

一维极化子的定域振动模*

邢 彪¹⁾ 孙 鑫

(复旦大学物理系; 中国科学院上海技术物理研究所红外物理开放研究实验室)

1987 年 4 月 27 日收到

提 要

本文研究了一维电子-晶格耦合系统中极化子的晶格振动, 发现了两个新的定域振动模 g_0 和 g'_0 , 它们分别在一定的耦合参量 λ 的范围内存在. 本文还给出了各个定域振动模的频率和位形随 λ 的变化情况.

存在于一维电子-晶格耦合系统中的非线性激发, 诸如孤子、极化子等, 对系统的动力学过程有着很大的影响. 一个很重要的特征就是, 在孤子或极化子附近的晶格振动会出现局域模. 近来, 这方面的研究已引起了人们高度重视. 研究一般都基于 SSH 模型^[1]或它的连续近似 TLM 模型^[2]. 后者只适用于弱耦合情况, 即小 λ 时. 孙鑫和他的合作者在研究孤子时发现了一类新的局域模 staggered mode^[3]. 有关这方面工作可参见文献 [4—10]. 本文将讨论极化子附近晶格振动. Hicks 和 Blaisdell 在 TLM 模型中用格林函数方法发现了四个局域振动模^[5]. 几乎同时, Ito 等人在同样模型中, 运用数值解积分方程获得了五个局域振动模^[4]. 后者使用的耦合常数 $\lambda \approx 0.19$, 大于前者. 在相同的 λ 下, Terai 和 Ono 在 SSH 模型中又重新研究了这一问题, 并发现了另外两个局域振动模 staggered mode^[7]. 因此, 有必要弄清楚极化子究竟具有哪些局域模, 特别是局域模的数目随耦合常数 λ 的变化情况.

我们研究了 SSH 模型在耦合参数 $\lambda > 0.2$ 时极化子的晶格振动, 结果又发现了两个新的局域振动模 g_0 和 g'_0 , 它们分别只在一定的 λ 范围内存在.

SSH 哈密顿量为

$$H = - \sum_{n,s} [t_0 - \alpha(u_{n+1} - u_n)] [a_{n,s}^\dagger a_{n+1,s} + \text{c.c.}] + \frac{k}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{M}{2} \sum_n \dot{u}_n^2, \quad (1)$$

其中 t_0 表示无电子-晶格作用时最近邻电子的跃迁, α 为电子-晶格耦合参量, u_n 为原子基团偏离平衡位置的位移, $a_{n,s}^\dagger$ 和 $a_{n,s}$ 表示一个自旋为 s 的电子在第 n 位置上的产生和湮灭算符, k 为原子基团间弹性力常数, M 为基团质量. 引入无量纲的序参量 ϕ_n 、耦合常数 λ 和时间 τ

* 国家自然科学基金资助的课题.

1) 现在地址: 华中工学院物理系.

$$\phi_n = (-1)^n \frac{\alpha}{t_0} u_n, \quad \lambda = \frac{2\alpha^2}{\pi \hbar t_0}, \quad \tau = \omega_q t, \quad (2)$$

其中 $\omega_q = (4k/M)^{1/2}$ 为裸光学频率, (1) 式可重写为

$$\begin{aligned} H/t_0 = & - \sum_{n, l} [1 + (-1)^n (\phi_{n+1} + \phi_n)] (a_{n, l}^+ a_{n+1, l} + \text{c.c.}) \\ & + \frac{1}{\lambda \pi} \sum_n (\phi_{n+1} + \phi_n)^2 + \frac{4}{\pi \lambda} \sum_n (\dot{\phi}_n)^2, \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $\dot{\phi}_n = d\phi/d\tau$, 这表明系统的能量若以 t_0 为单位, 频率以 ω_q 为单位, 那么系统的性质将只依赖于 λ . 从 (3) 式还可以得到 λ 的变化范围. 当 $\phi_n = 1/2$ 时, n 为奇数的电子部分哈密顿量为零, 这表明相邻格点上的原子基团两两结对, 电子只在对间可跃迁. 对应于 ϕ_n 从零到二分之一, λ 的相应变化为

$$\lambda = \left[0, \frac{2}{\pi} \right]. \quad (4)$$

静态极化子的数值解由下面的一组迭代方程决定:

$$\begin{aligned} & -[1 + (-1)^n (\phi_n + \phi_{n+1})] Z_{\mu, n+1} - [1 + (-1)^{n-1} (\phi_{n-1} + \phi_n)] Z_{\mu, n-1} \\ & = \varepsilon_\mu Z_{\mu, n}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\phi_n + \phi_{n+1} = (-1)^n \lambda \pi \left(\sum'_\mu Z_{\mu, n} Z_{\mu, n+1} - \frac{1}{N} \sum_{\mu} Z_{\mu, n} Z_{\mu, n+1} \right), \quad (6)$$

其中 $Z_{\mu, n}$ 表示电子波函数, μ 为电子态标记, ε_μ 为本征能量, Σ' 表示只对电子占据态求

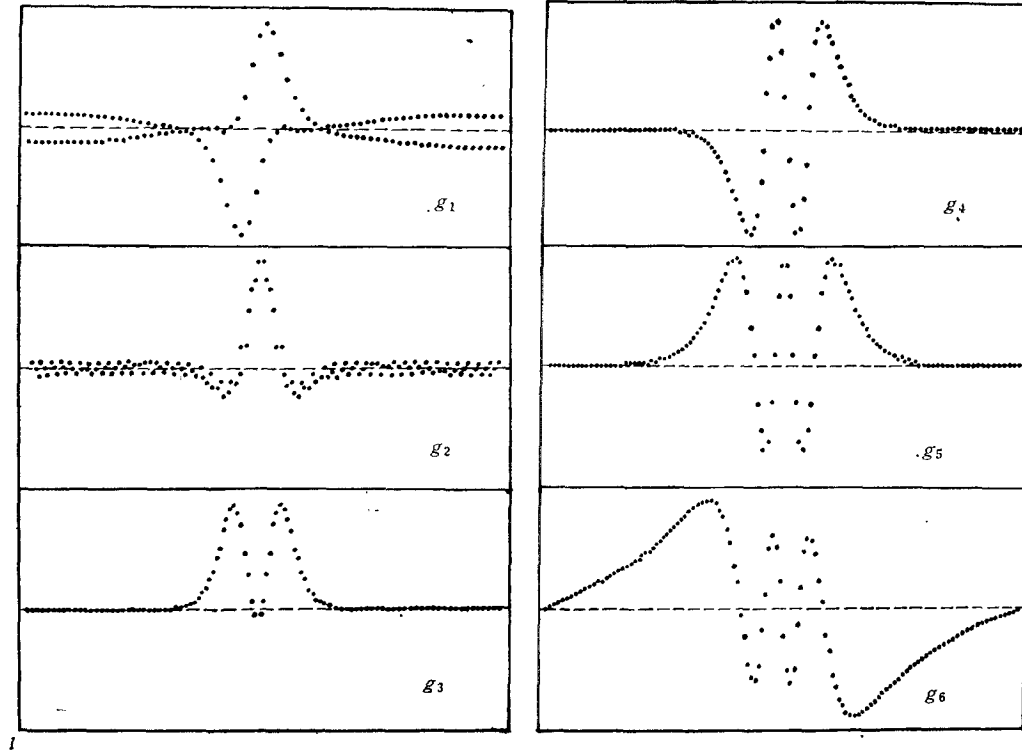


图 1

图 2

和。这是一组自洽迭代的方程组,决定电子态。

考虑静态极化子解附近的小振动 $\delta\phi_n$, 代入(3)式中, 得到微扰哈密顿量 H' 。运用(5)和(6)式得到的电子波函数, 计算微扰至二阶。可以得到系统的能量

$$E(\{\delta\phi_n\}) = E_p + \frac{1}{2} \sum_{m,n} B_{mn} \delta\phi_n \delta\phi_m + 4 \sum_n (\delta\phi_n)^2, \quad (7)$$

其中 E_p 为极化子能量

$$B_{mn} = \frac{2}{\lambda\pi} (\delta_{m,n-1} + 2\delta_{m,n} + \delta_{m,n+1}) + 2 \cdot (-1)^{m+n} \cdot \sum_{\mu} \sum_{\nu} \frac{C_{\mu\nu}^m C_{\mu\nu}^n}{\epsilon_{\mu} - \epsilon_{\nu}}, \quad (8)$$

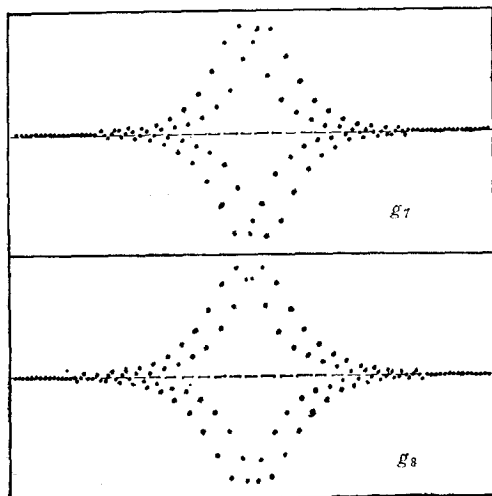


图 3

表 1 局域模性质与 λ 关系

局域模	g_1	g_2	g_3	g_4	g_5	g_6	g'_6	g_7	g_8
字 称	奇	偶	偶	奇	偶	奇	偶	奇	偶
频率 λ	Ω_1^2	Ω_2^2	Ω_3^2	Ω_4^2	Ω_5^2	Ω_6^2	$\Omega_6'^2$	Ω_7^2	Ω_8^2
0.25	0.000	0.206	0.326	0.384	0.438	0.459	—	0.473	0.394
0.29	0.000	0.236	0.353	0.415	0.472	—	0.493	0.465	0.373
0.35	0.000	0.275	0.380	0.420	—	—	0.475	0.463	0.342
0.4	0.000	—	0.407	0.402	—	—	0.491	0.487	0.324
0.43	0.000	—	0.415	—	—	—	0.500	0.400	0.337
0.45	0.000	—	0.425	—	—	—	—	0.402	0.352

$$C_{\mu\nu}^m = Z_{\mu,m}(Z_{\nu,m+1} - Z_{\nu,m-1}) + Z_{\nu,m}(Z_{\mu,m+1} - Z_{\mu,m-1}). \quad (9)$$

将 B_{mn} 矩阵对角化, 就可得到振动模的本征频率和本征矢。

我们用 140 个原子对 $\lambda = 0.25$ 进行计算。对于 $\lambda > 0.25$, 采用 100 个原子进行计算发现: $\lambda = 0.25$ 时, 存在 8 个局域模, 即 $g_1, g_2, g_3, g_4, g_5, g_6, g_7, g_8$ (见图 1 至图 3)。这比 Terai 和 Ono 的计算^[7]多了一个模 g_6 。它是奇宇称的, 具有五个节点, 只有在较强耦合时才会存在。 g_7 和 g_8 是 staggered modes。

$\lambda = 0.29$ 时, 依然有 8 个模存在 (见图 4 至图 6), 但 g_6 消失, 而出现了另一个新的局域模 g'_6 。它是偶宇称的。

随 λ 的增加, 局域模的个数减少, 但 g_1, g_3, g_7 和 g_8 则始终存在。为使计算结果更为明瞭, 我们将局域模性质随 λ 的改变列入表 1 中, 其中 Ω^2 是以 ω_0^2 为单位的振动频率。表 1 中列入了一些代表性的 λ 点。我们的研究发现只有当 λ 满足 $0.24 \leq \lambda \leq 0.276$ 时, g_6 才会存在; 而 g'_6 的存在范围为 $0.29 \leq \lambda < 0.44$ 。

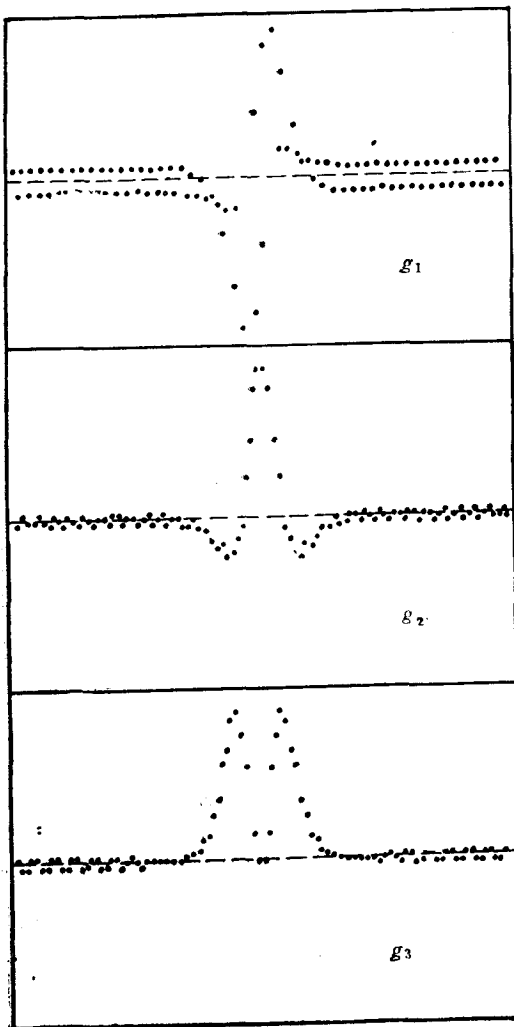


图 4

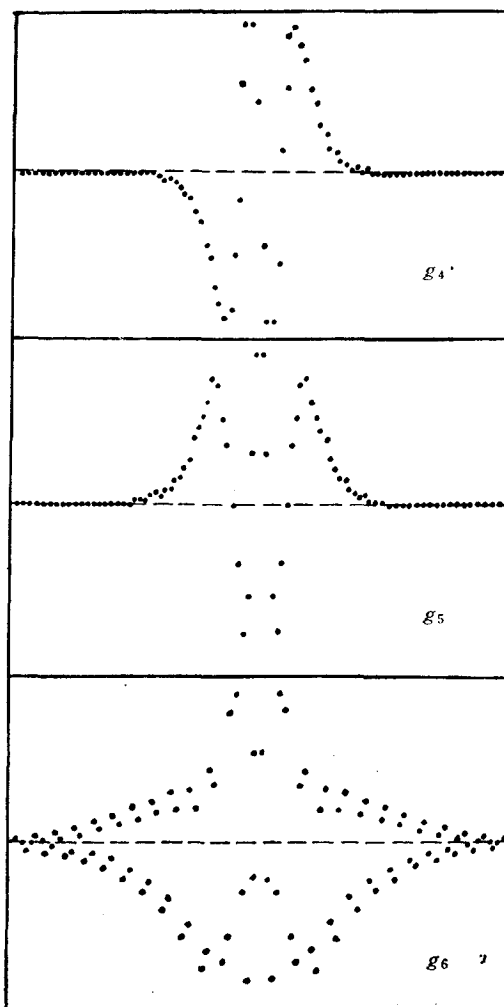


图 5

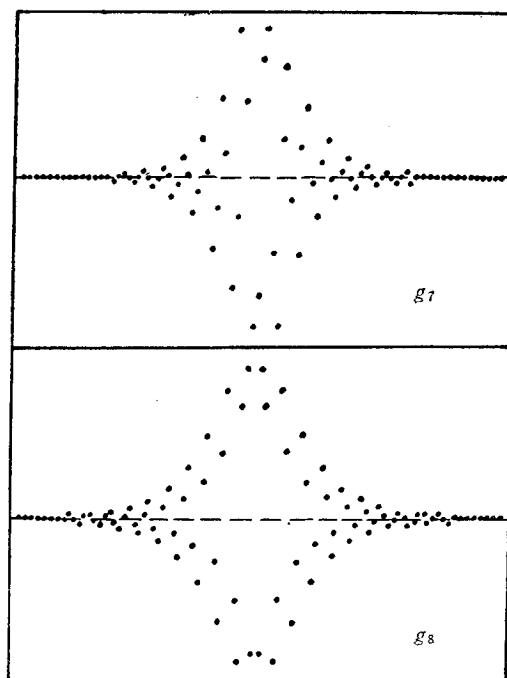


图 6

参 考 文 献

- [1] W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, *Phys. Rev.*, **B22**(1980), 2099.
- [2] H. Takayama, Y. R. Lin-Liu and K. Maki, *Phys. Rev.*, **B21**(1980), 2388.
- [3] X. Sun, C. Wu and X. Shen, *Solid State Commun.*, **56**(1985), 1039.
- [4] M. Nakahara and K. Maki, *Phys. Rev.*, **B25**(1982), 7789.
- [5] J. Hicks and G. Blaisdell, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 919.
- [6] H. Ito, A. Terai, Y. Ono and Y. Wada, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **53**(1984), 3519.
- [7] A. Terai and Y. Ono, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **55**(1986), 213.
- [8] K. A. Chao and Y. Wang, *J. Phys. C*, **18**(1985), L1127.
- [9] J. T. Gammel, Proc. International Conf. on Science and Tech. of Synthetic Metals, Kyoto, June 1—6, (1986).
- [10] X. Sun *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 4102.
- [11] S. Stafstrom and K. A. Chao, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 7010; *ibid.*, **B30**(1984), 2098.

THE LOCALIZED VIBRATIONAL MODES OF ONE-DIMENSIONAL POLARON

XING BIAO SUN XIN

(Department of Physics, Fudan University; Laboratory for Infrared Physics,
Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The lattice vibrations of polaron in one-dimensional electronlattice coupled system are investigated. Two new localized vibrational modes g_7 and g_8 are found, they can exist in some ranges of coupling constant λ . Furthermore, the dependences of frequencies and configurations of various localized modes on λ have been figured out.