

1:3 Peierls 系统中的极化子

邢定钰 龚昌德

(南京大学固体物理研究所)

1984年3月7日收到

提 要

在可约数为3的一维 Peierls 系统中,我们运用 SSH 模型的连续极限得到了极化子解. 在弱耦合极限下,这一极化子解严格满足离子位移序参量的自治条件. 我们给出了极化子的形成能和特征宽度,并讨论了可约数为 M 的一般情况下可能的孤子激发.

一、引 言

非线性激发在一维 Peierls 系统中起重要作用,已引起广泛的理论工作者和实验工作者的兴趣. 最引人注目的是反式结构聚乙炔 $[\text{trans}-(\text{CH})_x]$ 中的扭折(kink)孤子. 微观的电声子耦合模型^[1-3]的研究表明,这种可约数为2的 Peierls 系统中的扭折孤子,在能隙中央形成局域态,具有特殊的电荷和自旋关系. 聚乙炔中另一类重要的非线性激发是极化子^[4,5]. 极化子可看作是一对扭折的束缚态,预期在低掺杂聚乙炔材料中这两类孤子都可存在^[6].

Su 和 Schrieffer^[7] 首先用 SSH 分立模型^[1]研究 1:3Peierls 系统,提出可能存在的扭折孤子将具有分数电荷($e/3$ 的整数倍). 最近文献[8]取了 SSH 模型的连续极限和弱耦合极限,从电子波函数的 BdG 方程得到了扭折孤子的解析解. 但他们所得的扭折解不满足能隙自治方程,自治条件的成立要求扭折态上有分数电子数的占有. 为解决这一矛盾,他们提出了两种解释:一种是分数电子数占有的分子轨道假定;另一种是对能隙自治方程进行修正.

我们在文献[8]同样的极限条件下考察一对扭折,即一个第 I 类和一个第 II 类扭折^[7]. 结果发现:严格满足最低级近似下自治条件的非线性激发只能是这一对扭折组成的束缚态,即极化子.

二、基本方程和扭折孤子

在可约数为3的 Peierls 系统中,SSH 哈密顿量的连续极限已经得到(见文献[8]的(4)式). 对连续哈密顿量变分,可得到电子波函数 $u(x)$, $v(x)$ 的微分方程和离子位移序参量 $\Delta(x)$ 的自治方程,尤其在弱耦合极限 ($\Delta_0/W \ll 1$, $2\Delta_0$ 和 W 分别为能隙和能带宽),可忽略 Δ/W 量级的项,得到与双聚化不可约情况^[3]相同形式的 BdG 方程和 $\Delta(x)$ 的自治方程.

$$\begin{aligned}\varepsilon_n u_n &= -i v_F \frac{d}{dx} u_n + \Delta(x) v_n, \\ \varepsilon_n v_n &= i v_F \frac{d}{dx} v_n + \Delta^+(x) u_n\end{aligned}\quad (1)$$

和

$$\Delta(x) = - (g^2/\omega_Q^2) \sum'_{n,s} v_{n,s}^* u_{n,s}. \quad (2)$$

这里 g^2/ω_Q^2 描述有效电声子耦合, $v_F = 2t_0 a \sin(k_F a)$, t_0 是 SSH 哈密顿量中 π 电子在最近邻格点之间的跃迁积分, a 为晶格常数. (2) 式中求和仅对电子的占有态进行.

方程(1),(2)的基态解是均匀三聚化情况. 其单电子能谱为

$$\varepsilon = (v_F^2 k^2 + |\Delta|^2)^{1/2}, \quad |\Delta| = W \exp(-\pi v_F \omega_Q^2 / g^2).$$

离子实际位移还取决于序参量 Δ 中的幅角 θ_0 , 在 1:3 Peierls 系统中 $\theta_0 = \pi/6$,

$$\frac{\pi}{6} + \frac{2\pi}{3}, \quad \frac{\pi}{6} + \frac{4\pi}{3},$$

对应于三个简并基态^[7].

扭折孤子序参量的解析形式为^[8]

$$\Delta(x) = \Delta_0 e^{i(\theta_0 - \theta_k)} (\cos \theta_k + i \sin \theta_k \tanh(x/\xi_0)). \quad (3)$$

其单电子能谱中出现了能隙中的扭折态 $E_0 = \Delta_0 \cos \theta_k$, $\theta_k = \pi/3(2\pi/3)$ 对应于第 I(II) 类扭折孤子. (3) 式中 $\xi_0 = v_F/\Delta_0 \sin \theta_k$ 是表征扭折扩展宽度的参数. 由序参量(3)式出发得到的扭折态和价带扩展态的波函数^[8]不满足自洽方程(2), 即不满足系统能量变分极小的条件. 如第 I 类扭折的自洽条件可写为

$$(g^2/\omega_Q^2) \operatorname{sech}^2(x/\xi_0) \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{4} n_c \right) / \xi_0 = 0, \quad (4)$$

其中 n_c 为扭折态上电子占有数. 上式成立的第一种可能是 $\xi_0 \rightarrow \infty$, 这约化为均匀三聚化基态; 第二种可能是 $n_c = 2/3$, 这导致了分数电子数的困难, 虽然文献^[8]提出了两种解释, 但缺乏令人信服的论证.

三、极化子解

我们考察相距 $2x_0$ 的一对扭折孤子 (I + II), 选用试探序参量函数

$$\Delta(x) = \Delta_0 e^{i(\theta_0 - \theta_k)} \{ \cos \theta_k + i \sin \theta_k (1 - \kappa_0 \xi_0 \tanh[\kappa_0(x + x_0)] + \kappa_0 \xi_0 \tanh[\kappa_0(x - x_0)]) \} \quad (5)$$

和

$$\tanh[2\kappa_0 x_0] = \kappa_0 \xi_0. \quad (6)$$

这里只引进了一个独立参变量 x_0 (或 κ_0), 将由自洽方程(2)来定. ξ_0 和 θ_k 的定义同前. 把序参量 $\Delta(x)$ 代入 BdG 方程(1), 我们解得能隙内局域态能级为 $\pm E_p$, $E_p = (\Delta_0^2 - \kappa_0^2 v_F^2)^{1/2}$, 相应的波函数为

$$u_{\pm 0} = \{ A_{\pm} \operatorname{sech}[\kappa_0(x + x_0)] \pm i A_{\mp} \operatorname{sech}[\kappa_0(x - x_0)] \} \exp[i(\theta_0 - \theta_k)/2],$$

$$v_{\pm 0} = \{A_{\pm} \cdot \text{sech}[\kappa_0(x + x_0)] \mp iA_{\mp} \cdot \text{sech}[\kappa_0(x - x_0)]\} \exp[-i(\theta_0 - \theta_k)/2]. \quad (7)$$

这里 ± 0 表示能量为 $\pm E_p$ 的局域态, $A_{\pm} = [(E_p \pm \Delta_0 \cos \theta_k)/8\kappa_0 E_p]^{1/2}$. 价带和导带的色散关系与基态相同, 但电子波函数发生相移. 解出价带中电子波函数为

$$\begin{aligned} u^v &= B(t_+ - (\kappa v_F + i\Delta_0 \sin \theta_k)/(E_p - \Delta_0 \cos \theta_k) \cdot t_-) e^{ikx} \cdot e^{i(\theta_0 - \theta_k)/2}, \\ v^v &= B(t_+ + (\kappa v_F + i\Delta_0 \sin \theta_k)/(E_p - \Delta_0 \cos \theta_k) \cdot t_-) e^{ikx} \cdot e^{-i(\theta_0 - \theta_k)/2}. \end{aligned} \quad (8)$$

这里

$$t_{\pm} = k/\kappa_0 + i \tanh[\kappa_0(x \pm x_0)], \quad B^2 = \kappa_0^2(E_p - \Delta_0 \cos \theta_k)/[4LE_p(k^2 + \kappa_0^2)].$$

对于(6)式给出的任何 κ_0 值($\kappa_0 \xi_0 \leq 1$), 上面得到的 u, v 的解都满足 BdG 方程, 但为了满足自洽方程(2)和保证能隙局域态上只能占有整数电子, κ_0 只能取有限的选择. 把电子波函数(7)和(8)式代入自洽条件(2)式, 可得到

$$n_- - n_+ = 2 - (4/\pi) \sin^{-1}(\kappa_0 \xi_0 \sin \theta_k). \quad (9)$$

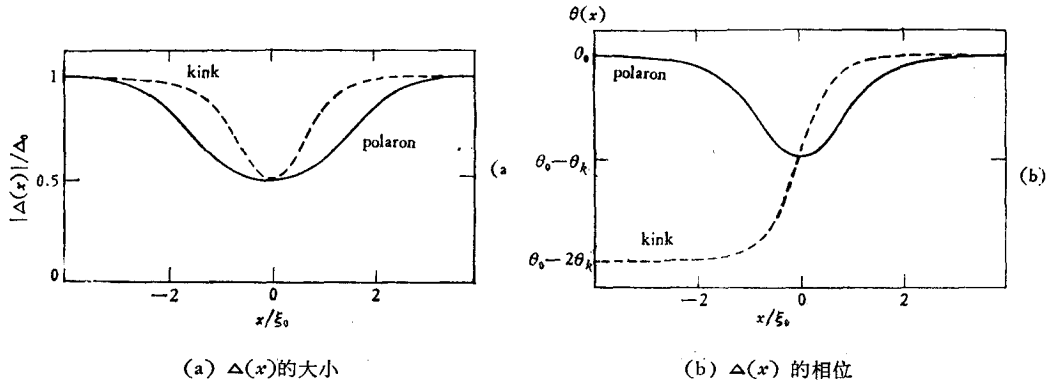
这里 $n_{\pm}$ 表示能量为 $\pm E_p$ 局域态上的电子占有数. 由于 $0 \leq \sin^{-1}(\kappa_0 \xi_0 \sin \theta_k) \leq \theta_k (= \pi/3)$, 故 $2 \geq n_- - n_+ \geq 2/3$, $n_{\pm}$ 只有两种取法. 其一是取 $n_- = 2, n_+ = 0$, 则有 $\kappa_0 \xi_0 = 0, x_0 = 0$, 这是均匀三聚化的平凡解. 其二是取 $n_- = 1, n_+ = 0$ 或 $n_- = 2, n_+ = 1$, 这正是我们感兴趣的极化子解, 它是严格满足能隙自洽方程的解.

三聚化系统的极化子解给出 $\kappa_0 \xi_0 = (2/3)^{1/2}$, 局域态能级是 $\pm (\sqrt{2}/2)\Delta_0$, 比扭折局域能级更靠近能带边. 由(6)式可定出 $2x_0 \approx 1.41\xi_0$, 图 1 给出了扭折和极化子的序参量的空间结构. 极化子具有通常的自旋和电荷关系: 自旋 1/2 和电荷 $\pm e$. 其形成能

$$E = (4/\pi)\kappa_0 v_F = 2\sqrt{2}\Delta_0/\pi \approx 0.9\Delta_0,$$

与 trans-(CH)_x 中极化子形成能相同.

文献[8]表 1 中给出了一组低激发能的扭折孤子, 但是单扭折不满足自洽条件和拓扑



(a) $\Delta(x)$ 的大小

(b) $\Delta(x)$ 的相位

图 1 序参量 $\Delta(x)$ 的位形分布虚线和实线分别对应扭折和极化子情况

边界条件 (只能产生 I + II, I + I + I, II + II + II). 一对无限分开的扭折(I + II) 相当在(9)式中取 $\kappa_0 \xi_0 = 1$, 则得到 $n_- - n_+ = 2/3$, 导致了分数电子数占有的问题^[8], 其相应的形成能为 $2\sqrt{3}\Delta_0/\pi \approx 1.1\Delta_0$, 大于极化子形成能. 因而我们认为在三聚化系统中最可能出现的激发是极化子. 从极化子模型可以推断在光吸收中, 低于带间跃迁阈值之下可能会有三个光吸收峰, 对应于局域态之间, 以及它们与导带价带之间的跃迁. 这些特征有待于光吸收实验的证实.

四、可约数 $M > 3$, j/M 满带情况的推广

在 SSH 连续极限和弱耦合极限下, 容易把上面结果推广到 $j:M$ Peierls 系统. 忽略了 $|\Delta|/W$ 量级的项, 方程 (1), (2) 仍成立, 但系统的基态是 M 重简并的 M 聚化情况, 可能有 $M-1$ 类扭折 (对应于序参量相位改变 $2\theta_n = 2n\pi/M$, $n = 1, 2, \dots, M-1$) 和由 θ_n 扭折与 $(\pi - \theta_n)$ 扭折束缚成的极化子. 考察一对扭折 $(\theta_n, \pi - \theta_n)$, 采用序参量函数 (5) 式, 则上节的结果 (7)–(9) 式都成立. 从自洽条件 (9) 式容易分析出整数电子占有的可能孤子激发态有: 1) 一对分开很远的扭折, 要求 $\kappa_0 \xi_0 = 1$, 可能的情况是 $\theta_n = \pi/2$, $n_- = n_+$ 和 $\theta_n = \pi/4, 3\pi/4$, $n_- - n_+ = 1$; 2) 极化子, $n_- - n_+ = 1$, $\kappa_0 \xi_0 \sin \theta_n = \sqrt{2}/2$ ($3\pi/4 > \theta_n > \pi/4$), 当 θ_n 逐渐趋向于 $\pi/4$ 或 $3\pi/4$, 一对束缚的扭折逐渐分远, 趋于两个独立扭折孤子. 因而我们推测在 $j:M$ Peierls 系统中可能出现的非线性激发是: 对于任意 $M \geq 2$, 都存在极化子 (只要 $3\pi/4 > \theta_n > \pi/4$); 对于偶数 M , 存在 $2\theta_n = \pi$ 的扭折孤子, 如 trans-(CH)_x 的情况; 对于 M 为 4 的倍数时, 还可能出现 $2\theta_n = \pi/2$ 和 $3\pi/2$ 的扭折. 最后一种情况特别有趣, 按文献 [7] 类似的讨论, 这类扭折孤子可带有 $\pm e/2$ 或 $\pm 3e/2$ 的分数电荷.

参 考 文 献

- [1] W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, *Phys. Rev. B*, **22** (1980), 2099.
- [2] H. Takayama, Y. R. Lin-Liu and K. Maki, *Phys. Rev. B*, **21** (1980), 2388.
- [3] B. Horovitz, *Phys. Rev. B*, **22** (1980), 1101.
- [4] W. P. Su and J. R. Schrieffer, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **77** (1980), 5526.
- [5] D. K. Campbell and A. R. Bishop, *Phys. Rev. B*, **24** (1981), 4859; *Nucl. Phys. B*, **200** (1982), 297.
- [6] K. Fesser, A. R. Bishop and D. K. Campbell, *Phys. Rev. B*, **27** (1983), 4804.
- [7] W. P. Su and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev. Lett.*, **46** (1981), 738; W. P. Su, *Phys. Rev. B*, **27** (1983), 370.
- [8] J. Tinka Gammel and J. A. Krumhansl, *Phys. Rev. B*, **27** (1983), 7659.

POLARONS IN A 1:3 PEIERLS SYSTEM

XING DING-YU GONG CHANG-DE

(Institute of Solid State Physics, Nanjing University)

ABSTRACT

Using the continuum limit of SSH model, we find explicitly the “polaron” soliton in one-dimensional Peierls system with commensurability-3. It is shown within the weak-coupling limit that the polaron solution satisfies exactly the self-consistent condition for the order parameter of the ionic displacements. The creation energy and characteristic width of the polaron are given. Furthermore, the possible soliton excitations in the general commensurability- M case are discussed.