

极化子新的变分计算*

汪克林 陈庆虎 完绍龙

中国科学技术大学基础物理中心, 合肥 230026

1993年1月3日收到

提出了一种新的变分解的方法求解极化子问题, 并归结为解一个非线性的微分积分方程。其数值计算的结果正是过去工作所预期的。

PACC: 7138; 7350; 6320K; 7420

一、引言

极化子的研究已有多年的历史。过去的工作大体上分为两方面。一种是在弱耦合的情况下用微扰论的办法计算。另一种是在强耦合情况下微扰论的方法不再适用时采用变分的办法。在这方面 Landau 和 Pekar 作过开创性的工作^[1]。他们假定电子取高斯型的波函数变分后得到

$$E = -0.106\alpha^2\omega_{\text{ph}} \quad (1)$$

的能量值。其中 α 是耦合常数, ω_{ph} 是声子的特征圆频率。以后 Miyake^[2] 在 $\alpha \gg 1$ 的情况下得到以下的结果:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} E = -\omega_{\text{ph}} \left[0.1085\alpha^2 + 2.836 + O\left(\frac{1}{\alpha^2}\right) \right] \quad (2)$$

从这个结果看出, 尽管 Landau 和 Pekar 用了简单的试探函数得到的结果在强耦合极限情形下却是相当精确的。另一方面它说明极化子的能量在一般的强耦合情形下仍可能比 Landau 和 Pekar 计算的结果低 2% 左右。为此本文提出一种新的变分方法计算极化子的能量。其特点是(1)声子部分采用 Davydov^[3] 提出的相干态形式。Ivic 和 Brown^[4] 曾用它讨论过一维晶格的小极化子问题。(2) Landau 和 Pekar 对于电子和声子部分的耦合实质上只考虑了一次叠代的效应, 而在本文中是完全的耦合求解。即从下面的讨论可以看出, 对电子的波函数的函数形式未作任何假定, 而是通过耦合求解得出。(3)不同于文献[2], 本文的结果不限于极限的情形。在一般的强耦合情形下明确得到能量值为

$$E = -0.1085\alpha^2\omega_{\text{ph}} \quad (3)$$

换句话说在文献[2]中未计算的 $\frac{1}{\alpha^2}$ 后的所有修正都全部考虑进去了。可以说用变分的方法解极化子的问题似已有了一个较为圆满的结果。除此之外本文的意义还在于循此路线

* 国家攀登计划资助的课题。

二、变分解的基本方法

电子和声子系统的哈氏量取接近真实系统的 Fröhlich 模型^[9]

$$H = -\frac{1}{2m} \nabla^2 + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} (M_s / \nu^{\frac{1}{2}} q) [a_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) + a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})], \quad (4)$$

其中 m 是电子质量, $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}, a_{\mathbf{q}}$ 是动量为 $\mathbf{q}$ 的声子的产生及湮没算符, ν 是系统的体积, M_s 的表示式为

$$M_s = 4\pi\alpha(\omega_s)^{3/2}/(2m)^{1/2}. \quad (5)$$

设试探波函数的形式为

$$\varphi(\mathbf{r})|A\rangle. \quad (6)$$

其中 $\varphi(\mathbf{r})$ 是电子的波函数, $|A\rangle$ 是声子系统的态矢. 假定 $|A\rangle$ 取如下的相干态形式:

$$|A\rangle = \exp\left\{\sum_{\mathbf{q}} \alpha(\mathbf{q}) a_{\mathbf{q}}^{\dagger} - \alpha^*(\mathbf{q}) a_{\mathbf{q}}\right\} |0\rangle. \quad (7)$$

现在求 $\alpha(\mathbf{q})$ 与 $\varphi(\mathbf{r})$ 间的耦合关系. 由于 $|A\rangle$ 的相干态性质, 有如下的关系:

$$a_{\mathbf{q}}|A\rangle = \alpha(\mathbf{q})|A\rangle. \quad (8)$$

上式等号右边乘以 $\varphi(\mathbf{r})$, 并等号左乘以 $\langle A|\varphi^*(\mathbf{r})$ 然后对 $\mathbf{r}$ 积分同时利用归一化条件:

$$\langle A|A\rangle = 1, \quad (9)$$

$$\int |\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1. \quad (10)$$

可得

$$\alpha(\mathbf{q}) = \int \langle A|\varphi^*(\mathbf{r}) a_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{r})|A\rangle d\mathbf{r}. \quad (11)$$

已设(6)式是 H 的基态函数, 相应的能量值记为 E . 应有

$$\begin{aligned} H\varphi(\mathbf{r})|A\rangle &= E\varphi(\mathbf{r})|A\rangle; \\ \langle A|\varphi^*(\mathbf{r})H &= \langle A|\varphi^*(\mathbf{r})E. \end{aligned} \quad (12)$$

以 E 乘以(11)式两端, 得

$$\begin{aligned} E\alpha(\mathbf{q}) &= \int \langle A|\varphi^*(\mathbf{r}) a_{\mathbf{q}} E\varphi(\mathbf{r})|A\rangle d\mathbf{r} \\ &= \int \langle A|\varphi^*(\mathbf{r}) E a_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{r})|A\rangle d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (13)$$

利用(12)式, 上式可改写为

$$\begin{aligned} E\alpha(\mathbf{q}) &= \int \langle A|\varphi^*(\mathbf{r}) a_{\mathbf{q}} H\varphi(\mathbf{r})|A\rangle d\mathbf{r} \\ &= \int \langle A|\varphi^*(\mathbf{r}) H a_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{r})|A\rangle d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (14)$$

由上式可得

$$\int \langle A | \varphi^*(\mathbf{r}) [a_{\mathbf{q}}, H] \varphi(\mathbf{r}) | A \rangle d\mathbf{r} = 0, \quad (15)$$

由 H 的表达式知, $[a_{\mathbf{q}}, H] = \omega_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} + M_{\mathbf{q}} / \sqrt{\nu} \mathbf{q} \cdot \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$ 引入

$$k(\mathbf{q}) = (1/q) \int |\varphi(\mathbf{r})|^2 \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (16)$$

由(15)式得

$$\alpha(\mathbf{q}) = -M_{\mathbf{q}} k(\mathbf{q}) / \nu^{1/2} \omega_{\mathbf{q}}. \quad (17)$$

三、电子波函数满足的非线性微分积分方程

将(12)式中的 H 明显写出, $\varphi(\mathbf{r})$ 取为球对称

$$E\varphi(\mathbf{r}) = -1/2m\nabla^2\varphi(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} |\alpha(\mathbf{q})|^2 \varphi(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{q}} (M_{\mathbf{q}}/\nu^{1/2}q) [\alpha(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) + \alpha^*(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})] \varphi(\mathbf{r}). \quad (18)$$

把 $\alpha(\mathbf{q})$ 的表达式(17)代入上式, 并将 $1/\nu\Sigma$ 改写成积分的形式, 可得

$$E\varphi(\mathbf{r}) = -(1/2m)\nabla^2\varphi(\mathbf{r}) + \left[(1/2\pi)^3 \omega_{\mathbf{q}} \int [M_{\mathbf{q}}^2 k^2(\mathbf{q})/\omega_{\mathbf{q}}^3] d\mathbf{q} \right] \varphi(\mathbf{r}) - \left[(1/2\pi)^3 \int [M_{\mathbf{q}}^2 k(\mathbf{q})/\omega_{\mathbf{q}}] [\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) + \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})] d\mathbf{q} \right] \varphi(\mathbf{r}). \quad (19)$$

将(16)式中的 $k(\mathbf{q})$ 的角度部分积得

$$k(\mathbf{q}) = k(q) = 4\pi \int_0^\infty (r \sin qr / qr) \varphi^2(r) dr. \quad (20)$$

将(20)式代入(19)式并将角度部分积分, 得到

$$E\varphi(r) = -(1/2m)[d^2/dr^2 + (2/r)d/dr]\varphi(r) + \left[\int_0^\infty 8M_0^2/\omega_{\mathbf{q}} q^2 \left(\int_0^\infty r_1 \varphi^2(r_1) \sin qr_1 dr_1 \right)^2 dq \right] \varphi(r) - 2M_0^2/\omega_{\mathbf{q}} \left[\int_0^\infty r_1 \varphi^2(r_1) dr_1 + \int_0^r (r_1^2/r) \varphi^2(r_1) dr_1 \right] \varphi(r). \quad (21)$$

将 $M_{\mathbf{q}}$ 的表达式(5)代入上式并引进符号

$$\rho = m^{1/2}, \quad \gamma = \alpha(\omega_{\mathbf{q}})^{1/2}, \quad E_1 = \rho E. \quad (22)$$

(21)式最终化简成

$$E_1\varphi(r) = -(1/2\rho) \left(d^2/dr^2 + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \varphi(r) + (32\pi\gamma/\sqrt{2}) \left[\int_0^\infty (1/q^2) \left(\int_0^\infty r_1 \varphi^2(r_1) \sin qr_1 dr_1 \right)^2 dq \right] \varphi(r) - (8\pi\gamma/\sqrt{2}) \left[\int_0^\infty r_1 \varphi^2(r_1) dr_1 + \int_0^r (r_1^2/r) \varphi^2(r_1) dr_1 \right] \varphi(r). \quad (23)$$

四、解 及 讨 论

上面的最后一个公式是电子波函数满足的非线性微分积分方程。本文采用数值解法。

求解。其步骤是,先将物理上考虑合理的初始的 $\varphi_0(r)$ 代入(23)式的积分号内,在给定一个 E_1 值的情况下利用微分运算算出 $\varphi_1(r)$,再将 $\varphi_1(r)$ 代入积分号内重复求 $\varphi_2(r)$ 。以这样的方法重复下去,经过若干次叠代得到相当精确的近似解。本文要求的精确程度是,最后求得的 $\varphi(r)$ 再代入(23)式求下一步的 $\varphi(r)$ 时,两者的平均相对差值小于 10^{-10} 。按照上述方法,每给一个 E_1 值可解出一个相应的 $\varphi(r)$ 。变动 E_1 直到 E_1 能达到的 E_c 值,比 E_c 更小的 E_1 值解不再存在。最后得到的结果是

$$E_c = -0.1085.$$

为了显示这一情形,在图1中给出三个不同的 E 值对应的 $\varphi(r)$ 。其中 E_c 对应的实线电子分布最宽。

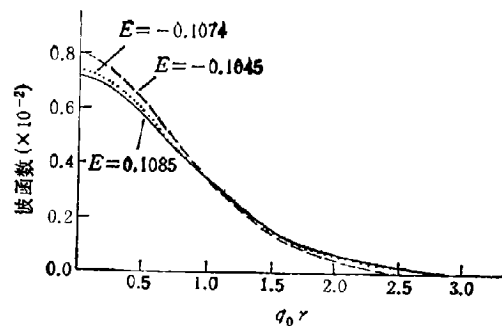


图1 变分能量 E 时不同的波函数

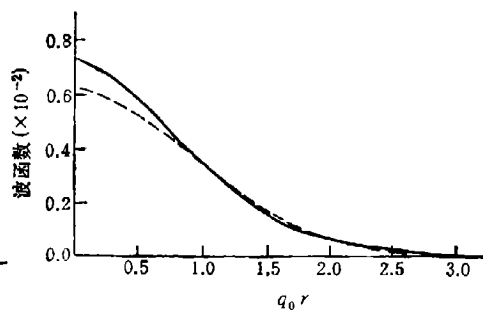


图2 Landau 的波函数与本文得到的波函数的比较

最后为了与 Landau 的结果作一比较,在图2中用虚线表示他们得出的电子波函数。实线表示本文计算的结果。从两条曲线看出,尽管两种方法很不相同,得出的波函数还是比较接近的。差异之处在于小 r 处本文得出的电子分布较高,因而得出更低的能量。如前所述,本文用了不同于 Landau 及 Miyake 的新变分方法,并得到与他们协调而又更普遍的结果。

- [1] L. D. Landau, and S. I. Pekar, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **16**, (1946), 341.
- [2] S. J. Miyake, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **41**, (1976), 745.
- [3] A. S. Davydov *et al.* *Phys. Stat. Solidi. (b)*, **59**, (1973), 465.
- [4] Z. Ivic and D. W. Brown, *Phys. Rev. Lett.*, **63**, (1989), 426.
- [5] Gerald D. Mahan, "Many Particle physics" (Plenum Press 1981), Chapter 6.

A NEW METHOD OF VARIATIONAL CALCULATION FOR POLARON

WANG KE-LIN CHEN QING-HU WAN SHAO-LONG

Centre for Fundamental Physics, University of Science and Technology of China, Hefei, 230026

(Received 3 January 1993)

ABSTRACT

A new variational method for solving polaron problem is suggested, and the nonlinear differential-integral equation satisfied by variational solution of polaron has been derived, the numerical result of which is as anticipated by earlier works.

PACC: 7138; 7350; 6320K; 7420