ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, № 2 (1997) с. 251–256

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 2 (1997) p. 251–256

ЕКРАНОВАНА МІЖЕЛЕКТРОННА ВЗАЄМОДІЯ В ОДНОВИМІРНОМУ КРИСТАЛІ

Б. А. Лукіянець[1], Н. К. Товстюк[2]
[1]*Державний університет "Львівська політехніка", кафедра фізики*
Україна, UA–290646, Львів, вул. С. Бандери, 12
[2]*Державний університет імені Івана Франка, кафедра фізики напівпровідників*
Україна, UA–290005, Львів, вул. Драгоманова, 50
(Отримано 1 лютого 1996)

У наближенні хаотичних фаз проаналізовано екранування потенціялу міжелектронної взаємодії для електронів з вузькою дозволеною зоною в одновимірних кристалах. Показано, що за деяких умов такий потенціял є осцилюючою знакозмінною функцією відстані між електронами, тобто залежно від відстані така взаємодія має різну природу — притягання чи відштовхування. Причому осциляційний характер одержаний в рамках прямої електрон–електронної взаємодії.

Ключові слова: екранування, одновимірний, RPA, потенціял, осциляції.

PACS number(s): 73.20.Dx, 21.60.Jz

I. ВСТУП

Одновимірні моделі (1D) природно давно ввійшли в фізику твердого тіла як такі, що дали змогу розв'язати низку її задач. Досить пригадати хоча б відому модель Кронінга–Пенні. Однак інтерес до такої моделі не обмежується лише цією обставиною — такі моделі мають низку властивих їм характеристик. Для прикладу можна навести працю [1], в якій автори показали істотне спотворення фононного спектра в одновимірній моделі кристала. Подальший пошук специфічних властивостей у подібних моделях має зміст з огляду на існування квазіодновимірних кристалічних структур — солі тетраціанхінодиметану (TCNQ), таких неорганічних солей, як платиноціаніди, низки молекулярних кристалів. Отже, теоретично отримані неординарні явища можуть стимулювати експериментальні пошуки їхніх виявів у квазіодновимірних структурах. Зворотний інтерес — коли експериментальні явища в квазіодновимірних структурах стимулюють теоретичні дослідження в рамках одновимірної моделі. Наприклад, недавній значний інтерес до електрон–фононного спарювання в одновимірних багатоелектронних системах був пов'язаний з нестабільностями в квазіодновимірних провідниках щодо динамічних та структурних змін [2].

Останнім часом 1D модель застосовують для опису явищ, пов'язаних зі стадійним упорядкуванням в інтеркальованих шаруватих кристалах — утворення різних упорядкованих структур інтеркальованих атомів в ван–дер–ваальсових щілинах шаруватого кристала [3], уздовж його оптичної осі, яка збігається з нормаллю до шарів. Наприклад, у [3] в рамках 1D–моделі проаналізовано середню величину заповнення вузлів ван–дер–ваальсової щілини, але у цьому випадку повністю іґнорують електронною підсистемою, врахування якої може суттєво вплинути на відомі висновки про впорядкування, а також виявити нові його грані.

II. РОЗРАХУНКИ

Дослідимо ефекти екранування міжелектронної взаємодії в 1D кристалі з вузькою зоною. Закон дисперсії в цьому випадку має вигляд

$$\varepsilon(k) = L_0 + \beta(1 - \cos k), \tag{2.1}$$

де L_0 — дно зони; β — інтеґрал електронного перекриття між сусідніми атомами, що дорівнює півширині дозволеної зони (стала ґратки дорівнює одиниці). Такий закон дисперсії відрізняє нашу роботу від праць, де подібні задачі розв'язували для електронів з квадратичним чи лінійним (в околі рівня Фермі) законом дисперсії [4]. Вираз (2.1) містить параболічний закон дисперсії як частковий випадок. Справді, при реальних заповненнях зони зі збільшенням її ширини до 2β ефект непараболічності закону дисперсії в околі рівня Фермі стає щораз менш суттєвим. Іншими словами, в цьому випадку $\cos k$ в (2.1) можна розкласти в ряд з точністю до k^2. Зазначимо, що (2.1) використовують, зокрема, для опису інтеркальованих стадійно впорядкованих шаруватих кристалів зі слабим ван–дер–ваальсовим зв'язком між сусідніми шарами [3].

Виберемо затравковий потенціял міжлектронної взаємодії на вузлах r_i, r_j у вигляді лоренцівської кривої

$$V_0\left(r\right) = \frac{Dc}{r^2 + D^2}, \tag{2.2}$$

де $r = |r_i - r_j|$; c — деяка константа, Дж·м; а D —

півширина такої кривої. Вибір саме такого вигляду потенціялу, а не кулонівського, зумовлений тим, що він не має синґулярності, як кулонівський при $r = 0$. Тому не буде спокуси пов'язати наведені нижче результати числових розрахунків з таким потенціялом з якимись його неаналітичностями. З іншого боку, такий вигляд потенціялу не повинен вплинути на якісний характер висновків про роль екранування у випадку електронів з вузькою дозволеною зоною.

Потенціялу (2.2) відповідає фур'є–трансформанта

$$V_0\left(q\right) = \sqrt{(\pi/2)}\exp\left(-qD\right). \tag{2.3}$$

У наближенні хаотичних фаз (RPA) екранований зонними електронами потенціял взаємодії має вигляд [5]

$$\tilde{V}\left(\mathbf{q}\right) = \frac{V_0\left(\mathbf{q}\right)}{\varepsilon\left(\mathbf{q}\right)}, \tag{2.4}$$

де

$$\varepsilon\left(\mathbf{q}\right) = 1 + \Pi\left(\mathbf{q},\Omega\right)V_0\left(\mathbf{q}\right), \tag{2.5}$$

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = \varepsilon_1(\mathbf{q}) + i\varepsilon_2(\mathbf{q})$$

діелектрична функція з

$$\varepsilon_1\left(\mathbf{q}\right) = 1 + \Re\mathrm{e}\Pi\left(\mathbf{q}\right)V_0\left(\mathbf{q}\right), \tag{2.6}$$

$$\varepsilon_2\left(\mathbf{q}\right) = \Im\mathrm{m}\Pi\left(\mathbf{q}\right)V_0\left(\mathbf{q}\right), \tag{2.7}$$

а

$$\Pi\left(\mathbf{q},\Omega\right) = i\int d\mathbf{k}\int d\omega G_0\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\omega+\frac{\Omega}{2}\right)G_0\left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\omega-\frac{\Omega}{2}\right), \tag{2.8}$$

де $\Pi(\mathbf{q},\Omega)$ — поляризаційна петля, розрахована на функціях Ґріна при $T = 0$,

$$G^0\left(\mathbf{k},\omega\right) = \left\{\omega - \varepsilon\left(\mathbf{k}\right) + \mu + i\delta\,\mathrm{sign}\left[\varepsilon\left(\mathbf{k}q\right) - \mu\right]\right\}^{-1} \tag{2.9}$$

Така поляризаційна петля проаналізована в [6, 7] для електронів у магнетному полі. Одержана при $n = n'$ (n, n' — індекси, що описують рівні Ландау), вона формально збігається з поляризаційною петлею для одновимірної моделі в екстремальному магнетному полі. Після інтеґрування за частотою методом лишків отримаємо

$$\Pi\left(q,\Omega\right) = \frac{1}{2\pi}\left[\int\limits_{\{B\}} R_2 dk - \int\limits_{\{A\}} R_1 dk\right], \tag{2.10}$$

де

$$R_\alpha^{-1} = \varepsilon\left(k-\tfrac{q}{2}\right) - \varepsilon\left(k+\tfrac{q}{2}\right) + \Omega + (-1)^\alpha i\delta,\ (\alpha = 1,2). \tag{2.11}$$

Поляризаційна петля має ненульове значення за умови

$$\{A\} \in \left\{\begin{array}{l}\varepsilon\left(k-q/2\right) > \mu\\ \varepsilon\left(k+q/2\right) < \mu\end{array}\right\} \quad \text{і/або} \quad \{B\} \in \left\{\begin{array}{l}\varepsilon\left(k-q/2\right) < \mu\\ \varepsilon\left(k+q/2\right) > \mu\end{array}\right\}. \tag{2.12}$$

Враховуючи явний вигляд $\varepsilon(k)$ в (2.11), отримаємо дійсну і уявну складові

$$\Re\mathrm{e}\Pi\left(q,\Omega\right) = -\frac{1}{2\pi}\int\limits_{\{B\}-\{A\}}\left(\Omega - b\sin k\right)^{-1}dk, \tag{2.13}$$

$$\Im\mathrm{m}\Pi\,(q,\Omega)=\frac{1}{2}\int\limits_{\{B\}+\{A\}}\delta\,(\Omega-b\sin k)\,dk, \qquad (2.14)$$

де $b=2\beta\sin(q/2)$. Інтеґрали (2.13) і (2.14) можна обчислити аналітично, але межі інтеґрування, які визначаються з умови (2.12), мають різне аналітичне зображення залежно від $Q=(\beta-\mu)/\beta$ [6]. Тому нижче ми наведемо числові розрахунки фізичних величин, пов'язаних з $\Pi(q,\Omega)$. Однак, наведемо ті висновки з [6], які випливають з аналізу аналітичного вигляду:

- $\Re\mathrm{e}\Pi\,(q)=0$ — при $|Q|>1$, тобто для повністю заповненої чи повністю порожньої зони;
- $\Re\mathrm{e}\Pi\,(q)$ має дві синґулярності при $q=2k_F$ і $q=2(\pi-k_F)$ (k_F — імпульс Фермі).

Перша з них (при $q=2k_F$) збігається з аналогічною для електронів з параболічним законом дисперсії [8]. Її фізичний вияв — це перехід Пайєрлса в одновимірній кристалічній ґратці або конівська аномалія у фононному спектрі кристалів, яка виявляється в пом'якшенні фононної моди. Отже, у цьому випадку такий ефект може бути і при $q=2(\pi-k_F)$ (слід зазначити, що така додаткова точка була пропущена в [7]).

Ці висновки використовували нижче для порівняння з результатами числових розрахунків, а отже, достовірності таких розрахунків.

Числові розрахунки були виконані в статичному і динамічному випадках. У цьому випадку $\delta(x)$ апроксимували кривою лоренцівського типу

$$\delta(x)=\frac{\gamma}{\pi(\gamma^2+x^2)}.$$

Така крива, як відомо, якщо її ширина прямує до нуля, $\gamma\to 0$, збігається з $\delta(x)$. При цьому (2.14) набуває вигляду

$$\Im\mathrm{m}\Pi\,(q,\Omega)=\frac{\gamma}{2\pi}\int\frac{dk}{\gamma^2+(\Omega-b\sin k)^2}. \qquad (2.15)$$

Зазначимо, що залежності $\Re\mathrm{e}\Pi$ і $\Im\mathrm{m}\Pi$, як функції q, аналогічні для різних μ симетричних відносно середини зони. Такий висновок можна поширити на всі фізичні характеристики, які визначаються через поляризаційну петлю (тут це дійсна і уявна складові діелектричної проникності та ефективний потенціял).

Потенціял міжелектронної взаємодії

$$\tilde V\,(r)=\int\tilde V\,(q)\cos\,(qr)\,dq \qquad (2.16)$$

визначений у статичному і динамічному випадках. Усі енергетичні параметри наведені в електрон-вольтах.

А. Статичний випадок [9]. Значення та характер $\Pi(q)$, як уже зазначено, суттєво залежать від параметра Q, тобто від ступеня заповнення зони (рис. 1, криві 1–3).

Зі збільшенням ширини зони при фіксованому μ область q, де $\Re\mathrm{e}\Pi(q)$ і $\Im\mathrm{m}\Pi(q)$ відмінні від нуля, значно звужується (рис. 1, крива 4), тому при $\beta\to\infty$, $\tilde V(r)\to V_0(r)$.

Екстремуми на графіку залежності $\varepsilon_1(q)$, $\varepsilon_2(q)$ пов'язані з синґулярностями в $\Re\mathrm{e}\Pi(q)$ і $\Im\mathrm{m}\Pi(q)$ при $q=2k_F$ і $q=2(\pi-k_F)$ (рис. 2).

На рис. 3, 4 показано потенціял міжелектронної взаємодії при різномуступені заповнення зони (для різних Q при фіксованому $\beta=0.1$):

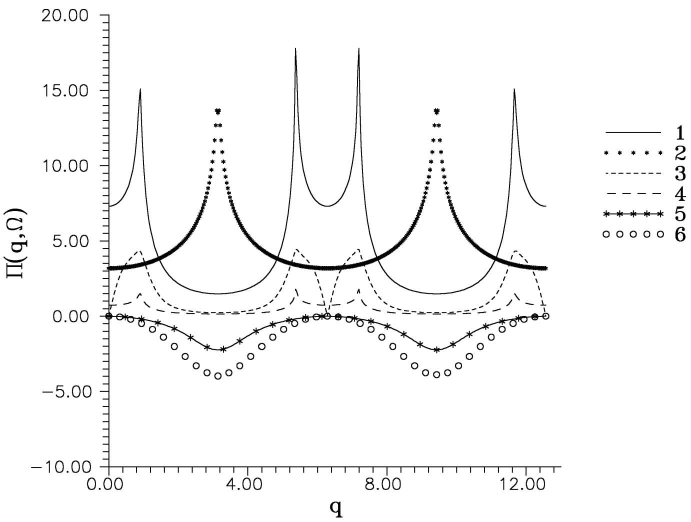

Рис. 1. Залежність $\Pi(q,\Omega)$ від q при фіксованих $\beta=0.1$ (криві 1–3, 5–6). Статичний випадок показаний кривими 1–4: 1) — $\Re\mathrm{e}\Pi(q)$ при $Q=0.9$; 2) — $\Re\mathrm{e}\Pi(q)$ при $Q=0$; 3) — $\Im\mathrm{m}\Pi(q)$ при $Q=0.9$; 4) — $\Re\mathrm{e}\Pi(q)$ при $Q=0.9$ та $\beta=10$, динамічний випадок показаний кривими 5,6; 5) — $\Re\mathrm{e}\Pi(q)$ при $Q=0.9$; 6) — $\Re\mathrm{e}\Pi(q)$ при $Q=0$.

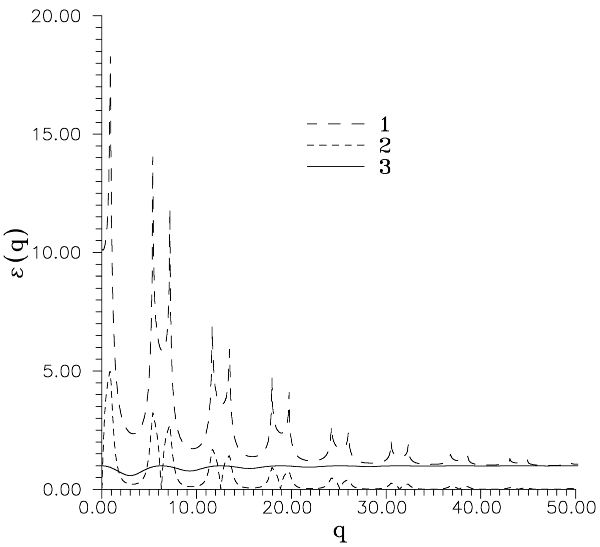

Рис. 2. Залежність діелектричної функції від q при $\beta = 0.1$, $Q = 0.9$ в статичному випадку $\varepsilon_1(q)$ (крива 1) та $\varepsilon_2(q)$ (крива 2); в динамічному випадку $\varepsilon_1(q)$ (крива 3) при $\Omega = 0.4$.

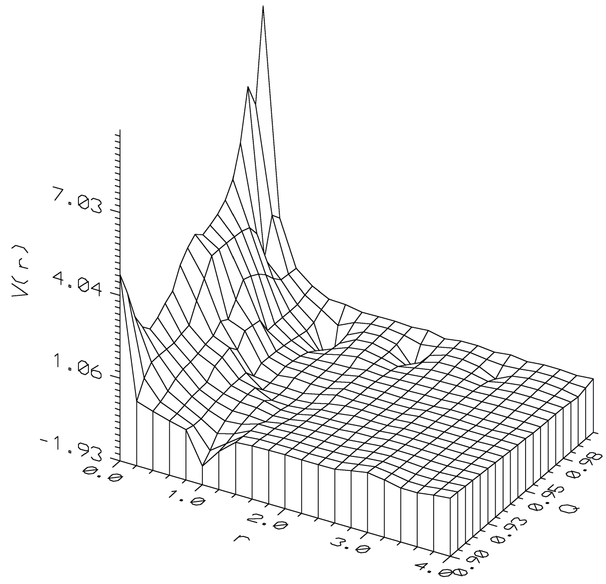

Рис. 3. Залежність екранованого міжелектронного потенціялу $\tilde{V}(r)$ від r при $\beta = 0.1$ та $0.9 < Q < 1$.

1. при $|Q| > 1$ ($\mu < 0$) екранування нема і $\tilde{V}(r)$ збігається з “голим” потенціялом (рис. 3) — монотонною функцією координати;

2. зі зменшенням Q нижче 1 в $\tilde{V}(r)$ з'являються осциляції (рис. 4);

3. подальше заповнення зони ($Q < 0.91$ тобто $\mu > 0.009$) супроводжується зменшенням осциляції $\tilde{V}(r)$ (рис. 4). Тобто якщо спостерігати за поведінкою, наприклад, крайнього лівого мінімуму $\tilde{V}(r)$ (величиною екранованого потенціялу взаємодії двох електронів на відстані однієї сталої ґратки), то можна побачити, що зі зниженням $Q < 1$ (що відповідає збільшенню заповнення зони) такий мінімум поводить себе немонотонно (рис. 3, 4): він спочатку знижується (рис. 3), а далі збільшується (рис. 4). У цьому випадку змінюється природа деяких екстремумів — зміна мінімумів на максимуми чи навпаки.

B. Динамічний випадок. Ми розглянули випадок $\Omega > 2\beta$. Згідно з (2.14) $\Im\mathrm{m}\Pi(q,\Omega) = 0$. Було визначено, що характер $\Re\mathrm{e}\Pi(q,\Omega)$ не так суттєво, як у статичному випадку, залежить від величини параметра Q, тобто від ступеня заповнення зони (рис. 1, криві 5, 6). Зі збільшенням Ω при фіксованому μ і $\beta\Re\mathrm{e}\Pi(q,\Omega)$ прямує до нуля. Діелектрична функція $\varepsilon_1(q,\Omega)$ має осцилюючий характер але без синґулярностей (рис. 2, крива 3). Зі збільшенням Ω осциляції в $\tilde{V}(r)$ зменшуються (рис. 5).

Слід зазначити, що отримані результати та їхній характер перевіряли різними числовими методами при розрахунку інтеґралу (2.16).

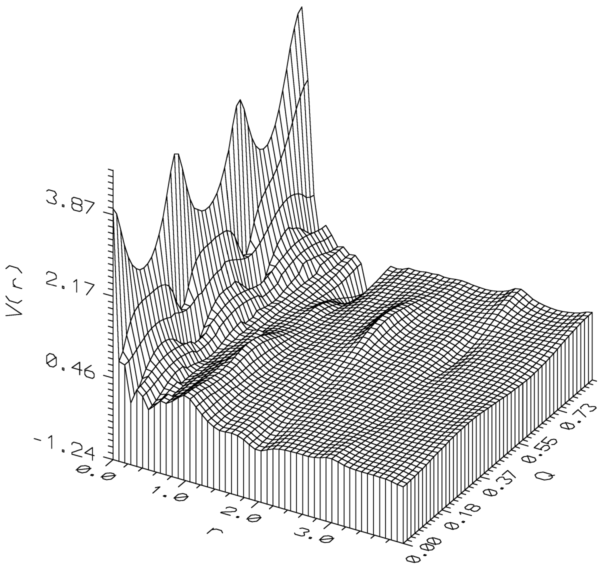

Рис. 4. Залежність екранованого міжелектронного потенціялу $\tilde{V}(r)$ від r при $\beta = 0.1$ та $0 < Q < 0.9$.

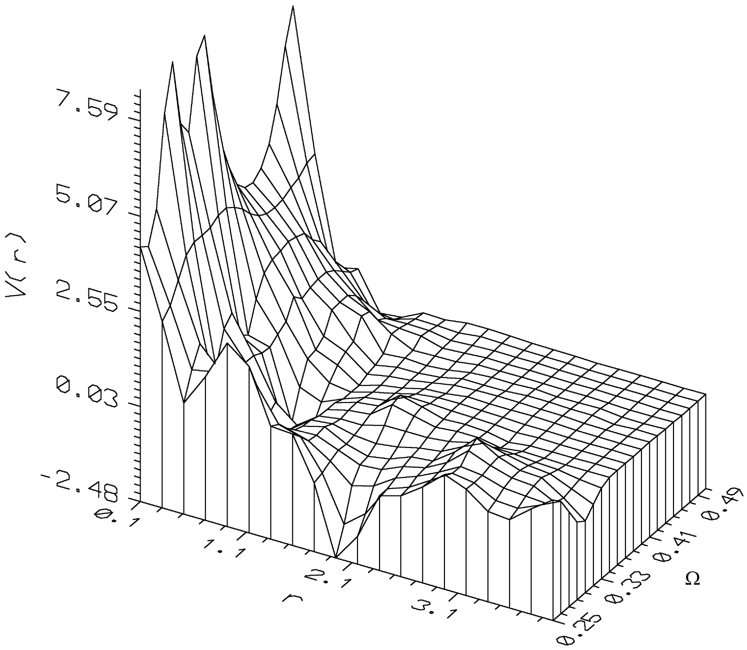

Рис. 5. Залежність екранованого міжелектронного потенціялу $\tilde{V}(r)$ від r в динамічному випадку при $\beta = 0.1$, $Q = 0.9$ та $0.25 < \Omega < 0.5$.

III. ВИСНОВКИ

Екранування міжелектронної взаємодії для електронів з вузькою дозволеною зоною із непараболічним законом дисперсії приводить до її осцилюючого характеру як функції відстані. Фізично це означає, що залежно від відстані така взаємодія має різну природу — притягання чи відштовхування. Подібна залежність потенціялу від відстані r (при великих r) характерна для йон–йонної взаємодії, — так звані осциляції Фріделя [10] — є лише при врахуванні непрямої взаємодії "йон–електрон–йон". Важливо зазначити, що в нашій роботі осциляційний характер $\tilde{V}(r)$ одержаний у рамках ***прямої*** електрон–електронної взаємодії.

Можливо, що врахування такого характеру перенормованого потенціялу в явищі стадійного впорядкування інтеркальованого шаруватого кристала може бути причиною зміни кратності стадії (періоду впорядкованої системи) при зміні заповнення зони [3]. Остаточна відповідь з цього приводу потребує додаткових розрахунків, які виходять за рамки нашої праці.

Про важливість ролі ширини дозволеної зони в осцилюючому характері $\tilde{V}(r)$ свідчать розрахунки потенціялу для різних β при фіксованому положенні хемопотенціялу. З розрахунків бачимо, що при зростанні β такі осциляції в $\tilde{V}(r)$ мають тенденцію до згладження і переходу до монотонної залежності від r. З іншого боку, саме вигляд закону дисперсії (2.1) є причиною появи додаткової синґулярності $\Re e\Pi(q)$ при $q = 2(\pi - k_F)$. Нарешті, такі дослідження в рамках 1D моделі можна застосовувати для чистого неінтеркальованого шаруватого кристала. В цьому випадку атомами 1D моделі є атоми кристалічної матриці.

[1] А. М. Афанасьев, Ю. Каган, ЖЭТФ **43**,1456 (1962).
[2] J. T. Devreese, J. Evrard, V. E. Van Doren, *High Conductivity of One–Dimensional Solids.* (Plenum Press, N. Y., 1979).
[3] S. A. Safran, Solid State Physics **40**, 183 (1987).
[4] A. A. Abrikosov, I. A. Ryzhkin, Adv. Phys. **27**, 147 (1978).
[5] Д. Пайнс, *Проблема многих тел* (Иностранная литература, Москва, 1963).
[6] Б. А. Лукіянець, Г. В. Вовківська, К. Д. Товстюк, ФТТ **26**, 254 (1984).
[7] Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела* (Мир, Москва, 1981).
[8] P. F. Williams, A. N. Bloch, Phys. Rev. **B10**, 1097 (1974).
[9] B. A. Lukiyanets, V. V. Sereda, N. K. Tovstyuk, Int. Sch. on Advanced Display Technologies.: Abstracts (Lviv, Ukraine, 1994), p. 11.
[10] А. Анималу, *Квантовая теория твердых тел* (Мир, Москва, 1981).

SCREENED INTERELECTRON INTERACTION IN ONE–DIMENSIONAL CRYSTAL

B. A. Lukiyanets[1], N. K. Tovstyuk[2]

[1]*State University "Lvivs'ka Politekhnika", Chair of Physics*
12 S. Bandera Str., Lviv, UA–290646, Ukraine
[2]*Ivan Franko Lviv State University, Chair of Semiconductor Physics*
50 Drahomanov Str., Lviv, UA–290005, Ukraine

Screening the interelectron interaction in the crystal with a narrow electron band in the frames of 1D model is analysed. Interelectron interaction screening for the electrons with a narrow nonparabolic band in 1D model is shown to be leading to its oscillating sign–variable character depending on the distance. Physically, it means that depending on the distance such an interaction is of varying nature — attractive or repulsive. A similar dependence on r (at large r) is usual for the ion–ion interaction (the so-called Friedel oscillations) and it takes place at the indirect exchange "ion–electron–ion" only. It is significant to point out that the obtained oscillations can be seen as a result of the direct 1D electron–electron interaction.