

SSHモデルの線形な電子格子相互作用からの
ずれによるソリトン・ポーラロンのエネルギー補正

平井 茂

(1985年3月9日受理)

I 問題点と方法

SSHモデル, 及びそれを連続体に移行したTLMモデルを用いて, ポリアセチレンのソリトン・ポーラロンなどの素励起の性質が調べられている^{1,2)}。

$$H_{SSH} = -\sum_n t_{n+1,n} (c_{n+1}^+ c_n + c_n^+ c_{n+1}) + \frac{1}{2} \sum_n K(u_{n+1} - u_n)^2 \quad (1)$$

$$t_{n+1,n} = t_0 - \alpha(u_{n+1} - u_n) \quad (2)$$

トランスファ積分の格子変位に関して高次の展開項を考えると

$$t_{n+1,n} = t_0 - \alpha(u_{n+1} - u_n) - \beta(u_{n+1} - u_n)^2 - \gamma(u_{n+1} - u_n)^3 \quad (2')$$

(2')を(1)に代入して連続体に移行すると⁴⁾ TLMハミルトニアンと, 付加項として次式を得る。 a は格子定数。

$$\int dx \Psi^\dagger(x) \left[i g_1 a \Delta^2(x) \sigma_3 \frac{\partial}{\partial x} + g_2 \Delta^3(x) \sigma_1 \right] \Psi(x)$$

$$g_1 = \frac{\beta}{a^2} \quad g_2 = \frac{\gamma}{2a^3} \quad (3)$$

ここでは g_2 項のみの効果を調べる。 g_2 項を摂動として, ソリトン・ポーラロンのエネルギー補正を求める。

$$H_0 = H_{TLM}$$

$$H = H_0 + H'$$

$$= \int dx \Psi^\dagger(x) \left[-i v_F \sigma_3 \frac{\partial}{\partial x} + \Delta(x) \sigma_1 + g \Delta^3(x) \sigma_1 \right] \Psi(x)$$

$$+ \frac{1}{\pi v_F \lambda} \int \Delta^2(x) dx \quad (4)$$

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} .$$

電子グリーン関数を用いて擾動エネルギーは求められる⁵⁾。

$$G_{ij}(xx'\tau) = - \langle T_\tau \psi_i(x\tau) \psi_j^\dagger(x'0) \rangle_{H_0} \quad (5)$$

[1次擾動]

$$\begin{aligned} \Delta E_\alpha^{(1)} &= 2g \int dx \Delta_\alpha^3(x) (\sigma_1)_{ij} G_{ji}^\alpha(xx0) \\ &= - \frac{2g}{\pi v_F \lambda} \int \Delta_\alpha^4(x) dx \end{aligned} \quad (6)$$

α は完全結合交替, ソリトン・ポーラロンなどの系の状態を表わす指標。(6)で, H_0 から断熱近似の下に得られる SC 方程式を利用した⁷⁾。

$$(\sigma_1)_{ij} G_{ji}^\alpha(xx0) = - \frac{1}{\pi v_F \lambda} \Delta_\alpha(x) \quad (7)$$

[2次擾動]

$$\begin{aligned} \Delta E_\alpha^{(2)} &= g^2 \int d\tau dx dx' (\sigma_1)_{ij} (\sigma_1)_{mn} G_{jm}(xx'\tau) G_{ni}(x'x-\tau) D_\alpha^3(xx'\tau) \\ &\sim g^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} \int dx dx' \Delta_\alpha^3(x) \Delta_\alpha^3(x') \text{Tr} [\sigma_1 G(xx'\omega) \sigma_1 G(x'x\omega)] \end{aligned} \quad (8)$$

(8) でフォノン線はエネルギーを運ばないという近似をした。

$$\begin{aligned} D_\alpha(xx'\tau) &\equiv \langle T_\tau \Delta_\alpha(x\tau) \Delta_\alpha(x'0) \rangle_0 \\ &\sim \Delta_\alpha(x) \Delta_\alpha(x') \end{aligned} \quad (9)$$

II 計算と結果

1. 結合交替した基底状態

SSHモデルの線形な電子格子相互作用からのずれによるソリトン・ポーラロンのエネルギー補正

$$\begin{aligned}\Delta E_D^{(1)} &= -\frac{2gA_0^4}{\pi v_F \lambda} L, \quad A_0 = W e^{-1/\lambda} \\ \Delta E_D^{(2)} &= -\frac{g^2 A_0^6}{\pi v_F} \left(\frac{1}{\lambda} - 1\right) L\end{aligned}\quad (10)$$

この場合は、系の全エネルギーは厳密に求められ、 g について展開して(10)が導かれる。

$$\begin{aligned}\Delta E_D &= E_D[A] - E_D[A=0] \\ &= -\frac{L}{\pi v_F} \left[A'^2 \ln \frac{W}{A'} + \frac{1}{2} A'^2 - \frac{1}{\lambda} A^2 \right], \quad A' = A(1+gA^2) \\ &= \sum_{n=0} \Delta E_D^{(n)}\end{aligned}\quad (11)$$

$$\left. \frac{\partial \Delta E_D}{\partial A} \right|_{A=A_0} = 0 \quad \text{より}$$

$$A_0(1+gA_0^2) = W \exp \left\{ \frac{-1}{\lambda(1+gA_0^2)(1+3gA_0^2)} \right\}$$

2. ソリトン・ポーラロンをもつ状態

[1次摂動] Appendix により $\int A^4(x) dx$ を計算する。

i) ソリトン³⁾

$$\Delta E_S^{(1)} = \Delta E_D^{(1)} + \frac{16gA_0^2}{3\pi\lambda} A_0 \quad (12)$$

ii) ポーラロン⁸⁾

$$\Delta E_P^{(1)} = \Delta E_D^{(1)} + \frac{32g}{3\pi\lambda} (A_0^2 + 2\omega_0^2) k_0 v_F - \frac{16g}{\pi\lambda} \omega_0^2 A_0 \operatorname{th}^{-1} \frac{k_0 v_F}{A_0} \quad (13)$$

○ポーラロン安定解 $\omega_0 = A_0/\sqrt{2}$ (トランス型)

$$\begin{aligned}\Delta E_P^{(1)} &= \Delta E_D^{(1)} + \frac{32gA_0^2}{3\pi\lambda} \frac{A_0^2}{v_F} \sqrt{2} \left(\frac{v_F}{A_0} - \frac{3}{4} x_0 \right) \\ &\sim \Delta E_D^{(1)} + 1.5 \times \frac{16gA_0^2}{3\pi\lambda} A_0\end{aligned}\quad (14)$$

○遠くはなれた SS 対⁶⁾ $\omega_0 \sim 2A_0 e^{-\frac{A_0 2x_0}{v_F}}$

$$k_0 v_F \sim A_0 (1 - 2e^{-2\frac{A_0 2x_0}{v_F}}) \quad d = 2x_0$$

$$\Delta E_{SS}^{(1)} \sim \Delta E_D^{(1)} + 2 \frac{16g A_0^2}{3\pi\lambda} A_0 + V_{SS}^{(1)}(d) \quad (15)$$

$$V_{SS}^{(1)}(d) = \frac{16g A_0^2}{\pi\lambda} A_0 \left(1 - \frac{d}{\xi_0}\right) e^{-2\frac{d}{\xi_0}} \quad (16)$$

iii) 2 ポーラロン^{9,10)}

$$\begin{aligned} \Delta E_{2p}^{(1)} &= \Delta E_D^{(1)} + \frac{32g}{3\pi\lambda} (A_0^2 + \omega_1^2 + \omega_2^2) (k_1 + k_2) v_F \\ &\quad - \frac{8g}{\pi\lambda} (\omega_1^2 + \omega_2^2) A_0 \left(\text{th}^{-1} \frac{k_1 v_F}{A_0} + \text{th}^{-1} \frac{k_2 v_F}{A_0} \right) \end{aligned} \quad (17)$$

○遠くはなれた PP 対 $k_1 = k_0 + \frac{1}{2} \delta k$

$$k_2 = k_0 - \frac{1}{2} \delta k \quad d = \frac{1}{k_0} \ln \frac{4k_0}{\delta k}$$

$$V_{PP}^{(1)}(d) = -\frac{64g}{3\pi\lambda} (k_0 v_F)^3 \left[8 \left(1 - \frac{3}{2} \frac{x_0}{\xi_0}\right) + 3 \frac{A_0^2}{\omega_0^2} \right] e^{-2k_0 d}$$

トランス型 PA $\omega_0 = A_0 / \sqrt{2}$

$$\sim -\frac{16g A_0^2}{\lambda} A_0 e^{-\sqrt{2} \frac{d}{\xi_0}} \quad (18)$$

iv) ソリトン格子¹¹⁾

$$\Delta E_{SL}^{(1)} = -\frac{2g}{\pi v_F \lambda} \frac{1}{3} \frac{A_k^4}{k^2} L \left[\left(1 + \frac{2}{k^2}\right) - 2 \left(1 + \frac{1}{k^2}\right) \frac{E(k)}{K(k)} \right] \quad (19)$$

$$n = \frac{|\rho - 1|}{a} = \frac{A_k}{2kK(k)} \quad A_k = k^{1/2} A_1$$

$$A_1 = W e^{-1/\lambda} \quad k^2 = 1 - \frac{2E(k)}{K(k)} + \frac{\pi^2}{4K^2(k)}$$

SSHモデルの線形な電子格子相互作用からのずれによるソリトン・ポーラロンのエネルギー補正
 $K(k)$, $E(k)$ は第1種, 第2種の完全楕円積分

$$n \ll \frac{A_1}{V_F}, \quad k \simeq 1 \quad \Delta E_{\text{SL}}^{(1)} = \Delta E_D^{(1)} + \frac{16gA_0^2}{3\pi\lambda} A_0 n L$$

[2次摂動] ソリトンの場合のみ計算⁵⁾ $A_s(x) = A_0 \operatorname{th} \frac{x}{\xi_0}$ を(8)に代入

$$\Delta E_s^{(2)} = \Delta E_D^{(2)} - \frac{(gA_0^2)^2}{12\pi^2} \left(\frac{W}{A_0}\right)^4 A_0 + g^2 O(W^3, W^2, W, \ln W, 1) \quad (20)$$

大きな因子 $\left(\frac{W}{A_0}\right)^n$ ($n \leq 4$) が現れる。

III まとめ

トランスファ積分の格子変位について3次の依存性は、断熱近似を用いて、1次摂動についてのみ考えると、次のような効果を与える。式(12), (14)より、ソリトンとポーラロンとの生成エネルギーの差をひろげる。(16)より、荷電ソリトン同士の斥力相互作用を弱める。(17), (18)より、シス型PAにおけるバイポーラロン同士の斥力相互作用を弱める。ポーラロンとバイポーラロンとの間には補正相互作用は働かない。

Appendix

ソリトン・ポーラロンの存在する系の格子変位パラメータは変形されたKdV方程式をみたす。 $v_F \equiv 1$

$$A'''(x) - 6A^2(x)A'(x) + AA'(x) = 0 \quad (A1)$$

(A1)を積分して(B, C は積分定数)

$$\frac{d}{dx} (AA') - A'^2 - 2A^4 + AA^2 = BA \quad (A2)$$

$$A'^2 - A^4 + AA^2 = 2BA + C \quad (A3)$$

(A2), (A3)より

$$A^4 = \frac{1}{3} \left[\frac{d}{dx} (AA') + 2AA^2 - 3BA - C \right]$$

B, C は $A(x)$ の $x \rightarrow \pm\infty$ の漸近値を(A2), (A3)に代入して求められる。

平井 茂

2 ポーラロン解の場合⁹⁾

$$A = 2(A_0^2 + \omega_1^2 + \omega_2^2)$$

$$B = 2(\omega_1^2 + \omega_2^2)A_0 \quad C = A_0^4 - 2(\omega_1^2 + \omega_2^2)A_0^2$$

ソリトン・ポーラロン共存系のような2つの禁止帯をもつ場合, $A(x)$ は (A 1) をみたさない¹²⁾。例えば, 1 ソリトン・1 ポーラロン共存解の場合¹³⁾

$$A''' - 6A^2 A' + \omega^2(A^2 - A_0^2) + (2A_0^2 + 3\omega^2)A' = 0$$

参 考 文 献

- 1) W. R. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger, Phys. Rev. **B22** (1980) 2099-11
- 2) H. Takayama, Y. R. Lin-Liu and K. Maki, Phys. Rev. **B21** (1980) 2388-93
- 3) S. Kivelson, T.K. Lee, Y.R. Lin-Liu, I. Peschel and L. Yu, Phys. Rev. **B25** (1982) 4173-84
- 4) J. Hara and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 2128-39
- 5) J. C. Hicks and A. L. Wassermann, Phys. Rev. **B15** (1984) 808-13
- 6) J. C. Hicks and Y. R. Lin-Liu, Phys. Rev. **B15** (1984) 6184-87
- 7) J. C. Hicks and G. A. Blaisdell, Phys. Rev. **B15** (1985) 919-26
- 8) D. K. Campbell, A. R. Bishop and K. Fesser, Phys. Rev. **B25** (1982) 6862-74
- 9) Y. Onodera and S. Okubo, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 2478-84
- 10) Y. Onodera, Phys. Rev. **B15** (1984) 775-85
- 11) S. A. Brazovskii, S. A. Gordyunin and N. N. Kirova, JETP Letters **20** (1980) 456-61
- 12) S. A. Brazovskii, I. E. Dzyaloshinskii and N. N. Kirova, JETP **54** (1981) 1209-16
- 13) S. Okuno and Y. Onodera, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 3495-505