

## АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ И КРИТЕРИЙ СУЩЕСТВОВАНИЯ МАЛОГО ПОЛЯРОНА

А. С. Александров, А. Б. Кребс

Теория возмущений, вариационные оценки, а также численное моделирование методом Монте-Карло показывают, что адиабатическое описание взаимодействующих электронов и фононов, основанные на малости отношения характерной энергии фонона  $\omega$  к кинетической энергии электрона  $E_F$ , нарушается уже в области промежуточных значений константы связи  $\lambda \approx 1$ .

Принято считать <sup>1</sup>, что малость адиабатического параметра

$$\omega/E_F \sim \omega/D \ll 1, \quad (1)$$

где  $D$  – ширина электронной зоны в недеформированной решетке ( $\hbar = 1$ ), позволяет использовать известные самосогласованные уравнения для собственно-энергетической части электронной функции Грина (ФГ) в нормальном <sup>2</sup> и сверхпроводящем состоянии <sup>3</sup> при сколь угодно больших значениях константы связи  $\lambda$ .

Ранее нами отмечалось <sup>4,5</sup>, что классическая теория электрон-фононного взаимодействия <sup>2,3</sup> не учитывает возможность локальной деформации решетки вследствие электрон-фононного взаимодействия, т.е. соответствующий поляронный эффект – самолокализацию электрона со значительным сужением электронной зоны.

Учет конечной ширины затравочной электронной зоны  $D$ , приводит к эффективному сужению электронного спектра уже в рамках стандартных уравнений для ФГ <sup>5</sup> при

$$\lambda > E_F/\omega \gg 1, \quad (2)$$

что следует также и из известного выражения <sup>2</sup> для перенормированной электронной массы  $m^* = m(1 + \lambda)$ .

В настоящей работе мы покажем, что поляронный коллапс электронной зоны происходит на самом деле при значительно меньших значениях константы связи:

$$\lambda \approx 1. \quad (3)$$

Для полярона при этом имеет место неравенство обратное неравенству (1), то есть

$$\omega/W \gtrsim 1 \quad (4)$$

и стандартный подход, основанный на теореме Мигдала, неприменим. Здесь  $W$  – максимальная кинетическая энергия полярона. Гамильтониан электрон-фононной системы в узельном представлении имеет вид:

$$\begin{aligned} H &= H_e + H_{ph} + H_{e-ph}, \\ H_e &= -J \sum_{i,j} (c_i^* c_{i+j} + c_{i+j}^* c_i), \\ H_{ph} &= \sum_q \omega(q) d_q^* d_q, \\ H_{e-ph} &= \sum_{i,q} c_i^* c_i [U(q) d_q^* e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} + \text{эс}]. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь  $c_i^*$  ( $c_i$ ) и  $d_q^*$  ( $d_q$ ) – операторы рождения (уничтожения) электрона на узле с номером  $i$  и фонона с квазиимпульсом  $\mathbf{q}$  соответственно;  $J$  – интеграл перескока электрона с узла на узел ( $J = D/2z$  и отличен от нуля только для ближайших соседей, число которых равно  $z$ );  $\omega(\mathbf{q})$  – частота фононов;  $U(\mathbf{q})$  – матричный элемент электрон-фононного взаимодействия.

Для  $U(\mathbf{q})$  примем степенную параметризацию вида

$$U(\mathbf{q}) = g_0 \omega_0 \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(aq)^\gamma}, \quad (6)$$

где  $g_0$  — безразмерная константа взаимодействия, степень нелокальности которого определяется параметром  $\gamma$ ;  $N$  и  $a$  — полное число узлов и постоянная решетки. Под  $\omega_0$  будем понимать максимальное значение фононной частоты:  $\omega_0 = \max \omega(\mathbf{q})$ .

В случае слабого электрон-фононного взаимодействия энергия основного состояния гамильтониана (5) во втором порядке теории возмущений по  $H_{e-ph}$  равна

$$E_0 = -zJ - \sum_{\mathbf{q}} |U(\mathbf{q})|^2 [\epsilon(\mathbf{q}) + \omega(\mathbf{q}) - \epsilon(0)]^{-1}, \quad (7)$$

где  $\epsilon(\mathbf{q})$  — закон дисперсии электронов, отвечающий гамильтониану  $H_e$ . В пределе сильной связи электронов с фононами в нулевом приближении можно пренебречь слагаемым  $H_e$  в полном гамильтониане (5) и с помощью известного канонического преобразования<sup>6</sup> получить следующее выражение для энергии основного состояния:

$$E_0 = -\sum_{\mathbf{q}} |U(\mathbf{q})|^2 / \omega(\mathbf{q}) \equiv -E_p, \quad (8)$$

где  $E_p = \lambda D$  — поляронный сдвиг атомного уровня. Энергия (8) определяет положение поляронной зоны, ширина которой  $W$  в  $\exp(g^2)$  раз меньше ширины исходной зоны  $D$ . Соответственно, эффективная масса полярона  $m^*$  оказывается экспоненциально большей по сравнению с затравочной зонной массой электрона  $m$ :

$$m^* = m \exp(g^2). \quad (9)$$

В случае простой кубической решетки строгое выражение для  $g^2$  имеет вид<sup>6</sup>

$$g^2 = \sum_{\mathbf{q}} |U(\mathbf{q})|^2 [1 - (\cos aq_x + \cos aq_y + \cos aq_z)/3] / \omega^2(\mathbf{q}). \quad (10)$$

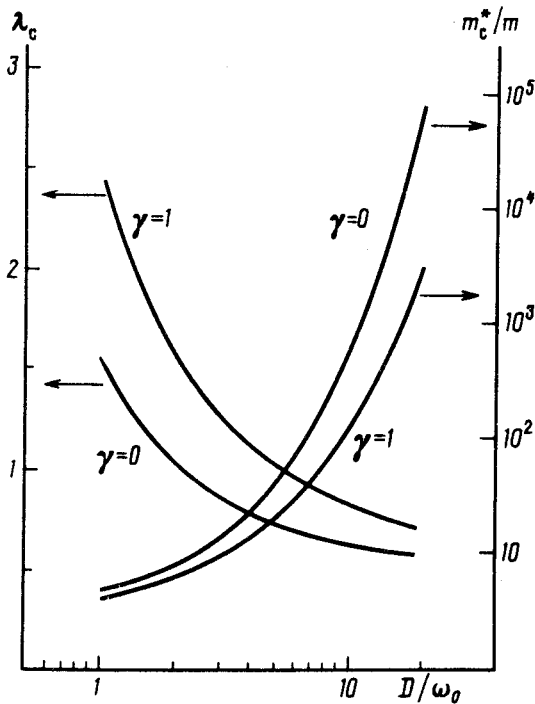
Именно эта константа, а не  $g_0^2$ , имеет "наблюдаемый" физический смысл, поскольку определяет величину перенормированной массы носителя. Для локального электрон-фононного взаимодействия с бесдисперсионной оптической фононной модой ( $\gamma = 0$ ,  $\omega(\mathbf{q}) = \omega_0$ )  $g^2 = g_0^2$ , в чем нетрудно убедиться подстановкой выражения (6) в (10). В то же время в случае фрелиховского взаимодействия ( $\gamma = 1$ ) численная оценка дает  $g^2 = 0,11g_0^2$ . Отметим также, что эффективная частота  $\omega = E_p/g^2$ , совпадая по порядку величины с  $\omega_0$ , в точности равна ей лишь в случае  $\gamma = 0$ ,  $\omega(\mathbf{q}) = \omega_0$ . Для фрелиховского взаимодействия с бесдисперсионной модой расчет с помощью формул (8), (10) дает  $\omega \approx 1,73 \omega_0$ , что целесообразно учитывать в количественных оценках параметров с помощью экспериментально наблюдаемых величин. В пределе сильной связи  $H_e$  можно учесть по теории возмущений в терминах канонически преобразованного гамильтониана, что требует суммирования большого количества диаграмм с многофононными вершинами. Во втором порядке по  $H_e$  энергия основного состояния с локальным взаимодействием с бесдисперсионной модой в простой кубической решетке дается выражением (см. также<sup>7</sup>):

$$E_0 = -E_p \left[ 1 + \frac{1}{2} z \left( \frac{J}{E_p} \right)^2 \right] = -E_p \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{D}{2\sqrt{z}E_p} \right)^2 \right]. \quad (11)$$

Этот результат, показывает, что параметром разложения в области сильной связи фактически является  $1/\lambda$ . Согласно (11), критерий существования полярона можно записать в виде неравенства

$$\lambda = E_p/D \gg \frac{1}{2\sqrt{z}}, \quad (12)$$

которое, например, для  $z = 6$  хорошо выполняется даже при  $\lambda \approx 1$ . Эта оценка показывает, что поляронный режим наступает при сравнительно малых значениях  $\lambda \approx 1$ , что обусловлено более низкой энергией электрона в локально деформированной решетке (ср. (7) и (8)). В литературе имеется целый ряд попыток расчета поляронных характеристик с целью изучения характера перехода полярона из состояния с большим радиусом (широкая зона) в состояние с малым радиусом (узкая зона). Значительная их часть опирается на вариационные методы и указывает на неаналитическую зависимость энергии основного состояния от  $\lambda$  со скачкообразной перенормировкой массы полярона в точке перехода. При этом, например, в работе <sup>8</sup> в случае локального взаимодействия с бесдисперсионной модой в простой кубической решетке для  $\omega_0/D = 0,05$  переход предсказывается при  $\lambda = \lambda_c \approx 0,6$ . Однако, по-видимому, наиболее надежные результаты для той же системы были получены с помощью численного моделирования методом Монте-Карло <sup>9,10</sup>. В частности, в работах <sup>9</sup> был обнаружен достаточно резкий переход между двумя состояниями с указанием на возможную неаналитичность вблизи критического значения константы взаимодействия. При этом переходная область оказалась наиболее узкой для трехмерной решетки и наименее узкой для одномерной. Результаты, приведенные в <sup>9</sup> для случая  $\omega_0/D = 1/2z$ , отвечают критическим значениям  $\lambda_c \approx 0,85$  и  $\lambda_c \approx 0,45$  для одномерной и трехмерной решеток соответственно.



Критические значения константы электрон-фононной связи  $\lambda_c$  и перенормировки электронной массы  $m_c^*/m$  как функции адиабатического параметра  $D/\omega_0$

Важный результат численных расчетов <sup>9,10</sup> состоит в том, что, как оказалось, с хорошей точностью численные значения  $\lambda_c$  совпадают с оценкой, получаемой приравнением друг другу выражений (7) и (8). Это обстоятельство позволяет сравнительно просто находить  $\lambda_c$  для любого выбранного значения  $\omega_0/D$ . Результаты расчета для локального ( $\gamma = 0$ ) и фреilihовского ( $\gamma = 1$ ) взаимодействия с бесдисперсионной фононной модой представлены на рисунке.

Из него, в частности, следует, что при  $D/\omega_0 \geq 5$  значения  $\lambda \gg 1$  отвечают поляронному состоянию и теорема Мигдала неприменима. При еще более широкой исходной зоне, когда  $D/\omega_0 \geq 20$ , область ее применимости ограничена еще меньшими значениями  $\lambda \lesssim 0,7$ .

В заключение отметим, что учет кулоновского взаимодействия не изменит выводов данной работы относительно применимости адиабатического приближения даже при металлических концентрациях носителей, так как радиус поляронного состояния при  $\lambda \gg 1$  оказывается порядка постоянной решетки. В рамках многополяронной теории сверхпроводимости <sup>4</sup> последовательный учет этого взаимодействия приводит к перенормировке энергии связи биполарона.

#### Литература

1. *Parks R.D.* Superconductivity. N.-Y., 1969.
2. *Мигдал А.Б.* ЖЭТФ, 1958, **34**, 1438.
3. *Элиашберг Г.М.* ЖЭТФ, 1960, **38**, 366; **39**, 1437.
4. *Alexandrov A., Ranninger J.* Phys. Rev. B, 1981, **23**, 1796; **24**, 1164. *Александров А.С.* ЖФХ, 1983, **57**, 273; ЖЭТФ, 1989, **95**, 296.
5. *Александров А.С. и др.* Письма в ЖЭТФ, 1987, **45**, 357.
6. *Фирсов Ю.А.* Поляроны. М.: Наука. 1975.
7. *Eagles D.M.* Phys. Rev., 1966, **145**, 645; *Gogolin A.A.* Phys. Stat. Sol. B, 1982, **109**, 95.
8. *Emin E.* Adv. Phys., 1973, **22**, 57.
9. *De Raedt H., Lagendijk A.* Phys., Rev. B, 1983, **27**, 6097; 1984, **30**, 1671.
10. *De Raedt H., Lagendijk A.* Phys. Rep. C, 1985, **127**, 233.

Московский инженерно-физический институт

Поступила в редакцию

22 мая 1989 г.