сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

12155

Р17 - 12155

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай

ПОЛЯРОН В ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХОЛСТЕЙНА И МЕТОД КАНОНИЧЕСКОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

1979

P17 - 12155

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай

ПОЛЯРОН В ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХОЛСТЕЙНА И МЕТОД КАНОНИЧЕСКОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

ОИЯИ
БИБЛИОТЕКА

Федянин В.К., Юшанхай В.Ю. Р17 - 12155

Полярон в одномерной модели Холстейна и метод канонического преобразования

С помощью унитарного преобразования поляронного гамильтониана и последующей замены операторов поляронных смещений с-числовыми функциями получено нелинейное уравнение Шредингера, имеющее солитонное решение для поляронных волновых функций в длинноволновом приближении. Выведена зависимость спектральных характеристик солитона от температуры. Обсуждается связь данного рассмотрения с адиабатическим приближением.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Fedyanin V.K., Yushanhai V.Yu. P17 - 12155

Polaron in One-Dimensional Holstein Model and the Canonical Transformation Method

By the method of unitary transformation of a polaron Hamiltonian and subsequent change of operators of polaron displacements with c-numerical functions the Schroedinger nonlinear equation has been obtained which has a soliton solution for polarons wave functions in the long wave approximation. The dependence of soliton spectral characteristics on temperature is derived. The connection of this consideration with the adiabatic approximation is discussed.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

© 1979 Объединенный институт ядерных исследований Дубна

1. В работе [1] на основе модели Холстейна в адиабатическом приближении получена волновая функция электрона, описывающая его локализацию в области $L \gg a$ (a - постоянная решетки) кристалла за счет взаимодействия с оптическими колебаниями решетки. Показано, что электрон и вызванная им равновесная деформация решетки могут самосогласованно двигаться по цепочке, а инерционные свойства такого возбуждения в этом приближении полностью определяются инерционными свойствами электрона.

Подход Давыдова и Кислухи [2], который является по существу некоторым обобщением адиабатического приближения для рассматриваемой модели, позволил найти добавку к массе возбуждения за счет инерционных свойств связанной с электроном деформации решетки, т.е. в некоторой, но неполной, мере учесть поляронный эффект в данной проблеме.

Вместе с тем в теории полярона малого радиуса хорошо разработан метод канонического преобразования, позволяющий получить, во-первых: главные эффекты перенормировки массы электрона за счет сильного взаимодействия с колебаниями решетки; во-вторых: вид гамильтониана модифицированного, "остаточного" взаимодействия полярона с колебаниями решетки.

Обобщение этого метода на случай полярона большого радиуса предложено в работе [3]. В настоящем исследовании мы дадим дальнейшее развитие метода канонического преобразования, которое возможно благодаря аппроксимации, существенно связанной с адиабатическим приближением, подробно рассмотренным в работе [1].

2. Запишем гамильтониан системы

$$\begin{gathered}\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{int},\\ \mathcal{H}_L = \sum_q \left\{ \frac{p_q^2}{2M} + \frac{M\omega_q^2}{2} \xi_q^2 \right\}, \quad \mathcal{H}_e = -J \sum_\ell \left(a_{\ell+1}^+ a_\ell + a_\ell^+ a_{\ell+1} \right), \\ \mathcal{H}_{int} = V \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \sum_\ell a_\ell^+ a_\ell \sum_q \xi_q \sin\left(q\ell + \frac{\pi}{4}\right).\end{gathered} \tag{I}$$

Унитарное преобразование гамильтониана, которое позволяет выделить структуру полярона, т.е. основной эффект сильного взаимодействия электрона с решеткой, а также "остаточное" взаимодействие полярона с колебаниями решетки, которое может трактоваться как слабое возмущение, осуществляется оператором

$$U = e^{-iS}, \tag{2}$$

где

$$S = \sum_m \hat{S}_m a_m^+ a_m, \quad \hat{S}_m = -\frac{iV}{\mathcal{M}}\left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \sum_q \frac{1}{\omega_q^2} \sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right) \frac{\partial}{\partial \xi_q}, \tag{3}$$

или эквивалентно

$$S = i \sum_q \hat{\xi}_q^{\,o} \frac{\partial}{\partial \xi_q}, \quad \hat{\xi}_q^{\,o} = -\frac{V}{\mathcal{M}\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \sum_m a_m^+ a_m \sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right). \tag{4}$$

При этом фермиевские операторы преобразуются так:

$$\tilde{a}_m^+ = U a_m^+ U^{-1} = a_m^+ e^{-i\hat{S}_m}, \quad \tilde{a}_m = U a_m U^{-1} = a_m e^{i\hat{S}_m}, \tag{5}$$

а нормальные координаты ξ_q следующим образом:

$$\tilde{\xi}_q = U \xi_q U^{-1} = \xi_q + \hat{\xi}_q^{\,o}. \tag{6}$$

Следствия унитарного преобразования, осуществляемого (2), так же, как и в [4], поясним на примере полярона малого радиуса, хорошим нулевым приближением для которого является исходный гамильтониан

$$\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{int}. \tag{7}$$

По сравнению с гамильтонианом (I) опущен член, пропорциональный полуширине зоны $\mathcal{J}$, которая чрезвычайно узка для полярона малого радиуса. Таким образом, выпали операторы типа $a_{m+1}^+ a_m$, связывающие состояния электрона на разных узлах, и номер узла становится хорошим квантовым числом для электрона. Как видно из (I), гамильтониан $\mathcal{H}_L$ описывает набор N независимых осцилляторов, поэтому стационарному состоянию решетки без электрона соответствует одна из волновых функций

$$\prod_q \Phi_{N_q}\left[\left(\frac{\mathcal{M}\omega_q}{\hbar}\right)^{1/2} \xi_q\right],$$

$$\Phi_N(x) \equiv \left(2^N N! \pi^{1/2}\right)^{-1/2} e^{-x^2/2} H_N(x), \tag{8}$$

$H_N(x)$ – полиномы Эрмита.

Поместим на узел m избыточный электрон. Волновая функция

$$a_m^+ |0\rangle \prod_q \Phi_{N_q}\left[\left(\frac{\mathcal{M}\omega_q}{\hbar}\right)^{1/2} \xi_q\right]$$

при этом не будет собственной функцией $\mathcal{H}_S$, а гамильтониан

$$\mathcal{H}_{SL} \equiv \langle 0 | a_m \mathcal{H}_S a_m^+ | 0 \rangle = \sum_q \left\{ \frac{P_q^2}{2\mathcal{M}} + \frac{1}{2}\mathcal{M}\omega_q^2 \xi_q^2 + V\left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \xi_q \sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right) \right\}$$

описывает систему N несвязанных друг с другом гармонических осцилляторов, на каждый из которых действует своя "вынуждающая сила". Эта сила вызывает изменение равновесного положения каждого q-го осциллятора на величину

$$\xi_q^{\,o}(m) = -\frac{V}{\mathcal{M}\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right). \tag{9}$$

Действительно, сдвиг

$$\xi_q = \xi_q' + \xi_q^{\,o}(m) \tag{10}$$

диагонализует гамильтониан $\mathcal{H}_{SL}$, который теперь описывает гармонические колебания узлов относительно смещенных положений равновесия. После сдвига (I0) точными собственными функциями гамильтониана $\mathcal{H}_S$ будут функции

$$\Psi_m\left(\{N_q\}, \{\xi_q - \xi_q^{\,o}(m)\}\right) \equiv a_m^+ |0\rangle \prod_q \Phi_{N_q}\left[\left(\frac{\mathcal{M}\omega_q}{\hbar}\right)^{1/2} \left(\xi_q - \xi_q^{\,o}(m)\right)\right] \tag{11}$$

с собственными значениями энергии

$$E = \sum_q \hbar\omega_q \left(N_q + \frac{1}{2}\right) + E', \quad E' = -\left(\frac{2}{N}\right) \sum_q \frac{V^2}{2\mathcal{M}\omega_q^2} \sin^2\left(qm + \frac{\pi}{4}\right) \simeq -\frac{V^2}{2\mathcal{M}\omega_t^2}, \tag{12}$$

где E' – энергия связи полярона.

С другой стороны, унитарное преобразование $\tilde{\mathcal{H}}_S = U \mathcal{H}_S U^{-1}$

$$\tilde{\mathcal{H}}_S = \sum_q \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{\partial^2}{\partial \xi_q^2} + \frac{1}{2}\mathcal{M}\omega_q^2 \xi_q^2 - \frac{V^2}{2\mathcal{M}\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right) \sum_{m,l} a_m^+ a_m a_l^+ a_l \sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right) \sin\left(ql + \frac{\pi}{4}\right) \right\}. \tag{12a}$$

полностью разделяет электронные и решеточные переменные, поэтому собственными волновыми функциями гамильтониана $\tilde{\mathcal{H}}_S$ являются функции

$$\tilde{\Psi}_m\left(\{N_q\}, \{\xi_q\}\right) \equiv a_m^+ |0\rangle \prod_q \Phi_{N_q}\left[\left(\frac{\mathcal{M}\omega_q}{\hbar}\right)^{1/2} \xi_q\right] \tag{13}$$

с собственными значениями энергии (I2).

Таким образом, стационарное состояние решетки с электроном на узле m описывается либо одной из функций (I3) в представлении преобразованного гамильтониана $\tilde{\mathcal{H}}_S$, либо одной из функций (II) в представлении исходного гамильтониана $\mathcal{H}_S$. От одного набора $\tilde{\Psi}_m$ функций (I3) можно перейти к набору Ψ_m функций (II) путем обратного преобразования

$$\Psi_m = e^{iS}\tilde{\Psi}_m = e^{iS} a_m^+ |0\rangle \prod_q \Phi_{N_q}\left[\left(\frac{M\omega_q}{\hbar}\right)^{1/2} \xi_q\right]$$

$$= a_m^+ |0\rangle e^{-i\hat{S}_m} \prod_q \Phi_{N_q}\left[\left(\frac{M\omega_q}{\hbar}\right)^{1/2} \xi_q\right] =$$

$$= a_m^+ |0\rangle \prod_q \Phi_{N_q}\left[\left(\frac{M\omega_q}{\hbar}\right)^{1/2} (\xi_q - \xi_q^0(m))\right].$$

Действие оператора $\exp(-i\hat{S}_m)$ на функцию $\prod_q \Phi_{N_q}\left[\left(\frac{M\omega_q}{\hbar}\right)^{1/2} \xi_q\right]$ заключается в смещении равновесных положений осцилляторов таким образом, чтобы при помещении электрона на узел m получилось стационарное состояние. Поэтому оператор $a_m^+ e^{-i\hat{S}_m}$ с точки зрения непреобразованного гамильтониана $\mathcal{H}_S$ является оператором рождения полярона на узле m (рождение электрона вместе с равновесной деформацией (9)), а оператор $a_m e^{i\hat{S}_m}$ – оператором уничтожения полярона на узле m. С точки зрения преобразованного гамильтониана $\tilde{\mathcal{H}}_S$ оператором рождения (уничтожения) полярона на узле m является оператор a_m^+ (a_m).

Как видно из (I2)-(I2a), деформация решетки, учитываемая унитарным преобразованием U, не только понижает энергию полярона на величину E', но и приводит к корреляциям в положении полярона на разных узлах, что описывается операторами в последней сумме с $m \neq \ell$. Для сильно локализованного полярона малого радиуса эти корреляции не играют большой роли, но сказываются при наличии широкой исходной электронной зоны $\mathcal{J}$. В этом случае электрон "размазан" по кристаллу, а корреляции проявляются в том, что электронная плотность, а вместе с ней и соответствующая деформация решетки, вообще говоря, зависят от электронной плотности на всех остальных узлах.

3. Гамильтониан $\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{int}$, описывающий электрон с широкой зоной $\mathcal{J}$ после унитарного преобразования

$\mathcal{H} \to \tilde{\mathcal{H}} = U\mathcal{H}U^{-1}$ представим в виде суммы трех слагаемых: гамильтониана $\tilde{\mathcal{H}}_L$, описывающего гармонические колебания узлов решетки относительно смещенных положений равновесия, поляронного гамильтониана $\tilde{\mathcal{H}}_p$ и гамильтониана $\tilde{\mathcal{H}}_{int}$ "остаточного" взаимодействия полярона с колебаниями деформированной решетки

$$\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{\mathcal{H}}_L + \tilde{\mathcal{H}}_p + \tilde{\mathcal{H}}_{int} \tag{I4}$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_L = \sum_q \left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial \xi_q^2} + \frac{M\omega_q^2}{2}\xi_q^2\right\} \tag{I5}$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_p = -\mathcal{J}\sum_m \left[\langle e^{i(\hat{S}_m - \hat{S}_{m+1})}\rangle_0 a_{m+1}^+ a_m + \text{э.с.}\right] + V\left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \sum_m a_m^+ a_m \sum_q \xi_q^{0} \sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right) + \sum_q \frac{M\omega_q^2}{2}\xi_q^{0\,2}, \tag{I6}$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_{int} = -\mathcal{J}\sum_m \left\{\left[e^{i(\hat{S}_m - \hat{S}_{m+1})} - \langle e^{i(\hat{S}_m - \hat{S}_{m+1})}\rangle_0\right] a_{m+1}^+ a_m + \text{э.с.}\right\}. \tag{I7}$$

Здесь $\langle \ldots \rangle_0$ означает усреднение по равновесному распределению с гамильтонианом $\tilde{\mathcal{H}}_0 = \tilde{\mathcal{H}}_L + \tilde{\mathcal{H}}_p$. Производя усреднение так же, как и в /3/, находим

$$\langle e^{i(\hat{S}_m - \hat{S}_{m+1})}\rangle_0 = e^{-S_\theta},$$

$$S_\theta = \frac{V^2}{4M\hbar}\left(\frac{2}{N}\right)\sum_q \frac{1}{\omega_q^3}\left[\sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right) - \sin\left(q(m+1) + \frac{\pi}{4}\right)\right]^2 \operatorname{cth}\frac{\hbar\omega_q}{2\theta}. \tag{I8}$$

Как показано в /3/, поляронный гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}_p$ (в терминах атомных отклонений u_ℓ) в виде (I6) может быть получен на основании вариационного принципа Боголюбова.

Гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}_p$ описывает движение полярона, при котором успевает полностью произойти перестройка колебаний решетки относительно новых положений равновесия, т.е. частица как бы тащит за собой "груз атомных смещений". Это есть поляронный эффект, приводящий к перенормировке массы электрона. Гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}_{int}$ описывает движение полярона с изменением числа фононов, происходящее из-за того, что перестройка колебаний решетки относительно новых положений равновесия не успевает произойти полностью. Процесс трения, описываемый $\tilde{\mathcal{H}}_{int}$, приводящий к потере поляроном энергии и к его замедлению, в этой работе исследоваться не будет. Проблема состоит в том, чтобы найти поляронную волновую функцию $|\psi(t)\rangle$ в виде

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \varphi_n(t) a_n^+ |0\rangle; \quad \sum_n |\varphi_n(t)|^2 = 1, \tag{I9}$$

удовлетворяющую уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \tilde{\mathcal{H}}_\rho |\psi(t)\rangle. \tag{20}$$

Функция $|\psi(t)\rangle$ полностью определяется поляронными амплитудами $\varphi_n(t)$. В работе [3] была развита процедура получения уравнения для $\varphi_n(t)$ на основе (20). Вкратце эта процедура состоит в том, что уравнение для гейзенберговских операторов $a_n(t) = \exp(\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathcal{H}}_0 t) a_n \exp(-\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathcal{H}}_0 t)$ проектировалось на некоторые векторы поляронных состояний, а для полученных таким образом матричных элементов, включающих кубические по ферми-операторам $a_l(t)$ члены, постулировалось специальное "расцепление". Приближение, заключенное в таком " расцеплении", формально может быть введено иначе, на другом уровне, что и будет показано ниже в следующем пункте. Это позволит нам прояснить физическую сторону такого приближения.

4. Гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}_\rho$ аппроксимируем гамильтонианом $\tilde{\mathcal{H}}'_\rho$, который получим следующим образом: операторы решеточной деформации

$$\hat{\xi}_q^0 = -\frac{V}{M\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \sum_m a_m^+ a_m \sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right),$$

вызванной избыточной электронной плотностью, заменим на C-числовые функции $\langle \hat{\xi}_q^0 \rangle$, где

$$\langle \hat{\xi}_q^0 \rangle \equiv \langle \psi(t) | \hat{\xi}_q^0 | \psi(t) \rangle = -\frac{V}{M\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \sum_m |\varphi_m(t)|^2 \sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right), \tag{2I}$$

а поляронные волновые функции

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \varphi_n(t) a_n^+ |0\rangle, \quad \sum_n |\varphi_n(t)|^2 = 1 \tag{22}$$

удовлетворяют уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \tilde{\mathcal{H}}'_\rho |\psi(t)\rangle. \tag{23}$$

Получаем следующий вид аппроксимирующего поляронного гамильтониана:

$$\tilde{\mathcal{H}}'_\rho = -\mathcal{J} e^{-S_\theta} \sum_m \left(a_{m+1}^+ a_m + a_m^+ a_{m+1}\right) - \sum_m a_m^+ a_m \sum_q \frac{V^2}{M\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right) \sum_l |\varphi_l(t)|^2 \sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right) \sin\left(ql + \frac{\pi}{4}\right) + \sum_q \frac{V^2}{2M\omega_q^2}\left(\frac{2}{N}\right)\left[\sum_m |\varphi_m(t)|^2 \sin\left(qm + \frac{\pi}{4}\right)\right]^2. \tag{24}$$

Сравнивая (2I) с величиной решеточной деформации, вызванной адиабатически движущимся электроном (формула (7) работы [I]), а (24) с выражением (8) работы [I], видим, что замена $\hat{\xi}_q^0 \to \langle \hat{\xi}_q^0 \rangle$ позволила нам получить поляронный гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}'_\rho$, совпадающий по виду с электронным гамильтонианом $\mathcal{H}^{ad}(\{\xi_q\})$, выведенным в адиабатическом приближении. Подобно последнему, гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}'_\rho$ описывает быстрое трансляционное движение полярона в некотором среднем поле согласованной с ним равновесной деформации $\langle \hat{\xi}_q^0 \rangle$. Чтобы это приближение было справедливо, перенормировка ширины зоны, связанная с множителем $\exp(-S_\theta)$, а с ней и константа связи V, не должны быть очень большими. Действительно, в случае больших констант связи V, как видно из (I8) $\exp(-S_\theta) \ll 1$, поэтому в нулевом приближении можно пренебречь слагаемыми, пропорциональными $\mathcal{J}\exp(-S_\theta)$, и собственными состояниями гамильтониана $\tilde{\mathcal{H}}'_\rho$ становятся сильно локализованные состояния (I3) с энергиями (I2), что соответствует полярону малого радиуса. Мы же ставим задачу исследовать состояния (22) "континуального" полярона.

Исходя из (22)-(24), так же, как и в работе [I], в "континуальном" пределе $\varphi_n(t) \to \varphi(x,t)$ получим следующее уравнение для поляронной амплитуды:

$$i\hbar \dot{\varphi}(x,t) = \left(\varepsilon - 2\mathcal{J}e^{-S_\theta}\right)\varphi(x,t) - \mathcal{J}e^{-S_\theta} a^2 \varphi_{xx}(x,t) - \frac{V^2}{M\omega_0^2}\left(1 - \frac{\omega_1^2}{\omega_0^2}\right)|\varphi(x,t)|^2 \varphi(x,t). \tag{25}$$

Уравнение (25) может быть получено из уравнения (I2) работы [I] заменой $\alpha(x,t) \to \varphi(x,t)$, $\mathcal{J} \to \mathcal{J}\exp(-S_\theta)$. Поэтому сразу же пишем солитонное решение уравнения (25)

$$\varphi(x,t) = \sqrt{\frac{a}{2L}} \; \frac{e^{i(kx - \omega t + \phi_0)}}{\operatorname{ch} \frac{1}{L}(x - vt - x_0)}, \tag{26}$$

$$k = v\frac{\hbar}{2a^2 J}\, e^{S_\Theta},$$

$$\hbar\omega = \frac{v^2}{2}\cdot\frac{\hbar^2}{2a^2 J}\, e^{S_\Theta} + \varepsilon - 2Je^{-S_\Theta} - Je^{-S_\Theta}\frac{a^2}{L^2}, \tag{27}$$

$$\varepsilon \simeq \frac{V^2}{6M\omega_c^2}\cdot\frac{a}{L}, \quad L = a\,\frac{4J}{\frac{V^2}{M\omega_c^2}\left(1-\frac{\omega_1^2}{\omega_c^2}\right)}\, e^{-S_\Theta}.$$

Энергия такого солитонного возбуждения равна

$$E = \frac{v^2}{2}\,\frac{\hbar^2}{2a^2J}\, e^{S_\Theta} + \varepsilon - 2Je^{-S_\Theta} + \frac{J}{3}e^{-S_\Theta}\frac{a^2}{L^2} - \frac{V^2}{3M\omega_c^2}\left(1-\frac{\omega_1^2}{\omega_c^2}\right)\frac{a}{L}, \tag{28}$$

а масса

$$m_s = \frac{\hbar^2}{2a^2J}\, e^{S_\Theta} = m_e^{\text{эфф.}}\, e^{S_\Theta}, \quad m_e^{\text{эфф.}} = \frac{\hbar^2}{2a^2J}. \tag{29}$$

В отличие от результата, полученного на основе адиабатического приближения (формула (I8) работы /I/), мы получили перенормированное значение для массы солитона, зависящее от температуры Θ.

ЛИТЕРАТУРА

I. В.К. Федянин, В.Ю. Юшанхай. Препринт ОИЯИ PI7-II996 Дубна, (I978).
2. А.С. Давыдов, Н.И. Кислуха. ЖЭТФ, 7I, I090 (I976).
3. В.К. Федянин, В.Ю. Юшанхай. ТМФ, 35, 240 (I978).
4. Обзор Ю.А. Фирсова в сборнике: "Поляроны", "Наука", I975.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 января I979 года