

关于双极化子模型的一个注记

郑 杭

(上海交通大学应用物理系)

1987 年 9 月 28 日收到

本文对双极化子的一个简单模型作了重新考虑;证明由于电声子相互作用,为了保证模型系统的总能量为稳定的极小声子系统必然处在一种新的相干态. 作为推论,我们论证了单态双极化子作为系统的稳定基态组态的可能性要比以往一些作者所认为的大得多.

一、引 言

近年来,在某些具有强电声子相互作用的系统中存在所谓的双极化子的可能性引起了人们广泛的兴趣^[1-7]. Anderson^[1]首先提出当局域晶格畸变导致出现一 U 中心时可以形成同位单态双极化子. Lakkis 等人^[2]则把这个思想推广到异位单态配对. Chakraverty 等人^[3]对异位双极化子提出一个简单的模型,并由此讨论了单态、三重态双极化子以及两个自由极化子的稳定性问题. Alexandrov 等人^[4]研究了单态双极化子的隧穿运动和超导性. 厉彦民等人^[5,6]以及 Alexandrov 等人^[7]指出在某些条件下,三重态双极化子比单态的来得稳定.

众所周知,对小极化子的能带运动存在所谓的 Holstein 致窄因子^[8]: $\exp[-g^2/(\hbar\omega_0)^2]$, 这里 g 表示电声子作用强度,而 ω_0 为声子频率. 显然,当 $g/\hbar\omega_0$ 大于 1 时(这是双极化子稳定的必要条件,见文献 [3, 4, 7]),致窄效应是相当强的. 有关双极化子及其稳定性的讨论一般都计入了这种致窄效应^[1-4, 7]. 但是,计入这种致窄效应以后,系统的总能量必然增加;这是因为能带的中心不受电声子作用的影响(暂不考虑极化子结合能 $g^2/\hbar\omega_0$). 本文通过重新考虑 Chakraverty 的双极化子模型具体指出由于致窄效应导致的能量增加,并发展一种变分方法来降低系统总能量. 我们将指出实际上致窄效应要比 Holstein 因子所表示的小得多.

本文对 Chakraverty 的双极化子模型^[3]作几点修正: 第一,计入交换作用^[5-7]以便考虑三重态双极化子的稳定性问题. 第二,以二次量子化形式写出电子-晶格相互作用;否则上述致窄效应不能从第一性原理推出. 第三, a 原子电子能级不仅与 a 原子振动有关,而且应与 b 原子振动也有关;对 b 原子电子能级也有类似情形.

二、模型与变分处理

考虑两个原子 a 和 b 及两个电子的最简单情况^[3], 对每个原子只计入单一能级. 模型哈密顿量为

$$H = H_e + H_p + H_{e-p}, \quad (1)$$

H_e , H_p 和 H_{e-p} 分别为电子、声子和电声子作用项。电子项

$$\begin{aligned} H_e = & \sum_{\sigma} \varepsilon_0 (n_{a\sigma} + n_{b\sigma}) - \sum_{\sigma} T_0 (f_{a\sigma}^+ f_{b\sigma} + f_{b\sigma}^+ f_{a\sigma}) \\ & + U_0 (n_{a\uparrow} n_{a\downarrow} + n_{b\uparrow} n_{b\downarrow}) + V_0 (n_{a\uparrow} + n_{a\downarrow})(n_{b\uparrow} + n_{b\downarrow}) \\ & + J \sum_{\sigma, \sigma'} f_{a\sigma}^+ f_{a\sigma'} f_{a\sigma'}^+ f_{b\sigma}, \end{aligned} \quad (2)$$

其中 ε_0 为非微扰能级, T_0 为跳跃积分, U_0 和 V_0 分别为同位和异位库仑排斥, $f_{a\sigma}^+$ 和 $f_{a\sigma}$ 以及 $f_{b\sigma}^+$ 和 $f_{b\sigma}$ 为 a 及 b 原子上电子的产生和湮灭算符, $n_{a\sigma} = f_{a\sigma}^+ f_{a\sigma}$, $n_{b\sigma} = f_{b\sigma}^+ f_{b\sigma}$ 。(2)式等号右端最后一项表示交换作用^[5,6]。

声子项 H_p 表示晶格振动的简谐能

$$H_p = \hbar\omega_0 (a^+ a + b^+ b), \quad (3)$$

a^+ , a 和 b^+ , b 分别为原子 a 和 b 振动的声子产生及湮灭算符。

电声子作用项

$$\begin{aligned} H_{e-p} = & \sum_{\sigma} g_1 [(a^+ + a)n_{a\sigma} + (b^+ + b)n_{b\sigma}] \\ & + \sum_{\sigma} g_2 [(b^+ + b)n_{a\sigma} + (a^+ + a)n_{b\sigma}], \end{aligned} \quad (4)$$

其中等号右端第一项为同位电声子作用, 第二项则为异位作用。

对声子算符引进正则变换

$$a = (c + d)/\sqrt{2}, \quad b = (c - d)/\sqrt{2}, \quad (5)$$

则

$$H_p = \hbar\omega_0 (c^+ c + d^+ d), \quad (3')$$

$$\begin{aligned} H_{e-p} = & [(g_1 + g_2)/\sqrt{2}](c^+ + c) \sum_{\sigma} (n_{a\sigma} + n_{b\sigma}) \\ & + [(g_1 - g_2)/\sqrt{2}](d^+ + d) \sum_{\sigma} (n_{a\sigma} - n_{b\sigma}). \end{aligned} \quad (4')$$

对总哈密顿量 H 作一位移算符类型的么正变换

$$\bar{H} = \exp(R) H \exp(-R), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} R = & [(g_1 + g_2)/\sqrt{2} \hbar\omega_0](c^+ - c) \sum_{\sigma} (n_{a\sigma} + n_{b\sigma}) \\ & + [(g_1 - g_2)/\sqrt{2} \hbar\omega_0](d^+ - d) \sum_{\sigma} (n_{a\sigma} - n_{b\sigma}), \end{aligned} \quad (7)$$

得

$$\begin{aligned} \bar{H} = & - \sum_{\sigma} T_0 (f_{a\sigma}^+ f_{b\sigma} + f_{b\sigma}^+ f_{a\sigma}) \cosh [(\sqrt{2}(g_1 - g_2)/\hbar\omega_0)(d^+ - d)] \\ & + \sum_{\sigma} \varepsilon_0 (n_{a\sigma} + n_{b\sigma}) + U_0 (n_{a\uparrow} n_{a\downarrow} + n_{b\uparrow} n_{b\downarrow}) + \hbar\omega_0 (c^+ c + d^+ d) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + V_0(n_{a_1} + n_{a_2})(n_{b_1} + n_{b_2}) + J \sum_{\sigma, \sigma'} f_{a\sigma}^+ f_{b\sigma'}^+ f_{a\sigma'} f_{b\sigma} \\
& - [(g_1 + g_2)^2 / 2\hbar\omega_0] \left[\sum_{\sigma} (n_{a\sigma} + n_{b\sigma}) \right]^2 \\
& - [(g_1 - g_2)^2 / 2\hbar\omega_0] \left[\sum_{\sigma} (n_{a\sigma} - n_{b\sigma}) \right]^2.
\end{aligned} \quad (8)$$

温度 $T = 0$ 时可以将 $\bar{H}$ 对声子真空态求平均, 从而将电子和声子两子系统解耦并得到致窄因子 $\exp[-(g_1 - g_2)^2 / (\hbar\omega_0)^2]$ ^[1,3,4,8]. 但是, 本文中为了降低模型系统的总能量, 我们对声子子系统引入一变分基态 $|\phi_p\rangle$

$$|\phi_p\rangle = \exp(-s)|\text{vac}\rangle, \quad (9)$$

$$s = \alpha(dd - d^+d^+), \quad (10)$$

α 为变分参数. 如 $\alpha = 0$ 则 $|\phi_p\rangle$ 回到真空态 $|\text{vac}\rangle$. 只要 $\alpha \neq 0$, $|\phi_p\rangle$ 为一个与任何声子数算符的本征态都不同的新的态. 由于么正算符 $\exp(-s)$ 与量子光学中双光子相干态算符相似^[9], 我们称 $|\phi_p\rangle$ 为双声子相干态^[10]. 以下将证明, 单态双极化子的总能量的极小值确实在 $\alpha \neq 0$ 时得到.

对 $\bar{H}$ 在 $|\phi_p\rangle$ 态中求平均, 利用关系式

$$e^s(d^+ \pm d)e^{-s} = (d^+ \pm d)e^{\pm 2\alpha},$$

$$e^s d^+ d e^{-s} = (d^+ \cosh 2\alpha + d \sinh 2\alpha)(d^+ \sinh 2\alpha + d \cosh 2\alpha), \quad (11)$$

得电子子系统的有效哈密顿量

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= \langle \text{vac} | e^s \bar{H} e^{-s} | \text{vac} \rangle = \hbar\omega_0 (\sinh 2\alpha)^2 + \varepsilon_c \sum_{\sigma} (n_{a\sigma} + n_{b\sigma}) \\
& - T \sum_{\sigma} (f_{a\sigma}^+ f_{b\sigma} + f_{b\sigma}^+ f_{a\sigma}) + U_c(n_{a_1}n_{a_2} + n_{b_1}n_{b_2}) \\
& + V_c(n_{a_1} + n_{a_2})(n_{b_1} + n_{b_2}) + J \sum_{\sigma, \sigma'} f_{a\sigma}^+ f_{b\sigma'}^+ f_{a\sigma'} f_{b\sigma},
\end{aligned} \quad (12)$$

$$\varepsilon_c = \varepsilon_0 - (g_1^2 + g_2^2) / \hbar\omega_0,$$

$$T = \exp[-(g_1 - g_2)^2 e^{-4\alpha} / (\hbar\omega_0)^2] T_0,$$

$$U_c = U_0 - 2(g_1^2 + g_2^2) / \hbar\omega_0, \quad V_c = V_0 - 4g_1g_2 / \hbar\omega_0. \quad (13)$$

现在重整化的跳跃积分 T 与变分参数 α 有关.

三、结果与讨论

如 Chakraverty 等人所指出的^[3], 如果 $V_c < 0$, 稳定的基态组态就可能是双极化子态. 对于(12)式这样的简单哈密顿量, 可以找到本征值和本征函数的准确解^[3-6]:

单态双极化子 (SB)

$$\begin{aligned}
E_{\text{SB}} &= \hbar\omega_0 (\sinh 2\alpha)^2 + 2\varepsilon_c + V_c + J + \frac{1}{2} (U_c - V_c - J) \\
& - \frac{1}{2} [(U_c - V_c - J)^2 + 16T^2]^{\frac{1}{2}};
\end{aligned} \quad (14)$$

三重态双极化子 (TB)

$$E_{TB} = \hbar\omega_0(\sinh 2\alpha)^2 + 2\varepsilon_c + V_c - J; \quad (15)$$

单态 Anderson^[1] 极化子 (AB)

$$E_{AB} = \hbar\omega_0(\sinh 2\alpha)^2 + 2\varepsilon_c + U_c; \quad (16)$$

分离的两个自由极化子 (FP)

$$E_{FP} = \hbar\omega_0(\sinh 2\alpha)^2 + 2\varepsilon_c - 2T. \quad (17)$$

(14)–(17)式与文献[3–6]中结果大致相同,只是这里出现了非零参数 α . 现在调整 α 以得到极小化的能量本征值. (15)和(16)式的极小值显然在 $\alpha = 0$ 时得到, 因为该两式与 T 无关. 然而, (14)和(17)式的极小值可以在 $\alpha \neq 0$ 时得到. 图 1 中绘出 E_{SB} 和 E_{FP} 与 $\tau = e^{-2\alpha}$ 的关系曲线;各参数取值在图中给出. 为方便起见,我们以裸跳跃积分 T_0 作能量单位. 由图 1 可见: E_{SB} 和 E_{FP} 分别在 $\tau = \tau_{SB} = 0.180$ 和 $\tau = \tau_{FP} = 0.178$ 处达到各自的极小值,而且 $(E_{SB})_{\min} < (E_{FP})_{\min}$. 所以,在图 1 的情况下,模型的基态组态应是单态双极化子,并且声子子系统处于双声子相干态,参数 $\alpha = \alpha_{SB} = 0.857$.

在图 1 的情况中,如果 $\alpha = 0$, 则有 $E_{SB} = -0.5$, $E_{FP} = -6.7 \times 10^{-4}$. 因此,假如

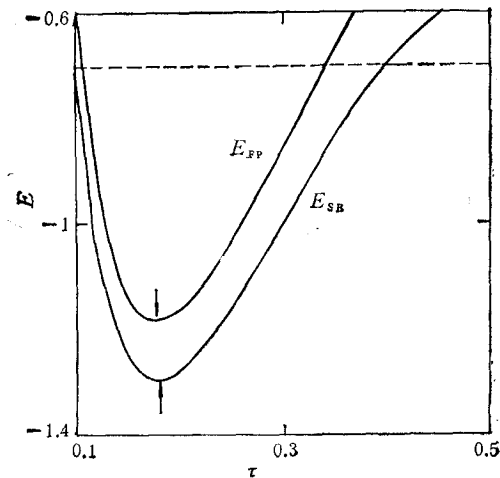


图 1 E_{SB} 和 E_{FP} 对 τ 的变化关系 参数取值 (以 T_0 作单位): $\varepsilon_c = 0$, $U_0 = 2$, $U_c = 0.4$, $V_0 = 0.2$, $V_c = -0.6$, $J = 0.1$, $g_1 = 0.1932$, $g_2 = 0.0518$; 两个箭头分别指出 $\tau_{SB} = 0.180$ ($(E_{SB})_{\min} = -1.30$) 和 $\tau_{FP} = 0.178$ ($(E_{FP})_{\min} = -1.18$); 水平虚线记 $E_{TB} = -0.7$

只考虑 $\alpha = 0$ 的情况,则基态组态应是三重态双极化子,因为此时 $E_{TB} = -0.7$ (如图 1 水平虚线所示). 这个事实表明,双声子相干态的引入是必要的,而且变分处理使得单态双极化子作为稳定基态组态的范围扩大了.

比较(14)和(15)式,三重态比单态双极化子稳定的条件为

$$2J > [(U_c + |V_c|)^2 + 8T^2] - (U_c + |V_c|), \quad (18)$$

从此并不能推出文献[6]中不等式

$$J > 2T/(U_c + |V_c|). \quad (19)$$

这因为在我们的变分处理中 T 不是小量 (在图 1 情况, $T = 0.772$, 当 $\alpha = \alpha_{SB} = 0.857$;

但如 $\alpha = 0$, 则 $T = 3.35 \times 10^{-4}$).

最后说明 α 的双重作用: 一方面 $\alpha \approx 0$ 使声子简谐能量增加; 另一方面 $\alpha \rightarrow \infty$ 使 $T = T_0$, 从而消除致窄作用. 正是 α 这两方面的作用互相竞争, 使得能量出现稳定的极小值, 这是本文变分处理的实质.

变分处理使致窄效应减弱, 将有利于双极化子超导性的出现; 这是因为致窄效应减弱使双极化子有效质量减小. 有关这个问题有另文讨论^[11].

- 1 P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.*, **34**(1975), 953.
- 2 S. Lakkis *et al.*, *Phys. Rev.*, **B14**(1976), 1429.
- 3 B. K. Chakraverty, M. J. Sienko and J. Bonnerot, *Phys. Rev.*, **B17**(1978), 3781.
- 4 A. Alexandrov and J. Ranninger, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 1796; *ibid.*, **24**(1981), 1164.
- 5 厉彦民、赵光安, *物理学报*, **33**(1984), 273.
- 6 Y. M. Li and L. Y. Zhang, *Solid State Commun.*, **57**(1986), 553.
- 7 A. Alexandrov, J. Ranninger and S. Robaszkiewicz, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 949; *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 4526.
- 8 T. Holstein, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **8**(1959), 343.
- 9 H. P. Yuen, *Phys. Rev.*, **A13**(1976), 2226.
- 10 Zheng Hang, to be Published in *Phys. Rev.*, **B**.
- 11 B. K. Chakraverty, D. Feinberg, Zheng Hang and M. Avignon, to be published in *Solid State Communications*.

A NOTE ON THE BIPOLARONIC MODEL

ZHENG HANG

(Department of Applied Physics, Shanghai Jiaotong University)

ABSTRACT

Via a reconsideration of a simple model for bipolarons, we have shown that in order to keep the total energy of the model system to be a stable minimum, a new phonon coherent state should be introduced as a result of the electron-phonon interaction. Thus it could be inferred that the reduction effect of phonons is much weaker and the range of the singlet bipolaronic state as the stable ground state configuration is more extensive than what the previous authors considered.