第 57 卷 第 7 期 2008 年 7 月
1000-3290/2008/57(07)/4402-10
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.57,No.7,July,2008

一维分子晶体系统的极化子-孤子压缩态，系统基态性质和量子涨落*

余超凡[1)†] 梁国栋[2)] 曹锡金[3)]

1)(广东教育学院物理系,广州 510303)

2)(暨南大学光电工程系,广州 510632)

3)(华南师范大学物理系,广州 510006)

(2007 年 11 月 19 日收到;2007 年 12 月 21 日收到修改稿)

基于一维分子晶体系统的 Holstein 模型,采用压缩-相干态展开方法,计及电子-声子间量子关联和重整化平移修正,分析和研究电子-双声子相互作用对极化子-孤子系统基态性质和量子涨落的影响.推导了一维极化子-孤子系统的封闭形式非线性方程.应用非线性项展开方法,给出非线性方程的解析解和相关基态特性结果.研究表明,仅当电子-双声子耦合强度 $g_1 < 0$ 时非线性方程才有孤波解,此时声子量子涨落效应随着压缩的增加,极化子-孤子系统基态能量变得更负,孤子局域减少,孤子态更加稳定;另一方面,电子密度涨落$\langle \Delta^2 n\rangle$和声子坐标-动量的不确定量$\langle \Delta^2 p\rangle\langle \Delta^2 q\rangle$比无声子压缩效应的大,极化子结合能变得更负.特别是,当 $g_1 < 0$ 时,双声子效应的量子涨落$\langle \Delta^2 n\rangle$与$\langle \Delta^2 p\rangle\langle \Delta^2 q\rangle$的值比单声子情况有明显增加.

关键词:压缩-相干态展开,极化子-孤子态与量子涨落,电子-双声子相互作用,非线性薛定谔方程

PACC:6320K,7138,7215N

1.引 言

一维分子晶体的一个非常重要的现象和效应是电子(空穴)的存在引起周围晶格的畸变造成电子的能量下降.由于晶格的畸变提供一个使电子(空穴)受束缚的吸引势阱,并形成自陷态,即极化子态.处理这种电子-局域声子耦合体的小极化子模型,最有代表性的是 Holstein 模型[1].它不但在固体物理方面有重要应用,例如高温超导,巨磁阻问题,而且在分子物理,高聚物材料,生命科学中的 DNA 研究等都用它来处理,并得到了许多重要成果[2—11],例如小极化子能带结构[5],非线性局域声子激发的动力学性质[2].原始的 Holstein 模型是一个电子与单声子相互作用模型.近年来,考虑到在平衡位置邻域对电子-晶格离子作用势作展开时,应该保留三级位移项的贡献,即计及电子-双声子相互作用效应,研究了电子-声子相互作用系统的双声子效应的性质.应当指出,对于一维分子晶体 Holstein 模型的研究,特别是基态性质和极化子问题,一直激起人们的广泛兴趣,并在深入研究中发现了许多求解的方法,例如变分法及最近的相干态方法[11—15].到目前为止,作者认为还没有真正解决一维分子晶体小极化子系统的基态问题,即未获得真正的基态和相关量子涨落特性,对极化子-孤子态的性质没有更深层次了解.特别是至今还没有计及电子-双声子相互作用,从极化子压缩态角度求解出系统的真实基态和回答相关的量子涨落问题.

本文试图从极化子-孤子压缩态图像来获得系统的真实基态.从声子压缩效应的物理图像来看,极化子-孤子压缩态表明声子场有量子涨落.由于声子压缩态场导致的量子涨落修正比声子相干态场的大,这一准相干态场所导致的基态能量比相干态展开方法得到的更低,因而更能反映真实基态.本文基于声子场压缩图像,应用压缩-相干态展开方法,研究电子-声子非线性相互作用及其诱生的非线性方

* 国家自然科学基金(批准号:10574163)资助的课题.

† E-mail:xijincao.scnu@yahoo.com.cn

程.具体考虑压缩-平移关联引起平移参量 α 的重整化修正，电子-声子间量子关联效应以及电子双声子相互作用.与通常方法不同，通过非线性展开方法和非线性方程求解，对极化子-孤子系统基态，量子涨落，极化子结合能作出重要修正.文中在第二节考虑了上述压缩声子相关量子效应，推导了一维电子-声子相互作用系统的基态能量和非线性变分方程.第三节分别给出了电子-单声子、双声子相互作用的非线性方程解析解结果，导出孤子局域性质及孤子解的稳定条件以及极化子-孤子系统基态能量.由于存在电子-声子间量子关联，我们给出了极化子-孤子量子涨落和极化子结合能的重要修正.第四节给出电子-双声子耦合效应对高阶非线性效应的作用，展示了计及电子-双声子二阶修正的积分形式孤波解.最后，结论中将主要问题作出总结和分析.

2. 一维电子-双声子相互作用系统，非线性变分方程

对于一维分子晶体，当考虑晶格三级位移效应，张开电子-双声子组态空间，除了电子-单声子相互作用，还需计及电子-双声子相互作用贡献[12,15]，此时的电子-声子耦合系统哈密顿量表示为

$$H = -t\sum_i\left(c_i^+c_{i+1} + c_i^+c_{i-1}\right) + \omega\sum_i b_i^+b_i + g\sum_i c_i^+c_i\left(b_i^+ + b_i\right) + g_1\sum_i c_i^+c_i\left(b_i^+b_i^+ + b_ib_i\right), \tag{1}$$

其中 c_i^+（c_i）代表电子产生（湮没）算符，b_i^+（b_i）代表声子产生（湮没）算符，t 代表跳跃作用强度，g 代表电子-单声子耦合强度，而 g_1 代表电子-双声子耦合强度.为了求解极化子-孤子压缩态物理内涵，我们采用声子压缩-相干态展开方法，将系统的变分波函数取作

$$|\phi\rangle = \sum_i \psi_i c_i^+ U_0 |0\rangle, \tag{2}$$

$$U_0 = \mathrm{e}^{\sum_i\left[r\left(b_i^2 - b_i^{+2}\right) + \alpha_i\left(b_i^+ - b_i\right)\right]}, \tag{3}$$

其中 $U_\mathrm{S}(r)$，$U_\mathrm{D}(\alpha)$ 分别代表压缩算符和平移算符，即

$$U_\mathrm{S}(r) = \mathrm{e}^{\sum_i r\left(b_i^2 - b_i^{+2}\right)},\quad U_\mathrm{D}(\alpha) = \mathrm{e}^{\sum_i \alpha_i\left(b_i^+ - b_i\right)}, \tag{4}$$

而$|0\rangle$代表电子$\oplus$声子系统真空态，ψ_i 与 α_i 代表变分参数，r 为压缩参数.我们求解薛定谔方程

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle, \tag{5}$$

而

$$E = \langle\phi|H|\phi\rangle / \langle\phi|\phi\rangle. \tag{6}$$

2.1. 平移变换效应

作为微扰近似，我们首先考虑平移变换效应.为了研究电子与单声子、双声子相互作用的非线性效应对 α_i 的影响，我们暂时略去电子-声子关联效应，此时，若

$$|\psi_1\rangle = \sum_i \psi_i c_i^+ |0\rangle, \tag{7}$$

$$\begin{aligned} E_{(0)} &= \langle\psi_1|DHD^{-1}|\psi_1\rangle / \langle\psi_1|\psi_1\rangle \\ &= \frac{1}{\sum_l \psi_l^2}\Big\{-t\sum_i\left(\psi_i\psi_{i+1} + \psi_i\psi_{i-1}\right) \\ &\quad + \omega\sum_{i_1}\psi_{i_1}^2\sum_i\alpha_i^2 + 2g\sum_i\alpha_i\psi_i^2 \\ &\quad + 2g_1\sum_i\alpha_i^2\psi_i^2\Big\}. \end{aligned} \tag{8}$$

对(8)式的变分参量 α_i 作极值变分

$$\frac{\partial E_{(0)}}{\partial\alpha_k} = \frac{2g}{\sum_l\psi_l^2}\psi_k^2 + \frac{4g_1\alpha_k}{\sum_l\psi_l^2}\psi_k^2 + 2\omega\alpha_k = 0, \tag{9}$$

得

$$\alpha_k^{(1)} = -\frac{g\psi_k^2}{\omega + 2g_1\psi_k^2}. \tag{10}$$

(10) 式 $\alpha_k^{(1)}$ 表示考虑电子-声子相互作用后 α 从 $\alpha^{(0)} = \frac{g}{\omega}$ 修正成为 $\alpha_k^{(1)}$.

2.2. 平移-压缩关联效应

我们下面再完成压缩变换操作.考虑到当电子-声子之间存在量子关联时，会进一步增强电子-声子之间耦合，导致系统基态能量进一步下降，我们将 U_0 表象变换到电子-声子关联表象 U'，即

$$U' = \mathrm{e}^{\sum_i\left[r\left(b_i^2 - b_i^{+2}\right) - \alpha_i^{(1)}\left(b_i^+ - b_i\right)c_i^+c_i\right]}, \tag{11}$$

注意到[16—20]，

$$U = U_\mathrm{D}\left(\alpha^{(1)}\right)U_\mathrm{S}(r) = U_\mathrm{S}(r)U_\mathrm{D}\left(\tilde{\alpha}^{(1)}\right), \tag{12}$$

$$\tilde{\alpha}^{(1)} = \alpha_i^{(1)}\cosh 2r + \alpha_i^{(1)*}\sinh 2r, \tag{13}$$

即

$$\begin{aligned} Ub_iU^{-1} &= \left(b_i - \alpha_i^{(1)}c_i^+c_i\right)\cosh 2r \\ &\quad + \left(b_i^+ - \alpha_i^{(1)*}c_i^+c_i\right)\sinh 2r \\ &= \tilde{b}_i - \left(\alpha_i^{(1)}\cosh 2r + \alpha_i^{(1)*}\sinh 2r\right)c_i^+c_i, \end{aligned} \tag{14}$$

其中

$$\tilde{b}_i = b_i\cosh 2r + b_i^+\sinh 2r. \tag{15}$$

我们知道声子压缩效应对电子-声子耦合系统的极化子态有重要影响，而压缩-平移之间关联效应，反过来对平移，压缩和极化子态产生影响，从 U 的关联表象得到的直接效应是声子通过压缩的平移效应及相关联的极化子效应导致重整化平移修正[17] $\alpha_i^{(1)} \to \tilde{\alpha}_i^{(1)} \frac{e^{2r}-1}{2r}$，

$$\tilde{\alpha}_i = (\alpha_i^{(1)}\cosh 2r + \alpha_i^{(1)*}\sinh 2r)\frac{e^{2r}-1}{2r} = -\frac{g\psi_i^2}{\omega + 2g_1\psi_i^2}\alpha_0\eta_0, \tag{16}$$

其中

$$\alpha_0 = \cosh 2r + \sinh 2r, \eta_0 = \frac{e^{2r}-1}{2r}, \tag{17}$$

此时

$$Ub_iU^{-1} = \tilde{b}_i - \tilde{\alpha}_i c_i^+ c_i. \tag{18}$$

考虑到 $\tilde{\alpha}_i^2 e^{-4r} \ll 1$，为了避免非线性方程过分复杂，作近似为

$$\begin{aligned} &{}_b\langle 0 \mid Uc_i^+ c_{i+1} U^{-1} \mid 0\rangle_b \\ &= {}_b\langle 0 \mid c_i^+ c_{i+1} e^{-[\tilde{\alpha}_i(\tilde{b}_i^+ - \tilde{b}_i) - \tilde{\alpha}_{i+1}(\tilde{b}_{i+1}^+ - \tilde{b}_{i+1})]} \mid 0\rangle_b \\ &= c_i^+ c_{i+1} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\alpha}_i^2 e^{-4r}} \\ &\approx c_i^+ c_{i+1}. \end{aligned} \tag{19}$$

计及重整化平移修正和电子-声子间量子关联效应，电子-声子耦合系统基态能量为

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= \langle \psi_1 \mid UHU^{-1} \mid \psi_1\rangle / \langle \psi_1 \mid \psi_1\rangle \\ &= \frac{1}{\sum_l \psi_l^2}\Big\{ -t\sum_i(\psi_i\psi_{i+1} + \psi_i\psi_{i-1}) \\ &\quad + \omega\sum_i(2\tilde{\alpha}_i^2\psi_i^2 + \sinh^2 2r) \\ &\quad + 2g\sum_i\tilde{\alpha}_i\psi_i^2 + 2g_1\sum_i(2\tilde{\alpha}_i^2\psi_i^2 + \sinh 2r\cosh 2r)\Big\}. \end{aligned} \tag{20}$$

2.3. 非线性变分方程

为了求得一维分子晶体电子-声子耦合系统的基态及了解量子涨落性质，我们首先要获得耦合系统的非线性方程. 为此将能量泛函数(20)式的 $\tilde{E}$ 对 ψ_i 求极值变分

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial \psi_k} = 0, \tag{21}$$

得

$$\begin{aligned} &t(\psi_{k+1} + \psi_{k-1}) - 2g\tilde{\alpha}_k\psi_k - 2(\omega + 2g_1)\tilde{\alpha}_k^2\psi_k \\ &- \psi_k\sum_i\psi_i[t(\psi_{i+1} + \psi_{i-1}) - 2g\tilde{\alpha}_i\psi_i \\ &- 2(\omega + 2g_1)\tilde{\alpha}_i^2\psi_i] = 0. \end{aligned} \tag{22}$$

进一步作连续近似

$$\psi_k \to \psi,\ \psi_{k+1} + \psi_{k-1} = \frac{d^2\psi}{dx^2} + 2\psi, \quad \sum_i \psi_i^2 = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^2(x)dx = 1, \tag{23}$$

得

$$\begin{aligned} &\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2A}{1 + A_1\psi^2}\psi^3 - \frac{A\tilde{A}_1}{(1 + A_1\psi^2)^2}\psi^5 \\ &- \psi\Big\{\int_{-\infty}^{+\infty}\psi\Big[\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2A}{1 + A_1\psi^2}\psi^3 \\ &- \frac{A\tilde{A}_1}{(1 + A_1\psi^2)^2}\psi^5\Big]dx\Big\} = 0, \end{aligned} \tag{24}$$

其中

$$A_1 = \frac{2g_1}{\omega},\ A = \frac{g^2(\alpha_0\eta_0)}{\omega t}, \quad \tilde{A}_1 = \frac{2(\omega + 2g_1)(\alpha_0\eta_0)}{\omega}. \tag{25}$$

令

$$A_0 = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi\Big[\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2A}{1 + A_1\psi^2}\psi^3 - \frac{A\tilde{A}_1}{(1 + A_1\psi^2)^2}\psi^5\Big]dx, \tag{26}$$

则(24)式简化成

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2A}{1 + A_1\psi^2}\psi^3 - \frac{A\tilde{A}_1}{(1 + A_1\psi^2)^2}\psi^5 = A_0\psi. \tag{27}$$

应用(24)式，考虑到电子-双声子相互作用修正，电子-声子关联和平移-压缩关联效应，在连续近似下，电子-声子耦合系统基态能为

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= \varepsilon_0(r) - t\int\psi\Big(\frac{d^2\psi}{dx^2} + 2\psi\Big)dx \\ &\quad + 2\omega\int\frac{g^2(\alpha_0\eta_0)^2}{\omega^2(1 + A_1\psi^2)^2}\psi^6 dx \\ &\quad - 2g\int\frac{g(\alpha_0\eta_0)}{\omega(1 + A_1\psi^2)}\psi^4 dx \\ &\quad + 4g_1\int\frac{g^2(\alpha_0\eta_0)^2}{\omega^2(1 + A_1\eta^2)^2}\psi^6 dx \\ &= \varepsilon_0(r) - 2t - A_0 t, \end{aligned} \tag{28}$$

其中

$$\varepsilon_0(r) = \omega\sinh^2 2r + 2g_1\sinh 2r\cosh 2r. \tag{29}$$

从结果(28)式可知，与文献[15]不同，考虑电子-声子量子关联和重整化平移修正效应，$\tilde{E}$ 有较大下降的重要修正. 并且我们的结果有一个新特点，(27)和(28)式构成自洽封闭方程，原则上可以自洽求解到

一定要求的精度.

3. 极化子-孤子系统基态孤子波解,系统基态与量子涨落特性

3.1. 极化子-孤子压缩态对系统量子涨落和极化子结合能的修正

为了研究电子-声子之间的关联效应对系统量子涨落的修正,我们首先研究声子坐标和动量之间的量子不确定性. 其中声子坐标与动量算符为

$$q_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(b_i^+ + b_i),\ p_i = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(b_i^+ - b_i),\tag{30}$$

作 U 变换

$$Uq_iU^{-1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\{(b_i^+ + b_i)\mathrm{e}^{2r} - 2\tilde{\alpha}_i c_i^+ c_i\},\tag{31}$$

$$Up_iU^{-1} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(b_i^+ - b_i)\mathrm{e}^{2r},\tag{32}$$

因而

$$\begin{aligned}\langle\phi \mid \Delta^2 q \mid \phi\rangle &= \langle\psi \mid q_i^2 \mid \psi\rangle - \langle\psi \mid q_i \mid \psi\rangle^2,\\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\mathrm{e}^{4r}[1 + 4\mathrm{e}^{-4r}(2\sum_i\tilde{\alpha}_i^2\psi_i^2\\ &\quad - \sum_i\tilde{\alpha}_i^2\psi_i^4)],\end{aligned}\tag{33}$$

$$\langle\phi \mid \Delta^2 p \mid \phi\rangle = \frac{\hbar\omega m}{2}\mathrm{e}^{-4r},\tag{34}$$

此时声子坐标和动量之间的量子测不准关系为

$$\langle\Delta^2 p\rangle\langle\Delta^2 q\rangle = \frac{\hbar^2}{4}[1 + 4\mathrm{e}^{-4r}(2\sum_i\tilde{\alpha}_i^2\psi_i^2 - \sum_i\tilde{\alpha}_i^2\psi_i^4)].\tag{35}$$

这时,电子密度量子涨落有较大修正

$$\langle\Delta^2 n\rangle = 2\sum_i\tilde{\alpha}_i^2\psi_i^2 - \sum_i\tilde{\alpha}_i^2\psi_i^4,\tag{36}$$

取连续近似,

$$\begin{aligned}\langle\Delta^2 p\rangle\langle\Delta^2 q\rangle = \frac{\hbar}{4}\{1 + 4\mathrm{e}^{-4r}[2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{g^2(\alpha_0\eta_0)^2}{\omega^2(1 + A_1\psi^2)^2}\psi^6\mathrm{d}x\\ - \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{g^2(\alpha_0\eta_0)^2}{\omega^2(1 + A_1\psi^2)^2}\psi^8\mathrm{d}x]\},\end{aligned}\tag{37}$$

而

$$\begin{aligned}\langle\Delta^2 n\rangle = 2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{g^2(\alpha_0\eta_0)^2}{\omega^2(1 + A_1\psi^2)^2}\psi^6\mathrm{d}x\\ - \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{g^2(\alpha_0\eta_0)^2}{\omega^2(1 + A_1\psi^2)^2}\psi^8\mathrm{d}x.\end{aligned}\tag{38}$$

($\hbar = 1$) 从上述结果可知,密度涨落(36)只影响声子坐标 $\langle\Delta^2 q\rangle$, 但对声子动量$\langle\Delta^2 p\rangle$不产生修正. 从(35)和(36)式还可以看到,计及电子-双声子作用及电子-声子关联,α 从 $\alpha_0 = \frac{g}{\omega}$修改成$\tilde{\alpha}$. 而电子密度涨落$\langle\Delta^2 n\rangle$ 由 ψ 的非线性方程(24)式的解来确定.

另一方面,极化子基态能量修正成为

$$\begin{aligned}\tilde{E}_{\mathrm{p}} &= -\sum_i\langle\psi_1 \mid (\tilde{\alpha}_i c_i^+ c_i)^2 \mid \psi_1\rangle\hbar\omega\\ &= -2\hbar\omega\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{g^2(\alpha_0\eta_0)^2}{\omega^2(1 + A_1\psi^2)^2}\psi^6\mathrm{d}x.\end{aligned}\tag{39}$$

从(39)式可以看到,对于极化子结合能来讲,由于电子-声子之间的量子关联效应,$\tilde{\alpha} > \alpha^{(1)}$,极化子结合能变得更负,极化子-孤子态更为稳定. 通过求解孤子波函数 ψ 即可获得系统的量子涨落和极化子结合能,详见图 3—5($t = 1.0$, $w = 1.0$, $g = 1.0$, $g_1 = -0.1$).

3.2. 电子-单声子相互作用效应对极化子-孤子基态效应

当 $g_1 = 0$ 情形,方程(27)退化成

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + 2A\psi^3 - 2(\alpha_0\eta_0)A\psi^5 = A_0^{(1)}\psi.\tag{40}$$

从(40)看到,只计及电子-单声子相互作用时,与文献[15] ψ^3 非线性不同,由于电子-声子关联效应,增加了 ψ^5 非线性,使得系统基态能量下降.

应用边界条件

$$\psi\mid_{x\to\pm\infty} = 0,\ \psi_x\mid_{x\to\pm\infty} = 0,\tag{41}$$

对方程(40)积分一次

$$\psi_x^2 = \psi^2(a_0 + a_1\psi^2 + a_2\psi^4),\tag{42}$$

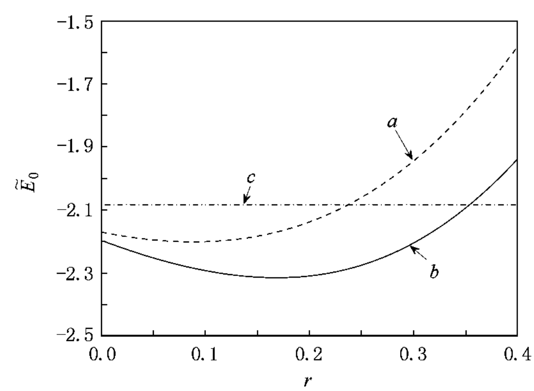

图 1　系统基态能量 $\tilde{E}_0$-r 曲线(曲线 a 代表单声子;b 代表双声子;c 为文献[15]的结果)

其中

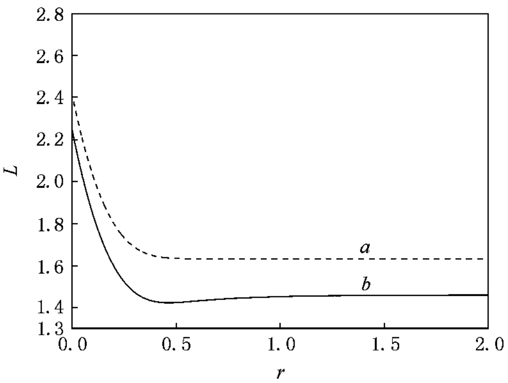

图 2 孤子局域 L-r 曲线(曲线 a 代表单声子;b 代表双声子)

$$a_0 = A_0, a_1 = -A, a_2 = \frac{2}{3}(\alpha_0\eta_0)A. \quad (43)$$

代替 Sech 型孤波,方程(42)的孤波解为

$$\psi(x) = \frac{1}{[(\alpha_1+\beta_1)+2\beta_1\sinh^2\sqrt{a_0}(x-x_0)]^{1/2}}, \quad (44)$$

此处

$$\alpha_1 = -\frac{a_1}{2a_0}, \beta_1 = \pm\frac{1}{2a_0}(a_1^2-4a_0a_2)^{1/2}. \quad (45)$$

由于 $0 \leqslant \sinh^2 y < +\infty$,因而稳定的孤子解存在条件为

$$\beta_1 > 0, \alpha_1+\beta_1 > 0. \quad (46)$$

从(43)式可知,$a_0 > 0$, $a_1 < 0$,因而 $\alpha_1 > 0$. β_1 取正根,$\alpha_1+\beta_1 > 1$. 应用 $\psi(x)$ 的归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\mathrm{d}x = 1,$$

求得

$$\alpha_1 = \frac{\eta_1}{\sqrt{a_0}\tanh\eta_1}, L_1 = \frac{1}{\sqrt{a_0}}. \quad (47)$$

进一步可以得出

$$\eta_1^2 = a_2 > 0, \quad (48)$$

以及孤子局域

$$L_1 = -\frac{2\eta_1}{a_1}\coth\eta_1. \quad (49)$$

从(47),(48),(49)式可以解出

$$A_0^{(1)} = a_0 = \frac{a_1^2}{4a_2}\tanh^2\sqrt{a_2}. \quad (50)$$

因而只考虑电子-单声子相互作用情形,一维分子晶体电子-声子耦合系统基态能量

$$\begin{aligned}\tilde{E}_0^{(1)} &= \varepsilon_0(r) - 2t - A_0^{(1)}t \\ &= \varepsilon_0(r) - 2t - \frac{a_1^2 t}{4a_2}\tanh^2\sqrt{a_2}.\end{aligned} \quad (51)$$

从(51)式可知,由于考虑电子-声子之间量子关联效应,对文献[15]的结果 $-\frac{1}{12}A_0^{(0)}t$ 有重大修正,即 $A_0^{(1)} \gg A_0^{(0)}$,系统基态能量减小. 在不计及声子压缩效应情形,这里考虑了电子-声子间的量子关联,电子态密度有了修正,本文结果(51)式的 $\tilde{E}_0$ 也比文献[15] 的电子-单声子相互作用系统基态能量要低,如图 1($t = 1.0$, $\omega = 1.0$, $g = 1.0$, $g_1 = -0.1$).

3.3. 电子-双声子相互作用效应对极化子-孤子基态效应

为了处理电子-双声子相互作用效应和更清楚看到高阶非线性效应图像,我们不采用通常的 Sech 型函数展开方法[15],而是借助于非线性展开方法和非线性方程求解方案. 为此,我们首先将非线性方程(27)表示成

$$\begin{aligned}&(1+A_1\psi^2)^2\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} - A_0\psi + 2(A-A_0A_1)\psi^3 \\ &- (A\tilde{A}_1 - 2AA_1 + A_0A_1^2)\psi^5 = 0.\end{aligned} \quad (52)$$

考虑到 $2g_1 < \omega$, $\psi^2 < 1$,以及 $A_1\psi^2 \ll 1$,因而 $(1+A_1\psi^2)^{-2} \approx 1 - 2A_1\psi^2 + 3A_1^2\psi^4$ 此时(52)式可以近似表示成

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} - A_0\psi + 2A\psi^3 - (2AA_1 + A\tilde{A}_1)\psi^5 \\ &+ 2A_1(AA_1 - A\tilde{A}_1 - 2A_0A_1^2)\psi^7 \\ &- 3A_1^2(2AA_1 - A\tilde{A}_1 - A_0A_1^2)\psi^9 = 0.\end{aligned} \quad (53)$$

显然,考虑电子-双声子相互作用,将贡献 ψ^5, ψ^7, ψ^9,…次非线性.

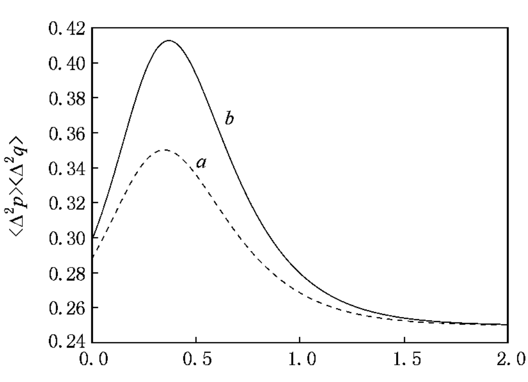

图 3 量子涨落 $\langle\Delta^2p\rangle\langle\Delta^2q\rangle$-$r$ 曲线.(曲线 a 代表单声子,曲线 b 代表双声子)

3.3.1. 计及电子-双声子相互作用一阶效应的 ψ^5 次非线性解

为了清楚认识电子-双声子相互作用及电子-声

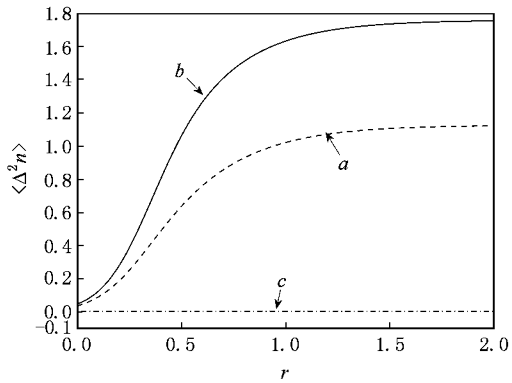

图 4　电子密度涨落$\langle\Delta^2 n\rangle$-r 曲线（曲线 a 代表单声子；曲线 b 代表双声子；曲线 c 为文献[15]的结果）

子量子关联的影响，我们首先考虑非线性方程(52)的孤子解结果，此时 $\psi(x)$ 考虑成

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} - A_0\psi + 2A\psi^3 - (2AA_1 + A\tilde{A}_1)\psi^5 = 0. \tag{54}$$

应用边界条件(41)式，方程(54)的一次积分得

$$\psi_x^2 = \psi^2(b_0 + b_1\psi^2 + b_2\psi^4), \tag{55}$$

其中

$$b_0 = A_0,\ b_1 = -A,\ b_2 = \frac{1}{3}(A\tilde{A}_1 + 2AA_1). \tag{56}$$

由于考虑电子-双声子相互作用一阶效应，ψ^5 非线性项，除原来 $A\tilde{A}_1$ 项外还增加了 $2AA_1$ 项. 当 $\beta_2^2 = \frac{1}{4b_0^2}(b_1^2 - 4b_0b_2) > 0$ 时，存在孤波解，而当 $\beta_2^2 = \frac{1}{4b_0^2}(b_1^2 - 4b_0b_2) < 0$ 时，不存在孤波解.

(a) 当 $b_1^2 - 4b_0b_2 > 0$ 情形

当 $g_1 < 0$ 时，条件(a)充分成立. 而当 $g_1 > 0$ 时，仅当压缩效应较小，即 $\alpha_0\eta_0$ 较小时才会满足. 在条件(a)成立下，方程(55)具有孤波解，存在稳定的极化子-孤子态. 孤子波为

$$\psi(x) = \frac{1}{[(\alpha_2 + \beta_2) + 2\beta_2\sinh^2\sqrt{b_0}(x - x_0)]^{1/2}}, \tag{57}$$

其中

$$\alpha_2 = -\frac{b_1}{2b_0},\ \beta_2 = \frac{1}{2b_0}(b_1^2 - 4b_0b_2)^{1/2}. \tag{58}$$

应用归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\mathrm{d}x = 1,$$

求得

$$\alpha_2 = \frac{\eta_2}{\sqrt{b_0}\tanh\eta_2},\ L_2 = \frac{1}{\sqrt{b_0}}. \tag{59}$$

进一步类似电子-单声子相互作用求解方法，得到

$$L_2 = \frac{2\eta_2}{b_1}\coth\eta_2,\ \eta_2^2 = b_2 > 0, \tag{60}$$

从而求得

$$b_0 = A_0^{(2)} = \frac{b_1^2}{4b_2}\tanh^2\sqrt{b_2}, \tag{61}$$

因而

$$\begin{aligned}\tilde{E}_0^{(2)} &= \varepsilon_0(r) - 2t - A_0^{(2)}t \\ &= \varepsilon_0(r) - 2t - \frac{b_1^2 t}{4b_2}\tanh^2\sqrt{b_2}.\end{aligned} \tag{62}$$

我们将电子-双声子相互作用效应结果作一分析：1）由于 $b_1 = a_1 = -A$ 而 $b_2 = \frac{1}{3}(A\tilde{A}_1 + 2AA_1) = a_2 + \frac{4g_1}{3\omega}(1 + \alpha_0\eta_0)A$，当 $g_1 > 0$，$b_2 > a_2$ 时，计及电子-双声子相互作用导致极化子-孤子系统基态能量比仅存在电子-单声子相互作用时还要高，破坏极化子-孤子态的稳定性. 而当 $g_1 < 0$，$b_2 < a_2$ 时，电子-双声子相互作用使极化子-孤子系统基态能量比只存在电子-单声子相互作用情况更负，如图 1. 2）孤子局域 $L_2 < L_1$ 如图 2. 虽然其走向与文献[15]相同，但计入电子-声子量子关联及重整化平移参量修正，电子-双声子相互作用起着本质上的重要修正. 3）因为电子-单声子、双声子对应的孤波解 $\psi(x)$ 及非线性效应修正在本质上不同，我们可以得到一个重要实事：1）电子-声子关联及重整化平移效应导致电子密度涨落$\langle\Delta^2 n\rangle$随 r 增加而递增，且比无声子压缩效应情形要大（文献[15]情形），特别是，当 $g_1 < 0$ 时电子-双声子的密度涨落$\langle\Delta^2 n\rangle$比电子-单声子的要高，如图 4. 2）声子动量坐标的不确定量$\langle\Delta^2 p\rangle\langle\Delta^2 q\rangle$随 r 增加，先递增至极大值后减小. 当 $g_1 < 0$ 时，电子-双声子效应的量子涨落$\langle\Delta^2 p\rangle\langle\Delta^2 q\rangle$比单声子效应明显增大，如图 3. 3）从图 5 可以到，极化子结合能随着 r 增大而变小，电子-双声子效应使得极化子结合能比单声子的要更负，孤子局域更小（$L_2 < L_1$），所以孤子局域更加稳定.

(b) 当 $b_1^2 - 4b_0b_2 < 0$

当 $g_1 > 0$ 时，随着压缩增加，$\alpha_0\eta_0$ 继续增加，导致 $b_1^2 - 4b_0b_2 < 0$. 随着孤子局域 $L_2 > L_1$，系统的极化子-孤子态消失，方程(55)没有孤子解，只有如下

的非孤子波解：

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{\tilde{\alpha}}\,[1+\operatorname{sech}\tilde{\eta}\sinh 2\sqrt{b_0}(x-x_0)]^{1/2}},\tag{63}$$

其中 $\operatorname{sech}\tilde{\eta}=\frac{\tilde{\beta}}{\tilde{\alpha}}$，波函数对 x_0 不是对称波函数，这是随着压缩系数 r 增加会出现的新特点.同样应用波函数 $\psi(x)$ 的归一化条件可求得

$$\tilde{\alpha}=\frac{L}{2}\frac{\tilde{\eta}_{+}+\tilde{\eta}_{-}}{\sqrt{1+\operatorname{sech}^2\tilde{\eta}}},\ L=-\frac{1}{\sqrt{b_0}},\tag{64}$$

其中 $\tilde{\eta}_{\pm}$ 与孤子局域 L 为

$$\tanh\frac{\eta_{\pm}}{2}=\frac{1\pm\operatorname{sech}\tilde{\eta}}{\sqrt{1+\operatorname{sech}^2\tilde{\eta}}},$$

$$L=-\frac{\tilde{\eta}_{+}+\tilde{\eta}_{-}}{b_1\sqrt{1+\operatorname{sech}^2\tilde{\eta}}}.\tag{65}$$

这样一来，$(\tilde{\eta}_{+}+\tilde{\eta}_{-})$ 可以解得

$$\frac{\tanh^2\tilde{\eta}}{4(1+\operatorname{sech}^2\tilde{\eta})}(\tilde{\eta}_{+}+\tilde{\eta}_{-})^2=b_2,\tag{66}$$

从而

$$b_0=A_0=\frac{b_1^2}{4b_2}\tanh^2\tilde{\eta}.\tag{67}$$

相应地，电子-声子相互作用系统基态能量可自洽决定，

$$\tilde{E}=\varepsilon_0(r)-2t-\frac{b_1^2t}{4b_2}(1+\operatorname{sech}^2\tilde{\eta}).\tag{68}$$

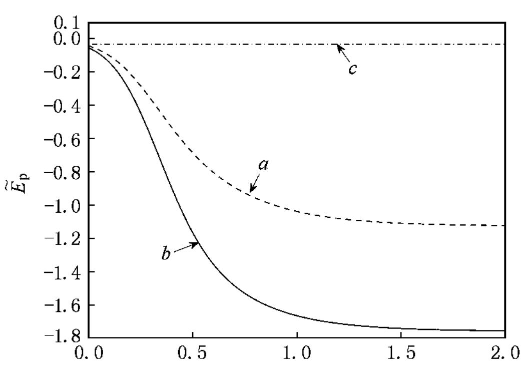

图 5 极化子结合能 $\tilde{E}_p$-r 曲线(曲线 a 代表单声子，曲线 b 代表双声子，曲线 c 为文献[15]的结果)

4. 电子-双声子耦合作用的二阶修正

我们考虑电子-双声子相互作用的二阶效应，此时我们需要考虑到 $a_3\psi^7$ 项，即

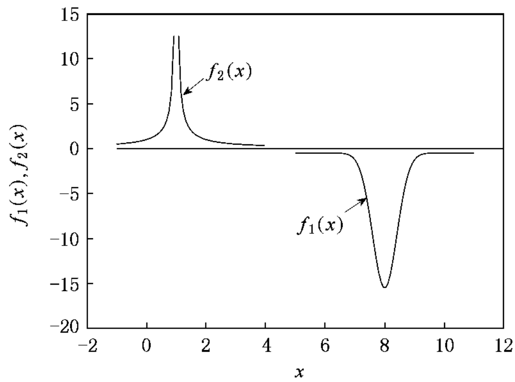

图 6 孤波解 $f_1(x)$ 与 $f_2(x)$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-A_0\psi+2A\psi^3-(2AA_1+A\tilde{A}_1)\psi^5-2A_1(A\tilde{A}_1-AA_1+2A_0A_1^2)\psi^7=0.\tag{69}$$

我们考虑 Bell 型孤子解边界条件(41)，当(69)式积分一次得

$$\psi_x^2=\psi^2(c_0+c_1\psi^2+c_2\psi^4+c_3\psi^6),\tag{70}$$

其中

$$c_0=A_0,\ c_1=-A,$$

$$c_2=-\frac{1}{3}(2AA_1+A\tilde{A}_1),$$

$$c_3=\frac{1}{4}A_1(AA_1-A\tilde{A}_1-2A_0A_1^2).\tag{71}$$

引入变换

$$f=\psi^2,\tag{72}$$

因而得到关于 f 的非线性方程

$$\frac{1}{2}(f_x)^2=2f^2(c_0+c_1f+c_2f^2+c_3f^3).\tag{73}$$

我们设法对方程(73)求积分解，将(73)式改写成

$$(f_x)^2=\Gamma f^2(f+U_{\pm})^2(f+V),\tag{74}$$

其中

$$\Gamma=4c_3,$$

$$U_{\pm}=\frac{1}{3}\left\{\frac{c_2}{c_3}\pm\sqrt{\left(\frac{c_2}{c_3}\right)^2-\frac{3c_1}{c_3}}\right\},$$

$$V=\frac{c_2}{c_3}-2U_{\pm}.\tag{75}$$

再令

$$F^2(x)=f(x)+V,\tag{76}$$

从(74)式有

$$\frac{dx}{dF}=\kappa\left[\frac{1}{F^2-V}-\frac{1}{F^2+(U_{\pm}-V)}\right],$$

$$\kappa = 2/\sqrt{\Gamma}U_{\pm}. \tag{77}$$

考虑到 $V>0$ 时，f 满足边界条件

$$f \to 0, \ |x| \to \infty, \tag{78}$$

易知，方程(74)有下列超椭圆积分解：

A)当 $|F(x)|<\sqrt{V}$时，

$$F_1(x) = -\sqrt{V}\tanh\left\{\frac{\sqrt{V}}{\kappa}(x-x_0)+\frac{1}{2}G(F(x))\right\}, \tag{79}$$

其中

$$G(F(x)) = \frac{2\sqrt{V}}{\sqrt{U_{\pm}-V}}\tan^{-1}\frac{F(x)}{\sqrt{U_{\pm}-V}}, \tag{80}$$

由此

$$f_1(x) = -V\mathrm{sech}^2\left[\frac{\sqrt{V}}{\kappa}(x-x_0)+\frac{1}{2}G(F_1(x))\right]. \tag{81}$$

B)当$|F(x)|>\sqrt{V}$时，

$$F_2(x) = -\sqrt{V}\coth\left\{\frac{\sqrt{V}}{\kappa}(x-x_0)+\frac{1}{2}G(F(x))\right\}, \tag{82}$$

由此

$$f_2(x) = V\mathrm{csch}^2\left[\frac{\sqrt{V}}{\kappa}(x-x_0)+\frac{1}{2}G(F_2(x))\right]. \tag{83}$$

因为 $F_1(x)$ 为非奇异函数，因此 $f_1(x)$ 是我们希望的积分形式表示的孤波解，如图 6. 另一方面，$F_2(x)$ 为奇异函数，$f_2(x)$ 为带有奇异性的爆裂型孤波解，如图 6. 这类孤波解在 KdV 方程亦有存在.

从非奇异解结果(79)—(81)式可以看到，若 $c_1 = 0$，有 $U=0$，$F_1(x)$ 因为无实数值使孤波解不稳定，因而 $A(r)\neq 0$. 另一方面，若 $c_3<0$，κ 为虚数，则 $f_1(x)$ 为不稳定孤波解，因而稳定的非奇异解 $f_1(x)$ 要求 $c_3>0$，这时要求 $g_1<0$. 最后我们可以看到

当 $F(x)>\sqrt{U_{\pm}-V}$ 时，可以近似表示成

$$f_1(x) = -V\mathrm{sech}^2\left[\frac{\sqrt{V}}{\kappa}(x-x_0) + \frac{\pi\sqrt{V}}{2\sqrt{U_{\pm}-V}} - \frac{\sqrt{V}}{F_1(x)}\right], \tag{84}$$

$$F_1(x) = -\sqrt{V}\tanh\left[\frac{\sqrt{V}}{\kappa}(x-x_0) + \frac{\pi\sqrt{V}}{2\sqrt{U_{\pm}-V}} - \frac{\sqrt{V}}{F_1(x)}\right], \tag{85}$$

特别是当 $F(x)\gg\sqrt{U_{\pm}-V}$ 情形，

$$f_1(x) = -V\mathrm{sech}^2\left[\frac{\sqrt{V}}{\kappa}(x-x_0)+\frac{\pi\sqrt{V}}{2\sqrt{U_{\pm}-V}}\right], \tag{86}$$

说明这正是标准孤子解形式.

5. 结　论

在本文中，我们应用压缩-相干态展开方法，基于一维分子晶体系统的 Holstein 模型，计及电子-双声子相互作用，研究电子-声子量子关联和重整化平移修正效应对极化子-孤子系统基态，量子涨落，极化子结合能的制约和影响. 与通常的变分求解方法[15,16]不同，我们采用了非线性项展开和求解非线性方程方法. 通过研究分析一维分子晶体的极化子-孤子压缩态的基态性质，我们有以下的新认识：

(A)电子-双声子相互作用，电子-声子量子关联和压缩-平移关联重整化效应，重要地制约极化子-孤子系统基态性质和行为：

(1)电子-单声子相互作用情形

代替 ψ^3 次非线性方程，演变成 ψ^5 非线性方程，而基态能量由 $\tilde{E}_0 = -2t - A_0^{(0)}t$ 修改成

$$\tilde{E}_0 = \varepsilon_0(r) - 2t - A_0^{(1)}t.$$

由于电子-声子量子关联及平移参量重整化修正，$A_0^{(1)}\gg A_0^{(0)}$，因而系统基态能量有更负的修正.

(2)电子-双声子互作用效应

由于作近似量估考虑 $t\approx 1.0$，$\omega\approx 0.8$，$g\approx 1.0$，$g_1\approx -0.1$，电子-双声子作用近似可以考虑一阶修正.

1)当 $g_1<0$，由于 $\beta_2^2 = \frac{1}{4b_0^2}(b_1^2-4b_0b_2)>0$ 充分成立，方程(53)有孤波解，极化子-孤子系统稳定存在. 因 $b_1 = a_1$而

$$b_2 = a_2 + \frac{4g_1}{3\omega}(1+\alpha_0\eta_0)A.$$

当 $g_1<0$ 时，由于电子-声子量子关联和平移参量重整化修正使 $b_2\ll a_2$，$\frac{b_1^2 t}{4b_2}\gg\frac{a_2^2 t}{4a_2}$虽然$|g_1|<g$ 或者 $|g_1|\ll g$，但电子-双声子相互作用效应使系统基态能量比电子-单声子作用情况有更负的修正，即 $|\tilde{E}_0^{(2)}|\gg|\tilde{E}_0^{(1)}|$，极化子-孤子态系统更稳定.

2)当 $g_1>0$ 情形，声子压缩参量 r 较小，($\alpha_0\eta_0$ 较小)且满足 $b_1^2-4b_0b_2>0$ 时，孤波解(57)仍然存

在，系统极化子-孤子态仍然存在.但随着 r 增加，电子-双声子作用效应破坏极化子-孤子态，使 $b_1^2 - 4b_0b_2 < 0$，系统的极化子-孤子态消失，非线性方程(54)没有孤波解，而是演变成非孤子解(63)，并且，此时的电子-双声子耦合系统的基态能量高于电子-单声子互作用状态的基态 $\tilde{E}_0$.

3) 与文献[15]的认识不同，在那里认为，当 $A_0^{(0)} = \frac{g^2}{\omega t} < 1$ 时不需要考虑电子-双声子互作用修正，只有当 $A_0^{(0)} > 1$ 时才考虑.从 1)，2) 可知，当考虑电子-声子量子关联和重整化平移修正效应，电子-双声子耦合作用就起着制约着系统的基态特性的重要作用，对此应该重新认识(事实上，一般一维分子晶体材料，紧束缚近似情形 $t \gg g$，$\omega \sim g$ (或 $\omega > g$) 因而 $A_0^{(0)} < 1$).

4) 由于计及电子-声子关联效应，与文献[15]不同，方程(27)和(28)构成自洽封闭方程.当计及电子-双声子相互作用二阶效应，非线性方程存在奇异解和非奇异解，而非奇异解要求 $g_1 < 0$，系统的极化子-孤子态是稳定的.

(B)在通常的极化子理论中，$\alpha(0)$ 只与 (ω, g) 有关，计及电子-双声子作用，平移重整化修正，$\alpha_{(0)} \to \tilde{\alpha}(\psi)$ 和波函数 ψ 的重要修正，我们得到重要结果:电子密度涨落 $\langle \Delta^2 n \rangle$ 和声子坐标动量不确定量 $\langle \Delta^2 p \rangle \langle \Delta^2 q \rangle$ 比无声子压缩时有较大增加，极化子结合能变得更负 $|\tilde{E}_p| > |E_p^0|$.特别是，当 $g_1 < 0$ 时，双声子效应导致的量子涨落 $\langle \Delta^2 n \rangle$ 和 $\langle \Delta^2 p \rangle \langle \Delta^2 q \rangle$ 值比单声子效应情形有明显增大，而相应的极化子结合能 $\tilde{E}_p$ 比单声子情形更负.此外当计及电子-声子量子关联和重整化平移修正时，电子-双声子相互作用使得 α 增加，且 $L_2 < L_1$，孤子局域更稳定.

[1] Holstein T 1959 *Annals of Physics* **8** 325

[2] Roncaglia R，Tsironis G P 1998 *Physica* D **113** 318

[3] Wellein G，Fehake H 1997 *Phys. Rev.* B **56** 4513

[4] Henning D 1998 *Physica* D **113** 196

[5] Tekic J，Ivic Z，Zekovic S 1999 *Phys. Rev.* E **60** 821

[6] Wang K L，Chen Q H，Wan S L 1994 *Phys. Lett.* A **185** 216

[7] Chen Q H，Fang M H，Zhang Q R 1996 *Phys. Rev.* B **53** 11296

[8] Kornilovitch P E 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 1551

[9] Wan S L，Wang K L 2000 *Chin. Phys. Lett.* **17** 129

[10] Ren Q B，Chen Q H 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 2914

[11] Wang K L，Chen Q H，Wan S L 1994 *Acta Phys. Sin.* **43** 433(in Chinese)[汪克林、陈庆虎、完绍龙 1994 物理学报 **43** 433]

[12] Ivanov V A，Zhuralev M Y，Muragama Y，Nakajima S 1996 *J. E. T. P Lett.* **64** 148

[13] Wang K L，Feng M，Wu J H 1995 *Phys. Rev.* A **52** 1419

[14] Feng M，Wang K L 1995 *Phys. Lett.* A **197** 135

[15] Ren X Z，Liao X，Liu T，Wang K L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2865 (in Chinese)[任学藻、廖 旭、刘 涛、汪克林 2006 物理学报 **55** 2865]

[16] Pang X F 2001 *J. Phys. and Chem. Solids.* **62** 491

[17] Majernfkova M，Koval J 1998 *Physica* **37** 23

[18] Zheng H 1988 *Phys. Rev.* B **37** 7419

[19] Zheng H 1990 *Phys. Rev.* B **41** 4723

[20] Feinberg D，Ciuchi S，de Pasquale F 1990 *Int. J. Mod. Phys.* B**4** 1317

Polaron-soliton squeezed states ，ground state and quantum fluctuation in one-dimensional molecular crystals*

Yu Chao-Fan[1)†] Liang Guo-Dong[2)] Cao Xi-Jin[3)]

1)（Department of Physics，Guangdong Education College ，Guangzhou 510303，China）

2)（Department of Optoelectronic Engineering，Jinan University，Guangzhou 510632，China）

3)（Department of Physics，South China Normal University，Guangzhou 510006，China）

（Received 19 November 2007；revised manuscript received 21 December 2007）

Abstract

On the basis of the Hamiltonian of the Holstein one-dimensional molecular crystals，using the squeezed-coherent state expansion method，the influence of the electron-two phonon interaction on the properties of the ground state and quantum fluctuation for the polaron-soliton system were investigated by including the quantum correlation between the polarons and the squeezed phonons，and the renormalized displacement correction. The nonlinear Schröinger equation for one-dimensional polaron-soliton state has been found in a closed form. By the use of the nonlinear expansion，we have given the analytical solution of the corresponding nonlinear equation so as to obtain the ground state energy，the quantum fluctuation and the polaron energy of the polaron-soliton system in analytical form. We have found that，when the electron-two phonon coupling strength $g_1 < 0$，the nonlinear Schröinger equation has the solitary wave solution. As a result，the ground state energy and the polaron energy are more negative than the electron-single phonon coupling. At the same time，the stability of the polaron-soliton state is enhanced and the soliton localization is decreased . Particularly，when $g_1 < 0$，the quantum fluctuation $\langle \Delta^2 n \rangle$ and $\langle \Delta^2 p \rangle \langle \Delta^2 q \rangle$ for the two-phonon effect are larger than the one-phonon one and the polaron energy for the two-phonons effect is more negative compared with the one-phonon one.

Keywords：squeezed-coherent state expansion，polaron-soliton state and quantum fluctuation，electron-two phonon interaction，nonlinear Schröinger equation

PACC：6320K，7138，7215N

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China（Grant No. 10574163）.

† E-mail：xijincao.scnu@yahoo.com.cn