Fröhlich 极化子的非经典基态*

罗质华† 余超凡 林洽武

(广东第二师范学院物理系,广州 510303)

(2009 年 6 月 21 日收到;2010 年 11 月 3 日录用)

本文计及波矢 q,q' 声子间动力学关联效应,采用双模-压缩(声子)相干态作为再一次正则变换方案,基于 Huybrechts 变分近似,求解 Fröhlich 大极化子的非经典基态. 由于双模-压缩(声子)相干态导致声子相干态-压缩声子态关联效应,相干参量 $\tilde{f}_q$ 与双模压缩角 $\phi_{qq'}$ 有较大幅度修正,因而显著增强了相干效应和压缩角效应. 对极化子基态能量计算与分析说明:在弱耦合区域,位移-声子压缩态效应的修正项 $\Delta E_c^{(1)}$ 与 Feynman 路径积分计算 (ΔE_f) 和 Huybrechts 相干态修正项 (ΔE_0) 相当. 但是,声子相干态双模-压缩效应导致相应的修正 $(\Delta E_c^{(2)})$ 有大幅度贡献, $\Delta E_c^{(2)} \ll (\Delta E_f, \Delta E_0)$;在强耦合区域,位移-声子压缩态效应的修正大为减弱而可以忽略, $\Delta E_c^{(1)} \geqslant (\Delta E_f, \Delta E_0)$. 虽然声子相干态双模-压缩效应也会同时减弱,考虑到电子-声子耦合强度(α)较大,仍有 $\Delta E_c^{(2)} \ll (\Delta E_f, \Delta E_0)$.

关键词: 双模-压缩(声子)相干态, 位移-声子压缩态 , Fröhlich 极化子,非经典基态

PACS: 71.38.-k, 67.85.De, 67.85.Fg, 67.85.Bc

1. 引 言

众所周知,极性半导体中一个能带电子与其内的纵向光学声子(LO 声子)的相互作用,用 Fröhlich 哈密顿量(FH)描述. FH 虽然简单,但至今仍没有正确求解. 由于极化子问题在凝聚态物理学中有十分重要的应用 [1—6],一直以来,众多学者在寻求各种近似方法求解 FH 的基态. 对于电子-声子耦合强度 $\alpha < 1$(弱耦合区域),微扰理论给出了一个满意结果 [7,8],对于 $\alpha > 6$ 这一强耦合区域,最好的结果已经由 Migake 给出 [9];而广泛注意的中间耦合区域,Lee, Low 和 Pines 采用么正变换和变分近似(LLP 方法)作出了解答,并广泛应用于极化子理论中 [10]. 另一方面,Feynman 应用量子力学路径积分方法成功地对整个耦合区域解答了 FH 的精确解问题,并且他的方法现在已用来作为检验其他近似的一个标准 [11]. 由于中间耦合区域显示自由极化子经历从巡游电子态到局域态的形式相变临界行为,所以中间耦合区域求解问题备受关注. 还有另一个问题是,Feynman 方法并不适用于激发态问题,为了解决激发态问题,后来 Huybrechts 给出了一个改进的更有效的变分近似方法(LLPH 方法),相继有类似的 LLPH 方法 [12,13],而另一途径还有格林函数法与运动方程方法 [14,15]. 需要特别指出,尽管 Feynman 路径积分法给出了 FH 精确解(以及 LLP 和 LLPH 方法),但它只是一个精确的数学解,还不是 FH 极化子问题的真实物理解. 我们知道,LLP 方法对声子真空态作位移振子变换得到的是相干态,是个经典态,因此 LLP 和 Feynman 他们只是找到 FH 模型极化子的 Feynman 经典基态,还不是已找到 FH 极化子的真正非经典基态. 一个物理实在的非经典基态不是单凭数学解就可以解决的,而是靠解决实在的物理图像才能解决. 这就像当年与超导问题相关的强关联电子体系的真实基态求解,它最终是基于库柏对图像的玻戈留玻夫正则变换才得到真正的超导基态.

近年来,量子光学的相干态和压缩态的实现和发展,这两个重要思想概念已在凝聚态物质科学中广泛应用,对 FH 极化子理论提供了新的思考和出路,这也是当年 Feynman 和 LLP 等人在求解 FH 极化子问题没法预料的. 作为寻找新物理图像的先锋性工作,基于 LLP 方法的正则变换思路,Altanhan, Kandemir, Chatterjee 等人试图在变分近似中采用位

* 国家自然科学基金(批准号:10574163)资助的课题.

† E-mail: lo-zh@126.com

©2011 中国物理学会 Chinese Physical Society

移-声子压缩态(理想声子压缩态)$|\psi\rangle = D(f)S(\phi)|0\rangle_b$($D$ 代表平移算符,S 代表压缩算符,$|0\rangle_b$代表 LO 声子真空态)再进行一次正则变换以求得到新的 FH 极化子基态[16-18],但他们的结果只是在弱耦合情况的修正($\Delta E_c^{(1)}$)接近 Feynman 方法,LLPH 和四阶微扰论结果,而在强耦合情况 $\Delta E_c^{(1)}$ 修正远远小于 Feynman, LLPH 等人的结果. 虽然沿着这样的路子,近年来又在量子点方面做了许多工作[19—22]. 但是应该说,这些作者们还没有解答了 FH 极化子的新的非经典基态. 我们注意到,位移-声子压缩态方法 $|\psi\rangle = D(f)S(\phi)|0\rangle_b$ 只是对声子有压缩,但对声子相干态没有压缩效应;而双模-压缩(声子)相干态 $|\tilde{\psi}\rangle = S(\phi)D(f)|0\rangle_b$ 不但对声子有压缩,而且对声子相干态也有压缩效应. 由于两个算符 $D(f)$ 与 $S(\phi)$ 是不对易的,所以 $|\tilde{\psi}\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 两个物理过程与物理效果也不一样的. 量子光学已证明,$|\tilde{\psi}\rangle$ >导致的非经典反聚束效应(量子效应)和 Q_M 因子效应(亚泊松统计行为)远比 $|\psi\rangle$ 要大得多. 基于这样的认识,我们试图在 FH 极化子问题采用双模-压缩(声子)相干态 $|\tilde{\psi}\rangle = S(\phi)D(f)|0\rangle_b$ 作为再一次正则变换方案,更深层次求解真正的非经典基态. 我们有理由期望,这一非经典态相应的基态能量比 Feynman 经典态要大幅度降低得多. 最近,作者们曾采用这一新思路研究了 Holstein 极化子-孤子系统的基态量子涨落和极化子能量,结果说明,由于压缩-相干态效应导致反常晶格涨落,显著增加量子涨落效应,极化子-孤子系统基态能量大幅度更负下降和极化子结合能大大增加[23].

2. 理论描述

2.1. 原理

电子与它周围的极化场构成一个相互作用的整体,称为极化子,这时电子与 LO 声子的相互作用由下列 Fröhlich 哈密顿量描述:

$$H = \frac{1}{2\mu}p^2 + \sum_q \hbar\omega_0 b_q^+ b_q + \sum_q (V_q b_q e^{iq\cdot r} + V_q^+ b_q^+ e^{-iq\cdot r}), \quad (1)$$

式中 r 为电子坐标,p 为具有能带质量 μ 的电子动量,$b_q^+(b_q)$ 代表波矢 q,无色散能量 $\hbar\omega_0$ 的 LO 声子产生(湮没)算符,而电子-声子相互作用幅 V_q 为

$$V_q = -i\hbar\omega_0\left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{r_0^{1/2}}{q},$$
$$r_0 = (\hbar/2\mu\omega_0)^{1/2}. \quad (2)$$

基于 LLPH 方法,我们首先作 U_0 变换(α_1 为表示耦合强度特征的参量)

$$U_0 = e^{i\alpha_1\sum_q \hbar q b_q^+ b_q\cdot r}. \quad (3)$$

按照 Huybrechts 方法,作 U_0 变换后果,

$$p\to(1-\alpha_1)p, \hbar\omega_q\to\hbar\omega_q + \alpha_1^2\frac{\hbar^2 q^2}{2m}\text{[12]},$$

因而

$$H(\alpha_1) = U_0 H U_0^{-1} = \frac{1}{2\mu}p^2(1-\alpha_1)^2 + \sum_q B_q b_q^+ b_q + \sum_q [V_q b_q e^{i(1-\alpha_1)q\cdot r} + V_q^+ b_q^+ e^{-i(1-\alpha_1)q\cdot r}] + \alpha_1^2 r_0^2\sum_{qq'}(q\cdot q')b_q^+ b_{q'}^+ b_q b_{q'}, \quad (4)$$

其中 $B_q = 1 + \alpha_1^2 r_0^2 q^2$. 我们认识到压缩-相干态是一种非经典态,为了更进一步计及反聚束和亚泊松统计的非经典效应导致对 Feynman 极化子态的量子修正,代替位移-声子压缩态变分方案,我们采用如下的变分波函数,即双模-压缩(声子)相干态变分方案,这里 $|\tilde{\psi}\rangle$ 代表声子相干态具有压缩特性,而 $|\psi\rangle = D(f)S(\phi)|0\rangle_b$ 代表相干态没有压缩特性,因此,我们的 FH 极化子的新非经典基态 $|\tilde{\psi}\rangle$ 取作

$$|\tilde{\psi}\rangle = U_0 S(\phi)D(f)|0\rangle_b\otimes|\Phi(r)\rangle, \quad (5)$$

其中 $|\Phi(r)\rangle$ 为高斯局域变分函数,$|0\rangle_b$ 代表 LO 声子真空态,而 $D(f)$, $S(\phi)$ 分别代表位移振子算符和双模压缩算符,即

$$D(f) = e^{\sum_q(f_q b_q^+ - f_q^* b_q)}, \quad (6)$$

$$S(\phi) = e^{\frac{1}{N}\sum_{qq'}\phi_{qq'}(b_q^+ b_{q'}^+ - b_q b_{q'})}, \quad (7)$$

这里 f_q, $\phi_{qq'}$ 分别代表声子位移(相干态)参量和压缩角(双模压缩态)参数,在本文中作为变分参数处理;而 N 为 LO 声子模式总数目. 为简写起见,以后记 $\tilde{\phi}_{qq'} = \phi_{qq'}/N$. 注意到

$$U = S(\phi)D(f), \quad (8)$$

我们得到如下的有效 Fröhlich 哈密顿量 $\tilde{H}$ 为

$$\tilde{H} = U^{-1}H(\alpha_1)U = \frac{1}{2\mu}p^2(1-\alpha_1)^2 + \sum_{qq'} B_q F_{qq'}^+ F_{qq'} + \sum_{qq'}[V_q F_{qq'} e^{-i(1-\alpha_1)q\cdot r} + V_q^+ F_{qq'}^+ e^{i(1-\alpha_1)q\cdot r}] + \alpha_1^2 r_0^2\sum_{qq'}(q\cdot q')F_{qq'}^+ F_{q'q}^+ F_{qq'} F_{q'q}, \quad (9)$$

此处

$$F^{+}_{qq'} = (b^{+}_{q} ch\tilde{\phi}_{qq'} + b_{q'} sh\tilde{\phi}_{qq'}) + (f^{+}_{q} ch\tilde{\phi}_{qq'} + f_{q'} sh\tilde{\phi}_{qq'}) . \tag{10}$$

如同我们预先期望的一样,由于考虑声子相干态的压缩效应,$F^{+}_{qq'}$ 第一项表示声子 (b^{+}_{q}) 的压缩效应,而第二项代表声子相干态(相干参量 f_q)的压缩效应,它反映声子相干态-声子压缩态之间存在关联(纠缠)效应. 此时,基态能量可表示成

$$\tilde{E} = \langle\tilde{\psi} | H | \tilde{\psi}\rangle. \tag{11}$$

考虑极化子的局域性质(半径 r_0),采用高斯试探函数近似

$$\Phi(r) = \left(\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2 r^2}, \tag{12}$$

其中 λ 为变分参数,我们有

$$\langle\Phi(r)\left|\frac{p^2}{2\mu}\right|\Phi(r)\rangle = \langle\Phi| - r_0^2 \ \nabla^2 |\Phi(r)\rangle = \frac{3}{2}\lambda^2 r_0^2, \tag{13}$$

$$\rho_q = \langle\Phi(r) | \mathrm{e}^{\mathrm{i}(1-\alpha_1)q\cdot r} | \Phi(r)\rangle = \mathrm{e}^{-(1-\alpha_1)^2 q^2/4\lambda^2}. \tag{14}$$

进一步,我们令 $V_q = -\mathrm{i}\tilde{V}_q, f_q = \mathrm{i}\tilde{f}_q$,并注意 $\tilde{\phi}_{qq} = \tilde{\phi}_{q'q'} = 0, \tilde{\phi}_{qq'} = \tilde{\phi}_{q'q} \neq 0$, 最后,将基态能量 $\tilde{E}$ 表示成对 q,q' 对称的形式,有

$$\begin{aligned}
\tilde{E} = {} & \frac{3}{2}\lambda^2 r_0^2 (1-\alpha_1)^2 + \frac{1}{2}\sum_{qq'}(B_q + B_{q'})\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'} \\
& + \frac{1}{2}\sum_{qq'}[B_q(\tilde{f}^2_q \mathrm{ch}^2\tilde{\phi}_{qq'} + \tilde{f}^2_{q'}\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'} - \tilde{f}_q\tilde{f}_{q'}\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'}) \\
& + B_{q'}(\tilde{f}^2_{q'}\mathrm{ch}^2\tilde{\phi}_{qq'} + \tilde{f}^2_q \mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'} - \tilde{f}_q\tilde{f}_{q'}\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'})] \\
& + \sum_{qq'}[\tilde{V}_q\rho_q(\mathrm{ch}\tilde{\phi}_{qq'} - \mathrm{sh}\tilde{\phi}_{qq'})\tilde{f}_q + \tilde{V}_{q'}\rho_{q'}(\mathrm{ch}\tilde{\phi}_{qq'} - \mathrm{sh}\tilde{\phi}_{qq'})\tilde{f}_{q'}] \\
& + \alpha_1^2 r_0^2 \sum_{qq'}(q\cdot q')\Big\{\Big[\frac{1}{2}(\tilde{f}^2_q + \tilde{f}^2_{q'})\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'} - \tilde{f}_q\tilde{f}_{q'}\mathrm{ch}2\tilde{\phi}_{qq'}\Big]\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'} \\
& + [(\tilde{f}^2_q + \tilde{f}^2_{q'})\mathrm{ch}2\tilde{\phi}_{qq'} - 2\tilde{f}_q\tilde{f}_{q'}\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'})]\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'}\Big\}.
\end{aligned} \tag{15}$$

2.2. 变分方程,基态能量

我们下面通过变分极值方程求出 $\tilde{f}_q$ 与 $\tilde{\phi}_{qq'}$ 的近似解结果. 应用(15)式

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\tilde{E}}{\partial\tilde{f}_q} = {} & \sum_{q'}\Big[B_q\Big(\tilde{f}_q\mathrm{ch}^2\tilde{\phi}_{qq'} - \frac{1}{2}\tilde{f}_{q'}\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'}\Big) + B_{q'}\Big(\tilde{f}_q\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'} - \frac{1}{2}\tilde{f}_{q'}\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'}\Big)\Big] \\
& + \sum_q \tilde{V}_q\rho_q(\mathrm{ch}\tilde{\phi}_{qq'} - \mathrm{sh}\tilde{\phi}_{qq'}) \\
& + \alpha_1^2 r_0^2\sum_{qq'}(q\cdot q') \\
& \times[(\tilde{f}_q\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'} - \tilde{f}_{q'}\mathrm{ch}2\tilde{\phi}_{qq'})\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'} \\
& + 2(\tilde{f}_q\mathrm{ch}2\tilde{\phi}_{qq'} - \tilde{f}_{q'}\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'})\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'}] \\
= {} & 0.
\end{aligned} \tag{16}$$

由于 q,q' 对称性,类似

$$\frac{\partial\tilde{E}}{\partial\tilde{f}_{q'}} = \frac{\partial\tilde{E}}{\partial\tilde{f}_q}\Big|_{q\to q', q'\to q} = 0. \tag{16$'$}$$

应用变分方程 $\frac{\partial\tilde{E}}{\partial\tilde{f}_q} = 0$ 与 $\frac{\partial\tilde{E}}{\partial\tilde{f}_{q'}} = 0$,可得

$$\begin{aligned}
& \alpha_1^2 r_0^2\sum_{qq'}(q\cdot q')\Big\{\Big[\frac{1}{2}(\tilde{f}^2_q + \tilde{f}^2_{q'})\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'} - \tilde{f}_q\tilde{f}_{q'}\mathrm{ch}2\tilde{\phi}_{qq'}\Big]\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'} \\
& + [(\tilde{f}^2_q + \tilde{f}^2_{q'})\mathrm{ch}2\tilde{\phi}_{qq'} - 2\tilde{f}_q\tilde{f}_{q'}\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'}]\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'}\Big\} \\
= {} & -\frac{1}{2}\sum_{qq'}[B_q(\tilde{f}^2_q\mathrm{ch}^2\tilde{\phi}_{qq'} + \tilde{f}^2_{q'}\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'} - \tilde{f}_q\tilde{f}_{q'}\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'}) \\
& + B_{q'}(\tilde{f}^2_{q'}\mathrm{ch}^2\tilde{\phi}_{qq'} + \tilde{f}_q\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}^2_{qq'} - \tilde{f}_q\tilde{f}_{q'}\mathrm{sh}2\tilde{\phi}_{qq'})] \\
& - \frac{1}{2}\sum_{qq'}[\tilde{V}_q\rho_q(\mathrm{ch}\tilde{\phi}_{qq'} - \mathrm{sh}\tilde{\phi}_{qq'})\tilde{f}_q + \tilde{V}_{q'}\rho_{q'}(\mathrm{ch}\tilde{\phi}_{qq'} - \mathrm{sh}\tilde{\phi}_{qq'})\tilde{f}_{q'}],
\end{aligned} \tag{17}$$

因而基态能量约化成

$$\tilde{E} = \frac{3}{2}\lambda^2 r_0^2(1-\alpha_1)^2 + \frac{1}{2}\sum_{qq'}(B_q + B_{q'})\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'} + \sum_{qq'}\tilde{V}_q\rho_q\tilde{f}_q(\mathrm{ch}\tilde{\phi}_{qq'} - \mathrm{sh}\tilde{\phi}_{qq'}). \tag{18}$$

考虑到 $\tilde{\phi}_{qq} = \phi_{qq'}/N$ 是个很小的量, $\mathrm{sh}\tilde{\phi}_{qq} \approx \phi_{qq'}/N, \mathrm{ch}\tilde{\phi}_{qq} \approx 1$, 这时从(16)式可解得 $\tilde{f}_q$ 近似表

示为

$$\begin{aligned}\tilde f_q \approx &-\sum_{q'}\frac{\tilde V_q\rho_q}{B_q}\left(1-\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)\\&-\sum_{q'}\frac{B_q+B_{q'}}{B_qB_{q'}}\tilde V_{q'}\rho_{q'}\left(1-\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)\left(\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)\\&-\alpha_1^2r_0^2\sum_{q'}\frac{(q\cdot q')}{B_qB_{q'}}\\&\times\tilde V_{q'}\rho_{q'}\left(\frac{2\phi_{qq'}}{N}\right)\left(1-\frac{\phi_{qq'}}{N}\right).\end{aligned}\tag{19}$$

与 Altanhan 位移-声子压缩态 $|\psi\rangle = D(f)S(\phi)|0\rangle$ 结果相比较[16,17]，由于声子相干态-压缩声子态关联效应修正，$\tilde f_q$ 引出了第二项和第三项(与 $b_q - b_{q'}$ 声子间动力学关联有关修正项)修正项，以及相干态项 $-\frac{\tilde V_q\rho_q}{B_q}$ 修正为 $-\sum_{q'}\frac{\tilde V_q\rho_q}{B_q}\left(1-\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)$，特别是相干态的压缩效应修正，使相干参量 f_q 有显著大幅度增加，从而大大增强了有效电子-声子相互作用 $\tilde V_q\rho_q\tilde f_q$. 跟着我们再求 $\tilde\phi_{qq'}$ 的变分方程

$$\begin{aligned}\frac{\partial\tilde E}{\partial\phi_{qq'}}=&\frac12(B_q+B_{q'})\mathrm{sh}2\tilde\phi_{qq'}+\frac12(B_q+B_{q'})\\&\times[(\tilde f_q^2+\tilde f_{q'}^2)\mathrm{sh}2\tilde\phi_{qq'}-2\tilde f_q\tilde f_{q'}\mathrm{ch}2\tilde\phi_{qq'}]\\&-(\tilde V_q\rho_q\tilde f_q+\tilde V_{q'}\rho_{q'}\tilde f_{q'})\\&\times(\mathrm{ch}\tilde\phi_{qq'}-\mathrm{sh}\tilde\phi_{qq'})+\alpha_1^2r_0^2(q\cdot q')\\&\times[\tilde f_q\tilde f_{q'}(-2\mathrm{ch}4\tilde\phi_{qq'}-4\mathrm{ch}2\tilde\phi_{qq'}\mathrm{sh}^2\tilde\phi_{qq'}\\&-2\mathrm{sh}^22\tilde\phi_{qq'})+(\tilde f_q^2+\tilde f_{q'}^2)\\&\times(3\mathrm{sh}2\tilde\phi_{qq}\mathrm{ch}2\tilde\phi_{qq'}\\&+2\mathrm{sh}2\tilde\phi_{qq'}\mathrm{sh}^2\tilde\phi_{qq'})]=0,\end{aligned}\tag{20}$$

注意到近似 $\mathrm{ch}\frac{\phi_{qq}}{N}\approx1$, $\mathrm{sh}\frac{\phi_{qq'}}{N}\approx\frac{\phi_{qq'}}{N}$, 我们求得

$$\begin{aligned}\frac{\phi_{qq'}}{N}\approx&\tilde f_q\tilde f_{q'}-(\tilde f_q^2+\tilde f_{q'}^2)\left(\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)\\&+\frac{\tilde V_q\rho_q\tilde f_q+\tilde V_{q'}\rho_{q'}\tilde f_{q'}}{B_q+B_{q'}}\left(1-\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)\\&+\alpha_1^2r_0^2\frac{(q\cdot q')}{B_q+B_{q'}}\Big[2\tilde f_q\tilde f_{q'}\\&-6\left(\tilde f_q^2+\tilde f_{q'}^2\right)\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)\Big].\end{aligned}\tag{21}$$

显然，(21)式对 q, q' 对称. 与位移-声子压缩态方法得到的第四项比较，压缩相干态效应导致 $\mathrm{sh}\frac{\phi_{qq'}}{N}$ 方程中多出修正项 $\tilde f_q\tilde f_{q'}$，

$$(\tilde V_q\rho_q\tilde f_q+\tilde V_{q'}\rho_q f_{q'})\left(1-\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)/(B_q+B_{q'})$$

与小修正项

$$-6\alpha_1^2r_0^2(q\cdot q')(\tilde f_q^2+\tilde f_{q'}^2)\left(\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)/(B_q+B_{q'}),$$

从而使压缩角 $\tilde\phi_{qq'}$ 效应增大.

我们注意到 $\tilde\phi_{qq'}=\tilde\phi_{q'q}$ 对 q, q' 对称性，但 $\tilde f_q$ 对 q, q' 不对称，因而从物理上 $q-q'$ 关联对称性原因考虑，凡是 $\tilde E$ 中来自于 $\phi_{qq'}$ 贡献的项目只取满足对 (q, q') 对称性要求项目，而剪掉对 (q, q') 不对称的组态求和项目. 并且，本文只计入到 α^2 一阶的修正项，经过归并整理后，此时基态能量 $\tilde E$ 修正成为

$$\begin{aligned}\tilde E=&\frac32\lambda^2r_0^2(1-\alpha_1)^2\\&-\sum_q\frac{\tilde V_q^2\rho_q^2}{B_q}+\Delta E_c^{(1)}+\Delta E_c^{(2)},\end{aligned}\tag{22}$$

$$\begin{aligned}\Delta E_c^{(1)}=&-2\alpha_1^4r_0^4\sum_{qq'}(q\cdot q')^2\\&\times\frac{\tilde V_q^2\rho_q^2\tilde V_{q'}^2\rho_{q'}^2}{B_q^2B_{q'}^2(B_q+B_{q'})},\end{aligned}\tag{23}$$

$$\begin{aligned}\Delta E_c^{(2)}=&-\frac12\sum_{qq'}\frac{B_q+B_{q'}}{B_q^2B_{q'}^2}\tilde V_q^2\rho_q^2\tilde V_{q'}^2\rho_{q'}^2\\&-\sum_{qq'}\frac{\tilde V_q^2\rho_q^2\tilde V_{q'}^2\rho_{q'}^2}{B_qB_{q'}(B_q+B_{q'})}\\&-2\alpha_1^2r_0^2\sum_{qq'}(q\cdot q')\frac{\tilde V_q^2\rho_q^2\tilde V_{q'}^2\rho_{q'}^2}{B_q^2B_{q'}^2},\end{aligned}\tag{24}$$

$\tilde E$ 中 $\Delta E_c^{(1)}$ 代表位移-声子压缩态的半经典结果[17,22]，而 $\Delta E_c^{(2)}$ 代表由于声子相干态压缩效应而带来的非经典态修正项目.

3. 数值结果与说明

为了讨论分析本文的结果，我们将(22)式的 $\tilde E$ 有关项目完成积分表示以作数值计算，得

$$\tilde E=E_0+\Delta E_c^{(1)}+\Delta E_c^{(2)},\tag{25}$$

$$\begin{aligned}E_0=&\frac32\tilde\lambda^2(1-\alpha_1)^2\\&-\alpha(1+\sqrt2\tilde\lambda\beta)[1-\mathrm{erf}(\beta)]\mathrm{e}^{\beta^2},\end{aligned}\tag{26}$$

$$\Delta E_c^{(1)} = -\frac{8}{3\pi^2}\alpha^2(1+\sqrt{2\tilde{\lambda}}\beta)^2 \times \int_0^\infty dx_1 \int_0^\infty dx_2 \times \frac{x_1^2 x_2^2 e^{-\beta^2(x_1^2+x_2^2)}}{(1+x_1^2)^2(1+x_2^2)^2(2+x_1^2+x_2^2)}, \quad (27)$$

$$\begin{aligned}\Delta E_c^{(2)} = & -\frac{2}{\pi^2}\alpha^2(1+\sqrt{2\tilde{\lambda}}\beta)^2\int_0^\infty dx_1\int_0^\infty dx_2 \times \frac{(2+x_1^2+x_2^2)e^{-\beta^2(x_1^2+x_2^2)}}{(1+x_1^2)^2(1+x_2^2)^2} \\ & -\frac{4}{\pi^2}\alpha^2(1+\sqrt{2\tilde{\lambda}}\beta)^2\int_0^\infty dx_1\int_0^\infty dx_2 \times \frac{e^{-\beta^2(x_1^2+x_2^2)}}{(1+x_1^2)(1+x_2^2)(2+x_1^2+x_2^2)} \\ & -\frac{1}{\pi}\alpha^2(1+\sqrt{2\tilde{\lambda}}\beta)^2\int_0^\infty dx_1\int_0^\infty dx_2 \times \frac{x_1x_2e^{-\beta^2(x_1^2+x_2^2)}}{(1+x_1^2)^2(1+x_2^2)^2},\end{aligned} \quad (28)$$

此处，$\tilde{\lambda} = \lambda r_0, \beta = (1-\alpha_1)/\sqrt{2\tilde{\lambda}}\alpha_1, x_1 = \alpha_1 r_0 q, x_2 = \alpha_1 r_0 q'$. 为了与 Huybrechts 的结果相对照，我们令

$$\tilde{\lambda} = \sqrt{\frac{\lambda_0}{2}}, 1+\sqrt{2\tilde{\lambda}}\beta = 1+\sqrt{\lambda_0}\beta. \quad (29)$$

在我们现在的工作中，由于采用 Huybrechts 方案，因而可以适用于整个电子-声子相互耦合区域 [12]，有利于计算分析和应用，因此克服了 Altanhan 等人的方法缺陷 [16,17]. 下面我们分析出若干重要结果，从中可以看出非经典效应的贡献与重要性.

1) $\alpha_1 = 1$，此时 $\beta = 0$.

只考虑位移-声子压缩态效应，

$$\tilde{E}_0 = -\alpha + \Delta E_c^{(1)} = -\alpha - 0.0135\alpha^2, \quad (30)$$

这正好是 Altanhan 的结果 [16]. 在这个耦合区域，Feynman 的修正 $\Delta E_f = -0.0123\,\alpha^2$，Barentzen 的修正是 $-0.0126\,\alpha^2$. 从这一点可以看到，耦合电子-声子系统位移-声子压缩态效应修正应比 Feynman 的路径积分的量子效应要大一些（这说明一个物理系统的真实基态，不是只凭数学方法可以解决的，而是需要找到真正的物理图像，才是解决问题的根本途径）.

我们再来看看双模-压缩相干态效应的结果，

$$\tilde{E} = -\alpha - 0.0135\alpha^2 + \Delta E_c^{(1)} + \Delta E_c^{(2)}, \quad (31)$$

其中非经典修正 $\Delta E_c^{(2)}$ 为

$$\Delta E_c^{(2)} = -0.761\alpha^2. \quad (32)$$

显然，考虑双模-压缩相干态效应，除了声子压缩效应贡献 $\Delta E_c^{(1)}$ 外，还附加一项由于声子相干态-声子压缩态效应带来更重要修正 $\Delta E_c^{(2)}$ 的贡献，它远远大于双模声子压缩态效应和 LLPH, Feynman 等人相干态效应的贡献.

2) 弱耦合情形：$\alpha \to 0$；$(\alpha \to 1, \beta \to 0)$. 此时

$$\begin{aligned}E_0 &= \frac{3}{4}\lambda_0(1-\alpha^2)^2 - \alpha(1+\sqrt{\lambda_0}\beta)\,\mathrm{erfc}(\beta)e^{\beta^2} \\ &\approx \frac{3}{4}\lambda_0^2\beta^2 - \alpha\left[1+\left(\sqrt{\lambda_0}-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\right)\beta\right].\end{aligned} \quad (33)$$

从 λ_0 与 β 的极值方程可求得 $\lambda_0 = 5.09, \beta = 0.029\alpha$，因而只计及相干态效应，极化子基态能量为

$$E_0 = -\alpha + \Delta E_0 = -\alpha - 0.0163\alpha^2, \quad (34)$$

这正是 Huybrechts 的结果. 而 Feynman 等人的路径积分二阶展开的修正是 $\Delta E_f = -0.0159\alpha^2$，Larsen 的四阶微扰论修正为 $-0.01592\alpha^2$；与此同时，位移-声子压缩态效应（$\Delta E_c^{(1)}$），以及声子相干态的双模压缩效应（$\Delta E_c^{(2)}$）相应的修正分别为

$$\Delta E_c^{(1)} = -0.0125(1+0.065\alpha)\alpha^2, \quad (35)$$

$$\Delta E_c^{(2)} = -0.753(1+0.065\alpha)\alpha^2. \quad (36)$$

以上结果说明，在弱耦合情形，虽然位移-声子压缩态效应修正接近 Huybrechts（ΔE_0）（与 Feynman（ΔE_f））等人相干态方法修正，使极化子能量有进一步更负的修正 $\Delta E_c^{(1)}$，但我们发现由于双模-压缩相干态导致的声子相干态-声子压缩态关联效应在弱耦合情形起着远为更重要作用，$\Delta E_c^{(2)}$ 使极化子能量显著更负，即 $\Delta E_c^{(2)} \ll (\Delta E_f, \Delta E_0)$.

3) 强耦合情形：$\alpha > 10$；$(\alpha_1 \to 0, \beta \to \infty)$. 此时

$$E_0 \approx \frac{3}{4}\lambda_0 - \frac{3}{2}\frac{\sqrt{\lambda_0}}{\beta} - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\lambda_0} - \frac{\alpha}{\beta\sqrt{\pi}} + \frac{\alpha\sqrt{\lambda_0}}{2\beta^2\sqrt{\pi}}. \quad (37)$$

从 λ_0 与 β 的极值方程我们得出

$$\sqrt{\lambda_0} = \frac{2}{3\sqrt{\pi}}\alpha, \sqrt{\lambda_0} = 2\beta, \quad (38)$$

由此

$$E_0 = -3.0 + \Delta E_0 = -3.0 - 0.106\alpha^2. \quad (39)$$

这是 Huybrechts 曾得到的结果. Feynman 的结果是 $-2.83 - 0.106\alpha^2$，而 Miyake 的结果是 $-2.836 - 0.108\alpha^2$. 与此同时，

$$\Delta E_c^{(1)} = -0.000181(1+0.071\alpha^2)\alpha^2, \quad (40)$$

$$\Delta E_c^{(2)} = -0.1094(1+0.071\alpha^2)\alpha^2. \quad (41)$$

这说明在强耦合情形，位移-声子压缩态效应明显减弱，它远远比不上相干态效应重要，$\Delta E_c^{(1)} \gg (\Delta E_0,$

ΔE_{f});另一方面,虽然声子相干态压缩效应在强耦合时也会明显减弱,由于 $(1+0.071\alpha^2)\alpha^2$ 存在仍有 $\Delta E_{\mathrm{c}}^{(2)} \ll (\Delta E_0, \Delta E_{\mathrm{f}})$,因而还必须计及这一重要修正.

4. 结 论

从本文结果的分析,我们得出如下重要结论:

1. 本文采用的双模-压缩(声子)相干态是一种非经典相干态,与位移-声子压缩态比较,更准确地算度波矢 q, q' 声子间动力学关联 $\alpha_1^2 r_0^2 \sum_{qq'} (q \cdot q') b_q^+ b_{q'}^+ b_q b_{q'}$,由此更进一步增强反聚束效应和亚泊松统计行为.

2. 由于双模-压缩(声子)相干态效应导致声子相干态-声子压缩态关联作用,耦合电子-声子系统基态能量产生了相应的关联效应修正项

$$
\begin{aligned}
\Delta\tilde{E}(f,\phi) = & -\frac{1}{2}\sum_{qq'}(B_q + B_{q'})\tilde{f}_q\tilde{f}_{q'}\mathrm{sh}\tilde{\phi}_{qq'} \\
& - \sum_{qq'}(\tilde{V}_q\rho_q\tilde{f}_q + \tilde{V}_{p'}\rho_{q'}\tilde{f}_{q'})\mathrm{sh}\tilde{\phi}_{qq'} \\
& + \frac{1}{2}\sum_{qq'}[B_q(\tilde{f}_q^2\mathrm{ch}^2\tilde{\phi}_{qq'} + \tilde{f}_{q'}^2\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'}) \\
& + B_{q'}(\tilde{f}_{q'}^2\mathrm{ch}^2\tilde{\phi}_{qq'} + \tilde{f}_q^2\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'})] \\
& + \alpha_1^2 R_0^2\sum_{qq'}(q\cdot q')(\tilde{f}_q^2 + \tilde{f}_{q'}^2) \\
& \times\left(\frac{1}{2}\mathrm{sh}^2 2\tilde{\phi}_{qq'} + \mathrm{ch}\tilde{\phi}_{qq'}\mathrm{sh}^2\tilde{\phi}_{qq'}\right) + \cdots,
\end{aligned}
$$

由此,相干参量 $\tilde{f}_q$ 使原来的相干态项带来修正项

$$
\begin{aligned}
\Delta\tilde{f}_q \approx & -\sum_{q'}\frac{B_q + B_{q'}}{B_q B_{q'}}\tilde{V}_{q'}\rho_{q'}\left(\frac{\phi_{qq'}}{N}\right) \\
& - \sum_{q'}\frac{\tilde{V}_q\rho_q}{B_q}\left(1 - \frac{\phi_{qq'}}{N}\right) \\
& - 2\alpha_1^2 r_0^2\sum_{q'}\frac{(q\cdot q')}{B_q B_{q'}}\tilde{V}_{q'}\rho_{q'}\left(\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)^2 + \cdots,
\end{aligned}
$$

它显著增强了相干效应.特别是相干参量 $\tilde{f}_q$ 修正项 $-\sum_{q'}\frac{B_q + B_{q'}}{B_q B_{q'}}\tilde{V}_{q'}\rho_{q'}\left(\frac{\phi_{qq'}}{N}\right)$ 对非经典态效应起着最主要的贡献;与此同时压缩角 $\frac{\phi_{qq'}}{N}$ 修正由原来的声子相干态关联项 $2\alpha_1^2 r_0^2\frac{(q\cdot q')}{B_q + B_{q'}}f_q\tilde{f}_{q'}$ 增添了声子相干态压缩效应修正项

$$
\begin{aligned}
\Delta\frac{\phi_{qq'}}{N} \approx & \tilde{f}_q\tilde{f}_{q'} - (\tilde{f}_q^2 + \tilde{f}_{q'}^2)\left(\frac{\phi_{qq'}}{N}\right) \\
& + \frac{\tilde{V}_q\rho_q\tilde{f}_q + \tilde{V}_{q'}\rho_{q'}\tilde{f}_{q'}}{B_q + B_{q'}}\left(1 - \frac{\phi_{qq'}}{N}\right) \\
& - 6\alpha_1^2 r_0^2\frac{(q\cdot q')}{B_q + B_{q'}}(\tilde{f}_q + \tilde{f}_{q'})\frac{\phi_{qq'}}{N} + \cdots,
\end{aligned}
$$

特别是修正项 $\tilde{f}_q\tilde{f}_{q'}$ 起着大大增强双模压缩角($\phi_{qq'}$)效应. $\tilde{f}_q$ 与 $\phi_{qq'}$ 的显著增强,其直接效果是有效增强电子-声子相互作用,从而使极化子基态能量远比声子相干态效应更负.

3. Altanhan 等人的方法[16,17]虽然给出了位移-声子压缩态效应的修正项 $\Delta E_{\mathrm{c}}^{(1)}$,他们只是给出 $\alpha_1 = 1$ 这一极限的结果,但无法给出整个电子-声子耦合区域的分析结果.本文采用 Huybrechts 方法,基于双模-压缩(声子)相干态效应,除了给出与 Huybrechts 相同的相干态项 E_0 外,并超出 Huybrechts 结果给出了非经典态修正项 $\Delta E_{\mathrm{c}}^{(1)}$ 与 $\Delta E_{\mathrm{c}}^{(2)}$.因而本文的处理与 Huybrechts 相同,对整个电子-声子耦合作用区域都适用.结果表明:1)在 $\alpha_1 = 1$ 情形,$\Delta E_{\mathrm{c}}^{(1)}$ 比 Feynman 的结果 ΔE_{f} 更负,说明此时位移-声子压缩态效应比 Feynman 路径积分量子效应要大;但另一方面,$\Delta E_{\mathrm{c}}^{(2)} \ll \Delta E_{\mathrm{c}}^{(1)}$,从这深一层次阐明,双模-压缩(声子)相干态效应(非经典态)远远超出相干态效应和 Feynman 的路径积分量子效应. 2)在弱耦合情况,虽然位移-声子压缩态修正项 $\Delta E_{\mathrm{c}}^{(1)}$($\sim -0.0125\alpha^2$)接近相干态效应修正 ΔE_0($\sim -0.0163\alpha^2$)和 Feynman 等人的四阶微扰论结果 ΔE_{f}($\sim -0.0159\alpha^2$),但要注意,计入位移-声子压缩态效应后,$\Delta E_0 + \Delta E_{\mathrm{c}}^{(1)} < \Delta E_{\mathrm{f}}$.特别要指出,由于声子相干态的压缩效应导致的声子相干态-声子压缩态关联的修正 $\Delta E_{\mathrm{c}}^{(2)}$($\sim -0.753\alpha^2$) $\ll (\Delta E_0, \Delta E_{\mathrm{f}})$,它说明这一关联效应在弱耦合电子-声子系统远远大于相干态效应和位移-声子压缩态效应. 3)在强耦合情形,相干态效应修正 $\Delta E_0 \sim \Delta E_{\mathrm{f}}$,但位移-声子压缩态效应的修正 $\Delta E_{\mathrm{c}}^{(1)} \gg (\Delta E_0, \Delta E_{\mathrm{f}})$,说明位移-声子压缩态效应只是在弱耦合情形显得重要,而在强耦合情形远不重要而可以忽略.与此同时,双模-压缩(声子)相干态由于声子相干态-声子压缩态关联修正 $\Delta E_{\mathrm{c}}^{(2)}$($\sim -0.1094\alpha^2$) $\ll (\Delta E_0, \Delta E_{\mathrm{f}})$,从这些结果分析说明,在整个电子-声子耦合区域内,双模-压缩(声子)相干态效应不

但远远比位移-声子压缩态效应重要,而且也远远比 Feynman 路径积分量子效应和声子相干态效应重要,也正是这样,我们有理由期望实验上观测到这些非经典效应.

[1] Zhao C L, Gao K Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4857 (in Chinese) [赵翠兰、高宽云 2010 物理学报 **59** 4857]

[2] 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]

[3] Gao K, Liu X J, Liu D S, Jie S J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5324 (in Chinese) [高 琨、刘晓静、刘德胜、解士杰 2005 物理学报 **54** 5324]

[4] Xie Y L, Chen Z D 2009 *Chin. Phys.* B **18** 5038

[5] Yu Y F, Xiao J L, Yin J W, Wang Z W 2008 *Chin. Phys.* B **17** 2236

[6] Xing Yan, Wang Zhi – Ping, Wang Xu 2009 *Chin. Phys.* B **18** 1935

[7] Larsen D M 1968 *Phys. Rev.* **174** 1046

[8] Röseler J 1968 *Phys. Status Solidi* **25** 311

[9] Miyake S J 1976 *J. Phys. Soc. Japan* **41** 747

[10] Lee T D, Low F, Pines D 1953 *Phys. Rev.* **90** 297

[11] Feynman R P 1955 *Phys. Rev.* **97** 660

[12] Huybrechts W J 1976 *J. Phys.* C. *Solid State Phys.* **9** L211

[13] Naoki T 1980 *J. Phys.* C. *Solid State Phys.* **13** L851

[14] Tiablikov S V 1962 *Sov. Phys. Solid State* **3** 2500

[15] Mitra T K, Chatterjee A, Mukhopadhyay S 1987 *Phys. Rep.* **153** 91

[16] Altanhan T, Kandemir B S 1993 *J. Phys. Condens. Matter* **5** 6729

[17] Kandemir B S, Altan han T 1994 *J. Phys. Condens Matter* **6** 4505

[18] Kervan N, Altanhan T, Chattergee A 2003 *Phys. Letters* A **315** 2003

[19] Lo C F, Sollie R 1993 *Phys. Rev.* A **47** 773

[20] Dodonov V V 2002 *J. Opt.* B: *Quantum S O* **4** R1

[21] Bilge S, Altanhan T 2000 *J. Phys. Condens Mater* **12** 1837

[22] Krishna P M, Mukhopadhyay S, Chatterjee A 2002 *Int. J. Mod. Phys.* B **16** 1489

[23] Yu C F, L G D, Cao X J 2008 *Acta. Phys. Sin.* **57** 4402 (in Chinese) [余超凡、梁国栋、曹锡金 2008 物理学报 57 4402]

Nonclassical ground state for Fröhlich polaron *

Luo Zhi-Hua† Yu Chao-Fan Lin Qia-Wu

(*Department of Physics*, *Guangdong University of Education*, *Guangzhou* 510303, *China*)

(Received 21 June 2009; revised manuscript received 3 November 2010)

Abstract

Based on the variational approach proposed by Huybrecht, using the two-mode squeezed coherent state as the second-step canonical transformation, we have investigated the nonclassical ground state for the Fröhlich polaron through considering the dynamical correlation bewteen the phonon wave vectors q and q'. Due to the correlation effect between the phonon coherent state and the phonon squcezed state, caused by the two-mode squeezing effect of the phonon coherent state, the coherent parameter $\tilde{f}_q$ and the two-mode squeezing angle $\phi_{qq'}$ also have a big correction correspondingly. As a result, this effect has greatly enhanced the coherent effect and the squeezing angle effect. The calculation and the analysis based on the ground state energy of the polaron have shown that 1) for the weakly coupled region, the correction $\Delta E_c^{(1)}$ due to the effect of the displaced-phonon squcezed state is comparable to the Feynma n' s path integral calculation (ΔE_f) and the coherent state correetion by Huybrechts (ΔE_0), while the correction ($\Delta E_c^{(2)}$) due to the squeezing effect of the phonon coherent state has an essential contribution, i. e. $\Delta E_c^{(2)} \ll (\Delta E_f, \Delta E_0)$; 2) for the strongly-coupled region, the contribution from the displaced-phonon squcezed state has a greatly reduction, $\Delta E_c^{(1)} \gg (\Delta E_f, \Delta E_0)$. Althougth, at the same time, the contribution due to the squeezing effect of the phonon coherent state also has a greatly reduction, we still have $\Delta E_c^{(2)} \ll (\Delta E_f, \Delta E_0)$.

Keywords: two-mode squeezed coherent state, displaced-phonon squcezed state, Fröhlich polaron, nonclassical ground state

PACS: 71.38.-k, 67.85.De, 67.85.Fg, 67.85.Bc

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10574163).

† E-mail: lo-zh@126.com