

Holstein 模型的非波矢确定态稳定传播解*

刘本康¹, 汪克林^{1,2}, 完绍龙^{1,2}

(1. 中国科学技术大学非线性科学中心; 2. 中国科学技术大学天文应用物理系, 安徽合肥 230026)

摘要: 论文通过引入含时相干态形式波函数, 对 Holstein 模型的非波矢确定态的稳定行波解做了详细的研究. 首先在紧束缚近似下, 通过数值计算, 给出了具有普遍意义的稳定传播解, 即一种有着复杂结构的准周期波; 同时在低激发态条件下, 得到系统的解析解, 并可看到数值解与解析解相吻合; 最后计算了系统能量的无损耗传播过程, 即系统的能量密度随群速变化的情况. 这些结果对进一步用 Holstein 模型研究其他领域传能问题有一定的指导意义.

关键词: Holstein 模型; 传播解; 相干态

中图分类号: O481.3 **文献标识码:** A

0 前言

近年来, 人们对电子与定域声子相互作用而形成小极化子的问题产生兴趣, 原因是它与当今的巨磁阻问题、高温超导问题以及高聚物材料等有着密切的关系. 人们利用描述小极化子系统的 Holstein 模型^[1]成功地处理了与上述有关的一些问题, 并取得很多有意义的结果^[2-11], 如非线性局域声子激发的动力学性质^[3]和小极化子能带结构^[8]等. 1998 年 Jeckelmann 和 White 用密度矩阵重整化方法对 Holstein 模型的极化子问题做了研究^[9]. 不久前, Kornilovitch 通过量子蒙特卡罗法研究了 Jahn-Teller 极化子的能带结构^[2], 给出了电子与定域声子相互作用下的具有确定动量的“Bloch 态”及能谱. 此外, 有人猜测生物的传能机制也可用 Holstein 模型加以描述. 在所有过去的工作中几乎都围绕着讨论 Holstein 模型中的确定波矢值的电子与定域声子的耦合系统的能量这一中心问题, 就是讨论 Holstein 模型中的极化子的色散关系; 但是, 众所周知, 如果在这种系统中以某一确定波矢为中心的波包形式来传播, 则经过一段时间以后波包便会扩散, 因此不能在 Holstein 模型所描述的系统形成一种稳恒的不变形的能量传播; 然而, 由于 Holstein 模型是一种电子与定域声子耦合的非线性效应很强的耦合系统, 因此有理由相信它可能存在一种不随时间改变的稳恒的传能过程. 这正是本文要探讨的. 在以下的讨论中, 我们将给出这种稳恒传播解应满足的条件, 同时结合作为 Holstein 模型的紧束缚近似基础应将时间变量作为分离变量来处理这点而得到它的稳

* 收稿日期: 2002-03-11

基金项目: 中国科学院院长特别基金, 校高水平大学建设重点基金资助项目

作者简介: 刘本康, 男, 1977 年生, 二年级博士生. E-mail: bkliu@mail.ustc.edu.cn

恒解;结果发现这种解不是象一般非线性系统中得到的孤子解,而是一种有着复杂结构的准周期形式解,它可以看作是由不同的波矢以一种特殊的组合方式形成的解.通过这种解的得到,也许会给出由 Holstein 模型所描述的物理系统中的稳恒的能量传播过程,各种稳流过程,甚至生物系统中的稳恒传能机制的可能性.

1 理论模型

一维系统的 Holstein 哈密顿量为^[1]

$$H = \epsilon_0 \sum_i C_i^\dagger C_i - t \sum_i (C_{i+1}^\dagger C_i + C_{i-1}^\dagger C_i) + \omega \sum_i b_i^\dagger b_i + g \sum_i C_i^\dagger C_i (b_i^\dagger + b_i), \quad (1)$$

其中: C_i (C_i^\dagger) 和 b_i (b_i^\dagger) 分别是 Wannier 表象下格点坐标 i 上的(不考虑自旋)费米子(电子)和玻色子(声子)的湮灭(产生)算符. Holstein 模型用了电子在格点间的跃迁(hopping), 所以是在紧束缚近似下得出的. 又因为电子的自旋自由度不起作用所以可忽略不计. 为简单起见,在本文中取如下的单位 $\hbar = a = 1$ (a 是晶格常数).

鉴于过去在讨论 Fröhlich 模型下的极化子问题时,我们用相干态展开的办法进行求解,并取得许多好的结果^[11~13], 因此将系统的波函数设成如下形式

$$|\psi(\tau)\rangle = \sum_i \varphi_i(\tau) C_i^\dagger \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\} |0\rangle. \quad (2)$$

将波函数及哈密顿量代入薛定谔方程

$$-i \frac{\partial}{\partial \tau} |\psi\rangle = H |\psi\rangle, \quad (3)$$

可以得到

$$\begin{aligned} & -i \sum_i \dot{\varphi}_i(\tau) C_i^\dagger \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\} |0\rangle - \\ & i \sum_i \varphi_i(\tau) C_i^\dagger \sum_m \dot{\alpha}_{im}(\tau) b_m^\dagger \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\} |0\rangle = \\ & \epsilon_0 \sum_i \varphi_i(\tau) C_i^\dagger \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\} |0\rangle + \\ & g \sum_i \varphi_i(\tau) C_i^\dagger b_i^\dagger \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\} |0\rangle - \\ & t \sum_i \varphi_i(\tau) (C_{i+1}^\dagger + C_{i-1}^\dagger) \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\} |0\rangle + \\ & \omega \sum_{im} \varphi_i(\tau) b_m^\dagger C_i^\dagger \alpha_{im}(\tau) \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\} |0\rangle + \\ & g \sum_{im} \varphi_i(\tau) C_i^\dagger \alpha_{im}(\tau) \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\} |0\rangle. \end{aligned}$$

比较方程(4)两边 $C_i^\dagger \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\} |0\rangle$ 和 $C_i^\dagger b_m^\dagger \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\} |0\rangle$ 的各阶系数可得到以下耦合方程组:

$$-i \dot{\varphi}_i(\tau) = \epsilon_0 \varphi_i(\tau) - t \varphi_{i-1}(\tau) - t \varphi_{i+1}(\tau) + g \sum_m \varphi_i(\tau) \alpha_{im}(\tau) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} -i \dot{\alpha}_{im}(\tau) \varphi_i(\tau) = & -t \varphi_{i-1}(\tau) (\alpha_{i-1m}(\tau) - \alpha_{im}(\tau)) + \omega \varphi_i(\tau) \alpha_{im}(\tau) - \\ & t \varphi_{i+1}(\tau) (\alpha_{i+1m}(\tau) - \alpha_{im}(\tau)) + g \varphi_i(\tau) \delta_{im}, \quad (6) \end{aligned}$$

其中为了比较同一格点处的声子相干态,作了如下近似

$$\exp\left\{\sum_l \alpha_{i\pm l}(\tau) b_l^\dagger\right\}|0\rangle = \exp\left\{\sum_{i\pm l} (\tau) - \alpha_{il}(\tau) + \alpha_{il}(\tau)\right\} b_l^\dagger |0\rangle \approx \left\{1 + \sum_m (\alpha_{i\pm 1m}(\tau) - \alpha_{im}(\tau)) b_m^\dagger\right\} \exp\left\{\sum_l \alpha_{il}(\tau) b_l^\dagger\right\}|0\rangle. \quad (7)$$

需要指出的是,因为我们所研究的系统是由电子及其局域声子耦合成的非线性系统,这样的近似只降低结果的一些精确程度,不影响结果的主要物理意义. 如果要使结果更精确一些,将(2)式展开到 b_l^\dagger 的平方项或者更高阶即可.

本文的目的是要寻找稳定传播解. 如果这种稳定解存在,则必须满足以下关系:

$$\varphi_i(\tau + 1/v) = \varphi_{i-1}(\tau) \quad (8)$$

$$\sum_m \alpha_{im}(\tau + 1/v) = \sum_m \alpha_{i-1m}(\tau). \quad (9)$$

这里, v 是解的传播(群)速度(假设其传播方向是由左向右为正).

方程组(5)、(6)可以重新写成如下简单形式

$$-i \dot{\varphi}_i = \epsilon_0 \varphi_i - t \varphi_{i-1} - t \varphi_{i+1} + g \varphi_i \beta_i \quad (10)$$

$$-i \dot{\beta}_i \varphi_i = -t \varphi_{i-1} (\beta_{i-1} - \beta_i) - t \varphi_{i+1} (\beta_{i+1} - \beta_i) + \omega \varphi_i \beta_i + g \varphi_i, \quad (11)$$

其中

$$\beta_i(\tau) = \sum_m \alpha_{im}(\tau), \quad (12)$$

当然,要应用此稳定解以求出系统的一些有意义的物理量,还必须把 $\alpha_{im}(\tau)$ 从联立方程组(6)、(12)解出来. 后面在求解相应于群速 v 的能量 $E(v)$ 时我们将用到它.

2 数值计算与讨论

在紧束缚近似下,电子只在格点间跃迁,所以相应的时间变量也只能是分离值,即可以将依赖于时间的变量的微商化成差分形式.

$$\dot{\varphi}_i(\tau) \approx [\varphi_i(\tau + 1/v) - \varphi_i(\tau - 1/v)] / \frac{2}{v} \quad (13)$$

$$\dot{\beta}_i(\tau) \approx [\beta_i(\tau + 1/v) - \beta_i(\tau - 1/v)] / \frac{2}{v}. \quad (14)$$

从而方程组(10)、(11)可以写成如下形式

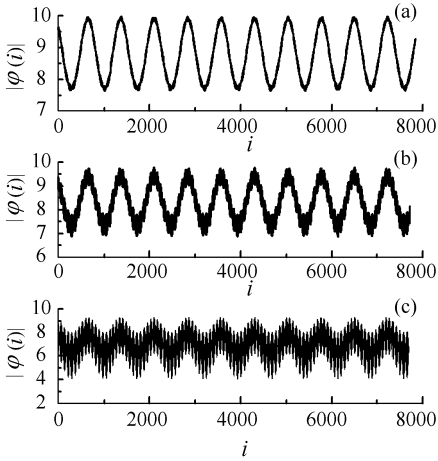
$$-\frac{iv}{2}(\varphi_{i-1} - \varphi_{i+1}) = \epsilon_0 \varphi_i - t \varphi_{i-1} - t \varphi_{i+1} + g \varphi_i \beta_i \quad (15)$$

$$-\frac{iv}{2}(\beta_{i-1} - \beta_{i+1}) \varphi_i = -t \varphi_{i-1} (\beta_{i-1} - \beta_i) - t \varphi_{i+1} (\beta_{i+1} - \beta_i) + \omega \varphi_i \beta_i + g \varphi_i. \quad (16)$$

在数值计算中,系统参数选为 $t = 0.05$, $\epsilon_0 = 1.0$, $\omega = 0.4$ 及 $g = -0.12$, 群速 v 的单位为 $\lambda \text{ m/s}$ (λ 是常数,具体大小取决于所要研究的系统;由于本文只考虑声学支声子,故对典型系统可以得到 λ 约为 1, 以下皆取 $\lambda = 1.0$). 图 1 和图 2 中已给出作为单电子在固体中的传播速度,我们合理地讨论出其大小在(20, 100)之间变动.

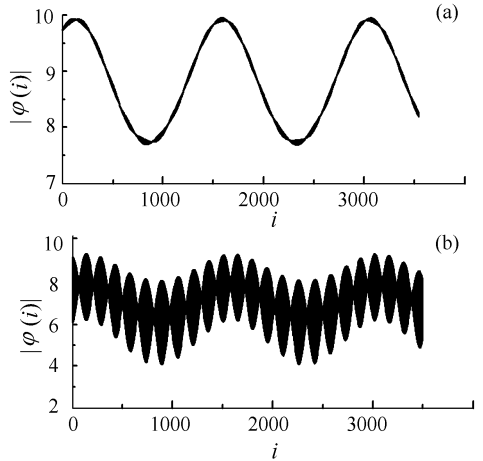
虽然考虑的是无限长的晶格,但在具体计算中仍然用了 N 很大但有限的晶格. 从计算的结果(图 1 和图 2)可以看出: 求得的稳恒解有着复杂的类周期结构. 只要 N 远大于其类周期

内所含的格点数就不会影响所得的结果. 在具体计算中取大 N 算得结果后, 再增加 N 的数量, 新的结果和原来的保持一致.



(a) 初始以低激发态为主; (b) 初始时高低激发态大致相当; (c) 初始以高激发态为主

图 1 $v = 23.3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 的稳定传播波函数的模 $|\varphi(i)|$



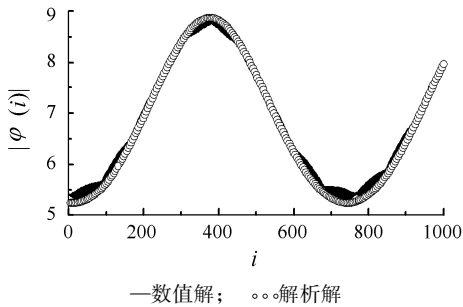
(a) 初始以低激发态为主; (b) 初始以高激发态为主

图 2 $v = 46.6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 的稳定传播波函数的模 $|\varphi(i)|$

Fig. 1 Steady transmitting wave function $|\varphi(i)|$ with $v = 23.3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

Fig. 2 Steady transmitting wave function $|\varphi(i)|$ with $v = 46.6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

以下讨论低激发态近似下的解析解并和数值解作一比较. 在低激发态的情况下可以略去 ϕ_i 对 x 的高阶微商, 因此可作如下近似



—数值解; $\circ\circ$ 解析解
图 3 $v = 23.3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 时低激发态初始条件下得到的传播波函数的数值解与解析解的比较

Fig. 3 Comparison of steady transmitting wave function $|\varphi(i)|$ for analytic solution with numerical one in $v = 23.3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

$$\varphi_{i\pm m} \approx \varphi_i \pm \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} = \varphi_i \pm \frac{\partial \varphi_i}{-v \partial \tau} \quad (17)$$

$$\beta_{i\pm m} \approx \beta_i \pm \frac{\partial \beta_i}{\partial x} = \beta_i \pm \frac{\partial \beta_i}{-v \partial \tau}, \quad (18)$$

其中作了低激发态近似 $|\varphi''_i| \ll 1.0$ 和 $|\beta''_i| \ll 1.0$.

基于以上关系, 方程组 (10)、(11) 可以重写为

$$-i\dot{\varphi}_i = \epsilon_0 \varphi_i - 2t \varphi_i + g \varphi_i \beta_i \quad (19)$$

$$-i\dot{\beta}_i = \omega \beta_i + g. \quad (20)$$

方程组 (20)、(21) 有如下解析解

$$\varphi_i(\tau) = \varphi_{i0} \exp \left\{ i \left(\epsilon_0 - 2t - \frac{g^2}{\omega} \right) \tau + \frac{g \beta_{i0}}{\omega} \exp \{ i \omega \tau \} \right\} \quad (21)$$

$$\beta_i(\tau) = \beta_{i0} \exp \{ i \omega \tau \} - \frac{g}{\omega}, \quad (22)$$

其中 φ_{i0} 和 β_{i0} 是常数.

理论解析解所得到的结果见图 3, 其中两者的初始传播条件一致, 都是低激发态形式. 我们可以看出理论结果和上面的数值计算非常的吻合. 其中的微小偏差可看作是在得到解

析解时因低激发态近似忽略了高阶项而引起. 从低激发态情形下得到的解析解和数值计算的相合, 一方面检验了理论的自洽性, 另一方面也肯定了数值计算的可靠性.

以下通过数值计算来讨论包括高激发在内的普通稳恒解的情况. 首先, 系统传播子的平均传播能量 $E(v)$ 表达式可以给出

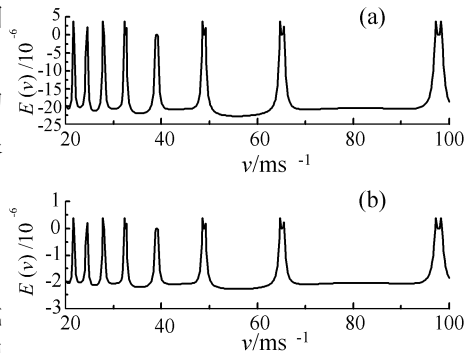
$$E(v) = \frac{1}{N} \frac{\langle \psi(\tau) | H | \psi(\tau) \rangle}{\langle \psi(\tau) | \psi(\tau) \rangle} = \frac{\sum_i \{ t \varphi_i (\varphi_{i+1}^* + \varphi_{i-1}^*) + \varphi_i \varphi_i^* \sum_m [\omega \alpha_{im} \alpha_{im}^* + g(\alpha_{im} + \alpha_{im}^*)] \}}{N \sum_i \varphi_i \varphi_i^*} + \epsilon_0. \quad (23)$$

在不同的初始条件(初始传播态所含低激发态成分的比重的多少不同)下算出的结果由图 4 给出. 这里, N 作为晶格总数, 和解的周期相比较必须取足够大.

除了确实找到稳定传播解以外, 还应该强调的是, 从图 4 可以看到, $E(v)$ 相应于 v 的变化出现了很多的波峰和平坦的波谷.

3 结论

通过采用一种非布洛赫波的新的解的形式, 我们找到了 Holstein 模型的稳定传播解. 尽管在不同初始传播条件下, 解的结构复杂多变, 但它们始终具有准周期性, 并且低激发态近似下和解析解惊人的吻合. 这种稳定传播解自然地给出了在系统中以这种波的形式传播时它会始终保持原来的形状无限地传播下去而不会扩散或变形; 其次从 $E-v$ 曲线可以看出这种稳恒解的另一个重要性质, 即在相当大的速度范围内传播的能量密度几乎都是相同的低能的情形, 只在很小范围内的某些 v 值时能量密度会陡然升高很多. 这种现在似乎对应着生物传能的稳定性, 而在特殊的 v 值处, 传能的陡增是否可以生物体的应激反应找到了一种相近的机制. 因此从本文得到的结果看, 它对生物传能的机制和一些类似的其他领域的现象可以提供一些有益的启示.



(a) 初始以低激发态为主,

(b) 初始以高激发态为主

图 4 稳定传播子的平均能量 $E(v)$ 与其传播群速度 v 的关系曲线

Fig. 4 Average energy $E(v)$ of steady transmitting solution with corresponding v

参 考 文 献

- [1] Holstein T. Studies of polaron motion Part I. The molecular-crystal model [J]. Ann. Phys. (N. Y.), 1959, 8: 325-342; Studies of polaron motion Part II. The small polaron. ibid. 8: 343-389.
- [2] Kornilovitch P E. Band structure of the Jahn-Teller polaron from quantum Monte Carlo [J]. Phys. Rev. Lett., 2000, 84(7):1551-1554.
- [3] Roncaglia Roberto and Tsironis George P. The anti-integrable limit of the Holstein model with a nonlinear phonon Hamiltonian: Localization properties [J]. Physica D, 1998, 113: 318-325.
- [4] Hennig D. Bounds on the energy exchange and freezing of the actions in the Holstein model [J]. Physica D, 1998, 113(2-4): 196-201.

- [5] Tekic J, Ivic Z, Zekovic S, *et al.* Kinetic properties of multi-quanta Davydov-like solitons in molecular chains[J]. *Phys. Rev. E*, 1999, 60(1): 821-825.
- [6] Lorenzo J P and Aubry S. Insulator-metal transition versus temperature for the CDW of the 1D adiabatic Holstein model [J]. *Physica D*, 1998, 113(2-4): 276-282.
- [7] Romero AH, Brown DW, Lindenberg K. Converging toward a practical solution of the Holstein molecular crystal model[J]. *Journal of Chem. Phys.*, 1998, 109(16): 6 540-6 549.
- [8] Wellein G and Fehske H. Polaron band formation in the Holstein model[J]. *Phys. Rev. B*, 1997, 56(8): 4 513-4 517.
- [9] Jeckelmann E, White SR. Density-matrix renormalization group-study of the polaron problem in the Holstein model[J]. *Phys. Rev. B*, 1998, 57(11): 6 376-6 385.
- [10] Bonca J, Trugman SA, Batistic I. Holstein polaron[J]. *Phys. Rev. B*, 1999, 60(3): 1 633-1 642.
- [11] Wang KL, Chen QH, Wan SL. A concise approach to the calculation of the polaron ground-state energy[J]. *Phys. Lett. A*, 1994, 185 (2): 216-220.
- [12] Wan SL, Wang KL. Polaronic band structure of Holstein model[J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2000, 17(2): 129-131.
- [13] Chen QH, Fang MH, Zhang QR, *et al.* Two- and three-dimensional polarons with extended coherent states[J]. *Phys. Rev. B*, 1996, 53 (17): 11 296-11 299.

Non-certain Wave Vector-like Steady Transmitting Solutions of the Holstein Model

LIU Ben-kang¹, WANG Ke-lin^{1,2}, WAN Shao-long^{1,2}

(1. Center for Nonlinear Science; 2. Department of Astronomy and Applied Physics, USTC, Hefei 230026, China)

Abstract: Non-certain wave vector-like steady transmitting solutions of the Holstein model are studied using the time-evolving coherent states wave functions in this paper. First, the common steady transmitting solutions which are quasiperiodic with complicated structure are given numerically; and the analytic solutions are obtained under low states approximation, which fit well with the numerical ones; finally, the transmission of energy without exhaustion, that is, the average transmitting energy $E(v)$ corresponding to the transmitting velocity, is studied. It is of significance to understand the mechanics of the transmission of energy without exhaustion within the Holstein model.

Key words: Holstein model; transmitting solution; coherent states