Письма в ЖЭТФ, том 53, вып. 9, стр. 456 - 460 10 мая 1991 г.

КВАНТОВЫЙ ПОЛЯРОН

А.О.Гоголин, А.С.Иоселевич

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау АН СССР
142432, Москва

Поступила в редакцию 8 апреля 1991 г.

Предложен новый тип полярона, в котором локализация электрона не сопровождается деформацией решетки, как в обычном поляроне. Поляронное одевание здесь возникает в результате локального подавления квантовых флуктуаций решетки. Такой полярон возникает, когда существенно квадратичное электрон-фононное взаимодействие.

Задача о поляроне существует давно и считается хорошо изученной (см., например, [1]). При сильной связи она допускает классическую интерпретацию: в окрестности электрона возникают ненулевые средние смещения ионов от положений равновесия. Радиус полярона может быть как малым (электрон сосредоточен на одном узле), так и большим (много больше постоянной решетки). Вследствие трансляционной инвариантности, полярон, разумеется, может перемещаться по кристаллу как целое, имея при этом большую эффективную массу. Такой обычный полярон возникает при линейном по смещениям решетки электрон-фононном взаимодействии.

Однако линейное электрон-фононное взаимодействие с некоторыми модами бывает запрещено симметрией. Так, запрещено линейное взаимодействие с любыми неполносимметричными колебаниями. Взаимодействие электрона с такими модами будет квадратичным, и в ряде случаев оно может оказаться существенным. Примером является взаимодействие электрона с вращательными модами в молекулярных кристаллах [2], а также взаимодействие с изгибными колебаниями плоскостей в квазидвумерных - или нитей - в квазиодномерных соединениях. В особенности оно важно, когда изгибные колебания связаны со структурным переходом и являются мягкими. Отметим, что именно такая ситуация реализуется в высокотемпературном сверхпроводнике La_2CuO_4 [3].

Возможно ли образование поляронов за счет квадратичного электрон-фононного взаимодействия? Для ответа на этот вопрос рассмотрим простейшую модель, описывающую электрон, локально взаимодействующий с системой бездисперсионных фононов. Ее гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{t}{2}\sum_{<\vec{n},\vec{n}'>}(a^+_{\vec{n}'} - a^+_{\vec{n}})(a_{\vec{n}'} - a_{\vec{n}}) + \sum_{\vec{n}}\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial Q^2_{\vec{n}}} + \frac{1}{2}[M\omega_0^2 + \gamma a^+_{\vec{n}} a_{\vec{n}}]Q^2_{\vec{n}} - \frac{1}{2}\hbar\omega_0\right\}. \tag{1}$$

Здесь $a^+_{\vec{n}}$, $a_{\vec{n}}$ - операторы рождения и уничтожения электрона, t - интеграл его перескока; $Q_{\vec{n}}$ - величина смещения на $\vec{n}$-ом узле, M - масса, ω_0 - частота осциллятора; γ - константа квадратичного электрон-фононного взаимодействия. Энергия отсчитывается от основного состояния невзаимодействующей системы.

Если γ мало, то электрон-фононное взаимодействие может быть учтено по теории возмущений и не приводит к образованию полярона. Если же γ велико, то видно, что теория возмущений не применима, т.е. основное состояние системы должно сильно перестроиться. Как происходит эта перестройка при большом отрицательном γ - понятно: жесткости осцилляторов, расположенных вблизи электрона становятся отрицательными (неустойчивость). В результате развиваются большие спонтанные смещения $< Q >$, стабилизирующиеся только за счет нелинейных эффектов (не учтенных в формуле (1)). Такое состояние качественно не отличается от обычного полярона, возникающего вследствие линейного электрон-фононного взаимодействия.

Если же γ велико и положительно, то жесткости осцилляторов могут только увеличиваться, поэтому никакой неустойчивости и никаких $< Q >$ не возникает. Таким образом поляронного эффекта (в обычном его понимание) нет, и кажется, что электрон должен быть делокализован при любых, сколь угодно больших $\gamma > 0$. Однако это неверно, так как поправки к делокализованному состоянию, вычисленные по теории возмущений, велики. Мы покажем, что основное состояние и в этом случае будет отвечать автолокализованному электрону. Локализация, однако, будет происходить не благодаря возникновению средних смещений $< Q >$, а в результате локального подавления квантовых флуктуаций Q (см. рис.1). Такое образование мы будем называть "квантовым поляроном".

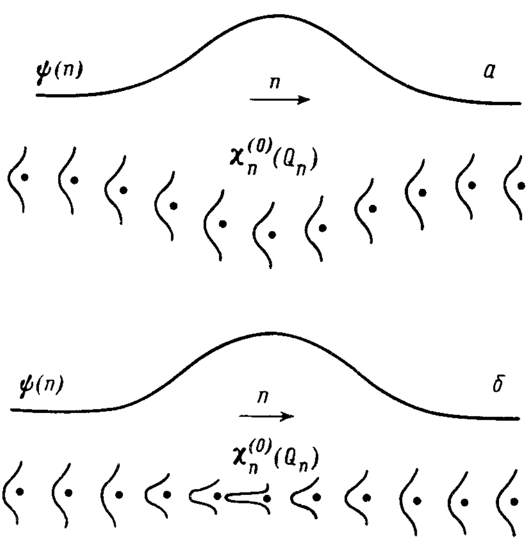

Рис. 1. a - Классический полярон: смещены центры осцилляторов; $б$ - квантовый полярон: подавлены нулевые колебания

Предположим сначала, что электрон локализован на одном узле (полярон малого радиуса). Энергия такого состояния есть

$$E_p = Dt + \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\Omega^2 + \omega_0^2} - \frac{1}{2}\hbar\omega_0, \tag{2}$$

где $\Omega = \sqrt{\gamma/M}$ и мы ограничились случаем D-мерной кубической решетки. Столь же легко вычислить и энергию свободного состояния, в котором электрон полностью делокализован:

$$E_f = \frac{1}{2}\gamma < Q^2 >= \hbar\gamma/4M\omega_0 = \hbar\Omega^2/4\omega_0. \tag{3}$$

Видно, что при $\hbar\Omega \gg (Dt, \hbar\omega_0)$ основным оказывается поляронное состояние $(E_p < E_f)$. Почему? Причина состоит в том, что электрон делает более жесткими близлежащие осцилляторы. Это приводит к уменьшению $< Q^2 >$ и, согласно (1), к уменьшению энергии взаимодействия.

Трудно, однако ожидать возникновения полярона малого радиуса, так как это требует малости ширины электронной зоны Dt по сравнению с частотой $\hbar\Omega$, которая обычно порядка дебаевской.

Более реальна ситуация, когда

$$\hbar\omega_0 \ll \hbar\Omega \ll Dt. \tag{4}$$

В этих условиях может возникать полярон большого радиуса. В адиабатическом приближении волновая функция системы факторизуется

$$\Phi(\vec{n}, \{Q_{\vec{n}'}\}) = \psi(\vec{n})\Pi_{\vec{n}'}\chi^{(0)}_{\vec{n}'}(Q_{\vec{n}'}), \tag{5}$$

где $\chi^{(0)}_n(Q_n)$ - волновая функция основного состояния n-ого осциллятора с перенормированной частотой

$$\omega_{\vec{n}} = \sqrt{\omega_0^2 + |\psi_{\vec{n}}|^2\Omega^2}. \tag{6}$$

Волновая функция электрона ψ должна определяться из условия минимума адиабатического функционала энергии

$$J\{\psi\} = \int d^D\vec{x}\left\{\frac{t}{2}|\nabla\psi|^2 + \frac{1}{2}\hbar[\omega(\vec{x}) - \omega_0]\right\}. \tag{7}$$

Выражение (7) записано в континуальном приближении, что оправдано неравенством (4). Постоянная решетки $a_0 = 1$, поэтому $\vec{x}$ и $\psi(\vec{x})$ - безразмерны. В формуле (7) явно проявляется квантовый характер эффекта. Действительно, второе слагаемое, содержащее постоянную Планка $\hbar$, представляет собой энергию нулевых колебаний, промодулированную за счет присутствия электрона.

Исследуем предел сильной связи, т.е. пренебрежем в (6) и (7) ω_0 по сравнению с $|\psi|\Omega$. Тогда

$$J\{\psi\} = \int d^D\vec{x}\left\{\frac{t}{2}|\nabla\psi|^2 + \frac{\hbar\Omega}{2}|\psi|\right\}. \tag{8}$$

Оценку минимума функционала (8) и радиуса соответствующего ему локализованного состояния a легко найти из теоремы вириала. Действительно, кинетическая энергия $\sim t/a^2$, потенциальная энергия $\sim \hbar\Omega a^{D/2}$, поэтому

$$a \sim \left(\frac{t}{\hbar\Omega}\right)^{\frac{2}{D+4}} \gg 1, \quad J \sim \hbar\Omega\left(\frac{t}{\hbar\Omega}\right)^{\frac{D}{D+4}}. \tag{9}$$

Поскольку характерные значения $|\psi| \sim a^{-D/2}$, то условие сильной связи $\omega_0 \ll |\psi|\Omega$ выполнено, если

$$\frac{\Omega}{\omega_0}\left(\frac{\hbar\Omega}{t}\right)^{\frac{D}{D+4}} \gg 1. \tag{10}$$

Условие адиабатичности: характерное электронное время $\tau_e \sim \hbar/J$ много меньше фононного $\tau_{ph} \sim \hbar/|\psi|\Omega$; оказывается выполненным. Оно совпадает с условием $t \gg \hbar\Omega$.

Интересно, что, несмотря на локальный характер электрон-фононного взаимодействия, квантовый полярон, в отличие от обычного полярона, может иметь большой радиус в любой размерности.

Простой вид функционала (8) позволяет найти его экстремали точно. Так, в одномерном случае

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{3a}} \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right), & |x| < a, \\ 0, & |x| > a, \end{cases} \tag{11}$$

причем $a = \left(\frac{2\pi^2 t}{\sqrt{3}\hbar\Omega}\right)^{2/5}$ и $J = \frac{5\hbar\Omega}{4\sqrt{3}}\left(\frac{2\pi^2 t}{\sqrt{3}\hbar\Omega}\right)^{1/5}$. Экстремаль исходного функционала (7) отличается от (11) наличием экспоненциального хвоста, сшивка с которым происходит в узкой области вблизи $x = a$. Мы не будем выписывать громоздкие формулы для экстремалей при $D = 2$, 3. Они могут быть сконструированы из свободного решения уравнения Шредингера, так же, как и в случае $D = 1$ (см. рис. 2).

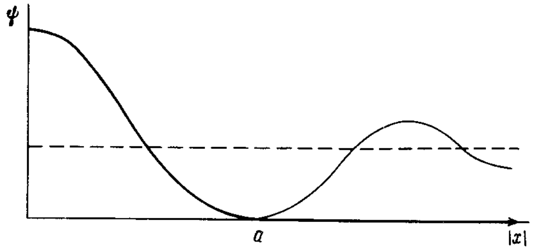

Рис. 2. Построение экстремали функционала (8). Решение свободного уравнения Шредингера сдвинуто таким образом, чтобы его первый минимум лежал на оси абсцисс

В задаче о квантовом поляроне имеется два безразмерных параметра $\mu = \Omega/t$ и $\alpha = \Omega/\omega_0$. При $\alpha < 1$ электрон всегда (при любом μ) делокализован; поправки к этому состоянию малы. При $\alpha > 1$ и $\mu > 1$ образуется полярон малого радиуса.

При $\alpha > 1$, но $\mu < 1$ (т.е. если выполнено неравенство (4)) образуется либо полярон большого радиуса, либо делокализованное состояние (см. рис.3). Обсудим кратко специфику, связанную с размерностью D. При $D = 1$, кроме "сильных" поляронов большого радиуса, описанных выше, в широкой области параметров возникают "слабые" поляроны, в которых изменение частот мало. Они описываются обычным нелинейным уравнением Шредингера, возникающим при разложении (6) и (7) до четвертого порядка по ψ. При $D = 2$ ситуация качественно не отличается от $D = 1$, но область "слабых" поляронов очень узка. При $D = 3$ "слабые" поляроны невозможны. Автолокализованное состояние возникает сразу как "сильный" полярон большого радиуса при увеличении α. Сначала он метастабилен, а затем метастабильным становится свободное состояние. В некоторой области параметров свободное и локализованное состояние разделены барьером и могут сосуществовать, как и в случае обычных поляронов [4].

Можно показать, что, как и масса обычного, масса квантового полярона велика по сравнению с массой голого электрона. Вычисление массы квантового полярона представляет собой нетривиальную задачу. Оно будет опубликовано отдельно.

Мы благодарны за многочисленные полезные обсуждения Э.И.Рашба, а также А.Г.Аронову, С.А.Бразовскому и Л.В.Келдышу.

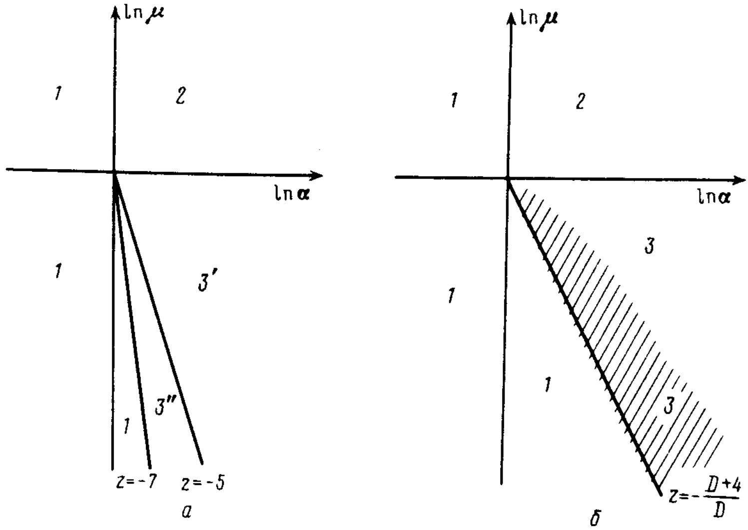

Рис. 3. Области параметров μ и α, отвечающие различным типам основного состояния: *1* - электрон делокализован, применима теория возмущений; *2* - полярон малого радиуса; *3* - полярон большого радиуса; параметр *z* - тангенс угла наклона линии; *а* - $D = 1$; области *3′* и *3″* - соответственно "сильные" и "слабые поляроны большого радиуса; *б* - $D = 2$, 3; заштрихована область сосуществования свободного и поляронного состояний (она имеется при $D = 3$)

Литература

1. Аппель Дж. Поляроны. М.: Наука, 1975.
2. Gutfreund H., Weger M. Phys. Rev. B, 1977, 16, 1753.
3. Böni P. et al. Phys. Rev. B., 1988, 38, 185.
4. Рашба Э.И. Оптика и спектроскопия, 1957, 2, 75, 88.