

## ЕКРАНОВАНА МІЖЕЛЕКТРОННА ВЗАЄМОДІЯ В ОДНОВИМІРНОМУ КРИСТАЛІ

Б. А. Лукіянець<sup>1</sup>, Н. К. Товстюк<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Державний університет "Львівська політехніка", кафедра фізики  
Україна, UA-290646, Львів, вул. С. Бандери, 12

<sup>2</sup>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 потенціалу міжелектронної взаємодії для електронів з вузькою дозволеною зоною в одновимірних кристалах. Показано, що за деяких умов такий потенціал 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, потенціал, 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 ігнорують 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

$$\varepsilon(k) = L_0 + \beta(1 - \cos k), \quad (2.1)$$

де  $L_0$  — дно зони;  $\beta$  — інтеграл 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  $2\beta$  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 потенціал міжелектронної взаємодії на вузлах  $r_i, r_j$  у вигляді лоренцівської кривої

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

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

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

Потенціалу (2.2) відповідає фур'є-трансформанта

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

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

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

де

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

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

діелектрична функція з

$$\varepsilon_1(\mathbf{q}) = 1 + \Re \Pi(\mathbf{q}) V_0(\mathbf{q}), \quad (2.6)$$

$$\varepsilon_2(\mathbf{q}) = \Im \Pi(\mathbf{q}) V_0(\mathbf{q}), \quad (2.7)$$

а

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

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

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

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 інтегрування за частотою методом лишків отримаємо

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

де

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

Поляризаційна петля має ненульове значення за умови

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

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

$$\Re \Pi(q, \Omega) = -\frac{1}{2\pi} \int_{\{B\}-\{A\}} (\Omega - b \sin k)^{-1} dk, \quad (2.13)$$

$$\Im\Pi(q, \Omega) = \frac{1}{2} \int_{\{B\}+\{A\}} \delta(\Omega - b \sin k) dk, \quad (2.14)$$

де  $b = 2\beta \sin(q/2)$ . Інтеграл (2.13) і (2.14) можна обчислити аналітично, але межі інтегрування, 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:

- $\Re\Pi(q) = 0$  — при  $|Q| > 1$ , тобто для повністю заповненої чи повністю порожньої зони;
- $\Re\Pi(q)$  має дві сингулярності 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 Пайерлса 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,  $\gamma \rightarrow 0$ , збігається з  $\delta(x)$ . При цьому (2.14) набуває вигляду

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

Зазначимо, що залежності  $\Re\Pi$  і  $\Im\Pi$ , як функції  $q$ , аналогічні для різних  $\mu$  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 потенціал).

Потенціал міжелектронної взаємодії

$$\tilde{V}(r) = \int \tilde{V}(q) \cos(qr) dq \quad (2.16)$$

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  $\mu$  область  $q$ , де  $\Re\Pi(q)$  і  $\Im\Pi(q)$  відмінні від нуля, значно звужується (рис. 1, крива 4), тому при  $\beta \rightarrow \infty$ ,  $\tilde{V}(r) \rightarrow V_0(r)$ .

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

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

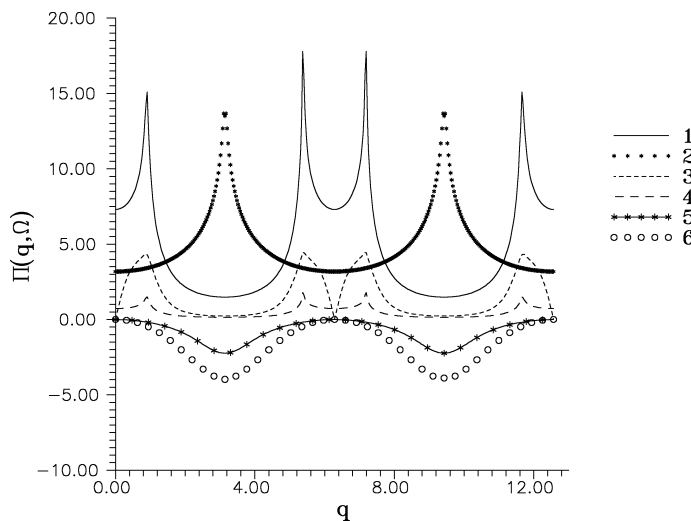


Рис. 1. Залежність  $\Pi(q, \Omega)$  від  $q$  при фіксованих  $\beta = 0.1$  (криві 1–3, 5–6). Статичний випадок показаний кривими 1–4: 1) —  $\Re\Pi(q)$  при  $Q = 0.9$ ; 2) —  $\Re\Pi(q)$  при  $Q = 0$ ; 3) —  $\Im\Pi(q)$  при  $Q = 0.9$ ; 4) —  $\Re\Pi(q)$  при  $Q = 0.9$  та  $\beta = 10$ , динамічний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

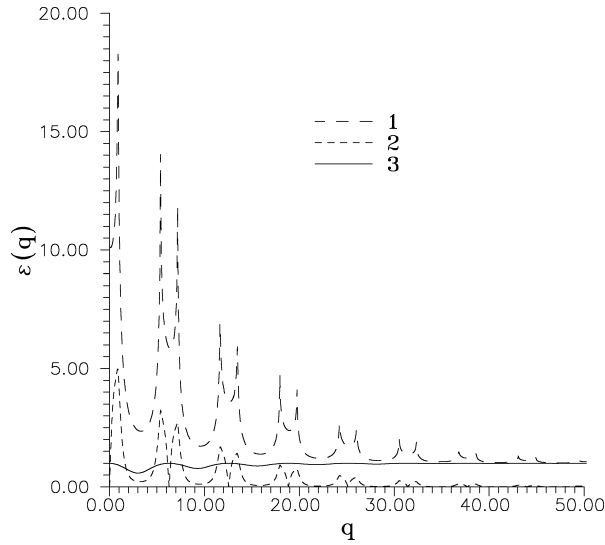


Рис. 2. Залежність діелектричної функції від  $q$  при  $\beta = 0.1$ ,  $Q = 0.9$  в статичному випадку  $\varepsilon_1(q)$  (крива 1) та  $\varepsilon_2(q)$  (крива 2); в динамічному випадку  $\varepsilon_1(q)$  (крива 3) при  $\Omega = 0.4$ .

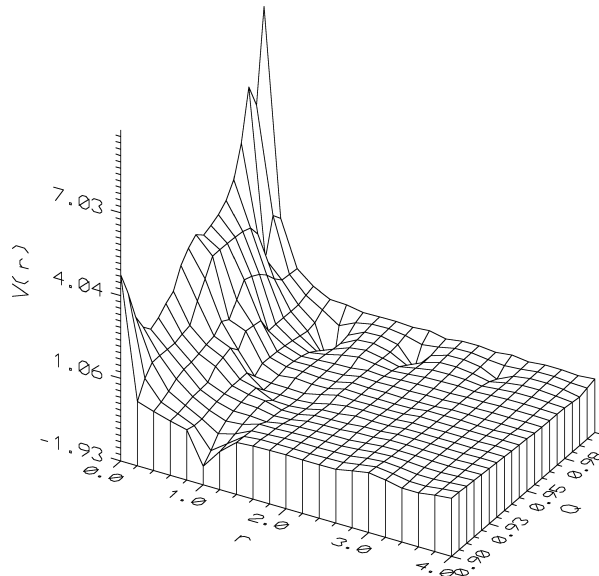


Рис. 3. Залежність екранованого міжелектронного потенціалу  $\tilde{V}(r)$  від  $r$  при  $\beta = 0.1$  та  $0.9 < Q < 1$ .

1. при  $|Q| > 1$  ( $\mu < 0$ ) екранування нема і  $\tilde{V}(r)$  збігається з “голим” потенціалом (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 потенціалу 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.

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

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

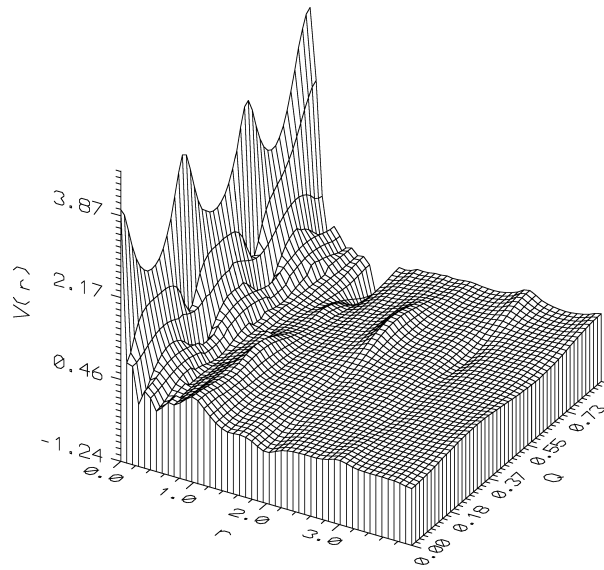


Рис. 4. Залежність екранованого міжелектронного потенціалу  $\tilde{V}(r)$  від  $r$  при  $\beta = 0.1$  та  $0 < Q < 0.9$ .

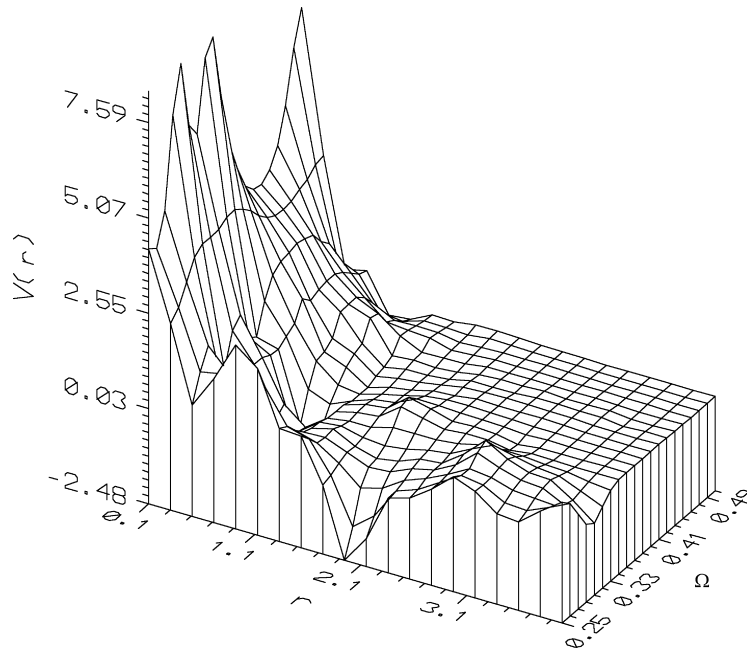


Рис. 5. Залежність екранованого міжелектронного потенціалу  $\tilde{V}(r)$  від  $r$  в динамічному випадку при  $\beta = 0.1$ ,  $Q = 0.9$  та  $0.25 < \Omega < 0.5$ .

### 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 потенціалу від відстані  $r$  (при великих  $r$ ) характерна для йон-йонної взаємодії, — так звані осциляції Фріделя [10] — є лише при врахуванні непря-

мої 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 потенціалу 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 потенціалу для різних  $\beta$  при фіксованому положенні хемопотенціалу. З розрахунків бачимо, що при зростанні  $\beta$  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 сингулярності  $\Re\Pi(q)$  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. Evgard, 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] В. А. Лукіянець, В. В. Середя, Н. К. Товстюк, *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<sup>1</sup>, N. K. Tovstyuk<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*State University "Lviv'ska Politehnika", Chair of Physics  
12 S. Bandera Str., Lviv, UA-290646, Ukraine*

<sup>2</sup>*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.