

## Критерий появления первого связанного состояния оптического полярона

© В.К. Мухоморов

Агрофизический институт,  
195220 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 21 декабря 1999 г.)

Для производной силы электрон-фононной связи анализируется основное состояние оптического полярона. Дифференциальное уравнение на собственные значения преобразовано в интегральное уравнение Фредгольма. Применяя метод следов к ядру интегрального уравнения, мы установили, что первое связанное состояние оптического полярона появляется как только для безразмерной константы связи начинает выполняться неравенство  $\alpha_c \geq 2.8$ .

Зависимость поляронных состояний от величины константы электрон-фононной связи ( $\alpha_c$ ) неоднократно обсуждалась [1–6]. Детально изучались предельные случаи сильной связи, когда поляронные образования наделяются собственной внутренней структурой, причем при  $\alpha_c \gg 1$  число собственных электронных состояний становится неограниченным [7], и слабой связи, когда взаимодействие электрона с колебаниями кристаллической решетки можно учесть методами теории возмущений [8,9]. Однако до сих пор остается открытым вопрос о том, при какой именно величине константы электрон-фононной связи появляется первое квазидискретное связанное состояние оптического полярона. Уже в случае  $\alpha_c \approx 6$  теория возмущений дает явно неверные предсказания для изменения эффективной массы медленного электрона [2]. Получаемые большие изменения массы противоречат наблюдениям. К общей проблеме определения числа связанных состояний гамильтонианов с гладкими потенциалами неоднократно привлекалось внимание [10–18].

В настоящей работе предлагается использовать математический подход, основанный на анализе решений интегрального уравнения, соответствующего поляронной проблеме, с целью определения критического значения величины константы связи, при которой в поляронной потенциальной яме появляется первое связанное состояние.

Для определения зависимости поляронного потенциала от величины константы электрон-фононной связи воспользуемся методом Буймиштова–Пекара [1], описывающим квантовые состояния электронов, взаимодействующих с гармонически колеблющимися поляризационным полем при произвольных значениях  $\alpha_c$ . При  $\alpha_c \rightarrow 0$  этот подход воспроизводит результаты теории возмущений, а при  $\alpha_c \gg 1$  — предельные результаты для случая сильной автолокализации электрона [7]. В то же время в области промежуточных значений константы связи ( $\alpha_c \approx 1$ ) метод [1] дает значения полной энергии оптического полярона почти на 5% ниже, чем альтернативный и часто используемый подход Фейнмана с применением интегралов по траекториям [4].

В континуальном приближении гамильтониан электрон-фононной системы можно записать как

$$H = -(\hbar^2/2m^*)\Delta + \sum_k (\hbar\omega_k/2)(q_k^2 - \partial^2/\partial q_k^2) + \sum_k c_k q_k \chi_{-k}(r). \quad (1)$$

Гамильтониан (1) справедлив в том случае, когда поверхность равной энергии сферическая и минимум энергии находится в точке  $k = 0$ . Здесь приняты обозначения:  $m^*$  — эффективная масса зонного электрона,  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор электрона,  $q_k$  — нормальные координаты продольного оптического колебания с частотой  $\omega_k$  и волновым вектором  $\mathbf{k}$ ,  $c_k$  — коэффициент связи  $k$ -го кристаллического колебания с электроном. Для продольных оптических колебаний коэффициент связи  $c_k$  может быть представлен в виде

$$c_k = -\frac{\hbar\omega_k}{|k|} (4\pi\alpha_c)^{1/2} \left( \frac{\hbar}{2m^*\omega_k} \right)^{1/4},$$

$$\alpha_c = \frac{e^2}{\varepsilon^* \hbar\omega_k} \left( \frac{m^*\omega_k}{2\hbar} \right)^{1/2},$$

$$\frac{1}{\varepsilon^*} = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s}, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_\infty$  и  $\varepsilon_s$  — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости среды. Функции

$$\chi_k(r) = (2/V)^{1/2} \sin(\mathbf{k}\mathbf{r} + \pi/4) \quad (3)$$

образуют полную систему функций, ортонормированных в кубе объемом  $V$ . В методе [1] предполагается, что под действием поля электрона изменяются равновесные положения  $q_k^0$  гармонических осцилляторов фононного поля, причем это смещение зависит от электронной волновой функции  $\varphi(r)$  и тем самым от координат электрона. Учитывая эту зависимость, перейдем в гамильто-

ниане (1) от переменных  $\mathbf{r}$ ,  $q_k$  к новым координатам  $\mathbf{r}$ ,  $q'_k = q_k - q_k^0(r)$  и запишем его в виде

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \Delta - 2 \sum_r (\nabla q_k^0 \nabla) \frac{\partial}{\partial q'_k} + \sum_{k,k_1} (\nabla q_k^0, \nabla q_{k_1}^0) \frac{\partial^2}{\partial q'_k \partial q'_{k_1}} - \sum_k (\Delta q_k^0) \frac{\partial}{\partial q'_k} \right] + \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} \left[ (q_k^0 + q'_k)^2 - \frac{\partial^2}{\partial q_k^2} \right] + \sum_k c_k (q_k^0 + q'_k) \chi_{-k}(r). \quad (4)$$

В рамках адиабатического приближения полную волновую функцию системы запишем в виде произведения  $\psi = \varphi(r) \prod_k \Phi_k(q'_k)$ , где  $\Phi_k$  — собственная волновая функция кристаллических колебаний. Функционал полной энергии полярона представим в виде

$$\bar{H} = (\hbar^2/2m^*) \int |\nabla\varphi|^2 d\tau - \sum_k (c_k^2/2\hbar\omega_k) \langle \varphi | \chi_{-k}(r) | \varphi \rangle^2 + \sum_k \hbar\omega_k (n_k + 1/2) + \sum_k c_k \left[ \langle \varphi | q_k^0 \chi_{-k}(r) | \varphi \rangle - \langle \varphi | \chi_{-k}(r) | \varphi \rangle \langle \varphi | q_k^0 | \varphi \rangle \right] + \sum_k (\hbar^2/2m^*) (n_k + 1/2) \langle \varphi | (\nabla q_k^0)^2 | \varphi \rangle. \quad (5)$$

Экстремизируя функционал (5) по  $q_k^0$ , можно получить уравнение Эйлера, решения которого и определяют  $q_k^0$ . Однако, как показано в [1], это решение может быть надежно заменено линейной аппроксимацией  $q_k^0 = a_k \chi_{-k}(r)$ , где  $a_k$  — вариационный параметр, определяемый из условия минимума функционала (4). Экстремальное значение параметра  $a_k$ , полученное из (4), равно

$$a_k = -\frac{c_k (1 - \langle \varphi | \cos(\mathbf{k}\mathbf{r}) | \varphi \rangle^2)}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \hbar\omega_k (1 - \langle \varphi | \cos(\mathbf{k}\mathbf{r}) | \varphi \rangle^2)}. \quad (6)$$

Электронная волновая функция основного состояния предполагается гауссовской,  $\varphi(r) = (2\beta/\pi)^{3/4} \exp(-\beta r^2)$ , и следовательно матричный элемент в (6) равен  $\langle \varphi | \cos(\mathbf{k}\mathbf{r}) | \varphi \rangle = \exp(-k^2/8\beta)$ , где  $\beta$  — вариационный параметр. Для решения задачи на собственные значения проварируем функционал (5) по функ-

ции  $\varphi(r)$ . В результате получим уравнение

$$-(\hbar^2/2m^*) \Delta\varphi + \sum_k (\hbar\omega_k/2) (2q_k^0 \langle \varphi | q_k^0 | \varphi \rangle \varphi - q_k^{02} \varphi) - \sum_k (c_k^2/\hbar\omega_k) \chi_{-k}(r) \langle \varphi | \chi_{-k}(r) | \varphi \rangle + \sum_k \left[ q_k^0 \chi_{-k}(r) \varphi - \langle \varphi | \chi_{-k}(r) | \varphi \rangle q_k^0 \varphi - \chi_{-k}(r) \langle \varphi | q_k^0 | \varphi \rangle \varphi \right] - \sum_k (\hbar^2/2m^*) (2n_k + 1) (\nabla q_k^0)^2 \varphi = \lambda \varphi. \quad (7)$$

Сохраняя в дифференциальном уравнении (7) слагаемые, зависящие от координаты  $\mathbf{r}$ , получим следующее дифференциальное уравнение на собственные значения:

$$\Delta\varphi + (2m^*/\hbar^2) \left[ \sum_k \chi_{-k}(r) \langle \varphi | \chi_{-k}(r) | \varphi \rangle \times \left( \hbar\omega_k a_k^2 + 2c_k a_k + (c_k^2/\hbar\omega_k) \right) \varphi + \lambda \varphi \right] = 0. \quad (8)$$

Подставим в уравнение (8) параметр  $a_k$  в форме (6) и функцию  $\chi_{-k}(r)$  и перейдем от суммирования по  $\mathbf{k}$  к интегрированию. В результате получим уравнение

$$\Delta\varphi + \left[ \frac{4e^2 \alpha_c^2}{\hbar\pi \varepsilon^* \omega} \int_0^\infty \frac{k^3 \sin(kr) \exp(-k^2/8\beta)}{r [a_c^2 k^2 + 1 - \exp(-k^2/4\beta)]} dk + \lambda \frac{2m^*}{\hbar^2} \right] \varphi = 0. \quad (9)$$

При выводе (9) было принято бездисперсионное приближение  $\omega_k = \omega$ .

Далее, следуя [11,17], перейдем от дифференциального уравнения к интегральному. Предварительно заменим радиальную функцию основного состояния  $\varphi(r) = u(r)/r$ . Тогда уравнение (9) можно переписать в виде

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[ \frac{4e^2 \alpha_c^2}{\hbar\pi \varepsilon^* \omega} \int_0^\infty \frac{k^3 \sin(kr) \exp(-k^2/8\beta)}{r [a_c^2 k^2 + 1 - \exp(-k^2/4\beta)]} dk + \lambda \frac{2m^*}{\hbar^2} \right] u(r) = 0. \quad (10)$$

Вычислить в замкнутом виде интеграл, входящий в уравнение (10), не представляется возможным, однако для основного электронного состояния его зависимость от радиус-вектора  $r$  может быть с высокой степенью надежности аппроксимирована аналитической формой  $V_0 \exp(-\gamma r^2)$ . Параметры потенциала  $V_0$  и  $\gamma$  находятся

численно при заданных значениях константы связи и вариационного параметра  $\beta$ , определяемого из экстремальных свойств функционала (5). Учитывая граничные условия  $u(0) = u(\infty) = 0$ , преобразуем уравнение (10) в интегральное уравнение Фредгольма

$$u(r) = \int_0^r zu(z) \left( (4\alpha_c^4 V_0 / \pi\gamma) \exp(-z^2) + 2\lambda m^* / \hbar^2 \right) dz + \int_r^\infty ru(z) \left( (4\alpha_c^4 V_0 / \pi\gamma) \exp(-z^2) + 2\lambda m^* / \hbar^2 \right) dz. \quad (11)$$

При выводе (11) использовалось интегральное соотношение

$$\int_{x_0}^x dx \int_{x_0}^x dx \dots \int_{x_0}^x f(x) dx = [1/(n-1)!] \int_{x_0}^x (x-z)^{n-1} f(z) dz, \quad (12)$$

а также был совершен переход к новой переменной  $z = r\sqrt{\gamma}$ . Далее используя подстановку  $u(z) = w(z) \times \exp(z^2/2)$  и учитывая, что критическому значению параметра  $\alpha_c$  будет соответствовать потенциал, для которого  $\lambda$  обращается в нуль, интегральное уравнение (11) можно привести к виду

$$w(z) = (4\alpha_c^4 V_0 / \pi\gamma) \int_0^\infty K(z, t) w(t) dt, \quad (13)$$

где ядро уравнения имеет теперь

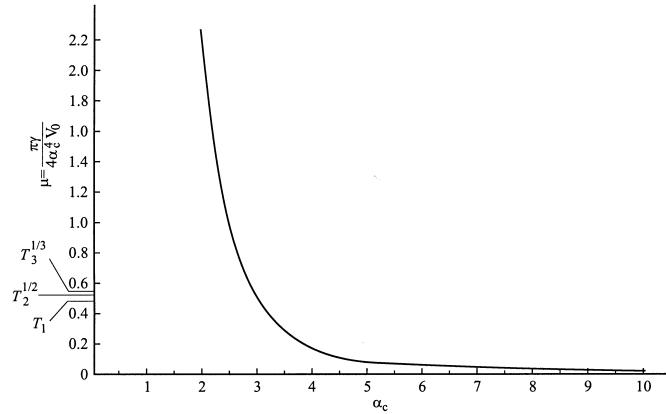
$$K(z, t) = \begin{cases} t \exp[-(z^2 + t^2)/2], & t < z; \\ z \exp[-(z^2 + t^2)/2], & t > z. \end{cases}$$

В соответствии с теоремой Мерсера [19] у уравнения с симметричным, вырожденным и непрерывным ядром каким является (13), имеется ограниченное число нетривиальных решений, и при увеличении силы потенциала первое собственное значение появляется как только след ядра  $T_j = \int_0^\infty K_j(x, x) dx$ , полученный в  $j$ -ом итерационном цикле метода последовательных приближений, начинает удовлетворять неравенству

$$T_j^{1/j} \geq \pi\gamma / 4\alpha_c^4 V_0 = \mu. \quad (14)$$

Для  $j$ -го итерированного ядра  $K_j(z, t)$  справедливо соотношение

$$K_j(z, t) = \int_0^\infty K_{j-1}(z, t) K(y, t) dy, \quad K_1(z, t) = K(z, t). \quad (15)$$



Изменение параметра  $\mu$  в зависимости от величины безразмерной константы электрон-фононной связи  $\alpha_c$ ,  $T_1$ ,  $T_2$  и  $T_3$  — итерационные значения следа ядра интегрального уравнения.

Для интегрального ядра  $K_j(x, x)$  в третьем порядке итераций имеем

$$T_3 = \frac{1}{4} \left( \frac{3\pi}{4\sqrt{2}} - \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{2}{3} \right)^{n+k+1} \frac{(n+k+1)! 2^{n+k} n! k!}{(2n+1)!(2k+1)!} \right). \quad (16)$$

Требование (14) позволяет установить критическое значение  $\alpha_c$ , для которого оно будет выполняться. Переход от состояния с  $T_j^{1/j} < \mu$  к состоянию, при котором  $T_j^{1/j} > \mu$ , можно определить как область появления первого связанного состояния оптического полярона. Метод следов применялся ранее [17] при определении числа связанных состояний для различных типов гладких потенциалов, и расхождение с результатами прямых численных расчетов [20] не превышает 4%.

На рисунке представлено изменение параметра  $\mu$  в зависимости от величины константы электрон-фононной связи. Неравенство для  $T_j^{1/j}$  начинает выполняться как только  $\alpha_c \geq 2.8$ , что и соответствует появлению первого связанного состояния. Для области значений константы связи  $\alpha_c < 2.8$  оптический полярон не обладает собственной внутренней структурой. Найденное критическое значение константы связи близко к приближенной оценке  $\alpha_c > 2$  [2]. Сходимость итерационного ряда для  $T_j$ , как видно из рисунка, быстрая и позволяет ограничиться при оценке  $\mu$  третьим итерационным циклом.

## Список литературы

- [1] В.М. Буймистров, С.И. Пекар. ЖЭТФ **32**, 5, 1193 (1957).
- [2] D. Pines. Polarons and Excitions / Ed. by C.C. Kuper, C.D. Whitfield. N.Y. (1962). P. 321.
- [3] В.М. Буймистров. ФТТ **5**, 10, 3264 (1963).
- [4] R.P. Feynman. // Phys. Rev. **97**, 2, 660 (1965).
- [5] W.J. Huybrechts. // J. Phys. **C10**, 17, 3761 (1977).
- [6] N. Tokuda. // J. Phys. **C13**, 3, L851 (1980).

- [7] С.И. Пекар. Исследования по электронной теории кристаллов. М.–Л. (1951). С. 256.
- [8] T. Lee, F. Low, D. Pines. *Phys. Rev.* **90**, *1*, 297 (1953).
- [9] M. Gurari. *Phil. Mag.* **44**, 329 (1953).
- [10] J.M. Blatt, J.D. Jackson. *Phys. Rev.* **26**, 18 (1949).
- [11] V. Bargmann. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **38**, 961 (1952).
- [12] J. Schwinger. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **47**, 122 (1961).
- [13] K. Chadan. *Nuovo Cimento.* **A33**, 191 (1968).
- [14] D. Simon. *J. Math. Phys.* **10**, 1123 (1969).
- [15] F. Martin. *Helvetica Phys. Acta.* **45**, *1*, 140 (1972).
- [16] M.L. Baeteman, K. Chadan. *Nucl. Phys.* **A255**, *1*, 35 (1975).
- [17] R. Dutt, R.S. Gangopadhyay. *Phys. Lett.* **A109**, *1–2*, 4 (1985).
- [18] F.M. Fernandez, Q. Ma, R.H. Tipping. *Phys. Rev.* **A39**, *4*, 1605 (1989).
- [19] В.И. Смирнов. Курс высшей математики. Т. 4. ГИТТЛ, М. (1957). С. 812.
- [20] Дж. Блатт, И. Вайскопф. Теоретическая ядерная физика. ИЛ, М. (1952).