

二维和三维大双极化子的稳定性

任宇航 陈庆虎 沙 健 焦正宽

(浙江大学物理系, 杭州 310027)

(1997 年 6 月 4 日收到; 1997 年 8 月 26 日收到修改稿)

结合相对运动的近似波函数和修正的 Lee(李政道)-Low-Pines 变分法, 研究了二维和三维大双极化子的稳定性. 得到了临界耦合参数 α_c 和临界介电常数比 η_c . 与近来用完全不同的变分方法求得的结果相一致. 还标定了在 $1/\alpha$, η 平面上双极化子稳定存在的区域. 结果显示, 低维材料更有利于双极化子的形成.

PACC: 7138; 6320K; 7145G; 7340L

1 引 言

两个相同的电子通过声子场相互作用, 能够形成双极化子束缚态. 当由电-声耦合引起的吸引力足够强, 以致可以克服两电子间的库仑相互作用时, 两个电子与声子场形成一个束缚态, 对应的准粒子就是双极化子. 双极化子通常有大小双极化子之分, 大双极化子是可以流动的, 有较小的有效质量比, 而小双极化子是局域的, 其质量比要小得多. 因此, 与超导电性相关的很有可能就是大双极化子^[1].

自从 Emin^[2]提出以双极化子的玻色-爱因斯坦凝聚解释高温超导电性以来, 有关大双极化子的稳定性方面的工作引起了人们极大的关注^[3-9]. 有一些作者通过二维和三维情况的讨论, 说明了其存在的维度效应.

两个电子通过声子场相互作用的系统哈密顿量可表述为(取 $m = \hbar = \omega_0 = 1$)

$$H = \sum_{j=1,2} \left[\frac{1}{2} P_j^2 + \sum_K v_K (a_K e^{iK r_j} + a_K^\dagger e^{-iK r_j}) \right] + \sum_K a_K^\dagger a_K + U(|r_1 - r_2|), \quad (1)$$

$$v_K^2 = \frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right) 2^{N-3/2} \pi^{(N-1)/2} \alpha}{V_N K^{N-1}}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right), \quad (2)$$

其中 $r_j(P_j)$ 是第 j 个电子的位置(动量)算符, $U = U/r$ 是势场 U 下的库仑相互作用势, 而 $U = e^2/\epsilon_\infty$ 给出了非屏蔽的库仑排斥势. 显然, 我们有以下的关系:

$$U = \frac{\sqrt{2}}{(1-\eta)} \geq \sqrt{2} \alpha,$$

其中 $\eta = \epsilon_\infty/\epsilon_0$ 是介电常数的比率.

由于双极化子哈密顿量(1)式中出现了两个电子, 所以相对于单极化子的情况而言, 这种问题更难求解. 与单极化子问题不同的是, 即使是在强耦合近似的情况下, 精确解也远没有得到. 因此, 为了讨论双极化子的稳定性, 在近年的文献中, 许多作者提出了各种各

样的近似方法.

本文将结合相对运动的渐进近似解波函数和早期修正的 Lee-Low-Pines(LLP)变分法来计算 N 维情况下的双极化子的基态能.最后与单极化子的 Feynman 路径积分结果^[10]进行比较,估算出临界耦合参数 α_c 和临界介电常数比 η_c .并在 $1/\alpha, \eta$ 平面上标定出双极化子稳定存在的范围.

2 双极化子基态能的计算公式

我们引入质心坐标 $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ 及相对坐标 $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ 来表示电子对的位置.根据这两个坐标,哈密顿量(1)式可以改写为

$$H_{bp} = \frac{\mathbf{P}^2}{4} + \mathbf{P}^2 + \sum_K \nu_K \cos\left[\frac{\mathbf{K}\mathbf{r}}{2}\right] (a_K e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} + a_K^\dagger e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}}) + \sum_K a_K^\dagger a_K + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (3)$$

首先,将相对运动的近似解波函数写作以下的谐振子形式:

$$\phi(\mathbf{r}) = \left[\frac{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}{\pi^{N/2} \Gamma\left(\frac{N}{2} + 1\right)} \left(\frac{\Omega}{2}\right)^{\frac{N}{2}+1} \right]^{1/2} \mathbf{r} e^{-\Omega r^2/4}. \quad (4)$$

它与强耦合近似极限下,二维和三维双极化子的解与相对运动波函数很接近^[7].我们知道,双极化子仅仅存在于强耦合区域.因此,强耦合的结果是任何双极化子理论的一个本质特征.

接着,将哈密顿量(3)式对近似解波函数(4)式求期待值,可消去相对坐标.这样,我们就可以写出有效哈密顿量

$$H_{\text{eff}} = \frac{\mathbf{P}^2}{4} + \sum_K B_K (a_K e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} + a_K^\dagger e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}}) + \sum_K a_K^\dagger a_K + E_r, \quad (5)$$

其中 $B_K = 2 \nu_K \langle \cos\left[\frac{\mathbf{K}\mathbf{r}}{2}\right] \rangle$, $E_r = \langle \mathbf{P}^2 + \frac{U}{r} \rangle$, 而 $\langle \cdot \rangle$ 表示对波函数的平均.

下面,我们就来计算 B_K 中的平均值部分.

$$\langle \cos\left[\frac{\mathbf{K}\mathbf{r}}{2}\right] \rangle = \int d\mathbf{r} r_N \cos\left[\frac{\mathbf{K}\mathbf{r}}{2}\right] \phi^2(\mathbf{r}). \quad (6)$$

取 $\mathbf{K}$ 与 $\mathbf{r}$ 之间的角度为最高指标转动角,并对其余角度积分,这时立体角积分部分变为

$$\int d\Omega_N = \frac{2\pi^{\frac{N-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)} \int_0^\pi \sin^{N-2} \theta d\theta. \quad (7)$$

将(7)式代入(6)式,则有

$$\begin{aligned} \langle \cos\left[\frac{\mathbf{K}\mathbf{r}}{2}\right] \rangle &= \frac{2\pi^{\frac{N-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)} \int d\mathbf{r} r^{N-1} \int_0^\pi d\theta \sin^{N-2} \theta \cos\left(\frac{1}{2} K r \cos \theta\right) \phi^2(\mathbf{r}) \\ &= \left(1 - \frac{K^2}{4N\Omega}\right) e^{-\frac{K^2}{8\Omega}}. \end{aligned} \quad (8)$$

在 E_r 的计算中, 将 Laplace 算符作用于球对称的 N 维波函数, 再利用拉普拉斯变换, 有

$$P^2 \phi(r) = -\frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} \left[r^{N-1} \frac{d}{dr} \phi(r) \right]. \quad (9)$$

这样, 我们就得到

$$\begin{aligned} \langle P^2 \rangle &= \left(\frac{2}{N} + \frac{N}{2} - 1 \right) \frac{\Omega}{2}, \\ E_r &= \left(\frac{2}{N} + \frac{N}{2} - 1 \right) \frac{\Omega}{2} + \frac{\Gamma\left(\frac{N+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}+1\right)} \left(\frac{\Omega}{2} \right)^{1/2} U. \end{aligned} \quad (10)$$

注意到有效哈密顿量(5)式实质上相当于对应质心运动的单极化子哈密顿量, 这个问题可以通过许多发展较为完善的单粒子近似方法来加以研究. 本文利用 Huybrechts 提出的修正的 LLP 变分法来进行求解. 通过这种方法, 我们可以得到对应于各种耦合区域较为精确的极化子能量, 并可以算出有效哈密顿量对应的基态能量值. 运用两个对(5)式的变换 U_1 和 U_2 :

$$U_1 = \exp \left[-i a \sum_K K R a_K^\dagger a_K \right], \quad (11)$$

$$U_2 = \exp \left[\sum_K (f_K a_K^\dagger - f_K a_K) \right], \quad (12)$$

其中 a 为变分参数, 而 f_K 可假定为仅与 K 有关的函数, 其由变分参量决定. 再引入产生和湮没算符 $b_l^\dagger$ 和 b_l , 则有

$$\begin{aligned} P_l &= (\lambda)^{\frac{1}{2}} (b_l^\dagger + b_l), \\ R_l &= i \left(\frac{1}{4} \lambda \right)^{\frac{1}{2}} (b_l - b_l^\dagger), \end{aligned} \quad (13)$$

下标 l 表示 N 维空间的第 l 维分量, 在新表象里基态能量由下式决定:

$$b_l |0\rangle = a_K |0\rangle = 0. \quad (14)$$

再考虑到极化子的总动量是守恒量, 我们就得到了以下形式的双极化子基态能量 E_{bp} :

$$E_{bp} = \frac{N}{4} \lambda (1-a)^2 - \sum_K B_K^2 \frac{e^{-\frac{(1-a)^2}{4\lambda}}}{1 + \frac{a^2 K^2}{4}} + E_r, \quad (15)$$

Huybrechts 处理极化子问题的具体推导过程, 请参见文献[11].

根据(8), (9)式, 我们易得到

$$\begin{aligned} E_{bp} &= \frac{N}{4} \lambda (1-a)^2 - 2 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma(N/2)} \alpha \int_0^\infty \left(1 - \frac{K^2}{4\pi\Omega} \right)^2 e^{-\left[\frac{1}{4\Omega} + \frac{(1-a)^2}{4\lambda} \right] K^2} \frac{dK}{1 + \frac{a^2 K^2}{4}} \\ &\quad + \left(\frac{2}{N} + \frac{N}{2} - 1 \right) \frac{\Omega}{2} + \frac{\Gamma\left(\frac{N+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}+1\right)} \left(\frac{\Omega}{2} \right)^{\frac{1}{2}} U. \end{aligned} \quad (16)$$

上式尽管还可以对等号右边的 K 积分解析求解, 得到一个包含容错函数 $\text{efx}(x)$ 误差的极其复杂的形式, 但这种形式对于实际的运算意义不大. 这样就可以通过求变分参数 λ , Ω , α 的极小值而得到双极化子的基态能量. 同时, (16) 式的数值解也可以求得, 有关数值解的计算结果将在下面加以讨论.

3 结果与讨论

下面我们采用普遍推行的与 Feynman 路径积分方法的结论进行类比的做法^[4-8], 对 N 维双极化子的稳定性加以讨论. Feynman 极化子基态能量^[12] E_{bp}^{F} 可以写为

$$E_{\text{bp}}^{\text{F}} = \frac{N}{4} \frac{(v-w)^2}{v} - \frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} \frac{\alpha v}{2} \int_0^\infty ds \frac{e^{-s}}{f(s)^{1/2}}, \quad (17)$$

$$f(s) = \frac{v^2 - w^2}{v} (1 - e^{-vs}) + w^2 s,$$

其中 v 和 w 都是变分参量.

一般而言, 通过 (16) 和 (17) 式, 考虑维度 N 、电-声耦合常数 α 以及非屏蔽的库仑排斥势 U (或者介电常数比 η), 就可以判断大双极化子存在与否. 我们可以就两种极端条件及一般情况进行讨论.

在 $\eta=0$ 的情况下, 取 $U = \sqrt{2} \alpha$, 对利用 (16) 和 (17) 式计算出来的双极化子基态能量与单极化子基态能量进行对比, 可以得到仅与耦合参量 α 有关的双极化子束缚态能量. 根据双极化子形成条件 $E_{\text{bp}} \leq 2E_{\text{sp}}$, 我们可以算出双极化子存在处的耦合参数 α_c . 通过仔细的计算和验证, 可以算出二维和三维的耦合参数 α_c 值分别为 3.6 和 8.1. 这与 Luczak 等^[7]所采用的与 Feynman 极化子能量计算方法相同的完全不同的变分方法结果 $\alpha_c = 3.5$ (二维) 和 $\alpha_c = 8.1$ (三维) 很接近.

在强耦合近似的情况下, (16) 式中 λ 和 Ω 都非常大, 而 a 趋于零. 如取 $\lambda = \lambda' \alpha^2$, $\Omega = \Omega' \alpha^2$, $a=0$, 则有

$$E_{\text{bp}} = \alpha^2 \left\{ \frac{N}{4} \lambda' - 2 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} \int_0^\infty dK \left(1 - \frac{K^2}{4N\Omega'} \right)^2 e^{-\left[\frac{1}{4\Omega'} + \frac{1}{4\lambda'}\right]K^2} + \left(\frac{2}{N} + \frac{N}{2} - 1 \right) \frac{\Omega'}{2} + \frac{\Gamma\left(\frac{N+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}+1\right)} \left(\frac{\Omega}{2} \right)^{1/2} U \right\}. \quad (18)$$

显然, 式中等号右端括号中所有的项都与 α 无关. 因此, 在强耦合极限下双极化子的基态能量正比于 α^2 . 另外, 在 Feynman 路径积分方法中, 强耦合近似情况下的极化子基态能量可表示为

$$E_{\text{sp}}^{\text{F}} = -\frac{1}{4N} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} \right]^2 \alpha^2. \quad (19)$$

这样,我们就可以计算出对应的临界介电常数比 η_c , 其对于二维和三维情况分别为 **0.133** 和 **0.159**, 这个结果与 Luczak 等^[7] 计算所得的 $\eta_c^{3D}=0.131$, $\eta_c^{2D}=0.158$ 也很接近.

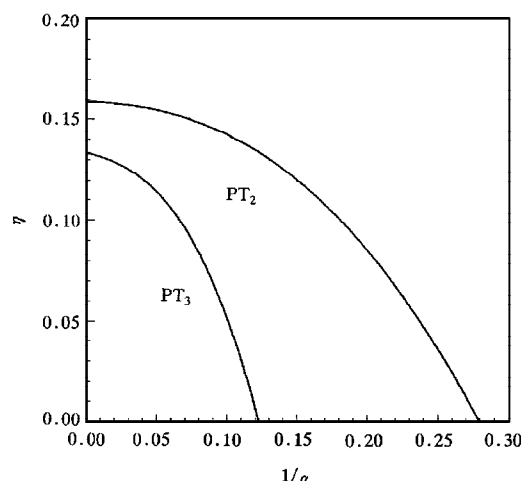


图 1 二维和三维双极化子稳定存在的区域

总之,对(6)式作必要的计算后,我们可以标志对于二维和三维情况下, $1/\alpha, \eta$ 平面上第一象限中双极化子稳定存在的范围,见图 1. 其中 PT_2 和 PT_3 表示二维和三维单极化子向双极化子转变的相变曲线. 在图中,我们看到维度越低则稳定区域越大. 并且,两种极端情况恰好表示在坐标轴中,其中横坐标表示 $\eta=0$ 的情况,纵坐标表示强耦合近似的情况. 而 PT 曲线与两根轴的交点,则分别表示与二维、三维情况对应的临界介电常数比 η_c 和耦合参数 α_c 的倒数.

值得指出的是,由我们的简单模型所得结果,可与其他研究者采用的变分法所得结果相媲美. 如果我们用更广泛的波函数形式来表示(4)式中表示的相对运动,那么二维或三维的双极化子稳定范围也将进一步扩大.

4 结 论

我们提出一种简单的近似方法来处理二维或三维的双极化子基态能量. 并在与其他研究者的计算结果进行对比的基础上,进一步讨论了双极化子稳定范围. 所得到的 α_c 和 η_c 与用全微分变分方法求得的结果相符合. 结果表明,维度越低则稳定区域越大. 因此,低维材料更适于形成双极化子. 这种简单的近似方法,对于其他极化子物理学中的问题(如激子),同样是有有效的. 进一步的工作还在进行中.

- [1] G. Iadonisi, V. Cataudella, D. Ninno *et al.*, *Phys. Lett.*, **A196**(1995), 359.
- [2] D. Emin, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 1544; *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 5525.
- [3] F. Bassani, M. Geddo, G. Iadonisi *et al.*, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 5296.
- [4] J. Adamoski, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 3649.
- [5] G. Verbist, M. A. Smondyrev, F. M. Peeters *et al.*, *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 5262.
- [6] G. Verbist, F. M. Peeters, J. T. Devreese, *Phys. Rev.*, **B43**(1991), 2712; G. Verbist, F. M. Peeters, J. T. Devreese, *Solid State Commun.*, **76**(1990), 1005.
- [7] F. Luczak, F. Brosens, J. T. Devreese, *Phys. Rev.*, **B52**(1995), 12743.
- [8] M. A. Smondyrev, J. T. Devreese, F. M. Peeters, *Phys. Rev.*, **B51**(1995), 15008.
- [9] Chen Qinghu, Wang Kelin, Wan Shaolong, *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 164.
- [10] R. P. Feynman, *Phys. Rev.*, **97**(1955), 660.
- [11] W. J. Huybrechts, *J. Phys. C*, **10**(1995), 3761.
- [12] F. M. Peeters *et al.*, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 3926.

STABILITY OF THE LARGE BIPOLARONS IN TWO AND THREE DIMENSIONS

REN YU-HANG CHEN QING-HU SHA JIAN JIAO ZHENG-KUAN

(*Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027*)

(Received 4 June 1997; revised manuscript received 26 August 1997)

ABSTRACT

The large bipolaron in two and three dimensions is investigated by combining an approximate wave functions for the relative motion and the modified Lee-Low-Pines variational method. The values of the critical coupling constant α_c above which bipolarons may exist and the critical ratio of dielectric constants η_c below which bipolarons may exist are evaluated, which are very close to the recent results obtained within a totally different variational approach. In addition, the stability region of bipolarons in the $1/\alpha, \eta$ plane is clearly plotted. It is also found that low dimensional materials are more favorable for the formation of bipolarons.

PACC: 7138; 6320K; 7145G; 7340L