , так что  $N/M = \rho$ . Континуальная и решеточная модели имеют много общего как с точки зрения электронного строения, так и с точки зрения поведения корреляторов. Так, в частности, коррелятор  $\rho(R)$  для решеточного ферми-газа может быть вычислен аналогично континуальному случаю, и соответствующий расчет [28] указывает на размытие ступеньки в распределении Ферми при сколь угодно слабом взаимодействии, а критический индекс  $\kappa$  при  $g \ll 1$  равен:

$$\kappa = 1 + g^2 v^2(0) / 32\pi^2 \beta^2 \sin^2(\pi\rho/2)$$

где  $v(q)$  — фурье-образ функции  $V(x)$ , ( $v(0) = v(q=0)$ ),  $\beta$  — резонансный интеграл.

Вместе с тем, решеточные системы обладают целым рядом особенностей. Так, например, в отличие от континуальных моделей, где спектр элементарных возбуждений бесщелевой, решеточные системы могут иметь щель. Наконец, при определенных значениях параметров в решеточных системах имеется дальний порядок при  $T=0$ .

Рассмотрим простейшую, но весьма нетривиальную решеточную модель — бесспиновый ферми-газ с взаимодействием ближайших соседей. Его гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = -\beta \sum_{n=1}^N (a_n^+ a_{n+1} + a_{n+1}^+ a_n) + g \sum_{n=1}^N a_n^+ a_{n+1}^+ a_{n+1} a_n; \quad \rho = 1/2; \quad g > 0 \quad (11)$$

( $a_n^+$  и  $a_n$  — операторы рождения и уничтожения фермионов на  $n$ -м центре). Эта система интересна еще и потому, что эквивалентна анизотропной антиферромагнитной модели Гейзенберга. Понятие «эквивалентна» математически означает, что существует каноническое преобразование [29], переводящее ферми-операторы в спиновые, так что выражение (11) переходит в гамильтониан модели Гейзенберга.

Интересной особенностью этой системы является наличие щели в спектре элементарных возбуждений при  $g > 2\beta$  [30, 31]. При  $g > 2\beta$  в системе имеется дальний порядок, т. е. коррелятор  $h(R)$  при  $R \rightarrow \infty$  стремится к конечному пределу, зависящему от отношения  $g/\beta$ . Для магнитных систем это означает, что имеется ненулевая намагниченность подрешеток. Асимптотика  $h(R)$  отличается от своего предельного значения, впервые вычисленного Бакстером [32], на экспоненциально малую величину. При  $g < 2\beta$  спектр системы не имеет щели, и дальнего порядка нет [30, 31]. Если изменять, например,  $\beta$ , то при  $\beta = g/2$  в системе произойдет переход металл — диэлектрик, причем щель и дальний порядок исчезают в точке перехода.

К сожалению, строгих расчетов парной корреляционной функции в металлической фазе нет, и в настоящее время имеются лишь приближенные выражения для этого коррелятора. Эти приближенные выражения были получены в работах [33—35] на основании следующих



соображений. Спектр элементарных возбуждений системы при  $g < 2\beta$  имеет вид, показанный на рис. 5 [36]. Заштрихованная область носит название двухпараметрического континуума, ограниченного сверху и снизу соответственно кривыми  $\epsilon_2(k)$  и  $\epsilon_1(k)$ , которые, например, при  $g = 2\beta$  описываются выражениями:

$$\epsilon_2(k) = \pi g |\sin(k/2)|; \quad \epsilon_1(k) = (\pi g/2) |\sin k|$$

Около треугольников на рис. 5 приведены величины  $S(k, \omega)$  для соответствующих  $k$  и  $\omega$ , полученные [33] в расчетах для систем с конечным значением  $N = 10$ . Эти расчеты показывают, что для состояний, лежащих

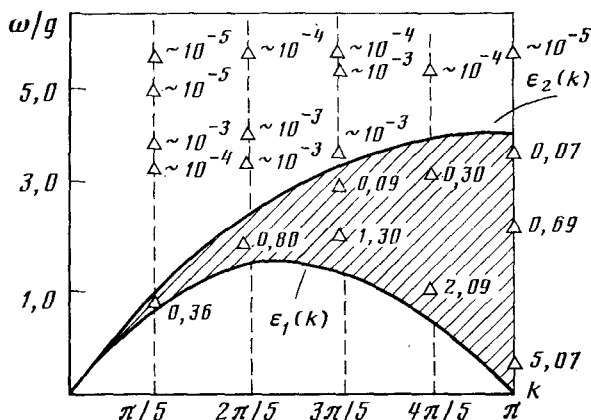


Рис. 5. Спектр возбуждений решеточного ферми-газа и значения  $S(k, \omega)$  для  $N = 10$  [33]

выше двухпараметрического континуума, значения  $S(k, \omega)$  по крайней мере на порядок меньше, чем для состояний внутри континуума. Полагая, что при  $N \rightarrow \infty$  высшие состояния не дают вклада, авторы упомянутых работ предложили для  $S(k, \omega)$  выражение:

$$S(k, \omega) = A \theta[\omega - \epsilon_1(k)] \theta[\epsilon_2(k) - \omega] \cdot [\omega^2 - \epsilon_1^2(k)]^{-\lambda_1} [\epsilon_2^2(k) - \omega^2]^{-\lambda_2}$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}$$

Здесь  $A$  — постоянная, а показатели  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  выбираются на основании некоторых соображений (например, при  $g = 2\beta$   $\lambda_1 = 1/2$ ;  $\lambda_2 = 0$ ). Полученное таким образом приближенное выражение для  $S(k, \omega)$  функционально похоже на соответствующее выражение для континуальной модели, что указывает на ее близость к решеточной модели в металлической фазе.

#### IV. ПРИМЕРЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ

Проиллюстрируем изложенный выше материал двумя примерами использования корреляционных функций: 1) для интерпретации экспериментальных данных по неупругому рассеянию нейтронов на одномерной системе; 2) для оценок критической температуры фазовых переходов в квазиодномерных системах.

1) Наиболее чистые эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов на одномерных системах рассмотренного типа были выполнены на одномерном антиферромагнетике СРС ( $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{N}(\text{C}_5\text{D}_5)$ ) [37, 38]. Как уже упоминалось ранее, одномерный антиферромагнетик эквивалентен одномерному решеточному ферми-газу с отталкиванием между частицами. Экспериментальные данные по измерению сечения неупругого рассеяния нейтронов на СРС приведены на рис. 6а. Видно, что с понижением температуры форма линии становится все более асимметричной, а интенсивность в максимуме растет. Поначалу даже предполагалось

[37], что такая асимметрия представляет собой аппаратный эффект, однако более поздние эксперименты [38] подтвердили ее наличие. Этот эффект находит простое объяснение, если принять во внимание температурную зависимость  $S(k, \omega)$ , полученную теоретически (см. рис. 2), и связан с особенностями функции  $S(k, \omega)$  при  $\omega = \omega(k)$ .

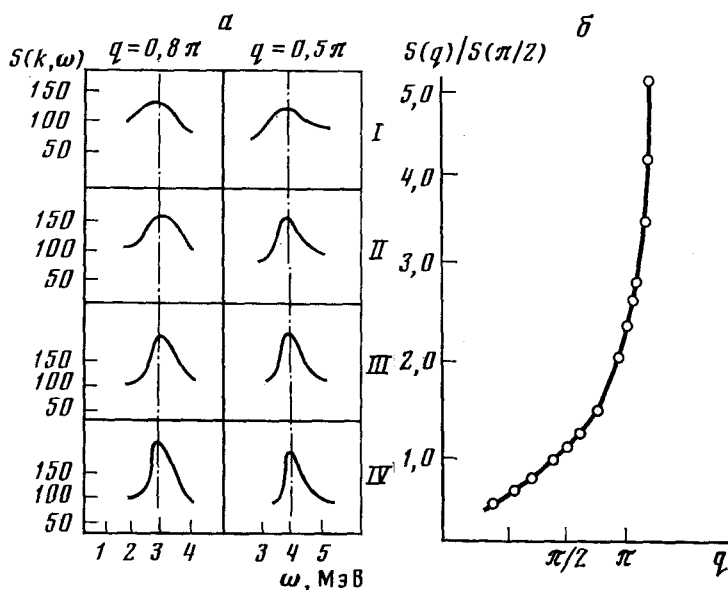


Рис. 6. *a* — Сечение неупругого рассеяния нейтронов на СРС в относительных единицах для двух значений  $q$ ; *б* — интегральная интенсивность рассеяния: I —  $T=8,0$  К, II —  $T=4,0$  К, III —  $T=2,0$  К, IV —  $T=1,3$  К [37, 38]

Экспериментально наблюдаемая интегральная интенсивность рассеяния при  $T=1,3$  К, изображенная на рис. 6б, указывает на сингулярное поведение функции  $S(k)$  при  $k \rightarrow 2k_F$  (в данном случае  $k_F = \pi/2$ ) и находится в хорошем согласии с зависимостью, полученной теоретически в [33].

2) Оценка критической температуры перехода в квазиодномерных системах. Как уже отмечалось ранее, в одномерных системах дальний порядок отсутствует при  $T \neq 0$  (в решеточных системах, обсуждавшихся нами, он существует лишь при  $T=0$ ). Вместе с тем, реально всегда существует хотя и малое, но отличное от нуля поперечное взаимодействие между одномерными системами (нитями). Наличие этого взаимодействия приводит к тому, что при низких температурах квазиодномерные системы являются, по существу, трехмерными, и в них имеется дальний порядок, исчезающий при  $T=T_{кр}$ .

Покажем, как, зная одномерные корреляторы, можно оценить  $T_{кр}$ . Для иллюстрации этого рассмотрим тривиальный, но очень наглядный пример [39] двумерной системы ферромагнитных изинговых цепочек со слабым поперечным взаимодействием. Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\hat{H} = -J_{\parallel} \sum_{i,m} S_{i,m}^z S_{i+1,m}^z - J_{\perp} \sum_{i,m} S_{i,m}^z S_{i,m+1}^z; \quad J_{\parallel} > 0; \quad J_{\perp} > 0 \quad (12)$$

где  $J_{\parallel}$  и  $J_{\perp}$  — обменные интегралы взаимодействия ближайших соседей вдоль цепочек и в перпендикулярном направлении,  $S_{i,m}^z$  — оператор  $z$ -компоненты спина на узле с номером  $(i, m)$ .

Воспользуемся приближением самосогласованного поля и заменим во втором члене один из операторов его средним значением  $\langle S^z \rangle$ :

$$\hat{H} = -J_{\parallel} \sum_{i,m} S_{i,m}^z S_{i+1,m}^z - 2J_{\perp} \langle S^z \rangle \sum_{i,m} S_{i,m}^z \quad (13)$$

Условие самосогласования имеет вид:

$$\langle S^z \rangle = \text{Sp } S_{i,m}^z \exp(-\hat{H}/k_B T) / \text{Sp } \exp(-\hat{H}/k_B T) \quad (14)$$

При  $T \rightarrow T_{\text{кр}}$  имеем  $\langle S^z \rangle \rightarrow 0$  и, разлагая правую часть последнего равенства в ряд по  $\langle S^z \rangle$ , получим уравнение для определения  $T_{\text{кр}}$ :

$$k_B T_{\text{кр}} = 2J_{\perp} \sum_n \langle S_0^z S_n^z \rangle \quad (15)$$

В это уравнение входит одномерная корреляционная функция  $\langle S_0^z S_n^z \rangle$ . Таким образом, зная одномерный коррелятор  $\langle S_0^z S_n^z \rangle = \text{th}^{|\eta|}(J_{\parallel}/4k_B T)/4$ , можно путем решения уравнения (15) вычислить  $T_{\text{кр}}$ :

$$k_B T_{\text{кр}} = 2J_{\parallel} / \ln(J_{\parallel}/J_{\perp})$$

Точное значение  $T_{\text{кр}}$ , известное из решения Онзагера, определяется выражением:

$$k_B T_{\text{кр}} = 2J_{\parallel} / \ln(2J_{\parallel}/J_{\perp})$$

Нетрудно обобщить указанные вычисления и на другие, более сложные системы [13, 40, 41]. Например, вполне аналогично предыдущему может быть оценена  $T_{\text{кр}}$  и для решеточного трехмерного газа со слабым поперечным взаимодействием [41]:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_1; \quad \hat{H}_0 = -\beta \sum_{i,m} (a_{i,m}^{\dagger} a_{i+1,m} + a_{i+1,m}^{\dagger} a_{i,m}) + \\ &+ g_{\parallel} \sum_{i,m} a_{i,m}^{\dagger} a_{i,m} a_{i+1,m}^{\dagger} a_{i+1,m}; \quad \hat{H}_1 = g_{\perp} \sum_{i,m} a_{i,m}^{\dagger} a_{i,m} a_{i,m+1}^{\dagger} a_{i,m+1} \end{aligned}$$

Индекс  $i$  нумерует узлы вдоль нити,  $m$  — узлы в перпендикулярных направлениях. При  $T < T_{\text{кр}}$  реализуется фаза с дальним порядком (так называемая фаза с волной зарядовой плотности); в этой фазе проявляются трехмерные эффекты, а при  $T > T_{\text{кр}}$  система, по существу, одномерна.

Используя приближение самосогласованного поля и записывая условие самосогласования, придем к уравнению:

$$1 = 2v \int_0^{(k_B T_{\text{кр}})^{-1}} d\tau \sum_n (-1)^n G(n, \tau)$$

Здесь  $v$  — число ближайших нитей,  $G(n, \tau)$  — одномерная парная корреляционная функция с мнимым временем. Как и в предыдущем случае, для определения  $T_{\text{кр}}$  необходимо знать чисто одномерную корреляционную функцию. Более сложный вид уравнения для  $T_{\text{кр}}$  по сравнению с моделью Изинга объясняется тем фактом, что  $\hat{H}_0$  и  $\hat{H}_1$  в данной модели не коммутируют в отличие от изинговского случая. Для  $T_{\text{кр}}$  из приведенного выше уравнения получим:

$$k_B T_{\text{кр}} = C g_{\perp}; \quad C \sim 1$$

Интересно сравнить две рассмотренные модели с такой точкой зрения: модель Изинга является предельным случаем решеточной модели при  $g \gg \beta$ , т. е. она в известной степени моделирует решеточный ферми-газ в диэлектрической (при  $T=0$ ) фазе, о которой шла речь ранее. Таким образом, два рассмотренных нами примера описывают трехмерное упорядочение нитей, находящихся или в диэлектрической, или в металлической (при  $T=0$ ) фазах. Сравнение соответствующих выражений для  $T_{\text{кр}}$  показывает, что температура перехода для нитей, находящихся в диэлектрической фазе, значительно выше.

Следует отметить, что описанный выше самосогласованный метод позволяет также находить приближенные выражения для квазиодномерных корреляционных функций в упорядоченной (трехмерной) фазе.

# ЛИТЕРАТУРА

1. Хидекель М. Л., Жилева Е. И. ЖВХО им. Д. И. Менделеева, 1978, т. 23, с. 506.
2. Park Y.-W., Heeger A. J., Druy M. A., MacDiarmid A. G. J. Chem. Phys., 1980, v. 73, p. 946.
3. Овчинников А. А., Украинский И. И., Квенцель Г. Ф. Успехи физ. наук, 1972, т. 108, с. 81.
4. Bonner J. C., Fisher M. E. Phys. Rev., 1964, v. 135, p. 640.
5. Булаевский Л. Н. Успехи физ. наук, 1975, т. 115, с. 263.
6. Shirane G., Shapiro S. M., Comes R., Garito A. F., Heeger A. J. Phys. Rev., B, 1976, v. 14, p. 2325.
7. Comes R., Shirane S. M., Garito A. F., Heeger A. J. Phys. Rev. Letters, 1975, v. 35, p. 1518.
8. Mattis D. C., Lieb E. H. J. Math. Phys., 1965, v. 6, p. 304.
9. Vaidya H. G., Tracy C. A. Phys. Rev. Letters, 1979, v. 42, p. 3.
10. Mathematical Physics in One Dimension. Ed. Lieb E. H., Mattis D. C. New York: Acad. Press, 1966.
11. Hove L. van. Phys. Rev., 1954, v. 95, p. 249.
12. Сохин Э. Б. Успехи физ. наук, 1982, т. 137, с. 267.
13. Ефетов К. Б., Ларкин А. И. Ж. эксперим. и теор. физики, 1975, т. 69, с. 764.
14. Luther A., Emery V. J. Phys. Rev. Letters, 1974, v. 33, p. 589.
15. Luther A., Peschel I. Phys. Rev., B, 1974, v. 9, p. 2911.
16. Luther A., Peschel I. Ibid., 1975, v. 12, p. 3908.
17. Кривнов В. Я., Овчинников А. А. Ж. эксперим. теор. физики, 1979, т. 76, с. 654.
18. Кривнов В. Я., Овчинников А. А. Там же, 1982, т. 82, с. 271.
19. Мугдал А. Б. Там же, 1957, т. 32, с. 399.
20. Luttinger J. M. Phys. Rev., 1960, v. 119, p. 1153.
21. Sutherland B. J. Math. Phys., 1971, v. 12, p. 246.
22. Sutherland B. Phys. Rev. A, 1971, v. 4, p. 2019.
23. Sutherland B. Ibid., 1972, v. 5, p. 1372.
24. Кривнов В. Я., Овчинников А. А. Теор. мат. физика, 1982, т. 50, с. 155.
25. Emery V. J., Axe J. D. Phys. Rev. Letters, 1978, v. 40, № 23, p. 1507.
26. Spal R., Chen C.-E., Egami T., Nigrey P. J., Heeger A. J. Phys. Rev. B, 1980, v. 21, p. 3110.
27. Haldane F. D. M. Phys. Rev. Letters, 1981, v. 47, p. 840.
28. Кривнов В. Я., Овчинников А. А. Теор. мат. физика, 1981, т. 47, с. 96. p. 3110.
29. Lieb E. H., Schultz T. D., Mattis D. C. Ann. Phys., 1961, v. 16, p. 407.
30. Cloizeaux J., Gaudin M. J. Math. Phys., 1966, v. 7, p. 1384.
31. Yang C. N., Yang C. P. Phys. Rev., 1966, v. 150, p. 327.
32. Baxter R. J. J. Phys. C., 1973, v. 6, p. L94.
33. Müller G., Thomas H., Beck H., Bonner J. C. Phys. Rev., B, 1981, v. 24, p. 1429.
34. Müller G., Thomas H., Puga M. W., Beck H. J. Phys. C., 1981, v. 14, p. 3399.
35. Müller G. Phys. Rev., 1982, v. 26, p. 1311.
36. Johnson J. D., McCoy B. M. Phys. Rev., A, 1972, v. 6, p. 1613.
37. Endoh Y., Schirane G., Birgenau R. J., Richards P. M., Holt S. L. Phys. Rev. Letters, 1974, v. 32, p. 170.
38. Heilman I. U., Schirane G., Endoh Y., Birgenau R. U., Holt S. L. Phys. Rev. B, 1978, v. 18, p. 3530.
39. Scalapino D. J., Imry Y., Pincus P. Ibid., B, 1975, v. 11, p. 2042.
40. Scalapino D. J., Imry Y., Pincus P. Ibid., B, 1975, v. 12, p. 1978.
41. Fowler M. Phys. Rev., B, 1978, v. 17, p. 2989.

Институт химической физики  
АН СССР, Москва