

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Анзац Пекара и проблема сильной связи в теории полярона

В.Д. Ляхно

Подробно излагается трансляционно-инвариантная теория полярона Тулуба, построенная без использования анзаца Пекара. Фундаментальным результатом теории является более низкое значение энергии полярона, чем полученное на основе анзаца Пекара, считавшегося в пределе сильной связи асимптотически точным решением. В случае биполяронов теория даёт наилучшие значения энергии связи и критических параметров их стабильности. Обсуждаются многочисленные физические следствия, вытекающие из факта существования трансляционно-инвариантных поляронов и биполяронов.

Ключевые слова: гамильтониан Фрёлиха, преобразование Ли–Лоу–Пайнса, слабая связь, бозе-конденсат, F-центр

PACS numbers: 71.38. – k, 74.20. – z, 74.72. – h

DOI: 10.3367/UFNr.0185.201503d.0317

Содержание

1. Введение. Анзац Пекара (317).
 2. Бескоординатный гамильтониан. Слабая связь (319).
 3. Бескоординатный гамильтониан. Общий случай (319).
 4. Предел слабой связи в теории Тулуба (321).
 5. Сильная связь (321).
 6. Трансляционно-инвариантные биполяроны (322).
 7. Функционал основного состояния. Анзац Тулуба (324).
 8. Дискуссия о полноте теории Тулуба (325).
 9. Следствия, вытекающие из существования трансляционно-инвариантных поляронов и биполяронов (326).
 10. Заключение (328).
 11. Приложения (328).
Приложение 1. Приложение 2. Приложение 3.
- Список литературы (330).

1. Введение. Анзац Пекара

Как известно, теория полярона была одной из первых теорий, описывающих взаимодействие частицы с квантовым полем. Различные аспекты теории поляронов отражены в многочисленных обзорах и книгах [1–10]. Будучи нерелятивистской, эта теория не содержит расходимостей, и в течение более чем шестидесяти лет она являлась полигоном для апробации различных методов квантовой теории поля. Хотя точного решения задачи о поляроне вплоть до настоящего времени не было найдено, считалось, что свойства основного состояния

полярона известны во всех деталях. Это в первую очередь относится к предельным случаям слабой и сильной связи. Решение в пределе слабой связи дано Фрёлихом [11], а решение в пределе сильной связи — Пекаром [1, 12]. В настоящее время энергия E_0 основного состояния полярона в пределе слабой связи найдена с высокой точностью [13, 14]:

$$E_0 = -(\alpha + 0,0159196220\alpha^2 + 0,000806070048\alpha^3 + \dots)\hbar\omega_0, \quad (1.1)$$

где $\hbar\omega_0$ — энергия оптического фонона, α — константа электрон-фононной связи.

Решение задачи в противоположном пределе сильной связи было получено Пекаром в предположении, что волновая функция Ψ системы электрон + поле имеет вид

$$\Psi(r, q_1, \dots, q_i, \dots) = \psi(r) \Phi(q_1, \dots, q_i, \dots), \quad (1.2)$$

где $\psi(r)$ — волновая функция электрона, зависящая только от его координат, Φ — волновая функция поля, зависящая только от полевых координат. Сам Пекар в фундаментальной монографии [1] считал анзац (1.2) приближённым решением. В пионерских работах Боголюбова и Тябликова [15, 16] показано, что в последовательной трансляционно-инвариантной теории использование анзаца (1.2) (для введённых в [15, 16] расщеплённых координат) даёт для энергии основного состояния полярона те же результаты, что и полуклассическая теория Пекара [1, 12]. Энергия основного состояния с использованием (1.2) в настоящее время определена с высокой точностью [17, 18]:

$$E_0 = (-0,108513\alpha^2 - 2,836)\hbar\omega_0. \quad (1.3)$$

Представление об анзаце Пекара (1.2) как о точном решении задачи о поляроне сильной связи полностью утвердилось после публикации работы [19], в которой

В.Д. Ляхно. Институт математических проблем биологии РАН, ул. Институтская 4, 142290 Пущино, Московская обл., Российская Федерация
Тел. (496) 773-24-08. E-mail: lak@impb.psn.ru

Статья поступила 29 ноября 2013 г.,
после доработки 10 декабря 2014 г.

методом интегралов по траекториям, т.е. без использования анзаца (1.2), строго доказана асимптотика (1.3) (см. также обзор [20]).

До появления работы [19] предпринималось много попыток улучшить теорию сильной связи [21–26]. Причиной чувства неудовлетворённости анзацем Пекара служила трансляционная инвариантность исходного поляронного гамильтониана. При использовании анзаца для волновой функции $\psi(r)$ в (1.2) получается локализованное решение — электрон захватывается созданной им самим локализованной поляризационной потенциальной ямой. Другими словами, это решение не обладает симметрией исходного гамильтониана. Самозахват электрона в локализованную поляронную яму приводит к спонтанному нарушению симметрии системы. Подход, который был выбран для восстановления исходной симметрии, основывался на использовании вырождения состояния с нарушенной симметрией. Поскольку в однородной и изотропной среде от положения центра поляронной ямы r_0 ничего не должно зависеть, исходно локализованное решение можно "размазать" по всем положениям потенциальной ямы полярона, выбрав волновую функцию в виде линейной комбинации по всем положениям ямы.

Наиболее последовательным образом указанный подход был реализован в работе [24]. С этой целью в качестве волновой функции, являющейся собственной функцией полного импульса, бралась суперпозиция соответствующих полному импульсу плоских волн, умноженных на волновые функции, полученные из (1.2) в результате действия на них оператора трансляций. Другими словами, бралась соответствующая суперпозиция по всем положениям поляронной ямы r_0 .

Главным результатом работы [24] является то, что вычисление энергии основного состояния полярона с такой делокализованной волновой функцией привело к тому же значению, что и вычисление с локализованной функцией (1.2). В [24] также воспроизведено значение массы полярона, ранее полученное в работе Ландау и Пекара [27], на основе представления о движении в среде локализованного состояния (1.2). Результаты [24] явились важным шагом в разрешении противоречия между требованиями делокализованности трансляционно-инвариантной волновой функции и локализованности волновой функции самозахваченного состояния.

Несмотря на достигнутый в таком подходе успех, его нельзя считать полностью удовлетворительным, так как он сохраняет целый ряд противоречий, которые вытекают из самой природы использованного в этом подходе полуклассического описания. Действительно, построенная в [24] суперпозиция, с одной стороны, определяет делокализованное состояние полярона, а с другой стороны, не изменяя это состояние, можно измерить его положение и обнаружить локализованную поляронную яму с захваченным в неё электроном. Причиной такого парадокса является классичность поляронной ямы в пределе сильной связи и, как следствие, коммутация оператора полного импульса с положением поляронной ямы r_0 . Для устранения этого дефекта были предложены

подходы, в которых величина r_0 , никоим образом не являющаяся дополнительной степенью свободы, рассматривалась как таковая с наложением на функцию $r_0(r, q_1, \dots, q_i, \dots)$ дополнительных связей. Обсуждение проблем, связанных с решением задачи введения коллективных координат, содержится в обзоре [30].

Ввиду дискуссионности результатов, получаемых посредством введения в теорию полярона различными способами коллективных координат, представляется целесообразным изложить строгие результаты трансляционно-инвариантной теории, не прибегая к представлению о коллективных координатах. Цель данного обзора — описать применимый в пределе сильной связи подход, не использующий анзаца Пекара.

Решение, обладающее такими свойствами в случае полярона сильной связи, впервые было найдено в работах Тулуба [31, 32]. В течение почти полувека важность результата, полученного в [31, 32], не была осознана работающими в теории поляронов специалистами. Причина состояла в том, что для оценки основного состояния в [32] был сделан не оптимальный выбор пробной волновой функции. В результате для энергии основного состояния в [32] было получено $E_0 = -0,105\alpha^2\hbar\omega_0$, т.е. более высокое значение E_0 , чем в (1.3). Оптимальный выбор волновой функции сделан совсем недавно в работе [33]. Это привело к более низкому, чем (1.3), значению энергии основного состояния полярона: $E_0 = -0,125720\alpha^2\hbar\omega_0$. Таким образом, фактически речь идёт о неприменимости в случае полярона адиабатического приближения, которое лежит в основе физики твёрдого тела.

В данном обзоре мы изложим основные черты трансляционно-инвариантной (ТИ) теории полярона. В разделе 2 посредством канонического преобразования Гейзенберга вводится бескоординатный гамильтониан Пекара–Фрёлиха, лежащий в основе трансляционно-инвариантного описания, и с использованием пробной волновой функции Ли, Лоу и Пайнса воспроизводится предел слабой связи.

В разделе 3 излагается общая трансляционно-инвариантная теория Тулуба, справедливая для любых значений константы электрон-фононного взаимодействия. Ввиду исключительной важности подхода Тулуба приведено более подробное, чем в оригинальной статье [32], изложение, чтобы читатель при желании мог воспроизвести и проверить представленные результаты. Получено общее выражение для энергии ТИ-полярона при произвольной силе связи.

В разделе 4 рассмотрен предельный случай слабой связи. Показано, что общее выражение для энергии полярона, приведённое в разделе 3, воспроизводит предел слабой связи с высокой точностью.

В разделе 5 рассмотрен предельный случай сильной связи. Показано, что в этом предельном случае энергия основного состояния полярона имеет более низкое, чем полученное на основе анзаца Пекара, значение.

этого поля, т.е. квантовая теория поля: "...дело в том, что при квантовании механических параметров (координат и импульсов) нужно также квантовать и связанные с ними поля. В противном случае, как показали Бор и Розенфельд [29], можно предложить такой мысленный эксперимент, который состоит в одновременном измерении координаты и импульса частицы по наблюдению создаваемого ею поля и который тем самым нарушает принцип неопределённости Гейзенберга".

¹ Природа возникающих здесь трудностей ясно осознавалась на заре становления квантовой механики её основателями. Так, например, Бете отмечает [28], что для правильного квантово-механического описания взаимодействия поля с частицами требуется квантование

В разделе 6 трансляционно-инвариантная теория полярона обобщается для случая биполярона. Полученное в разделе 6 значение энергии основного состояния биполярона значительно ниже её значений из лучших вариационных расчётов, выполненных с использованием анзаца Пекара. Результаты расчётов используются для объяснения высокотемпературной сверхпроводимости на основе ТИ-биполяронов.

В разделе 7 даётся альтернативный вывод энергии ТИ-полярона и биполярона. Изложенный в разделе 7 подход позволяет получить явный вид волновых функций для полярона и биполярона. Представленные результаты свидетельствуют, что при всех значениях константы электрон-фононной связи найденные волновые функции описывают делокализованные состояния. Таким образом, показано, что в пределе сильной связи анзац Пекара не выполняется и никакого перехода в samozахваченное (т.е. локализованное) состояние с нарушенной симметрией не происходит.

Полученные результаты кардинально меняют представление о поляронах и биполяронах и в общем случае ставят под сомнение концепцию автолокализованных состояний в конденсированных системах. В последнее время прошла открытая дискуссия о полноте теории Тулуба. Основные моменты и итоги этой дискуссии отражены в разделе 8.

В разделе 9 мы обсудим некоторые вытекающие из существования ТИ-поляронов и биполяронов проблемы и следствия, из которых особый практический интерес представляют выводы, касающиеся их сверхпроводящих свойств.

Раздел 10 посвящён обсуждению ряда фундаментальных вопросов теории сильной связи, которые ещё ждут своего разрешения.

В приложениях 1–3 приведены доказательства некоторых важных утверждений, лежащих в основе рассматриваемого подхода.

2. Бескоординатный гамильтониан.

Слабая связь

Будем исходить из гамильтониана Пекара–Фрёлиха

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \sum_k V_k [a_k \exp(ikr) + a_k^+ \exp(-ikr)] + \sum_k \hbar\omega_k^0 a_k^+ a_k, \quad (2.1)$$

где a_k^+ и a_k — операторы соответственно рождения и уничтожения квантов поля с энергией $\hbar\omega_k^0 = \hbar\omega_0$, m — эффективная масса электрона, V_k — функция волнового вектора k .

Интерес к изучению гамильтониана (2.1) обусловлен также тем, что, в отличие от многих модельных гамильтонианов, рассматриваемых в теории конденсированных сред, гамильтониан Пекара–Фрёлиха (2.1) в пределе больших длин волн асимптотически точно описывает поведение нерелятивистского электрона в непрерывной полярной среде.

Координаты электрона могут быть исключены из (2.1) посредством преобразования Гейзенберга [34]:

$$S_1 = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{P} - \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k \right) \mathbf{r} \right], \quad (2.2)$$

где $\mathbf{P}$ — полный импульс системы. В результате действия S_1 на операторы поля получим

$$S_1^{-1} a_k S_1 = a_k \exp(-ikr), \quad S_1^{-1} a_k^+ S_1 = a_k^+ \exp(ikr).$$

Соответственно, преобразованный гамильтониан $\tilde{H} = S_1^{-1} H S_1$ примет вид

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} - \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k \right)^2 + \sum_k V_k (a_k + a_k^+) + \sum_k \hbar\omega_k^0 a_k^+ a_k. \quad (2.3)$$

Так как гамильтониан (2.3) не содержит координат электрона, очевидно, что решение задачи о поляроне, полученное на основе (2.3), является трансляционно-инвариантным. Ли, Лоу и Пайнс [35] применили для исследования основного состояния (2.3) пробную волновую функцию $|\Psi\rangle_{\text{LLP}}$:

$$|\Psi\rangle_{\text{LLP}} = S_2 |0\rangle, \quad (2.4)$$

где

$$S_2 = \exp \left[\sum_k f_k (a_k^+ - a_k) \right], \quad (2.5)$$

f_k — вариационные параметры, имеющие смысл величины смещения осцилляторов поля из своих равновесных положений, $|0\rangle$ — вакуумная волновая функция. Величина f_k в S_2 (2.5) определяется при минимизации энергии $E = \langle 0 | S_2^{-1} \tilde{H} S_2 | 0 \rangle$, что при $P = 0$ даёт

$$E = 2 \sum_k f_k V_k + \frac{\hbar^2}{2m} \left[\sum_k \mathbf{k} f_k^2 \right]^2 + \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f_k^2 + \sum_k \hbar\omega_k^0 f_k^2, \quad (2.6)$$

$$f_k = -\frac{V_k}{\hbar\omega_k^0 + \hbar^2 k^2 / (2m)}. \quad (2.7)$$

В случае ионного кристалла

$$V_k = \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0}{\tilde{\epsilon}V}} = \frac{\hbar\omega_0}{ku^{1/2}} \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2}, \quad (2.8)$$

$$u = \left(\frac{2m\omega_0}{\hbar} \right)^{1/2}, \quad \alpha = \frac{1}{2} \frac{e^2 u}{\hbar\omega_0 \tilde{\epsilon}}, \quad \tilde{\epsilon}^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1},$$

где e — заряд электрона, ϵ_∞ и ϵ_0 — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости соответственно, α — константа электрон-фононной связи. Подстановка (2.8) в (2.6), (2.7) даёт величину энергии основного состояния $E = -\alpha\hbar\omega_0$, т.е. энергию полярона слабой связи в первом порядке по α .

Проблема перехода к случаю сильной связи в бескоординатном гамильтониане (2.3) была решена на основе общей трансляционно-инвариантной теории, построенной в работе Тулуба [32]. Основные черты этой теории представлены в разделе 3.

3. Бескоординатный гамильтониан.

Общий случай

Для построения общей трансляционно-инвариантной теории в [31, 32] использовано каноническое преобра-

зование гамильтониана (2.3) с помощью оператора S_2 (2.5), которое приводит к сдвигу операторов поля:

$$S_2^{-1} a_k S_2 = a_k + f_k, \quad S_2^{-1} a_k^+ S_2 = a_k^+ + f_k. \quad (3.1)$$

Полученный в результате преобразования гамильтониан $\tilde{H} = S_2^{-1} \tilde{H} S_2$ имеет вид

$$\tilde{H} = H_0 + H_1, \quad (3.2)$$

где

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k \left(\hbar \omega_k^0 - \frac{\hbar \mathbf{k} \mathbf{P}}{m} \right) f_k^2 + \frac{1}{2m} \left(\sum_k \mathbf{k} f_k^2 \right)^2 + \mathcal{H}_0, \quad (3.3)$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_k \hbar \omega_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2m} \sum_{k,k'} \mathbf{k} \mathbf{k}' f_k f_{k'} (a_k a_{k'} + a_k^+ a_{k'}^+ + a_k^+ a_{k'} + a_{k'}^+ a_k), \quad (3.4)$$

$$\hbar \omega_k = \hbar \omega_k^0 - \frac{\hbar \mathbf{k} \mathbf{P}}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \sum_{k'} \hbar \mathbf{k}' f_{k'}^2. \quad (3.5)$$

Гамильтониан H_1 содержит линейные, тройные и четверные по операторам рождения и уничтожения члены. Соответствующим выбором волновой функции, диагонализующей квадратичную форму (3.4), математическое ожидание H_1 обращается в нуль (см. приложение 1). Далее будем считать, что $\hbar = 1$, $\omega_0 = 1$, $m = 1$, $P = 0$.

Для приведения $\mathcal{H}_0$ к диагональному виду положим

$$q_k = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} (a_k + a_k^+), \quad p_k = -i \sqrt{\frac{\omega_k}{2}} (a_k - a_k^+), \quad (3.6)$$

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{k} f_k \sqrt{2\omega_k}.$$

С учётом (3.6) выражение (3.4) примет вид

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_k (p_k^+ p_k + \omega_k^2 q_k^+ q_k) + \frac{1}{2} \left(\sum_k \mathbf{z}_k q_k \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_k \omega_k. \quad (3.7)$$

Из (3.7) вытекает следующее уравнение движения для оператора q_k :

$$\ddot{q}_k + \omega_k^2 q_k = -\mathbf{z}_k \sum_{k'} \mathbf{z}_{k'} q_{k'}. \quad (3.8)$$

Будем искать решение системы (3.8) в виде

$$q_k(t) = \sum_{k'} \Omega_{kk'} \xi_{k'}(t), \quad \xi_k(t) = \xi_k^0 \exp(i v_k t). \quad (3.9)$$

В результате для матрицы $\Omega_{kk'}$ получим систему уравнений

$$(v_{k'}^2 - \omega_k^2) \Omega_{kk'} = \mathbf{z}_k \sum_{k''} \mathbf{z}_{k''} \Omega_{k'' k'}. \quad (3.10)$$

Рассмотрим определитель этой системы, получающийся при замене в (3.10) собственных значений v_k^2 величиной s , которая может быть отличной от v_k^2 . Определитель такой

системы имеет вид

$$\det |(s - \omega_k^2) \delta_{kk'} - \mathbf{z}_k \mathbf{z}_{k'}| = \prod_k (s - v_k^2). \quad (3.11)$$

С другой стороны, согласно работе Вентцеля² [36],

$$\det |(s - \omega_k^2) \delta_{kk'} - \mathbf{z}_k \mathbf{z}_{k'}| = \prod_k (s - \omega_k^2) \left(1 - \frac{1}{3} \sum_{k'} \frac{\mathbf{z}_{k'}^2}{s - \omega_{k'}^2} \right)^3. \quad (3.12)$$

Удобно ввести величину

$$\Delta(s) = \frac{\prod_k (s - v_k^2)}{\prod_k (s - \omega_k^2)}. \quad (3.13)$$

Из (3.11) и (3.12) следует, что

$$\Delta(s) = \left(1 - \frac{1}{3} \sum_k \frac{\mathbf{z}_k^2}{s - \omega_k^2} \right)^3. \quad (3.14)$$

Из (3.11), (3.12) также следует, что перенормированные взаимодействия частоты поля v_k определяются решением уравнения

$$\Delta(v_k^2) = 0. \quad (3.15)$$

Изменение энергии системы ΔE , обусловленное взаимодействием электрона с полем, выражается как

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_k (v_k - \omega_k). \quad (3.16)$$

Чтобы выразить ΔE через $\Delta(s)$, воспользуемся подходом Вентцеля [36]. Следуя [36], запишем тождество

$$\begin{aligned} \sum_k (f(v_k^2) - f(\omega_k^2)) &= \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C ds f(s) \sum_k \left(\frac{1}{s - v_k^2} - \frac{1}{s - \omega_k^2} \right) = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C ds f(s) \frac{d}{ds} \ln \Delta(s) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C ds f'(s) \ln \Delta(s), \end{aligned} \quad (3.17)$$

где интегрирование проводится по контуру, изображённому на рис. 1.

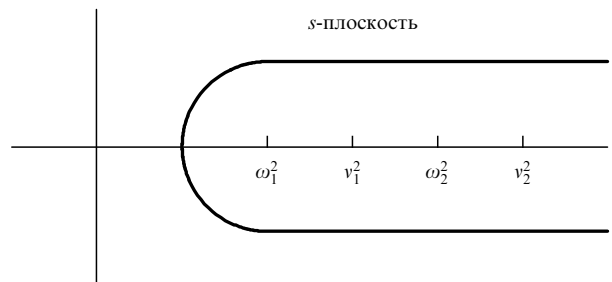


Рис. 1. Контур C .

² В работе Вентцеля [36] z_k — не векторная, а скалярная функция, поэтому там нет "куба" в (3.12). Обобщение для векторного случая дано в [31].

Полагая $f(s) = \sqrt{s}$, получим

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_k (v_k - \omega_k) = -\frac{1}{8\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln A(s). \quad (3.18)$$

Переходя в (3.14) от суммирования к интегрированию с помощью соотношения

$$\sum_k = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k,$$

в непрерывном случае с использованием для $\mathbf{z}_k$ выражения (3.14) находим

$$A(s) = D^3(s), \quad D(s) = 1 - \frac{2}{3(2\pi)^3} \int \frac{k^2 f_k^2 \omega_k^2}{s - \omega_k^2} d^3k. \quad (3.19)$$

В результате для полной энергии электрона имеем

$$E = \Delta E + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k f_k^2 \omega_k^0. \quad (3.20)$$

Представленные здесь результаты являются общими и справедливыми для самых разных моделей поляронов (т.е. для любых функций V_k и ω_k^0). В разделах 4 и 5 мы рассмотрим предельные случаи слабой и сильной связи, вытекающие из общего выражения (3.20). Отметим, что при $\mathbf{P} \neq 0$, согласно [31], выражение (3.20) принимает вид

$$E = \frac{P^2}{2m} + \Delta E(\mathbf{P}) + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k f_k^2 \omega_k^0,$$

$$\Delta E(\mathbf{P}) = -\frac{1}{8\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln \prod_{i=1}^3 D^i(s),$$

$$D^i(s) = 1 - \sum_k \frac{(z_k^i)^2}{s - \omega_k^2},$$

где z_k^i — i -я компонента вектора $\mathbf{z}_k$. При этом функции f_k , ω_k и z_k следует считать зависящими как от $|\mathbf{k}|$, так и от $\mathbf{kP}$.

4. Предел слабой связи в теории Тулуба

Величины f_k в выражении для полной энергии E (3.20) должны находиться из условия минимума $\delta E / \delta f_k = 0$, которое приводит к следующему интегральному уравнению для определения f_k :

$$f_k = -\frac{V_k}{1 + k^2/2\mu_k}, \quad \mu_k^{-1} = \frac{\omega_k}{2\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \frac{1}{(s - \omega_k^2)D(s)}. \quad (4.1)$$

В случае слабой связи $\alpha \rightarrow 0$ и уравнения (4.1) можно решать по теории возмущений. В первом приближении при $\alpha \rightarrow 0$ величина $D(s) = 1$ и для μ_k^{-1} получим выражение

$$\mu_k^{-1} = \frac{\omega_k}{2\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \frac{1}{s - \omega_k^2} = 1. \quad (4.2)$$

Соответственно, для f_k из (4.1) имеем

$$f_k = -\frac{V_k}{1 + k^2/2}. \quad (4.3)$$

Для входящей в полную энергию величины ΔE получим

$$\Delta E = -\frac{3}{8\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln D(s), \quad (4.4)$$

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

Вычисление входящих в (4.4) интегралов с учётом (4.3) даёт $\Delta E = (\alpha/2)\hbar\omega_0$. Вычисляя остальные члены, входящие в выражение (3.20), получим первый член разложения полной энергии полярона по константе связи α : $E = -\alpha\hbar\omega_0$.

В работах [31, 37, 38] развита общая схема расчёта следующих членов разложения по α . В частности, для собственной энергии и эффективной массы полярона получено [38]

$$E = -(\alpha + 0,01592\alpha^2)\hbar\omega_0, \quad (4.5)$$

$$m^* = \left(1 + \frac{\alpha}{6} + 0,02362\alpha^2\right)m.$$

Таким образом, с точностью до членов $O(\alpha^3)$ выражение для энергии полярона, вычисленное на основе подхода Тулуба с использованием теории возмущений, совпадает с результатом точного расчёта (1.1) (см. раздел 7).

5. Сильная связь

Случай сильной связи гораздо более сложен. Для выяснения характера решения в области сильной связи рассмотрим прежде всего аналитические свойства функции $D(s)$. Представим с этой целью функцию $D(s)$ в виде

$$D(s) = D(1) + \frac{s-1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 \omega_k dk}{(\omega_k^2 - 1)(\omega_k^2 - s)}, \quad (5.1)$$

где $D(1)$ — значение $D(s)$ при $s = 1$,

$$D(1) = 1 + Q \equiv 1 + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 \omega_k}{\omega_k^2 - 1} dk. \quad (5.2)$$

Из (3.19) также следует, что

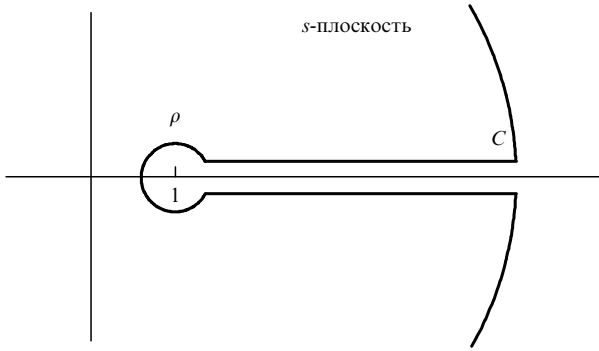
$$D(s) = 1 - \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{\omega_k k^4 f_k^2}{s - \omega_k^2} dk. \quad (5.3)$$

Функция $D(s)$ как функция комплексного переменного s обладает следующими свойствами: 1) $D(s)$ имеет разрез вдоль вещественной оси от $s = 1$ до $s = \infty$ и не имеет других особенностей; 2) $D^*(s) = D(s^*)$; 3) при $s \rightarrow \infty$ $sD(s)$ возрастает не медленнее, чем s . Перечисленные свойства позволяют представить функцию $[(s-1)D(s)]^{-1}$ в виде (см. приложение 2)

$$\frac{1}{(s-1)D(s)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C+\rho} \frac{ds'}{(s'-s)(s'-1)D(s')}. \quad (5.4)$$

Контур интегрирования $C + \rho$ показан на рис. 2.

Подынтегральная функция в (5.4) имеет полюс при $s' = 1$ и разрез от $s' = 1$ до $s' = \infty$. Интегрируя в (5.4) вдоль верхней и нижней сторон разреза, получим сле-

Рис. 2. Контур $C + \rho$.

дующее интегральное уравнение для $D^{-1}(s)$:

$$\frac{1}{D(s)} = \frac{1}{1+Q} + \frac{s-1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 \omega_k dk}{(s - \omega_k^2)(\omega_k^2 - 1)|D(\omega_k^2)|^2}. \quad (5.5)$$

С помощью интегрирования по частям выражение (3.18) для ΔE может быть представлено в виде

$$\Delta E = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dk k^4 f_k^2 \omega_k \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{\sqrt{s}}{(s - \omega_k^2)^2} \frac{1}{D(s)} ds. \quad (5.6)$$

Из (5.5), (5.6) находим

$$\begin{aligned} \Delta E = & \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 dk}{2(1+Q)} + \\ & + \frac{1}{12\pi^4} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 p^4 f_p^2 \omega_p [\omega_k \omega_p + \omega_k(\omega_k + \omega_p) + 1]}{(\omega_k + \omega_p)^2 (\omega_p^2 - 1) |D(\omega_p^2)|^2} dp dk. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Уравнение (4.1) для μ_k^{-1} можно, согласно (5.5), представить в виде

$$\mu_k^{-1} = \frac{1}{1+Q} + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{p^4 f_p^2 (\omega_k \omega_p + 1) dp}{(\omega_p^2 - 1)(\omega_k + \omega_p) |D(\omega_p^2)|^2}. \quad (5.8)$$

Уравнения (4.1), (5.8) для нахождения f_k и вычисления энергии полярона (3.20), (5.7) очень сложны, и их точное решение вряд ли возможно. Для приближённого расчёта энергии E (3.20), (5.7) в [32] был использован прямой вариационный принцип. В качестве пробной функции была взята гауссова функция вида

$$f_k = -V_k \exp\left(-\frac{k^2}{2a^2}\right), \quad (5.9)$$

где a — варьируемый параметр, причём, как можно убедиться, при сильной связи $a \gg 1$. Подстановка (5.9) в (3.19) для действительной и мнимой частей $D(s)$ даёт (см. приложение 3)

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} D(\omega_k^2) &= 1 + \lambda v(y), \quad \operatorname{Im} D(\omega_k^2) = \frac{k^3 f_k^2}{6\pi}, \\ v(y) &= 1 - y \exp(-y^2) \int_0^y \exp(t^2) dt - \\ &- y \exp(y^2) \int_y^\infty \exp(-t^2) dt, \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$\lambda = \frac{4\alpha a}{3\sqrt{2}\pi}, \quad y = \frac{k}{a}.$$

В пределе сильной связи ($\alpha \gg 1$) выражение для энергии E , определяемое (3.20), с учётом (5.7) примет вид

$$E = \frac{3}{16} a^2 \left[1 + q\left(\frac{1}{\lambda}\right) \right] - \frac{\alpha a}{\sqrt{\pi}} \left(2 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \quad (5.11)$$

$$q\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\exp(-y^2)(1 - \Omega(y)) dy}{(1/\lambda + v(y))^2 + \pi y^2 \exp(-2y^2)/4}, \quad (5.12)$$

$$\Omega(y) = 2y^2 \left[(1 + 2y^2)y \exp(y^2) \int_y^\infty \exp(-t^2) dt - y^2 \right].$$

При $\lambda \rightarrow \infty$ интеграл (5.12) имеет максимум при $y^4 = 3\lambda/4$, если выбрать функцию f_k в виде (5.9), однако при учёте фактической ограниченности области интегрирования по y этой особенности не возникает (см. раздел 8).

В работе [32] при вычислении (5.12) полагалось, что в пределе сильной связи $1/\lambda = 0$. В результате численного интегрирования было получено значение $q(0) = 5,75$, откуда, варьируя энергию E (5.11) по a , находим

$$E = -0,105\alpha^2 \hbar \omega_0. \quad (5.13)$$

Сравнение (5.13) с (1.3) показывает, что значение E (5.13) при $\alpha \rightarrow \infty$ лежит выше, чем точное значение в теории Пекара (1.3). По этой причине вплоть до недавнего времени считалось, что теория Тулуба применительно к полярону не даёт новых результатов.

Ситуация кардинально поменялась после публикации работы [33], в которой было показано, что выбор пробной функции для минимизации энергии (3.20) в виде (5.9) не является оптимальным, поскольку не удовлетворяет вириальным соотношениям. Как показано в [33], оптимальный выбор функции f_k должен содержать множитель $\sqrt{2}$ перед экспонентой в выражении (5.9). Минимизация энергии (3.20) с оптимальной пробной функцией приводит к величине

$$E = -0,125720\alpha^2 \hbar \omega_0. \quad (5.14)$$

Результат (5.14) является фундаментальным. Прежде всего он означает, что анзац Пекара не даёт точного решения. Хотя результат (5.14) относится к конкретному случаю гамильтониана Пекара–Фрёлиха с V_k , даваемым (2.8), концептуально сделанный вывод должен быть справедливым для всех типов автолокализованных состояний. Особый интерес представляет случай биполяронов в связи с возможной их важной ролью в сверхпроводимости.

6. Трансляционно-инвариантные биполяроны

Большое внимание, уделяемое в последнее время проблеме биполярона, связано с попытками объяснить явление сверхпроводимости на основе механизма бозеконденсации биполяронного газа. В связи с этим изучение условий, при которых биполяронные состояния будут стабильными, имеет первостепенное значение. Подробное изложение теории биполяронов большого радиуса, которые в настоящее время являются основными кандидатами на роль заряженных бозонов, образующих конденсат Бозе–Эйнштейна со спариванием в реальном пространстве, дано в обзорах [7, 8, 39].

Изучение процесса образования устойчивого двухэлектронного состояния в кристалле, или биполярона, как правило, связано с нахождением парного взаимодей-

ствия между двумя поляронами как функции расстояния между ними [8]. Область существования биполарона большого радиуса ограничена со стороны константы связи α довольно большим значением α_c — при $\alpha < \alpha_c$ связанное биполаронное состояние не существует. В связи с требованием большой величины α_c , которое может не выполняться в высокотемпературных сверхпроводниках, ряд работ был посвящён изучению вклада взаимодействий и симметрий спаривания других типов [40, 41].

Ниже мы ограничимся рассмотрением только электрон-фононного взаимодействия Пекара–Фрёлиха, поскольку рассматриваемый подход можно обобщать и для взаимодействий других типов. Это представляется тем более актуальным в связи с тем, что в последнее время были получены веские аргументы, позволяющие считать электрон-фононное взаимодействие в высокотемпературных сверхпроводниках сильным [42–44]. Имеются также аргументы в пользу того, что вследствие слабого экранирования высокочастотных оптических фононов описание электрон-фононного взаимодействия в высокотемпературных сверхпроводниках посредством дальнего взаимодействия Фрёлиховского типа [45] является более адекватным, чем его описание в рамках контактного взаимодействия Холстейновской модели полярона [46].

До появления работ [47–49] низшие значения энергии биполаронных состояний, определяемых электрон-фононным взаимодействием, для $\alpha < 8$ были получены в [50–52], а для $\alpha > 8$ — в [52–55]. Попытки найти трансляционно-инвариантное решение биполаронной проблемы вариационными методами посредством прямой вариации волновой функции двухэлектронной системы [39, 56, 57] приводили к более высоким значениям энергии основного состояния биполарона, чем значения энергии, полученные в расчётах, в которых использовалась волновая функция, не обладающая трансляционной инвариантностью [51, 52, 55, 58]. Ниже мы изложим результаты, полученные в [47–49] для биполарона на основе трансляционно-инвариантного подхода.

Будем исходить из гамильтониана Пекара–Фрёлиха для биполарона [8]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}_2} + \sum_k \hbar \omega_k^0 a_k^+ a_k + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) + \sum_k [V_k \exp(ikr_1) a_k + V_k \exp(ikr_2) a_k + \text{h.c.}], \quad (6.1)$$

$$U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \frac{e^2}{\varepsilon_\infty |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|},$$

где $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ — координаты соответственно первого и второго электрона, величина U описывает кулоновское отталкивание между электронами, h.c. — эрмитово сопряжённые члены.

В системе центра масс гамильтониан (6.1) примет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_e} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu_e} \Delta_r + U(r) + \sum_k \hbar \omega_k^0 a_k^+ a_k + \sum_k 2V_k \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} [a_k \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) + \text{h.c.}], \quad (6.2)$$

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad M_e = 2m, \quad \mu_e = \frac{m}{2}.$$

Далее будем полагать $\hbar = 1$, $\omega_k^0 = 1$, $M_e = 1$ (соответственно, $\mu_e = 1/4$).

Координаты центра масс $\mathbf{R}$ могут быть исключены из гамильтониана (6.2) посредством канонического преобразования Гейзенберга:

$$S_1 = \exp \left(-i \sum_k \mathbf{k} a_k^+ a_k \right) \mathbf{R},$$

$$\tilde{H} = S_1^{-1} H S_1 = -2\Delta_r + U(r) + \sum_k a_k^+ a_k + \sum_k 2V_k \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} (a_k + a_k^+) + \frac{1}{2} \left(\sum_k \mathbf{k} a_k^+ a_k \right)^2. \quad (6.3)$$

Из формулы (6.3) следует, что точное решение биполаронной проблемы определяется волновой функцией $\psi(r)$, содержащей только относительные координаты r и, следовательно, являющейся трансляционно-инвариантной.

Усреднение $\tilde{H}$ по $\psi(r)$ приводит к гамильтониану

$$\bar{H} = \frac{1}{2} \left(\sum_k \mathbf{k} a_k^+ a_k \right)^2 + \sum_k a_k^+ a_k + \sum_k \bar{V}_k (a_k + a_k^+) + \bar{T} + \bar{U}, \quad (6.4)$$

$$\bar{V}_k = 2V_k \left\langle \psi \left| \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} \right| \psi \right\rangle,$$

$$\bar{U} = \langle \psi | U(r) | \psi \rangle, \quad \bar{T} = -2 \langle \psi | \Delta_r | \psi \rangle.$$

Гамильтониан (6.4) отличается от гамильтониана (2.3) заменой V_k в (2.3) величиной $\bar{V}_k$ и добавлением к гамильтониану постоянных $\bar{T}$ и $\bar{U}$. Таким образом, повторяя вывод, проведённый в разделе 3, для энергии биполарона E_{bp} , получим

$$E_{bp} = \Delta E + 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 + \bar{T} + \bar{U}, \quad (6.5)$$

где ΔE определяется выражением (5.7). Из соотношения (6.5) можно получить уравнения для определения энергии биполарона, варьируя E_{bp} по f_k и ψ . Так как решение выведенных таким образом уравнений представляет большую трудность, для фактического определения энергии биполарона используем прямой вариационный подход, полагая [49]

$$f_k = -N \bar{V}_k \exp \left(-\frac{k^2}{2\mu} \right), \quad (6.6)$$

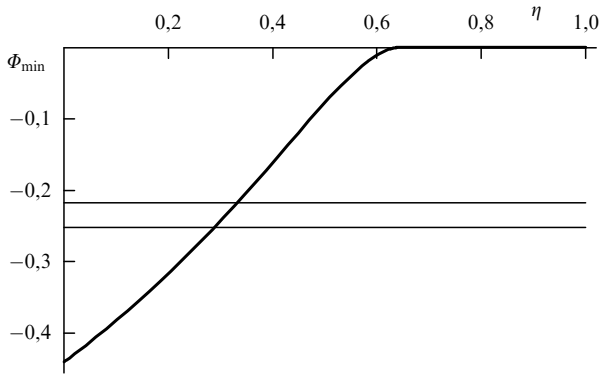
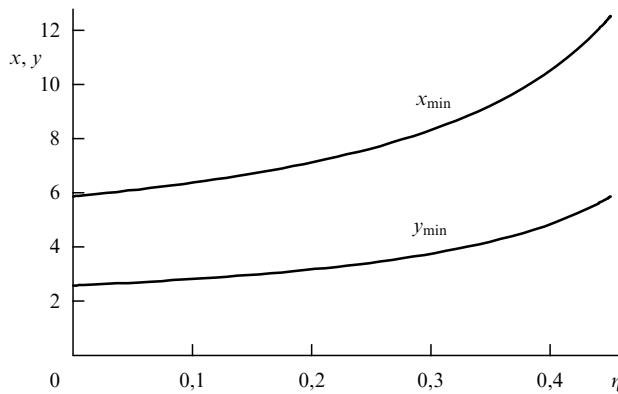
$$\psi(r) = \left(\frac{2}{\pi \ell^2} \right)^{3/4} \exp \left(-\frac{r^2}{\ell^2} \right),$$

где N , μ , ℓ — вариационные параметры. При $N = 1$ выражение (6.6) воспроизводит результаты работы [47], а при $N = 1$, $\mu \rightarrow \infty$ — результаты работы [48].

Подстановка (6.6) в выражение для полной энергии после минимизации по параметру N приводит к следующему уравнению:

$$E(x, y; \eta) = \Phi(x, y; \eta) \alpha^2, \quad (6.7)$$

$$\Phi(x, y; \eta) = \frac{6}{x^2} + \frac{20,25}{x^2 + 16y} - \frac{16\sqrt{x^2 + 16y}}{\sqrt{\pi}(x^2 + 8y)} + \frac{4\sqrt{2/\pi}}{x(1 - \eta)}.$$

Рис. 3. Функция $\Phi_{\min}(\eta)$.Рис. 4. Функции $x_{\min}(\eta)$, $y_{\min}(\eta)$.

Здесь x, y — варьируемые параметры, $x = \ell\alpha$, $y = \alpha^2/\mu$; $\eta = \varepsilon_{\infty}/\varepsilon_0$. Обозначим через $\Phi_{\min}$ минимальное значение функции Φ от параметров x и y . На рисунке 3 приведена зависимость $\Phi_{\min}$ от параметра η , а на рис. 4 показаны зависимости $x_{\min}$ и $y_{\min}$ от параметра η .

Из рисунка 3 видно, что $E_{\min}(\eta=0) = -0,440636\alpha^2$ — самое низкое из всех ранее полученных вариационным способом значение энергии основного состояния биполярона. Горизонтальные линии на рис. 3 соответствуют энергиям $E_1 = -0,217\alpha^2$ и $E_2 = -0,2515\alpha^2$, где $E_1 = 2E_{p_1}$, E_{p_1} — энергия основного состояния полярона Пекара (1.3), $E_2 = 2E_{p_2}$, E_{p_2} — энергия основного состояния трансляционно-инвариантного полярона (5.14). Пересечение этих линий с кривой $E_{\min}(\eta)$ даёт критические значения параметров $\eta = \eta_{c_1} = 0,3325$ и $\eta = \eta_{c_2} = 0,289$. При $\eta > \eta_{c_2}$ происходит распад биполярона на два трансляционно-инвариантных полярона, а при $\eta > \eta_{c_1}$ биполярон распадается на пекаровские поляроны. Значения минимизирующих параметров $x_{\min}$, $y_{\min}$ для указанных значений η следующие: $x_{\min}(0) = 5,87561$, $y_{\min}(0) = 2,58537$, $x_{\min}(0,289) = 8,16266$, $y_{\min}(0,289) = 3,68098$, $x_{\min}(0,3325) = 8,88739$, $y_{\min}(0,3325) = 4,03682$.

Критическое значение константы электрон-фононной связи α для образования ТИ-биполярона, определяемое из сравнения выражений для энергий в пределе слабой связи (удвоенная энергия полярона слабой связи $E = -2\alpha\hbar\omega_0$) и сильной связи ($E = -0,440636\alpha^2\hbar\omega_0$), составляет $\alpha_c \approx 4,54$ и является самой низкой из оценок, сделанных вариационным методом. Подчеркнём условность последней величины. Гамильтониан (6.4) совпа-

дает по структуре с одноэлектронным гамильтонианом (2.3), следовательно, как и в случае полярона, энергия биполярона, согласно [20], является аналитической функцией α . По этой причине в точке $\alpha = \alpha_c$ энергия биполярона не имеет никаких особенностей и биполяронное состояние существует во всём диапазоне изменения параметров α и η : $0 < \alpha < \infty$; $0 < \eta < 1 - 1/2\sqrt{2}$, при которых $E < 0$.

Вопрос о существовании значения α_c , при котором возможен распад биполяронного состояния на отдельные поляроны, требует проведения расчётов при промежуточной силе связи. В частности, возможен сценарий, в котором энергия биполярона для некоторых значений η будет меньше энергии двух отдельных поляронов при любых значениях α , т.е. биполяронное состояние существует всегда. Отметим, что для полученного основного состояния с высокой точностью выполняется теорема вириала.

Проблема возникновения высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) и её объяснение образованием биполяронных состояний рассматривались во многих статьях и обзорах [7, 8, 59, 60]. В этих работах существование ВТСП объясняется бозе-конденсацией биполяронного газа. Температура бозе-конденсации $T_0 = 3,31\hbar^2 n_0^{2/3}/(k_B m_{bp})$, которая полагается равной критической температуре сверхпроводящего перехода T_c при $m_{bp} \approx 10m$, в зависимости от концентрации биполяронов n_0 варьируется в широком диапазоне: от $T_0 = 3$ К при $n = 10^{18}$ см⁻³ до $T_0 \approx 300$ К при $n \approx 10^{21}$ см⁻³. В последнем случае концентрация биполяронов настолько значительна, что в случае биполяронного газа, так же как и в случае куперовских пар, должен проявиться составной характер биполяронов, при котором биполярон перестаёт вести себя как отдельная частица, а при ещё больших концентрациях биполярон должен распадаться на поляроны. В соответствии с (6.6) характерный размер биполяронного состояния ℓ в размерных единицах выражается как $\ell_{\text{corr}} = \hbar^2 \bar{e} x(\eta)/(me^2)$, где ℓ_{corr} имеет смысл корреляционной длины, а зависимость $x(\eta)$ показана на рис. 4. Из рисунка 4 видно, что во всём диапазоне изменения η , в котором биполяронное состояние стабильно, величина x изменяется слабо: от $x(\eta=0) \approx 6$ до $x(\eta=0,289) \approx 8$.

Таким образом, даже при $\eta = \eta_c$ критическая величина концентрации, при которой может быть заметным составной характер биполярона, имеет порядок $n_c \approx 10^{21}$ см⁻³. Этот результат свидетельствует в пользу возможности существования биполяронного механизма ВТСП в оксидах меди.

7. Функционал основного состояния.

Анзац Тулуба

Для диагонализации квадратичной формы (3.4) можно использовать преобразование Боголюбова–Тябликова [61]. Обозначим через a_k операторы физических частиц, в которых $\mathcal{H}_0$ — диагональный оператор.

Диагонализуем квадратичную форму посредством преобразования

$$\begin{aligned} a_k &= \sum_{k'} M_{1kk'} a_{k'} + \sum_{k'} M_{2kk'}^* a_{k'}^+, \\ a_k^+ &= \sum_{k'} M_{1kk'}^* a_{k'}^+ + \sum_{k'} M_{2kk'} a_{k'}, \end{aligned} \quad (7.1)$$

так чтобы выполнялись соотношения

$$[a_k, a_{k'}^+] = [\alpha_k, \alpha_{k'}^+] = \delta_{kk'}, \quad [H_0, \alpha_k^+] = \omega_k \alpha_k^+. \quad (7.2)$$

Из свойств унитарного преобразования (7.1) следует

$$M_2 M_1^+ = M_1^* M_2^T, \quad (7.3)$$

$$(M_1^+)^{-1} = M_1 - M_2^* (M_1^*)^{-1} M_2.$$

Преобразование операторов, обратное по отношению к (7.1), с учётом (7.3) примет вид

$$\alpha_k = \sum_{k'} M_{1kk'}^* a_{k'} - \sum_{k'} M_{2kk'}^* a_{k'}^+, \quad (7.4)$$

$$\alpha_k^+ = \sum_{k'} M_{1kk'} a_{k'}^+ - \sum_{k'} M_{2kk'} a_{k'}.$$

Согласно [31, 32] матрицы M_1 и M_2 имеют вид

$$(M_{1,2})_{kk'} = \frac{1}{2} (\omega_k \omega_{k'})^{-1/2} (\omega_k \pm \omega_{k'}) \times$$

$$\times \left[\delta(k - k') + (\mathbf{k}\mathbf{k}') f_k f_{k'} \frac{2(\omega_k \omega_{k'})^{1/2}}{(\omega_k^2 - \omega_{k'}^2 \pm i\varepsilon) D_{\pm}(\omega_k^2)} \right], \quad (7.5)$$

$$D_{\pm}(\omega_p^2) = 1 + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{f_k^2 k^4 \omega_k}{\omega_k^2 - \omega_p^2 \pm i\varepsilon} dk.$$

Верхний знак (+) в правой части (7.5) относится к M_1 , а нижний знак (–) — к M_2 . В результате диагонализации квадратичная форма (3.4) принимает вид

$$\mathcal{H}_0 = \Delta E + \sum_k v_k \alpha_k^+ \alpha_k. \quad (7.6)$$

Функционал основного состояния $A_0|0\rangle$ выбирается из условия

$$\alpha_k A_0|0\rangle = 0. \quad (7.7)$$

Чтобы установить явный вид функционала A_0 , удобно использовать для операторов a_k, a_k^+ фоковское представление [62, 63], ставящее в соответствие оператору a_k^+ некоторое c -число $\bar{a}_k$, а оператору a_k — оператор $d/\bar{d}\bar{a}_k$. Тогда условие (7.7) с учётом (7.4) примет вид

$$\left(\sum_{k'} M_{1kk'}^* \frac{d}{d\bar{a}_{k'}} - \sum_{k'} M_{2kk'}^* \bar{a}_{k'} \right) A_0|0\rangle = 0. \quad (7.8)$$

Непосредственной подстановкой в (7.8) легко убедиться, что решение уравнения (7.8) выражается как

$$A_0 = C \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{k, k'} a_k^+ A_{kk'} a_{k'}^+ \right), \quad (7.9)$$

где C — некоторая постоянная. Для этого достаточно вернуться в (7.9) к величинам $\bar{a}_k$ вместо a_k^+ . Матрица A удовлетворяет соотношениям

$$A = M_2^* (M_1^*)^{-1}, \quad A = A^T. \quad (7.10)$$

Таким образом, энергия основного состояния, соответствующая функционалу A_0 , равна

$$\langle 0|A_0^+ \mathcal{H}_0 A_0|0\rangle = \Delta E. \quad (7.11)$$

В приложении 1 показано, что $\langle 0|A_0^+ H_1 A_0|0\rangle \equiv 0$.

Из (7.9), (2.2), (2.5) следует, что волновая функция основного состояния полярона $|\psi\rangle_p$ имеет вид

$$|\psi\rangle_p = C \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k \mathbf{r} \right) \exp \left[\sum_k f_k (a_k^+ - a_k) \right] A_0|0\rangle. \quad (7.12)$$

Соответственно, волновая функция биполярона $|\psi\rangle_{bp}$ с учётом (5.3), (5.4) выражается как

$$|\psi\rangle_{bp} = C \psi(r) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k \mathbf{R} \right) \times$$

$$\times \exp \left[\sum_k f_k (a_k^+ - a_k) \right] A_0|0\rangle. \quad (7.13)$$

Из (7.12), (7.13) следует, что волновые функции полярона и биполярона делокализованы по всему пространству и они не могут быть представлены в виде анзаца (1.2).

Из (7.12), (7.13) также следует, что причина, по которой попытка Ли, Лоу и Пайнса [35] исследовать энергию основного состояния полярона во всём диапазоне изменения α оказалась неуспешной, состоит в выборе плохой пробной функции (2.4), в которой отсутствовал множитель, соответствующий функционалу A_0 .

Необходимо, однако, подчеркнуть, что, несмотря на радикальное улучшение качества пробной функции введением в функции Ли–Лоу–Пайнса множителя A_0 , позволяющего рассматривать случаи как слабой, так и сильной связи, получаемые с её помощью результаты не являются точными. Тот факт, что волновая функция Тулуба представляет собой анзац, следует из её свойств:

$$\langle 0|A_0^+ H_1 A_0|0\rangle = 0, \quad E = \langle 0|A_0^+ H_0 A_0|0\rangle, \quad H_0 A_0|0\rangle = E A_0|0\rangle. \quad (7.14)$$

Будучи анзацем, решение Тулуба даёт решение задачи о поляроне в определённом классе функций, обладающих структурой $A_0|0\rangle$. Тот факт, что анзац Тулуба не является точным решением задачи, следует хотя бы из того, что само по себе использование выражения (3.20) для расчёта энергии, например, в случае слабой связи даёт величину [31]

$$E = -\alpha - \frac{1}{6} \left(\frac{1}{2} - \frac{4}{3\pi} \right) \alpha^2.$$

Для получения точного значения коэффициента при α^2 в разложении энергии по степеням α (1.1) необходимо по теории возмущений учесть вклад гамильтониана H_1 [38].

Из факта делокализованности волновых функций (7.12), (7.13) вытекают многие важные следствия, которые мы рассмотрим в разделе 9.

8. Дискуссия о полноте теории Тулуба

В работах [64, 65] был поставлен вопрос о полноте теории Тулуба [31, 32]. Возражения авторов работ [64, 65] основывались на работе Порша и Роселера [37], которая воспроизводит результаты теории Тулуба. Однако в последнем разделе статьи Порша и Роселера рассмотрен вопрос о том, что произойдёт, если в теории Тулуба заменить бесконечный предел интегрирования конечным, а затем перейти к бесконечному пределу. Сюрпризом оказалось то, что в этом случае одновременно с

обрезанием интегрирования по фоновым волновым векторам в функционале полной энергии полярона к последнему необходимо добавить член δE^{PR} , который даёт неисчезающий вклад, если верхний предел устремить к бесконечности [37, 65]. На основании этого результата авторы работ [64, 65] пришли к выводу, что Тулуб не учёл эту добавку и, следовательно, его теория не полна.

Для того чтобы разрешить этот парадокс, рассмотрим функцию $\Delta(s)$, определяемую формулой (3.14) (соответственно (3.19) в непрерывном случае). Согласно (3.14), (3.19) нули этой функции дают вклад в величину энергии "отдачи полярона" ΔE , определяемую (3.16), и, согласно (3.15), находятся из решения уравнения

$$1 = \frac{2}{3} \sum_k \frac{k^2 f_k^2 \omega_k}{s - \omega_k^2}. \quad (8.1)$$

Если обрезание в сумме, стоящей в правой части (8.1), отсутствует, то решение уравнения (8.1) даёт спектр значений s , определяемый частотами v_{k_i} , лежащими между соседними значениями ω_{k_i} и $\omega_{k_{i+1}}$, для всех волновых векторов k_i . Эти частоты определяют значение энергии отдачи:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_{k_i} (v_{k_i} - \omega_{k_i}). \quad (8.2)$$

Посмотрим, что происходит со вкладом частот v_{k_i} в ΔE в той области волновых векторов k , в которой f_k стремится к нулю, но нигде в точности в нуль не обращается. Из (8.1) следует, что при $f_k \rightarrow 0$ решения уравнения (8.1) будут стремиться к ω_{k_i} : $v_{k_i} \rightarrow \omega_{k_i}$. Соответственно, вклад в ΔE области волновых векторов, в которой $f_k \rightarrow 0$, будет также стремиться к нулю.

В частности, если мы введём некоторое k^0 , такое что в области $k > k^0$ величины f_k будут малы, то мы получим выражение

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_{k_i \leq k^0} (v_{k_i} - \omega_{k_i}), \quad (8.3)$$

не содержащее никаких добавочных членов. Это соответствует тому, что в функционале Тулуба мы можем установить верхний предел k^0 и никаких добавочных членов при этом не возникнет.

Например, если для исследования минимума функционала Тулуба (3.20), (5.7) выбрать пробную функцию f_k , не содержащую обрезания, в виде [49]

$$f_k = -V_k \exp\left(-\frac{k^2}{2a^2(k)}\right), \quad (8.4)$$

$$a(k) = \frac{a}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{k_b - k}{a}\right) \right],$$

где a — параметр пробной функции Тулуба (5.9), k_b удовлетворяет условию $a \ll k_b \ll k_{\text{oc}}$, $k_{\text{oc}} = a\sqrt{3\lambda}/4$ — величина волнового вектора, при котором интеграл Тулуба (5.12) имеет максимум [32, 66], то с использованием (8.4) в пределе $a \rightarrow \infty$ получим для интеграла $q(1/\lambda)$ выражение

$$q\left(\frac{1}{\lambda}\right) \approx 5,75 + 6\left(\frac{a}{k_b}\right)^3 \exp\left(-\frac{k_b^2}{a^2}\right). \quad (8.5)$$

Второй член в правой части (8.5) исчезает при $k_b/a \rightarrow \infty$, и мы приходим, как и следовало ожидать, к результату Тулуба: $q(1/\lambda) \approx 5,75$.

Уравнение (8.1), однако, обладает особенностью. Даже в случае непрерывного спектра, при $f_k = 0$, если $k > k^0$, уравнение (8.1) имеет изолированное решение v_{k^0} , отличающееся от максимальной частоты ω_{k^0} на конечную величину. Это изолированное решение приводит к дополнительному вкладу в ΔE :

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_{k_i < k^0} (v_{k_i} - \omega_{k_i}) + \delta E^{\text{PR}}, \quad (8.6)$$

$$\delta E^{\text{PR}} = \frac{3}{2} (v_{k^0} - \omega_{k^0}),$$

где v_{k^0} имеет смысл "плазменной частоты" [37]. Таким образом, здесь отсутствует непрерывный переход от случая $f_k \rightarrow 0$ при $k > k^0$ к случаю $f_k = 0$ при $k > k^0$. Как показано прямым вычислением [67] вклада в (8.6) слагаемого с "плазменной частотой" δE^{PR} , даже при $k^0 \rightarrow \infty$ теория Порша и Роселера не переходит в теорию Тулуба.

В теории Тулуба мы выбираем такие f_k , которые приводят к минимуму функционала полной энергии полярона. В частности, выбор пробной функции в виде (8.4) гарантирует отсутствие вклада "плазменной частоты" в величину полной энергии и при практических расчётах можно выбирать обрезанную f_k , не вводя при этом в функционал Тулуба никаких дополнительных членов [66, 67].

Подводя итог дискуссии, отметим, что несостоятельность критических замечаний, высказанных в [64, 65], была показана в работах [66, 67] и в воспроизведённой здесь работе [49]. В настоящее время теория Тулуба и полученные на её основе результаты [33, 47–49] не вызывают сомнений.

9. Следствия, вытекающие из существования трансляционно-инвариантных поляронов и биполяронов

Согласно полученным результатам основное состояние ТИ-полярона представляет собой делокализованное состояние электрон-фононной системы: вероятность нахождения электрона в любой точке пространства одинакова. Явный вид волновой функции основного состояния приведён в разделе 7. Делокализованы как электронная плотность, так и амплитуды фононных мод, соответствующих перенормированным взаимодействиям частотам v_{q_i} .

Важно отметить, что, согласно (3.15), перенормированные фононные частоты v_{q_i} в случае ТИ-полярона лежат по энергии выше, чем перенормированные частоты оптических фононов, и, следовательно, выше, чем перенормированные частоты полярона со спонтанно нарушенной симметрией [68]. Это позволяет надеяться обнаружить такие фононные моды в экспериментах по комбинационному рассеянию света и оптическому поглощению. Согласно [68], если полярон (биполярон) связан на кулоновском центре, т.е. образует F-центр (F'-центр), то все перенормированные локальные фононные частоты ω_n лежат по энергии ниже частоты оптического фонона ω_0 . Это обстоятельство также облегчает

возможность экспериментальной проверки наличия де-локализованных ТИ-фоонных мод с $v_{qi} > \omega_0$.

Понятие "поляронная потенциальная яма" (яма, образованная локальными фоонами [68]), в которой локализован электрон, т.е. самозахваченное состояние, в трансляционно-инвариантной теории отсутствует. Соответственно, индуцированный поляронный заряд для ТИ-полярона равен нулю. Отсутствие локализованной "фоонной шубы" у ТИ-полярона позволяет предположить, что его эффективная масса не слишком сильно отличается от эффективной массы электрона. Энергия основного состояния ТИ-полярона, которая меньше энергии полярона Пекара, даётся формулой (5.14) (для полярона Пекара энергия определяется (1.3)).

Таким образом, при равном нулю полном импульсе полярона имеется энергетическая щель между ТИ-поляронным состоянием и пекаровским состоянием, т.е. состоянием с нарушенной трансляционной инвариантностью. ТИ-полярон является бесструктурной частицей (результаты исследований структуры пекаровского полярона представлены в работе [68]).

Согласно ТИ-теории полярона термины "полярон большого радиуса" (ПБР) и "полярон малого радиуса" (ПМР) являются условными, так как в обоих случаях состояние электрона делокализовано по кристаллу. Различие между ПБР и ПМР в ТИ-теории состоит в том, что для ПБР выполняется неравенство $k_{\text{char}}a < \pi$, а для ПМР справедливо неравенство $k_{\text{char}}a > \pi$, где a — постоянная решётки, k_{char} — характерное значение фоонных волновых векторов, которые дают основной вклад в энергию полярона. Сделанное утверждение справедливо не только для полярона Пекара–Фрёлиха, но и для всего класса поляронов, у которых константа связи не зависит от волнового вектора электрона, как это имеет место, например, в случае холстейновского полярона. В классе поляронов с константой связи, зависящей от волнового вектора электрона, указанные критерии могут не выполняться (как это имеет место, например, в модели Си–Шриффера–Хигера [69]).

Указанные особенности ТИ-поляронов определяют их физические свойства, качественно отличные от свойств пекаровских поляронов. При наличии в кристалле небольших локальных нарушений ТИ-полярон остаётся в делокализованном состоянии. Так, например, в ионном кристалле с вакансиями образование F-центров делокализованными поляронными состояниями будет происходить только при некотором критическом значении ϵ_{0c} статической диэлектрической постоянной. При $\epsilon_0 > \epsilon_{0c}$ в кристалле будут присутствовать делокализованные ТИ-поляроны и свободные вакансии. При $\epsilon_0 = \epsilon_{0c}$ произойдёт переход из делокализованного состояния в локализованное на вакансии состояние (коллапс волновой функции). Такое поведение ТИ-поляронов качественно отличается от поведения пекаровских поляронов, которые локализуются на вакансиях при любом значении ϵ_0 . Это объясняет, в частности, отсутствие наблюдений поглощения (т.е. структуры) свободным поляроном Пекара, так как в этом случае реализуется ТИ-полярон. Поглощение появляется только при образовании связанного полярона Пекара, т.е. F-центра. Сделанные утверждения подтверждаются также результатами ряда последних работ, рассматривающих поляроны Холстейна [70–72]. Обобщение изложенного здесь под-

хода для случая полярона Холстейна проведено автором настоящего обзора в работе [73].

Отметим, что изменениям должна подвергнуться только физическая интерпретация свободных поляронов сильной связи. Подавляющее большинство результатов по физике поляронов сильной связи относится к связанным (на вакансиях или дефектах решётки) поляронным состояниям пекаровского типа и не требует какой-либо коррекции.

Учёт трансляционной инвариантности в случае полярона вносит небольшое изменение в оценку основного состояния, однако это приводит к качественно иному представлению о свойствах такого состояния. В работе Тулуба [32] в части, посвящённой рассеянию ТИ-полярона, показано, что при увеличении константы электрон-фоонной связи при достижении некоторого её критического значения рассеяние полярона на оптических фоонах обращается в нуль.

Таким образом, при константах связи, превышающих критическое значение, полярон будет сверхпроводящим. Хотя в ионных кристаллах основным механизмом рассеяния электронов является рассеяние на оптических фоонах [74], вклад акустических фоонов в этом случае, казалось бы, также необходимо учитывать. Однако, как это следует в общем случае из закона сохранения энергии и импульса, рассеяние ТИ-полярона на акустических фоонах будет происходить только при скорости полярона, превышающей скорость звука [75].

ТИ-биполяроны обладают гораздо большей энергией связи, чем поляроны. Это приводит к важным физическим следствиям. В частности, при наличии в кристалле небольших локальных нарушений ТИ-биполярон будет оставаться в делокализованном состоянии. Так, например, в ионном кристалле с вакансиями образование F'-центров делокализованными биполяронными состояниями будет происходить только при некотором критическом значении ϵ_{0c1} статической диэлектрической постоянной. При $\epsilon_0 > \epsilon_{0c1}$ в кристалле будут существовать делокализованные ТИ-биполяроны и свободные вакансии. При $\epsilon_0 = \epsilon_{0c1}$ будет происходить переход из делокализованного состояния ТИ-биполярона в локализованное на вакансии состояние, т.е. в F'-центр. Такое поведение ТИ-биполяронов качественно отличается от поведения биполяронов со спонтанно-нарушенной симметрией пекаровского типа [8], которые локализуются на вакансиях при любом значении ϵ_0 .

Принципиальным отличием ТИ-биполяронов от биполяронов со спонтанно нарушенной симметрией является несепарабельность первых и сепарабельность вторых. Это связано с тем, что в случае биполяронов со спонтанно нарушенной симметрией взаимодействие между электронами и поляризацией имеет вид $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = F(\mathbf{r}_1) + F(\mathbf{r}_2)$. При $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \gg R$, где R — радиус биполярона, уравнение для биполярона распадается на два независимых поляронных уравнения. Это обстоятельство позволяет трактовать биполяронное состояние со спонтанно нарушенной симметрией как связанное состояние двух поляронов [8]. В случае ТИ-биполяронов $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. Разделение функционала взаимодействия для биполярона на функционалы взаимодействия отдельных поляронов в этом случае невозможно ни при каких значениях $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ и представление о ТИ-биполяронах как о составных состояниях становится неприменимым. Этот вывод соответствует современным

представлениям о невозможности разделения квантово-механической системы на независимые подсистемы [76].

Делокализованные при $P = 0$, где P — полный импульс биполярона, ТИ-биполароны будут отделены энергетической щелью от биполаронных состояний с нарушенной трансляционной инвариантностью, которые описываются локализованной волновой функцией. Как и в случае поляронов, при константе связи, превышающей некоторое критическое значение, ТИ-биполароны становятся сверхпроводящими. Как известно, объяснение высокотемпературной сверхпроводимости на основе биполаронного механизма бозе-конденсации сталкивается с трудностью, связанной с большой массой биполаронов и, следовательно, низкой температурой бозе-конденсации. Возможность малости массы ТИ-биполаронов разрешает эту проблему.

Следует подчеркнуть, что отмеченные выше свойства ТИ-биполаронов придают им сверхпроводящие качества даже в отсутствие их бозе-конденсации, а большая энергия связи биполаронов делает такой сценарий сверхпроводимости реальным даже в сильно дефектных кристаллах.

10. Заключение

В настоящее время теория Тулуба и полученные на её основе количественные результаты не вызывают сомнений. Рассматриваемая квантово-полевая теория является непerturbативной и может воспроизводить не только пределы сильной и слабой связи, но и режим промежуточной связи.

Одним из наиболее эффективных методов расчёта поляронов и биполаронов в этом диапазоне силы связи считается метод интегрирования по траекториям [77]. Этот подход без должной модификации не является трансляционно-инвариантным, поскольку в нём главный вклад в уровни энергии дают классические решения (т.е. экстремумы экспоненты от классического действия, входящей в интеграл по траекториям). При этом такие решения вследствие трансляционной инвариантности являются не изолированными стационарными точками, а принадлежат непрерывному семейству классических решений, получаемых в результате действия на исходное классическое решение оператора трансляций. Соответственно, приближение стационарной фазы в трансляционно-инвариантной системе неприменимо.

В квантовой теории поля для восстановления трансляционной инвариантности разработаны основанные на введении коллективных координат в функциональный интеграл [78] подходы, которые, однако, вплоть до настоящего времени в теории поляронов не применялись. По этой причине неудивительно, что использованный в теории полярона метод интегралов по траекториям приводит к результату, совпадающему с результатом полуклассической теории полярона сильной связи [79].

В последнее время в теории полярона разработан такой мощный вычислительный метод, как квантовый метод Монте-Карло [80, 81]. Этот метод, сам по себе являясь лишь инструментом расчёта, без указанной выше модификации не в состоянии воспроизвести результаты анзаца Тулуба. В случае же диаграммного метода Монте-Карло препятствием для проверки анзаца Тулуба в пределе сильной связи является необходимость вычисления диаграмм очень высокого порядка.

Подведём общий итог полученных результатов. Анзац Пекара (1.2) представляет собой исходное предположение о форме решения, которое было подтверждено в ходе его многочисленных проверок и доказательств. За более чем 80-летнюю историю развития теории полярона (если отсчёт вести от заметки Ландау [82]) утвердилось мнение, что анзац (1.2) является асимптотически точным решением задачи о поляроне в пределе сильной связи.

Анзац Тулуба (см. раздел 7) представляет собой другое предположение о форме решения, структура которого определяется видом функции $A_0|0\rangle$. В рамках этого предположения решение Тулуба также является асимптотически точным. Ввиду того что решение Тулуба даёт для полярона более низкое значение энергии, с вариационной точки зрения предпочтение следует отдать анзацу Тулуба.

Таким образом, теорию полярона никоим образом нельзя считать завершённой. В рамках анзаца Тулуба предстоит огромная работа по пересмотру многих концепций (например, сверхпроводимости) и положений в физике конденсированных сред. Расширение области применения анзаца Тулуба на другие разделы квантовой теории поля может привести к радикальному пересмотру многих результатов, представляющихся в настоящее время несомненными, и наоборот. Так, например, несепарабельность биполаронного состояния в поляронной модели кварков [83] (роль фононов в [83] играет глюонное поле) даёт естественное объяснение их конфайнмента. В работе [73] отмечено, что в ТИ-теории нет необходимости использовать механизм Хиггса спонтанного нарушения симметрии для получения масс элементарных частиц.

Автор выражает искреннюю признательность А.В. Тулубу за многочисленные ценные обсуждения и советы. Автор также признателен Н.И. Кашириной за ценные обсуждения. Различные аспекты затронутых в обзоре вопросов обсуждались также с В.А. Осиповым, Е.А. Кочетовым, С.И. Виночкиным, которым автор приносит благодарность.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 13-07-00256).

11. Приложения

Приложение 1

Гамильтониан H_1 (3.2) имеет вид

$$\begin{aligned} H_1 = & \sum_k (V_k + f_k \hbar \omega_k) (a_k + a_k^+) + \\ & + \sum_{k, k'} \frac{\mathbf{k} \mathbf{k}'}{m} f_{k'} (a_k^+ a_k a_{k'} + a_k^+ a_{k'}^+ a_k) + \\ & + \frac{1}{2m} \sum_{k, k'} \mathbf{k} \mathbf{k}' a_k^+ a_{k'}^+ a_k a_{k'}, \end{aligned} \quad (\text{П1.1})$$

где $\hbar \omega_k$ даётся выражением (3.5). Воздействуем оператором H_1 на функционал A_0 (7.9). Покажем, что $\langle 0 | A_0^+ H_1 A_0 | 0 \rangle = 0$. Действительно, действие A_0 на члены гамильтониана H_1 , включающие в себя нечётное число операторов (т.е. на первый и второй члены H_1), всегда будет содержать их нечётное число и величина математического ожидания от этих членов обратится в нуль.

Рассмотрим математическое ожидание последнего члена в H_1 :

$$\left\langle 0 \left| A_0^+ \sum_{k, k'} \mathbf{k} \mathbf{k}' a_k^+ a_k^+ a_k a_{k'} A_0 \right| 0 \right\rangle. \quad (\text{П1.2})$$

Функция $\langle 0 | A_0^+ a_k^+ a_k^+ a_k a_{k'} A_0 | 0 \rangle$ представляет собой норму вектора $a_k a_{k'} A_0 | 0 \rangle$ и является положительно определённой при всех k и k' . Если в (П1.2) сделать замену $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, то всё выражение изменит свой знак, поэтому (П1.2) равно нулю. Таким образом, $\langle 0 | A_0^+ H_1 A_0 | 0 \rangle = 0$.

Приложение 2

Покажем, что (5.4), (5.5) следуют из (5.1), (5.2). Прежде всего отметим, что аналитические свойства $D(s)$, указанные в [32], непосредственно вытекают из (3.19). Действительно, полюс $D(s)$ может лежать только на вещественной оси, так как вследствие положительной определённости $\omega_k k^4 f_k^2$ в (3.19) уравнение

$$1 + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{\omega_k k^4 f_k^2 (\omega_k^2 - s_0 + i\varepsilon)}{(\omega_k^2 - s_0)^2 + \varepsilon^2} dk = 0 \quad (\text{П2.1})$$

может выполняться лишь при $\varepsilon = 0$. Кроме того, $D(s)$ является монотонно возрастающей функцией s , ввиду того что $D'(s) > 0$ при $s < 1$, а при $s_0 \rightarrow \infty$ $D(s)$ обращается в единицу. Поэтому $D(s)$ не может иметь нулей при $-\infty < s_0 < 1$. На этом основании функция $(s-1)D(s)$ может быть представлена в виде

$$\frac{1}{(s-1)D(s)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C+p} \frac{ds'}{(s'-s)(s'-1)D(s')}. \quad (\text{П2.2})$$

Контур интегрирования в интеграле Коши (П2.2) показан на рис. 2. Подынтегральная функция в (П2.2) имеет полюс при $s' = 1$ и разрез от $s' = 1$ до $s' \rightarrow \infty$. Выполняя интегрирование в (П2.2) по верхнему и нижнему берегам разреза, получим интегральное уравнение (5.5).

Приложение 3

Проведём подробный расчёт величины ΔE (5.7) с использованием пробной функции (5.9).

С этой целью для расчёта действительной части величины $D(\omega_p^2)$, входящей в 5.7, воспользуемся формулой Сохоцкого:

$$\frac{1}{\omega_k^2 - \omega_p^2 - i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega_k^2 - \omega_p^2} + i\pi \delta(\omega_k^2 - \omega_p^2),$$

$$\text{Re } D(\omega_p^2) = 1 + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty f_k^2 k^4 \mathcal{P} \frac{\omega_k}{\omega_k^2 - \omega_p^2} dk.$$

Удобно представить $\text{Re } D$ в виде

$$\text{Re } D = 1 + I_1 + I_2,$$

$$I_1 = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty f_k^2 k^4 \frac{dk}{\omega_k + \omega_p},$$

$$I_2 = \mathcal{P} \frac{\omega_p^2}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{f_k^2 k^4 dk}{(\omega_k - \omega_p)(\omega_k + \omega_p)}.$$

Подставляя в эти выражения f_k вида (5.9), получим

$$I_1 = \frac{8\alpha}{3\sqrt{2}\pi} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{k^2}{a^2}\right) dk - \frac{8\alpha(p^2 + 4)}{3\sqrt{2}\pi} \int_0^\infty \frac{\exp(-k^2/a^2)}{k^2 + p^2 + 4} dk.$$

Полагая $k/a = \tilde{k}$, в пределе сильной связи ($a \rightarrow \infty$) находим

$$I_1 = \frac{8\alpha a}{3\sqrt{2}\pi} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{\pi}{2} \tilde{p} \exp(\tilde{p}^2) \left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\tilde{p}} \exp(-t^2) dt \right] \right\}.$$

Соответственно,

$$I_2 = \mathcal{P} \frac{4\alpha\omega_p}{3\pi\sqrt{2}} \int_0^\infty \frac{\exp(-k^2/a^2) k^2 dk}{(\omega_k - \omega_p)(\omega_k + \omega_p)}.$$

Последний интеграл можно представить в виде суммы:

$$I_2 = I_{20} + I_{21},$$

где

$$I_{20} = \frac{16\alpha\omega_p}{3\pi\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\omega_p - 1}{p^2 + 2} \right) \int_0^\infty \frac{\exp(-k^2/a^2)}{k^2 + p^2 + 4} dk,$$

$$I_{21} = \frac{16\alpha\omega_p(\omega_p - 1)}{3\pi\sqrt{2}(p^2 + 2)} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\exp(-k^2/a^2)}{k^2 - p^2} dk.$$

Для входящих в I_{20} и I_{21} интегралов получим

$$\int_0^\infty \frac{\exp(-k^2/a^2)}{k^2 + p^2 + 4} dk =$$

$$= \frac{1}{a} \left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\tilde{p}} \exp(-t^2) dt \right] \frac{\pi}{2} \frac{\exp(\tilde{p}^2)}{\tilde{p}},$$

$$\mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\exp(-k^2/a^2)}{k^2 - p^2} dk = -\frac{\sqrt{\pi}}{a} \frac{\exp(-\tilde{p}^2)}{\tilde{p}} \int_0^{\tilde{p}} \exp(t^2) dt.$$

В результате имеем

$$I_2 = \frac{2}{3} \frac{\alpha a \tilde{p}}{\sqrt{2}} \exp(\tilde{p}^2) \left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\tilde{p}} \exp(-t^2) dt \right] -$$

$$- \frac{4\alpha a \tilde{p}}{3\sqrt{2}\pi} \exp(-\tilde{p}^2) \int_0^{\tilde{p}} \exp(t^2) dt.$$

Окончательно для $\text{Re } D$ находим

$$\text{Re } D = 1 + \frac{4\alpha a}{3\sqrt{2}\pi} \left[1 - \tilde{p} \exp(\tilde{p}^2) \int_{\tilde{p}}^\infty \exp(-t^2) dt - \right.$$

$$\left. - \tilde{p} \exp(-\tilde{p}^2) \int_0^{\tilde{p}} \exp(t^2) dt \right].$$

Этот результат воспроизводит величину, даваемую формулой (5.10). Для мнимой части $\text{Im } D$ по формуле Сохоцкого находим

$$\text{Im } D = \frac{1}{3\pi} \int_0^\infty f_k^2 k^4 \omega_k \delta(\omega_k^2 - \omega_p^2) dk = \frac{1}{6\pi} f_p^2 p^3.$$

В результате для $|D(\omega_k^2)|$ получим

$$|D|^2 = (\text{Re } D)^2 + (\text{Im } D)^2 =$$

$$= \frac{2}{9} \alpha^2 a^2 \left\{ \exp(-2\tilde{p}^2) \tilde{p}^2 + \frac{8}{2\pi} \left[1 - \tilde{p} \int_{\tilde{p}}^\infty \exp(-t^2) dt - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \tilde{p} \exp(-\tilde{p}^2) \int_0^{\tilde{p}} \exp(t^2) dt \right] \right\}.$$

Первый член в формуле (5.7) легко вычисляется:

$$\frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2}{1+Q} dk = \frac{3}{16} a^2.$$

При вычислении второго слагаемого в (5.7) выделим в нём интеграл

$$I_p = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{k^2}{a^2}\right) \frac{k^2(\omega_k \omega_p + \omega_k(\omega_k + \omega_p) + 1)}{(\omega_k + \omega_p)^2} dk.$$

При $a \rightarrow \infty$

$$I_p = a^3 \frac{\sqrt{\pi}}{4} \left[1 - \tilde{p}^3 \exp(\tilde{p}^2) \times \right. \\ \left. \times \int_{\tilde{p}}^\infty \exp(-t^2) dt (2 + 4\tilde{p}^2) + 2\tilde{p}^4 \right] = \frac{a^3 \sqrt{\pi}}{4} (1 - \Omega(\tilde{p})),$$

где

$$\Omega(\tilde{p}) = 2\tilde{p} \left[(1 + 2\tilde{p}^2) \tilde{p} \exp(\tilde{p}^2) \int_{\tilde{p}}^\infty \exp(-t^2) dt - \tilde{p}^2 \right],$$

что соответствует выражению для $\Omega(y)$ в (5.12).

В итоге для второго члена в правой части (5.7) получим

$$\frac{1}{12\pi^4} \frac{4\pi\alpha}{\sqrt{2}} \int_0^\infty I_p p^4 f_p^2 \frac{\omega_p}{(\omega_p^2 - 1)|D(\omega_p^2)|^2} dp.$$

При $a \rightarrow \infty$ последнее выражение примет вид

$$\frac{\alpha^2 a^4}{3\pi\sqrt{\pi}} \int_0^\infty (1 - \Omega(\tilde{p})) \frac{\exp(-\tilde{p}^2)}{|D(\omega_{\tilde{p}}^2)|^2} d\tilde{p} = \frac{3}{16} a^2 q,$$

где $q = q(0)$ даётся выражением (5.12). Таким образом, окончательно для ΔE (5.7) находим

$$\Delta E = \frac{3}{16} a^2 (1 + q),$$

что соответствует первому члену в правой части (5.11).

Список литературы

1. Пекар С И *Исследования по электронной теории кристаллов* (М. – Л.: ГИТТЛ, 1951)
2. Kuper C G, Whitfield G D (Eds) *Polarons and Excitons* (Edinburgh: Oliver and Boyd, 1963)
3. Devreese J T (Ed.) *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors* (Amsterdam: North-Holland, 1972)
4. Фирсов Ю А *Поляроны* (М.: Наука, 1975)
5. Devreese J T, Peeters F (Eds) *Polarons and Excitons in Polar Semiconductors and Ionic Crystals* (New York: Plenum Press, 1984)
6. Lakhno V D (Ed.) *Polarons and Applications* (Chichester: Wiley, 1994)
7. Devreese J T, Alexandrov A S *Rep. Prog. Phys.* **72** 066501 (2009)
8. Каширина Н И, Лахно В Д *УФН* **180** 449 (2010); Kashirina N I, Lakhno V D *Phys. Usp.* **53** 431 (2010)
9. Emin D *Polarons* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2013)
10. Каширина Н И, Лахно В Д *Математическое моделирование автолокализованных состояний в конденсированных средах* (М.: Физматлит, 2013)
11. Fröhlich H, Pelzer H, Zienau S *Philos. Mag.* **41** 221 (1950)
12. Пекар С И *ЖЭТФ* **16** 341 (1946); **16** 335 (1946)
13. Смондырев М А *ТМФ* **68** 29 (1986); Smondyrev M A *Theor. Math. Phys.* **68** 653 (1986)
14. Selyugin O V, Smondyrev M A *Phys. Status Solidi B* **155** 155 (1989)
15. Боголюбов Н Н *Укр. мат. журн.* **2** (2) 3 (1950)
16. Тябликов С В *ЖЭТФ* **21** 377 (1951)
17. Miyake S J *J. Phys. Soc. Jpn.* **38** 181 (1975)
18. Miyake S J *J. Phys. Soc. Jpn.* **41** 747 (1976)
19. Adamowski J, Gerlach B, Leschke H *Phys. Lett. A* **79** 249 (1980)
20. Gerlach B, Löwen H *Rev. Mod. Phys.* **63** 63 (1991)
21. Höhler G *Z. Phys.* **140** 192 (1955)
22. Allcock G R *Adv. Phys.* **5** 412 (1956)
23. Gross E P *Phys. Rev.* **100** 1571 (1955)
24. Буймистров В М, Пекар С И *ЖЭТФ* **33** 1271 (1957); Buimistrov V M, Pekar S I *Sov. Phys. JETP* **6** 977 (1958)
25. Toyozawa Y *Prog. Theor. Phys.* **26** 29 (1961)
26. Gross E P *Ann. Physics* **99** 1 (1976)
27. Ландау Л Д, Пекар С И *ЖЭТФ* **18** 419 (1948)
28. Bethe H A *Intermediate Quantum Mechanics* (New York: W.A. Benjamin, 1964); Бете Г *Квантовая механика* (М.: Мир, 1965)
29. Bohr N, Rosenfeld L *Kgl. Danske Vid. Selsk. Math.-Fys. Medd.* **12** (8) 1 (1933); Бор Н *Избранные научные труды* Т. 2 (М.: Наука, 1971)
30. Лахно В Д *УФН* **168** 465 (1998); Lakhno V D *Phys. Usp.* **41** 403 (1998)
31. Тулуб А В *Вестн. ЛГУ* **15** (22) 104 (1960)
32. Тулуб А В *ЖЭТФ* **41** 1828 (1961); Tulub A V *Sov. Phys. JETP* **14** 1301 (1962)
33. Каширина Н И, Лахно В Д, Тулуб А В *ЖЭТФ* **141** 994 (2012); Kashirina N I, Lakhno V D, Tulub A V *JETP* **114** 867 (2012)
34. Heisenberg W *Z. Phys.* **65** 4 (1930)
35. Lee T D, Low F E, Pines D *Phys. Rev.* **90** 297 (1953)
36. Wentzel G *Helv. Phys. Acta* **15** 111 (1942)
37. Porsch M, Röseler J *Phys. Status Solidi* **23** 365 (1967)
38. Röseler J *Phys. Status Solidi* **25** 311 (1968)
39. Smondyrev M A, Fomin V M, in *Polarons and Applications* (Ed. V D Lakhno) (Chichester: Wiley, 1994) p. 13
40. Gunnarsson O, Röscher O J *Phys. Condens. Matter* **20** 043201 (2008)
41. Vidmar L et al. *Phys. Rev. Lett.* **103** 186401 (2009)
42. Meevasana W et al. *Phys. Rev. B* **74** 174524 (2006)
43. Meevasana W et al. *Phys. Rev. Lett.* **96** 157003 (2006)
44. Mishchenko A S et al. *Phys. Rev. Lett.* **100** 166401 (2008)
45. Alexandrov A S, Kornilovitch P E *Phys. Rev. Lett.* **82** 807 (1999)
46. Holstein T *Ann. Physics* **8** 343 (1959)
47. Лахно В Д *ЖЭТФ* **137** 926 (2010); Lakhno V D *JETP* **110** 811 (2010)
48. Lakhno V D *Solid State Commun.* **152** 621 (2012)
49. Лахно В Д *ЖЭТФ* **143** 1033 (2013); Lakhno V D *JETP* **116** 892 (2013)
50. Verbist G, Peeters F M, Devreese J T *Phys. Rev. B* **43** 2712 (1991)
51. Adamowski J, Bednarek S J *Phys. Condens. Matter* **4** 2845 (1992)
52. Kashirina N I, Lakhno V D, Sychyov V V *Phys. Status Solidi B* **234** 563 (2002)
53. Kashirina N I, Lakhno V D, Sychyov V V *Phys. Rev. B* **71** 134301 (2005)
54. Супрун С Г, Мойжес Б Я *ФТТ* **24** 1571 (1982); Suprun S G, Moizhes B Ya *Sov. Phys. Solid State* **24** 903 (1982)
55. Kashirina N I, Lakhno V D, Sychyov V V *Phys. Status Solidi B* **239** 174 (2003)
56. Verbist G et al. *Phys. Rev. B* **45** 5262 (1992)
57. Vansant P et al. *J. Phys. A Math. Gen.* **27** 7925 (1994)
58. Винетский В Л, Мередов О, Янчук В А *Теор. и экп. химия* **25** 641 (1989); Vinetskii V L, Meredov O, Yanchuk V A *Theor. Exp. Chem.* **25** 591 (1989)
59. Александров А С, Кребс А Б *УФН* **162** (5) 1 (1992); Alexandrov A S, Krebs A B *Sov. Phys. Usp.* **35** 345 (1992)
60. Alexandrov A S, Mott N *Polarons and Bipolarons* (Singapore: World Scientific, 1995)
61. Тябликов С В *Методы квантовой теории магнетизма* (М.: Наука, 1975); перевод 1-го изд.: Tyablikov S V *Methods in the Quantum Theory of Magnetism* (New York: Plenum Press, 1967)

62. Новожилов Ю В, Тулуб А В *УФН* **61** 53 (1957)
63. Novozhilov Y V, Tulub A V *The Method of Functionals in the Quantum Theory of Fields* (New York: Gordon and Beach, 1961)
64. Klimin S N, Devreese J T *Solid State Commun.* **152** 1601 (2012)
65. Klimin S N, Devreese J T *Solid State Commun.* **153** 58 (2013)
66. Lakhno V D *Solid State Commun.* **152** 1855 (2012)
67. Lakhno V D, arXiv:1211.0382
68. Лахно В Д, Чуев Г Н *УФН* **165** 285 (1995); Lakhno V D, Chuev G N *Phys. Usp.* **38** 273 (1995)
69. Marchand D J J et al. *Phys. Rev. Lett.* **105** 266605 (2010)
70. Hague J P, Kornilovitch P E, Alexandrov A S *Phys. Rev. B* **78** 092302 (2008)
71. Mishchenko A S et al. *Phys. Rev. B* **79** 180301(R) (2009)
72. Ebrahimnejad H, Berciu M *Phys. Rev. B* **85** 165117 (2012)
73. Lakhno V D *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2014** 073101 (2014)
74. Schultz T D *Phys. Rev.* **116** 526 (1959)
75. Kittel Ch *Quantum Theory of Solids* (New York: Wiley, 1963); Киттель Ч *Квантовая теория твердых тел* (М.: Наука, 1967)
76. Гриб А А *УФН* **183** 1337 (2013); Grib A A *Phys. Usp.* **56** 1230 (2013)
77. Feynman R P *Phys. Rev.* **97** 660 (1955); *Statistical Mechanics* (Reading, Mass.: W.A. Benjamin, 1972); Фейнман Р *Статистическая механика* (М.: Мир, 1975)
78. Rajaraman R *Solitons and Instantons: an Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory* (Amsterdam: North-Holland, 1982); Раджараман Р *Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля* (М.: Мир, 1985)
79. Gerlach B, Löwen H *Phys. Rev. B* **37** 8042 (1988)
80. Мищенко А С *УФН* **175** 925 (2005); Mishchenko A S *Phys. Usp.* **48** 887 (2005)
81. Кашурников В А, Красавин А В *Численные методы квантовой статистики* (М.: Физматлит, 2010)
82. Landau L D *Phys. Z. Sowjetunion* **3** 644 (1933); Ландау Л Д *Собрание трудов* Т. 1 (М.: Наука, 1969) с. 90
83. Iwao S *Lett. Nuovo Cimento* **15** 331 (1976)

Pekar's ansatz and the strong coupling problem in polaron theory

V.D. Lakhno

*Institute of Mathematical Problems of Biology, Russian Academy of Sciences,
ul. Institutskaya 4, 142290 Pushchino, Moscow region, Russian Federation
Tel. + 7 (496) 773 24 08. E-mail: lak@impb.psn.ru*

The translationally invariant polaron theory of Tulub is discussed in detail which makes no use the Pekar's ansatz (believed to provide the asymptotically exact solution in the strong coupling limit) and fundamentally produces a lower-energy polaron than when using the ansatz. In the case of the bipolaron, the theory yields the best values for bonding energy and for critical stability parameters. A variety of physical implications of the existence of translationally invariant polarons and bipolarons are discussed.

Keywords: Froehlich Hamiltonian, Lee–Low–Pines transformation, weak coupling, Bose condensate, F-center

PACS numbers: **71.38. – k**, **74.20. – z**, **74.72. – h**

DOI: 10.3367/UFNr.0185.201503d.0317

Bibliography — 83 references

Received 29 November 2013, revised 10 December 2014

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **185** (3) 317–331 (2015)

Physics – Uspekhi **58** (3) (2015)