СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р17 - 11996

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай

ПОЛЯРОН В ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХОЛСТЕЙНА В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

1978

P17 - 11996

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай

ПОЛЯРОН В ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХОЛСТЕЙНА В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Федянин В.К., Юшанхай В.Ю. P17 - 11996

Полярон в одномерной модели Холстейна в адиабатическом приближении

Обсуждается возможность автолокализации электрона при учете эффектов электрон-фононного взаимодействия для модели Холстейна (полярон большого радиуса).

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

P17 - 11996

Fedyanin V.K., Yushankhai V.Yu.

A Polaron in the One-Dimensional Holstein Model in the Adiabatic Approximation

The possibility of electron self-trapping taking into account effects of electron-phonon interaction for Holstein's model (the case of a large polaron) is discussed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

I. В работе [1] Холстейном предложена модель, на основе которой был выведен в дальнейшем ряд особенностей, характеризующих движение по кристаллу избыточного электрона, сильно взаимодействующего с колебаниями решетки кристалла (полярона) (см., например, [2]). В предыдущей работе авторов [3] на основе этой модели была развита с использованием ряда аппроксимаций формальная схема получения нелинейного уравнения для поляронной волновой функции. В настоящем исследовании мы поясним физическую сторону этих аппроксимаций и используем результаты, полученные в [3], для нахождения и обсуждения некоторых физических характеристик солитона. Напомним, что различие между гамильтонианом Пекара-Фрелиха, являющегося основой для многочисленных исследований в теории полярона [2], и гамильтонианом Холстейна состоит в том, что фрелиховский гамильтониан учитывает дальнодействующий характер взаимодействия электрона с поляризационным полем вызванной им деформации решетки полярного кристалла, в то время как в холстейновской модели взаимодействие электрона с решеткой имеет короткодействующий характер . (Формально же оба гамильтониана записываются совершенно одинаково [3]).

2. Итак, будем исходить из гамильтониана

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{int} ,$$

$$\mathcal{H}_L = -\frac{\hbar^2}{2M}\sum_\ell \frac{\partial^2}{\partial u_\ell^2} + \frac{1}{2}M\omega_0^2\sum_\ell u_\ell^2 + \frac{1}{2}M\omega_1^2\sum_\ell u_\ell u_{\ell+1} , \tag{I}$$

$$\mathcal{H}_e = (\varepsilon+W)\sum_l a_l^+ a_l - J\sum_l \left(a_{l+1}^+ a_l + a_l^+ a_{l+1}\right),$$

$$\mathcal{H}_{int} = V\sum_l a_l^+ a_l \cdot u_l .$$

Положим $\varepsilon+W=0$ (т.е. фиксируем начало отсчета энергии) и перейдем к нормальным координатам ξ_q ($q=\frac{2\pi n}{N}$, $n=0,1,\ldots,N-1$), описывающим движение частиц решетки в виде стоячих волн:

$$u_l = \left(\frac{2}{N}\right)^{1/2}\sum_q \xi_q \sin\left(ql+\frac{\pi}{4}\right),\quad \xi_q = \left(\frac{2}{N}\right)^{1/2}\sum_l u_l \sin\left(ql+\frac{\pi}{4}\right). \tag{2}$$

В адиабатическом приближении можно пренебречь в $\mathcal{H}_L$ кинетической энергией колебаний решетки:

$$\mathcal{H}\to\mathcal{H}^{ad.}(\{\xi_q\}) = \sum_q \frac{M\omega_q^2}{2}\xi_q^2 - J\sum_l\left(a_{l+1}^+ a_l + a_l^+ a_{l+1}\right) +$$
$$+V\left(2/N\right)^{1/2}\sum_l a_l^+ a_l \sum_q \xi_q \sin\left(ql+\frac{\pi}{4}\right);\ \omega_q^2=\omega_0^2+\omega_1^2\cos qa . \tag{3}$$

Волновая функция электронного возбуждения в этом приближении , записанная в виде

$$|\psi(t)\rangle^{ad.} = \sum_n \alpha_n(t) a_n^+|0\rangle,\quad \sum_n|\alpha_n(t)|^2 = 1 , \tag{4}$$

удовлетворяет уравнению

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle^{ad.} = \mathcal{H}^{ad.}(\{\xi_q\})\,|\psi(t)\rangle^{ad.} \tag{5}$$

Тогда энергия системы "электрон плюс решетка" определяется набором величин $\{\xi_q\}$ и равна

$$E(\{\xi_q\}) = {}^{ad.}\langle\psi(t)|\mathcal{H}^{ad}(\{\xi_q\})|\psi(t)\rangle^{ad.} \tag{6}$$

Минимум функции $E(\{\xi_q\})$ достигается при

$$\xi_q = \tilde{\xi}_q = -\frac{V}{M\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right)^{1/2}\sum_m |\alpha_m(t)|^2 \sin\left(qm+\frac{\pi}{4}\right) . \tag{7}$$

Именно на такую величину смещается равновесное положение каждого q -го осциллятора за счет присутствия избыточного электрона.

Гамильтониан системы в точке минимума имеет вид

$$\mathcal{H}^{ad.}(\{\tilde{\xi}_q\}) = \mathcal{E} + \mathcal{H}_e^{ad.}, \tag{8}$$

где $\mathcal{E} = \sum_q \frac{V^2}{2M\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right)\left[\sum_m |\alpha_m(t)|^2 \sin\left(qm+\frac{\pi}{4}\right)\right]$ - упругая энергия равновесной деформации решетки, а

$$\mathcal{H}_e^{ad.} = -J\sum_l\left(a_{l+1}^+ a_l + a_l^+ a_{l+1}\right) - \sum_l a_l^+ a_l \sum_q \frac{V^2}{M\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right)\sum_m |\alpha_m(t)|^2 \sin\left(qm+\frac{\pi}{4}\right)\sin\left(ql+\frac{\pi}{4}\right) -$$

-гамильтониан электрона в самосогласнованном с ним поле равновесной деформации. Действительно, адиабатическое приближение означает, что электрон совершает быстрые движения в медленном инерционном поле деформации решетки. Количественно это может быть выражено следующим образом: время $\tau_1 \sim \hbar/J$ между двумя трансляционными скачками электрона много меньше характерного времени $\tau_2 \gtrsim \omega_0^{-1}$ релаксации деформации решетки, связанной с его движением.

$$\tau_1 \ll \tau_2 \quad \text{или} \quad \hbar\omega_0 \ll J, \tag{9}$$

что осуществимо при достаточно широкой электронной зоне J .

Самосогласованные решения для электронных амплитуд $\alpha_f(t)$ найдем из уравнения

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle^{ad.} = \mathcal{H}^{ad.}(\{\tilde{\xi}_q\})\,|\psi(t)\rangle^{ad.}, \tag{10}$$

которое перепишется следующим образом:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\alpha_f(t) = -J\left(\alpha_{f-1}(t)+\alpha_{f+1}(t)\right) + \Big[\mathcal{E} - \sum_q \frac{V}{M\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right)\times$$
$$\times\sum_m |\alpha_m(t)|^2 \sin\left(qm+\frac{\pi}{4}\right)\sin\left(qf+\frac{\pi}{4}\right)\Big]\alpha_f(t) . \tag{11}$$

Так же, как и в /I/, будем предполагать дисперсию оптических колебаний слабой, т.е. $\omega_1^2 \ll \omega_0^2$, и далее ограничимся членами с точностью до I-го порядка отношения ω_1^2/ω_c^2. Тогда обычным образом /3/ в "континуальном" пределе $\alpha_f(t)\to\alpha(x,t)$ из (II) получим нелинейное уравнение

$$i\hbar\frac{\partial\alpha(x,t)}{\partial t} = (\mathcal{E}-2\mathcal{J})\alpha(x,t) - \mathcal{J}a^2\alpha_{xx}(x,t) - \frac{V^2}{M\omega_c^2}\left(1-\frac{\omega_1^2}{\omega_c^2}\right)|\alpha(x,t)|^2\alpha(x,t) \qquad (\text{I}2)$$

(a-постоянная решетки), частное солитонное решение которого имеет вид

$$\alpha(x,t) = \sqrt{\frac{a}{2L}}\;\frac{e^{i(kx-\omega t+\phi_0)}}{ch\,\frac{1}{L}(x-v t+x_0)} \qquad (\text{I}3)$$

и зависит от четырех параметров: ϕ_0, x_0, L, v. Начальные фазу ϕ_0 и центр масс x_0 фиксируем, положив их равными нулю. Величины k и ω выражаются через ширину L и скорость солитона v следующим образом:

$$k = v\frac{\hbar}{2a^2\mathcal{J}}\;;\quad \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2a^2\mathcal{J}}\cdot\frac{v^2}{2} + \mathcal{E} - 2\mathcal{J} - \mathcal{J}\frac{a^2}{L^2}\,. \qquad (\text{I}4)$$

Условие нормировки $\int\frac{dx}{a}|\alpha(x,t)|^2 = 1$ дает

$$L = L_s = a\,\frac{4\mathcal{J}}{\frac{V^2}{M\omega_c^2}\left(1-\frac{\omega_1^2}{\omega_c^2}\right)}\,. \qquad (\text{I}5)$$

Энергия системы в адиабатическом приближении в пренебрежении гармоническими колебаниями узлов решетки относительно смещенных положений равновесия $E(\{\tilde\xi_q\}) = {}^{ad}\langle\psi(t)|\mathcal{H}^{ad}(\{\tilde\xi_q\})|\psi(t)\rangle^{ad}$ в "континуальном" пределе имеет вид

$$E(\{\tilde\xi_q\}) = \mathcal{E} + \int\frac{dx}{a}\Big[-2\mathcal{J}|\alpha(x,t)|^2 + \mathcal{J}a^2|\alpha_x(x,t)|^2 - \frac{V^2}{M\omega_c^2}\left(1-\frac{\omega_1^2}{\omega_c^2}\right)|\alpha(x,t)|^4\Big]\;;\quad \mathcal{E} = \frac{V^2}{M\omega_c^2}\int\frac{dx}{a}|\alpha(x,t)|^2\,. \qquad (\text{I}6)$$

Интегрируя последнее выражение с учетом (I3), получим

$$E(\{\tilde\xi_q\}) = \frac{\hbar^2}{2a^2\mathcal{J}}\cdot\frac{v^2}{2} + \mathcal{E} - 2\mathcal{J} + \frac{\mathcal{J}a^2}{3}\cdot\frac{1}{L_s^2} - \frac{V^2}{3M\omega_c^2}\left(1-\frac{\omega_1^2}{\omega_c^2}\right)\frac{a}{L_s}\;; \qquad (\text{I}7)$$

$$\mathcal{E} = \frac{V^2}{6M\omega_c^2}\cdot\frac{a}{L_s}\,.$$

Проинтерпретируем отдельные слагаемые в (I7): $\frac{\hbar^2}{2a^2\mathcal{J}}\cdot\frac{v^2}{2}$ – кинетическая энергия солитона, так что

$$m = \frac{\hbar^2}{2a^2\mathcal{J}} \qquad (\text{I}8)$$

есть масса солитонного возбуждения, совпадающая в данном приближении с массой зонного электрона (см. /3/), $\mathcal{E}$ – энергия равновесной упругой деформации, движущейся вместе с электроном со скоростью v; $-2\mathcal{J}$ — сдвиг энергии электрона за счет трансляционных скачков; $a^2\mathcal{J}/3L_s^2 = \hbar^2/6mL_s^2$ – энергия квантовых осцилляций электрона в яме с размером L_s; $-\frac{V^2}{3M\omega_c^2}\left(1-\frac{\omega_1^2}{\omega_c^2}\right)\cdot\frac{a}{L_s}$ – энергия электрона в поле равновесной деформации решетки. Суммируя слагаемые в (I7) с учетом (I5), получим

$$E(\{\tilde\xi_q\}) = m\frac{v^2}{2} - 2\mathcal{J} - \frac{1}{48\mathcal{J}}\left(\frac{V^2}{M\omega_c^2}\right)^2\left(1-4\frac{\omega_1^2}{\omega_c^2}\right). \qquad (\text{I}9)$$

Энергия солитона (электрона, связанного с деформацией решетки в области с размером L_s) ниже энергии зонного электрона на величину

$$E_{связи} = \frac{1}{48\mathcal{J}}\left(\frac{V^2}{M\omega_c^2}\right)^2\left(1-4\frac{\omega_1^2}{\omega_c^2}\right), \qquad (20)$$

что и обусловливает локализацию электрона. Развитый подход справедлив, если

$$L_s \gg a \quad \text{или} \quad 2\mathcal{J} \gg \frac{V^2}{2M\omega_c^2}\,, \qquad (2\text{I})$$

т.е. при достаточно широкой исходной электронной зоне $\mathcal{J}$ и не очень большой константе связи V. Как видно, (2I) не противоречит условию (9). Из выражения (I5) для L_s следует, что в пределе очень слабой связи ($V\to 0$) или очень жесткой решетки

($M\omega_0^2 \to \infty$) нельзя уже говорить о локализации электрона. В этом случае солитонная волновая функция (I3) вырождается в плоскую волну

$$\alpha(x,t) \sim e^{i(kx-\omega t)}; \quad \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - 2J, \quad m = \frac{\hbar^2}{2a^2 J}. \qquad (22)$$

3. Давыдовым и Кислухой [4] исследовались частицеподобные экситонные возбуждения, распространяющиеся в одномерных молекулярных цепях. Предложенным ими способом было рассмотрено взаимодействие магнонов [5,6] и дефектонов [7] с колебаниями решетки. Ниже мы применим этот способ для исследования взаимодействия электрона с оптическими колебаниями решетки и получим нелинейное уравнение (I2) для электронной амплитуды $\alpha(x,t)$. Тем самым будет продемонстрирована связь между квазиклассическим рассмотрением, предложенным в [4], и развитым выше адиабатическим приближением. При этом будем использовать нормальные координаты ξ_q и сопряженные им импульсы p_q , что позволит получить результат более простым путем , чем в случае, если действовать в терминах атомных отклонений u_l и сопряженных импульсов p_l . Итак, гамильтониан системы имеет вид (I). Решеточный гамильтониан представим как сумму кинетической и потенциальной энергий:

$$\mathcal{H}_L = T + U; \quad T = \sum_q \frac{p_q^2}{2M}, \quad U = \sum_q \frac{M\omega_q^2}{2}\xi_q^2. \qquad (23)$$

Волновую функцию электронного возбуждения, как и раньше, выбираем в виде

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \alpha_n(t) a_n^+ |0\rangle, \quad \sum_n |\alpha_n(t)|^2 = 1, \qquad (24)$$

где амплитуды $\alpha_n(t)$ можно получить из уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \mathcal{H}|\psi(t)\rangle, \qquad (25)$$

которое перепишется в виде

$$i\hbar\frac{\partial \alpha_n(t)}{\partial t} = \Big[T+U+V(2/N)^{1/2}\sum_q \xi_q \sin\big(qn+\tfrac{\pi}{4}\big)\Big]\alpha_n - J\big(\alpha_{n+1}(t)+\alpha_{n-1}(t)\big). \qquad (26)$$

Введем функцию переменных $\xi_q, p_q, \alpha_n(t)$,

$$F \equiv \langle\psi(t)|\mathcal{H}|\psi(t)\rangle = \sum_n \Big\{\Big[T+U+V\big(\tfrac{2}{N}\big)^{1/2}\sum_q \xi_q \sin\big(qn+\tfrac{\pi}{4}\big)\Big]\alpha_n^*(t)\alpha_n(t) - J\alpha_n^*(t)\big(\alpha_{n+1}(t)+\alpha_{n-1}(t)\big). \qquad (27)$$

При фиксированных значениях амплитуд $\alpha_n(t)$ функция F является функцией Гамильтона относительно нормальных координат ξ_q и канонически сопряженных с ними импульсов p_q . Поэтому можно написать уравнения Гамильтона следующим образом:

$$\dot\xi_q = \frac{\partial F}{\partial p_q} = p_q/M,$$
$$\dot p_q = -\frac{\partial F}{\partial \xi_q} = -M\omega_q^2\xi_q - V(2/N)^{1/2}\sum_n |\alpha_n(t)|^2 \sin\big(qn+\tfrac{\pi}{4}\big). \qquad (28)$$

Исключая из этих уравнений p_q , находим уравнение гармонического осциллятора с постоянно действующей на него силой ($\alpha_n(t)$ здесь фиксированы):

$$\ddot\xi_q = -\omega_q^2\xi_q - \frac{V}{M}\Big(\frac{2}{N}\Big)^{1/2}\sum_n \sin\big(qn+\tfrac{\pi}{4}\big)|\alpha_n(t)|^2. \qquad (29)$$

Решение последнего уравнения

$$\xi_q(t) = \xi_q(0)\cos\omega_q t - \frac{V}{M\omega_q^2}\Big(\frac{2}{N}\Big)^{1/2}\sum_n |\alpha_n(t)|^2 \sin\big(qn+\tfrac{\pi}{4}\big) \qquad (30)$$

подставим в (26) и получим следующее уравнение для $\alpha_n(t)$:

$$i\hbar\frac{\partial\alpha_n(t)}{\partial t} = \Big[\mathcal{E}+K-\sum_q \frac{V}{M\omega_q^2}\Big(\frac{2}{N}\Big)\sum_m |\alpha_m(t)|^2 \sin\big(qm+\tfrac{\pi}{4}\big)\sin\big(qn+\tfrac{\pi}{4}\big)\Big]\alpha_n(t) - J\big(\alpha_{n-1}(t)+\alpha_{n+1}(t)\big). \qquad (31)$$

Здесь $\mathcal{E} = \sum_q \frac{V^2}{2M\omega_q^2}\Big(\frac{2}{N}\Big)\Big[\sum_m |\alpha_m(t)|^2 \sin\big(qm+\tfrac{\pi}{4}\big)\Big]^2$ – упругая энергия деформации решетки, согласованной с электроном;

$$K = \sum_q \frac{V^2}{2M\omega_q^4} \left(2/N \right) \left[\sum_m \frac{\partial}{\partial t} |\alpha_m(t)|^2 \sin\left(qm + \frac{\xi}{4}\right) \right]^2$$

– кинетическая энергия такой деформации. В первом коэффициенте уравнения (3I) мы пренебрегли, как и ранее, энергией гармонических колебаний осцилляторов относительно смещенных положений равновесия $T' + U' = \sum_q \frac{M\omega_q^2}{2} \xi_q^2(c)$, дающей постоянную поправку к закону дисперсии возбуждения.

В "континуальном" пределе получим уравнение

$$i\hbar \dot{\alpha}(x,t) = (\mathcal{E} + K - 2J)\alpha(x,t) - Ja^2 \alpha_{xx}(x,t) - \frac{V^2}{M\omega_0^2}\left(1 - \frac{\omega_1^2}{\omega_0^2}\right) |\alpha(x,t)|^2 \alpha(x,t),$$

имеющее солитонное решение (I3) и закон дисперсии

$$E = \mathcal{E} + K - 2J + \frac{a^2 J}{3} \cdot \frac{1}{L_s^2} - \frac{V^2}{3M\omega_0^2}\left(1 - \frac{\omega_1^2}{\omega_0^2}\right)\frac{a}{L_s} + \frac{\hbar^2}{2a^2 J} \cdot \frac{v^2}{2};$$

$$L_s = \frac{4J}{\frac{V^2}{M\omega_0^2}\left(1 - \frac{\omega_1^2}{\omega_0^2}\right)}, \quad \mathcal{E} \simeq \frac{V^2}{6M\omega_0^2} \cdot \frac{a}{L_s}, \quad K \simeq \frac{V^2}{M\omega_0^4} \cdot \frac{a}{L_s^3} \cdot \frac{4}{15} \cdot \frac{v^2}{2}.$$

Как видим, в этом подходе получена перенормировка массы солитонного возбуждения на величину

$$\Delta m = \frac{4}{15} \frac{V^2}{M\omega_0^4} \cdot \frac{a}{L_s^3} \quad .$$

Отношение

$$\frac{\Delta m}{m} = \frac{72}{15}\left(\frac{V^2}{6M\omega_0^2}\right)^2 \left(\frac{a}{L_s}\right)^2 \frac{1}{\hbar^2\omega_0^2}\left(1 - \frac{\omega_1^2}{\omega_0^2}\right)$$

пропорционально квадрату отношения упругой энергии деформации к энергии фонона.

Литература

I. T.Holstein. Ann.Phys., 8, 325, 343, 1959 .
2. Сб."Поляроны". "Наука", М., I975.
3. В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай. ТМФ, 35, 240, I978.

4. А.С.Давыдов, Н.И.Кислуха. ЖЭТФ,7I, I090, I976 .
5. В.П.Яцишин. ТМФ, 32, I27, I977 .
6. D.I.Pushkarov, Kh.I.Pushkarov. phys.stat.sol.(b), 81,703, 1977 .
7. D.I.Pushkarov, Kh.I.Pushkarov. J.Phys.C: Solid state phys., 10, 3711, 1977 .

Рукопись поступила в издательский отдел
3I октября I978 года