

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Структура полярона большого радиуса
в пределе сильной связи

В.Д. Лахно, Г.Н. Чуев

Теория полярона изложена на основе трансляционно-инвариантного метода Боголюбова–Тябликова. Представлены результаты расчетов автолокализованных электронных состояний для различных типов взаимодействия. Показано, что структура этих состояний тесно связана со структурой и особенностями спектра локальных фононов. Приведены расчеты спектра для случая сильной электрон-фононной связи. Рассмотрены приложения поляронной модели и возможности экспериментального наблюдения полярона большого радиуса в пределе сильной связи. Метод Боголюбова–Тябликова обобщен на случай биполярона в пределе сильной связи. Приведены критерии стабильности и условия возникновения биполярных состояний.

PACS numbers: 71.38.+i, 71.50.+t

Содержание

1. Введение (285).
 2. Теория полярона в пределе сильной связи (286).
2.1. Общие соотношения. 2.2. Поляронный гамильтониан для различных типов взаимодействия.
 3. Состояния электронной подсистемы (288).
3.1. Основное состояние. 3.2. Возбужденные состояния. 3.3. Приложение модели полярона большого радиуса.
 4. Локализованные фононы (291).
4.1. Спектр фононных частот. 4.2. Фононная неустойчивость.
 5. Биполярон в пределе сильной связи (294).
5.1. История проблемы биполярона. 5.2. Адиабатическая теория для биполярона. 5.3. Результаты расчетов.
 6. Заключение (297).
- Список литературы (297).

1. Введение

Теория полярона представляет собой простейший пример квантовой теории поля, который, однако, находит важные приложения в физике конденсированных сред. Первоначально проблема полярона большого радиуса была сформулирована как задача об автолокализованном состоянии электрона в ионном кристалле [1]. При

этом предполагалось, что представление о поляроне соответствует пределу сильной связи.

Поскольку для большинства ионных кристаллов критерий сильной связи не выполняется [2], то в течение длительного времени центральной проблемой в теории полярона было ее обобщение для произвольной константы связи: развитие различных подходов к расчету зависимости основного состояния от константы электрон-фононной связи α [3, 4], вычисление эффективной массы при произвольных значениях α [5], обобщение результатов на случай конечных температур [6], исследование вопросов поляронного переноса [4–8].

С другой стороны, существует большое число физических примеров, когда реализуется предел сильной связи и электрон может автолокализоваться. К числу таких сред относятся магнитоупорядоченные кристаллы, в которых возможны различные типы магнитополяронных состояний [9–11], полярные жидкости, в которых автолокализованные состояния есть сольватированные электроны [12, 13], и другие системы.

Более того, даже в ионных кристаллах, в которых для однополяронных состояний применимо описание слабой или промежуточной силы связи, для биполяронных состояний реализуется случай сильной связи. Отметим также, что в важном случае связанного полярона, который реализуется при образовании F -центров, критерий сильной связи существенно слабее и может выполняться в ионных кристаллах.

Таким образом, несмотря на некоторую выделенность, исследование полярона в пределе сильной связи представляет определенный интерес для физики твердого тела. Кроме того, как мы покажем ниже, концепция полярона сильной связи может с успехом использоваться и для целого ряда смежных областей, таких, например, как мезонная теория ядерных сил [14–16], теория движения ионов, внедренных в жидкий гелий, и т.д. [17].

В.Д. Лахно, Г.Н. Чуев. Институт математических проблем биологии РАН
142292 Пущино, Московская обл., Россия
Тел. (095) 923-35-58
Факс (095) 938-19-14
E-mail: com@impb.serpukhov.su

Статья поступила 21 октября 1994 г.,
после доработки 15 декабря 1994 г.

В большинстве работ по теории полярона в пределе сильной связи основное внимание уделяется исследованию свойств основного состояния. Вместе с тем вопрос о возможности существования поляронных состояний, отличных от основного, является исходным при исследовании процессов, связанных с возбуждением электронов в полярных средах, например при фотовозбуждении F -центров и других дефектов решетки.

В настоящее время, помимо чисто теоретического интереса, проблема возбужденных поляронных состояний приобретает интерес в связи с проблемой электронного переноса возбуждений в самых различных конденсированных средах (растворы [18], биомакромолекулы [19–22] и др.).

Отметим также, что для полярона в пределе сильной связи возможны два типа состояний: состояния малого радиуса, когда электрон локализуется на одной молекуле среды [4, 23], и состояния большого радиуса, когда поляронное состояние размазано по большому числу молекул. Существует огромное число книг и обзоров по поляронной проблематике [3–7, 24–29]. Несмотря на это, на наш взгляд, в настоящее время отсутствует единый подход к описанию поляронных состояний в различных конденсированных средах.

В основу такого подхода в данном обзоре положен метод Боголюбова–Тябликова, развитый для описания нерелятивистской частицы, сильно взаимодействующей с квантовым полем. Это позволяет получать асимптотически точные в пределе сильной связи уравнения для различных типов квантовых полей, играющих важную роль в теории твердого тела. Результаты решения этих уравнений в физически интересных случаях приводят к представлению о сложной структуре автолокализованных электронных состояний.

Особый интерес в последнее время эти результаты приобрели также в связи с появлением большого числа непертурбативных теорий в физике элементарных частиц. Настоящий обзор посвящен исследованию структуры полярона большого радиуса в пределе сильной связи.

В разделе 2 приведены основные результаты метода Боголюбова–Тябликова для нерелятивистской частицы, сильно взаимодействующей с квантовым полем. Раздел 3 посвящен исследованию состояний электронной подсистемы, определяемых различными решениями нелинейного уравнения Шрёдингера с самосогласованным потенциалом. В разделе 4 рассмотрены спектр и свойства локальных фононов, возникающих в результате сильного электрон-фононного взаимодействия. В разделе 5 представлены результаты обобщения теории на случай биполярона. В разделе 6 приведены выводы авторов.

2. Теория полярона в пределе сильной связи

2.1. Общие соотношения

Исходным при описании движения нерелятивистской частицы в квантовом поле в работах [30, 31] является гамильтониан

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\tilde{r}} + \frac{1}{2} \sum_k \hbar \omega_k (b_k b_k^+ + b_k^+ b_k) + \sum_k \{c_k \exp(ik\tilde{r}) b_k + c_k^* \exp(-ik\tilde{r}) b_k^+\}. \quad (1)$$

Здесь μ — эффективная масса частицы, \tilde{r} — ее координаты, b^+ и b — операторы рождения и уничтожения квантов поля с энергией $\hbar \omega_k$, c_k — некоторые характеризующие взаимодействие частицы с полем постоянные, которые определяются через макроскопические параметры среды. Отметим, что эти постоянные пропорциональны $\sqrt{\alpha}$, где α — константа связи.

Гамильтониан (1) описывает взаимодействие электрона с полем фононов и активно исследуется в теории квантового поля [33]. В общем случае при наличии неоднородностей в среде гамильтониан (1) должен также включать потенциал взаимодействия квантовой частицы с примесями.

Дальнейшее исследование гамильтониана зависит от наличия малых параметров. В случае малости последнего члена в (1) задача сводится к проблеме полярона в пределе слабой связи [34, 35]. Другим предельным случаем является предел сильной связи. В этом случае существует малый параметр $\epsilon^2 = \omega_k/E \propto \alpha^{-2}$ (где $E \propto \alpha^2 \omega$ — характерная энергия электронного состояния).

Впервые такая задача была исследована в работах Пекара [1] в феноменологическом подходе. Наличие трансляционной инвариантности в задаче вносит дополнительные трудности. Последовательное решение квантовой задачи с учетом трансляционного вырождения (1) было дано в [30, 31] (см. также [32]).

В этом подходе первоначально вводятся комплексные координаты решетки

$$(\tilde{D}_k + \epsilon \tilde{Q}_k) = \frac{1}{2} (b_k + b_{-k}^+), \quad P_k = -i \frac{\partial}{\partial Q_k}. \quad (2)$$

Здесь \tilde{D}_k есть равновесные положения координат решетки, в то время как \tilde{Q}_k и P_k определяют отклонения от равновесных положений и соответствующие им импульсы.

Затем в задаче выделяются переменные, связанные с движением квазичастицы как целого:

$$\tilde{r} = r_c + r, \quad (\tilde{D}_k + \epsilon \tilde{Q}_k) = (D_k + \epsilon Q_k) \exp(-ikr_c). \quad (3)$$

Здесь r_c — координата, связанная с прямолинейным движением частицы, r — флуктуационная часть (дрожь), обусловленная взаимодействием частицы с полем.

Формула (3) определяет каноническое преобразование Боголюбова–Тябликова, вводящее вместо переменных \tilde{r} , \tilde{Q}_k переменные r , r_c , Q_k , число которых на три больше. Поэтому на эти переменные необходимо наложить дополнительные условия типа

$$\sum_k k v_k^* Q_k = 0, \quad (4)$$

где v_k — комплексные числа, удовлетворяющие условиям нормировки

$$\sum_k k_i k_j v_k^* D_k = \delta_{ij}. \quad (5)$$

Соотношения (3)–(5) представляют собой замкнутую систему уравнений, определяющих каноническое преобразование.

После перехода к новым каноническим переменным и выделения прямолинейного движения стандартная про-

педура теории возмущений для гамильтониана (1) по параметру ϵ позволяет представить соответствующие волновые уравнения в виде

$$(H_0 + \epsilon H_1 + \epsilon^2 H_2 + \dots - E_0 - \epsilon E_1 - \epsilon^2 E_2 - \dots) \Phi = 0. \quad (6)$$

При этом волновая функция системы Φ представляется как

$$\Phi(r, Q_k, \dots) = \varphi_0(r) \Theta(Q_k, \dots) + \epsilon \varphi_1(r, Q_k, \dots). \quad (7)$$

Равновесные координаты решетки определяются из условия $E_1 = 0$, совпадающего с условием обращения в нуль линейной по смещениям формы $\langle H_1 \rangle = 0$, и имеют вид

$$\begin{aligned} D_{-k} &= -\frac{c_k^* \omega_k}{\omega_k^2 - (\mathbf{v}\mathbf{k})^2} \langle \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) \rangle \equiv \\ &\equiv -\frac{c_k^* \omega_k}{\omega_k^2 - (\mathbf{v}\mathbf{k})^2} \int \varphi_0^2(\mathbf{R}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) d\mathbf{R}. \end{aligned} \quad (8)$$

Каноническое преобразование (3)–(5) устраняет трансляционное вырождение исходного гамильтониана, что делает возможным применение теории возмущений. Применяя обычную схему теории возмущений для волновой функции $\varphi_0(r)$, получаем волновое уравнение, определяющее состояние квантовой частицы:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + U(r) - W_0 \right) \varphi_0(r) &= 0, \\ U(\mathbf{r}) &= -2 \sum_k \frac{c_k^2 \omega_k}{\omega_k^2 - (\mathbf{v}\mathbf{k})^2} \langle \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \rangle, \\ E_0 &= W_0 + \frac{1}{2} \sum_k D_k D_{-k} \left(\omega_k + \frac{(\mathbf{v}\mathbf{k})^2}{\omega_k} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь E_0 и W_0 — полная и электронная энергии системы в нулевом приближении, $U(r)$ — самосогласованный потенциал для полярона.

В пределе малых скоростей с помощью разложения по скорости v из (9) можно получить эффективную массу частицы:

$$M = \frac{2}{3} \sum_k \frac{c_k^2 k^2}{\omega_k^3} \left| \int \varphi_0^2(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2. \quad (10)$$

Таким образом, в пределе сильной связи возникает автолокализованное состояние полярона с энергией E_0 и эффективной массой M , волновая функция которого определяется решением (9). В свою очередь состояние фононной подсистемы в адиабатическом приближении соответствует гармоническим колебаниям ядер, причем ядра движутся в параболической яме:

$$\left[\frac{1}{2} \sum_k P_{-k} P_k - \hbar \omega_k + \sum_l \omega_k^2 M_{kl} Q_k Q_l - E_2 \right] \Theta_0 = 0. \quad (11)$$

Здесь M_{kl} — квадратичная матрица, которая определяется распределением электронной плотности. В разделе 4 мы получим соотношение, определяющее эту матрицу через состояние электронной подсистемы.

Формулы (8)–(11) полностью определяют задачу о движении медленной (нерелятивистской) частицы в квантовом поле в пределе сильного взаимодействия частицы и поля. Отметим, что в данной формулировке задачи неявно содержится дополнительное предположение о континуальном характере среды, с которой взаимодействует электрон (предположение об эффективной массе, о зависимости константы взаимодействия от макроскопических характеристик среды и т.д.). Это приближение справедливо, когда характерные размеры распределения электронной плотности, описываемые уравнением (9), намного превышают постоянную решетки. В противоположном случае необходимо рассматривать случай полярона малого радиуса [23].

В общем случае характерный размер поляронного состояния определяется типом взаимодействия электрона со средой. В случае локального короткодействующего взаимодействия, когда $c_k \propto k^{1/2}$ и $\omega_k \propto k$, состояние полярона в пределе сильной связи оказывается неустойчивым [36, 37] и, если не вводить специальных ограничений, связанных с дискретной структурой среды, размер поляронного состояния будет стремиться к нулю. В случае дальнедействующего взаимодействия кулоновского типа, когда $c_k \propto k^{-1}$ и $\omega \propto \omega_0$, характерный размер состояния полярона $r_p \propto (\mu\omega)^{1/2} \alpha^{-1}$ может существенно превышать постоянную решетки.

Таким образом, в случае применимости приближения сильной связи частицы и поля уравнение (9) является фундаментальным при описании свойств электронов в среде.

2.2. Поляронный гамильтониан для различных типов взаимодействия

Гамильтониан (1) охватывает многочисленные примеры взаимодействия квантовой частицы с конденсированной средой. Так, гамильтониан (1) описывает движение электрона в ионном кристалле, если (см. [1, 34])

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{e}{|k|} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c \omega_k}{V}}, \quad \omega_k = \omega_0, \\ U(r) &= -ce^2 \int d\mathbf{r}' \frac{|\phi(r')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \end{aligned} \quad (12)$$

где e — заряд электрона, V — объем, $c = \tilde{c}^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon^{-1}$.

Практически важной для приложений является модель F -центра, описывающая взаимодействие электрона с ионной вакансией. В этом случае необходимо добавить кулоновское притяжение к вакансии в потенциал взаимодействия:

$$U(r) = -ce^2 \int d\mathbf{r}' \frac{|\phi(r')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{ze^2}{\epsilon_0 |r|}. \quad (13)$$

Здесь z — заряд вакансии.

В пьезоэлектрическом полупроводнике [38–41]

$$c_k = \frac{1}{k^{1/2}} \left(\frac{4\pi}{V} \frac{\hbar/\mu s}{\hbar^2 \epsilon / \mu e^2} \frac{\langle e_{ijk}^2 \rangle}{2\epsilon c} \right), \quad \omega_k = sk, \quad (14)$$

где s — скорость звука, c — упругая константа, $\langle e_{ijk}^2 \rangle$ — усредненный квадрат пьезоэлектрического тензора. Это приводит к такому же виду потенциала, что и в случае ионных кристаллов.

В гомеоплярном кристалле [42, 43]

$$c_k = Gk\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V\omega_k}}, \quad \omega_k = \sqrt{\frac{1}{\rho}\left(K + \frac{4}{3}\tilde{\mu}\right)k},$$

$$U(r) = -\frac{3G^2}{3K+4\tilde{\mu}}\phi(r)^2, \quad (15)$$

где K и $\tilde{\mu}$ — модули всестороннего сжатия и сдвига соответственно, G — константа деформационного потенциала.

В случае ядерной материи [14, 44]

$$c_k = \frac{g}{\sqrt{2\omega_k V}}, \quad \omega_k = \sqrt{\frac{\mu_0^2 c^4}{\hbar^2} + c^2 k^2},$$

$$U(r) = -\frac{g^2}{4\pi} \int d\mathbf{r}' \frac{|\phi(r')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp\left(-\frac{\mu_0}{\hbar c} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\right), \quad (16)$$

где g — константа связи нуклона с мезонным полем, μ_0 — масса мезона, c — скорость света.

В случае континуального экситона [29, 45]

$$c_k = \sqrt{\frac{2\pi\omega_p\epsilon(k)}{V\epsilon_0(\epsilon(k)-1)}} \frac{e}{k},$$

$$U(r) = -\frac{e^2}{\epsilon_0} \int d\mathbf{r}' \frac{|\phi(r')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} [1 - \exp(-\kappa_D |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)], \quad (17)$$

где ω_p — плазменная частота, $\epsilon(k)$ — диэлектрическая проницаемость легированного полупроводника, κ_D — обратный дебаевский радиус.

В ряде случаев гамильтониан (1) описывает поведение электронов в магнитоупорядоченных средах [24, 46].

3. Состояния электронной подсистемы

3.1. Основное состояние

Уравнение (9) является нелинейным уравнением Шрёдингера. Оно исследовалось неоднократно для различных типов самосогласованных потенциалов, соответствующих основному состоянию электрона. В случае полярона (12) и F -центра (13) основное сферически-симметричное решение $\phi_0(\mathbf{r})$ найдено вариационным методом в [1]. Наилучшее численное решение для основного состояния полярона получено в [47]. Результаты этих расчетов подтверждены в [48].

Решение уравнения с короткодействующим потенциалом типа (15), соответствующее основному состоянию, активно исследовалось в нелинейной оптике [49, 50], физике неупорядоченных сред [51–53], нелинейной теории поля [54] либо с помощью различных вариационных методов, либо численными итерационными методами [55]. Применительно к проблеме автолокализованного состояния электрона в неполярных средах оно было исследовано в [42] с помощью вариационных методов. В [56] эти результаты были уточнены с помощью прямого численного расчета задачи (15). Численные расчеты основного состояния для самосогласованного потенциала (17) приведены в [57, 58].

3.2. Возбужденные состояния

Детальный анализ нелинейного уравнения Шрёдингера показывает, что в общем случае его решение не единственно, а имеет дискретный набор решений, каждому из которых соответствует свой самосогласованный потенциал. Наиболее наглядно это проявляется в случае F -центра, где этим решениям можно сопоставить решения линейной задачи с водородоподобным потенциалом. Тогда основному состоянию будет соответствовать решение типа $1s$, первому возбужденному сферически-симметричному — типа $2s$, несимметричному относительно вращения — типа $2p$ и т.д.

Отметим, что, в отличие от решения для основного состояния электрона, решения для возбужденных состояний изучены гораздо хуже. Доказано, что их существует счетное количество для самосогласованного потенциала типа полярона (12) [59] или типа (15) [60, 61]. В [62] численно найдены сферически-симметричные решения для полярона, а в [63] — для F -центра. В [50, 56] численно получены возбужденные состояния для гомеоплярного кристалла с короткодействующим потенциалом (15).

Несколько первых решений и соответствующие им самосогласованные потенциалы представлены на рис. 1. В общем случае для $(n+1)$ -й сферически-симметричной моды решение n раз пересекает ось x . В табл. 1 представлены численные значения полных энергий, радиусов и эффективных масс различных самосогласованных сферически-симметричных состояний полярона.

Таблица 1. Полные энергии (в ед. $e^4\mu c^2/\hbar^2$), радиусы (в ед. $\hbar^2/\mu c e^2$) и эффективные массы (в ед. $\alpha^4\mu$) для различных самосогласованных состояний полярона

n	0	1	2	3
E_n	-0,05426	-0,0103	-0,00416	-0,00223
R_n	9,29	48,4	120	216
M_n	0,0227	$3,0 \cdot 10^{-4}$	$2,9 \cdot 10^{-5}$	$5,0 \cdot 10^{-6}$

Отметим, что в [66] была найдена квазиклассическая (при $n \rightarrow \infty$) асимптотика для электронной энергии полярона, которая имеет вид

$$W_n \propto -\frac{2}{9\pi^2(0,486)^2} \frac{\mu e^4 c^2}{\hbar^2(n+1)^2}. \quad (18)$$

Из табл. 1 следует, что радиус состояния быстро возрастает с номером решения, а энергия и эффективная масса полярона уменьшаются.

Таким образом, для наблюдения самосогласованных состояний, энергии которых выше энергии основного состояния, требуются кристаллы с константой связи, много большей $\alpha = 10$ ($\alpha = e^2 c \hbar^{-1} \sqrt{\mu/2\hbar\omega}$). Типичные значения констант связи в большинстве кристаллов составляют примерно $\alpha \approx 2-3$. Так, $\alpha = 3,97$ в KCl, $\alpha = 2,0$ в AgCl, $\alpha = 1,69$ в AgBr, $\alpha = 0,85$ в ZnO [2]. По этой причине более реальную возможность сравнения с экспериментом может представить расчет самосогласованных состояний для связанных поляронов.

Природа происхождения самосогласованных состояний является общей для различных типов взаимодействия, рассмотренных в разделе 2, однако физические характеристики этих состояний могут вести себя по-разному для различных типов взаимодействий. Например, в случае поляронов в ионном кристалле как полная,

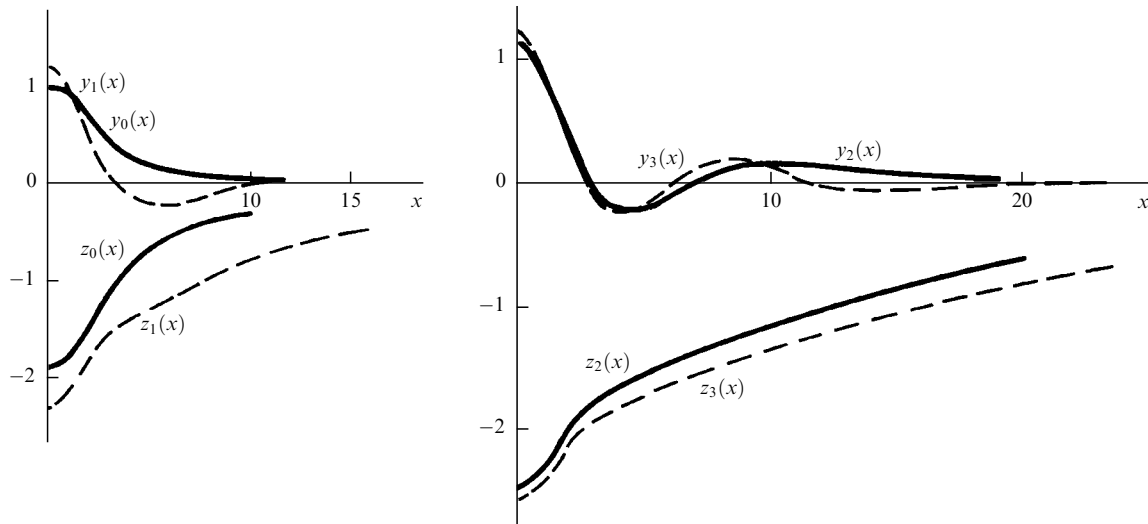


Рис. 1. Волновые функции $y(x) = A\phi(Bx)$ и самосогласованные потенциалы $z(x) = |W|^{-1}U(Bx)$ для основного ($y_0(x), z_0(x)$), первого ($y_1(x), z_1(x)$), второго ($y_2(x), z_2(x)$) и третьего ($y_3(x), z_3(x)$) возбужденных состояний полярона. $A = |W|^{-1}(e\hbar)\mu^{-1/2}(2\pi c)^{1/2}$, $B = \hbar(2\mu|W|)^{-1/2}$

так и электронная энергии отрицательны, т.е. лежат ниже дна зоны проводимости. В случае электрона в гомеополлярном кристалле (15) полная энергия каждого самосогласованного состояния положительна, в то время как электронная энергия (равная по модулю полной энергии) оказывается отрицательной.

Таким образом, для электронов в гомеополлярных кристаллах электронная энергия возбужденного самосогласованного состояния по энергии лежит ниже основного состояния (т.е. состояния без узлов). Значительное различие между двумя рассматриваемыми случаями имеется и в вопросе об эффективных массах самосогласованных состояний. В случае ионного кристалла эффективная масса состояния быстро убывает с ростом номера n . Для гомеополлярного кристалла, напротив, эффективная масса быстро растет с номером состояния.

В случае нелокального экранированного потенциала (дейтрон) существование решений нелинейного уравнения Шрёдингера (16) зависит от значения константы связи g . Решение без узлов, соответствующее основному состоянию, существует только для значений g , больших некоторого критического значения g_{cr} , причем значение g_{cr} возрастает с номером моды. При этом может реализоваться ситуация, аналогичная как случаю полярона, когда полная энергия и энергия нуклона отрицательны, так и случаю гомеополлярного кристалла, когда полная энергия положительна, а энергия нуклона отрицательна, т.е. образуются метастабильные состояния [14].

Еще менее изучены несферические решения уравнения (9). Для самосогласованного потенциала типа (15) некоторые из таких решений найдены в [64]. Нам не известны какие-либо работы по доказательству существования несферических поляроноподобных решений. Как правило, попытки поиска таких решений базируются на изначальном предположении о виде симметрии этих решений.

Для полярона попытка вычисления состояния $2p$ -типа на основе вариационного метода проведена в [65]. Для F -центра несферические решения $2p$ - и $3p$ -типов, а также ряд других найдены прямым вариационным методом [67]. Вид решений и условия их ветвления в предельном

случае, когда заряд F -центра велик, исследованы в [68]. Модифицированный метод Галеркина для поиска несферических решений задачи о поляроне использован в [69] (однако, вероятно, полученные решения неверны, имеется численная ошибка).

Недавно в [70–72] численно найдены несферические решения для задач об F -центре и поляроне. В этих целях нелинейное дифференциальное уравнение (9) редуцировалось к бесконечномерной системе обычных дифференциальных уравнений. При численном решении цепочка обрывалась на конечном числе уравнений. Условие обрыва цепочки определялось условием сходимости решения. В итоге, численные решения получались в форме ряда

$$\varphi(r) = \sum_{nl,k} c_k^{nl} |E|^{k/2+1} r^k Y_{nl}(\vartheta, \theta) \exp(-\tilde{a}^2 r),$$

$$\tilde{a}^2 = \frac{\mu|W_0|}{\hbar^2}, \tag{19}$$

где $Y_{nl}(\vartheta, \theta)$ являются сферическими гармониками.

В табл. 2 представлены полные энергии таких возбужденных состояний в задаче о поляроне, найденные различными авторами. На рис. 2 изображены самосогласованные решения полярона $2p$ - и $3p$ -типов, полученные численно в [71, 72]. Как видно из рисунка, распределение электронной плотности имеет типичный для p -состояний гантелеобразный вид. Некоторые из найденных решений затабулированы в [70].

Таблица 2. Полные энергии (в ед. $\alpha^2 \hbar \omega$) для различных поляронных состояний

$1s$	$2s$	$3s$	$2p$
-0,1085 [47]	-0,0206 [62] -0,02048 [69] -0,0169 [67]	-0,00832 [62] -0,00804 [69]	-0,0457 [71] -0,05248 [69] -0,03829 [5] -0,0472 [67]
$3p$	$3d$	$2s - 3d$	$2s + 3d$
-0,0168 [71] -0,0136 [69]	-0,0207 [71] -0,0260 [69]	-0,0240 [71]	-0,030 [71]

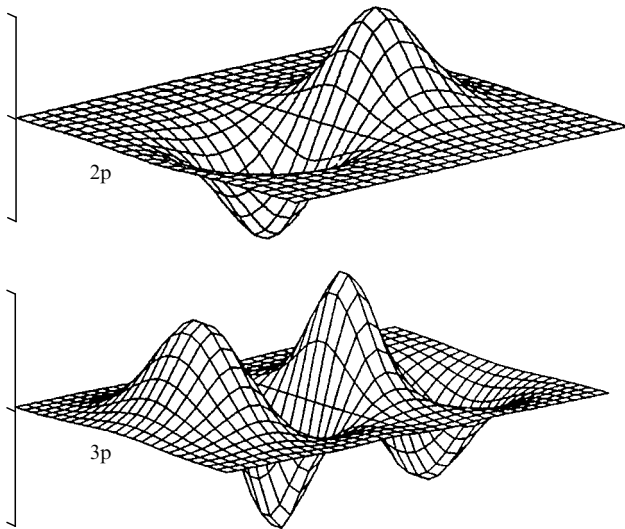


Рис. 2. Волновые функции полярона для самосогласованных возбужденных состояний $2p$ - и $3p$ -типов

Численно обнаружен также удивительный факт ветвления решений в задаче об F -центре и существовании возбужденных состояний со смешанной симметрией. (Ниже мы покажем, что возникновение таких решений связано с фоновой неустойчивостью.) При этом возникающие решения можно интерпретировать в терминах s - и d -состояний.

На рис. 3 представлены распределения электронной плотности для водородоподобных s - и d -состояний. Знаком "+" ($|\psi^2| > 10^3$) отмечены области сгущения, знаком "-" ($|\psi^2| < 10^3$) — области разрежения. В результате наложения этих двух состояний в зависимости от

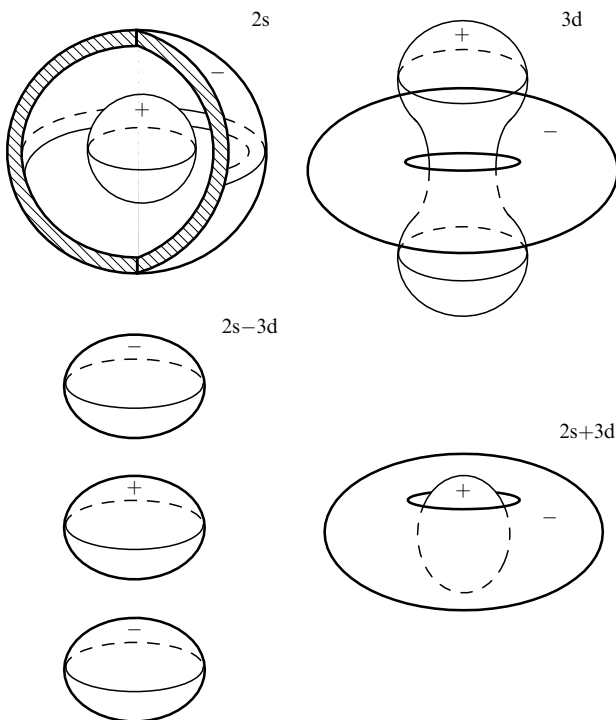


Рис. 3. Распределения электронной плотности для самосогласованных возбужденных состояний полярона смешанной симметрии $2s \pm 3d$

знака могут возникать гибридные состояния $(2s + 3d)$ - и $(2s - 3d)$ -типов.

Несферические состояния топологически аналогичны гибридным состояниям $(2s \pm 3d)$ -типа для линейного уравнения Шрёдингера с кулоновским потенциалом. Нелинейность исследуемого уравнения (9) приводит к тому, что полученные решения количественно отличаются, особенно при $r \rightarrow 0$. Однако при этом топологическое и асимптотическое подобия при $r \rightarrow \infty$ с линейной задачей сохраняются, так как асимптотики задачи (9) и линейной задачи совпадают с точностью до коэффициента.

3.3. Приложение модели полярона большого радиуса

Модель полярона в пределе сильной связи являлась исходной для объяснения спектров поглощения в задаче об F -центре [1]. В течение долгого времени эта модель была очень популярна, поскольку позволяла объяснять количественную корреляцию между параметрами спектра и диэлектрическими характеристиками кристаллов. Однако последующие эксперименты по циклотронному резонансу показали, что измеренные эффективные массы электронов не согласуются с моделью полярона в пределе сильной связи [2].

Кроме того, согласно экспериментам по электронному спиновому резонансу [74] в большинстве ионных кристаллов основное состояние имеет характерный размер порядка постоянной решетки, и применение континуальной модели в этом случае является достаточно условным. В настоящее время исследование основного состояния F -центра, как правило, базируется на квантовохимических расчетах (см., например, [75, 76]).

Вместе с тем большинство аргументов против использования модели полярона большого радиуса исчезают при рассмотрении возбужденных состояний F -центра. Роль возбужденного релаксированного состояния в процессе поглощения F -центров обсуждается в большом числе обзоров и монографий [73, 77–79].

Приближенные решения (13), отвечающие протяженным релаксированным состояниям $2p$ -типа, найденные в [67], использовались при описании фотопоглощения F -центров [80], при расчете времени жизни возбужденных F -центров [81], при описании теплового возбуждения полярона [82]. В [83] точные решения (13), соответствующие протяженным возбужденным состояниям $2s$ -типа, использовались для расчета времени жизни фотовозбужденных состояний F -центров и фотопроводимости кристаллов с центрами окраски.

Дискуссия о природе релаксированного возбужденного состояния в реальных системах продолжается и в настоящее время [78, 79]. Это связано с тем, что во многих случаях для описания реальных экспериментов, связанных с фотопоглощением, нет никакой необходимости в знании самого релаксированного состояния. Так, при объяснении температурной зависимости максимума фотопоглощения F -центров достаточно знания не самих волновых функций, а так называемых S -факторов, которые могут использоваться как подгоночные параметры [84].

Другая проблема, возникающая при интерпретации возбужденных состояний, состоит в том, что имеется набор полос поглощения, отвечающих переходам между различными самосогласованными состояниями, причем, как правило, эти полосы сильно уширены и

перекрываются. При этом каждая такая полоса может иметь довольно сложную структуру, обусловленную многофононным характером перехода, причем основной вклад в такой переход могут давать связанные фононы (см. раздел 4). Все это приводит к тому, что ответ на вопрос, применима ли модель полярона большого радиуса к описанию релаксированного возбужденного состояния F -центра, остается неоднозначным.

В качестве другого объекта приложения модели полярона большого радиуса можно рассмотреть проблему автолокализованного состояния электрона в полярной жидкости (сольватированного электрона). В отличие от F -центра, спектр поглощения сольватированного электрона имеет более простую структуру и состоит из одной или нескольких сильно уширенных полос.

Первые попытки объяснения этого спектра на основе модели полярона большого радиуса [85] позволили выявить качественные особенности этого спектра. Однако последующие эксперименты и расчеты показали, что модель должна быть модифицирована. Она должна включать эффект влияния короткодействующих сил с учетом химической структуры среды (размер окружающих молекул, координационное число и пр.).

В настоящее время существуют хорошо разработанные полуконтинуальные модели полярона (см. обзор [86]), которые учитывают как эффект образования полости за счет короткодействующих сил, так и влияние полярных хвостов. Эти модели позволяют объяснить большое число экспериментальных данных по спектрам поглощения (влияние температуры, плотности, давления на ширину и максимум полосы и т. д.)

Отметим при этом, что, несмотря на свою простоту, континуальная модель полярона в пределе сильной связи используется также при объяснении ряда эффектов для сольватированного электрона. Так, в [87] с ее помощью исследовано влияние концентрации солей на максимум полосы поглощения. В [88] использовано обобщение модели полярона большого радиуса на случай неупорядоченных сред. Эта модель позволяет объяснить большое число экспериментальных результатов о корреляциях между поведением термодинамических параметров среды (плотности, давления, фактора Кирквуда) и формой полосы поглощения.

Отдельной темой является использование модели полярона большого радиуса для задачи о переносе электрона на большие расстояния. Подчеркнем, что модель полярона большого радиуса являлась отправной точкой теоретических исследований [89]. Этому вопросу посвящено большое число работ (см., например, обзоры [90–92]). Отметим только, что в последнее время этот вопрос приобрел особую актуальность в связи с проблемой суперобмена.

Существующие в настоящее время экспериментальные данные показывают, что для глобулярных белков, а также ряда органических молекул скорость электронного переноса является аномально высокой. При этом предполагается, что перенос идет через возбужденные состояния электронной системы (см. обзор [92]). Какова природа этих состояний, пока не ясно [93]. В [20, 22] сделана попытка объяснить аномально высокую скорость переноса на основе модели полярона большого радиуса, модифицированной для белковой глобулы [19].

Результаты расчетов по этой модели согласуются с экспериментальными данными.

Как правило, применение теории поляронов в полупроводниках ограничено областью малых констант электрон-фононной связи $\alpha \leq 1$. Учет поляронного эффекта в этом случае приводит к наблюдаемой экспериментально дублетной структуре в спектре поглощения при резонансных частотах с оптическими колебаниями полупроводника. Поляронный эффект играет также важную роль при объяснении транспортных свойств носителей тока и других явлений.

Случай сильной связи может реализоваться в сильно легированных полупроводниках [29, 45]. В сильно легированном полупроводнике дырочного типа электрон, подобно полярону в ионном кристалле, оказывается окруженным шубой из дырок. Аналогичное явление происходит с дыркой в полупроводнике электронного типа. Состояния такого типа с суммарным зарядом квазичастицы, равным нулю, были названы в [45] континуальным экситоном.

Основное и возбужденное состояния континуальных экситонов исследованы в [29, 45]. Образование континуальных экситонов приводит к сужению ширины запрещенной щели в полупроводниках и объясняет зависимость ширины щели от концентрации примеси.

Обычные экситонные состояния в металлах не могут реализоваться вследствие сильного экранирования притягивающего кулоновского потенциала электрона и дырки. Образование континуальных экситонов в металлах может приводить к особенностям в поглощении рентгеновского излучения (так называемые краевые сингулярности). Аннигиляцию позитронов в металлах можно также рассматривать как аннигиляцию континуального экситона, в котором позитрон играет роль дырки.

Идейная связь между теорией многих частиц в твердом теле и ядерной физикой позволяет переносить успешно работающие методы из одной области в другую [14–16]. Исходная проблема ядерной физики — проблема описания нуклона в мезонном поле аналогична проблеме полярона, т.е. проблеме взаимодействия электрона с фононным полем. Принципиальная трудность, возникающая в простейшем случае взаимодействия нерелятивистского нуклона со скалярным мезонным полем, — ультрафиолетовая расходимость при применении теории возмущений.

В [14] развита последовательная схема теории сильной связи для нуклона в мезонном поле, свободная от неустранимых расходимостей. Показано, что в случае двух нуклонов в мезонном поле задача аналогична случаю биполярона без кулоновского отталкивания (подробнее см. в разделе 5) и сводится к одночастичной задаче (9). Решение нелинейного уравнения (16) дает близкие к экспериментальным значения энергии связи и радиуса дейтрона.

4. Локализованные фононы

4.1. Спектр фононных частот

Выше рассматривалось поведение электронной плотности для состояния поляронного типа в пределе сильной связи. Форма этого распределения может характеризовать ряд важных эффектов и проявляться в различных экспериментах (см. раздел 3). Однако не менее важно, что

Таблица 3. Квадраты фононных частот $\omega^2(n, l)$ (в ед. ω_0^2) для основного и первого возбужденного самосогласованного состояний полярона

1/n	Основное состояние				Первое возбужденное самосогласованное состояние			
	2	3	4	5	2	3	4	5
0	0,412	0,9254	0,9792	0,992	1,538	0,3586	0,8896	0,9574
1	0	0,8932	0,9726	0,9898	2,54	0	0,7992	0,9676
2		0,8158	0,9596	0,9864		-1,62	0,882	0,9254
3			0,9416	0,9816			0,4948	0,9362
4				0,976				0,817

при сильном взаимодействии происходит не только локализация электронного состояния, но и существенное изменение состояния фононной подсистемы.

Присутствие дополнительного локализованного распределения электронной плотности с точки зрения динамики решетки можно рассматривать как наличие особого рода дефекта. Вследствие сильного электрон-фононного взаимодействия спектр фононов существенно изменяется и возникают связанные фононные состояния [94] аналогично тому, как это происходит в неидеальной решетке [95]. Однако если в последнем случае локализованность фононов связана с изменением либо массы атома, либо силовой постоянной, то для полярона локализованность фононов связана с локализованностью самого электронного распределения.

В случае трансляционной симметрии локализованные фононы образуют некоторое облако, которое связано и движется вместе с электроном. Отметим, что связанные фононные моды возникают и для случая слабой связи, для которого они и были первоначально исследованы и получили название диэлектрических мод [96]. В [94] дан обзор ранних теоретических и экспериментальных работ по этой теме. Случаю сильной связи посвящен обзор [97]. Ниже мы кратко изложим эти результаты.

Как отмечалось в разделе 2, свойства фононной подсистемы описываются в гармоническом приближении и определяются матрицей M_{kl} . Если ввести собственные векторы A_{sk} и собственные числа ω_s , определяемые как

$$\sum_k M_{kl} A_{sk} = \omega_s^2 A_{sl}, \quad A_{sk} = A_{s-k}^*,$$

$$\sum_k A_{sk} A_{tk}^* = \delta_{st}, \quad (20)$$

то соотношение (11) для фононной подсистемы примет диагональный вид:

$$\left[\sum_k \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \zeta_s^2} - \omega_s^2 \zeta_s^2 \right) + \tilde{E}_2 \right] \Theta_s(\zeta_s) = 0, \quad (21)$$

где $\zeta_s = \sum_k A_{sk} Q_k$ являются нормальными колебаниями решетки.

Таким образом, состояние фононной подсистемы в адиабатическом приближении описывается произведением волновых функций $\Theta(\zeta) = \prod_s \Theta_s(\zeta_s)$ и характеризуется набором квантовых чисел $[n_1, n_2, \dots, n_s]$ для невзаимодействующих фононов с ренормированными частотами ω_s , квадраты которых являются собственными числами матрицы M_{kl} .

Энергия \tilde{E}_2 связана с поправкой второго порядка для полной энергии системы и определяется выражением

$$\tilde{E}_2 = E_2 - \frac{1}{2} \sum_k \hbar \omega_k = \frac{\hbar}{2} \sum n_s \omega_s + \frac{\hbar}{2} \sum (\omega_s - \omega_0). \quad (22)$$

Итак, состояние фононной подсистемы определяется матрицей M_{kl} и ее собственными значениями ω_s^2 .

В случае сильного взаимодействия матрица M_{kl} определяется через состояние электронной подсистемы. Представляя электронную волновую функцию первого порядка в виде $\varphi_1(\mathbf{r}, \zeta) = \sum X_s(\mathbf{r}) \zeta_s$, можно получить для собственных векторов A_{sk} и собственных значений ω_s следующие соотношения [97–99]:

$$A_{sk}^* = \frac{2}{\omega_s^2 - \omega_0^2} \langle \varphi_0 | h_k | X_k \rangle,$$

$$h_k = c_k \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) + D_{-k}, \quad (23)$$

$$(H_0 - E_0) X_s = \frac{2\varphi_0}{\omega_0^2 - \omega_s^2} \sum_k h_k \langle \varphi_0 | h_k | X_s \rangle. \quad (24)$$

Соотношение (24) определяет спектр локальных частот фононов как задачу на собственные значения для линейного интегро-дифференциального уравнения. Эта задача была исследована для основного состояния полярона в [99], где ряд первых частот был найден численно. Для основного состояния полярона уравнение (24), сформулированное в вариационной форме, исследовалось также в [100].

В случае одномерного полярона значения ω_s найдены аналитически в [101]. Влияние дисперсии фононов на спектр локальных частот исследовано в [102]. Для возбужденных сферически-симметричных состояний полярона и F -центра уравнение (24) исследовалось в [102, 103]. В табл. 3 представлены приведенные ренормированные частоты фононов для основного и первого возбужденного самосогласованного состояний полярона. На рис. 4 представлена аппроксимация фононного спектра.

4.2. Фононная неустойчивость

Если все собственные числа матрицы M_{kl} положительны, то амплитуды колебаний фононов малы: $\Theta(\zeta_s) \propto \exp(-\omega_s \zeta_s^2 / 2)$, и система остается стабильной. В случае, если какое-либо из собственных чисел мало или отрицательно, амплитуда колебаний в данном приближении становится порядка размера кристалла и система теряет стабильность. Таким образом, проблема стабильности по отношению к движению фононов связана с исследованием собственных значений матрицы M_{kl} .

В [102, 103] численно найдено, что для возбужденных состояний полярона и F -центра существуют критические

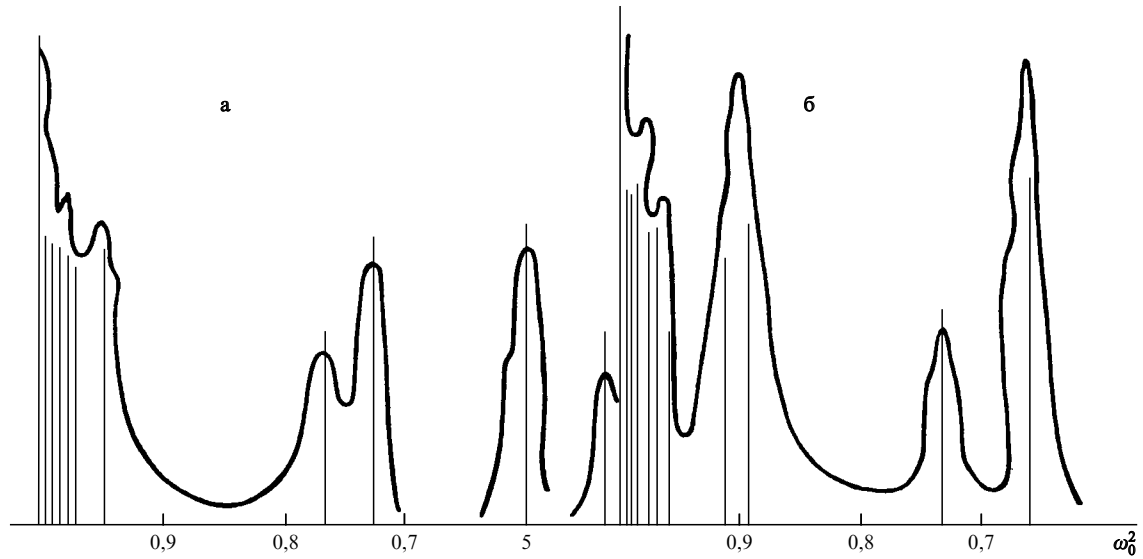


Рис. 4. Аппроксимация спектра частот связанных фононов для основного (а) и первого (б) самосогласованного состояния F -центра в КС1. Полуширина каждой линии спектра $\sigma = 0,0025\omega_0$

значения эффективного заряда F -центра $v_{cr} = Z/\epsilon_0 c = 0,21$, когда квадрат ренормированной частоты становится отрицательным для одной или нескольких мод и возникает фоновая неустойчивость системы. Как показано в [98], эта фоновая неустойчивость связана с ветвлением решений для нелинейной задачи (13).

В [72] численно найдены критические значения v , при которых, кроме возбужденного самосогласованного решения $2s$ -типа, возникают самосогласованные решения ($2s \mp 3d$)-типа. На рис. 5 представлены зависимости

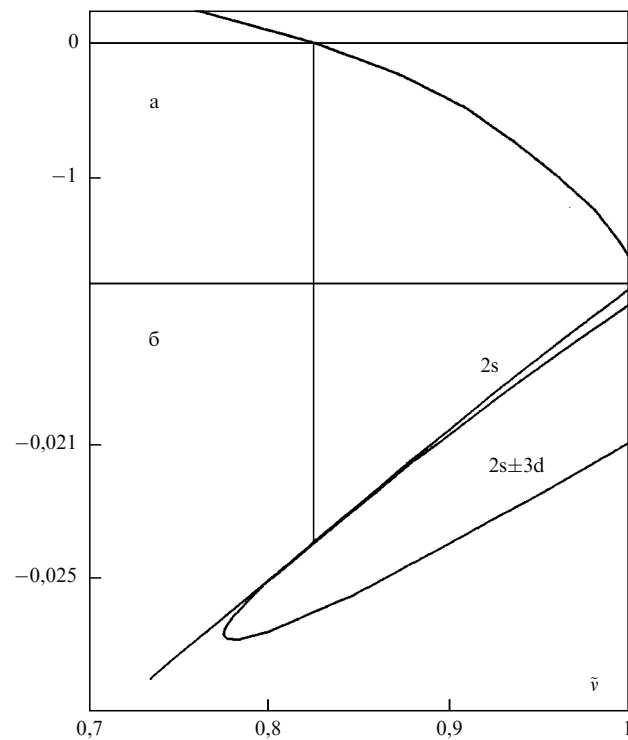


Рис. 5. Зависимости квадрата частоты $\tilde{\omega}_{32}^2 = \omega_{32}^2/\omega_0^2$ для локальной фоновой моды (а) и электронной энергии состояния $\bar{E} = W/(x^2\hbar\omega_0)$ (б) от параметра $\tilde{v} = Z/(Z + \epsilon_0 c)$

квадрата частоты ω_{nl}^2 для фоновой моды $n = 2, l = 3$ и электронной энергии самосогласованных состояний \bar{E} от эффективного заряда F -центра.

Появление фоновой неустойчивости аналогично эффекту Яна–Теллера. В случае полярона, кроме самосогласованных состояний, каждое из которых соответствует своей потенциальной яме, для каждой потенциальной ямы существует бесконечный набор электронных несамосогласованных уровней, каждый из которых характеризуется своей волновой функцией φ_n и энергией E_n :

$$\left(-\nabla^2 + \int d\mathbf{r}' \frac{|\varphi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{v}{r} - E_n\right) \varphi_n(\mathbf{r}) = 0, \quad (25)$$

где $\varphi(\mathbf{r}')$ — самосогласованное решение, определяемое соотношением (8).

Если электронные несамосогласованные уровни не вырождены, то согласно стандартной теории возмущений поправка первого порядка X_s может быть представлена через разложение по волновым функциям этих уровней:

$$X_s(\mathbf{r}) = C_s \varphi_s(\mathbf{r}), \quad \langle X_s(\mathbf{r}) \varphi_s(\mathbf{r}) \rangle = 0. \quad (26)$$

Подставляя соотношение (26) в уравнение для частот (24), получаем соотношение между ренормированными частотами фононов и спектром энергий электронов:

$$\frac{\omega_s^2}{\omega_0^2} = 1 - \frac{2e^2}{E_s - E_0} \left\langle \varphi_s \varphi_0 \left\langle \frac{\varphi_s \varphi_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right\rangle \right\rangle. \quad (27)$$

Если, однако, $E_s - E_0 \leq 2 \langle \varphi_s \varphi_0 \langle \varphi_s \varphi_0 e^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \rangle \rangle$, т.е. электронные уровни достаточно близки, квадрат частоты становится отрицательным: $\omega_s^2/\omega_0^2 < 0$. Возникает неустойчивость, приводящая к ветвлению решения. При этом состояние электрона имеет смешанную симметрию этих двух близких электронных состояний. На рис. 3 представлены схематически $2s$ - и $3d$ -состояния и возникающие состояния смешанного типа $2s \pm 3d$.

Изучение фоновой неустойчивости возбужденных поляронных состояний показывает, что ветвление само-

согласованных решений уравнения (8) связано с фоновой неустойчивостью, в результате которой возникает новое самосогласованное состояние смешанной симметрии. Это явление обусловлено следующими факторами.

Полярное состояние определяется нелинейным уравнением (9), которое включает в себя два типа потенциалов: самосогласованный поляризационный потенциал и кулоновский. Симметрии этих двух типов потенциала различны. При изменении количественного соотношения между этими типами взаимодействия происходит изменение симметрии для некоторых решений задачи. По-видимому, этот эффект является характерным не только для рассмотренного нами случая F -центра, но и для других аналогичных квазичастиц (пезополярона, флукутона и т.д.), связанных на неоднородностях.

Отметим некоторые важные следствия описанного явления. В отличие от задачи (8) задача о стабильности (24) является линейной. Таким образом, можно ожидать, что она является более легкой для исследования. С этой точки зрения было бы разумным первоначально изучать линейную задачу, определять точки ветвления и симметрию возникающих решений, а затем исследовать самосогласованные решения (8).

Указанная нестабильность может наблюдаться экспериментально. Она будет приводить к распаду возбужденных состояний за характерное время $|\omega^{-1}|$. Отметим, что для LiCl ($v = 0,35$), LiBr ($v = 0,29$), флюоридов щелочно-земельных металлов эффективный заряд $v = Z/\epsilon_0 c$ близок к критическому значению $v_{cr} = 0,21$. По-видимому, это может служить объяснением отсутствия люминесценции [104] в экспериментах по фото-возбуждению в кристаллах.

5. Биполярон в пределе сильной связи

5.1. История проблемы биполярона

Как отмечалось в разделе 1, биполяроны представляют другой пример реализации режима сильной связи. Интенсивное исследование биполяронов в последние годы связано не только с общефизическим интересом к этой проблеме, но и с важными приложениями, в частности с объяснением высокотемпературной сверхпроводимости [105, 106].

История исследования биполяронов драматична. В течение длительного периода вследствие вычислительных ошибок возможность существования биполяронов ставилась под сомнение. Постановка вопроса о существовании связанных двухэлектронных биполяронных состояний восходит к работам Огга [107], который, наблюдая аномально высокую проводимость в металл-аммиачных растворах (еще за сорок лет до открытия высокотемпературной сверхпроводимости в металлооксидных керамиках [108]), высказал предположение о возможной сверхпроводимости при температурах, превышающих температуру кипения азота.

В настоящее время существуют хорошо подтвержденные экспериментальные данные о том, что для металл-аммиачных растворов в определенной области концентраций (около 0,1 промилле) доминируют электронные состояния со спаренным спином [109, 110]. Ряд авторов связывают это с образованием биполяронов. Однако механизм явления еще окончательно не выяснен.

В последнее время появился ряд работ (см., например, [111–114]), в которых с использованием теории Кона–Шэма и методов молекулярной динамики найдено, что в указанной области концентраций возникают биполяронные состояния, и исследованы характеристики этих состояний (распределение электронной плотности, эффективный потенциал и т.д.).

Теоретически проблема биполярона была впервые рассмотрена в 1951 г. [115]. Исходным при описании биполяронных состояний является гамильтониан Пекара–Фрелиха для двух электронов, взаимодействующих с фононным полем:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{r_2} + \sum_k \hbar\omega_k b_k^+ b_k + U(|r_1 - r_2|) + \sum_k \left\{ c_k \exp[ik(r_1 - r_0)] b_k + c_k^* \exp[-ik(r_1 - r_0)] b_k^+ + c_k \exp[ik(r_2 - r_0)] b_k + c_k^* \exp[-ik(r_2 - r_0)] b_k^+ \right\}, \quad (28)$$

где r_1 и r_2 — координаты первого и второго электронов соответственно, r_0 — произвольная величина, выбранная за точку отсчета, $U(r)$ — потенциал взаимодействия между электронами. Обычно полагают $r_0 = 0$, и в таком виде гамильтониан (28) является исходным при исследовании биполяронов.

В большинстве работ далее переходят к вариационным расчетам для различных видов волновых функций биполярона. В полуклассической теории биполярона [1] волновые функции выбирались в мультипликативной форме. Было показано, что в этом приближении связанное состояние биполярона отсутствует. Впервые связанное состояние биполярона в рамках полуклассической модели получено в работах Винецкого и Гиттермана [116].

Наилучшие оценки для энергии связанного биполярона получены в работе [117], в которой при выборе пробных волновых функций учитывалась электронная корреляция. В частности, для параметра ионной связи $\eta = \epsilon_\infty/\epsilon_0$ получено условие существования биполяронных состояний $\eta > 0,14$. Современное состояние этих вопросов изложено в обзорах [118, 119]. Обобщение теории на случай наличия короткодействующих сил дано в [120, 121].

Отметим, что, в отличие от теории полярона, в которой известны асимптотически точные решения в пределе слабой связи и в пределе сильной связи, в теории биполярона в настоящее время отсутствуют точные решения. Более того, в случае биполярона, вообще, отсутствуют решения в области малых и промежуточных значений константы связи α .

Согласно [122] связанное биполяронное состояние возможно только при достаточно больших константах связи ($\alpha > 5,2$). При этом считается, что в адиабатическом пределе оба электрона движутся в единой поляронной потенциальной яме, создаваемой их быстрыми осцилляциями в яме. По этой причине взаимодействие электронов с поляризацией $\phi(r_1, r_2)$ имеет вид

$$\phi(r_1, r_2) = F(r_1) + F(r_2). \quad (29)$$

В итоге задача сводится к расчету двухчастичной волновой функции биполярона в самосогласованном

потенциале. Поскольку в настоящее время отсутствуют методы, позволяющие определять асимптотически точные решения для такой задачи, приходится вводить дополнительные предположения о виде волновой функции. При этом, как сказано выше, вид аппроксимации волновой функции может существенно повлиять на результат.

5.2. Адиабатическая теория для биполярона

В качестве альтернативного подхода приведем результаты работы [123], где развита последовательная адиабатическая трансляционно-инвариантная теория биполярона, основанная на адиабатической теории Боголюбова–Тябликова [30, 31]. Согласно этому подходу в адиабатическом пределе движения в биполяроне разделяются и удается выделить движение центра масс биполярона в виде плоской волны.

Относительные координаты электронов описывают быстрые осцилляции электронов в потенциальной яме, которая имеет вид их эффективного взаимодействия:

$$\phi(r_1, r_2) = \phi(r_1 - r_2). \tag{30}$$

При этом поляризационная потенциальная яма не фиксирована в пространстве, а адиабатически следует за движением центра масс электронов.

Взаимодействие (30) автоматически оказывается трансляционно-инвариантным, в отличие от обычного феноменологического подхода (29), не обладающего трансляционной инвариантностью с фиксированной в какой-либо области пространства потенциальной ямой.

В указанном подходе можно провести рассуждения, аналогичные изложенным в разделе 2. В итоге задача становится "почти одночастичной" и сводится к исследованию уравнения Шрёдингера для относительного движения пары электронов:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{\mu} \Delta_r + \Pi(r) + U(r) - W_0 \right\} \varphi_0(r) = 0, \tag{31}$$

$$\begin{aligned} \Pi(r) = & -2 \sum_k \frac{\omega_k |c_k|^2}{\omega_k^2 - (\mathbf{v}\mathbf{k})^2} \cos \frac{kr}{2} \times \\ & \times \int d\mathbf{R} \cos \frac{kR}{2} |\varphi_0(R)|^2. \end{aligned} \tag{32}$$

При этом эффективная масса биполярона определяется аналогично (10):

$$M^* = \frac{2}{3} \sum_k \frac{c_k^2 k^2}{\omega_k^3} \left| \int d\mathbf{R} \cos \frac{kR}{2} |\varphi_0(R)|^2 \right|. \tag{33}$$

5.3. Результаты расчетов

В [123] расчеты проводились для случая ионного кристалла ($\omega_k = \omega, c_k \propto k^{-1}$), а взаимодействие между двумя электронами $U(r)$ соответствовало кулоновскому отталкиванию, экранированному высокочастотной диэлектрической проницаемостью:

$$U(r_1 - r_2) = \frac{e^2}{\epsilon_\infty |r_1 - r_2|}. \tag{34}$$

Полученные решения существенно зависят от параметра $\kappa = 0, 125(1 - \epsilon_\infty/\epsilon_0)$.

На рис. 6 показаны частицеподобные решения краевой задачи (31), (32) для нескольких значений параметра

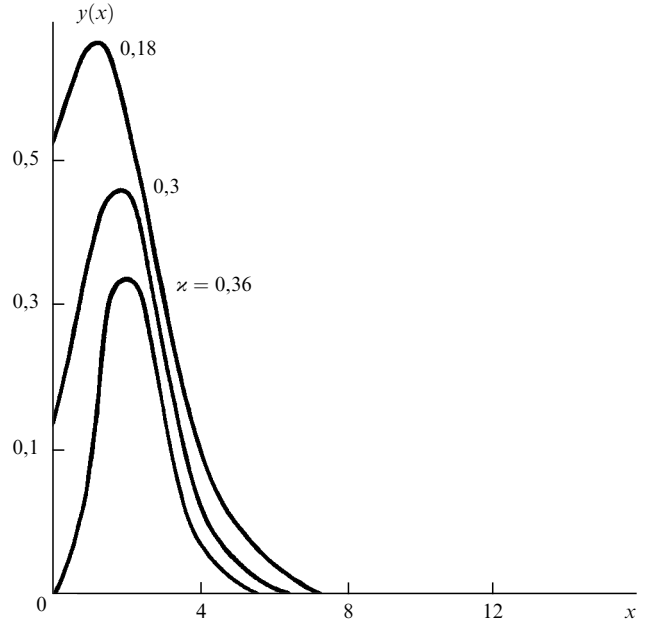


Рис. 6. Частицеподобные решения $y(x) = A\phi(Bx)$ уравнения (32) для различных значений параметра κ . $A = |W|^{-1}(e\hbar)\mu^{-1/2}(2\pi c)^{1/2}$, $B = \hbar(2\mu|W|)^{-1/2}$

κ . Из рисунка видно, что вероятность нахождения электронов в одной и той же пространственной точке уменьшается с ростом κ . При этом максимум распределения электронной плотности с ростом параметра κ смещается вправо и уходит на бесконечность при критическом значении $\kappa_{cr} = 0, 5$. Это следует из того, что при достаточно больших r асимптотика потенциала, фигурирующего в (31), (32), имеет вид

$$r \left\{ e\Pi(r) - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r} \right\} \approx \frac{4}{\epsilon} - \frac{1}{\epsilon_\infty}. \tag{35}$$

Локализованное решение (31) существует только при условии, когда правая часть (35) положительна, т.е. при $\kappa < 0, 5$. Соответственно, для параметра ионной связи $\eta = \epsilon_\infty/\epsilon_0 = (8\kappa - 1)/8\kappa$ получаем $\eta_{cr} = 0, 75$, что существенно больше значения параметра ионной связи, вытекающего из феноменологической теории.

Критическое значение параметра η_s , при котором биполяронное состояние стабильно, определяется из условия энергетической выгодности биполяронного состояния по отношению к распаду на два отдельных поляронных состояния:

$$E \leq 2E_{pol}, \tag{36}$$

где E_{pol} — энергия одиночного поляронного состояния.

Расчеты показывают, что неравенство (36) выполняется при условии $\eta < \eta_s$, где $\eta_s = 0, 31$. В табл. 4 приведены значения параметров для кристаллов, удовлетворяющих условию $\eta < \eta_s$, а также рассчитанные для них значения энергий, радиусов и эффективных масс биполяронов. В случаях, когда экспериментальное значение эффективной массы электрона m отсутствует, приведены результаты, зависящие только от отношения m/m_0 , где m_0 — масса свободного электрона в вакууме.

Условием адиабатически сильной связи является то, что частота осцилляций электрона в поляронной яме

Таблица 4. Сводная таблица значений¹ энергий \tilde{W} , полных энергий \tilde{E} , радиусов \tilde{R} и эффективных масс биполяронов \tilde{M}^*

Кристалл ²	η	$\hbar\omega$, эВ	$\tilde{\alpha}$	\tilde{W} , эВ	\tilde{E} , эВ	\tilde{R} , Å	\tilde{M}^*
LiF	0,213	0,082	5,24	10,7	2,13	2,3	31,6 ³
LiCl	0,235	0,052	4,43	4,6	0,93	3,7	40,3
LiBr	0,243	0,079	5,25	3,2	0,62	4,5	71,7
LiH	0,279	0,140	1,98	2,2	0,42	5,5	1,3
TlBr	0,176	0,014	4,54	1,56	0,317	6,3	0,47
TlCl	0,202	0,020	4,46	2,15	0,45	5,3	0,61
TlI	0,315	0,012	3,4	0,54	0,1	11,3	0,6
CsF	0,269	0,030	7,13	6,3	1,2	3,3	222
RbF	0,299	0,036	7,03	7	1,25	3	186
SrTiO ₃	0,016	0,0153	1,84	2,9	0,67	4,4	1,98

¹ $\alpha = \tilde{\alpha}(\mu/m_0)^{1/2}$, $W = -\tilde{W}\mu/m_0$, $E = -\tilde{E}\mu/m_0$, $R = \tilde{R}m_0/\mu$, $M^* = \tilde{M}^*(\mu/m_0)^2$. Для всех кристаллов, кроме LiF, TlBr, TlCl, принято, что $\mu \equiv m_0$.

² Экспериментальные значения параметров взяты из [2].

³ Значение эффективной массы для LiF взято из [124].

намного превосходит частоту колебаний решетки. Из табл. 4 следует, что для биполяронов это условие выполняется при разумных значениях эффективных масс электронов.

Таким образом, в то время как для одиночного полярона выполняется условие слабой или промежуточной связи, для биполярона в случае рассматриваемых кристаллов выполняется условие сильной связи. Это позволяет получить оценку критических значений констант электрон-фононной связи α_s , при которых возможно связанное биполярное состояние.

С учетом сказанного условие энергетической выгоды биполярного состояния имеет вид

$$|E| > 2\alpha\hbar\omega. \quad (37)$$

Поскольку $E \propto \alpha^2$, использование условия (37) позволяет оценить значения критических констант связи α_s . Эти значения приведены в табл. 5.

Таблица 5. Критические значения констант электрон-фононной связи α_s для различных значений параметра η

η	0	0,053	0,094	0,132	0,166	0,199	0,228	0,256	0,282	0,305	0,317
α_s	1,54	1,64	1,74	1,85	1,97	2,10	2,25	2,40	2,58	2,77	2,90

Отметим, что значения критических констант связи, полученные на основе точного решения уравнений биполярона, оказываются существенно ниже полученных с помощью пробных вариационных функций. Так, согласно [124] $\alpha_s \approx 5,4$ для $\eta = 0$, $\alpha_s \approx 7,2$ для $\eta = 0,1$, т.е. критические значения оказываются более чем вдвое больше полученных на основе точного решения проблемы биполярона.

Отметим также, что, так как при переходе от полярного состояния к биполярному происходит изменение симметрии решения задачи, вблизи критического значения параметра η_s должна происходить существенная перестройка фононного спектра, связанная с фононной неустойчивостью решения, аналогично тому, как это наблюдается для возбужденных состояний полярона (см. раздел 4).

Некоторые из полученных результатов можно легко перенести на двумерный случай. Проблема биполярона в двумерном случае приобрела интерес в связи с открытием высокотемпературной сверхпроводимости.

Простейшая модель, используемая для описания поляронов в трехмерном пространстве, состоит в

замене c_k в (12) на

$$c_{k,D} = \hbar\omega \left[\frac{\alpha_D}{V k^{D-1}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (2\sqrt{\pi})^{D-1} \Gamma\left(\frac{D-1}{2}\right) \right]^{1/2}. \quad (38)$$

При этом считается, что физические параметры (частоты, диэлектрические проницаемости, эффективные массы) в двумерном слое такие же, как и в объеме.

Зависимость $c_{k,D}$ от волнового вектора выбирается из условия, что взаимодействие электрона с поляризацией в D -мерном случае имеет кулоновский вид $1/r$. Численный фактор в (38) выбирается из условия соответствия $c_{k,D}$ значению c_k при $D = 3$.

Для оценки энергии и критических констант в двумерном случае можно воспользоваться качественными оценками, полученными в [125] на основе гауссова приближения. Эти оценки связывают энергии биполярона в трех- и двумерном случае.

В результате для энергии связи биполярона в двумерном случае получаем

$$E_{2D, \text{bipol}} = \frac{2}{3} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^2 E_{3D, \text{bipol}}, \quad (39)$$

где $E_{3D, \text{bipol}}$ — энергия биполярона в трехмерном случае. Соответственно, $\kappa_{2D} = \kappa_{3D}$, $\eta_{2D} = \eta_{3D}$.

Критическое значение константы электрон-фононной связи находится аналогично и в двумерном случае имеет вид

$$\alpha_{s, 2D} = \frac{3}{4\pi} \alpha_{s, 3D}, \quad (40)$$

где значения α_s даются табл. 5.

Развитая выше трансляционно-инвариантная теория биполярона приводит к качественным отличиям от результатов, полученных в обычной адиабатической схеме. Согласно результатам [123] картина представляется такой. При образовании биполярного состояния электроны локализованы в глубокой потенциальной яме с энергией электронного возбуждения $W \sim 1$ эВ. Эта энергия остается примерно такой же вплоть до критического значения параметра $\eta_s = 0,31$, при котором происходит развал биполярного состояния на одиночные поляроны.

При этом вплоть до критических значений $\eta = \eta_s$ частота осцилляций электронов в биполярной потенциальной яме намного превосходит частоту осцилляций

ионов решетки, и можно использовать адиабатическое приближение. Лишь для кристаллов с очень малыми константами электрон-фононной связи, например для PbSe ($\alpha = 0,215$) и PbS ($\alpha = 0,317$), в которых $\eta < \eta_s$, т.е. в которых в принципе возможны биполяронные состояния, критерий адиабатичности не выполняется.

Наилучшее представление о характеристиках биполяронов дают кристаллы TlVg и TlCl. Континуальные приближения в них выполняются хорошо; радиусы состояний равны 20 и 16 Å соответственно. Условие адиабатичности также выполняется с большим запасом, несмотря на сравнительно небольшую константу связи: $\alpha \approx 2,5$.

Важно отметить, что во всех случаях, представленных в табл. 4, имеется большое различие между электронной энергией биполярона W и полной энергией E . Электронная энергия биполярона примерно в пять раз превосходит по модулю полную энергию биполярона, в то время как в случае одиночного полярона в пределе сильной связи это отношение равно трем. Такая особенность может приводить, в частности, к большому различию между энергиями фото- и термодиссоциации биполярона.

В некоторых кристаллах критерий образования стабильных биполяронных состояний находится на пределе. Так, в кристалле RbF биполярон стабилен при комнатной температуре ($\eta = 0,3$) и не стабилен при гелиевой температуре ($\eta = 0,32 > \eta_s$). Таким образом, в RbF охлаждение от комнатных температур до гелиевых приводит к диссоциации биполярона. Этот эффект можно было бы наблюдать по спектрам поглощения, по изменению подвижности, циклотронной частоты и др.

Отметим также, что рассмотренный выше способ выделения трансляционного движения и сведения двухчастичной задачи к нелинейному уравнению Шрёдингера для волновой функции относительного движения является достаточно универсальным и может быть применен для любой другой двухчастичной задачи в пределе сильной связи (для экситона, электронно-дырочной пары и т.д.).

6. Заключение

Несмотря на длительную историю исследования поляронов, интерес к проблеме полярона в пределе сильной связи не уменьшается. По-видимому, это вызвано в первую очередь особым положением, которое занимает полярон в физике взаимодействия частиц с квантовым полем.

В отличие от большинства других квазичастиц (фононов, магнонов, плазмонов и т.д.), определяющихся спектром и типом линейных возмущений системы, полярон в пределе сильной связи является "нелинейной" квазичастицей, образующейся в результате нелинейного самосогласованного взаимодействия. Это, в свою очередь, требует применения для полярона нестандартной математики [66, 128].

На наш взгляд, возможности методов современного математического анализа еще мало используются в поляронной проблеме. Приведенный нами пример показывает, что даже обобщение достаточно известного метода Боголюбова–Тябликова на случай двухчастичных автолокализованных состояний дает новые результаты, которые существенно отличаются от обычных вариационных оценок.

Представленные выше результаты показывают, что полярон большого радиуса в пределе сильной связи обладает сложной внутренней структурой, выражающейся в наличии как большого набора различных самосогласованных состояний электронной подсистемы, так и спектра локальных фононов. При этом особенности поведения спектра локальных фононов тесно связаны с топологией самосогласованных состояний электронной подсистемы и определяются типом симметрии самосогласованного потенциала для нелинейного уравнения Шрёдингера.

Отметим, что исследование уравнений подобного типа связано с развитием численных методов решения нелинейных краевых задач. По-видимому, новые интересные результаты в этой области могут быть получены при активном использовании высокопроизводительных вычислительных комплексов для параллельных вычислений.

Изложенные выше факты говорят о том, что экспериментальная проверка возможности существования поляронных и биполяронных состояний большого радиуса в пределе сильной связи достаточно неоднозначна. Однако, по нашему мнению, яркие качественные результаты теории (например, наличие возбужденных самосогласованных состояний или фононная неустойчивость) могут быть выявлены в специально поставленных экспериментах.

Список литературы

1. Пекар С И *Исследования по электронной теории кристаллов* (М., Л.: Гостехиздат, 1951)
2. Kartheuser E *Polarons in ionic crystals and polar semiconductors* (Ed. J T Devreese) (Amsterdam: North-Holland, 1972) p.717
3. Kuper C G, Whitfield G D *Polarons and Excitons* (Edinburgh: Oliver & Boyd Ltd., 1963)
4. Фирсов Ю А *Поляроны* (М.: Наука, 1975)
5. Devreese J T, Peeters F M *Polarons and excitons in polar semiconductors and ionic crystals* (N.Y.: Plenum, 1984)
6. Родригес К, Федянин В К *ЭЧАЯ* **15** 870 (1984)
7. Зырянов П С, Клиндер М И *Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках* (М.: Наука, 1976)
8. Клиндер М И *УФН* **146** 105 (1985)
9. Нагаев Э Л *Физика магнитных полупроводников* (М.: Наука, 1979)
10. Лахно В Д *ФТТ* **24** 2787 (1982)
11. Лахно В Д *ФТТ* **27** 669 (1985)
12. Jortner J *Mol. Phys.* **5** 257 (1962)
13. Пикаев А К *Сольватированный электрон в радиационной химии* (М.: Наука, 1969)
14. Лахно В Д *ТМФ* **100** 219 (1994)
15. Kutschera M, Wojcik W *Phys. Rev. C* **47** 1077 (1993)
16. Пекар С И *ЖЭТФ* **27** 399 (1954)
17. Pang T *Phys. Rev. Lett.* **61** 849 (1988)
18. Герман Э Д, Кузнецов А М *Кинетика жидкофазных реакций переноса* (М.: ВИНТИ, 1990)
19. Atanasov V P, Balabaev N K, Lakhno V D, Molchanov A M *J. Mol. Electron.* **6** 155 (1990)
20. Лахно В Д, Чуев Г Н *Хим. физ.* **11** 382 (1992)
21. Чуев Г Н *Ж. теор. и экп. хим.* **28** 180 (1992)
22. Chuev G N, Lakhno V D *J. Theor. Biol.* **163** 51 (1993)
23. Holstein T *Ann. Phys.* **8** 325, 343 (1959)
24. Лахно В Д *Автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук* (Пушино, 1987); Lakhno V D, in *Excited polarons states in condensed media* (Ed. V D Lakhno) (Manchester: Manchester Univ. Press, 1991)
25. Александров А С, Кребе А Б *УФН* **162** 1 (1992)
26. Mitra T K, Chatterjee A, Mukhopadhyay S *Phys. Rep.* **153** 91 (1987)
27. Pokatilov E P, Fomin V M *Phys. Rep.* **158** 206 (1988)
28. Lakhno V D *Excited polarons states in condensed media* (Manchester: Manchester Univ. Press, 1991)
29. Lakhno V D, in *Polarons and applications* (Ed. V D Lakhno) (Chichester: Wiley, 1994)
30. Боголюбов Н Н *УМЖ* **2** 3 (1950)
31. Тябликов С В *ЖЭТФ* **21** 377 (1951)
32. Солодовникова Е П, Тавхелидзе А Н, Хрусталев О А *ТМФ* **10** 162 (1972)
33. Боголюбов Н Н, Ширков Д В *Квантовые поля* (М.: Наука, 1982)
34. Fröhlich H, Pelzer H, Zienau S *Philos. Mag.* **41** 221 (1950)
35. Fröhlich H *Adv. Phys.* **3** 325 (1954)
36. Рашба Э И *Экситоны* (Ред. Э И Рашба, М В Стердж) (М.: Наука, 1985) с. 385
37. Emin D, Holstein T *Phys. Rev. Lett.* **36** 323 (1976)
38. Покатилов Е П *ФТТ* **6** 2809 (1964)
39. Клюканов А А, Покатилов Е П *ФТТ* **11** 766 (1969)
40. Engineer M, Whitfield G *Phys. Rev.* **179** 869 (1969)
41. Whitfield G, Platzman P M *Phys. Rev. B* **6** 3987 (1972)
42. Дейген М Ф, Пекар С И *ЖЭТФ* **21** 803 (1951)
43. Киттель Ч *Квантовая теория твердых тел* (М.: Наука, 1967)
44. Gross E P *Ann. Phys.* **19** 219 (1962)
45. Lakhno V D *Phys. Rev. B* **46** 7519 (1992)
46. Лахно В Д *ФТТ* **26** 2547 (1984)
47. Miyake S *J. Phys. Soc. Jpn* **38** 181 (1975)
48. Adamowski J, Gerlach B, Leshke H *Phys. Lett. A* **79** 249 (1980)

49. Уизем Дж *Нелинейные волны* (М.: Мир, 1977)
50. Захаров В Е, Соболев В В, Сынах В С *ПМТФ* **1** 92 (1972)
51. Halperin B, Lax M *Phys. Rev.* **148** 722 (1966)
52. Zittartz J, Langer J S *Phys. Rev.* **148** 747 (1966)
53. Лифшиц И М, Гредескул С А, Пастур Л А *Введение в теорию неупорядоченных систем* (М.: Наука, 1982)
54. Иваненко Д Д *Нелинейная квантовая теория поля* (М.: ИЛ, 1959)
55. Миронов В А, Сергеев А М, Шер Э М *ДАН СССР* **260** (2) 325 (1981)
56. Балабаев Н К, Лахно В Д, Молчанов А М *Препринт* (Пушино: НЦБИ АН СССР, 1983)
57. Amirkhanov I V, Lakhno V D, Puzynini I V et al., in *Proc Int. Conf. NEEDS* (Eds V G Makhankov, O K Pashaev) (Berlin: Springer, 1991)
58. Амирханов И В, Пузынин И В, Стриж Т А и др. *Препринт* (Пушино: НЦБИ АН СССР, 1990)
59. Lions P L *Nonlin. Anal.: Theory Meth. and Appl.* **4** 1063 (1980)
60. Янкаускас З К *Изв. вузов. Сер. Радиофиз.* **9** 430 (1968)
61. Колоколов А А *ПММ* **38** (5) 922 (1974)
62. Балабаев Н К, Лахно В Д *ТМФ* **45** 139 (1980)
63. Балабаев Н К, Лахно В Д *Опт. и спектроскоп.* **55** (2) 308 (1983)
64. Alfimov G L, Eleonsky V M, Kulagin N E et al. *Physica D* **44** 168 (1990)
65. Devreese J, Evrard R, Kartheuser E, Brosens F *Solid State Commun.* **44** 1435 (1982)
66. Карасев М В, Маслов В П, в кн. *Итоги науки и техники* Т. XIII (М.: ВИНТИ, 1979)
67. Зильберман Г Е *ЖЭТФ* **19** 136 (1949)
68. Карасев М В, Осипов Ю В *ТМФ* **52** 263 (1982)
69. Hagen D E, Van Zandt L L, Prohofsky E W *Phys. Rev. B* **2** 553 (1970)
70. Габдуллин Р Р *Препринт* (Пушино: НЦБИ АН СССР, 1991)
71. Габдуллин Р Р *ДАН РАН* **333** 23 (1993)
72. Gabdoulline R R *Phys. Lett. A* **185** 390 (1994)
73. Fowler W B *Treatise Solid State Chem.* **2** 133 (1975)
74. Mollenauer L F, Baldacchini G *Phys. Rev. Lett.* **21** 465 (1971)
75. Ewig C S, Tellinghuisen, Mendenhall M H *Chem. Phys. Lett.* **188** 501 (1992)
76. Adachi J, Kosugi N *Bull. Chem. Soc. Jpn* **66** 3314 (1993)
77. Кристофелл Н Н *Теория примесных центров малых радиусов в ионных кристаллах* (М.: Наука, 1974)
78. Bosi L, Cova S, Spinolo G *Phys. Status Solidi B* **68** 603 (1975)
79. Bosi L, Nimis M *Nuovo Cimento D* **13** 1483 (1991)
80. Пекар С И *УФН* **50** 197 (1953)
81. Пекар С И, Перлин Ю Е *ЖЭТФ* **43** 1108 (1962)
82. Москаленко В А *ЖЭТФ* **34** 346 (1958)
83. Лахно В Д *ДАН СССР* **272** (1) 85 (1983)
84. Kun H, Rhys A *Proc. Roy. Soc.* **204** 406 (1950)
85. Дейген М Д *ЖЭТФ* **26** 300 (1954)
86. Kevan L, Feng D-F *Chem. Rev.* **80** 1 (1980)
87. Lakhno V D, Vasil'ev O V *Chem. Phys.* **153** (1, 2) 147 (1991)
88. Чуев Г Н *ЖЭТФ* **105** (3) 626 (1994)
89. Kubo R, Toyozawa Y *Prog. Theor. Phys.* **13** 160 (1955)
90. Marcus R A *Ann. Rev. Phys. Chem.* **15** 155 (1964)
91. Догондзе Р Р, Кузнецов А М, в кн. *Итоги науки и техники. Сер. Физ. хим.* Т. II (М.: ВИНТИ, 1973)
92. Marcus R A, Sutin N *Biochim. Biophys. Acta* **811** 265 (1985)
93. Miller J R, in *Adv. in Chem. Ser.* (Ed. J R Bolton et al.) (Washington: ACS, 1991) p. 228
94. Левинсон О Б, Рашба Э И *УФН* **111** 683 (1973)
95. Марадудин А *Дефекты и колебательный спектр кристаллов* (М.: Мир, 1972)
96. Коган Ш М, Сурис Р А *ЖЭТФ* **50** 1279 (1966)
97. Чуев Г Н *Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук* (Пушино, 1990); Lakhno V D, Chuev G N, in *Excited polaron states in condensed media* (Ed. V D Lakhno) (Manchester: Manchester Univ. Press, 1991)
98. Chuev G N, Lakhno V D *Phys. Rev. B* **48** 12655 (1993)
99. Miyake S J *J. Phys. Soc. Jpn* **41** 747 (1976)
100. Мельников В И *ЖЭТФ* **74** 772 (1978)
101. Мельников В И *ЖЭТФ* **72** 2345 (1972)
102. Чуев Г Н *ФТТ* **33** 3059 (1991)
103. Lakhno V D, Chuev G N *Phys. Status Solidi B* **152** 79 (1989)
104. Stoneham A M *Theory of defects in solids* (Oxford: Clarendon Press, 1975)
105. De Jong L J *Physica C* **152** 171 (1988)
106. Micnas R, Ranninger J, Robalszkiewicz S *Rev. Mod. Phys.* **62** 113 (1990)
107. Ogg R A *Phys. Rev.* **70** 93 (1946)
108. Беднорц И Г, Мюллер К А *УФН* **156** (2) 323 (1988)
109. Nicoloso N, Freyland W J. *Phys. Chem.* **87** 1997 (1987)
110. Nakamura Y J. *de Phys. IV C1* 5 (1991)
111. Seloni A, Parrinello M, Car R, Carevali P J. *Phys. Chem.* **91** 4947 (1987)
112. Fois E S, Seloni A, Parrinello M, Car R J. *Phys. Chem.* **92** 3268 (1988)
113. Fois E S, Seloni A, Parrinello M *Phys. Rev. B* **39** 4812 (1989)
114. Мартуна Г Ж, Денг З, Клейн М Л *J. Chem. Phys.* **98** 555 (1993)
115. Пекар С И, Томасевич О Ф *ЖЭТФ* **21** (11) 1219 (1951)
116. Винецкий В Л, Гиттерман М Ш *ЖЭТФ* **33** (3) 730 (1957)
117. Супрун С Г, Мойжес Б Я *ФТТ* **24** (5) 1571 (1982)
118. Винецкий В Л, Каширина Н И, Пашицкий Э А *УФЖ* **37** (1) 76 (1992)
119. Smondyrev M A, Fomin V M, in *Polarons and applications* (Ed. V D Lakhno) (Chichester: Wiley, 1994)
120. Emin D, Hilery M S *Phys. Rev. B* **39** 6575 (1989)
121. Hiramoto H, Toyozawa Y J. *Phys. Soc. Jpn* **54** 245 (1985)
122. Adamowski J, Bednarek S J. *Phys. Condens. Matter* **4** 2845 (1992)
123. Лахно В Д *Препринт* (Пушино: ПНЦ РАН, 1993); *Phys. Rev. B* **51** 3512 (1995)
124. Iadonisi G, Bassani F, Strinati G *Phys. Status Solidi B* **153** 611 (1989)
125. Verbist G, Peeters F M, Devreese J T *Solid State Commun.* **76** 1005 (1990); *Phys. Rev. B* **43** 2712 (1991)
126. Devreese J, in *Polarons and applications* (Ed. V D Lakhno) (Chichester: Wiley, 1994)
127. Peeters F M, in *Polarons and applications* (Ed. V D Lakhno) (Chichester: Wiley, 1994)
128. Захаров В Е, Манаков С В, Новиков С П, Питаевский Л П *Теория солитонов: Метод обратной задачи* (М.: Наука, 1980)

THE STRUCTURE OF STRONG-COUPLED LARGE POLARON

V.D. Lakhno, G.N. Chuev

Institute of Mathematical Problems of Biology, Russian Academy of Sciences

142292 Pushchino, Moscow Region, Russia

Tel. (7-095) 923-35 58, Fax (7-095) 938-19 14

E-mail: com@impb.serpukhov.su

The polaron theory is considered on the base of the translation-invariant Bogolubov–Tyablikov approach. The calculations of the autolocalized electron states are presented for different types of interaction. It is shown that the internal structure of these states strongly relates with the structure and peculiarities of the local phonons spectrum, calculations of the spectrum are given for the strong electron-phonon interaction. The application of the model and the experimental observation of the large polaron are discussed. The Bogolubov–Tyablikov method is generalized on the bipolaron state, and the critical parameters of the bipolaron stability and existence are evaluated.

PACS numbers: **71.38.+i, 71.50.+t**

Bibliography — 128 references

Received 21 October 1994, revised 15 December 1994