

有限格点一维 Holstein 极化子研究*

任学藻^{1)†} 廖 旭¹⁾ 黄书文¹⁾ 汪克林²⁾

1) 西南科技大学理学院, 绵阳 621010

2) 中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230026

(2008 年 5 月 25 日收到, 2008 年 10 月 7 日收到修改稿)

利用相干态正交化展开法, 得到了一维 Holstein 模型基态能量的解析表达式. 为了便于比较, 将系统的基态试探波函数逐级展开到三级近似, 计算了不同格点、不同耦合强度下的基态能量, 在展开到 3 级近似时, 所得结果与数值计算一致.

关键词: 相干态正交化展开, 极化子, 模拟退火方法

PACC: 7138, 6320K

1. 引 言

近年来, 人们对电子与定域声子相互作用而形成小极化子的问题产生兴趣, 原因是它与巨磁电阻、高温超导以及高聚物材料、生命科学中 DNA 研究等有着密切的关系. 人们利用描述小极化子系统的 Holstein 模型^[1]成功地处理了与上述有关的一些问题, 并取得很多有意义的结果^[2-14]. 由于一维无限格点的 Holstein 模型至今没有找到精确解, 所以发展了很多近似的解析方法和数值计算方法. 近似的解析方法如弱耦合展开 (WCPT) 方法^[3]和强耦合展开 (SCPT) 方法^[4], 它们均不能给出中间耦合区的正确物理图像. 数值计算方法有精确对角化方法^[5] (ED)、密度矩阵重正化群方法^[6] (DMRG)、量子 Monte Carlo (QMC) 方法^[7]等. 本文给出一种相干态正交化展开方法, 是一种能逐级提高近似程度的较好方法, 为了比较其结果, 我们将系统的基态试探波函数展开到相干态的 3 级近似, 得到的一维分子晶体基态的能量期待值逐级降低明显.

2. 极化子的基态能量和波函数

一维系统 Holstein 模型的哈密顿量为^[1]

$$H = -t \sum_i (c_i^+ c_{i+1} + c_i^+ c_{i-1}) + \omega \sum_i b_i^+ b_i$$

$$+ g \sum_i c_i^+ c_i (b_i + b_i^+), \quad (1)$$

其中 c_i (c_i^+) 和 b_i (b_i^+) 分别是 Wannier 表象下格点坐标 i 上的 (不考虑自旋) 费米子 (电子) 和玻色子 (声子) 的湮没 (产生) 算符. (1) 式等号右端第一项是电子在格点间的跃迁 (hopping) 能量, t 是裸的跃迁积分, 第二项是声子能量, 第三项是电子与单声子的相互作用项. 因为研究的是单电子, 所以电子的自旋自由度不起作用, 为简单起见, 在本文中取如下的单位: $\hbar = a = 1$ (a 是晶格常数).

在文献 [11—15] 中, 考虑系统的基态波函数是相干态, 已取得许多好的结果, 但由于 Holstein 模型的基态并不是相干态, 所以这样通过变分法得到的基态能量比其他方法得到的基态能量要高, 普遍形式的基态试探波函数可以设为

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = & \sum_i \Psi_i c_i^+ \exp\left(\sum_l \left(\alpha_l b_l^+ - \frac{1}{2} \alpha_l^2\right)\right) \Big|_0 \\ & + \sum_i c_i^+ \sum_l \beta_{il} (b_l^+ - \alpha_l) \\ & \times \exp\left(\sum_l \left(\alpha_l b_l^+ - \frac{1}{2} \alpha_l^2\right)\right) \Big|_0 \\ & + \sum_i c_i^+ \sum_{lm} \gamma_{ilm} (b_l^+ - \alpha_l) (b_m^+ - \alpha_m) \\ & \times \exp\left(\sum_l \left(\alpha_l b_l^+ - \frac{1}{2} \alpha_l^2\right)\right) \Big|_0 \\ & + \sum_i c_i^+ \sum_{lmn} \delta_{ilmn} (b_l^+ - \alpha_l) (b_m^+ - \alpha_m) (b_n^+ - \alpha_n) \end{aligned}$$

* 四川省自然科学基金 (批准号 2006C028) 资助的课题.

† E-mail: rxz63@sohu.com

$$\times \exp\left(\sum_i \left(\alpha_i b_i^\dagger - \frac{1}{2} \alpha_i^2\right)\right) |0\rangle + \dots, \quad (2)$$

其中 $\Psi_i, \alpha_i, \beta_{il}, \gamma_{ilm}, \delta_{ilmn}, \dots$ 为待定的变分参数. 容易验证 (2) 式中的每一项均是相互正交的, 因此我们将这种展开方法称为相干态正交化展开方法.

由 (2) 式可得其内积为

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle = & \sum_i \Psi_i^2 + 1! \sum_{il} \beta_{il}^2 + 2! \sum_{ilm} \gamma_{ilm}^2 \\ & + 3! \sum_{ilmn} \delta_{ilmn}^2 + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

将 (2) 式代入 (1) 式, 得到基态能量期待值的普遍表达式为

$$\begin{aligned} E = & \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \\ = & \frac{1}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \left\{ -2t \left[\sum_i \Psi_i \Psi_{i+1} + 1! \sum_{il} \beta_{il} \beta_{i+1,l} \right. \right. \\ & \left. \left. + 2! \sum_{ilm} \gamma_{ilm} \gamma_{i+1,lm} + 3! \sum_{ilmn} \delta_{ilmn} \delta_{i+1,lmn} + \dots \right] \right. \\ & \left. + \omega \left[\left(\sum_i \Psi_i^2 + 1! \sum_{il} \beta_{il}^2 + 2! \sum_{ilm} \gamma_{ilm}^2 \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. + 3! \sum_{ilmn} \delta_{ilmn}^2 + \dots \right) \sum_l \alpha_l^2 \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left. + 2 \times \left(1! \sum_{il} \Psi_i \beta_{il} \alpha_l + 2! \sum_{ilm} \beta_{il} \gamma_{ilm} \alpha_l \right. \right. \\ & \left. \left. + 3! \sum_{ilmn} \gamma_{ilm} \delta_{ilmn} \alpha_l + \dots \right) \right. \\ & \left. + 1 \times 1! \sum_{il} \beta_{il}^2 + 2 \times 2! \sum_{ilm} \gamma_{ilm}^2 + 3 \times 3! \sum_{ilmn} \delta_{ilmn}^2 + \dots \right] \\ & + 2g \left[\sum_i \left(\Psi_i^2 + 1! \sum_{il} \beta_{il}^2 + 2! \sum_{ilm} \gamma_{ilm}^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + 3! \sum_{ilmn} \delta_{ilmn}^2 + \dots \right) \alpha_i \right. \\ & \left. + 1! \sum_i \Psi_i \beta_{ii} + 2! \sum_{il} \beta_{il} \gamma_{il} + 3! \sum_{ilm} \gamma_{ilm} \delta_{iilm} + \dots \right] \}. \end{aligned} \quad (4)$$

(4) 式比较复杂, 无法按文献 [14] 中用变分方法来计算, 因此用模拟退火方法计算, 即根据能量期待值最小来确定 $\Psi_i, \alpha_i, \beta_{il}, \gamma_{ilm}, \delta_{ilmn}, \dots$, 由于下标 l, m, n, \dots 具有置换对称性, 因此独立的变分参数将大为减少. (3) 和 (4) 式中已经考虑了脚标 l, m, n, \dots 等的置换对称性.

若用 N 表示格点数, 表 1 和表 2 给出了不同耦合强度、不同格点数对应的基态能量.

表 1 $\omega = 1, t = 1, g = 1$ 时, 不同格点数 0, 1, 2, 3 级修正对应的基态能量

N	2	3	4	5	6
0 级修正	-2.49999999	-2.33333333	-2.24999999	-2.19999999	-2.16666664
1 级修正	-2.59807621	-2.493580232	-2.454089703	-2.43525239	-2.42430422
2 级修正	-2.60790965	-2.511430635	-2.479923156	-2.46827858	-2.46338892
3 级修正	-2.60911124	-2.514095654	-2.484174452	-2.47394453	-2.47017965

表 2 $\omega = 1, t = 1, g = \sqrt{2}$ 时, 不同格点数 0, 1, 2, 3 级修正对应的基态能量

N	2	3	4	5	6
0 级修正	-2.99999999	2.666666666	-2.500000001	-2.40000001	-2.33333333
1 级修正	-3.19258240	-2.976067744	-2.887962148	-2.84146202	-2.81199221
2 级修正	-3.23072542	-3.040741627	-2.976664737	-2.95000215	-2.93611453
3 级修正	-3.24117213	-3.061939859	3.007227586	-2.98819836	-2.98070985

为了便于比较, 表 1 和表 2 中列出了将基态试探波函数展开到 0 级、1 级、2 级和 3 级时基态能量的计算结果. 我们看到基态能量随波函数近似级次的增加, 能量逐渐降低. 当格点数 $N = 6, \omega = 1, t = 1, g = 1$ 时, 文献 [16] 给出的数值计算结果为 -2.471, 我们 3 级近似计算的结果 -2.47018, 与之相差 0.03%. 当格点数 $N = 6, \omega = 1, t = 1, g = \sqrt{2}$ 时, 文献 [7] 给出的数值计算结果为 -2.999, 我们 3 级近似计算的结果 -2.98071, 与之相差 0.6%.

从表 1 可知, 对于弱耦合和中间耦合区情形, 我们的计算结果与文献 [16] 给出的结果, 几乎完全相同. 从表 2 可知, 在强耦合区, 我们的 3 级近似计算结果也非常接近数值解. 如果要提高计算精确度, 只需增加波函数的近似级次即可.

在上述计算中可以看到, 较高计算的精确度需要计算到较高的近似级次. 如果我们将基态的试探波函数 (2) 式中的变分参数 α_l 修正为与电子格点坐标相关的 α_{il} , 只需计算到 2 级近似就可以得到很精

确的结果.

$$\begin{aligned}
 |\varphi\rangle &= \sum_i \Psi_i^2 c_i^+ \exp \sum_l \left(\alpha_{il} b_l^+ - \frac{1}{2} \alpha_{il}^2 \right) \Big| 0 \\
 &+ \sum_i c_i^+ \sum_l \phi_{il} (b_l^+ - \alpha_{il}) \\
 &\times \exp \sum_l \left(\alpha_{il} b_l^+ - \frac{1}{2} \alpha_{il}^2 \right) \Big| 0 \\
 &+ \sum_i c_i^+ \sum_{lp} \beta_{ilp} (b_l^+ - \alpha_{il}) \chi (b_p^+ - \alpha_{ip}) \\
 &\times \exp \sum_l \left(\alpha_{il} b_l^+ - \frac{1}{2} \alpha_{il}^2 \right) \Big| 0 \\
 &+ \sum_i c_i^+ \sum_{lp} \delta_{ilpm} (b_l^+ - \alpha_{il}) \chi (b_p^+ - \alpha_{ip}) \\
 &\times (b_m^+ - \alpha_{im}) \exp \sum_l \left(\alpha_{il} b_l^+ - \frac{1}{2} \alpha_{il}^2 \right) \Big| 0 \\
 &+ \dots \tag{5}
 \end{aligned}$$

为简单起见,我们取零级展开和二级展开项两项作为基态的试探波函数

$$\begin{aligned}
 |\varphi_2\rangle &= \sum_i \Psi_i c_i^+ \exp \sum_l \left(\alpha_{il} b_l^+ - \frac{1}{2} \alpha_{il}^2 \right) \Big| 0 \\
 &+ \sum_i c_i^+ \sum_{lp} \beta_{ilp} (b_l^+ - \alpha_{il}) \chi (b_p^+ - \alpha_{ip}) \\
 &\times \exp \sum_l \left(\alpha_{il} b_l^+ - \frac{1}{2} \alpha_{il}^2 \right) \Big| 0. \tag{6}
 \end{aligned}$$

(6)式的内积为

$${}_2 \langle \varphi | \varphi_2 \rangle = \sum_i \Psi_i^2 + 2 \sum_{ilp} \beta_{ilp}^2.$$

基态的能量表达式为

表 3 2级近似时,不同参量对应的基态能量与文献 [6,16,17] 结果的比较

参量取值	$N=6, \omega=1, \mu=1, g=1$	$N=6, \omega=1, \mu=1, g=\sqrt{2}$	$N=10, \omega=0.4, \mu=1, g=0.4\sqrt{0.5}$	$N=10, \omega=4, \mu=1, g=4$
基态能量	-2.47058	-2.98864	-2.06129	-5.01999
	-2.471 ^[16]	-2.99883 ^[6]	-2.06130 ^[17]	-5.02985 ^[17]

合情形,我们的计算结果与文献 [6,16,17] 给出的结果几乎完全一致,在中间耦合区相差约 0.3%,在强耦合区相差约 0.2%.因此,如果要提高计算精确度,只需增加波函数的近似级次即可.

3. 结 论

本文运用相干态正交化展开法研究一维

$$\begin{aligned}
 E_2 &= \frac{1}{\sum_i \Psi_i^2 + 2 \sum_{ilp} \beta_{ilp}^2} \left\{ -t \left[\sum_i \Psi_i \Psi_{i+1} \chi(i) \right. \right. \\
 &+ \sum_i \Psi_i \Psi_{i-1} \chi(i) + 2 \sum_i \Psi_{i+1} \times \sum_{lp} \beta_{ilp} \\
 &\times (\alpha_{i+1,l} - \alpha_{il}) \chi (\alpha_{i+1,p} - \alpha_{ip}) \chi(i) \\
 &+ 2 \sum_i \Psi_i \times \sum_{lp} \beta_{i+1,lp} (\alpha_{i,l} - \alpha_{i+1,l}) \\
 &\times (\alpha_{i,p} - \alpha_{i+1,p}) \chi(i) \\
 &+ 4 \sum_{ilm} \beta_{ilm} \beta_{i+1,lm} \chi(i) + 2 \sum_{ilmq} \beta_{ilp} \beta_{i+1,mq} (\alpha_{i+1,l} - \alpha_{il}) \\
 &\times (\alpha_{i+1,p} - \alpha_{ip}) \chi (\alpha_{im} - \alpha_{i+1,m}) \chi (\alpha_{iq} - \alpha_{i+1,q}) \chi(i) \\
 &+ 8 \sum_{ilmp} \beta_{ilp} \beta_{i+1,lm} (\alpha_{i+1,p} - \alpha_{ip}) \chi (\alpha_{i,m} - \alpha_{i+1,m}) \chi(i) \left. \right] \\
 &+ \omega \left[\sum_i \Psi_i^2 \sum_l \alpha_{il}^2 + 4 \sum_{ilp} \beta_{ilp}^2 + 2 \sum_{ilp} \beta_{ilp}^2 \sum_n \alpha_{in}^2 \right] \\
 &+ g \left[2 \sum_i \Psi_i^2 \alpha_{ii} + 4 \sum_{ilp} \beta_{ilp}^2 \alpha_{ii} \right] \Big\} \tag{7}
 \end{aligned}$$

其中,变分参数 $\Psi_i, \alpha_{il}, \beta_{ilp}$ 根据能量期待值最小来确定, $\chi(i) = \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N (\alpha_{il} - \alpha_{i+1,l})^2\right)$.

表 3 给出了格点数 $N=6$ 和格点数 $N=10$ 时,从弱耦合区到强耦合区与文献 [6,16,17] 的结果比较.

从表 3 可以看出,当基态的试探波函数采用(6)式展开到 2 级近似时,基态能量进一步降低,这充分说明了相干态正交化展开方法是一种系统改善计算精确度的好方法.尽管只计算到 2 级近似,对于弱耦

Holstein 极化子,这是一种能系统提高计算精确度的近似计算方法,同时给出了展开到无穷阶的解析表达式.通过对不同格点数、不同耦合强度基态能量的计算,发现基态能量随着展开级次的提高呈单调下降,并逐渐趋于稳定.因此无论在任何耦合情况下,随着将试探波函数展开到更高级次,就能得到越来越精确的基态能量.这说明相干态正交化展开方法是研究电声相互作用的一种非常有效的方法.

- [1] Holstein T 1959 *Ann. Phys.* **8** 325
- [2] Roncaglia R ,Tsironis G P 1998 *Physica D* **113** 318
- [3] Migdal A B , Eksp Z 1958 *Sov. Phys. JETP* **7** 996
- [4] Stephan W 1996 *Phys. Rev. B* **54** 8981
- [5] Zhang C ,Jeckelmann E ,White S R 1999 *Phys. Rev. B* **60** 14092
- [6] Jeckelmann E ,White S R 1998 *Phys. Rev. B* **57** 6376
- [7] Kornilovitch P E 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 5382
- [8] Kornilovitch P E 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 1551
- [9] Wellein G ,Fehske H 1997 *Phys. Rev. B* **56** 4513
- [10] Bonca J ,Trugman S A ,Batistic I 1999 *Phys. Rev. B* **60** 1633
- [11] Wang K L ,Chen Q H ,Wan S L 1994 *Phys. Lett. A* **185** 216
- [12] Chen Q H ,Fang M H ,Zhang Q R 1996 *Phys. Rev. B* **53** 11296
- [13] Wan S L , Wang K L 2000 *Chin. Phys. Lett.* **17** 129
- [14] Ren X Z ,Liao X ,Liu T ,Wang K L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2865
(in Chinese] 任学藻、廖 旭、刘 涛、汪克林 2006 物理学报 **55** 2865]
- [15] Liu T ,Wang Y , Wang K L 2007 *Chin. Phys. B* **16** 272
- [16] Alexandrov A S , Kabanov V V ,Ray D K 1994 *Phys. Rev. B* **49** 9915
- [17] Cataudella V , Fillippis G D , Martone F , Perroni C A 2004 *Phys. Rev. B* **70** 193105

Study of one-dimensional Holstein polaron in infinite lattice ^{*}

Ren Xue-Zao^{1)†} Liao Xu¹⁾ Huang Shu-Wen¹⁾ Wang Ke-Lin²⁾

¹ *College of Science , Southwest University of Science and Technology ,Mianyang 621010 ,China)*

² *Department of Modern Physics , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 ,China)*

(Received 25 May 2008 ; revised manuscript received 7 October 2008)

Abstract

Applying the method of coherent state orthogonal expansion , an analytical expression of the ground state energy for one-dimensional Holstein model is obtained. We expand the trial wave function of ground state to third order , and calculate the ground state energy for different lattice sites and different coupling intensities. In the third order approximation , the ground state energy agrees with the numerical solution.

Keywords : coherent-state orthogonal expansion , polaron , simulated annealing method

PACC : 7138 , 6320K

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Sichuan Province ,China(Grant No.2006C028).

[†] E-mail :rxz63@sohu.com