

Н.І. КАШИРИНА

Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України
(Просп. Науки, 41, Київ 03028; e-mail: n_kashirina@mail.ru)**ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ
КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ ПОЛЯ ДО РОЗРОБКИ
ТРАНСЛЯЦІЙНО-ІНВАРІАНТНОЇ ТЕОРІЇ
ПОЛЯРОНА ТА БІПОЛЯРОНА**

УДК 544.225.3

У роботі досліджуються функціонали енергії полярона і біполярона, отримані методом квантової теорії поля. Виведено точні аналітичні вирази для ефективних функціоналів з використанням двохпараметричної пробної функції для полярона і трьохпараметричної для біполярона. Варіаційним методом знайдено значення енергії досліджуваних систем для проміжних значень фрьоліховської константи електрон-фононного зв'язку $4 \leq \alpha \leq 20$.

Ключові слова: полярон, біполярон, гамільтоніан Фрьоліха, електрон-фононна взаємодія, високотемпературна надпровідність.

1. Вступ

Актуальність поляронної тематики, крім відомих застосувань, зумовлених спробами побудови теорії ВТНП [1, 2] на основі біполяронного механізму, пов'язана з тим, що прості у своїй постановці модельні задачі, в яких розглядаються різні аспекти поляронної теорії, є зручним об'єктом для розвитку методів теоретичної фізики у галузі взаємодії заряджених частинок з квантовими полями. Вивченню поляронних і біполяронних станів, а також численним прикладам застосування поляронної тематики в різних розділах фізики конденсованого стану присвячено багато робіт, оглядів і монографій (див., наприклад, [3] і посилання в ній).

У роботі [4] методами квантової теорії поля була побудована послідовна теорія полярона (Π) з урахуванням трансляційної інваріантності. Для сильного зв'язку в [4] були отримані результати пекаровської теорії Π [5]. Для слабкого і проміжного (з боку слабкого зв'язку) Тулубом в [4] отримані результати близькі до фейнманівських (метод інтегрування по траєкторіях). В [6] повідомлялось про те, що метод, запропонований Тулубом, при великих фрьоліховських константах електрон-фононної взаємодії дає найбільш низькі значення поляронної енергії порівняно з іншими методами. Для розрахунків енергії зв'язку використовувалися наближені вирази, отримані, строго кажучи, в

границі $\alpha \rightarrow \infty$. Значний інтерес відіграє знаходження в рамках польової теорії точних математичних виразів для ефективного функціонала Π і біполярона (БП) при заданому виборі пробної функції. Необхідно без використання яких би то не було наближень отримати максимально спрощені аналітичні вирази для функціоналів енергії Π і БП, які б дали можливість провести процедуру чисельної мінімізації в найбільш актуальній для теорії БП області параметрів електрон-фононної взаємодії $4 \leq \alpha \leq 20$.

**2. Функціонал Тулуба
для полярона і функціонал біполярона**

Схема отримання функціонала Π [4] і БП [7, 8] з урахуванням ефектів віддачі, запропонована в [4], зводиться до таких кроків: 1) до гамільтоніана Фрьоліха, що описує взаємодію електрона з фононами, послідовно застосовують два класичних канонічних перетворення Лі, Лоу і Пайнса [9]: перше перетворення виключає координату електрона, а друге відповідає операції зсуву операторів народження (\mathbf{a}_k^+) і знищення (\mathbf{a}_k) фононів; 2) в отриманому гамільтоніані виділяється доданок:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}^0 \mathbf{a}_{\mathbf{k}}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2m^*} \left(\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} f_{\mathbf{k}} (\mathbf{a}_{\mathbf{k}}^+ + \mathbf{a}_{\mathbf{k}}) \right)^2, \quad (1)$$

де m^* – ефективна маса електрона, а варіаційна функція $f_{\mathbf{k}}$ визначає зсув фононних операторів:

$\mathbf{a}_k \rightarrow \mathbf{a}_k + f_k$; \mathbf{k} – хвильовий вектор (ХВ) фононів, ω_k^0 – частота поздовжніх оптичних фононів. Далі дисперсією ω_k^0 будемо нехтувати.

Вираз (1) можна привести до діагонального вигляду, використовуючи методи квантової теорії поля. Отримання енергії зводиться до усереднення функціонала Π на власних функціях оператора (1) з подальшою мінімізацією по f_k . В границі сильного зв'язку використовується спрощена процедура: замість варіювання по функції f_k варіюють параметри, що входять в f_k , а саму функцію вибирають в заданому вигляді.

Аналітичний вираз для функціонала Π Тулуба, отриманий в [4] для нульового повного імпульсу і пробної функції f_k , має вигляд

$$E_{PT} = \Delta E + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k f_k^2, \quad (2)$$

де ΔE – власне значення гамільтоніана (1); у фейнманівських одиницях $2m^* = 1$, $\hbar = 1$, $\omega_k^0 = 1$; тоді одиницею енергії є величина $\hbar\omega_k^0$, одиницею довжини $L_0 = \sqrt{\hbar/2m^*\omega_k^0}$; $V_k = k^{-1}\sqrt{4\pi\alpha L_0/V}$, V – об'єм кристала, $\alpha = \frac{e^2}{2\hbar\omega_k^0} \frac{1}{L_0} (\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0})$, ϵ_∞ і ϵ_0 – високочастотна і статична діелектрична проникність відповідно.

Функціонал БП можна знайти після переходу в гамільтоніані БП до координат центра мас, подібно тому, як це робиться в [10]. Потім повторюється викладена вище схема розрахунку, що була застосована для отримання функціонала (2). Трьохпараметричний функціонал БП, отриманий методом Тулуба в рамках квантової теорії поля, досліджувався в [8]. Його можна записати у вигляді:

$$E_B = \Delta E' + 2 \sum_k \bar{V}'_k f'_k + \sum_k f_k'^2 + \bar{T}(\mathbf{r}) + \bar{U}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

де $\bar{V}'_k = 2V_k \langle \Psi | \cos \mathbf{k}\mathbf{r} / 2 | \Psi \rangle$; \bar{T} і \bar{U} – середні значення кінетичної енергії та енергії міжелектронного відштовхування в координатах центра мас: $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$; $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ – радіус-вектори першого і другого електронів відповідно. Координата центра мас \mathbf{R} в (3) виключена першим канонічним перетворенням Лі Лоу і Пайнса [9]. Штрихи введені для того, щоб розрізняти вирази ΔE , $\Delta E'$ і функції f_k , f'_k , які входять до рівняння (2) і (3) відповідно.

1090

Двохпараметрична пробна функція Π вибирається у вигляді:

$$f_k = -NV_k \exp(-k^2/2a^2), \quad (4)$$

де N і a – варіаційні параметри. Функціонал БП (3) мінімізується з пробною хвильовою функцією (ХВ), фононній частині якої відповідає вираз:

$$f'_k = -N\bar{V}'_k \exp(-k^2/2\mu), \quad (5)$$

а координатна частина має вигляд: $\Psi(\mathbf{r}) = (2/\pi b^2)^{3/4} \exp(-r^2/b^2)$, де N , μ , b – варіаційні параметри.

У границі сильного зв'язку перший доданок в (2) відповідає кінетичній енергії електрона в фононному полі. У загальному випадку, для проміжних значень електрон-фононної взаємодії, члени, які відповідають кінетичній енергії електронів, повинні виділятися окремо і не збігаються з величиною ΔE для Π і $\Delta E' + \bar{T}$ для БП.

Якщо межі інтегрування по фононному ХВ вважаються нескінченними, то:

$$\Delta E = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dk k^4 f_k^2 \omega_k F(\omega_k), \quad (6)$$

$$F(\omega_k) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{\sqrt{s}}{(s - \omega_k^2)^2} \frac{1}{D(s)} ds, \quad (7)$$

$$D(s) = 1 - \frac{2}{3(2\pi)^3} \int \frac{k^2 f_k^2 \omega_k}{s - \omega_k^2} d^3\mathbf{k},$$

де $\omega_k = 1 + k^2/2$. Вибір контура інтегрування C в площині комплексного змінного s обговорюється в [4].

Величина $\Delta E'$, що входить у функціонал біполярона (3), може бути отримана з ΔE заміною f_k на f'_k .

Вираз (6) допускає значне спрощення. Більшість інтегралів можуть бути обчислені в аналітичному вигляді, інтеграли, що мають полюси на дійсній осі, обчислюються у сенсі головного значення.

При інтегруванні в нескінченних границях для варіаційної функції полярона f_k дійсна і уявна частини виразу (7) мають вигляд:

$$\text{Re } D(\omega_k^2) = 1 + \lambda\nu(y), \quad \text{Im } D(\omega_k^2) = k^3 f_k^2 / 6\pi, \quad (8)$$

$$\nu(y) = 1 - ye^{-y^2} \int_0^y e^{t^2} dt - \xi(y) e^{-\xi(y)^2} \int_{\xi(y)}^\infty e^{-t^2} dt,$$

де $\xi(y) = \sqrt{y^2 + 4/a^2}$, $y = k/a$, $\lambda = 4N^2\alpha a / 3\sqrt{2\pi}$.

Звернемо увагу на те, що врахування обмеженості фононного спектра граничним значенням ХВ приводить до складніших виразів. Змінюється не тільки аналітичний вираз для функції $D(s)$, а і сам вигляд Π і БП функціоналів: з'являється додатковий член, загальний вигляд якого наведено в [11]. У нашій роботі границі інтегрування по ХВ не обмежуються.

Наведемо точні формули, отримані нами для величини (6) з використанням пробної ХФ f_k (4) для необмежених границь інтегрування:

$$\Delta E(a, N, \alpha) = \Delta E_0(a, N, \alpha) + \Delta E_1(a, N, \alpha), \quad (9)$$

$$\Delta E_0 = \frac{3a^2}{16} q_0(a, N, \alpha), \quad (10)$$

$$\Delta E_1 = \frac{3a^2}{16} q_1(a, N, \alpha),$$

$$q_0 = \frac{1}{1 + \frac{1}{\lambda} - \frac{\sqrt{\pi}}{a} \exp(4/a^2)(\operatorname{erf}(2/a) - 1)}, \quad (11)$$

$$q_1 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dy \frac{e^{-y^2} (1 - \tilde{\Omega}(y)) \tilde{\eta}(y)}{(\nu(y) + 1/\lambda)^2 + \pi y^2 \exp(-2y^2)/4}, \quad (12)$$

де $\tilde{\eta}(y) = (y^2 + 2/a^2)/(y^2 + 4/a^2)$,

$$\tilde{\Omega}(y) = 2y^2 \left[(1 + 2\xi(y)^2) \xi(y) e^{\xi(y)^2} \times \int_{\xi(y)}^\infty e^{-t^2} dt - \xi(y)^2 \right], \quad (13)$$

для $a \gg 1, \alpha \gg 1$,

$$\Delta E_0 \approx 3a^2/16, \quad \xi(y) \approx y, \quad \tilde{\eta}(y) \approx 1.$$

Введемо також нові позначення для цієї межі:

$$q_1 \approx q(1/\lambda), \quad \tilde{\Omega}(y) \approx \Omega(y).$$

Таким чином, для сильного зв'язку вирази (12) і (13) можна наближено представити в такому вигляді:

$$q(1/\lambda) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dy \times \frac{e^{-y^2} (1 - \Omega(y))}{(\nu(y) + 1/\lambda)^2 + \pi y^2 \exp(-2y^2)/4}, \quad (14)$$

$$\Omega(y) = 2y^2 \left[(1 + 2y^2) y e^{y^2} \int_y^\infty e^{-t^2} dt - y^2 \right]. \quad (15)$$

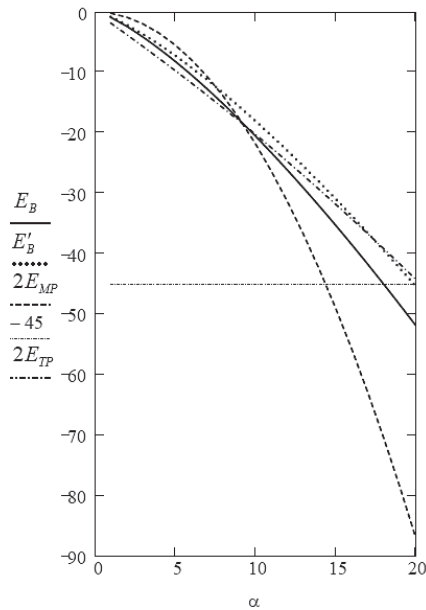
Наближені вирази (14) (при $N = 1$) і (15) збігаються з величинами $q(1/\lambda)$ і $\Omega(y)$, наведеними в [4].

Дельтаподібна особливість, що з'являється при великих значеннях констант електрон-фононої взаємодії в підінтегральних виразах (12) і (14), зумовлена тим, що величина $\operatorname{Re} D(\omega_k^2)$, яка визначається формулою (8), проходить через нуль і стає негативною, не виникає при порівняно малих значеннях фрьоліховської константи зв'язку $\alpha \leq 10$, а для $10 \leq \alpha \leq 20$ значення інтегралів, що входять у вираз (6), можуть з великою точністю бути розраховані чисельно.

У зв'язку з тим, що ми врахували додатковий варіаційний параметр N у варіаційній функції БП f'_k , роль якого обговорювалася в роботі [6], значення величини енергії БП в границі сильного зв'язку при $\alpha \rightarrow \infty$ для $\eta = 0$, отримані нами з використанням точних виразів (9)–(13), $E_{\text{Bs}} \approx -0,440959\alpha^2$ (головне значення інтеграла (12) обчислювалося чисельно) виявилися дещо нижче значення, отриманого в [7] для $N = 2$ (без варіювання функціонала БП за цим параметром). Результати сильного зв'язку з великою точністю справедливі для області $\alpha \geq 35$, при $N = \sqrt{2}$ вони збігаються з оптимальним значенням для функціонала Π Тулуба сильного зв'язку [6] в границі $1/\lambda \rightarrow 0$. В роботі [8] була проведена оптимізація функціонала БП по параметру N , але розрахунки виконувалися для наближеного значення ΔE , наведеного в [4], а також використовувалося наближення $1/\lambda \approx 0$, що значно спрощує функціонал БП, однак, як показали наші розрахунки, дає занижені значення енергії БП в області порівняно малих значень параметра електрон-фононої взаємодії $\alpha \leq 20$. У той самий час, використання точних формул (9)–(13) для Π і відповідних виразів для БП з додатковим варіаційним параметром N в області $4 \leq \alpha \leq 20$, знизило значення енергії БП порівняно з роботою [12], автори якої користувалися наближеними формулами сильного зв'язку, наведеними в [4] для додатної добавки ΔE , проте, відмовилися від наближення $1/\lambda = 0$ у виразі (14).

3. Результати розрахунків

Розрахунки енергії Π проводились з використанням точних формул (9)–(13), які визначають доданок ΔE в функціоналі (2). Величина $\Delta E'$ в (3) може бути отримана з ΔE в результаті переозначення варіаційних параметрів, аналітичний вигляд



Залежності енергій E_B , $2E_{MP}$ і $2E_{TP}$ біполярона, подвоєної енергії полярона сильного зв'язку Мійяке [15] і полярона Тулуба [4] відповідно для $\eta = \varepsilon_\infty/\varepsilon_0 = 0$; E'_B – енергія біполярона, розрахована для $\eta = 0,1$; горизонтальна штрихпунктирна крива відповідає значенню енергії рівному -45 і наведена для зручності порівняння отриманих нами результатів з результатами роботи [12]. E_{TP} розраховувалася для двохпараметричної функції f_k ; E_B і E'_B – для трьохпараметричної функції f'_k з використанням виразів (9)–(13) для полярона та відповідних виразів для біполярона

Залежність енергії біполярона від параметрів електрон-фононного зв'язку.
 E_B – наші розрахунки, E_{Bs} – значення, отримане екстраполяцією границі сильного зв'язку для $1/\lambda = 0$, E_{BK} – енергія, розрахована в [13], $\eta = \varepsilon_\infty/\varepsilon_0$

$\alpha = 9$			
η	$-E_B$	$-E_{Bs}$	$-E_{BK}$
0	19,08	35,69	24,93
0,01	18,86	35,25	24,65
0,1	16,79	31,00	22,07
$\alpha = 7$			
η	$-E_B$	$-E_{Bs}$	$-E_{BK}$
0	13,02	21,60	16,23
0,01	12,24	21,32	16,05
0,1	10,89	18,75	14,60

решти доданків, які входять у функціонал БП (3), наведений в [8].

У таблиці представлена енергія БП E_B , розрахована з використанням точних формул для доданка $\Delta E'$, а також відповідні значення цієї ж величини, отримані в роботах [8, 13], для $\alpha = 9$, $\alpha = 7$, при різних значеннях $\eta = \varepsilon_\infty/\varepsilon_0$. Величина E_{Bs} відповідає екстраполяції наближення $1/\lambda = 0$, на область порівняно невеликих значень параметра α . Дана екстраполяція була проведена в роботах [7, 8]. E_{BK} – енергія БП, отримана в роботі [13] методом Буймістрова–Пекара [14]. Звернемо увагу на те, що величини E_B і E_{BK} отримані варіаційним методом без використання яких би то не було апроксимацій у вихідних функціоналах, тому можуть розглядатися як верхні межі енергії БП. У той самий час, величина E_{Bs} отримана в результаті варіювання наближеного функціонала для $1/\lambda = 0$.

На рисунку наведені результати проведених автором роботи чисельних розрахунків енергії П і БП. Для порівняння наведено також графік залежності подвоєної енергії П сильного зв'язку Мійяке [15].

Аналіз отриманих нами значень енергії БП показує, що екстраполяція границі сильного зв'язку (наближення $1/\lambda \approx 0$) на область досліджуваних нами значень параметра α неправомірна, оскільки дане наближення приводить до істотно занижених значень енергії БП. Розрахунки, виконані в рамках методу Тулуба без використання наближених виразів для функціонала П і БП, показали, що критична величина фрьоліховської константи зв'язку для границі $\eta \rightarrow 0$, нижче якої БП не існує, $\alpha_c = 10$. Дане значення не приводить до розширення області існування БП порівняно з іншими методами. Як приклад в таблиці нами наведені більш низькі значення енергії БП, отримані в [13] для тих самих значень параметрів.

У той самий час, в області досліджуваних в [4] значень $\alpha \leq 8$, асимптотика $q(1/\lambda) = q(0)$, а також використання в [4] наближених виразів для функціонала П в границі сильного зв'язку, не привело до заниження енергії П, як це і передбачалося в [4].

Причину досить жорсткого обмеження констант електрон-фононної взаємодії порівняно невеликими значеннями автор [4] бачить у тому, що при збільшенні константи зв'язку розсіяння П на оптичних фонах взагалі не може мати місця, бо по

мірі зростання α відповідальними за розсіювання стають коливання ґратки з усе меншою довжиною хвилі. Фононна взаємодія для малих довжин хвиль не може бути описана в рамках континуального наближення, яке покладено в основу теорії Тулуба. Обрізання фононного спектра граничним ХВ також призводить до обмеження по константі зв'язку, за межами якої континуальне наближення не працює. Як показали аналітичні розрахунки, пов'язані з обчисленням матричних елементів матриці розсіювання Π на оптичних фонах, і чисельні оцінки для параметрів ряду кристалів, наведені в [4], максимальні величини фрєліховської константи електрон-фононного зв'язку α_{\max} мають для більшості іонних кристалів значення порядку $\alpha_{\max} = 8-9$. Ці величини фактично звужують область застосовності сильного зв'язку до нуля, бо в реальних кристалах повинен здійснюватися слабкий або проміжний зв'язок.

Дослідження залежності енергії БП від параметра обрізання фононного спектра, що являє собою самостійну і надзвичайно трудомістку задачу, буде проведено нами в інших роботах. Відзначимо тільки, що для порівняно невеликих констант електрон-фононної взаємодії, позитивна добавка, аналітичний вигляд якої наведений в [11], не призводить до суттєвих змін величини енергії Π і БП.

Автор роботи висловлює подяку А.В. Тулубу та В.Д. Лахно за обговорення результатів роботи і корисну дискусію.

1. В.Л. Винецкий, Н.И. Каширина, Э.А. Пашицкий, УФЖ **37**, 77 (1992).
2. Н. И. Каширина, В. Д. Лахно, УФН **80**, 449 (2010).
3. Н.И. Каширина, В.Д. Лахно, *Математическое моделирование автолокализованных состояний в конденсированных средах* (ФИЗМАТЛИТ, Москва, 2013).
4. А.В. Тулуб, ЖЭТФ **41**, 1828 (1961).
5. С.И. Пекар, *Исследование по электронной теории кристаллов* (Гостехтеоретиздат, Москва, Ленинград, 1951).

6. Н.И. Каширина, В.Д. Лахно, А.В. Тулуб, ЖЭТФ **141**, 994 (2012).
7. V.D. Lakhno, Sol. St. Com. **152**, 621 (2012).
8. В.Д. Лахно, ЖЭТФ **143**, 1033 (2013).
9. T.D. Lee, F.E. Low, and D. Pines, Phys. Rev. **90**, 297 (1953).
10. В.Л. Винецкий, О. Мередов, В.Я. Янчук, Теорет. и эксперим. химия **25**, 641 (1989).
11. M. Porsch and J. Röseler, Phys. Stat. Sol. **23**, 365 (1967).
12. S.N. Klimin and J.T. Devreese, Sol. St. Com. **153**, 58 (2013).
13. N.I. Kashirina, V.D. Lakhno, and V.V. Sychov, Phys. Stat. Sol. (b). **239**, 174 (2003).
14. В.М. Буймистров, С.И. Пекар, ЖЭТФ **32**, 1193(1957).
15. S.J. Miyake, J. Phys. Soc. Japan. **38**, 181 (1975).

Одержано 02.07.14

Н.И. Каширина

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ К ПОСТРОЕНИЮ
ТРАНСЛЯЦИОННО-ИНВАРИАНТНОЙ ТЕОРИИ
ПОЛЯРОНА И БИПОЛЯРОНА

Р е з ю м е

В работе исследуются функционалы энергии полярона и биполярона, полученные методом квантовой теории поля. Получены точные аналитические выражения для эффективных функционалов с использованием двухпараметрической пробной функции для полярона и трехпараметрической для биполярона. Вариационным методом найдены значения энергии исследуемых систем для промежуточных значений фрєліховской константы $4 \leq \alpha \leq 20$.

N.I. Kashirina

APPLICATION OF QUANTUM FIELD
THEORY METHODS TO THE DEVELOPMENT
OF THE TRANSLATIONAL-INVARIANT
POLARON AND BIPOLARON THEORY

S u m m a r y

The polaron and bipolaron energy functionals obtained in the framework of quantum field theory have been studied. Exact analytical expressions for the effective functionals are derived in terms of the two-parametrical trial function for a polaron and the three-parametrical one for a bipolaron. Variational solutions are found for the energies of the systems under study in the case of the intermediate values of Fröhlich electron-phonon coupling constant, $4 \leq \alpha \leq 20$.