

关于强电声子耦合系统基态的一个注记

郑 杭

(上海交通大学应用物理系)

1987 年 10 月 26 日收到

本文提出强电声子耦合系统的一个新的变分基态,在此态中电子子系统处于超导对态而声子子系统处于双声子相干态。我们证明为了得到正确的超导凝聚能而且载流子的有效质量又不至于太大,这样的变分态是必须的。

一、引 言

由于潜在的高温超导的可能性,强电声子耦合系统一直引起人们极大的兴趣。这种系统中超导性的理论研究可以分成两大类。一类以所谓的强耦合超导理论^[1]为代表,它是著名的 BCS 弱耦合理论^[2]的扩展,属于连续统模型理论。在该理论中,只有 Fermi 面近旁的电子才强烈地与声子耦合。但是,已有作者指出^[3],在强耦合窄能带系统中作为强耦合超导理论基础的众所周知的 Migdal 定理不再成立,这是因为这样的系统可以处在所谓的反绝热极限^[3,4]:

$$\omega \gtrsim W, \quad (1)$$

这里 ω 是特征声子频率, W 是重整化半带宽。

另一类理论研究针对强耦合窄能带系统,讨论格点上的电子与声子的强相互作用导致的超导性;这时候系统的 Fermi 球内所有电子都参与超导过程。按照极化子之间有效吸引 V 的大小,这类研究工作又可以分为两小类。如果有效吸引较小, $V \lesssim W$, Alexandrov^[5] 和 Robaszkiewicz 等人^[6]证明小极化子可以形成空间交迭的 Cooper 对,超导态性质与通常的 BCS 理论差不多。如果有效吸引很强, $V \gg W$, Alexandrov 等人^[3,7], Robaszkiewicz 等人^[8]以及厉彦民和章立源^[9]证明此时可以出现所谓的双极化子超导性,其超导性质与通常的 BCS 理论不同,而类似于 ^3He 的超流性。

由以上讨论可见,在讨论强耦合电声子系统时 W 的大小起了重要的作用。如所周知, W 与裸半带宽 D 通过一个 Holstein 约化因子^[3,10]相联系,

$$W = D \exp(-g^2/\hbar^2\omega^2), \quad (2)$$

g 代表电声子作用的强度。但是,这个约化因子是在讨论小极化子问题^[10,11]时出现的,而小极化子相应的是窄能带中单个电子与声子的相互作用问题;因此,在多电子与声子的相互作用系统中,情况如何?

由(2)式可见,如果 $g/\hbar\omega$ 大于1(对强电声子作用系统,情况正是如此),约化效应将相当强,然而很强的带宽约化效应必将使系统的总能量增加,原因是能带中心位置并不受

电声子作用的影响(暂不考虑极化子自陷能). 如果每个原胞的平均电子数 $n = N_e/N$ 是一个可以忽略的小量, 则上述总能量的增加也可以忽略. 但当 n 是一个有限的量时情况就完全不同了. 本文通过讨论强电声子相互作用系统的一个简单模型的基态, 具体说明 $n \approx 0$ 时总能量的增加, 并发展一种变分处理来降低它. 我们将证明实际上约化效应可以比(2)式所显示的弱得多; 变分处理的这种减弱机制对强电声子作用系统的其它物理性质有重要的影响.

二、模 型 理 论

对于一个量子力学系统来说, 建立它的正确的基态具有基本的重要性. 本文目的就是试图对强电声子作用系统的一个简单模型建立它的变分基态. 本文步骤如下: 首先, 用一个么正变换把模型哈密顿量 H 变成 $\bar{H}$; $\bar{H}$ 与 H 描述同样的物理系统. 其次, 假定模型系统的基态矢量(对 $\bar{H}$ 而言) $|\Psi\rangle$ 可以近似地写成两个态矢的乘积

$$|\Psi\rangle = |\Psi_p\rangle |\Psi_e\rangle, \quad (3)$$

其中 $|\Psi_p\rangle$ 只包含声子变数, $|\Psi_e\rangle$ 只包含电子变数. 第三, 分别建立 $|\Psi_p\rangle$ 和 $|\Psi_e\rangle$, 其中引进一些可调整变分参数. 最后, 调整这些变分参数以达到系统基态能量的极小.

本文使用的模型哈密顿量是电子子系统的 Hubbard 哈密顿量加上电声子相互作用,

$$\begin{aligned} H = & \sum_{i,\sigma} (E_c - \mu) d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \sum_{j(i \neq j)} \sum_{\sigma} T_{ij}^0 d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \\ & + \sum U_{ij} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \sum_q \hbar\omega_q b_q^\dagger b_q \\ & + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \sum_{i,\sigma} g(\mathbf{q}) d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} (b_q^\dagger + b_{-q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{i}}, \end{aligned} \quad (4)$$

μ 是化学势, $d_{i\sigma}^\dagger$ 和 $d_{i\sigma}$ 是电子的产生和湮灭算符, $b_q^\dagger$ 和 b_q 是声子的产生和湮灭算符. (4)式第四项是晶格简谐能量.

对 H 作用一个位移算符类型的么正变换

$$\bar{H} = e^R H e^{-R}, \quad (5)$$

$$R = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \sum_{i,\sigma} [g(\mathbf{q})/(\hbar\omega_q)] d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} (b_q^\dagger - b_{-q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{i}}, \quad (6)$$

则

$$\begin{aligned} \bar{H} = & \sum_q \hbar\omega_q b_q^\dagger b_q + \sum_{i,\sigma} (E_c - \mu) d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \sum_{ij} U_{ij} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} \\ & + \sum_{j(i \neq j)} \sum_{\sigma} T_{ij}^0 d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \cdot \exp \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \frac{g(\mathbf{q})}{\hbar\omega_q} \right. \\ & \times (b_q^\dagger - b_{-q}) (e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{i}} - e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{j}}) \Big] \\ & - \sum_{i,\sigma} \sum_{j,\sigma'} \frac{1}{N} \sum_q [|g(\mathbf{q})|^2 / \hbar\omega_q] \cdot \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})] \\ & \cdot d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} d_{j\sigma'}^\dagger d_{j\sigma'}. \end{aligned} \quad (7)$$

现在我们可以假定当整个电声子相互作用系统处于基态时, 声子子系统处于它的真空态; 由此通过对 $\bar{H}$ 在声子子系统的真空态求平均, 立即可得 Holstein 约化因子. 这种处理方法是在讨论小极化子问题时常用的^[10,11]. 但是, 对于本文的多电子与声子相互作用系统, 我们为声子子系统引入一个变分基态 $|\Psi_p\rangle$,

$$|\Psi_p\rangle = \exp(-s)|\text{vac}\rangle, \quad (8)$$

$$s = \sum_q \alpha_q (b_q b_{-q} - b_q^+ b_{-q}^+), \quad (9)$$

α_q 是变分参数. 如果对所有 q 都有 $\alpha_q = 0$, 则 $|\Psi_p\rangle$ 回到真空态 $|\text{vac}\rangle$; 只要 $\alpha_q \neq 0$, 则 $|\Psi_p\rangle$ 是声子子系统的一个新的特殊的态, 与任何声子数算符的本征态都不同. 因为么正算符 $\exp(-s)$ 与量子光学中双光子相干态的变换算符相似^[12], 我们称 $|\Psi_p\rangle$ 为双声子相干态.

假定电子子系统的基态 $|\Psi_c\rangle$ 是 BCS 类型变分态^[2],

$$|\Psi_c\rangle = \prod_k (u_k + v_k d_k^+ d_{-k}^+) |\text{vac}\rangle, \quad (10)$$

式中 u_k 和 v_k 是变分参数, 满足归一条件: $u_k^2 + v_k^2 = 1$. 显然, 假定这样的 $|\Psi_c\rangle$ 意味着我们已认为声子诱导的极化子之间的吸引作用超过了它们之间的 Coulomb 排斥, 这种情形只有在电声子耦合较强时才能达到.

根据变分法原理可由下式导出系统基态的能量泛函 E ,

$$E = \langle \Psi_c | \langle \Psi_p | \bar{H} | \Psi_p \rangle | \Psi_c \rangle. \quad (11)$$

利用关系

$$e^s (b_q^+ \pm b_{-q}) e^{-s} = (b_q^+ \pm b_{-q}) \exp(\pm 2\alpha_q)$$

和

$$e^s b_q^+ b_q e^{-s} = (b_q^+ \cosh 2\alpha_q + b_{-q} \sinh 2\alpha_q)(b_q^+ \sinh 2\alpha_q + b_q \cosh 2\alpha_q),$$

容易得出

$$\begin{aligned} \langle \Psi_p | \bar{H} | \Psi_p \rangle &= \sum_q \hbar \omega_q (\sinh 2\alpha_q)^2 + \sum_{i,\sigma} (E_0 - \mu) d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} \\ &+ \sum_{i,j(i \neq j)} \sum_{\sigma} T_{ij} d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma} \\ &+ \sum_i U_0 d_{i\uparrow}^+ d_{i\uparrow} d_{i\downarrow}^+ d_{i\downarrow} - \sum_{i,\sigma} \sum_{j,\sigma'} J_{ij} d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} d_{j\sigma'}^+ d_{j\sigma'}, \end{aligned} \quad (12)$$

式中

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_q [|g(q)|^2 / \hbar \omega_q] e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})},$$

$$T_{ij} = T_{ij}^0 \cdot \exp \left\{ -\frac{2}{N} \sum_q \left[\frac{|g(q)|}{\hbar \omega_q} \sin \frac{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})}{2} \right]^2 \cdot \exp(-4\alpha_q) \right\}. \quad (13)$$

容易看到, 在通常的 Holstein 约化因子的指数中出现了一个新的因子, $\exp(-4\alpha_q)$. 然后, 再将(12)式对 $|\Psi_c\rangle$ 态求期望值, 并在 $u_k^2 + v_k^2 = 1$ 而 α_q 不变的条件下对 u_k 和 v_k 作变分计算^[2,6]通过繁复的代数运算可以得出(11)式的能量泛函为

$$\begin{aligned} E &= \sum_q \hbar \omega_q (\sinh 2\alpha_q)^2 + N(E_c - \mu - |U_c|n/2) \\ &+ N(|U_c|n^2/4 + \Delta^2/|U_c|) - \sum_k \sqrt{E^2(k) + \Delta^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

为简单起见已假定 $J_0 = |g(\mathbf{q})|^2/\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ 为与 $\mathbf{q}$ 无关的常数. 另外,

$$E_c = E_0 - J_0, \quad U_c = U_0 - 2J_0,$$

$$E(\mathbf{k}) = E_c - \mu - W_c |n/2 + \rho E_{\mathbf{k}}|,$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sum_{i,j} T_{ij}^0 \cdot \exp[-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})],$$

$$\rho = \exp \left\{ -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{|g(\mathbf{q})|}{\hbar\omega_{\mathbf{q}}} \sin \frac{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})}{2} \right]^2 \cdot \exp(-4\alpha_{\mathbf{q}}) \right\}; \quad (15)$$

$$n = 1 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})/\sqrt{E^2(\mathbf{k}) + \Delta^2}, \quad (16)$$

$$\Delta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} |U_c| \Delta/\sqrt{E^2(\mathbf{k}) + \Delta^2}. \quad (17)$$

(14)式的 E 仍然是 $\alpha_{\mathbf{q}}$ 的泛函.

为了得出解析的结果但又不失去主要的物理内容, 以下我们假定 $\omega_{\mathbf{q}} = \omega$ 也是与 $\mathbf{q}$ 无关的常数, 并对电子的裸能带假定一个宽度为 $2D$ 的方形态密度. 这样 $\alpha_{\mathbf{q}} = \alpha$ 也与 $\mathbf{q}$ 无关, (14), (16), (17) 式中的积分都可以做出解析结果

$$\Delta = \sqrt{n(2-n)}\rho D/\sinh(2\rho D/|U_c|), \quad (18)$$

$$E(\Delta \neq 0)/N = \hbar\omega(\sinh 2\alpha)^2 + |U_c|n^2/4$$

$$- \frac{\hbar^2}{2} \rho D \coth(2\rho D/|U_c|), \quad (19)$$

$$\rho = \exp[-(J_0/\hbar\omega) \cdot \exp(-4\alpha)] = \exp[-(J_0/\hbar\omega)\tau^2]_0 \quad (20)$$

能隙方程(17)具有平凡解 $\Delta = 0$, 相应的能量泛函是

$$E(\Delta = 0)/N = \hbar\omega(\sinh 2\alpha)^2 + |U_c|n^2/4 - n^2\rho D/2. \quad (21)$$

三、结果与讨论

某些情况下的数值结果在图 1 和图 2 中给出. 计算中用到的各参数的取值也在图中标明, 其中 $\bar{E} = E/D$, $\bar{J}_0 = J_0/D$, $\bar{U}_0 = U_0/D$, $\hbar\bar{\omega} = \hbar\omega/D$, 等等. 由图 1 可见, $\bar{E}(\Delta \neq 0)/N$ 在 $\tau = \tau_{\min}(\Delta \neq 0) = 0.423$ 处达到极小值 $\bar{E}_{\min}(\Delta \neq 0)/N = -0.0406$; 而 $\bar{E}(\Delta = 0)/N$ 在 $\tau = \tau_{\min}(\Delta = 0) = 0.421$ 处达到极小值

$$\bar{E}_{\min}(\Delta = 0)/N = -0.0402.$$

在 $\tau = \tau_{\min}(\Delta \neq 0) = 0.423$ 处 $\bar{\Delta} = 0.0332$. 由这里给出的极小化能量, 可以得出基态超导凝聚能^[2]为

$$\delta = \bar{E}_{\min}(\Delta \neq 0)/N - \bar{E}_{\min}(\Delta = 0)/N = -0.0004. \quad (22)$$

但是, 如果我们不引进双声子相干态, 则 $\alpha=0$ 而 $\tau=1$, 这时有超导凝聚能 $\delta = -0.04$, 这个数值作为超导凝聚能就太大了. 作为比较, 我们指出能量单位 D 对窄能带系统来说应为 $0.1-1\text{eV}$ 的数量级, 而 BCS 理论的超导凝聚能大约为 10^{-7}eV 的数量级^[2].

图 2 中给出的是约化因子 $\rho_{\min}(\Delta \neq 0)$ (相应于在 (20) 式中令 $\tau = \tau_{\min}(\Delta \neq 0)$).

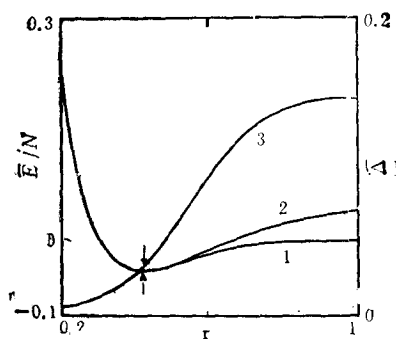


图1 $\bar{E}(\Delta \neq 0)$ (曲线 1), $\bar{E}(\Delta = 0)$ (曲线 2) 和 Δ (曲线 3) 与 τ 的关系 参数取值 $\hbar\bar{\omega} = 0.08$; $\bar{J}_0 = 0.3$; $\bar{U}_0 = 0.3$; $n = 0.8$; 两个箭头分别标明 $\tau_{\min}(\Delta \neq 0) = 0.423$ ($\bar{E}_{\min}(\Delta \neq 0)/N = -0.0406$) 和 $\tau_{\min}(\Delta = 0) = 0.421$ ($\bar{E}_{\min}(\Delta = 0)/N = -0.0402$)

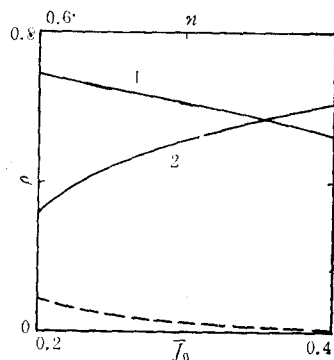


图2 $\rho_{\min}(\Delta \neq 0)$ 与 $\bar{J}_0$ (曲线 1) 和 n (曲线 2) 的关系 参数取值 $\hbar\bar{\omega} = 0.08$; $\bar{U}_0 = 0.3$; $n = 1$ (曲线 1) 和 $\bar{J}_0 = 0.3$ (曲线 2); 虚线是函数 $\exp(-\bar{J}_0/\hbar\bar{\omega})$

对 $\bar{J}_0$ 或 n 的关系, 曲线 1 表明, 随着电声子作用强度 $\bar{J}_0$ 增大, $\rho_{\min}(\Delta \neq 0)$ 减少; 但它的减少速率远远慢于通常的 Holstein 因子(当 $\bar{J}_0 = 0$ 时, 由(20)式可见 $\rho = 1$), 后者在图 2 中以一虚线表示. 曲线 2 表明, 当系统中电子数增加, $\rho_{\min}(\Delta \neq 0)$ 变大; 这种趋势与我们在引言中所指出的是一致的, 即 $n \approx 0$ 时需要引入双声子相干态来抵消声子无规运动造成的极化子能带致窄. 在本文变分处理中引入的致窄效应的这种减弱机制显然将影响相互作用系统的各种物理性质. 例如, 在本文变分基态中极化子的有效质量就要比以前作者所考虑的^[3,4,7,10,11]要小得多.

四、结 论

1. 在强电声子相互作用系统中, 强电声子相互作用导致出现局域晶格不稳定性, 其结果是形成很窄能带的小极化子^[3,7,10,11]. 容易知道, 能带致窄效应是由于围绕着极化子的声子云中声子的无规运动而造成的; 当 $n \approx 0$, 各个极化子的声子云发生交迭, 声子可以形成某种总动量为零的相干态以减弱致窄效应. 本文的双声子相干态正是这样的一种声子有序态.

2. 变分参数 α 的作用是两重的. 如(20)式所表明, α 可以抵消声子致窄效应(当 $\alpha \rightarrow \infty$, $\rho \rightarrow 1$). 但是非零的 α 又使声子子系统的简谐能量增加; 当 $\alpha \rightarrow \infty$, 这个能量也趋于无穷大. α 的这两种作用互相竞争从而达到基态能量的一个稳定极小值. 在这种变分基态中, 我们得到了具有合理大小的数值的超导凝聚能和较小的极化子有效质量. 需要指出, 载流子有效质量的大小与系统的热力学和电动力学性质有密切关系.

3. 本文虽然在电子和声子子系统之间作了近似退耦处理((3)式), 这两个子系统之间的相互作用仍通过变分参数 α 表现出来. α 描述声子状态, 它的值与电子状态和电声子作用强度有关. 这种情形与小极化子^[10,11]完全不同, 那里声子子系统确定地处于真空态. 另外, 如果我们计入 ω_q 和 $g(q)$ 与 q 有关, 则 α_q 也与 q 有关; α_q 作为 q 的函数应该与 ω_q

和 $g(\mathbf{q})$ 的谱相联系. 这个问题是进一步研究的内容.

- [1] D. S. Scalapino, in *Superconductivity*, Vol. 1, edited by R. D. Parks, Marcel Dekker, New York. (1969).
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.*, **108**(1957), 1175.
- [3] A. S. Alexandrov, J. Ranninger and S. Robaszkiewicz, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 4526; *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 949.
- [4] K. Nash, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 1748.
- [5] A. S. Alexandrov, *Zh. Fiz. Khimi.*, **57**(1983), 273.
- [6] S. Robaszkiewicz, R. Micnas and K. A. Chao, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 4018; *ibid.*, **B26**(1982), 3915.
- [7] A. Alexandrov and J. Ranninger, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 1796.
- [8] S. Robaszkiewicz, R. Micnas and K. A. Chao, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 1447; *ibid.*, **B24**(1981), 1579.
- [9] Y. M. Li and L. Y. Zhang, *Solid State Commun.*, **57**(1986), 553.
- [10] T. Holstein, *Ann. Phys.*, (New York), **8**(1959), 325.
- [11] Y. Toyazawa, in *Polarons and Excitons*, edited by G. B. Kuper and G. D. Whitfield, Oliver and Boyd, Edinburgh, (1962).
- [12] H. P. Yuen, *Phys. Rev.*, **A13**(1976), 2226.

A NOTE ON THE GROUND STATE OF STRONG ELECTRON-PHONON INTERACTING SYSTEM

ZHENG HANG

(Department of Applied Physics, Shanghai Jiaotong University)

ABSTRACT

In this paper, a new variational ground state of strong electron-phonon interacting system is proposed, in which the electron subsystem is in superconducting pairing state and the phonon subsystem in two-phonon coherent state. We show that such a variational state is necessary for obtaining a superconducting condensation energy with reasonable magnitude and for the effective mass of the charge carriers not being too large.