

ФУНКЦІЯ ГРІНА ПСЕВДОСПІН-1 СИСТЕМИ З ІЗОЛЬОВАНИМ ТОЧКОВИМ ДЕФЕКТОМ У Н-ПІДГРАТЦІ

Вінницький національний технічний університет

Анотація

Розглядається псевдоспін-1 система, яка відповідає дісе-решітками або решіткам Ліба. Гамільтоніан системи вибрано у стандартному наближенні сильного зв'язку з перескоками між найближчими сусідами. Ізольований точковий дефект моделюється зміною вузельної енергії атома в h -підгратці та інтегралу перескоків між найближчими сусідами з двох інших підграток. Обчислюється двочасова запізнююча функція Гріна. Показано, що завдяки локальному характеру збурення відповідне їй рівняння руху має сепарабельну структуру, що дозволило для системи з ізольованим дефектом одержати точну функції Гріна, важливу для встановлення енергетичний спектр і дослідження термодинамічні властивості системи.

Ключові слова: псевдоспін-1 системи, модель сильного зв'язку, загаяна функція Гріна, ізольований точковий дефект, сепарабельне рівняння руху.

Abstract

Here a pseudospin-1 system corresponds to Dice lattices or Lieb lattices has been considered. The Hamiltonian of the system is chosen in the standard tight binding approximation with nearest-neighbor hopping only. An isolated point defect is implanted into the h -sublattice of the system. Its impact on the Hamiltonian reveals in appearing of nodal energy different from zero and by changing of nearest-neighbor hopping integral between rim atoms. The two-time retarded Green's function for the crystal with defect has been found. It is shown that due to the local nature of the perturbation, the corresponding equation of motion has a separable structure, which allowed us to obtain an exact Green's function for a system with an isolated defect. The obtained result is important for treating of the energy spectrum and studying the thermodynamic properties of the system.

Keywords: pseudospin-1 systems, tight-binding model, retarded Green's function, isolated point defect, equation of motion with separable kernel.

Вступ

Псевдоспін-1 системи завдяки специфічним властивостям енергетичного спектру, які, у свою чергу, є відображенням, як правило, трипідграткової кристалічної структури, з моменту свого відкриття стали об'єктом інтенсивних як теоретичних, так і прикладних досліджень. Підтвердженням цьому є лавинна кількість публікацій, про що свідчить обширна бібліографія. Не претендуючи на повноту, в якості прикладу можна привести джерела, цитовані у роботах [1-8]. Не зважаючи на ширину охоплення та глибину і фундаментальність вже одержаних результатів, деякі проблеми ще не досягли достатньої повноти і закінченості. На одній із таких проблем, а саме теорії домішкових центрів у псевдоспін-1 системах, фокусується увага у даній роботі.

1. Постановка задачі. Модель

Основні дослідження псевдоспін-1 систем фокусуються на пошуках реальних фізичних об'єктів, які допускають опис в термінах псевдоспін систем, вивченні впливу зовнішніх факторів, наприклад електромагнітних, акустичних полів на спектр і електрофізичні, магнітні властивості. Псевдоспін системи, як і будь які інші конденсовані твердо тільні об'єкти, в силу специфіки технологічних процесів синтезу, не позбавлені дефектів кристалічної структури дуже різноманітні за своєю природою та багаті за морфологічними ознаками (наприклад, геометричною формою, розмірами, просторовою розмірністю). В силу суттєвого впливу згаданих неоднорідностей на ефекти, чутливі до ступеня впорядкованості, а по суті це стосується всіх процесів, дослідження неупорядкованих псевдоспін систем стало об'єктом значного наукового і практичного інтересу.

Найбільш повні дослідження неупорядкованих псевдоспін-1 систем стосуються протяжних одномірних дефектів та їх ролі у андерсонівській локалізації та порівняння з властивостями набагато краще вивчених псевдоспін-1/2 систем, зокрема графену. Основні результати одержані в довгохвильовому наближенні, коли динаміка квазічастинок описується діраківським гамільтоніаном.

У даній роботі розглядається альтернативний випадок, а саме оператор Гамільтона зберігає свою вихідну форму сильного зв'язку. а дефект є точковим за своєю природою. Відповідно зі вказаним гамільтоніан псевдоспін-1 системи з ізольованим точковим дефектом у представленні вторинного квантування такий вигляд:

$$\hat{H} = - \sum_{n,(\alpha,\beta)} \sum_{\vec{k}} \left[t(\vec{R}_n + \vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta) e^{-i\vec{k}\vec{R}_n - i\vec{k}(\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta)} a_{\vec{k}\alpha}^+ a_{\vec{k}\beta} + h.c. \right] - \sum_{n,(\alpha,\beta)} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \left[e^{-i\vec{k}\vec{r}_\alpha + i\vec{k}'\vec{r}_\beta} \varepsilon \delta_{\alpha 2} \delta_{\beta 2} a_{\vec{k}\alpha}^+ a_{\vec{k}'\beta} + \tau(\delta_{\alpha 2} \delta_{\beta 1} + \delta_{\alpha 2} \delta_{\beta 3}) a_{\vec{k}\alpha}^+ a_{\vec{k}'\beta} + h.c. \right] \quad (1)$$

Тут перша сума є загально відомий [7,8] гамільтоніан ідеальної періодичної системи. Другою сумою у формулі (1) описується точковий дефект. Без втрати загальності вважається, що дефект локалізований в комірці з $\vec{R}_n = 0$, вибраній як початок системи координат. На відміну від стандартної моделі, в якій діагональний матричний елемент дорівнює нулю, завдяки чому у спектрі має місце бездисперсна плоска зона, енергія електрона на ефекті відмінна від нуля і дорівнює ε . Параметр τ має зміст інтегралу перескоків частинки з дефекту на найближчі атоми матриці. Вектори $\vec{r}_\alpha$ визначають положення атому певного типу α у кристалічній комірці, причому $\vec{r}_2 = (0,0)$, $\vec{r}_1 = (\pm a/2, 0)$, $\vec{r}_3 = (0, \pm a/2)$. Що стосується $a_{\vec{k}\alpha}^+$, $a_{\vec{k}\alpha}$, то це ферміонські оператори народження і знищення електронів у відповідних квантових станах. Крім цього слід зауважити, що $h.c.$ позначає ермітове спряження відповідних операторів.

2. Метод запізнюючих функцій Гріна

Загально відомо, що для дослідження енергетичного спектру, термодинамічних властивостей, колективних ефектів, явищ перенесення в конденсованих системах ефективним методом запізнюючих функцій Гріна. За означенням для такої функції Гріна місце співвідношення

$$G(\vec{k}\alpha, \vec{k}'\beta; t-t') = -i\theta(t-t') \left\langle \left[a_{\vec{k}\alpha}(t), a_{\vec{k}'\beta}^+(t') \right]_+ \right\rangle \quad (2)$$

в якому $\theta(t-t')$ – знакова функція Хевісайда, $[A, B]_+$ – антикомутатор операторів A і B , а $\langle \dots \rangle$ означає термодинамічне усереднення. Еволюція функції Гріна в часі описується рівнянням:

$$i\hbar \partial_t G(\vec{k}\alpha, \vec{k}'\beta; t-t') = -i\theta(t-t') \left\langle \left[\left[a_{\vec{k}\alpha}(t), H \right], a_{\vec{k}'\beta}^+(t') \right] \right\rangle \quad (3)$$

Оператор Гамільтона (1) є квадратичною формою щодо операторів народження і знищення в силу чого його комутатор з оператором знищення залежить лінійно від цього ж оператора, тобто

$$\left[a_{\vec{k}\alpha}, a_{\vec{Q}\mu}^+ a_{\vec{Q}'\nu} \right] = a_{\vec{k}\alpha} a_{\vec{Q}\mu}^+ a_{\vec{Q}'\nu} - a_{\vec{Q}\mu}^+ a_{\vec{Q}'\nu} a_{\vec{k}\alpha} = \delta_{\vec{k}\vec{Q}} \delta_{\alpha\mu} a_{\vec{Q}'\nu} \quad (4)$$

Співвідношення (5) показує, що рівняння руху (3) зводиться до лінійної форми, яка після переходу до енергетичного представлення дає для Фур'є образу $G(\vec{k}\alpha, \vec{k}'\beta; E)$ рівняння

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k}'; E) = G_{\alpha\beta}^0(\vec{k}; E) \delta_{\vec{k}\vec{k}'} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{Q}, \vec{Q}', \mu, \nu} G_{\alpha\mu}^0(\vec{k}; E) W_{\mu\nu}(\vec{k}; \vec{Q}) G_{\nu\beta}(\vec{Q}', \vec{k}'; E) \quad (5)$$

Тут $G_{\alpha\beta}^0(\vec{k}; E)$ – матрична функція Гріна ідеальної системи

$$\hat{G}_{\alpha\beta}^0(\vec{k}; E) = \frac{1}{E[E^2 - 4t^2(\cos^2 k_x a/2 + \cos^2 k_y a/2)]} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} E^2 - 4\cos^2 k_y a/2 & -2tE\cos k_x a/2 & 4t^2(\cos k_x a/2)\cos k_y a/2 \\ -2tE\cos k_x a/2 & E^2 & -2tE\cos k_y a/2 \\ 4t^2(\cos k_x a/2)\cos k_y a/2 & -2tE\cos k_y a/2 & E^2 - 4\cos^2 k_x a/2 \end{pmatrix} \quad (6)$$

а $W_{\mu\nu}(\vec{k}, \vec{Q}')$ – ядро матрично-інтегрального рівняння, яке у випадку ізольованого точкового дефекту має такий вигляд:

$$\hat{W}(\vec{Q}') = \begin{pmatrix} 0 & -2\tau\cos(Q'_x a/2) & 0 \\ -2\tau\cos(Q'_x a/2) & -2\varepsilon & -2\tau\cos(Q'_y a/2) \\ 0 & -2\tau\cos(Q'_y a/2) & 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

3. Розв'язання рівняння для функції Гріна. Висновки

Сепарабельний характер ядра рівняння (5) дозволяє отримати розв'язок Впровадження допоміжної матриці $\hat{M}(\vec{k}')$, визначеної співвідношенням

$$M_{\mu\beta}(\vec{k}') = \sum_{\vec{Q}'} W_{\mu\nu}(\vec{Q}') G_{\nu\beta}(\vec{Q}', \vec{k}'; E) \quad (8)$$

приводить рівняння (5) до такого вигляду

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k}'; E) = G_{\alpha\beta}^0(\vec{k}; E) \delta_{\vec{k}\vec{k}'} + \frac{1}{N} \sum_{\mu} G_{\alpha\mu}^0(\vec{k}; E) M_{\mu\beta}(\vec{k}') \quad (9)$$

Множенням (9) зліва на ядро $\hat{W}(\vec{k}')$ одержується алгебраїчне рівняння

$$M_{\gamma\alpha}(\vec{k}') = \sum_{\alpha} W_{\gamma\alpha}(\vec{k}') G_{\alpha\beta}^0(\vec{k}'; E) + \sum_{\mu} \Xi_{\gamma\mu}(E) M_{\mu\beta}(\vec{k}') \quad (10)$$

Тут $\Xi_{\gamma\mu}(E)$ – матриця з матричними елементами, які виражаються в термінах оператора збурення і функції Гріна ідеальної решітки наступною формулою

$$\Xi_{\gamma\mu}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \alpha} W_{\gamma\alpha}(\vec{k}) G_{\alpha\mu}^0(\vec{k}; E) = a^2 \int \sum_{\alpha} W_{\gamma\alpha}(\vec{k}) G_{\alpha\mu}^0(\vec{k}; E) d\vec{k} \quad (11)$$

де інтегрується по першій зоні Бріллюєна. Поєднання розв'язку рівняння (10) зі співвідношенням (9) дає основний результат даної роботи, а саме запізнюючу функцію Гріна

$$G_{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{k}'; E) = G_{\alpha\beta}^0(\vec{k}; E) \delta_{\vec{k}\vec{k}'} + \frac{1}{N} \sum_{\mu} G_{\alpha\mu}^0(\vec{k}; E) [I - \Xi(E)]_{\mu\gamma}^{-1} W_{\gamma\nu}(\vec{k}') G_{\nu\beta}^0(\vec{k}'; E) \quad (12)$$

псевдоспін-1 системи з ізольованим точковим дефектом.

Загально відомо що полюси функції Гріна в енергетичній площині визначають спектр системи. З одержаного тут результату (12) випливає, що мають місце полюси двох видів. Три із них є полюсами функції Гріна ідеальної системи і описують отриманий багатьма авторами і добре відомий з багатьох джерел тризонний спектр з плоскою зоною і лінійним законом дисперсії в околі особливих точок, які співпадають з вершинами зони Бріллюєна. Результатом даної роботи є другий доданок формули (12), з якого видно, що поряд із вище вказаними полюсами, можлива поява полюсів як розв'язків рівняння $\text{Det}[I - \Xi(E)] = 0$. Оскільки енергія не залежить від хвильового числа, то відповідні хвильові функції локалізовані на дефекті решітки. Ті із них, які перебувають за межами інтервалу $[-2t\sqrt{2}, 2t\sqrt{2}]$ є стаціонарними. Спектр ідеальної системи без щілинний, а тому розв'язки, які потрапляють у цей інтервал є віртуальними.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. T.O. Wehling, A.M.Black-Schaffer, and A.V.Balatsky, Dirac materials,arXiv:1405.5774v1 [cond-mat.mtrl-sci],22 May,2014, 77pp
2. V.Jakubsky and K.Zelaya,"Lieb lattices and pseudospin-1 dynamics under barrier-and well-like electrostatic interactions",Physica E 152, 115738(2023)
- 3.Taie,H.Ozava,T.Ishinose at al,Coherent driving and freezing of bosonic matter wave in an optical Lieb lattice, Science Advances,vol. 1, no 10 ,article no 041410,2010
- 4 .S.Xing et al.,"Theory, properties and engineering of 2D magnetic maerials"Progress in Matrial Science, 132,101036,(2023)
5. T.Ozava,H.M.Price,A.Amo,N.Goldman,M.Hafezi,Ling Lu, M.C.Rechtsman, D.Schuster, J.Simon,O.Zilberberg,and L.Carusotto, Topological photonics,Rev.Mod.Phys,91,015006, 2019
6. A.Fang,Z.Q.Zhang,Steven G.Louie, and C.T.Chan, Pseudospin-1 Physucs of Photonic Crystals,AAAS Research Volume, 2019,Article ID 3054062, 15pages,https://doi.org/10.34133/2019/3054062
7. C.Tassi and D. Bercioux, "Implementation and characterization of the dice lattice in the electron quantum simulator", arXiv:2403.06040v1 [cond-mat.mess-hall], 9 Mar 2024
8. V.Jakubsky and K.Zelaya, "Reflectionless pseudospin-1 Dirac systems via Darboux transformation and flat band solutions", arXiv:2307.021123v1 [quant-ph] 5 Jul 2023

Володимир Бурдейний ,кандидат фізико-математичних наук,доцент, професор кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця. brdnvldmr@ukr.net

Василь Касіяненко, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри фізики загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця,

Volodymyr Burdeinyy, PhD in Physics and Mathematics, associated professor of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia , brdnvldmr@ukr.net

Vasul Kaccyianenko, Doctor of Science in Physics and Mathematics, full professor and Chief of General Physics Department, Vinnytsia National Technical Univrsity, Vinnytsia.