Физика твердого тела, том 25, в. 1, 1983
Solid State Physics, vol. 25, № 1, 1983

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ ПОЛЯРОННОЙ МОДЕЛИ

О. М. Браун, А. И. Волокитин

В последнее время широкое применение нашла локальная поляронная модель, в которой электрон в локализованном состоянии $|A\rangle$ взаимодействует с бозонами и с другим состоянием $|B\rangle$ за счет гибридизации. Эта модель использовалась в теории соединений с промежуточной валентностью (ПВ) [1-3] для объяснения стабилизации состояния ПВ за счет поляронных эффектов (состоянию $|A\rangle$ соответствует f-состояние, $|B\rangle$ — d-состояние, бозонам соответствуют объемные фононы или плазмоны), а также в теории хемосорбции [4, 5] для учета электростатических сил изображения ($|A\rangle$ соответствует состоянию электрона на адатоме, $|B\rangle$ — в металле, бозонам соответствуют поверхностные плазмоны). Локальная поляронная модель описывается гамильтонианом [2]

$$H = \varepsilon_A n_A + \varepsilon_B n_B + V\left(c_A^* c_B + \text{э. с.}\right) + \omega a^* a + g n_A \left(a + a^*\right), \tag{1}$$

где $n_A = c_A^* c_A$, $n_B = c_B^* c_B$, c_A^* и c_B^* — операторы рождения электрона в состояниях $|A\rangle$ и $|B\rangle$, a^* — оператор рождения бозона. Для сокращения записи удобно положить $\omega = 1$, $\varepsilon_B = 0$.

Для нахождения основного состояния гамильтониана (1) обычно проводят усреднение по бозонной подсистеме с помощью вариационной волновой функции, учитывающей корреляцию состояний электронной и бозонной подсистем, и получают в результате эффективный электронный гамильтониан [2, 3, 5]

$$H_{\text{eff}} = \varepsilon_{\text{eff}} n_A + V_{\text{eff}} (c_A^* c_B + \text{э. с.}),$$

в котором параметры ε_{eff} и V_{eff} зависят от параметров исходного гамильтониана (1).

В настоящей работе приводится точное решение модели (1). Волновую функцию запишем в виде

$$|\psi\rangle = [c_A^* f_A(a^*) + c_B^* f_B(a^*)] |0\rangle \tag{2}$$

$$f_A(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n; \quad f_B(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n, \tag{3}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (|a_n|^2 + |b_n|^2) n! = 1. \tag{4}$$

Подставляя волновую функцию (2) в уравнение Шредингера и учитывая коммутационное соотношение $[a, f(a^*)] = f'(a^*)$, получим систему дифференциальных уравнений

$$\left.\begin{aligned} V f_B + (x+g) f_A' &= (\varepsilon - \varepsilon_A - gx) f_A, \\ V f_A + x f_B' &= \varepsilon f_B. \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

Из условия нормировки следует, что при $n \to \infty$ коэффициенты a_n и b_n уменьшаются быстрее, чем $1/\sqrt{n!}$. Откуда следует, что $f_A(x)$ и $f_B(x)$ являются целыми функциями. Исключая из (5) $f_B(x)$, можно получить уравнение для функции $f_A(x)$

$$x(x+g) f_A'' + [x^2 g + x(1 + \varepsilon_A - 2\varepsilon) - \varepsilon g] f_A' + [xg(1-\varepsilon) + \varepsilon(\varepsilon - \varepsilon_A) - V^2] f_A = 0. \tag{6}$$

Аналогичное уравнение может быть написано и для функции $f_B(x)$. Таким образом, задача сводится к нахождению аналитического во всей комплексной области $|z| < \infty$ решения системы (5) или, что аналогично, уравнения (6). Аналитическое решение возможно только при определенных значениях ε, которые определяют собственные значения гамильтониана (1). Процедура решения состоит в следующем. Подставляя (3) в (6), получим систему рекурентных соотношений

$$\left(\varepsilon - \varepsilon_A - n - \frac{V^2}{\varepsilon - n}\right) a_n - g(n+1) a_{n+1} - g a_{n-1} = 0. \tag{7}$$

Определяя из (7) коэффициенты a_n, получим функцию $f_A(x)$, которая аналитична в круге $|z| < g$. В окрестности точки $x = -g$ уравнение (6) имеет два независимых решения, из которых только одно аналитично. Запишем его в виде

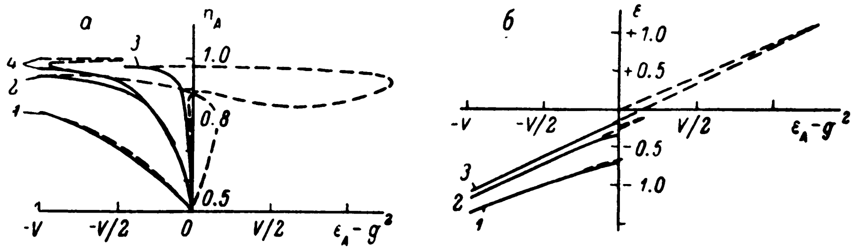
$$\tilde{f}_A(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (x+g)^n. \tag{8}$$

Рекурентные соотношения для коэффициентов c_n также получаются путем подстановки (8) в (6). Ряд, определяемый функцией (8), сходится в круге $|z+g| < g$. Сшивая функции (3) и (8) в некоторой произвольной точке x_0 $(-g < x_0 < 0)$

$$f_A'(x_0)/f_A(x_0) = \tilde{f}_A'(x_0)/\tilde{f}_A(x_0), \tag{9}$$

получаем необходимое нам аналитическое во всей комплексной области $|z| < \infty$ решение. При этом условие сшивки (9) является уравнением, определяющим собственные значения гамильтониана (1). Решение уравнения (9) осуществлялось численными методами. Результаты расчета зависимости числа заполнения $\langle n_A \rangle$ и энергии основного состояния ε от положения уровня ε_A приведены на рисунке.

Несложно рассмотреть также предельные случаи. В случае медленных флуктуаций бозонной подсистемы, когда $|\varepsilon| \gg 1$, т. е. когда $|\varepsilon_A - g^2| \gg 1$ или $V \gg 1$, бозонная подсистема не успевает следить за изменениями электронной подсистемы и применимо адиабатическое приближение (1); при этом $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_A - g^2$, $V_{eff} = V$. В случае быстрых флуктуаций, когда $|\varepsilon| \ll 1$,



Зависимость числа заполнения n_A (*а*) и энергии основного состояния ε (*б*) от положения уровня ε_A.

Сплошные линии — точное решение, штриховые — вариационное решение. *1* — $g = \sqrt{2}$, $V = 1$; *2* — $g = \sqrt{5}$, $V = 1$; *3* — $g = 2\sqrt{2}$, $V = 1$; *4* — $g = 1.95$, $V = 0.1$.

т. е. когда $|\varepsilon_A - g^2| \ll 1$, $V \ll 1$ и $g^2 \ll 1/|\varepsilon_A - g^2|$, бозонная подсистема мгновенно подстраивается под электронную и применимо обратное адиабатическое приближение (4); при этом $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_A - g^2$, $V_{eff} = V_{exp}(-g^2/2)$ («поляронное сужение»). Вариационный метод [2, 3, 5] дает плавную интерполяцию между этими предельными случаями.

Сравнение полученного в настоящей работе точного решения с вариационным решением [2] показывает, что вариационный метод с достаточной точностью определяет энергию основного состояния системы ε (см. рисунок). При $g \lesssim \sqrt{3}$ (а это условие обычно выполняется для хемосорбционных систем [5]) удовлетворительно согласуются также и зависимости $n_A(\varepsilon_A)$, рассчитанные обоими методами. При $g > \sqrt{3}$ в отличие от результатов вариационного метода [2] точное решение дает плавный переход между состояниями с $\langle n_A \rangle = 0$ и 1; никаких особенностей, которыми можно было бы объяснить стабилизацию состояния с ПВ, на зависимости $n_A(\varepsilon_A)$ нет. Это связано с предельной упрощенностью модели (1); обсуждение вопроса о возможности такой стабилизации за счет поляронного сужения в более реалистических моделях смотри в [2, 3].

Литература

[1] F. D. M. Haldane. Phys. Rev. *B15*, 281, 2477, 1977.
[2] D. I. Khomskii. Sol. St. Commun., *27*, 775, 1978.
[3] A. C. Hewson, D. M. Newns. J. Phys. *C12*, 1665, 1979; *C13*, 4477, 1980.
[4] A. C. Hewson, D. M. Newns. Jap. J. Appl. Phys. Suppl. 2, *2*, 121, 1974.
[5] О. М. Браун, А. И. Волокитин. ФТТ, *23*, 3530, 1982.

Новосибирский государственный университет

Поступило в Редакцию
13 января 1982 г.
В окончательной редакции
11 октября 1982 г.