

# ЭНЕРГИЯ И КРИТИЧЕСКОЕ ЗНАЧЕНИЕ ПАРАМЕТРА ИОННОЙ СВЯЗИ ТРЕХМЕРНОГО БИПОЛЯРОНА БОЛЬШОГО РАДИУСА

*В. Д. Лахно\**

*Институт математических проблем биологии Российской академии наук  
142290, Пущино, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 31 августа 2009 г.

Развита теория биполярона сильной связи большого радиуса. Обсуждается возможность образования трехмерных биполярона в высокотемпературных сверхпроводниках. Для энергии биполярона получена низшая вариационная оценка при  $\alpha > 8$ , где  $\alpha$  — константа электрон-фононной связи. Для критического параметра ионной связи  $\eta_c = \varepsilon_\infty / \varepsilon_0$ , где  $\varepsilon_\infty$ ,  $\varepsilon_0$  — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости, получено значение  $\eta_c = 0.2496$ .

Интерес к электрон-фононным взаимодействиям (ЭФВ) обусловлен не только их общефизическим значением, но и их возможными приложениями в теории сверхпроводимости. Исследования многочисленных явлений, в которых ЭФВ играет определяющую роль, находились в центре внимания всего периода становления современной физики. Важное место среди фундаментальных задач, связанных с изучением электрон-фононных взаимодействий, занимает проблема биполярона. Большое внимание, уделяемое в последние годы проблеме биполярона, связано с попытками объяснить явление сверхпроводимости на основе механизма бозе-конденсации биполярона газа. В связи с этим изучение условий, при которых биполяронные состояния будут стабильны, имеет первостепенное значение. Подробное изложение теории биполярона большого радиуса, которые в настоящее время являются основными кандидатами на роль заряженных бозонов, образующих конденсат Бозе–Эйнштейна в реальном пространстве, дается в обзорах [1, 2].

Изучение процесса образования устойчивого двухэлектронного состояния в кристалле, или биполярона, как правило, связано с нахождением парного взаимодействия между двумя поляронами как функции расстояния между ними. Для биполярона большого радиуса область его существования ограничена со стороны фрелиховской константы ЭФВ  $\alpha$  довольно большим значением  $\alpha_c = 6.8$  [3], ниже которого связанное биполяронное состояние

не существует. В связи с требованием большой величины  $\alpha_c$ , которое может не выполняться в высокотемпературных сверхпроводниках, ряд работ был посвящен изучению вклада других типов взаимодействия и симметрий спаривания [4, 5].

В данной работе ограничимся рассмотрением только фрелиховского ЭФВ, поскольку рассматриваемый ниже подход можно обобщить и на другие типы взаимодействий. Это представляется тем более актуальным, поскольку в последнее время были получены веские аргументы, чтобы считать ЭФВ в высокотемпературных сверхпроводниках сильным [6–8]. Имеются также аргументы в пользу того, что вследствие слабой экранировки высокочастотных оптических фонов ЭФВ в высокотемпературных сверхпроводниках более адекватно описывать не в рамках контактного взаимодействия холстейновской модели полярона [9], а посредством дальнодействующего ЭФВ фрелиховского типа [10].

Для гамильтониана Фрелиха низшие значения энергии биполяронных состояний, определяемых ЭФВ, для  $\alpha < 8$  были получены в [3, 11, 12], а для  $\alpha > 8$  в [12–15].

Вплоть до настоящего времени многочисленные попытки найти трансляционно-инвариантное решение биполярной проблемы вариационными методами посредством прямой вариации волновой функции (ВФ) двухэлектронной системы [1, 16, 17] приводили к большим значениям энергии основного состояния биполярона, чем те, в которых использовалась

\*E-mail: lak@impb.psn.ru

ВФ, не обладающая трансляционной инвариантностью [11, 12, 15, 18].

Целью данной работы является получение низшей вариационной оценки энергии биполярона в рамках трансляционно-инвариантного подхода и интерпретация полученных результатов применительно к возможности биполярона высокотемпературной сверхпроводимости.

Наше рассмотрение основывается на преобразовании Гейзенберга, которое было использовано в работе [19] для исключения пространственных координат из поляронного гамильтониана. Будучи примененным к случаю биполярона, это преобразование приводит к гамильтониану, содержащему только разности координат электронов, что делает его автоматически трансляционно-инвариантным.

Будем исходить из гамильтониана Фрелиха для биполярона:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{r_2} + \\ & + \sum_k \hbar\omega a_k^\dagger a_k + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) + \\ & + \sum_k (V_k e^{ikr_1} a_k + V_k e^{ikr_2} a_k + \text{H.c.}), \end{aligned} \quad (1)$$

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

где  $m$  — эффективная масса электрона;  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$  — координаты соответственно первого и второго электрона;  $a_k^\dagger$ ,  $a_k$  — операторы рождения и уничтожения фононов с энергией  $\hbar\omega$ ,

$$V_k = \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{\tilde{\varepsilon}V}}, \quad \tilde{\varepsilon}^{-1} = \varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1}, \quad (2)$$

где  $e$  — заряд электрона,  $\varepsilon_\infty$  и  $\varepsilon_0$  — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости,  $V$  — объем системы.

В системе центра масс гамильтониан (1) примет вид

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2M_e}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu_e}\Delta_r + U(|\mathbf{r}|) + \sum_k \hbar\omega a_k^\dagger a_k + \\ & + \sum_k 2 \cos \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}{2} (V_k a_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} + \text{H.c.}), \end{aligned} \quad (3)$$

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

$$M_e = 2m, \quad \mu_e = m/2.$$

В дальнейшем будем полагать  $\hbar = 1$ ,  $\omega = 1$ ,  $M_e = 1$  (соответственно  $\mu_e = 1/4$ ).

Координаты центра масс  $\mathbf{R}$  могут быть исключены из гамильтониана (3) посредством канонического преобразования Гейзенберга

$$\hat{S}_1 = \exp \left\{ -i \sum_k \mathbf{k} a_k^\dagger a_k \right\} \mathbf{R}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \hat{S}_1^{-1} \hat{H} \hat{S}_1 = -2\Delta_r + U(|\mathbf{r}|) + \sum_k a_k^\dagger a_k + \\ & + \sum_k 2 \cos \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}{2} (V_k a_k + V_k^* a_k^\dagger) + \\ & + \frac{1}{2} \left( \sum_k \mathbf{k} a_k^\dagger a_k \right)^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Из формулы (5) следует, что точное решение биполярной проблемы определяется волновой функцией  $\Psi(r)$ , содержащей только относительные координаты  $r$ , и, таким образом, являющейся трансляционно-инвариантной.

Усреднение  $\hat{H}$  по  $\Psi(r)$  приводит к гамильтониану  $\hat{\bar{H}}$ :

$$\begin{aligned} \hat{\bar{H}} = & \frac{1}{2} \left( \sum_k \mathbf{k} a_k^\dagger a_k \right)^2 + \sum_k a_k^\dagger a_k + \\ & + \sum_k \bar{V}_k (a_k + a_k^\dagger) + \bar{T} + \bar{U}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\bar{V}_k = 2V_k \langle \Psi | \cos \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}{2} | \Psi \rangle, \quad \bar{U} = \langle \Psi | U(r) | \Psi \rangle,$$

$$\bar{T} = -2\langle \Psi | \Delta_r | \Psi \rangle.$$

Каноническое преобразование Ли, Лоу и Пайнса (LLP) [19] этого гамильтониана

$$\hat{S}_2 = \exp \left\{ \sum_k f_k (a_k - a_k^\dagger) \right\} \quad (7)$$

дает

$$\hat{\bar{H}} = \hat{S}_2^{-1} \hat{\bar{H}} \hat{S}_2, \quad \hat{\bar{H}} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \bar{T} + \bar{U} + 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 + \frac{1}{2} \left( \sum_k \mathbf{k} f_k \right)^2 + \\ & + \sum_k \left( 1 + \frac{k^2}{2} + \mathbf{k} \sum_{k'} \mathbf{k}' f_{k'}^2 \right) a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \sum_{k, k'} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') \times \\ & \times f_k f_{k'} (a_k a_{k'} + a_k^\dagger a_{k'}^\dagger + a_k^\dagger a_{k'} + a_k a_{k'}^\dagger), \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 = & \sum_k \left[ \bar{V}_k + f_k \left( 1 + \frac{k^2}{2} + \mathbf{k} \sum_{k'} \mathbf{k}' f_{k'}^2 \right) \right] (a_k + a_k^\dagger) + \\ & + \sum_{k,k'} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') [f_{k'} a_k^\dagger a_k a_{k'} + f_{k'} a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_k] + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k,k'} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_k a_{k'}. \quad (10)\end{aligned}$$

Заметим, что переход к гамильтониану (8), осуществляемый посредством канонического преобразования  $a_k \rightarrow a_k - f_k$ , в отличие от аналогичного преобразования  $a_k \rightarrow a_k - V_k \rho_k^*/\hbar\omega$  (где  $\rho_k^*$  — фурье-компоненты плотности зарядового распределения) непосредственно в исходном гамильтониане (1), приводит скорее к случаю слабой, чем сильной связи. Рассмотрим эту ситуацию подробнее в случае одного полярона, гамильтониан которого имеет вид

$$\begin{aligned}\hat{H}_p = & -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \sum_k (V_k e^{ikr} a_k + \text{H.c.}) + \\ & + \sum_k \hbar\omega a_k^\dagger a_k. \quad (11)\end{aligned}$$

Результаты сильной связи получаются из формулы (11) немедленно при выборе пробной ВФ в виде

$$|\Psi\rangle = \varphi(r) \exp \sum_k V_k \frac{\rho_k^*}{\hbar\omega} (a_k - a_k^\dagger) |0\rangle. \quad (12)$$

С использованием (12) выражение для полной энергии  $E = \langle \Psi | \hat{H}_p | \Psi \rangle$  приводит к пекаровскому функционалу полярона сильной связи:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla \varphi|^2 d^3 r - \sum_k \frac{V_k^2}{\hbar\omega} \rho_k^* \rho_k. \quad (13)$$

В подходе LLP исходный гамильтониан (11) посредством канонического преобразования вида (4) преобразовывается в гамильтониан

$$\begin{aligned}\hat{H}'_p = & \frac{\hbar^2}{2m} \left( \sum_k (\mathbf{k} a_k^\dagger a_k) \right)^2 + \sum_k V_k (a_k + a_k^\dagger) + \\ & + \sum_k \hbar\omega a_k^\dagger a_k. \quad (14)\end{aligned}$$

Для нахождения энергии основного состояния, отвечающего  $\hat{H}'_p$ , LLP выбирают пробную ВФ в виде

$$\Psi = \hat{S}_2 |0\rangle. \quad (15)$$

Величина  $f_k$  в  $\hat{S}_2$  (7) определяется при минимизации энергии  $E = \langle 0 | \hat{S}_2^{-1} | \hat{H}'_p | \hat{S}_2 | 0 \rangle$ , что дает

$$\begin{aligned}E = & 2 \sum_k f_k V_k + \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \sum_k \mathbf{k} f_k^2 \right]^2 + \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f_k^2 + \\ & + \sum_k \hbar\omega f_k^2, \quad (16)\end{aligned}$$

$$f_k = -\frac{V_k}{\hbar\omega + \hbar^2 k^2 / 2m}. \quad (17)$$

Подстановка формулы (17) в (16) дает  $E = -\alpha\hbar\omega$  — энергию полярона в пределе слабой связи. Таким образом, желание построить трансляционно-инвариантную теорию полярона посредством перехода к бескоординатному гамильтониану LLP сталкивается с проблемой невоспроизведимости предела сильной связи. Можно сказать, что ВФ

$$\begin{aligned}|\Psi_{LLP}\rangle = & \exp \left\{ -i \sum_k \mathbf{k} a_k^\dagger a_k \right\} r \times \\ & \times \exp \left\{ \sum_k f_k (a_k - a_k^\dagger) \right\} |0\rangle, \quad (18)\end{aligned}$$

выбранная LLP для расчета энергии полярона, определяемой гамильтонианом (11) в пределе сильной связи, является плохой пробной ВФ.

Все сказанное относится и к случаю биполярона: применение метода LLP к бескоординатному гамильтониану (6) приводит к пределу слабой связи, в котором связанное биполярное состояние оказывается невозможным [20]. Попытка решить эту проблему была предпринята в работе [17]. В этой работе использовалась гибридная ВФ, сконструированная с помощью ВФ (12) и (18). Такой подход автоматически приводит к потере трансляционной инвариантности и не добавляет каких-либо новых результатов в теории биполярона.

Решение проблемы перехода к случаю сильной связи в бескоординатном гамильтониане было найдено в работе [21] в течение длительного времени остававшейся в тени.

Для минимизации энергии, определяемой  $\hat{H}$ , в работе [21] была выбрана ВФ  $|\Lambda_0\rangle$ , являющаяся собственной функцией оператора  $\hat{H}_0$  (9):

$$\begin{aligned}|\Lambda_0\rangle = & c \exp \frac{1}{2} \left[ \iint a_k^\dagger A_{kk'} a_{k'}^\dagger dk dk' \right] |0\rangle, \quad (19) \\ \hat{A}^* = & \hat{M}_- \hat{M}_+^{-1},\end{aligned}$$

где  $c$  — нормировочная константа. Операторы  $\hat{M}_\pm$  определяются матричными элементами

$$\begin{aligned} (\hat{M}_\pm)_{kk'} &= \frac{1}{2}(\omega_k \omega_{k'})^{-1/2}(\omega_k \pm \omega_{k'}) \times \\ &\times \left[ \delta(k-k') + \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' f_k f_{k'} \frac{2(\omega_k \omega_{k'})^{1/2}}{(\omega_{k'}^2 - \omega_k^2 \pm i\varepsilon) D_\pm(\omega_k^2)} \right], \quad (20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_\pm(\omega_p^2) &= 1 + \frac{1}{3\pi^2} \int \frac{f_k^2 k^4 \omega_k}{\omega_k^2 - \omega_p^2 \mp i\varepsilon} dk, \\ \omega_k &= 1 + \frac{k^2}{2} + \mathbf{k} \sum_{k'} \mathbf{k}' f_{k'}^2. \end{aligned} \quad (21)$$

Как показано в работе [21], такой выбор пробной ВФ обращает математическое ожидание для гамильтониана  $H_1$  в нуль.

В результате, используя приближенную волновую функцию  $\Psi_0$  для биполярного гамильтониана (1) в виде

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= \Psi(r) \exp \left\{ -i \sum_k \mathbf{k} a_k^\dagger a_k \mathbf{R} \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ \sum_k f_k (a_k - a_k^\dagger) \right\} |\Lambda_0\rangle, \quad (22) \end{aligned}$$

для энергии биполярона получим

$$E = \Delta E + 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 + \bar{T} + \bar{U}, \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 dk}{1+Q} + \frac{1}{12\pi^4} \int_0^\infty k^4 p^4 f_k^2 f_p^2 \times \\ &\times \frac{\omega_p(\omega_k \omega_p + \omega_k(\omega_k + \omega_p) + 1)}{(\omega_k + \omega_p)^2(\omega_p^2 - 1)|D_+(\omega_p^2)|^2} dp dk, \quad (24) \\ Q &= \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 \omega_k}{\omega_k^2 - 1} dk. \end{aligned}$$

Из формул (23), (24) можно получить уравнения для определения энергии биполярона, варьируя  $E$  по  $f_k$  и  $\Psi$ . Подстановка  $f_k$  и  $\Psi$ , полученных посредством решения этих уравнений, в выражение (23) дает значение энергии биполярона  $E$ . Так как решение полученных таким образом уравнений представляет большие трудности, используем вариационный подход, полагая

$$f_k = -\bar{V}_k, \quad \Psi(r) = \left( \frac{2}{\pi l^2} \right)^{3/4} \exp \left( -\frac{r^2}{l^2} \right), \quad (25)$$

где  $l$  — вариационный параметр. Подстановка формулы (25) в (23), (24) приводит к следующему выражению для энергии биполярона  $E$ :

$$E = \frac{26.25}{l^2} - \frac{8}{\sqrt{\pi}} \left[ 2 - \frac{1/\sqrt{2}}{1-\eta} \right] \frac{\alpha}{l}, \quad (26)$$

где  $\eta = \varepsilon_\infty / \varepsilon_0$ ,  $\alpha = (e^2 / \hbar \tilde{\varepsilon}) \sqrt{m/2\hbar\omega}$  — константа электрон-фононной связи. Величина  $E$  (26) имеет минимум при

$$l \approx \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \cdot 6.56 \frac{1}{2 - \frac{1/\sqrt{2}}{1-\eta}}. \quad (27)$$

Это приводит к энергии основного состояния, равной

$$E \approx -0.194 \left[ 2 - \frac{1/\sqrt{2}}{1-\eta} \right]^2 \alpha^2. \quad (28)$$

Из формулы (28) вытекает критическое значение параметра ионной связи  $\eta_c = 0.2496$ , которое соответствует максимальной величине параметра  $\eta = \varepsilon_\infty / \varepsilon_0$ , определяемого из условия

$$E < -2E_{pol}, \quad (29)$$

где  $E_{pol} = -0.1085128\alpha^2$  — энергия основного состояния полярона в пределе сильной связи. Условие (29) определяет область, в которой биполярное состояние стабильно относительно распада на два полярных состояния. Полученные результаты значительно расширяют область стабильности биполярных состояний:  $0 < \eta < \eta_c$ . Наибольшее значение величины  $\eta_c$  было получено в работах [15, 22] и равно  $\eta_c = 0.143\dots$ . Для  $\eta = 0$  и  $\alpha \rightarrow \infty$  величина биполярной энергии  $E = -0.3243\alpha^2$ , вытекающая из выражения (28), является низшей из всех, которые до сих пор были получены вариационными методами (наименьшее значение для биполярной энергии было получено в работе [12] и равно  $E = -0.273024\alpha^2$ ).

В таблице сравниваются биполярные энергии  $E = E_{BPL}\alpha^2$ , определяемые выражением (28) для  $\alpha = 7$  и  $\alpha = 9$ , с соответствующими значениями, полученными в работе [11] ( $E = E_{BPA}\alpha^2$ ) и в работе [12] ( $E = E_{BPK}\alpha^2$ ). Из таблицы следует, что при  $\alpha = 9$  для всех значений  $\eta$  энергия, определяемая формулой (28), является низшей. При  $\alpha > 8$  энергия, определяемая выражением (28), ниже, чем полученная в работе [11]. Так как энергия биполярона, полученная в работе [11] в области  $25 > \alpha > 8$ , меньше, чем найденная в работе [3], а энергия, полученная в работе [12] для  $\alpha > 25$ , меньше, чем полученная в работе [11], и энергия биполярона, полученная в данной работе при  $\alpha > 8$ , ниже полученной в работах [11, 12], то во всем диапазоне изменения  $\alpha$  наименьшей энергией при  $\alpha < 8$  будет полученная в работе [3], а при  $\alpha > 8$  — полученная

Таблица

$\alpha = 7$			
$\eta$	$E_{BPK}$ [12]	$E_{BPA}$ [11]	$E_{BPL}$ (28)
0	-16.234	-16.067	-15.9
0.01	-16.053	-15.910	-15.72
0.1	-14.598	-14.5	-14.2
$\alpha = 9$			
$\eta$	$E_{BPK}$ [12]	$E_{BPA}$ [11]	$E_{BPL}$ (28)
0	-24.927	-24.652	-26.27
0.01	-24.650	-24.354	-25.976
0.1	-22.068	-21.756	-23.17

в данной работе. Если исходить из того, что согласно [3] биполярное состояние возможно лишь при  $\alpha > \alpha_c = 6.8$  [3], то область применимости подхода [3] лежит в области значений  $\alpha \in (6.8; 8)$ . Для  $\alpha > 8$  энергия биполярона будет определяться выражением (28).

Причина неточности подхода [3] в пределе сильной связи, по-видимому, состоит в следующем. Как и в данной работе, в статье [3] вычисление величин  $\bar{V}_k, \bar{U}, T$  проводилось с ВФ осцилляторного типа. Гамильтониан (6), совпадающий по структуре с однополярным, изучался в работе [3] с использованием фейнмановского подхода [23], который в пределе сильной связи дает более высокое значение энергии, чем в теории Пекара.

Полученные результаты позволяют по-новому взглянуть на биполярный механизм сверхпроводимости в высокотемпературных сверхпроводниках. Так, например, для высокотемпературного сверхпроводника  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  эксперимент [24] дает следующие величины диэлектрических проницаемостей:  $\epsilon_\infty = 4$  и  $\epsilon_0 = 50$  в слоях  $\text{CuO}_2$ , и  $\epsilon_0 = 23$  в перпендикулярном направлении, что свидетельствует о большой анизотропии диэлектрической проницаемости. Это дает  $\eta_{c\parallel} = 0.08$  в плоскостях  $\text{CuO}_2$  и  $\eta_{c\perp} = 0.174$  в перпендикулярном направлении. Наибольшее значение  $\eta_c = 0.143$  (см. [15, 22] и ссылки в них) приводило к выводу, что биполярный механизм сверхпроводимости может быть обусловлен только двумерными и одномерными биполяронами [25]. Величина  $\eta_c = 0.2496$ , полученная в данной работе, приводит к выводу, что сверхпроводимость в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  может быть обусловлена трехмерными биполяронами большого радиуса, поскольку  $\eta_c > \eta_{c\perp}$ . Большая

величина энергии связи биполярона, полученная в работе, расширяет область их стабильности, что также указывает на возможность 3D-биполяронов в оксидах меди.

В заключение отметим, что полученные в работе результаты основываются на вариационном подходе, который был использован дважды: во-первых при выборе пробной ВФ в виде (22), который обращает в нуль вклад от оператора  $\hat{H}_1$  (10) и, во-вторых, при выборе  $\Psi(r)$  в виде гауссовской функции (25). Дальнейшее продвижение по уточнению энергии основного состояния биполярона требует выбора более точной (и, соответственно, более сложной) ВФ, что может сделать дальнейший прогресс в этом направлении практически невозможным. В связи с этим обратим внимание на то, что более эффективным подходом для расчета основного состояния биполярона может оказаться использование диаграммных квантовых монте-карловских алгоритмов [26, 27] после их соответствующей адаптации на случай дальнодействующего ЭФВ.

Автор благодарен А. В. Тулубу, обратившему его внимание на тот факт, что работа [21] воспроизводит результаты теории полярона сильной связи после устранения из поляронного гамильтониана координат гейзенберговским преобразованием.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-07-12073).

## ЛИТЕРАТУРА

1. M. A. Smondyrev and V. M. Fomin, in: *Polarons and Applications*, ed. by V. D. Lakhno, Wiley, Chichester (1994), p. 514.
2. J. T. Devreese and A. S. Alexandrov, Rep. Progr. Phys. **72**, 1 (2009).
3. G. Verbist, F. M. Peeters, and J. T. Devreese, Phys. Rev. B **43**, 2712 (1991).
4. O. Gunnarsson and O. Rösch, J. Phys.: Condens. Matter **20**, ID 043201 (2008).
5. L. Vidmar, J. Bonča, S. Maekawa, and T. Tohyama, Phys. Rev. Lett **103**, 186401 (2009).
6. W. Meevasana, T. P. Devereaux, N. Nagaosa, Z.-X. Shen, and J. Zaanen, Phys. Rev. B **74**, ID 174524 (2006).

7. W. Meevasana, N. J. Ingle, D. H. Lu et al., Phys. Rev. Lett. **96**, ID 157003 (2006).
8. A. S. Mishchenko, N. Nagaosa, Z.-X. Shen et al., Phys. Rev. Lett. **100**, ID 166401 (2008).
9. T. Holstein, Ann. Phys. **8**, 343 (1959).
10. A. S. Alexandrov and P. E. Kornilovitch, Phys. Rev. Lett. **82**, 807 (1999).
11. J. Adamowski and S. Bednarek, J. Phys.: Condens. Matter **4**, 2845 (1992).
12. N. I. Kashirina, V. D. Lakhno, and V. V. Sychyov, Phys. Stat. Sol. (b) **234**, 235 (2002).
13. N. I. Kashirina, V. D. Lakhno, and V. V. Sychyov, Phys. Rev. B **71**, 134301 (2005).
14. С. Г. Супрун, Б. Я. Мойжес, ФТТ **24**, 1571 (1982).
15. N. I. Kashirina, V. D. Lakhno, and V. V. Sychyov, Phys. Stat. Sol. (b) **239**, 174 (2003).
16. G. Verbist, M. A. Smolyrev, F. M. Peeters, and J. T. Devreese, Phys. Rev. B **45**, 5662 (1992).
17. P. Vansant, M. A. Smolyrev, F. M. Peeters, and J. T. Devreese, J. Phys. A **27**, 7925 (1994).
18. В. Л. Винецкий, О. Мередов, В. А. Янчук, ТЭХ **25**, 641 (1989).
19. T. D. Lee, F. Low, and D. Pines, Phys. Rev. **88**, 960 (1952).
20. И. В. Амирханов, И. В. Пузынин, Т. А. Стриж, В. Д. Лахно, Изв. РАН Сер. Физ. **59**, 106 (1995).
21. А. В. Тулуб, ЖЭТФ **14**, 1828 (1961).
22. N. I. Kashirina, V. D. Lakhno, and V. V. Sychyov, Semiconductor Phys., Quantum Electronics and Optoelectronics **5**, 235 (2002).
23. R. P. Feynman, Phys. Rev. **97**, 660 (1955).
24. D. Reagor, E. Ahrens, S.-W. Cheong, A. Migliori, and Z. Fisk, Phys. Rev. Lett. **62**, 2048 (1989).
25. G. Verbist, F. M. Peeters, and J. T. Devreese, Phys. Scr. **39**, 66 (1991).
26. N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov, and I. S. Tupitsyn, JETP **87**, 310 (1998).
27. A. Macridin, G. A. Sawatzky, and M. Jarrell, Phys. Rev. B **69**, 245111 (2004).