ЖЭТФ, 2012, том 141, вып. 5, стр. 994–996

ТЕОРЕМА ВИРИАЛА И ПРОБЛЕМА ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ В ТЕОРИИ ПОЛЯРОНА

Н. И. Каширина [a*], **В. Д. Лахно** [b**], **А. В. Тулуб** [c***]

[a] *Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины 03028, Киев, Украина*

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

[c] *Санкт-Петербургский государственный университет 199034, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 15 августа 2011 г.

Обсуждается теорема вириала для трансляционно-инвариантной теории полярона [3]. Показано, что в работе [3] в пределе сильной связи был сделан неоптимальный выбор вариационных параметров, который привел к нарушению вириальных соотношений. Введение дополнительного вариационного параметра в пробную функцию приводит к понижению энергии полярона и выполнению соотношений теоремы вириала для полярона сильной связи (теоремы Пекара $1:2:3:4$).

Как известно, для классических и квантовых систем в ряде случаев возможно установить некоторые общие соотношения между средними величинами кинетической энергии, потенциальной энергии и энергии взаимодействия, которые носят название теоремы вириала. Теорема вириала выполняется как для точных, так и для приближенных волновых функций, при том, однако, условии, что они получены вариационным методом.

В частности, такие общие соотношения можно получить для полярона, исходя непосредственно из гамильтониана Фрёлиха:

$$H_p = -\frac{\hbar^2\Delta_r}{2m} + \sum_k (V_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_k + \text{H.c.}) + \sum_k \hbar\omega a_k^\dagger a_k, \quad (1)$$

где m — эффективная масса электрона; $\mathbf{r}$ — координата электрона; $a_k^\dagger$, a_k — операторы рождения и уничтожения фононов с энергией $\hbar\omega$,

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

e — заряд электрона, ε_∞, ε_0 — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости, V — объем системы.

Вириальные соотношения для поляронной задачи при произвольной величине электрон-фононного взаимодействия имеют вид [1]

$$T_p = -F_p, \quad E_{el} = 3F_p, \quad E_{int} = 4F_p, \quad (3)$$

где

$$F_p = T_p + E_{int}/2, \quad E_{el} = T_p + E_{int},$$

$$T_p = \langle\Psi_p| - \frac{\hbar^2\Delta_r}{2m}|\Psi_p\rangle,$$

$$E_{int} = \langle\Psi_p|\sum_k (V_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_k + \text{H.c.})|\Psi_p\rangle,$$

Ψ_p — волновая функция основного состояния полярона. В пределе сильной связи к вириальным соотношениям (3) добавляется еще одно соотношение:

$$E_{ph} = -2F_p, \quad (4)$$

где

$$E_{ph} = \langle\Psi_p|\sum_k \hbar\omega a_k^\dagger a_k|\Psi_p\rangle.$$

В этом пределе величина F_p совпадает с полной энергией основного самосогласованного состояния полярона (энергией термоионизации) $E_p = \langle\Psi_p|H_p|\Psi_p\rangle$, а вириальные соотношения, полученные в работе [1], соответствуют известной теореме Пекара $1:2:3:4$ для полярона сильной связи [2].

*E-mail: n_kashirina@mail.ru
**E-mail: lak@impb.psn.ru
***E-mail: tulub@NK7099.Spb.edu

В трансляционно-инвариантной теории [3] операторы поля подвергаются преобразованию сдвига:

$$a_k \to a_k + f_k,$$

причем функция f_k описывает классическую компоненту поля (поляронная яма). Для энергии основного состояния E_p в работе [3], исходя из гамильтониана (1), было получено выражение

$$E_p = \Delta E + 2\sum_k V_k f_k + \sum_k f_k^2 \tag{5}$$

(в формуле (5) положено $\hbar = \omega = 1$, как в работе [3]).

Входящие в (5) величины имеют следующий смысл:

$$T_p = \Delta E, \quad E_{int} = 2\sum_k V_k f_k, \quad E_{ph} = \sum_k f_k^2,$$

и должны подчиняться вириальным соотношениям (3) и (4). Так, для величины E_{int} в работе [3] было получено с использованием пробной функции $f_k^T = -V_k \exp(-k^2/2a^2)$, где a — вариационный параметр, выражение

$$E_{int} = 2\sum_k V_k f_k = -\frac{2}{\sqrt{\pi}}\, g^2 a, \tag{6}$$

где

$$g^2 = \alpha = \frac{e^2}{\hbar\tilde{\varepsilon}}\sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}}\,,$$

α — фрёлиховская константа электрон-фононной связи. Соответственно для E_{ph} было получено выражение

$$E_{ph} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, g^2 a. \tag{7}$$

Из формул (6) и (7) следует, что

$$E_{int}/E_{ph} = -2\sqrt{2}\,. \tag{8}$$

Это выражение находится в противоречии с теоремой вириала (с соотношением (4)).

В работе [3] для энергии основного состояния при одном варьируемом параметре было получено значение

$$E_0 = -0.105 g^4, \tag{9}$$

которое соответствует более высокой энергии полярона, чем энергия, полученная в работе Мияке [4], равная:

$$E_0 = -0.10851128 g^4. \tag{10}$$

Представляет интерес найти минимум полной энергии в рамках трансляционно-инвариантной теории в классе функций, удовлетворяющих вириальным соотношениям. В рамках этой задачи выяснилось, что выбор пробной функции f_k^T в работе [3] не является оптимальным. Наименьшее значение функционалу (5) доставляет в рамках задания двух вариационных параметров функция типа $f_k^0 = N f_k^T$. Вариационный параметр N оказался равным $N = \sqrt{2}$. При выборе $f_k = f_k^0 = \sqrt{2}\, f_k^T$ выполняются вириальные соотношения (3) и (4), справедливые для полярона сильной связи (теорема Пекара 1 : 2 : 3 : 4 [2]), а для энергии основного состояния, вычисленного согласно (5), получается следующее значение:

$$E_0 = -0.1257520 g^4, \tag{11}$$

что гораздо ниже наилучшего значения (10).

Значение E_0, определяемое формулой (10), в настоящее время является твердо установленным и определяется из соотношения

$$\lim \frac{E_0}{\alpha^2} = \inf_{\Psi, \|\Psi\|=1} \left[\frac{1}{2}\int d\mathbf{r} |\nabla\Psi(\mathbf{r})|^2 - \right.$$
$$\left. - \frac{1}{\sqrt{2}} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\Psi(\mathbf{r}_1)|^2 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1} |\Psi(\mathbf{r}_2)|^2 \right], \tag{12}$$

где функционал в правой части выражения является функционалом Пекара, полученным в пределе сильной связи. Строгое доказательство утверждения (12) было дано в работах [5, 6]. Результат Мияке воспроизводился в большом числе работ (см. [7, 8]) и не вызывает никакого сомнения.

На наш взгляд, (результаты работы [3] были еще раз перепроверены) единственное возможное объяснение возникшего противоречия лежит в том, что в трансляционно-инвариантной теории в приближении сильной связи и в теории сильной связи, основанной на волновых функциях, минимизирующих функционал (12), используются волновые функции, принадлежащие разным классам функций. В трансляционно-инвариантной теории волновая функция полярона при равном нулю полном импульсе имеет вид

$$\Psi_0^T = \exp\left(-i\sum_k \mathbf{k} a_k^\dagger a_k \mathbf{r}\right) \hat{\Phi}\left(\{a_k\}\right)|0\rangle, \qquad |\Psi_0^T|^2 = \text{const}, \tag{13}$$

где функционал $\hat{\Phi}$ в явном виде приведен в работе [3]. Переход к локализованному описанию в поляронной задаче (состояния в теории со спонтанно нарушенной трансляционной симметрией) был также рассмотрен в работе [3] и привел к выражению (9) для энергии. Приближенная волновая функция основного состояния, определяемая функционалом (12), принадлежит к классу локализованных, нормируемых функций. В то же время, строгое обоснование вывода о делокализованности истинной волновой функции полярона в основном состоянии было дано в работе [9].

В заключение отметим, что принятие значения (11) для энергии основного состояния полярона приводит к необходимости переоценки критерия стабильности биполяронного состояния $E_{bp} < -2E_p$ по параметру $\eta_c = \varepsilon_\infty/\varepsilon_0$, выше которого биполяронные состояния отсутствуют. Для параметра η_c, найденного в работе [10] в рамках того же квантово-полевого подхода, что и поляронная энергия, определяемая выражением (11), получим значение $\eta_c = 0.179$ вместо $\eta_c = 0.2496$, рассчитанного с использованием поляронной энергии (10). В связи с тем, что в работе [10] при решении биполяронной задачи была проведена процедура оптимизации по дополнительному вариационному параметру, теорема вириала для биполярона [11] выполняется в [10] автоматически.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №№ 11-07-12054, 10-07-00112).

ЛИТЕРАТУРА

1. L. F. Lemmens and J. T. Devreese, Sol. St. Comm. **12**, 1067 (1973).
2. С. И. Пекар, *Исследование по электронной теории кристаллов*, Гостехиздат, Москва (1951).
3. А. В. Тулуб, ЖЭТФ **41**, 1828 (1961).
4. S. J. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn. **41**, 747 (1976).
5. J. Adamowski, B. Gerlach, and H. Leshke, Phys. Lett. A **79**, 249 (1980).
6. B. Gerlach and H. Löwen, Rev. Mod. Phys. **63**, 63 (1991).
7. E. Lieb, Stud. Appl. Math. **57**, 93 (1977).
8. В. Д. Лахно, Н. К. Балабаев, ТМФ **45**, 139 (1980).
9. B. Gerlach and H. Löwen, Phys. Rev. B **37**, 8042 (1988).
10. В. Д. Лахно, ЖЭТФ **137**, 926 (2010).
11. Н. И. Каширина, В. Д. Лахно, УФН **180**, 449 (2010).