

## Биполярон в методе промежуточной связи

© П.Ж. Байматов, Д.Ч. Хужакулов, Х.Т. Шарипов

Институт химии Академии наук Узбекистана,  
700170 Ташкент, Узбекистан

(Поступила в Редакцию 29 апреля 1996 г.)

Методы промежуточной связи, учитывающей электрон-решеточную корреляцию, изучены свойства полярона и биполярона. Учтена кулоновская корреляция в движении электронов. С уменьшением константы связи Фрѐлиха при  $\alpha^* = 5.7$  биполярон скачкообразно распадается из автолокализованного состояния на два делокализованных полярона. Построена фазовая диаграмма области существования устойчивого биполярона. Найденные результаты сравниваются с результатами, полученными методом интегралов по траекториям.

Образование биполярона (БП) большого радиуса, предложенное Пекаром [1], в настоящее время исследуется различными методами, такими как прямой вариационный [2,3], оптимизированный каноническим преобразованием [4] и метод интегралов по траекториям [5,6]. Изучение образования связанных пар электронов важно при обосновании механизмов высокотемпературной сверхпроводимости, обусловленной бозе-конденсацией БП [7].

Адиабатические расчеты показывают [2], что энергия связи БП составляет до 25% удвоенной энергии полярона при  $\varepsilon_\infty/\varepsilon_0 \rightarrow 0$ , т.е. БП стабилен при достаточно большой степени ионной связи  $\varepsilon_\infty/\varepsilon_0 < 0.14$ . Однако адиабатическое приближение справедливо при больших значениях константы связи  $\alpha$ . С уменьшением  $\alpha$  условия адиабатики нарушаются и решетка начинает чувствовать мгновенное положение электронов [8].

В работе [4] показано, что БП образуется, начиная с некоторого критического значения  $\alpha_c = 7.3$ . Метод интегралов по траекториям дает значение  $\alpha_0 = 6.8$  [6].

В настоящей работе методом промежуточной связи [8], который интерполирует области слабой и сильной связи, изучены некоторые характеристики полярона и БП. Простыми волновыми функциями рассчитаны энергия основных состояний и значение  $\alpha^*$ , при котором полярон и БП переходят от автолокализованного к свободному состоянию. Построена фазовая диаграмма области устойчивости БП.

Гамильтониан Фрѐлиха для двух электронов, взаимодействующих с поляризующим континуумом, имеет вид (в единицах энергии  $\hbar\omega$  и длины  $l_0 = (\hbar/2m\omega)^{1/2}$ )

$$H_{bp} = H_e + H_{int} + H_{ph}, \quad H_e = -(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{u}{r_{12}}, \quad (1)$$

$$H_{ph} = \sum_q b_q^\dagger b_q,$$

$$H_{int} = \sum_q [v_q b_q (\exp(igr_1) + \exp(igr_2)) + \text{h.c.}] \quad (2)$$

$$v_q = -1(4\pi\alpha/\omega)^{1/2}/|q|, \quad (3)$$

где  $m$  — зонная масса электрона,  $r_1, r_2$  — координаты электронов;  $r_{12} = |r_1 - r_2|$ ,  $u = 2\sqrt{\alpha}/(1 - \varepsilon_\infty/\varepsilon_0)$ ,  $\varepsilon_\infty$  и  $\varepsilon_0$  — высокочастотная и статическая диэлектрическая проницаемость,  $b_q^\dagger$  ( $b_q$ ) — оператор рождения (уничтожения) фонона с импульсом  $q$  и с частотой  $\omega$ ,  $\Omega$  — объем. Константа связи Фрѐлиха определяется как

$$\alpha = [(1/\varepsilon_\infty) - (1/\varepsilon_0)] e^2 / 2\hbar\omega l_0, \quad (4)$$

где  $e$  — заряд электрона. При этом полная энергия БП выражается через параметры  $\alpha$  и  $u$ , причем  $u > \sqrt{2}\alpha$ .

Для вычисления среднего значения  $H_{bp}$  волновую функцию БП представим в виде

$$\psi_{bp} = \varphi(r_1, r_2) \Phi_{ph}, \quad \Phi_{ph} = U|0\rangle, \\ U = \exp(A - A^\dagger), \quad A = \sum_q \chi_q(r_1, r_2) b_q, \quad (5)$$

где  $|0\rangle$  — вакуум для фононов,  $b_q|0\rangle = 0$ ,  $\langle 0|0\rangle = 1$ . Амплитуду смещения представим в виде суммы из двух частей (не зависящей и зависящей от  $r_1, r_2$ )

$$\chi_q(r_1, r_2) = v_q [f_q + g_q (\exp(igr_1) + \exp(igr_2))], \quad (6)$$

где  $f_q$  и  $g_q$  определяется вариационно.

Для усреднения по  $\psi$  можно сначала произвести канонические преобразования  $\tilde{H} = U^\dagger H_{bp} U$ , а затем определить результат  $\langle 0|\tilde{H}|0\rangle$ . После этого, определяя  $f_q$  и  $g_q$ , из условия минимума  $\int \varphi \langle 0|\tilde{H}|0\rangle \varphi d\tau_1 d\tau_2$  можно получить функционал БП

$$E_{bp}[\varphi(r_1, r_2)] = \bar{H}_e - \sum_q |v_q|^2 [\overline{\cos}(qr_1) + \overline{\cos}(qr_2)]^2 \\ - \sum_q |v_q|^2 \frac{(2[1 + \overline{\cos}(qr_{12})] - [\overline{\cos}(qr_1) + \overline{\cos}(qr_2)]^2)^2}{2q^2 + 2[1 + \overline{\cos}(qr_{12})] - [\overline{\cos}(qr_1) + \overline{\cos}(qr_2)]^2}. \quad (7)$$

Здесь черточка означает усреднение по  $\varphi(r_1, r_2)$ .

Аналогичным образом можно получить функционал полярона

$$E_p[\varphi(r)] = -\bar{\nabla}^2 - \sum_p |v_p|^2 [\overline{\cos}(qr)]^2 \\ - \sum_q |v_q|^2 \frac{(1 - \overline{\cos}(qr))^2}{2q^2 + 1 - [\overline{\cos}(qr)]^2}. \quad (8)$$

Электронную часть волновых функций полярона и БП берем в виде

$$\varphi(r) = N \exp(-\mu^2 r^2),$$

$$\varphi(r_1, r_2) = N(1 + \gamma r_{12}^2) \exp[-\mu^2(r_1^2 + r_2^2)], \quad (9)$$

параметры  $\mu$  и  $\gamma$  определяются из условий минимума соответствующего функционала.

На рис. 1 приведена зависимость  $2E_p$  и  $E_{bp}$  от константы связи  $\alpha$  для  $u = \sqrt{2}\alpha$ . В области слабой связи  $\alpha < \alpha^*$  обе зависимости линейны по  $\alpha$ , что соответствует приближению Ли-Лоу-Пайнса [9]. В области  $\alpha \gg \alpha^*$  обе зависимости ведут себя как  $\alpha^2$ , причем отношение  $E_{bp}/2E_p$  насыщается и стремится к значению 1.22 (что очень близко к результатам работы [2], небольшое различие обусловлено различной аппроксимацией волновых функций электронов). По мере уменьшения  $\alpha$  роль электрон-решеточной корреляции возрастает, и зависимость начинает отклоняться от  $\alpha^2$  и переходит в линейную в точке  $\alpha^*$ , причем для полярона  $\alpha_p^* = 6.9$ , а для БП  $\alpha_{bp}^* = 5.7$ . Именно начиная от критической точки  $\alpha > \alpha_c = \alpha_{bp}^* = 5.7$ , БП начинает формироваться, т. е.  $E_{bp}/2E_p > 1$ .

Расчет показывает, что при  $\alpha < \alpha^*$  радиусы полярона и БП равны  $\infty$ , т. е. электроны делокализованы, а при  $\alpha > \alpha^*$  их радиусы конечны.

Область существования БП показана на фазовой диаграмме в плоскости параметров  $\{u, \alpha\}$  (рис. 2). Нефизическая область, где  $u < \sqrt{2}\alpha$ , отделена прямой линией  $u = \sqrt{2}\alpha$ . БП начинает формироваться в точке  $\alpha_c = 5.7$ . При  $\alpha > \alpha_c$  БП устойчив до тех пор пока  $u < u_c(\alpha)$ , а при  $u > u_c(\alpha)$  кулоновское отталкивание доминирует над межэлектронным притяжением, обусловленным поляризацией среды, и БП распадается на два независимых полярона.

Значение критической константы связи  $\alpha_c = 5.7$  сравнимо с результатами работ [4] ( $\alpha_c = 7.3$ ) и [7] ( $\alpha_c = 6.8$ ). Небольшая разница обусловлена как методом расчета, так и различной аппроксимацией

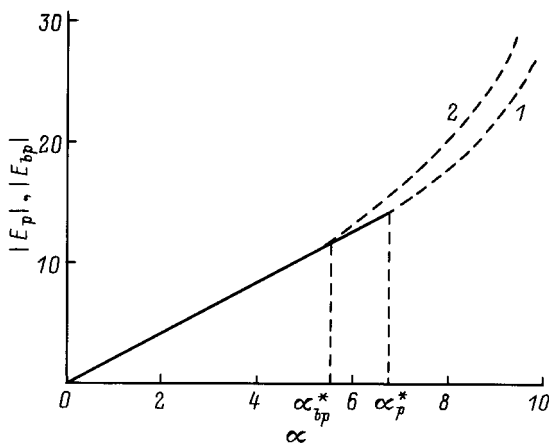


Рис. 1. Зависимости  $2E_p$  (1) и  $E_{bp}$  (2) от константы связи  $\alpha$  для  $u = \sqrt{2}\alpha$ .

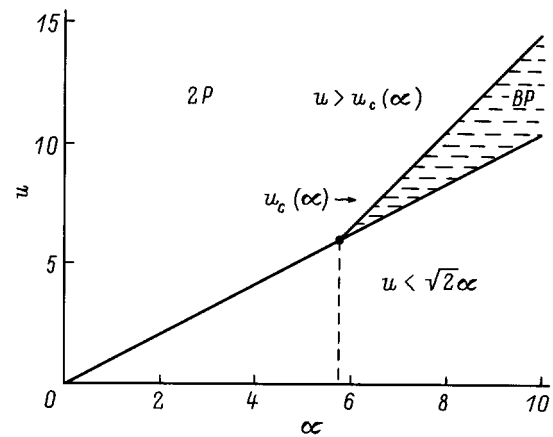


Рис. 2. Фазовая диаграмма области устойчивости биполярона (БП).

вариационных волновых функций системы фононов и электронов.

Таким образом, методом промежуточной связи показано, что образование БП большого радиуса энергетически возможно при определенных значениях параметров  $\alpha$ ,  $u$ , причем область устойчивости БП ограничена условием  $\alpha > \alpha_c$  и  $2\alpha < u < u_c(\alpha)$ . Важно отметить, что устойчивость БП обусловлена именно межэлектронными корреляциями. Более точные результаты можно получить выбором подходящих аппроксимаций волновых функций с традиционной инвариантностью [10].

Авторы благодарны В.И. Матвееву за постоянное внимание и обсуждение результатов работы.

### Список литературы

- [1] С.И. Пекар. Исследование по электронной теории кристаллов. ГИТТЛ, М.-Л. (1951).
- [2] С.Г. Супрун, Б.Я. Мойжес. ФТТ **24**, 5, 571 (1982).
- [3] D. Emin, M.S. Hillery. Phys. Rev. **B39**, 6575 (1989).
- [4] J. Adamowski. Phys. Rev. **B39**, 3649 (1989).
- [5] H. Hiramoto, Y. Toyozawa. J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 245 (1985).
- [6] G. Verbist, F.M. Peeters, J.T. Devreese. Solid State Commun. **76**, 1005 (1990).
- [7] В.К. Chakraverty, D. Feinberg, H. Zheng, M. Avignon. Solid State Commun. **64**, 1147 (1987).
- [8] В.М. Бурмистров, С.И. Пекар. ЖЭТФ **32**, 5, 1193 (1957).
- [9] T.D. Lee, F. Low, D. Pines. Phys. Rev. **90**, 297 (1953).
- [10] В.М. Буймистров, С.И. Пекар. ЖЭТФ **33**, 5, 1271 (1957).