

# 强耦合一维电子-晶格体系中孤子激活能\*

傅 柔 励

中国科学院红外物理国家重点实验室, 上海 200083

马 允 胜 孙 鑫

复旦大学物理系, 上海 200433

1991 年 7 月 26 日收到

计算了在不同电子-晶格耦合强度  $\lambda$  下, 一维电子-晶格体系中孤子激活能  $\epsilon_s(\lambda)$  及电子激发到禁带中央分立能级所需能量  $\Delta(\lambda)$ . 得到孤子激活能随  $\lambda$  增大而增大; 但对不同  $\lambda$ , 孤子激活能总是小于产生一个电子或空穴所需能量.

PACC: 7190; 7138

## 一、引 言

孤子是一维电子-晶格体系中的拓扑扭折<sup>[1]</sup>, 是电子和晶格相互耦合的集体激发, 因此激活孤子所需能量一般说应和体系中电子-晶格耦合的强弱有关.

令电子-晶格耦合强度为  $\lambda$ , 在弱耦合  $\lambda < 0.2$  情况下, SSH<sup>[2]</sup> 模型可简化为 TLM<sup>[3]</sup> 模型. 对 TLM 模型, 孤子激活能有解析解, 所以  $\lambda < 0.2$  时, 一维电子-晶格体系中孤子激活能的大小是已知的. 但是对于强耦合体系 ( $\lambda > 0.2$ ), SSH 模型不能用 TLM 模型表示, 没有解析解, 这时孤子的激活能该是多少? 需要仔细研究. 因为最近实验上发现, 有一类一维链状材料的电子-晶格耦合强度可从弱到强在很大范围内变化<sup>[4-6]</sup>, 这是卤素 (X) 过渡金属 (M) 的混价化合物(简称为 MX). 改变卤素原子和周围的有机分子基团, 几乎可连续地调节耦合强度, 从很弱耦合到极强耦合, 提供了研究电荷密度波 (CDW), 自旋密度波 (SDW), 各种非线性激发的典型体系, 引起了大量的实验和理论研究, 因而有必要系统地研究孤子激活能随  $\lambda$  变化的全部过程.

## 二、方 法

绝热近似下, 具有  $N$  个格点的 SSH 哈密顿量为

$$H = - \sum_{n,i} [\epsilon_0 - \alpha(u_{n+1} - u_n)](a_{n+1,i}^+ a_{n,i} + \text{c.c.}) + \frac{K}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2, \quad (1)$$

\* 国家自然科学基金资助的课题.

其中  $t_0$  是原子等距排列时相邻原子间的相互作用矩阵元,  $\alpha$  是原子位移引起相互作用变化的电子-晶格相互作用耦合常数,  $u_n$  是第  $n$  个原子离开未二聚化时平衡位置的位移,  $a_{n,s}^+$ ,  $a_{n,s}$  分别为第  $n$  个格点上自旋为  $s$  的  $\pi$  电子的产生和湮没算符. 格点总数  $N$  取奇数, 这样保证体系内有一个孤子而避开了人为的边界条件.

对强耦合体系, 电子-晶格耦合强烈, 晶格的位移直接影响电子状态, 为此引入无量纲序参量  $\phi_n = (-1)^n \cdot \alpha \cdot u_n / t_0$  表示孤子的位形; 和无量纲参数  $\lambda = 2\alpha^2 / (\pi t_0 K)$  表示电子-晶格耦合强度. 则(1)式可改写成

$$\frac{H}{t_0} = - \sum_{n,s} [1 + (-1)^n (\phi_{n+1} + \phi_n)] (a_{n+1,s}^+ a_{n,s} + \text{c.c.}) + \frac{1}{\lambda\pi} \sum_n (\phi_{n+1} + \phi_n)^2. \quad (2)$$

由(2)式可见, 哈密顿量  $H/t_0$  只含有一个参数: 电子-晶格耦合强度  $\lambda$ . 如能量以  $t_0$  为单位, 则体系的性质将只和电子-晶格耦合强度  $\lambda$  有关.

从哈密顿量(2)式可以得到电子本征方程:

$$-[1 + (-1)^n (\phi_n + \phi_{n+1})] Z_{\mu,n+1} - [1 + (-1)^{n-1} (\phi_n + \phi_{n-1})] \cdot Z_{\mu,n-1} = \varepsilon_\mu Z_{\mu,n}, \quad (3)$$

其中  $\varepsilon_\mu$  和  $Z_{\mu,n}$  是电子的本征值和本征矢.

知道了电子能谱  $\varepsilon_\mu$ , 就可求得系统的总能量. 静态时体系的总能为电子能量和晶格弹性能之和:

$$E(\{\phi_n\}) = \sum_{\mu,s} \varepsilon_\mu + \frac{1}{\lambda\pi} \sum_n (\phi_n + \phi_{n+1})^2. \quad (4)$$

(占据态)

假定  $\phi_n = \phi_n^0 + \delta\phi_n$ , 这里  $\phi_n^0$  是基态时晶格平衡位置,  $\delta\phi_n$  是偏离平衡位置的小量,  $\delta\phi_n \ll \phi_n^0$ . 将此式代入静态能量表达式(4)式, 并将  $E(\{\phi_n\})$  在  $\phi_n^0$  附近展开到  $\delta\phi_n$  的二级项, 可得

$$E(\{\phi_n\}) = E_0 + E_s + \sum_n A_n \delta\phi_n + \frac{1}{2} \sum_{m,n} B_{m,n} \delta\phi_m \delta\phi_n, \quad (5)$$

其中  $E_0$  是二聚化基态能量,  $E_s$  是孤子产生能, 最后一项表示由于对平衡位置偏离所引起的晶格振动能. 由变分原理  $\delta E(\{\phi_n\}) / \delta\phi_n = 0$ , 可确定体系的稳定位形  $\phi_n^0$ , 在此位形下体系的静态总能  $E(\{\phi_n^0\})$  取极小, 即当系数  $A_n$  均趋于零时,

$$A_n(\{\phi_n^0\}) = 0. \quad (6)$$

系统能量将达到极小值, 这时体系处于基态.

由(6)式可得到决定孤子位形  $\phi_n^0$  的方程为

$$\phi_n + \phi_{n+1} = (-1)^n \lambda\pi \left[ \sum_\mu Z_{\mu,n} Z_{\mu,n+1} - \frac{1}{N} \sum_n \sum'_\mu Z_{\mu,n} Z_{\mu,n+1} \right]. \quad (7)$$

(占据态) \qquad \qquad \qquad (占据态)

联立求解(3), (4), (7)式, 即可自洽地求得孤子位形  $\{\phi_n\}$  和有孤子体系的总能.

既然孤子是  $A$  相和  $B$  相交界处的畴壁<sup>[1]</sup>, 根据孤子的定域性, 孤子的出现并不改变远距离处键的性质, 只是改变了二聚化的位相. 并且 SSH 的计算表明<sup>[2]</sup>, 他们模型中的孤

子宽度约 14 个晶格常数, 他们取的  $\lambda$  约为 0.2. 我们的工作表明, 当电子-晶格耦合强度  $\lambda$  增大时, 孤子宽度变小, 因此可以认为距畴壁为 20 来个晶格常数处的  $\{\phi_n\}$  和二聚化基态的位形一样. 求出此位形时二聚化基态的总能, 它和对应孤子体系总能之差即孤子激活能. 具体计算时, 孤子的  $N$  为 101; 二聚化的取  $N = 102$  和  $N = 100$  体系值的内插.

### 三、结果与讨论

在上述计算中只有一个参数  $\lambda$ , 改变  $\lambda$  即可得到在不同电子-晶格耦合强度下产生一个孤子所需能量.

用这样的方法我们在周期边界条件下求得了不同电子-晶格耦合强度下的孤子激活能. 图 1 示出孤子激活能和电子-晶格耦合强度的关系. 由图 1 可见有两个特点:

1. 孤子激活能随电子-晶格耦合强度  $\lambda$  的增大而增大.
2.  $\lambda < 0.35$ , 孤子激活能随  $\lambda$  增大近乎线性;  $\lambda > 0.35$ , 孤子激活能随  $\lambda$  增大渐渐减缓, 尤其  $\lambda > 0.45$  后减缓明显.

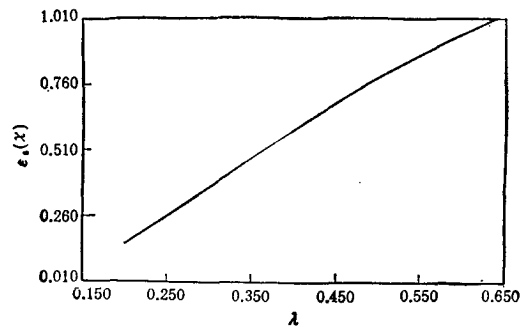


图 1 孤子激活能  $\epsilon_s(\lambda)$  与电子-晶格耦合强度  $\lambda$  的关系

要激发一个孤子, 除了一个电子从价带顶跃迁到禁带中央的分立能级外, 晶格结构(出现畴壁)和能带结构(价带和导带中减少了一个状态)也要改变. 孤子是电子和晶格相互耦合的集体激发, 因此我们得到的产生孤子所需能量要随电子-晶格耦合强度而变化, 这个结果是合理的. 我们的计算表明, 随电子-晶格耦合强度增大, 能隙要增大; 同时在孤子处孤子位形与二聚化位形的差异也随  $\lambda$  变大. 这二者都导致了在强耦合时, 激活一个孤子需要更多的能量.

为了进一步弄清在强耦合情况下, 激发一个孤子所需能量和激发电子、空穴所需能量哪个大, 即在强耦合时, 激发孤子是否比激发电子、空穴容易? 我们除了计算孤子激活能随电子-晶格耦合强度  $\lambda$  的变化  $\epsilon_s(\lambda)$  外, 还计算了一个电子从价带顶跃迁到禁带中央的分立能级所需能量随  $\lambda$  的变化  $\Delta(\lambda)$ . 图 2 表示  $\epsilon_s(\lambda)$  与  $\Delta(\lambda)$  的关系. 图 3 表示  $\epsilon_s(\lambda)/\Delta(\lambda)$  随  $\lambda$  的变化. 由图 1 至图 3 可见:

1.  $\lambda < 0.25$  时,  $\epsilon_s(\lambda)$  与  $\Delta(\lambda)$  的关系为线性, 其斜率  $\epsilon_s(\lambda)/\Delta(\lambda) \approx 0.63$ .
2.  $\lambda > 0.25$  时,  $\epsilon_s(\lambda)$  与  $\Delta(\lambda)$  的关系渐渐偏离线性, 且其斜率随  $\lambda$  增加而减小, 尤其  $\lambda > 0.32$  后, 这种减小越趋明显.

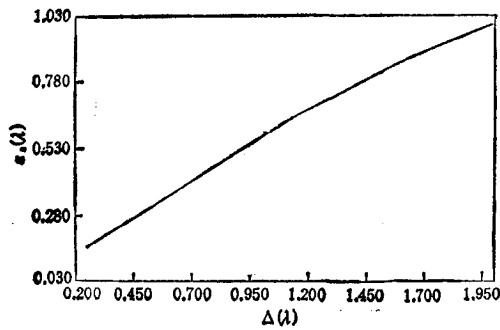


图2 孤子激活能  $\varepsilon_s(\lambda)$  与激发一个电子或空穴能量  $\Delta(\lambda)$  的关系

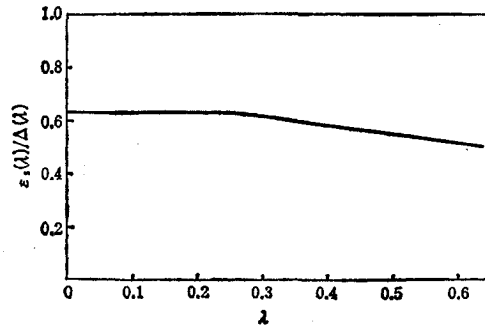


图3 比值  $\varepsilon_s(\lambda)/\Delta(\lambda)$  随电子-晶格耦合强度  $\lambda$  的变化

3.  $\lambda$  越大, 比值  $\varepsilon_s(\lambda)/\Delta(\lambda)$  越小。如:  $\lambda < 0.25$ ,  $\varepsilon_s(\lambda)/\Delta(\lambda) \approx 0.63$ ,  $0.25 < \lambda < 0.32$ ,  $\varepsilon_s(\lambda)/\Delta(\lambda)$  在 0.63 和 0.6 间。  $\lambda > 0.32$ ,  $\varepsilon_s(\lambda)/\Delta(\lambda) < 0.6$ ,  $\lambda = 0.6$ ,  $\varepsilon_s(\lambda)/\Delta(\lambda) \approx 0.5$ 。

综观上述 3 个图的特点可见, 在不同的电子-晶格耦合强度下,  $\varepsilon_s(\lambda) < \Delta(\lambda)$  总是成立。并且  $\lambda$  越大, 比值  $\varepsilon_s(\lambda)/\Delta(\lambda)$  越小, 这说明在不同的  $\lambda$  下, 对一维强耦合电子-晶格体系, 孤子对总是比电子-空穴对容易激发; 而且, 耦合增强时, 孤子对比电子-空穴对更稳定。这都有利于孤子的形成, 意味着强耦合情况下孤子仍然是载流子。

- [1] 孙鑫, 高聚合物中的孤子和极化子, 四川教育出版社, (1987).  
 [2] W. P. Su, J. R. Schrieffer, A. J. Heeger, *Phys. Rev. Lett.*, 42(1978), 1698; *Phys. Rev.*, B22(1980), 2099.  
 [3] H. Takayma, Y. R. Lin-Lin, K. Maki, *Phys. Rev.*, B21(1980), 2388.  
 [4] A. R. Bishop, R. J. Donohoe, J. T. Gammel and B. I. Swanson, Abstracts of ICST Vol. 1, (1990), p. 41.  
 [5] J. T. Gammel, R. J. Donohoe, A. R. Bishop and B. I. Swanson, *Phys. Rev. Lett.*, in press.  
 [6] K. Toriumi *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 111(1989), 2341.

## EXCITATION ENERGY OF SOLITON IN STRONGLY COUPLED ELECTRON-LATTICE SYSTEM

FU ROU-LI

National Laboratory of Infrared Physics, Academic Sinica, Shanghai, 200083

MA YUN-SHENG SUN XIN

Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433

(Received 26 July 1991)

### ABSTRACT

The excitation energy of soliton  $\varepsilon_s$  and its dependence upon electron-lattice coupling strength  $\lambda$  have been calculated in strongly coupled one dimensional electron-lattice systems. Our results show: The excitation energy of soliton  $\varepsilon_s(\lambda)$  augments as  $\lambda$  increases. Whereas,  $\varepsilon_s$  will be always less than the energy needed to excite an electron or a hole in this system.

PACC: 7190; 7138