

Биполярон в анизотропных кристаллах (произвольная связь)

Каширина Н.И.^{*1}, Лахно В.Д.^{2}**

¹*Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева, Национальная академия наук
Украины, Киев, 03028, Украина*

²*Институт математических проблем биологии, Российская академия наук, Пущино,
Московская область, 142290, Россия*

Аннотация. В работе в континуальном приближении методом Буймистрова-Пекара получен функционал биполярона в анизотропных кристаллах для произвольной величины электрон-фононной связи. Изучается влияние электронных корреляций, связанных с прямой зависимостью волновой функции системы от расстояния между электронами, на энергию связи биполярона. Проведено сравнение одноцентральной и двухцентральной (соосная конфигурация) моделей биполярона в кристаллах с анизотропными эффективными массами для предельного случая квазиодномерных систем (система «лёгкая ось»).

Ключевые слова: электрон-фононное взаимодействие, анизотропные кристаллы, полярон, биполярон.

ВВЕДЕНИЕ

Теория поляронов и биполяронов (БП) изначально разрабатывалась для изотропных полярных сред. Одним из основных приложений биполяронной теории являлись попытки на её основе построить теорию сверхпроводимости [1] и высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) (см. обзоры [2, 3] и ссылки в них). В настоящее время теория поляронов и БП интенсивно развивается не только в твёрдом теле, но и в биологических системах [4–7].

В ДНК при низких температурах для хаотических нуклеотидных последовательностей (λ -ДНК) удалось наблюдать сверхпроводящее состояние [4]. Для объяснения сверхпроводимости в низкоразмерных системах, включая биологические объекты, необходимо дальнейшее развитие теории БП.

Для одномерных и квазиодномерных систем, примером которых может служить ДНК, в пределе сильной связи существует точное солитонное решение, описываемое моделью Холстейна [8]. Как показано в [8], гамильтониан континуального полярона, рассматривавшегося Холстейном, с точностью до обозначений совпадает с гамильтонианом Фрёлиха. Переход к системам с пониженной размерностью можно смоделировать в рамках модели анизотропного полярона: при достаточной степени анизотропии эффективных масс зонного электрона в рамках одной модели можно описать как квазиодномерные, так и квазидвумерные системы. Отдельного исследования заслуживает вопрос о пространственной конфигурации квазиодномерного БП.

^{*}kashirina@mail.ru

^{**}lak@impb.psn.ru

Переход от изотропного трехмерного БП к квазиодномерному, или одномерному БП приводит к качественно новому состоянию: в пределе сильной связи появляется точное аналитическое решение для поляронной задачи (солитон Холстейна), которое отсутствует для трехмерного полярона.

Наиболее наглядно качественный переход от трехмерной к одномерной системе может быть проиллюстрирован на примере конденсона Дейгена-Пекара [9]. Как известно, в трехмерном изотропном кристалле континуальный конденсон (конденсон большого радиуса) не может образоваться, т.к. соответствующий ему функционал не имеет минимума. В то же время, переход системы в одномерное состояние приводит к появлению соответствующего минимума и точного солитонного решения, соответствующего этому минимуму. Переход изотропного трехмерного полярона в одномерное состояние может быть смоделирован, например, включением магнитного поля большой величины [10], либо введением значительной анизотропии эффективной массы зонного электрона (система типа лёгкая ось).

В пределе сильной связи анизотропный БП исследовался в рамках как двухцентровой [11], так и одноцентровой моделей [12]. Обратим внимание на то, что численных расчётов энергии БП для двухцентровой модели до настоящего времени не было проведено, т.к. в [11] были опубликованы только аналитические выражения энергии БП для кристаллов с анизотропными эффективными массами и диэлектрическими проницаемостями.

В настоящей работе будет проведено сравнение энергии двухцентрового и одноцентрового БП для квазиодномерного случая (соосная конфигурация БП), а также в рамках метода Буймистрова-Пекара будет рассмотрен БП промежуточной связи в анизотропных кристаллах.

2. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ И СООТНОШЕНИЯ

Гамильтониан заряженной частицы в поле фононов, взаимодействующей с кулоновским зарядом, расположенным в начале координат, можно записать в виде:

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \hat{T}(\mathbf{r}) + \hat{V}_C(\mathbf{r}) + \hat{H}_{ef}(\mathbf{r}) + \hat{H}_{ph}, \quad (1)$$

где

$\hat{T}(\mathbf{r})$ – оператор кинетической энергии частицы с координатой $\mathbf{r}$;

$\hat{V}_C(\mathbf{r})$ описывает кулоновские взаимодействия в системе;

$\hat{H}_{ef}(\mathbf{r})$ – оператор электрон-фононного взаимодействия;

$\hat{H}_{ph}$ – гамильтониан поля фононов.

Соответственно, для двух частиц с координатами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \hat{T}(\mathbf{r}_1) + \hat{T}(\mathbf{r}_2) + \hat{V}_C(\mathbf{r}_1) + \hat{V}_C(\mathbf{r}_2) + \hat{V}_{ee}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \hat{H}_{ef}(\mathbf{r}_1) + \hat{H}_{ef}(\mathbf{r}_2) + \hat{H}_{ph}, \quad (2)$$

где

$\hat{T}(\mathbf{r}_1)$, $\hat{T}(\mathbf{r}_2)$ – операторы кулоновской энергии 1 и 2 электронов;

$\hat{V}_{ee}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – оператор кулоновского взаимодействия между частицами;

$\hat{V}_C(\mathbf{r}_1)$, $\hat{V}_C(\mathbf{r}_2)$ – операторы взаимодействия электронов с кулоновским центром, расположенным в начале координат (для свободного БП данные слагаемые отсутствуют);

$\hat{H}_{ef}(\mathbf{r}_1)$, $\hat{H}_{ef}(\mathbf{r}_2)$ – операторы взаимодействия электронов с фононами;

$\hat{H}_{ph}$ – оператор фононного поля.

Численные расчёты будут выполняться для кристаллов с одноосной анизотропией. В качестве пробных волновых функций (ВФ) будем использовать сумму гауссовых орбиталей:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i=1}^{2N} C_i \exp(-a_{i1}z_1^2 - 2a_{2i}z_1z_2 - a_{3i}z_2^2) \cdot \exp(-b_{i1}\rho_1^2 - 2b_{2i}\rho_1\rho_2 - b_{3i}\rho_2^2), \quad (3)$$

где $\mathbf{r} = \{x, y, z\}$ – радиус-вектор электрона; $\rho^2 = x^2 + y^2$; $C_i, a_{1i}, a_{2i}, a_{3i}, b_{1i}, b_{2i}, b_{3i}$ – вариационные параметры.

Процедура автоматической симметризации ВФ (3) требует выбора чётного количества слагаемых в (3), чтобы можно было провести попарную симметризацию слагаемых, входящих в ВФ (3). В дальнейшем полагаем для синглетных состояний $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$.

2.1. Кулоновские взаимодействия в анизотропных кристаллах

Для построения гамильтониана двухэлектронной системы в анизотропном кристалле необходимо получить выражения, описывающие взаимодействие электрона с неподвижным кулоновским центром, и электронов между собой с учётом анизотропии статической и высокочастотной диэлектрических проницаемостей кристалла. Уравнение Пуассона для точечного заряда, помещённого в точку $\mathbf{r}$, имеет вид $\text{Div} \mathbf{D} = 4\pi e \delta(\mathbf{r})$. В анизотропном кристалле $\mathbf{D}_i = \varepsilon_{ik} E_k = -\varepsilon_{ik} \partial \phi / \partial x_k$. Выберем оси x, y, z вдоль главных осей тензора ε_{ik} . Уравнение для потенциала, создаваемого точечным зарядом, примет вид:

$$\varepsilon_x \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \varepsilon_y \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \varepsilon_z \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -4\pi e \delta(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Вводя новые переменные по формуле:

$$x = x' \sqrt{\varepsilon_x}, y = y' \sqrt{\varepsilon_y}, z = z' \sqrt{\varepsilon_z}, \quad (5)$$

и воспользовавшись фурье-представлением кулоновского потенциала получим:

$$\phi = \frac{e'}{r'} = \frac{e}{\sqrt{\varepsilon_x \varepsilon_y \varepsilon_z}} \left[\frac{x^2}{\varepsilon_x} + \frac{y^2}{\varepsilon_y} + \frac{z^2}{\varepsilon_z} \right]^{-1/2} = \frac{e'}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{\mathbf{q}^2} d^3\mathbf{q} = \frac{e}{2\pi^2} \sum_{i,k} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{\mathbf{q}_i \varepsilon_{ik} \mathbf{q}_k} d^3\mathbf{q}. \quad (6)$$

В том случае, когда оси выбраны произвольно, $\phi = e' / \sqrt{|\varepsilon| (\varepsilon^{ik})^{-1} x_i x_k}$. Т. о. операторам энергии кулоновских взаимодействий в анизотропной системе соответствуют выражения:

$$V_C = -\frac{e^2 Z}{2\pi^2} \sum_{i,k} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{\mathbf{q}_i \varepsilon_0^{ik} \mathbf{q}_k} d^3\mathbf{q}, \quad V_{ee} = \frac{e^2}{2\pi^2} \sum_{i,k} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{\mathbf{q}_i \varepsilon_{\infty}^{ik} \mathbf{q}_k} d^3\mathbf{q}, \quad (7)$$

где Z – целое число, соответствующее кратности статического заряда, помещённого в начале координат; $\varepsilon_{\infty}^{ik}, \varepsilon_0^{ik}$ – компоненты тензоров высокочастотной и низкочастотной диэлектрических проницаемостей кристалла соответственно, $i, k = x, y, z$ – индексы, нумерующие компоненты вектора $\mathbf{q}$ в импульсном пространстве и компоненты тензора диэлектрической проницаемости.

Дальнейшее рассмотрение проводим для кристаллов с одноосной анизотропией. Будем считать, что ось OZ совпадает с одной из главных осей тензора диэлектрической проницаемости, являясь при этом кристаллографической осью симметрии четвёртого, третьего или шестого порядка, а направление двух других осей, совпадающих с

главными осями тензора диэлектрической проницаемости, может быть выбрано произвольно.

Т.о. для аксиально-симметричных кристаллов в выбранной описанным выше образом системе координат

$$\varepsilon_{\infty}^{xx} = \varepsilon_{\infty}^{yy} = \varepsilon_{\infty}^{\perp}, \varepsilon_{\infty}^{zz} = \varepsilon_{\infty}^{\parallel}; \quad \varepsilon_0^{xx} = \varepsilon_0^{yy} = \varepsilon_0^{\perp}, \varepsilon_0^{zz} = \varepsilon_0^{\parallel}, \quad (8)$$

недиагональные компоненты ($i \neq j$) тензоров $\varepsilon_{\infty}^{ij}$ и ε_0^{ij} равны нулю. В подавляющем большинстве анизотропных кристаллов анизотропией высокочастотной диэлектрической проницаемости можно пренебречь, в то время как статическая диэлектрическая проницаемость может обладать значительной анизотропией. Так, например, для анизотропного сегнетоэлектрика LiNbO_3 , $n^2 = \varepsilon_{\infty} = (2.29)^2$, где n – показатель преломления, ε_{∞} – высокочастотная диэлектрическая проницаемость, $\varepsilon_0^{xx} = \varepsilon_0^{yy} = \varepsilon_0^{\perp} = 85$, $\varepsilon_0^{zz} = \varepsilon_0^{\parallel} = 29$ – компоненты тензора статической диэлектрической проницаемости.

2.2. Электрон-фононное взаимодействие в анизотропных кристаллах

Взаимодействие заряженной частицы с полем фононов в анизотропных кристаллах исследовалось в [13, 14]. В кристалле с одноосной анизотропией оператор электрон-фононного взаимодействия (ось z совпадает с осью симметрии, оси x и y лежат в плоскости симметрии кристалла), полученный в [13], имеет вид:

$$\hat{H}_{ef}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 4\pi e \int \sum_{i,j,\alpha} \frac{d\mathbf{q}}{\mathbf{q} \hat{\varepsilon}_{\infty} \mathbf{q}} \gamma_j(\mathbf{q}) (a_j(\mathbf{q}) e_j^{\alpha} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} - a_j^+(\mathbf{q}) e_j^{*\alpha} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1}) \quad (9)$$

где индекс $i = 1, 2$, нумерует координаты электронов; индекс $\alpha = x, y, z$ соответствует компонентам вектора поляризации $\mathbf{e}$ в направлениях x, y, z ; индекс j нумерует ветви оптических фононов, $\mathbf{q}$ – волновой вектор фононов

$$\gamma_j(\mathbf{q}) = \frac{\omega_j^{1/2}}{\varepsilon_{\infty}^{nm} \mathbf{q}_n \mathbf{q}_m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_j}} \mathbf{q}_{\alpha} b_{12}^{\alpha}; \quad b_{12}^{\alpha} = \left[\frac{1}{4\pi} (\varepsilon_0^{\alpha} - \varepsilon_{\infty}^{\alpha}) \right]^{1/2} \omega_{\alpha}.$$

В одноосном кристалле в выбранной нами системе координат все тензоры второго ранга становятся диагональными, а компоненты с индексами x и y одинаковыми.

Дисперсионные соотношения фононных частот $\omega_j(\mathbf{q})$ в анизотропных кристаллах приведены в [13].

3. ЭНЕРГИЯ БИПОЛЯРОНА В АНИЗОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Применяя то, или иное каноническое преобразование к гамильтониану (2), можно получить энергию двухэлектронных систем как функцию параметров кристалла. Метод канонических преобразований, использующий вариационные параметры и функциональное варьирование по функциям, входящим в операторы канонических преобразований, эквивалентен выбору определённого вида пробной функции системы «электроны + поле фононов».

3.1. Метод сильной связи

В методе сильной связи используется второе каноническое преобразование (после преобразования, устранившего координату электрона), выполнявшееся в работе Ли Лоу и Пайнса [15]. В связи с тем, что в методе сильной связи решения ищутся без учёта трансляционной инвариантности исходного гамильтониана, операторы полного импульса полярона и БП не входят в конечные выражения для энергии этих

квазичастиц, а пробная ВФ не обладает трансляционной инвариантностью. Тем не менее, данное предположение не противоречит вариационному принципу, означая только, что точному решению соответствует некая трансляционно-инвариантная функция, которая даст более низкое значение энергии, чем полученное с использованием пробной функции, не обладающей трансляционной инвариантностью.

Проведем каноническое преобразование гамильтониана (2), исключаящее линейные по операторам поля переменные. В дальнейшем для простоты ограничимся одной ветвью оптических колебаний. Введём вспомогательный оператор $J_a(\alpha)$:

$$J_a(\alpha) = \exp(\alpha S_a) a_q \exp(-\alpha S_a),$$

где $S_a = \sum_q C_q (a_q^+ - a_q)$, a_q^+ , a_q – операторы рождения и уничтожения фононов с импульсом $\mathbf{q}$. Тогда

$$J'_a(\alpha) = \exp(\alpha S_a) C_q ((a_q^+ - a_q) a_q - a_q (a_q^+ - a_q)) \exp(-\alpha S_a) = -C_q.$$

Отсюда $J(\alpha) = a_q - \alpha C_q$. Полагая $\alpha = -1$, получаем следующие правила преобразования фононных операторов: $a_q \rightarrow a_q + C_q$, $a_q^+ \rightarrow a_q^+ + C_q^*$, где C_q, C_q^* – зависящие от $\mathbf{q}$ с-числа, коммутирующие с любым оператором исходного гамильтониана, явный вид которых может быть найден в результате функционального варьирования по C_q и C_q^* .

В результате проведения описанных преобразований, с последующим усреднением по фононным переменным и электронным ВФ, энергия E_2^s двухэлектронной системы в фононном поле в пределе сильной связи будет иметь следующий вид:

$$E_2^s = \bar{T}_{12} + \bar{V}_{12} + 2\bar{V}_C + \bar{V}_{ef}, \quad (10)$$

где $\bar{T}_{12}$ – средняя кинетическая энергия электронов, $\bar{V}_{12}$ – энергии кулоновского отталкивания между электронами; $2\bar{V}_C$ – энергия притяжения к кулоновскому центру (учтена процедура симметризации пробных электронных ВФ). Для нормированных функций суммарная потенциальная энергия взаимодействия электронов через поле фононов и собственная энергия поля фононов имеют вид:

$$\bar{V}_{ef} = \bar{V}_{ef}(\hat{\varepsilon}^\infty) - \bar{V}_{ef}(\hat{\varepsilon}^0); \quad \bar{V}_{ef}(\hat{\varepsilon}) = -\frac{e^2}{\pi^2} \cdot \int \frac{|P(\mathbf{q}, 0)|^2}{\mathbf{q} \hat{\varepsilon} \mathbf{q}} d\mathbf{q}; \quad (11)$$

$$P(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \langle \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \exp(i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_2) | \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle. \quad (12)$$

Расчёт энергии двухэлектронных систем через поле фононов зависит от трёх параметров системы, каждый из которых в общем случае является тензорной величиной. Поэтому в общем виде подобный расчёт не представляет практической ценности.

В качестве иллюстрации на рис. 1 приведены параметрические зависимости энергии связи одноцентрового БП, выраженной в единицах удвоенной поляронной энергии, от параметра анизотропии эффективной массы $\gamma_m = m_{xy}^* / m_z^*$ (анизотропия типа «лёгкая плоскость» $\gamma_m < 1$). Диэлектрическая проницаемость кристалла, для которого проведены расчёты, полагается изотропной. Другие численные примеры расчёта энергии одноцентрового БП для кристаллов с сильной связью приведены в [12].

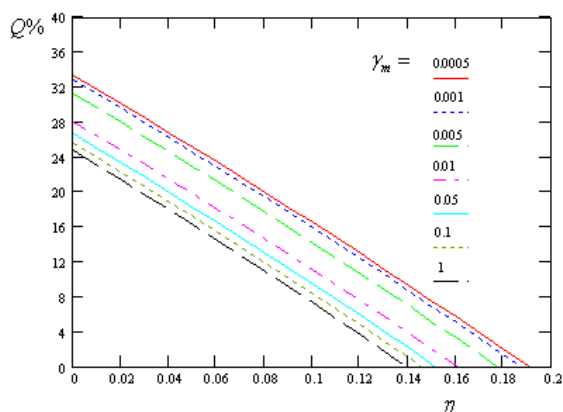


Рис. 1. Зависимость величины $Q = \Delta W / 2|E_p|$ от отношения $\eta = \epsilon_\infty / \epsilon_0$ для различных значений параметра анизотропии кристалла. ΔW – энергия связи БП, E_p – поляронная энергия, $\gamma_m = m_{xy} / m_z$. Расчёты проведены для одноцентровой конфигурации БП.

3.2. Двухцентровый биполярон в анизотропных кристаллах (сильная связь)

Функционал двухцентровой конфигурации БП получен в работе [11]. В качестве пробной функции в [11] выбиралось симметризованное произведение поляронных ВФ, центрированных в различных точках анизотропного кристалла. Аналитические выражения функционала основного состояния приведены в [11]. Численных расчётов энергии БП в [11] не проводилось. Поэтому для сравнения энергетических минимумов двухцентровой и одноцентровой конфигураций БП нами были воспроизведены аналитические выражения для функционала сильной связи двухцентрового БП и проведены численные расчёты энергии двух поляронов как функции расстояния между центрами поляризационных ям. В качестве конкретного примера нами выбрана соосная конфигурация БП в квазиодномерной системе, когда поляроны вытянуты вдоль направления «лёгкая ось».

На рис. 2 сравниваются распределения электронной плотности полярона в изотропном кристалле (а) и квазиодномерного полярона (b) в системе «лёгкая ось».

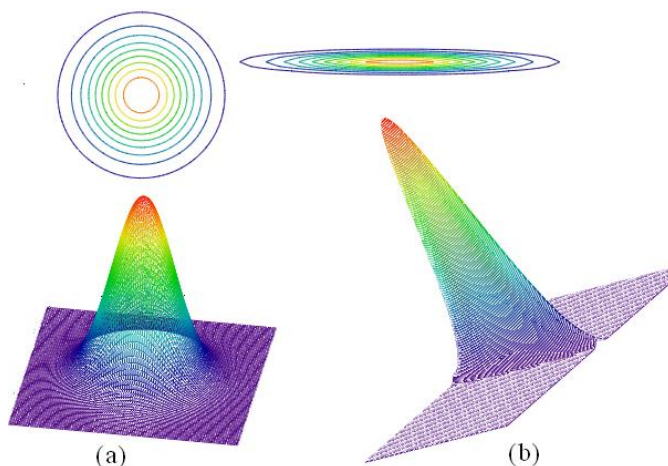


Рис. 2. Распределение электронной плотности полярона в изотропном кристалле (а) и в квазиодномерном кристалле типа «лёгкая ось» (b). Отношение эффективных масс выбиралось равным $m_{xy} / m_z = 2^{10}$. Поляронная ВФ выбиралась в простейшем виде: $\Psi_p = A \exp(-\beta^2 \rho^2 - \alpha^2 z^2)$, нормировочный множитель $A = \beta \sqrt{\alpha} (2/\pi)^{3/4}$; минимуму поляронного функционала соответствуют вариационные параметры $\alpha = 1.347978296$ и $\beta = 19.621237248$.

На рис. 3 приведены графики зависимости полной энергии системы, состоящей из двух взаимодействующих между собой квазиодномерных поляронов.

Обратим внимание на то, что на рис. 3 для кривой (1), полученной в рамках метода Гайтлера-Лондона без варьирования по параметрам ВФ БП, теорема вириала в минимуме энергии не выполняется даже приближённо. В то же время, после варьирования по параметрам α и β теорема вириала выполняется с высокой точностью как для двухцентровой, так и для одноцентровой конфигурации БП.

В отличие от БП в изотропном кристалле, величины энергетических минимумов в двухцентровой и одноцентровой конфигурациях в квазиодномерной системе сравнимы по величине. Так для одноцентровой конфигурации энергия БП, полученная с использованием трехпараметрической ВФ (3) для квазиодномерного БП, составила -3.101969 . Соответствующая трехпараметрическая ВФ для двухцентровой конфигурации (кроме расстояния между центрами поляризационных ям двух поляронов R варьируются параметры α и β) приводит к практически такому же значению энергии БП в минимуме: -3.006832 . Возможно, это связано с тем, что в одномерной системе распределения плотности ВФ для обеих конфигураций БП равноценны, как об этом сообщалось в [5], и принципиальное отличие между двухцентровой конфигурацией БП и одноцентровой теряется. Тем не менее, для окончательного решения данного вопроса, необходимо провести расчёты энергии двухцентрового БП в анизотропных кристаллах и низкоразмерных системах с учётом прямой зависимости ВФ от межэлектронного расстояния.

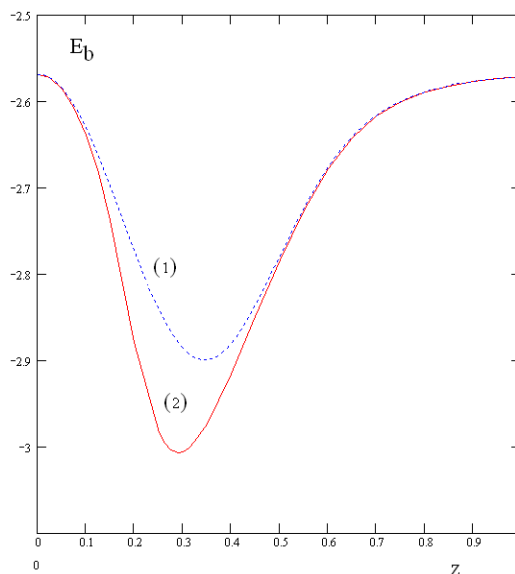


Рис. 3. Зависимость энергии двухцентрового БП от расстояния между центрами поляризационных ям для $\varepsilon_\infty/\varepsilon_0 = 0$. Начало координат расположено посередине между центрами поляризационных ям, $z = R/2$. Кривая (1) построена в рамках метода Гайтлера-Лондона, без дополнительного варьирования по параметрам поляронной ВФ. Кривая (2) строилась с учётом варьирования по параметрам α и β ВФ поляронов $\Psi_p = A \exp(-\beta^2 \rho^2 - \alpha^2 z^2)$, $A = \beta \sqrt{\alpha} (2/\pi)^{3/4}$, α и β . Энергия приведена в эффективных атомных единицах [12], в качестве единицы массы выбиралась продольная эффективная масса электрона.

3.3. Метод произвольной связи

Каноническое преобразование, которое позволяет получить правильные предельные переходы к случаям сильной и слабой связи, было предложено в [16].

Проведем каноническое преобразование $\exp(\alpha S) H \exp(-\alpha S)$ исходного гамильтониана (2) с унитарным оператором S следующего вида.

$$S = \sum_{\mathbf{q}} (F_{\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) a_{\mathbf{q}} - F_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) a_{\mathbf{q}}^+), \quad (13)$$

где $F_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – некоторая функция координат электронной системы.

Преобразование (13), как и в случае сильной связи, приводит к смещению операторов фононного поля:

$$a_{\mathbf{q}}^+ \rightarrow a_{\mathbf{q}}^+ + F_{\mathbf{q}}^*, \quad a_{\mathbf{q}} \rightarrow a_{\mathbf{q}} + F_{\mathbf{q}}, \quad (14)$$

Однако уже не предполагается, что вариационная функция $F_{\mathbf{q}}$ является c -числом, коммутирующим с любым оператором в исходном гамильтониане, напротив, она может зависеть от координат первого и второго электронов. В этом случае слагаемое, соответствующее кинетической энергии, также изменится, тогда как для канонического преобразования, проводившегося для сильного электрон-фононного взаимодействия, оператор кинетической энергии коммутировал с оператором канонического преобразования. Найдем, как изменяются при таком преобразовании производные по координатам. Введем вспомогательный параметр α и оператор $J(\alpha) = \exp(\alpha S) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \exp(-\alpha S)$. Дифференцируя $J(\alpha)$ по α , получим:

$$\frac{dJ}{d\alpha} = \exp(\alpha S) \left(S \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} S \right) \exp(-\alpha S) = \exp(\alpha S) \left(a_{\mathbf{q}} \left[F_{\mathbf{q}}^*, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right] - a_{\mathbf{q}}^+ \left[F_{\mathbf{q}}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right] \right) \exp(-\alpha S). \quad (15)$$

Учитывая операторное равенство $\left[F_{\mathbf{q}}^*, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right] \Psi_{12} = -\Psi_{12} \frac{\partial F_{\mathbf{q}}^*}{\partial \mathbf{x}}$, получим:

$$\begin{aligned} \frac{dJ}{d\alpha} &= \sum_{\mathbf{q}} \left(\exp(\alpha S) a_{\mathbf{q}} \exp(-\alpha S) \left[F_{\mathbf{q}}^*, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right] - \exp(\alpha S) a_{\mathbf{q}}^+ \exp(-\alpha S) \left[F_{\mathbf{q}}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right] \right) = \\ &= \sum_{\mathbf{q}} \left((a_{\mathbf{q}} + F_{\mathbf{q}}) \left[-\frac{\partial F_{\mathbf{q}}^*}{\partial \mathbf{x}} \right] - (a_{\mathbf{q}}^+ + F_{\mathbf{q}}^*) \left[-\frac{\partial F_{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{x}} \right] \right) \end{aligned} \quad (16)$$

Полагаем также, что $F_{\mathbf{q}}^* = F_{-\mathbf{q}}$. Отсюда получаем линейное дифференциальное уравнение с начальным условием при $\alpha = 0$: $J = \partial/\partial \mathbf{x}$. Решая данное операторное уравнение, находим:

$$J = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \sum_{\mathbf{q}} \left(a_{\mathbf{q}}^+ \frac{\partial F_{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial F_{\mathbf{q}}^*}{\partial \mathbf{x}} a_{\mathbf{q}} \right). \quad (17)$$

Далее полагаем: $F_{\mathbf{q}} = C_{\mathbf{q}} + g_{\mathbf{q}} (\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1) + \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_2))$. Как и для изотропного случая, функционал полной энергии БП можно представить в виде суммы функционала сильной связи E_2^s и добавки промежуточной связи $\bar{V}_{ef}^i$:

$$E_2^s = E_2^s + \delta \bar{V}_{ef}^i, \quad \delta \bar{V}_{ef}^i = \bar{V}_{ef}^i(\hat{\epsilon}^\infty) - \bar{V}_{ef}^i(\hat{\epsilon}^0), \quad \bar{V}_{ef}^i(\hat{\epsilon}) = - \sum_{\mathbf{q}} 2 |V_{\mathbf{q}}(\hat{\epsilon})|^2 \frac{|U_{12}|^2}{\chi_b(\mathbf{q}, \hat{m}^*) U_0 + \omega U_{12}}, \quad (18)$$

$$|V_q(\hat{\varepsilon})|^2 = \frac{2\pi e^2}{V} \frac{\hbar\omega}{\mathbf{q}\hat{\varepsilon}\mathbf{q}}, \quad \chi_b(\mathbf{q}, \hat{m}^*) = \frac{\mathbf{q}_p^2}{m_{xy}^*} + \frac{\mathbf{q}_z^2}{m_z^*}, \quad U_{12} = 1 + P(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) + 2P(\mathbf{q}, 0),$$

$$U_0 = 1 + P(\mathbf{q}, -\mathbf{q}),$$

В фейнмановских единицах энергии, определённых нами относительно оси симметрии кристалла, $2m_z = 1$, $\hbar = 1$, $\omega_q = \omega_0 = 1$:

$$\bar{V}_{ef}^i(\hat{\varepsilon}^\infty) - \bar{V}_{ef}^i(\hat{\varepsilon}^0) = \frac{\alpha^\parallel(\hat{\varepsilon})}{1 - \eta^\parallel} \cdot (J(\hat{\varepsilon}^\infty) - \eta^\parallel J(\hat{\varepsilon}^0)),$$

$$J(\hat{\varepsilon}^f) = -\frac{1}{2\pi^2} \int d\mathbf{q} \frac{1}{\mathbf{q}_p^2 \gamma_f^{-1} + \mathbf{q}_z^2} \frac{|U_{12}|^2}{(\mathbf{q}_p^2 \gamma_m^{-1} + \mathbf{q}_z^2) U_0 + U_{12}}, \quad (19)$$

где $\alpha^\parallel(\hat{\varepsilon}) = \frac{e^2}{2\hbar\omega_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty^\parallel} - \frac{1}{\varepsilon_0^\parallel} \right) \frac{1}{L_0}$; $L_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_z\omega_0}}$; $\gamma_f = \frac{\varepsilon_f^\perp}{\varepsilon_f^\parallel}$, $f = \infty, 0$; $\gamma_m = \frac{m_{xy}^*}{m_z^*}$; $\eta^\parallel = \frac{\varepsilon_\infty^\parallel}{\varepsilon_0^\parallel}$.

В качестве единиц энергии мы выбрали модифицированные (для случая анизотропного кристалла) фейнмановские единицы энергии и длины, полагая $\hbar = 1$, $\omega_0 = 1$, $m_z = 1$. Тогда энергия будет выражена в единицах $\hbar\omega_0$. Для произвольной связи появляется дополнительный параметр – энергия продольных оптических фононов $\hbar\omega_0$ – что ещё больше затрудняет вычисление энергии рассматриваемых нами систем в общем виде. Поэтому, в качестве примера использования полученных нами формул, справедливых для произвольной связи, приведём расчёт энергии полярона и БП для параметров, близких ниобату лития. В связи с тем, что для тензора эффективной массы электрона у нас нет надёжных экспериментальных данных. В таблице 1 показано изменение энергии полярона и БП в зависимости от отношения $\gamma_m = m_{xy}/m_z$ при учёте добавки произвольной связи в электрон-фононном взаимодействии, которая всегда понижает энергию системы по сравнению с пределом сильной связи. Фрёлиховская константа электрон-фононной связи полагалась равной $\alpha^\parallel = 7$, что кажется нам разумным предположением для LiNbO₃. Оптические характеристики кристалла соответствуют табличным величинам: в главных осях тензор статический диэлектрической проницаемости $\varepsilon_0^\perp = 85$, $\varepsilon_0^\parallel = 29$, показатель преломления $n = 2.29$, $\varepsilon_\infty^\perp = \varepsilon_\infty^\parallel = n^2$.

Таблица 1 численно иллюстрирует типичные для анизотропных кристаллов эффекты: понижение энергии основного состояния автолокализованных систем при увеличении анизотропии эффективной массы кристалла с одновременным повышением энергии связи двухэлектронных систем по сравнению с изотропным случаем.

Таблица 1. Зависимость энергии полярона E_p , БП E_B , энергии связи БП ΔW и величины $Q = \Delta W / 2E_p$ от параметра анизотропии эффективной массы (анизотропия типа «лёгкая ось») для $\alpha^\parallel = 7$. Оптические характеристики соответствуют кристаллу LiNbO₃. Расчёты проводились для $N = 3$ в выражении (3) для ВФ БП

$\gamma_m = m_\perp / m_\parallel$	$-E_p$	$-E_B$	$\Delta W = 2E_p - E_B$	$Q\%$
1	7.12221	15.4680	1.22361	8.59
2	9.99959	22.4122	2.41309	12.1
3	12.2881	27.9821	3.40573	13.9
4	14.2036	32.6793	4.27194	15.0
5	15.90932	36.7503	4.93166	15.5

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные в работе выражения для эффективных функционалов энергии двухэлектронных систем позволяют провести численные расчёты для анизотропных кристаллов с заданными параметрами электрон-фононного взаимодействия. Переход к низкоразмерным системам возможен в предельных случаях $\gamma_m \rightarrow 0$ (двумерная система $m_z^* \rightarrow \infty$) и $\gamma_m^{-1} \rightarrow 0$ (одномерная система $m_{xy}^* \rightarrow \infty$). При этом в одномерной системе кулоновское взаимодействие между электронами не требует экстраполяции дельтаобразным оператором, как это предлагается в [17]. В рамках континуальной модели БП большого радиуса аппроксимация кулоновского отталкивания между электронами дельта-функцией для квазиодномерных систем может оказаться недостаточно обоснованным предположением.

В анизотропных кристаллах, в отличие от изотропного случая, эффективные операторы энергии системы, взаимодействующей с фононами, не могут быть выражены через тензор эффективной диэлектрической проницаемости $\hat{\epsilon}^{-1} = \hat{\epsilon}_{\infty}^{-1} - \hat{\epsilon}_0^{-1}$, как это постулировалось в работе [18], в которой в адиабатическом приближении исследовалось взаимодействие электрона с оптическими фононами в анизотропных кристаллах. Подобное предположение оправдано только в том случае, когда параметры анизотропии тензоров высокочастотной и низкочастотной диэлектрических проницаемостей одинаковы, т. е. когда $\gamma_e = \gamma_0$ ($\gamma_e = \epsilon_{\infty}^{\perp} / \epsilon_{\infty}^{\parallel}$, $\gamma_0 = \epsilon_0^{\perp} / \epsilon_0^{\parallel}$). В реальных кристаллах анизотропией высокочастотной диэлектрической проницаемостью можно пренебречь, в то время как статическая диэлектрическая проницаемость может обладать значительной анизотропией. В качестве примеров могут служить рассмотренный нами кристалл ниобата лития и слоистые кристаллы купратных металло-оксидных соединений (МОС), в которых наблюдалась высокотемпературная сверхпроводимость.

Работа выполнялась при поддержке РФФИ, проект № 13-07-00256.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schafroth M.R. *Phys. Rev.* 1954. V. 96. 1149–1149.
2. Devreese J.T., Alexandrov A.S. *Rep. Prog. Phys.* 2009. V. 72. Article No. 066501. doi: [10.1088/0034-4885/72/6/066501](https://doi.org/10.1088/0034-4885/72/6/066501)
3. Каширина Н.И., Лахно В.Д. *УФН*. 2010. Т. 180. С. 449–473.
4. Лахно В.Д., Султанов В.Б. *Биофизика*. 2011. Т. 56. № 2. С. 230–234.
5. Каширина Н.И., Лахно В.Д. *Mathematical biology and bioinformatics*. 2014. V. 9. P. 430–437. doi: [10.17537/2014.9.430](https://doi.org/10.17537/2014.9.430)
6. Korshunova A.N., Lakhno V.D. *Physica E*. 2014. V. 60. P. 206–209.
7. Shigaev A.S., Ponomarev O.A., Lakhno V.D. *Mathematical biology and bioinformatics*. 2013. V. 8. 553–664. doi: [10.17537/2013.8.553](https://doi.org/10.17537/2013.8.553)
8. Holstein T. *Ann. Phys.* 1959. V. 8. P. 325–342.
9. Дейген М.Ф., Пекар С.И. *ЖЭТФ*. 1951. Т. 21. С. 803–806.
10. Кукушкин Л. С. *ЖЭТФ*. 1970. Т. 57. 1224–1230.
11. Винецкий В.Л., Пашицкий Э.А., Янчук В. А. *ЖСХ*. 1986. V. 27. P. 181–185.
12. Kashirina N.I., Mozdor E.V., Pashitskij E.A., Sheka V.I. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. 1999. V. 2. P. 7–10.
13. Bergman E. *J. Phys. and Chem. Solids*. 1974. V. 35. P. 1433–1436.
14. Орбух В.И., Шека В.И. *Украинский физич. журн.* 1985. Т. 30. С.771–775.
15. Lee T.D., Low F.E., Pines D. *Phys. Rev.* 1953. V. 90. 297–302.

16. Буймистров В.М., Пекар С.И. *ЖЭТФ*. 1957. Т. 32. С. 1193–1199.
17. Peeters F.M., Smondyrev M.A. *Phys. Rev. B*. 1990. V. 43. 4920–4924.
18. Pertzsch B., Rössler U. *Solid State Communications*. 1981. V. 37. P. 931–935.

Материал поступил в редакцию 25.06.2015, опубликован 30.06.2015.