



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН

Онлайновая библиотека



В.Д.Лахно

Математические основы
трансляционно-
инвариантной
биполярной теории
сверхпроводимости

Рекомендуемая форма библиографической ссылки

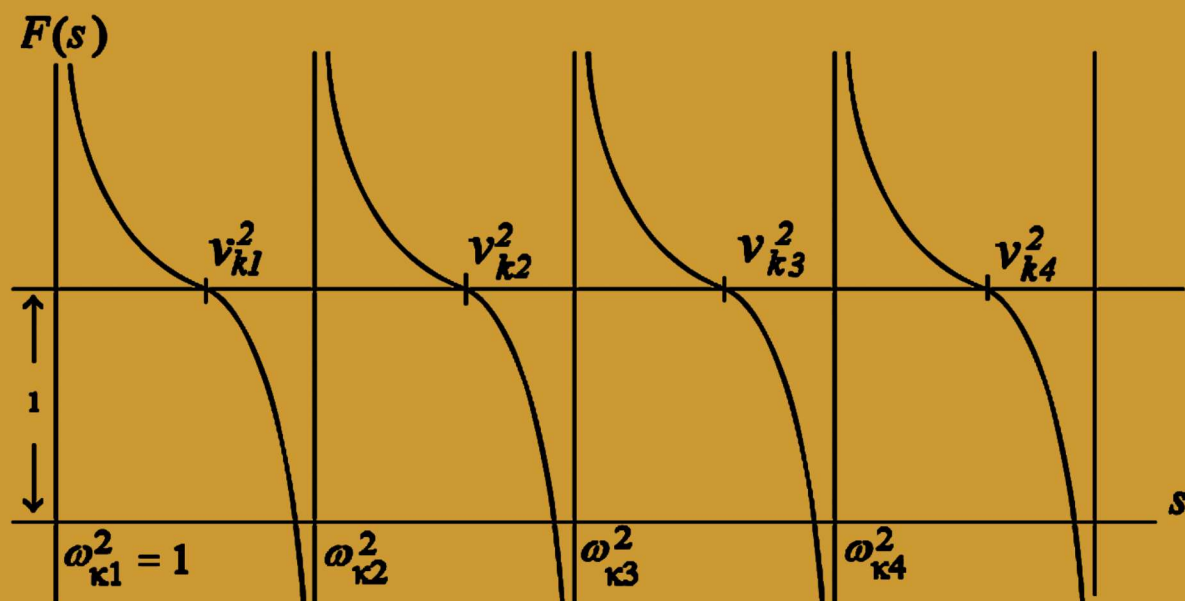
Лахно В.Д. Математические основы трансляционно-инвариантной биполярной теории сверхпроводимости. М.: ИПМ им.М.В.Келдыша, 2021. 292 с.

<https://doi.org/10.20948/mono-2021-lakhno>

<https://keldysh.ru/e-biblio/lakhno/>

В.Д. Лахно

Математические основы трансляционно-инвариантной биполярной теории сверхпроводимости



В.Д.Лахно

**Математические основы
трансляционно-инвариантной
биполярной теории
сверхпроводимости**

2021

УДК 538.945

ББК 22.314

Л 28

Лахно В.Д. Математические основы трансляционно-инвариантной биполярной теории сверхпроводимости. — М.: ИПМ им.М.В.Келдыша, 2021. — 292 с.

В монографии излагается теория трансляционно-инвариантных поляронов и биполяронов на основе теории сжатых вакуумных волновых функций. Показано, что анзац Тулуба, устанавливающий связь между обобщённым преобразованием Боголюбова и унитарным оператором сжатия, даёт решение спектральной задачи для биполярона.

Полученные решения используются для построения теории сверхпроводимости на основе гамильтониана Фрёлиха с сильным электрон-фононным взаимодействием. Роль куперовских пар в ней играют ТИ-биполярны пространственно делокализованных электронов с малой корреляционной длиной.

Построенная теория объясняет большое число экспериментов по термодинамическим, спектроскопическим и транспортным характеристикам высокотемпературных сверхпроводников, джозефсоновскому туннелированию, фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением, нейтронному рассеянию и др.

Книга рассчитана на физиков и математиков, работающих в области теории конденсированных систем, а также аспирантов и студентов старших курсов университетов.

<https://doi.org/10.20948/mono-2021-lakhno>

ISBN 978-5-98354-060-6

© Лахно В.Д., 2021

© ИПМ им.М.В.Келдыша РАН, 2021

Предисловие

В монографии излагается поляронная теория сверхпроводимости. Теория полярона, начало которой положила статья Ландау 1933 г., появившаяся на заре становления квантовой механики, вначале развивалась в Советском Союзе в работах Пекара, а впоследствии, начиная с работ Фрёлиха, и в работах зарубежных теоретиков. Причиной такого интереса является тот факт, что полярон, представляя собой элементарную квазичастицу, даёт простейший содержательный пример нерелятивистской квантовой теории поля. На протяжении своего почти 90-летнего развития в теории полярона был опробован практически весь аппарат теоретической физики. Так, например, техника континуального интегрирования стала общепризнанной после её успешного применения в теории полярона Фейнманом в 1955 г. Метод коллективных координат в квантовой теории поля также появился после работ Боголюбова и Тябликова по полярону сильной связи. Методы теории когерентных и сжатых состояний, широко используемые в квантовой оптике и многих других разделах физики после появления работ Глаубера, также впервые были разработаны Тулубом в теории полярона. Однако, несмотря на усилия многих поколений теоретиков, проблема полярона до сих пор не нашла своего полного решения.

Теория полярона, в основе которой лежит уравнение Шрёдингера для электрона, взаимодействующего с бесконечным числом осцилляторов поля, представляет собой простейший пример квантовой теории поля.

Математический аппарат для постановки такой квантово-полевой задачи в принципе позволял это сделать сразу же после матричной формулировки Гейзенбергом квантовой механики Шрёдингера.

В теории твёрдого тела впервые это было сделано Пекаром для полярона сильной связи. Говоря современным языком, решение задачи

было дано в форме анзаца, в котором оно представляется в мультипликативном виде, составленном из произведения электронной волновой функции и когерентных состояний осцилляторов поля. Под когерентными состояниями понимаются, согласно введённому впоследствии их определению Глаубером, собственные состояния оператора уничтожения.

Позже Фрелихом и Ли, Лоу, Пайнсом был построен анзац, в котором было дано решение в форме произведения операторов Гейзенберга (устраняющих электронные координаты и поэтому делающих теорию трансляционно-инвариантной) и операторов сдвига, действующих на вакуумную волновую функцию гамильтониана, которое соответствовало случаю слабого взаимодействия электрона с осцилляторами поля.

Наконец, спустя 10 лет в 1961 году Тулубом было дано решение задачи в форме анзаца, в котором впервые фигурировал оператор сжатия, действующий на вакуумную волновую функцию. Анзац Тулуба давал решение во всём диапазоне изменения константы связи и в случаях сильной и слабой связи воспроизводил результаты Пекара, Фрелиха, Ли, Лоу и Пайнса.

Совсем другая проблема, как казалось, никак не связанная с проблемой полярона, возникла в 1911 году (Kamerlingh Onnes H., 1911) после открытия голландским учёным Камерлинг-Оннесом сверхпроводимости, задолго до создания квантовой механики.

Построение квантовой теории сверхпроводимости проходило с большим трудом. Феноменологические основы теории были заложены в работах Тиссы и Лондонов, а её вершиной было построение феноменологической теории Гинзбургом и Ландау спустя почти сорок лет с момента открытия сверхпроводимости.

Подсказкой для построения микроскопической теории сверхпроводимости оказалось открытие изотопического эффекта в середине прошлого века. Стало ясно, что в этом явлении замешана

решётка, то есть электрон-фононное взаимодействие. Микроскопическая теория на основе электрон-фононного взаимодействия была построена Бардиным, Купером и Шриффером (БКШ) в 1957 году. Теория была построена в приближении слабого электрон-фононного взаимодействия и хорошо описывала ситуацию в металлах.

В течение некоторого времени после триумфа БКШ теория сверхпроводимости и теория поляронов развивались как две не связанные друг с другом теории. Несмотря на их математическое изящество, в практическом плане они представляли небольшой интерес: теория полярона совсем не имела практических приложений, а теория сверхпроводимости была неспособна указать путь к повышению температуры сверхпроводящего перехода. По этой причине открытие высокотемпературной проводимости в 1986 г. Беднорцем и Мюллером было мало связано с теоретическими достижениями. Качественной руководящей идеей для одного из авторов открытия – К. Мюллера – было его предположение о биполярном механизме высокотемпературной сверхпроводимости. Открытие Мюллера и Беднорца вдохновило исследователей всего мира в поиске сверхпроводников, работающих при комнатной температуре (к моменту написания данной монографии рекордная температура составляла 15°C для смеси сероводорода и метана, полученная при давлении в 2,5 млн атмосфер).

Биполярная теория сверхпроводимости в настоящее время даёт одно из возможных решений этой проблемы. Большой вклад в её развитие был внесён работами Винецкого, Андерсона, Александрова, Мотта, Раннингера и др. Большинство этих работ было посвящено поляронам и биполяронам малого радиуса.

В 10-20-х годах нашего века автором разрабатывалась теория сверхпроводимости на основе трансляционно-инвариантных поляронов большого радиуса, способная объяснить большую совокупность

экспериментальных фактов по высокотемпературным сверхпроводникам. Теория основана на эквивалентности преобразования Боголюбова, использованного им для построения теории сверхпроводимости, и оператора сжатия, фигурирующего в решении задачи о поляроне и биполяроне. Развитая теория дает решение спектральной задачи как в случае полярона, так и биполярона. Решение спектральной задачи для полярона и биполярона может найти применение в различных областях физики, однако наиболее актуальным является его использование в теории сверхпроводимости. Хотя эта теория была опубликована в ряде статей и обзоров, её систематическое изложение в форме монографии автору представляется целесообразным. При этом большое внимание уделяется непротиворечивому объяснению экспериментальных результатов на основе минимального числа сделанных предположений и параметров теории.

Изложенные в монографии результаты могут представлять интерес для широкого круга областей физики конденсированных систем, а также физики высоких энергий.

Книга может быть полезной не только специалистам, но и студентам старших курсов и аспирантам, специализирующимся в области физики конденсированных сред.

Pluralitas non est sine necessitate
(*Не следует привлекать новые сущности*
без крайней на то необходимости)

Оккам

Введение

1. История вопроса

Теория сверхпроводимости для обычных металлов является одним из самых красивых и давно сформировавшихся разделов физики конденсированных сред, который включает в себя как макроскопическую, так и микроскопическую теории, а также вывод макроскопических уравнений теории из микроскопического описания [Лифшиц 1978]. В этом смысле теория в своей основе представлялась в законченном виде, и её дальнейшее развитие должно быть связано с детализацией и рассмотрением различных специальных случаев.

Ситуация изменилась после открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) [Bednorz 1986]. Неожиданным оказалось, что в оксидных керамиках корреляционная длина на несколько порядков меньше, чем в традиционных металлических сверхпроводниках, а ширина запрещённой щели намного больше температуры сверхпроводящего перехода [Гинзбург 2000]. С современным состоянием теории и эксперимента можно ознакомиться по книгам и обзорам [Kakani 2009], [Tohyama 2012], [Kruchinin 2011], [Sinha 2002], [Benneman 2008], [Schrieffer 1999], [Cooper 2011], [Plakida 2010], [Askerzade 2012], [Gunnarsson 2008], [Moriya 2000], [Manske 2004].

На сегодняшний день основной вопрос связан с построением микроскопической теории, способной объяснить совокупность экспериментальных фактов, не укладывающихся в стандартную теорию Бардина, Купера, Шриффера (БКШ) [Bardeen 1957].

При всей множественности современных версий микроскопического описания ВТСП: фононный, плазмонный, спиновый, экситонный и другие механизмы – центральным пунктом построения микроскопической теории является эффект спаривания электронов (эффект Купера). Такая «бозонизация» электронов далее лежит в основе описания их сверхпроводящего конденсата.

Явление спаривания в широком смысле есть образование биелектронных состояний, а в узком смысле, если в основу описания положен фононный механизм – есть образование биполяронных состояний. В течение длительного времени такому представлению препятствовала большая корреляционная длина, другими словами, размер куперовских пар в теории БКШ. Эта же причина долгое время препятствовала представлению о сверхпроводимости как о бозонном конденсате (см. примечание на стр. 1177 работы [Bardeen 1957]). В немалой степени такому непониманию способствовало и стандартное представление о биполяронах как об очень компактных образованиях.

Первое указание на ошибочность такой точки зрения было получено в работе [Келдыш 1968], в которой при изучении свойств экситонного газа высокой плотности впервые была продемонстрирована аналогия между теорией БКШ и бозе-эйнштейновской конденсацией (БЭК). Результаты [Келдыш 1968] послужили основой для развития идеи кроссовера – перехода от теории БКШ, которой соответствует предел слабого электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ), к теории БЭК, которой соответствует предел сильного ЭФВ [Eagles 1969], [Nozières 1985], [Локтев 1996], [Randeria 1997], [Uemura 1997], [Drechsler 1992], [Griffin 1996]. Считалось, что дополнительным свидетельством правильности такого пути служит теория сильной связи Элиашберга [Элиашберг 1960]. Согласно [Marsiglio 1991], в пределе бесконечно сильного ЭФВ эта теория приводит к режиму локальных пар, хотя и сильно отличному от режима БЭК [Micnas 1990].

Попытки построить теорию кроссовера между БКШ и БЭК столкнулись, однако, с непреодолимыми трудностями. Так, например, используя T-матричный подход, предлагалось построить теорию, в которой бы T-матрица исходной фермионной системы при увеличении силы ЭФВ переходила бы в T-матрицу бозонной системы [Zwenger 2012], [Bloch 2008], [Giorgini 2008], [Chen 2005], [Ketterle 2007], [Pieri 2000]. Такой переход, однако, оказалось невозможно осуществить даже в случае предельно разбавленных систем. Фактически речь идёт о том, что даже в пределе, когда система состоит только из двух фермионов, оказывается невозможным построить из них однобозонное состояние. В теории ЭФВ эта проблема известна как проблема биполярона.

Одна из причин неудачи теории кроссовера связана со следующим обстоятельством. Как и в теории биполярона, в теории БКШ исходным является гамильтониан Фрёлиха. Для этого гамильтониана доказана важная теорема об аналитичности энергии полярона и биполярона по константе ЭФВ [Gerlach 1991]. В теории БКШ делается, однако, очень важное приближение: замена настоящего матричного элемента взаимодействия в гамильтониане Фрёлиха на модельную величину – обрезанный снизу и сверху по фоновым импульсам матричный элемент. Эта процедура отнюдь не является безобидной. Как показано в [Ляхно 2013], в теории биполярона это приводит к побочным эффектам – существованию локального уровня энергии, отделённого от квазинепрерывного спектра щелью (эффект Купера). Такое решение является изолированным и не обладает свойствами аналитичности по константе связи. В теории БКШ именно такое решение берётся за основу построения теории сверхпроводимости.

В результате, построенная теория и её аналитическое продолжение – теория Элиашберга, сильно искажают реальную картину и, в частности, делают невозможным построение теории сверхпроводимости на основе БЭК. Замена истинного матричного элемента на модельный позволяет

привести до конца аналитические вычисления. В частности, замена в БКШ истинного взаимодействия на локальное позволила провести вывод феноменологической модели Гинзбурга-Ландау, являющейся также локальной моделью [Горьков 1959]. В действительности, мощь такого подхода трудно переоценить, так как он позволил получить множество согласованных с экспериментом утверждений.

Другая, еще более важная причина неудачи теории кроссовера состоит в том, что вакуумы в теории полярона (биполярона) со спонтанно нарушенной симметрией и трансляционно-инвариантного (ТИ) полярона (ТИ-биполярона) в случае сильного взаимодействия различны, что делает невозможным переход теории Элиашберга к трансляционно-инвариантной биполяронной теории сильной связи.

В данной книге излагается теория сверхпроводимости (СП), основанная на электрон-фононном взаимодействии. В ней случаю БКШ соответствует предел слабого ЭФВ, а случаю сильного ЭФВ соответствует ТИ-биполяронная теория сверхпроводимости, в которой СП фазе соответствует бозе-конденсат ТИ-биполяронов [Lakshno 2018; Cond. Matter 2019; Physica C, 2019; Cond. Mat., 2020].

Актуальность написания монографии по биполяронному механизму сверхпроводимости обусловлена следующими обстоятельствами 1) Большинство публикаций по биполяронной СП посвящено поляронам малого радиуса (ПМР) [Александров 1992], в то время как за прошедшее время, после критики теории СП на основе ПМР [Chakraverty 1988], [Mello 1997, 1999], [Firsov 1999], интерес сместился к поляронам большого радиуса. 2) Основная масса работ последних десятилетий была посвящена магнитно-флуктуационным механизмам СП, в то время как новейшие эксперименты, в которых получены рекордные T_c (под высоким давлением), были выполнены на сульфидах водорода и гидридах лантана, в которых магнитных взаимодействий нет, но есть сильное электрон-фононное взаимодействие. 3) Решающим

доказательством в пользу биполярного механизма служат недавние эксперименты [Zhou 2019], доказывающие существование пар выше T_c .

4) Важнейшим подтверждением биполярного механизма СП служат эксперименты (Божовича и др. [Vožovič 2016]), в которых продемонстрировано, что число спаренных состояний в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) много меньше общего числа носителей тока.

В главе 1 рассмотрены основные представления о трансляционно-инвариантных (ТИ) поляронах и биполяронах в трехмерных полярных кристаллах. Изложение здесь следует обзору [Лахно 2015]. Как и в теории Бардина–Купера–Шриффера, в основу описания газа ТИ-биполяронов положено электрон-фононное взаимодействие и гамильтониан Фрелиха. Приводится общий вид решения задачи о поляроне (биполяроне) в форме анзаца Тулуба. В отличие от теории БКШ, соответствующей слабой связи, в которой корреляционная длина намного превышает среднее расстояние между парами, рассматривается противоположный случай сильной связи, когда корреляционная длина много меньше расстояния между парами. Дается обобщение теории на случай экситонов.

В главе 2 рассмотрен одномерный случай холстейновского полярона и биполярона, актуальный в современных теориях ВТСП, основанных на модели Хаббарда и ее модификациях.

В главе 3 дано общее решение спектральной задачи для полярона и биполярона. Полученное решение используется для описания термодинамических свойств трехмерного бозе-конденсата ТИ-биполяронов. Обсуждаются критическая температура перехода, энергия, теплоемкость и теплота перехода газа ТИ-биполяронов. Рассмотрено влияние на термодинамические характеристики газа ТИ-биполяронов внешнего магнитного поля. На основе полученных результатов в этой главе построена теория псевдощелевой фазы.

В главе 4 дается сравнение с экспериментом таких характеристик, как максимальная величина напряженности магнитного поля, при которой возможно существование конденсата ТИ-биполяронов, лондоновской длины проникновения и ее температурной зависимости. Построена теория изотопического эффекта для температуры сверхпроводящего перехода и лондоновской длины. Полученные результаты используются для объяснения экспериментов по высокотемпературным сверхпроводникам. Особое внимание в этой главе уделено тому факту, что, согласно ТИ-биполярной теории ВТСП, разные типы экспериментов в качестве СП щели измеряют различные величины. Показано, что с помощью туннельных экспериментов определяется энергия биполяронов, в то время как в методе фотоэмиссионной спектроскопии углового разрешения ARPES измеряется фононная частота, для которой ЭФВ является максимальным. Согласно ТИ-биполярной теории СП естественное объяснение получают такие явления, как наличие кинков в спектральных измерениях щели, угловая зависимость щели, отсутствие изотопического эффекта для оптимально допированных сверхпроводников, наличие псевдощели и др.

В главе 5 ТИ-биполярная теория применяется к описанию движущегося бозе-конденсата. Рассмотрен эффект Литтла – Паркса.

В главе 6 устанавливается связь между теориями сверхпроводимости, основанными на представлении о волнах зарядовой плотности (ВЗП), и трансляционно-инвариантной (ТИ) биполярной теорией. Показано, что ВЗП формируются в псевдощелевой фазе из биполярных состояний за счет коновской аномалии, образуя волну плотности пар (ВПП), при волновых векторах, соответствующих нестингу. Образуясь в псевдощелевой фазе, ВЗП при температуре ниже температуры сверхпроводящего перехода сосуществуют со сверхпроводимостью, а их амплитуда уменьшается при образовании бозе-конденсата из ТИ-биполяронов, обращаясь в ноль при

температуре, равной нулю. Рассматриваются вопросы пиннинга ВЗП и теория странных металлов.

2. Полярон и фундаментальные проблемы нерелятивистской квантовой теории поля

В основе теории полярона лежит гамильтониан Фрёлиха, описывающий взаимодействие электрона с фононным полем:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_k \hbar\omega(k)a_k^+a_k + \sum_k V_k [a_k e^{ikr} + a_k^+ e^{-ikr}], \quad (\text{B.1})$$

где \mathbf{r} – радиус-вектор электрона, а \hat{p} – его импульс; m – эффективная масса электрона; a_k^+ , a_k – операторы рождения и уничтожения квантов поля с энергией $\hbar\omega(k)$, V_k – матричный элемент взаимодействия электрона с фононным полем.

В физике конденсированных сред теория полярона представляет собой обширную область, которая включает в себя описание электронных свойств ионных кристаллов [Пекар 1951], [Fröhlich 1950], [Kuper 1963], [Devreese 2009], [Lakhno 1994], полярных полупроводников [Devreese 1972, 1984], проводящих полимеров [Heeger 1988], [Ribeiro 2013], [Junior 2015], биополимеров [Schuster 2004], [Starikov 2006], высокотемпературных сверхпроводников [Emin 2013], [Alexandrov 1996], [Iadonisi 2006], магнитных полупроводников [Нагаев 1979] и других важных объектов конденсированной материи.

Причина такого широкого использования модели полярона в самых разных областях связана с ее универсальностью. С фундаментальной точки зрения, в основе описания всех явлений в физике лежит ее квантовополевая формулировка. В нерелятивистской физике ее простейшая реализация основана на использовании гамильтониана Фрёлиха (B.1).

Различные выражения для V_k и $\omega(k)$ в случае ионных кристаллов, пьезоэлектриков, сверхпроводников, ядерной материи, плазмы вырожденных полупроводников, приведены в [Ляхно 1995]. Так, гамильтониан (В.1) описывает движение электрона в ионном кристалле, если:

$$V_k = \frac{e}{|k|} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V\tilde{\varepsilon}}}, \quad \omega_k = \omega_0, \quad (\text{В.2})$$

где e – заряд электрона, $\tilde{\varepsilon}$ – эффективная диэлектрическая постоянная.

В пьезоэлектрическом полупроводнике

$$V_k = \frac{1}{k^{1/2}} \left(\frac{4\pi}{V} \frac{\hbar/\mu s}{\hbar^2 \varepsilon/\mu e^2} \frac{\langle e_{ijk}^2 \rangle}{2\varepsilon c} \right), \quad \omega_k = sk, \quad (\text{В.3})$$

где s – скорость звука, c – упругая константа, $\langle e_{ijk}^2 \rangle$ – усреднённый квадрат пьезоэлектрического тензора.

В неполярной среде:

$$V_k = Gk \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V\omega_k}}, \quad \omega_k = sk, \quad (\text{В.4})$$

где ρ – плотность среды, G – некоторая постоянная. Аналогичный (В.4) гамильтониан используется в теории сверхпроводимости.

В случае ядерной материи:

$$V_k = \frac{g}{\sqrt{2\omega_k V}}, \quad \omega_k = \sqrt{\frac{\mu_0^2 c^4}{\hbar^2} + c^2 k^2}, \quad (\text{В.5})$$

где g – константа связи нуклона с мезонным полем, μ_0 – масса мезона, c – скорость света.

В случае взаимодействия с плазмой вырожденного полупроводника:

$$V_k = \sqrt{\frac{2\pi\omega_p \varepsilon(k)}{V\varepsilon_0(\varepsilon(k)-1)}} \frac{e}{|k|}, \quad \omega_k = \omega_p \sqrt{\frac{\varepsilon(k)}{\varepsilon(k)-1}}, \quad (\text{В.6})$$

где ω_p – плазменная частота, $\varepsilon(k)$ – диэлектрическая проницаемость плазмы.

В последнее время гамильтониан (В.1) стал использоваться при описании примесных атомов, помещенных в конденсат Бозе-Эйнштейна

из ультрахолодных атомов [Grusdt 2017], электронов в низкоразмерных системах [Iadonisi 2006], [Chatterjee 2018] и т.д.

Для примеси в бозе-конденсате, согласно [Cucchietti 2006], [Sacha 2006], [Tempere 2009]:

$$V_k = \frac{a_{IB}\sqrt{n_0}}{\sqrt{2\pi M}} \left[\frac{(\xi k)^2}{2 + (\xi k)^2} \right]^{1/4}, \quad \omega_k = ck \left[1 + \frac{(\xi k)^2}{2} \right]^{1/2}, \quad (\text{B.7})$$

c и ξ – скорость звука в конденсате и характерная длина затухания возмущений в конденсате соответственно, a_{IB} – длина рассеяния бозона на примеси, n_0 – плотность бозе-конденсата, $M^{-1} = m_B^{-1} + m_I^{-1}$, m_B – масса атома решётки, m_I – масса примесного атома

Относительно простой вид гамильтониана (B.1) побуждал исследователей найти точное решение задачи о поляроне. В стационарном случае точное решение давало бы спектр гамильтониана (B.1) и, как следствие, решение широкого круга задач в физике конденсированного состояния. Задача, однако, оказалась гораздо сложнее, чем казалась. На ней были опробованы различные методы и техники квантовой теории поля, включая метод функций Грина, диаграммную технику, метод интегралов по траекториям, метод ренормгруппы, квантовый метод Монте-Карло, диаграммный метод Монте-Карло и другие. Различные вариационные подходы, из которых наиболее эффективным оказался метод интегралов по траекториям Фейнмана, позволили определить примерную зависимость энергии основного состояния полярона во всем диапазоне изменения константы электрон-фононного взаимодействия α .

Перечисленные подходы, однако, оказались не в состоянии определить спектр гамильтониана (B.1) даже в пределе слабой связи [Tkach 2015].

В пределе сильной связи для исследования свойств гамильтониана (B.1), начиная с основополагающих работ Пекара [Пекар 1951], было использовано каноническое преобразование:

$$a_k \rightarrow a_k - V_k \rho_k^* / \hbar \omega(k), \quad (\text{B.8})$$

где ρ_k^* – фурье-компонента плотности зарядового распределения. Преобразование (B.8) выделяет из квантового поля классическую составляющую (второе слагаемое в правой части (B.8)), которая, по предположению, должна давать основной вклад в пределе сильной связи. Начиная с работы Либа [Lieb 1958] (см. также [Lieb 1997] и цитированные в ней работы) доказательству того, что функционал полной энергии Пекара для основного состояния полярона, к которому приводит (B.8), является асимптотически точным в пределе сильной связи, было посвящено много работ. Другими словами, утверждалось, что выбор вариационной волновой функции основного состояния в виде:

$$|\Psi\rangle = \varphi(r) \exp \sum_k V_k \frac{\rho_k^*}{\hbar \omega(k)} (a_k - a_k^+) |0\rangle, \quad (\text{B.9})$$

где $\varphi(r)$ – волновая функция электрона, который приводит для полной энергии основного состояния полярона $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ к пекаровскому функционалу сильной связи:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla \Psi|^2 d^3r - \sum_k \frac{V_k^2}{\hbar \omega(k)} \rho_k^* \rho_k, \quad (\text{B.10})$$

дает точное решение в пределе сильной связи.

В этом случае речь о спектре возбужденных состояний полярона шла только для случая покоящегося полярона $P = 0$, где P – импульс полярона. Вариация (B.10) по Ψ^* приводит к нелинейному уравнению Шредингера для волновой функции Ψ , имеющему вид уравнения Хартри. Численное интегрирование этого уравнения было осуществлено в [Балабаев 1980] и несколько возбужденных поляронных состояний и соответствующих этим состояниям перенормированных фононных мод было найдено (см., например обзор [Лахно 1995]).

Таким образом, подавляющее большинство работ по теории полярона в пределе сильной связи представляет собой реализацию метода квантования в окрестности классического решения, в настоящее время

широко используемого в непертурбативной квантовой теории поля [Раджараман 1985].

С фундаментальной точки зрения такой подход представлялся неудовлетворительным уже на самых ранних этапах развития теории поля. Действительно, если в пределе сильной связи поле поляризации можно считать классическим и отличным от нуля, то становится непонятным, как такое макроскопическое состояние может удерживаться одним электроном. Это возможно только в одном случае, если поле равно нулю почти всюду, за исключением небольшой области, в которой локализуется электрон, образуя с полем самосогласованное состояние. При этом исходная трансляционная симметрия системы оказывается нарушенной: поляризационная потенциальная яма спонтанным образом может образоваться с равной вероятностью в любой области пространства. Все попытки построить трансляционно-инвариантную теорию на основе такой физической картины приводили к тем же результатам, что и исходная полуклассическая теория сильной связи, разработанная Пекаром [Пекар 1951].

Ситуация радикально поменялась после публикации работ [Лахно 2010, 2013], [Lakhno 2012], [Каширина 2012], в которых был рассмотрен принципиально иной тип движения электрона в полярном кристалле. Согласно [Лахно 2010, 2013], [Lakhno 2012], [Каширина 2012], при движении по кристаллу электрон не только смещает равновесные состояния атомов, но и изменяет профиль их потенциальной энергии в кристалле, что эквивалентно образованию их сжатых колебательных состояний [Nakioglu 1995], [Шумовский 1991], [Braunstein 2005]. Для ТИ-полярона средние (т.е. классические) смещения атомов из равновесных положений, в отличие от полярона Пекара, равны нулю. Соответственно, равна нулю поляризация кристалла, так как ТИ-полярон делокализован в пространстве. Однако средние числа заполнения фононов в поляронном состоянии не равны нулю. Этот

парадокс разрешается тем, что неравное нулю среднее число фононов обусловлено наличием возбужденных электроном сжатых (т.е. неклассических) состояний.

Сжатие фононных состояний, индуцируемых движением электрона по кристаллу, приводит к новому типу связанного состояния электрон-фононной системы, которое описывается единой волновой функцией, представляющей новый тип анзаца, которую невозможно представить в виде факторизованного анзаца, образованного по отдельности электронной и фононной частями [Лахно 2015].

Применение теории сжатых состояний в теории полярона было впервые осуществлено в теории Тулуба [Тулуб 1961]. В силу неоптимального выбора вариационной волновой функции в работе [Тулуб 1961] для энергии основного состояния получились результаты, фактически воспроизводящие полученные Пекаром. Это намного задержало их использование в теории полярона. По этой причине интенсивное развитие теории сжатых состояний началось гораздо позже – после работы Глаубера [Glauber 1963], обратившего внимание на их важную роль для понимания принципа неопределенности и принципа суперпозиции в квантовой механике.

В настоящее время сжатые состояния имеют широкую область применения: в оптике они используются для подавления собственных шумов света, в вычислительной технике – для создания оптических компьютеров и линий связи, в прецезионных измерениях они используются в интерференционных антеннах гравитационных волн и т.д. (см., например книги и обзоры [Тайш 1991], [Шляйх 2005], [Мисочко 2013]).

В теории полярона метод сжатых состояний после пионерской работы Тулуба [Тулуб 1961] был использован в работах [Hang Zheng 1988 (1), 1988 (2), 1989, 1988 (3), 1988 (4)] для дискретной модели холстейновского полярона [Holstein 1959] и в работах [Porsch 1967],

[Röseler 1968], [Barentzen 1975], [Kandemir В 1994, 2005], [Nagy 1991], [Zhang 2007], [Kervan 2003] для фрелиховского полярона. В работах [Hang Zheng 1988 (1), 1988 (2), 1989, 1988 (3), 1988 (4)] были получены очень важные результаты: во-первых, энергия основного состояния полярона для сжатых состояний оказалась ниже, чем во всех работах по полярону Холстейна, использующих обычный вакуум, и, во-вторых, эффективная масса холстейновского полярона, вычисленная для сжатых состояний, оказалась намного меньше, чем ее величина, полученная Холстейном в [Holsteint 1959].

Этого нельзя сказать о работах [Porsch 1967], [Röseler 1968], [Barentzen 1975], [Kandemir 1994, 2005], [Nagy 1991], [Zhang 2007], [Kervan 2003], в которых теория сжатых состояний применялась к гамильтониану Фрёлиха. Несмотря на то, что в них отмечалось значительное усиление поляронных эффектов при использовании сжатых состояний, в целом эти работы не меняли результатов, полученных Пекаром [Пекар 1951]. Как уже было сказано выше, прорывные результаты были получены в работах [Лахно 2010, 2013], [Lakhno 2012], [Каширина 2012], в которых для гамильтониана Пекара–Фрёлиха было показано, что энергия основного состояния полярона и биполярона на сжатых состояниях оказывается ниже, чем в теории Пекара.

Наиболее важным приложением теории поляронов и биполяронов является сверхпроводимость. По-видимому, построение теории сверхпроводимости является самой трудной проблемой физики конденсированного состояния, поскольку требует решения многочастичной задачи. Такая задача на основе гамильтониана Фрёлиха (В.1) была в пределе слабого взаимодействия решена Бардиным, Купером и Шриффером [Bardeen 1957]. На ее основе удалось объяснить ряд свойств обычных сверхпроводников.

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) показало, что теория БКШ к ним, по-видимому, неприменима, поскольку взаимодействие электронов с фононами в ВТСП материалах нельзя считать слабым. В настоящее время для описания этого случая прибегают к использованию теории Элиашберга [Элиашберг 1960], [Marsiglio 2008], [Carbotte 1990], поскольку последняя была построена для случая сильного электрон-фононного взаимодействия и в пределе слабого взаимодействия, совпадает с теорией БКШ. В отсутствие кулоновского отталкивания теория Элиашберга приводит к выражению для T_c вида [Kresin 2009]:

$$T_c = 0,25\omega_0 / (e^{2/\lambda} - 1)^{1/2}, \quad \lambda = 2 \int \alpha^2(\omega) F(\omega) \omega^{-1} d\omega, \quad (\text{B.11})$$

где $\alpha^2(\omega)$ определяет силу ЭФВ и слабо зависит от ω , $F(\omega)$ имеет смысл плотности фононных состояний. В пределе слабой связи, когда $\lambda \rightarrow 0$, из (B.11) следует, что:

$$T_c = 0,25\omega_0 e^{-1/\lambda}, \quad (\text{B.12})$$

то есть выражение для T_c в БКШ, а в случае сильной связи, когда $\lambda \rightarrow \infty$:

$$T_c = 0,18\lambda^{1/2}\omega_0. \quad (\text{B.13})$$

Важным следствием теории Элиашберга сильной связи является вывод об отсутствии верхнего предела для T_c в случае сильного ЭФВ.

Применение теории Элиашберга к ВТСП, однако, имело ограниченный успех. Это обстоятельство породило большое число теорий, в которых за основу брался не гамильтониан электрон-фононного взаимодействия (B.1), а другие типы взаимодействий, отличные от ЭФВ. Эти работы в конечном счете столкнулись с теми же проблемами, что и теория сильного взаимодействия Элиашберга.

В теории Элиашберга малым параметром является отношение ω/E_F , где ω – фононная частота, E_F – энергия Ферми. Если $\omega/E_F \rightarrow 0$, то константа электрон-фононного взаимодействия $\alpha \sim \omega^{-1/2} \rightarrow \infty$. Теория возмущений по этому параметру построена для обычных вакуумных

фононных функций $|0\rangle$, которые берутся в качестве нулевого приближения. Но при $\alpha \rightarrow \infty$ правильным выбором нулевого приближения будет выбор функции $\Lambda_0|0\rangle$,

$$\Lambda_0 = C \left\{ \exp \frac{1}{2} \sum_{k,k'} a_k^+ A_{kk'} a_{k'}^+ \right\}, \quad (\text{B.14})$$

где Λ_0 – оператор сжатого состояния [Тулуб 1961, 1960, 2015], [Лажно 2015]. Таким образом, теория Элиашберга, построенная для обычного вакуума, будет давать совсем другие результаты, чем теория, построенная для сжатого вакуума. Разумеется, в пределе слабой связи, когда $\alpha \rightarrow 0$, результаты двух теорий будут совпадать. Однако с увеличением α будет развиваться нестабильность бозонного вакуума, определяемого вакуумной функцией $|0\rangle$ и, при определенном критическом значении α_c , образуется новый бозонный вакуум, определяемый функцией $\Lambda_0|0\rangle$, который является более низкоэнергетическим состоянием. По-видимому, впервые на возможность нарушения теоремы Мигдала обратил внимание Александров [Александров 1992], который применительно к теории сверхпроводимости на основе теории поляронов малого радиуса указал, что выбранный на основе теоремы Мигдала вакуум «ничего не знает» о другом вакууме, который представляет собой поляронное сужение зоны проводимости и образование ПМР в новом вакууме сжатых состояний [Zheng 1988 (1), 1988 (2), 1989, 1988 (3), 1988 (4)]. По этой причине теория Элиашберга может быть мало пригодной для объяснения ВТСП.

Идейная основа сверхтекучести была заложена в работах Лондона и Тиссы [London 1938], [Tisza 1938], впервые связавших фундаментальное явление конденсации Бозе-Эйнштейна со сверхтекучестью. Идея же сверхпроводимости, трактуемой как сверхтекучесть электронной жидкости, была высказана Ландау в работе [Ландау 1941]. В этой работе был впервые введен спектр элементарных возбуждений сверхтекучей жидкости, который был назван ротонным и который позволил построить

статистическую механику сверхтекучего состояния. Для Ландау перенос идей своей работы по сверхтекучести на сверхпроводимость был запрещен различием статистик: Ферми статистики для электронов в металлах и Бозе статистики для атомов гелия в жидком гелии. П. Ускорить построение теории сверхпроводимости на основе бозе-конденсата могла бы работа Боголюбова по сверхтекучести [Боголюбов 1947], которая связала явление бозе-конденсата со сверхтекучестью, однако в то время не существовало примера бозе-газа, состоящего из заряженных бозонов, необходимого для сверхпроводимости.

Хорошо известен дальнейший ход событий: в 1950 г. Гинзбургом и Ландау была построена феноменологическая теория сверхпроводимости [Гинзбург 1950], в которой микроскопический механизм сверхпроводимости не обсуждался, поскольку возможная его природа была неизвестна.

Наконец, в работе Бардина, Купера, Шриффера [Bardeen 1957] микроскопический механизм сверхпроводимости был найден – это механизм куперовского спаривания электронов. Куперовские пары, являясь бозонами, казалось бы, могли выполнить роль частиц, из которых состоит бозе-газ, и тем самым объединить теории сверхтекучести и сверхпроводимости. Этого, однако, не случилось. Ответ был дан в самой теории БКШ – размер куперовских пар в металлах оказался так огромен, что в каждой паре содержался миллион других пар. На этом основании аналогия между конденсатом Бозе-Эйнштейна и сверхпроводимостью была в работе [Bardeen 1957] отвергнута. Интерес к ней возродился только в 1986 г. после открытия Мюллером и Беднорцем высокотемпературной сверхпроводимости.

Справедливости ради важно подчеркнуть, что возможность образования такого сингулярного квантового состояния, как бозе-конденсат, была предсказана Эйнштейном на основе его обобщения статистики Бозе на случай конечной массы бозе-частицы. Вплоть до

работы БКШ в физике конденсированного состояния не было примера заряженного бозона с конечной массой. Первым примером возможного существования таких квазичастиц была куперовская пара, что и дало возможность БКШ построить теорию сверхпроводимости. Куперовская пара, как было отмечено выше, в силу ее перекрытия с другими не могла быть настоящей квазичастицей. По этой же причине как в теории БКШ, так и в теории Боголюбова [Боголюбов 1958] фигурирует только одноэлектронный спектр возбуждений фермиевского типа. Таким образом, в рамках теории БКШ, как это и было указано ее авторами, теорию бозе-конденсата построить нельзя.

В 70–80-х годах прошлого века в качестве квазичастицы, имеющей свойства заряженного бозона, обладающей массой и способной образовывать бозе-конденсат в узкозонных кристаллах, был рассмотрен биполярон малого радиуса (БПМР) [Anderson 1975].

Работы по сверхпроводимости, основанные на идее бозе-конденсации БПМР, в течение длительного времени развивались Александровым и группой его коллег [Александров 1992], [Alexandrov 1996, 1981], [Firsov 1999].

Ввиду большой массы ПМР и БПМР температура СП перехода, определяемая температурой образования БЭК, должна быть низкой. На это обстоятельство было обращено внимание в статьях [Chakraverty 1988], [Mello 1997, 1999], критикующих теорию СП, основанную на ПМР.

После открытия высокотемпературной сверхпроводимости развивались и другие подходы, из которых наибольшую популярность получила теория резонирующих валентных связей (RVB) Андерсона и t - j модель [Anderson 1997], [Изюмов 1997].

Несмотря на большую привлекательность этих моделей с точки зрения теории, например возможности на основе одного простого гамильтониана описать как проводящие, так и магнитные свойства

кристаллов, для объяснения ВТСП они оказались малоэффективны, в частности, сам факт возможности существования СП фазы в этих моделях не получил надежного доказательства.

Ввиду того, что новейшие эксперименты [Zhou 2019], [Vožovič 2016] свидетельствуют о фононной природе механизма сверхпроводимости в ВТСП с рекордными T_c , дальнейшее изложение основано на ЭФВ. Будучи общими, рассматриваемые теоретические подходы могут быть применимы и для других типов взаимодействия, отличных от ЭФВ.

Глава 1. Анзац Пекара и проблема сильной связи в теории полярона

Подробно излагается трансляционно-инвариантная теория полярона, построенная без использования анзаца Пекара. Показано, что волновая функция полярона (биполярона) представляет собой произведение унитарных операторов Гейзенберга, оператора сдвига и оператора сжатия, действующих на вакуумную волновую функцию. Фундаментальным результатом теории является более низкое значение энергии полярона, чем полученное на основе анзаца Пекара, считавшегося в пределе сильной связи асимптотически точным решением. В случае биполяронов теория даёт наилучшие значения энергии связи и критических параметров их стабильности. Обсуждаются многочисленные физические следствия, вытекающие из факта существования трансляционно-инвариантных поляронов и биполяронов. Дано обобщение теории на случай экситонов.

1. Введение. Анзац Пекара

Как известно, теория полярона была одной из первых теорий, описывающих взаимодействие частицы с квантовым полем. Различные аспекты теории поляронов отражены в многочисленных обзорах и книгах [Пекар 1951], [Kuper 1963], [Devreese 1972, 1984, 2009], [Фирсов 1975], [Lakhno 1994], [Каширина 2010, 2013], [Emin 2013]. Будучи нерелятивистской, эта теория не содержит расходимостей и в течение более чем шестидесяти лет была полигоном для апробации различных методов квантовой теории поля. Хотя точного решения задачи о поляроне вплоть до настоящего времени найдено не было, считалось, что свойства основного состояния полярона известны во всех деталях. Это в первую очередь относится к предельным случаям слабой и сильной связи. Решение в пределе слабой связи было дано Фрëлихом [Fröhlich 1950], а решение в пределе сильной связи было дано Пекаром [Пекар 1951, 1946]. В настоящее время энергия основного состояния

полярона в пределе слабой связи найдена с высокой точностью и равна [Смондырев 1986], [Selyugin 1989]:

$$E_0 = -(\alpha + 0.0159196220\alpha^2 + 0.000806070048\alpha^3 + \dots)\hbar\omega_0, \quad (1.1)$$

где $\hbar\omega_0$ – энергия оптического фонона, α – константа электрон-фононной связи.

Решение задачи в противоположном пределе сильной связи было дано Пекаром в предположении, что волновая функция Ψ системы электрон + поле имеет вид:

$$\Psi(r, q_1, \dots, q_i, \dots) = \psi(r)\Phi(q_1, \dots, q_i, \dots), \quad (1.2)$$

где $\psi(r)$ волновая функция электрона, зависящая только от координат электрона, Φ – волновая функция поля, зависящая только от полевых координат. Сам Пекар в своей фундаментальной монографии [Пекар 1951] считал анзац (1.2) приближенным решением. В пионерских работах Боголюбова и Тябликова [Боголюбов 1950], [Тябликов 1951] было показано, что в последовательной трансляционно-инвариантной теории использование анзаца (1.2) (для введенных в [Боголюбов 1950], [Тябликов 1951] расщепленных координат) дает для энергии основного состояния полярона те же результаты, что и полуклассическая теория Пекара [Пекар 1951, 1946]. Поскольку проблема трансляционной инвариантности полярона была впервые чётко обозначена в этих работах, остановимся подробнее на сделанных в них предположениях.

С этой целью перейдём в гамильтониане Фрëлиха (В.1) от операторов рождения и уничтожения a_k^+ , a_k к комплексным координатам поля q_k с помощью соотношений:

$$\begin{aligned} q_k &= (a_k + a_{-k}^+)/\sqrt{2}, \\ -\frac{\partial}{\partial q_k} &= (a_k^+ - a_{-k})/\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

В результате гамильтониан (В.1) примет вид гамильтониана Пекара:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_k A_k q_k e^{ikz} + \frac{1}{2} \sum_k \hbar \omega(k) \left(q_k q_{-k} - \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{\partial}{\partial q_{-k}} \right), \quad (1.4)$$

$$A_k = \sqrt{2} C_k.$$

Из (1.4) видно, что координаты q_k и канонически сопряжённые им импульсы $-i\partial/\partial q_k$ входят в энергию поля одинаковым образом. Чтобы сделать их вклад в энергию неодинаковым, в работах [Боголюбов 1950], [Тябликов 1951] используется преобразование:

$$\tilde{q}_k = \varepsilon q_k, \quad \omega(k) = \varepsilon^2 v(k). \quad (1.5)$$

В результате этого гамильтониан (1.4) приобретает вид:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_k \tilde{A}_k \tilde{q}_k + \frac{1}{2} \sum_k v(k) \tilde{q}_k \tilde{q}_{-k} - \frac{\varepsilon^4}{2} \sum_k v(k) \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_k} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_{-k}},$$

$$\tilde{A}_k = \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c v(k)}{V}} = \frac{1}{\varepsilon} A_k,$$

в котором малый параметр ε входит только в последний член гамильтониана, вкладом которого в нулевом приближении можно пренебречь.

Легко, однако, видеть, что посредством преобразования $q_k = \varepsilon \tilde{q}_k$, $\omega = \varepsilon^2 v$ мы получим, что малой является потенциальная энергия поля, которая теперь $\sim \varepsilon^4$, и в качестве нулевого приближения надо рассматривать кинетическую энергию.

В действительности причина выбора в работах Боголюбова и Тябликова [Боголюбов 1950], [Тябликов 1951] потенциальной энергии в качестве нулевого приближения связана с дополнительными предположениями. Чтобы воспроизвести предел Пекара сильной связи, в [Боголюбов 1950], [Тябликов 1951] делается предположение о существовании классической составляющей квантового поля. Наличие такой составляющей никак не сказывается на кинетической энергии поля, в то время как её вклад в потенциальную энергию поля становится доминирующим. Фактически введение классической составляющей эквивалентно выбору решения в форме анзаца Пекара (1.2). При отказе от предположения о наличии классической составляющей поля в теории

[Боголюбов 1950], [Тябликов 1951] перестаёт существовать и малый параметр. С этим, в частности, связаны все неудачные попытки построить теорию возмущений по ε в пределе сильной связи, не прибегая к концепции классического поля.

Энергия основного состояния с использованием (1.2) в настоящее время найдена с высокой точностью и равна [Miyake 1975, 1976]:

$$E = (-0.108513\alpha^2 - 2.836)\hbar\omega_0. \quad (1.6)$$

Представление об анзаце Пекара (1.2) как о точном решении задачи о поляроне сильной связи полностью утвердилось после публикации работы [Adamowski 1980], в которой методом интегралов по траекториям, т.е. без использования анзаца (1.2), была строго доказана асимптотика (1.3) (см. также обзор [Gerlach 1991]).

До появления работы [Adamowski 1980] было предпринято много попыток улучшить теорию сильной связи [Höhler 1955], [Allcock 1956], [Gross 1955], [Буймистров 1957], [Toyozawa 1961], [Gross 1976]. Причиной чувства неудовлетворенности анзацем Пекара служила трансляционная инвариантность исходного поляронного гамильтониана. При использовании анзаца для волновой функции $\psi(r)$ в (1.2) получается локализованное решение – электрон локализуется в созданной им самим локализованной поляризационной потенциальной яме. Другими словами, полученное решение не обладает симметрией исходного гамильтониана. Самозахват электрона в локализованной поляронной яме приводит к спонтанному нарушению симметрии системы. Путь, по которому шли для восстановления исходной симметрии, был основан на использовании вырождения состояния с нарушенной симметрией. Поскольку в однородной и изотропной среде от положения центра поляронной ямы r_0 ничего не должно зависеть, то исходно локализованное решение можно "размазать" по всем положениям

потенциальной ямы полярона, выбрав волновую функцию в виде линейной комбинации по всем положениям ямы.

В наиболее последовательной форме эта программа была проведена в работе [Буймистров 1957]. С этой целью в качестве волновой функции, являющейся собственной функцией полного импульса, бралась суперпозиция, составленная из плоских волн, соответствующих полному импульсу, умноженных на волновые функции, полученные из (1.2) посредством действия на них оператора трансляций. Другими словами, бралась соответствующая суперпозиция по всем положениям поляронной ямы r_0 .

Главным результатом работы [Буймистров 1957] является то, что вычисление энергии основного состояния полярона с такой делокализованной волновой функцией привело к тому же значению, что и с локализованной функцией (1.2). В работе [Буймистров 1957] также было воспроизведено значение массы полярона, ранее полученное в работе Ландау и Пекара [Ландау 1948], на основе представления о движении в среде локализованного состояния (1.2). Полученные в [Буймистров 1957] результаты представляли важный шаг в разрешении противоречия между требованием делокализованности трансляционно-инвариантной волновой функции и локализованности волновой функции samozахваченного состояния.

Несмотря на достигнутый в таком подходе успех, его нельзя считать полностью удовлетворительным, т.к. он сохраняет целый ряд противоречий, которые вытекают из самой природы использованного в нем полуклассического описания. Действительно, построенная в [Буймистров 1957] суперпозиция, с одной стороны, определяет делокализованное состояние полярона, а с другой, не изменяя это состояние, можно провести измерение его положения и обнаружить локализованную поляронную яму с локализованным в ней электроном. Причиной такого парадокса является классичность поляронной ямы в

пределе сильной связи и, как следствие, коммутации оператора полного импульса с положением поляронной ямы¹ r_0 . Для устранения этого дефекта были предложены подходы, в которых величина r_0 , никоим образом не являющаяся дополнительной степенью свободы, рассматривалась как таковая с наложением на функцию $r_0(r, q_1, \dots, q_i, \dots)$ дополнительных связей. Обсуждение этих проблем, связанных с решением задачи введения коллективных координат, содержится в обзоре [Лакно 1998].

Ввиду дискуссионности результатов, получаемых посредством введения в теорию полярона различными способами коллективных координат, представляется целесообразным изложить строгие результаты трансляционно-инвариантной теории, не прибегая к представлению о коллективных координатах. Цель данной главы – изложить подход, применимый в пределе сильной связи, не использующий анзаца Пекара.

Решение, обладающее такими свойствами в случае полярона сильной связи, было впервые найдено в работах Тулуба [Тулуб 1960, 1961]. В течение почти полувека результат, полученный в работах [Тулуб 1960, 1961], не был осознан работающими в теории поляронов специалистами. Причина, по которой важность полученного в [Тулуб 1960, 1961] результата не была оценена, состояла в том, что для оценки основного состояния в [Тулуб 1961] был сделан неоптимальный выбор пробной волновой функции. В результате для энергии основного состояния в

¹ Природа возникающих здесь трудностей ясно осознавалась на заре становления квантовой механики её основателями. Так, например, Бете отмечает в [Бете 1965], что для правильного квантово-механического описания взаимодействия поля с частицами требуется квантование этого поля, т.е. квантовая теория поля: «дело в том, что при квантовании механических параметров (координат и импульсов) нужно также квантовать и связанные с ними поля. В противном случае, как показали Бор и Розенфельд [Бор 1971], можно предположить такой мысленный эксперимент, который состоит в одновременном измерении координаты и импульса частицы по наблюдению создаваемого ею поля и который тем самым нарушает принцип неопределённости Гейзенберга».

[Тулуб 1961] было получено: $E_0 = -0.105\alpha^2\hbar\omega_0$, т.е. более высокое значение, чем (1.6). Оптимальный выбор волновой функции был сделан – в работе [Каширина 2012]. Это привело к более низкому, чем (1.6), значению энергии основного состояния полярона, равному: $E_0 = -0.125720\alpha^2\hbar\omega_0$. Таким образом, фактически речь идет о неприменимости в случае полярона адиабатического приближения, которое лежит в основе физики твердого тела.

В данной главе мы изложим основные черты трансляционно-инвариантной теории полярона (ТИ-полярона) и её обобщение на случай биполярона и экситона.

2. Бескоординатный гамильтониан. Слабая связь

Будем исходить из гамильтониана Пекара-Фрёлиха:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \sum_k V_k (a_k e^{ikr} + a_k^+ e^{-ikr}) + \sum_k \hbar\omega_k^0 a_k^+ a_k, \quad (2.1)$$

где a_k^+ , a_k – операторы рождения и уничтожения квантов поля с энергией $\hbar\omega_k^0 = \hbar\omega_0$, m – эффективная масса электрона, V_k – функция волнового вектора k .

Координаты электрона могут быть исключены из (2.1) посредством преобразования Гейзенберга [Heisenberg 1930]:

$$S_1 = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{P} - \sum_k \hbar k a_k^+ a_k\right)\mathbf{r}\right\}, \quad (2.2)$$

где \mathbf{P} – полный импульс системы. В результате действия S_1 на операторы поля, получим:

$$S_1^{-1} a_k S_1 = a_k e^{-ikr}, \quad S_1^{-1} a_k^+ S_1 = a_k^+ e^{ikr}.$$

Соответственно, преобразованный гамильтониан $\tilde{H} = S_1^{-1} H S_1$ примет вид:

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{P} - \sum_k \hbar k a_k^+ a_k\right)^2 + \sum_k V_k (a_k + a_k^+) + \sum_k \hbar\omega_k^0 a_k^+ a_k. \quad (2.3)$$

Так как гамильтониан (2.3), не содержит координат электрона, то очевидно, что решение задачи о поляроне, полученное на основе (2.3) является трансляционно-инвариантным. Ли, Лоу и Пайнс [Lee 1953] применили для исследования основного состояния (2.3) пробную волновую функцию $|\Psi\rangle_{LLP}$:

$$|\Psi\rangle_{LLP} = S_2|0\rangle, \quad (2.4)$$

где:

$$S_2 = \exp\left\{\sum_k f_k (a_k^+ - a_k)\right\}, \quad (2.5)$$

f_k – вариационные параметры, имеющие смысл величины смещения осцилляторов поля из своих равновесных положений, $|0\rangle$ – вакуумная волновая функция. Величина f_k в S_2 (2.5) определяется при минимизации энергии $E = \langle 0|S_2^{-1}\tilde{H}S_2|0\rangle$, что при $P=0$ дает:

$$E = 2\sum_k f_k V_k + \frac{\hbar^2}{2m}\left[\sum_k \mathbf{k}f_k^2\right]^2 + \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f_k^2 + \sum_k \hbar\omega_k^0 f_k^2, \quad (2.6)$$

$$f_k = -\frac{V_k}{\hbar\omega_k^0 + \hbar^2 k^2 / 2m}. \quad (2.7)$$

В случае ионного кристалла:

$$V_k = \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0}{\tilde{\epsilon}V}} = \frac{\hbar\omega_0}{ku^{1/2}} \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2}, u = \left(\frac{2m\omega_0}{\hbar}\right)^{1/2}, \alpha = \frac{1}{2} \frac{e^2 u}{\hbar\omega_0 \tilde{\epsilon}}, \tilde{\epsilon}^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1}, \quad (2.8)$$

где e – заряд электрона, ϵ_∞ и ϵ_0 – высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости, α – константа электрон-фононной связи. Подстановка (2.8) в (2.6), (2.7) дает для энергии основного состояния величину $E = -\alpha\hbar\omega_0$, т.е. энергию полярона слабой связи в первом порядке по α .

Решение проблемы перехода к случаю сильной связи в бескоординатном гамильтониане (2.3) было найдено на основе общей трансляционно-инвариантной теории, построенной в работе Тулуба [Тулуб 1961]. Основные черты этой теории будут изложены в следующем разделе.

3. Бескоординатный гамильтониан. Общий случай

Для построения общей трансляционно-инвариантной теории в [Тулуб 1960, 1961] было использовано каноническое преобразование гамильтониана (2.3) с использованием оператора S_2 (2.5), которое приводит к сдвигу операторов поля:

$$S_2^{-1}a_k S_2 = a_k + f_k, \quad S_2^{-1}a_k^+ S_2 = a_k^+ + f_k. \quad (3.1)$$

Полученный в результате преобразования гамильтониан $\tilde{H} = S_2^{-1}\tilde{H}S_2$ имеет вид:

$$\tilde{H} = H_0 + H_1, \quad (3.2)$$

где:

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + 2\sum_k V_k f_k + \sum_k \left(\hbar\omega_k^0 - \frac{\hbar\mathbf{k}\mathbf{P}}{m} \right) f_k^2 + \frac{1}{2m} \left(\sum_k \mathbf{k}f_k^2 \right)^2 + H_{KB}, \quad (3.3)$$

$$H_{KB} = \sum_k \hbar\omega_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2m} \sum_{k,k'} \mathbf{k}\mathbf{k}' f_k f_{k'} (a_k a_{k'} + a_k^+ a_{k'}^+ + a_k^+ a_{k'} + a_k a_k^+), \quad (3.4)$$

$$\hbar\omega_k = \hbar\omega_k^0 - \frac{\hbar\mathbf{k}\mathbf{P}}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} \sum_{k'} \hbar\mathbf{k}' f_{k'}^2. \quad (3.5)$$

Гамильтониан H_1 содержит линейные, тройные и четверные по операторам рождения и уничтожения члены. Соответствующим выбором волновой функции, диагонализующей квадратичную форму (3.4), математическое ожидание H_1 обращается в ноль (Приложение А). В дальнейшем будем полагать $\hbar=1$, $\omega_0=1$, $m=1$. Для приведения H_{KB} к диагональному виду положим:

$$q_k = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} (a_k + a_k^+), \quad p_k = -i\sqrt{\frac{\omega_k}{2}} (a_k - a_k^+), \quad \mathbf{z}_k = \mathbf{k}f_k \sqrt{2\omega_k}. \quad (3.6)$$

С использованием (3.6) выражение (3.4) примет вид:

$$H_{KB} = \frac{1}{2} \sum_k (p_k^+ p_k + \omega_k^2 q_k^+ q_k) + \frac{1}{2} \left(\sum_k \mathbf{z}_k q_k \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_k \omega_k. \quad (3.7)$$

Из (3.7) вытекает следующее уравнение движения для оператора q_k :

$$\ddot{q}_k + \omega_k^2 q_k = -\mathbf{z}_k \sum_{k'} \mathbf{z}_{k'} q_{k'}. \quad (3.8)$$

Будем искать решение системы (3.8) в виде:

$$q_k(t) = \sum_{k'} \Omega_{kk'} \xi_{k'}(t), \quad \xi_k(t) = \xi_k^0 e^{i\nu_k t}. \quad (3.9)$$

Связь матрицы $\Omega_{kk'}$ с функцией Грина рассмотрена в Приложении Б. В результате получим для матрицы $\Omega_{kk'}$ уравнение:

$$(v_{k'}^2 - \omega_k^2)\Omega_{kk'} = \mathbf{z}_k \sum_{k''} \mathbf{z}_{k''} \Omega_{k''k'}. \quad (3.10)$$

Рассмотрим определитель этой системы, который получается при замене в (3.10) собственных значений v_k^2 на величину s , которая может быть отлична от v_k^2 . Определитель такой системы будет равен:

$$\det\left[(s - \omega_k^2)\delta_{kk'} - \mathbf{z}_k \mathbf{z}_{k'}\right] = \prod_k (s - v_k^2). \quad (3.11)$$

С другой стороны, согласно работе Вентцеля² [Wentzel 1942]:

$$\det\left[(s - \omega_k^2)\delta_{kk'} - \mathbf{z}_k \mathbf{z}_{k'}\right] = \prod_k (s - \omega_k^2) \left(1 - \frac{1}{3} \sum_{k'} \frac{\mathbf{z}_{k'}^2}{s - \omega_{k'}^2}\right)^3. \quad (3.12)$$

Удобно ввести величину $\Delta(s)$:

$$\Delta(s) = \prod_k (s - v_k^2) / \prod_k (s - \omega_k^2). \quad (3.13)$$

Из (3.11) и (3.12) следует, что величина $\Delta(s)$ равна:

$$\Delta(s) = \left(1 - \frac{1}{3} \sum_{k'} \frac{\mathbf{z}_{k'}^2}{s - \omega_{k'}^2}\right)^3. \quad (3.14)$$

Из (3.11), (3.12) следует, что перенормированные взаимодействием частоты поля v_k определяются решением уравнения:

$$\Delta(v_k^2) = 0. \quad (3.15)$$

Изменение энергии системы ΔE , обусловленное взаимодействием электрона с полем, равно:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_k (v_k - \omega_k). \quad (3.16)$$

Чтобы выразить величину ΔE через $\Delta(s)$, воспользуемся подходом Вентцеля [Wentzel 1942]. Следуя [Wentzel 1942], запишем тождество:

$$\begin{aligned} \sum_k \{f(v_k^2) - f(\omega_k^2)\} &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C ds f(s) \sum_k \left(\frac{1}{s - v_k^2} - \frac{1}{s - \omega_k^2} \right) = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C ds f(s) \frac{d}{ds} \ln \Delta(s) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C ds f'(s) \ln \Delta(s), \end{aligned} \quad (3.17)$$

где интегрирование проводится по контуру, изображенному на рис. 3.1.

Полагая $f(s) = \sqrt{s}$, получим:

² В работе Вентцеля [Wentzel 1942] z_k – не векторная, а скалярная функция, поэтому там нет «куба» в (3.12). Обобщение для векторного случая дано в [Тулуб 1961].

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_k (v_k - \omega_k) = -\frac{1}{8\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln \Delta(s). \quad (3.18)$$

Переходя в (3.14) от суммирования к интегрированию с помощью соотношения:

$$\sum_k = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k$$

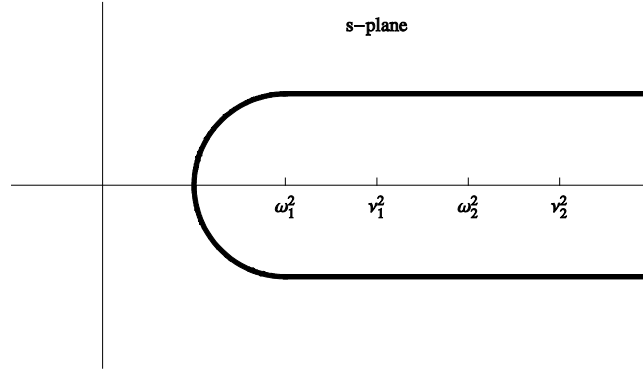


Рис. 3.1. Контур C .

в непрерывном случае, с использованием для \mathbf{z}_k выражения (3.14) для $\Delta(s)$ получим:

$$\Delta(s) = D^3(s), \quad D(s) = 1 - \frac{2}{3(2\pi)^3} \int \frac{k^2 f_k^2 \omega_k^2}{s - \omega_k^2} d^3k. \quad (3.19)$$

В результате для полной энергии электрона получим:

$$E = \Delta E + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k f_k^2 \omega_k^0. \quad (3.20)$$

Представленные здесь результаты являются общими и справедливы для самых различных моделей поляронов (т.е. любых функций V_k и ω_k^0). В разделах 4 и 5 мы рассмотрим предельные случаи слабой и сильной связи, вытекающие из общего выражения (3.20). Отметим, что при $\mathbf{P} \neq 0$, согласно [Тулуб 1960], выражение (3.20) принимает вид

$$E = \frac{P^2}{2m} + \Delta E(\mathbf{P}) + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k f_k^2 \omega_k^0,$$

$$\Delta E(\mathbf{P}) = -\frac{1}{8\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln \prod_{i=1}^3 D^i(s),$$

$$D^i(s) = 1 - \sum_k \frac{(z_k^i)^2}{s - \omega_k^2},$$

где z_k^i — i -я компонента вектора \mathbf{z}_k . При этом функции f_k , ω_k и z_k следует считать зависящим как от $|k|$, так и от \mathbf{kP} .

4. Предел слабой связи в теории Тулуба

Величины f_k в выражении для полной энергии E (3.20) должны находиться из условия минимума: $\delta E / \delta f_k = 0$, которое приводит к следующему интегральному уравнению для определения f_k :

$$f_k = -V_k / (1 + k^2 / 2\mu_k), \quad \mu_k^{-1} = \frac{\omega_k}{2\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \frac{1}{(s - \omega_k^2)D(s)}. \quad (4.1)$$

В случае слабой связи $\alpha \rightarrow 0$ уравнения (4.1) можно решать по теории возмущений. В первом приближении при $\alpha \rightarrow 0$ $D(s) = 1$ и величина μ_k^{-1} равна:

$$\mu_k^{-1} = \frac{\omega_k}{2\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \frac{1}{(s - \omega_k^2)D(s)} = 1. \quad (4.2)$$

Соответственно, для f_k из (4.1) получим:

$$f_k = -V_k / (1 + k^2 / 2). \quad (4.3)$$

Для входящей в полную энергию величины ΔE получим:

$$\Delta E = -\frac{3}{8\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln D(s), \quad \ln D(s) = -\frac{2}{3(2\pi)^3} \int \frac{k_2 f_k^2 \omega_k}{s - \omega_k^2} d^3 k. \quad (4.4)$$

Вычисление входящих в (4.4) интегралов с использованием (4.3) дает: $\Delta E = (\alpha/2)\hbar\omega$. Вычисляя остальные члены, входящие в выражение (3.20), получим первый член разложения полной энергии полярона по константе связи α : $E = -\alpha\hbar\omega$.

В работах [Тулуб 1960], [Porsch 1967], [Röseler 1968] была развита общая схема расчета следующих членов разложения по α . В частности, для собственной энергии и эффективной массы полярона было получено [Röseler 1968]:

$$E = -(\alpha + 0.01592\alpha^2)\hbar\omega, \quad m^* = \left(1 + \frac{\alpha}{6} + 0.02362\alpha^2\right)m. \quad (4.5)$$

Таким образом, с точностью до членов $O(\alpha^3)$ выражение для энергии полярона, вычисленное на основе подхода Тулуба с использованием теории возмущений совпадает с точным расчетом (1.1) (см. раздел 11).

5. Сильная связь

Случай сильной связи является гораздо более сложным. Для выяснения характера решения в области сильной связи рассмотрим прежде всего аналитические свойства функции $D(s)$. Представим с этой целью функцию $D(s)$ в виде:

$$D(s) = D(1) + \frac{s-1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 \omega_k dk}{(\omega_k^2 - 1)(\omega_k^2 - s)}, \quad (5.1)$$

где $D(1)$ – значение $D(s)$ при $s=1$:

$$D(1) = 1 + Q \equiv 1 + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 \omega_k}{\omega_k^2 - 1} dk. \quad (5.2)$$

Из (3.19) также следует, что:

$$D(s) = 1 - \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{\omega_k k^4 f_k^2}{s - \omega_k^2} dk. \quad (5.3)$$

Функция $D(s)$ как функция комплексного переменного s обладает следующими свойствами: **1)** $D(s)$ имеет разрез вдоль вещественной оси от $s=1$ до ∞ и не имеет других особенностей; **2)** $D^*(s) = D(s^*)$; **3)** при $s \rightarrow \infty$ $sD(s)$ возрастает не медленнее s . Перечисленные свойства позволяют представить функцию $[(s-1)D(s)]^{-1}$ в виде (Приложение В):

$$\frac{1}{(s-1)D(s)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C+\rho} \frac{ds'}{(s'-s)(s'-1)D(s')}, \quad (5.4)$$

где контур $C + \rho$ показан на рис. 5.1.

Подынтегральная функция в (5.4) имеет полюс при $s' = 1$ и разрез от $s' = 1$ до $s' = \infty$. Выполняя в (5.4) интегрирование вдоль верхней и нижней стороны разреза, получим следующее интегральное уравнение для $D^{-1}(s)$:

$$\frac{1}{D(s)} = \frac{1}{1+Q} + \frac{s-1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 \omega_k dk}{(s - \omega_k^2)(\omega_k^2 - 1)D(\omega_k^2)^2}. \quad (5.5)$$

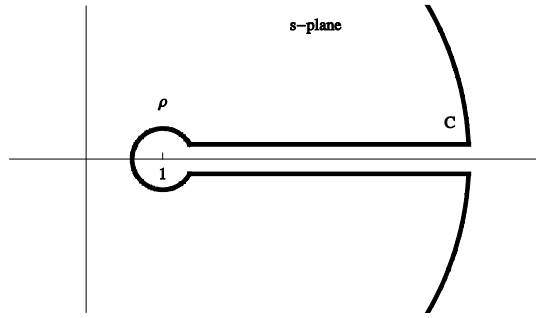


Рис. 5.1. Контур $C + \rho$.

С помощью интегрирования по частям выражение (3.18) для ΔE может быть представлено в виде:

$$\Delta E = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dk k^4 f_k^2 \omega_k \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{\sqrt{s}}{(s - \omega_k^2)^2} \frac{1}{D(s)} ds. \quad (5.6)$$

Из (5.5), (5.6) получаем:

$$\Delta E = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2}{2(1+Q)} dk + \frac{1}{12\pi^4} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2 p^4 f_p^2 \omega_p (\omega_k \omega_p + \omega_k (\omega_k + \omega_p) + 1)}{(\omega_k + \omega_p)^2 (\omega_k^2 - 1) |D(\omega_k^2)|^2} dp dk. \quad (5.7)$$

Уравнение (4.1) для μ_k^{-1} может быть, согласно (5.5), записано в виде:

$$\mu_k^{-1} = \frac{1}{1+Q} + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{p^4 f_p^2 (\omega_k \omega_p + 1) dp}{(\omega_p^2 - 1) (\omega_k + \omega_p) |D(\omega_p^2)|^2}. \quad (5.8)$$

Уравнения (4.1), (5.8) для нахождения f_k и вычисления энергии полярона (3.20), (5.7) очень сложны, и их точное решение вряд ли возможно. Для приближенного расчета энергии E (3.20), (5.7) в работе [Тулуб 1961] был использован прямой вариационный метод. В качестве пробной функции была использована гауссовская функция вида:

$$f_k = -V_k \exp(-k^2/2a^2), \quad (5.9)$$

где a – варьируемый параметр, причем, как в этом можно убедиться, при сильной связи $a \gg 1$. Подстановка (5.9) в (3.19) для действительной и мнимой части $D(s)$ дает (см. Приложение Г):

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} D(\omega_k^2) &= 1 + \lambda v(y), \quad \operatorname{Im} D(\omega_k^2) = k^3 f_k^2 / 6\pi, \\ v(y) &= 1 - ye^{-y^2} \int_0^y e^{t^2} dt - ye^{y^2} \int_y^\infty e^{-t^2} dt, \\ \lambda &= 4\alpha a / 2\sqrt{2\pi}, \quad y = k/a. \end{aligned} \quad (5.10)$$

В пределе сильной связи ($\alpha \gg 1$) выражение для энергии E , определяемое (3.20), с использованием (5.7) примет вид:

$$E = \frac{3}{16} a^2 \left[1 + q\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \right] - \frac{\alpha a}{\sqrt{\pi}} \left(2 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \quad (5.11)$$

$$q\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{e^{-y^2} (1 - \Omega(y)) dy}{(1/\lambda + v(y))^2 + \pi y^2 e^{-2y^2}/4}, \quad (5.12)$$

$$\Omega(y) = 2y^2 \left\{ (1 + 2y^2) y e^{y^2} \int_y^{\infty} e^{-t^2} dt - y^2 \right\}.$$

При $\lambda \rightarrow \infty$ интеграл (5.12) имеет максимум при $y^4 = 3\lambda/4$, если выбрать функцию f_k в виде (5.9), однако при учёте фактической ограниченности области интегрирования по y этой особенности не возникает (см. раздел 12).

В работе [Тулуб 1961] при вычислении (5.12) полагалось, что в пределе сильной связи $1/\lambda = 0$. В результате численного интегрирования для $q(0)$ было получено значение $q(0) = 5.75$, откуда, варьируя энергию E (5.11) по a , получим:

$$E = -0.105\alpha^2 \hbar \omega. \quad (5.13)$$

Сравнение (5.13) с (1.6) показывает, что полученное значение E при $\alpha \rightarrow \infty$ лежит выше, чем точное значение в теории Пекара (1.6). По этой причине вплоть до недавнего времени считалось, что теория Тулуба применительно к полярону не даёт новых результатов.

Ситуация кардинально поменялась после публикации работы [Каширина 2012]. В этой работе было показано, что выбор пробной функции для минимизации энергии (3.20) в виде (5.9) не является оптимальным, поскольку не удовлетворяет вириальным соотношениям. Как показано в [Каширина 2012], оптимальный выбор функции f_k должен содержать множитель $\sqrt{2}$ перед экспонентой в выражении (5.9). В результате вместо (5.11) для энергии полярона получим:

$$E = \frac{3a^2}{16} \left[1 + q\left(\frac{1}{\lambda}\right) \right] - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha a. \quad (5.14)$$

Минимизация энергии (5.14) с оптимальной пробной функцией приводит к значению энергии:

$$E = -0.12572\alpha^2. \quad (5.15)$$

Результат (5.15) является фундаментальным. Прежде всего, он означает, что анзац Пекара не дает точного решения. Хотя результат (5.15) относится к конкретному случаю гамильтониана Пекара-Фрёлиха с выражением V_k , даваемым (2.8), концептуально сделанный вывод должен быть справедлив для всех типов автолокализованных состояний.

6. Индуцированный заряд трансляционно-инвариантных поляронов и поляронов с нарушенной трансляционной симметрией

Чтобы найти индуцируемый электроном заряд в полярной среде и поляризацию среды $\mathbf{P}(r)$, будем исходить из того, что создаваемый средой электростатический потенциал $\phi(r)$, наведённый в ней электроном, определяется оператором $\hat{\phi}(r)$:

$$\hat{\phi}(r) = -\frac{1}{e} H_{int}(r), \quad (6.1)$$

$$H_{int}(r) = \sum_k V_k (a_k e^{ikr} + a_k^+ e^{-ikr}), \quad (6.2)$$

Из (6.1), (6.2) следует, что:

$$\hat{\phi}(r) = -\sqrt{\frac{2\pi\omega_0}{\tilde{\epsilon}V}} \sum_k \frac{1}{k} (a_k e^{ikr} + a_k^+ e^{-ikr}). \quad (6.3)$$

Соответствующая $\hat{\phi}$ напряжённость электрического поля определяется соотношением $\hat{\mathbf{E}} = -grad \hat{\phi}$. С учётом соотношения $\hat{\mathbf{E}} + 4\pi\mathbf{P} = 0$ для поляризации \mathbf{P} получим:

$$\mathbf{P}(r) = \sqrt{\frac{\omega_0}{8\pi\tilde{\epsilon}V}} \sum_k \frac{\mathbf{k}}{k} (a_k e^{ikr} + a_k^+ e^{-ikr}). \quad (6.4)$$

Из (6.1), (6.2) также следует, что плотность индуцируемого заряда, определяемого уравнением Пуассона, равна:

$$\hat{\rho}_{ind}(r) = \Delta_r \hat{\phi}(r) / 4\pi. \quad (6.5)$$

В теориях полярона со спонтанно нарушенной симметрией делается предположение, что центр тяжести электрона локализован в точке r_0 . Для электрона, находящегося в точке r_0 с энергией $H_{int}(r_0)$, в результате

усреднения по фоновым переменным из (6.1) получают следующее распределение индуцированного потенциала в зависимости от расстояния $r - r_0$:

$$\varphi(r) = \langle 0 | S_2^{-1} S_1^{-1}(r) \hat{\varphi}(r_0) S_1(r) S_2 | 0 \rangle = -\frac{2}{e} \sum_k V_k f_k \cos \mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (6.6)$$

Так, например, в случае слабой связи с использованием для f_k выражения (4.3) для $\rho_{ind}(r)$, определяемого (6.5), в [Lee 1953] было получено:

$$\rho_{ind}(r) = -\frac{em\omega_0}{\hbar\tilde{\epsilon}} \frac{1}{r} \exp(-ur), \quad u = \left(\frac{2m\omega_0}{\hbar} \right)^{1/2}, \quad (6.7)$$

где u^{-1} – характерный размер локализованного состояния. Соответственно, локализованные распределения получаются для $\varphi(r)$ и $\mathbf{P}(r)$. Соответствующий (6.7) индуцированный заряд будет равен $Q_{ind} = \int \rho_{ind} dV = -e/\tilde{\epsilon}$.

В трансляционно-инвариантной теории полярона предположение о локализации электрона в окрестности точки r_0 не делается. В результате индуцируемый потенциал:

$$\varphi(r) = \langle 0 | S_2^{-1} S_1^{-1}(r) \hat{\varphi}(r_0) S_1(r) S_2 | 0 \rangle = -\frac{2}{3} \sum_K V_K f_K = \text{const}, \quad (6.8)$$

т.е. не зависит от положения электрона. Соответственно, поле поляризации $\mathbf{P}(r)$, определяемое (6.4) и индуцированная плотность заряда $\hat{\rho}_{ind}(r)$, определяемая (6.5), будут равны нулю.

При этом важно отметить, что среднее число фононов N в поляронном «облаке»:

$$N_p = \langle 0 | S_2^{-1} \hat{N} S_2 | 0 \rangle = \sum_k f_k^2, \quad \hat{N} = \sum_k a_k^+ a_k$$

не равно нулю и для f_k , соответствующего пределу слабой связи: $f_k = -V_k / (\hbar\omega + \hbar^2 k^2 / 2m)$, составляет: $N_p = \alpha / 2$, что соответствует известному значению, полученному Ли, Лоу и Пайнсом. В пределе сильной связи с использованием $f_k = -\sqrt{2} V_k \exp(-k^2 / 2a^2)$ для N_p получим:

$N_p = 0,126\alpha^2$, что значительно меньше результата диаграммного квантового метода Монте-Карло: $N_p = 0,22\alpha^2$ [Кашурников 2010]. Для биполярона N_{bp} также отлично от нуля и пропорционально квадрату константы ЭФВ: $N_{bp} \propto \alpha^2$.

7. Фононное взаимодействие электронов в трансляционно-инвариантной теории

Проблема взаимодействия двух электронов в фононном поле в случае слабого взаимодействия была впервые рассмотрена Купером в работе [Cooper 1956]. Тот факт, что в системе имеется много электронов, не влияет на допустимость двухэлектронного приближения, т.к. вследствие принципа Паули электроны, находящиеся под поверхностью Ферми лишь слабо возмущают состояния, расположенные над поверхностью. Исходным гамильтонианом в задаче Купера является гамильтониан Фрѐлиха, который в случае двух электронов имеет вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{r_2} + \sum_k \hbar\omega_k^0 a_k^+ a_k + U(|r_1 - r_2|) + \sum_k [V_k \exp(ikr_1) a_k + V_k \exp(ikr_2) a_k + H.c.], \quad (7.1)$$

$$U(|r_1 - r_2|) = \frac{e^2}{\epsilon_\infty |r_1 - r_2|},$$

где \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 – координаты соответственно первого и второго электрона, величина U описывает кулоновское отталкивание между электронами, $H.c.$ – эрмитово сопряжённые члены.

В системе центра масс гамильтониан (7.1) примет вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_e}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu_e}\Delta_{\mathbf{r}} + U(r) + \sum_k \hbar\omega_k^0 a_k^+ a_k + \sum_k 2V_k \cos\frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} [a_k \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) + H.c.], \quad (7.2)$$

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad M_e = 2m, \quad \mu_e = m/2.$$

Далее будем полагать $\hbar = 1$, $\omega_k^0 = 1$, $M_e = 1$ (соответственно, $\mu_e = 1/4$).

Координаты центра масс \mathbf{R} могут быть исключены из гамильтониана (7.2) посредством канонического преобразования Гейзенберга:

$$S_1 = \exp\left(-i \sum_k \mathbf{k} a_k^+ a_k\right) \mathbf{R},$$

$$\tilde{H} = S_1^{-1} H S_1 = -2\Delta_r + U(r) + \sum_k a_k^+ a_k +$$

$$+ \sum_k 2V_k \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} (a_k + a_k^+) + \frac{1}{2} \left(\sum_k \mathbf{k} a_k^+ a_k \right)^2. \quad (7.3)$$

Рассмотрим подробнее член, отвечающий взаимодействию электронов с фоновым полем. Применяя к нему преобразование Ли, Лоу и Пайнса (2.5), для энергии взаимодействия получим:

$$U_{int}(r) = \langle 0 | S_2^{-1} \left(2 \sum_k V_k \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} (a_k + a_k^+) \right) S_2 | 0 \rangle = 4 \sum_k V_k f_k \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2}. \quad (7.4)$$

Найдём точное выражение для $U_{int}(r)$ в пределе слабого и промежуточного электрон-фононного взаимодействия, который был рассмотрен Купером. Используя для этой цели выражение для f_k , даваемое (2.7), для $U_{int}(r)$ получим:

$$U_{int}(r) = -\frac{4e^2}{\tilde{\epsilon}r} \left(1 - e^{-r/2r_0} \right), \quad (7.5)$$

где:

$$r_0 = (\hbar / 2m\omega)^{1/2} \quad (7.6)$$

имеет смысл характерного размера в поляронной теории. Выражение (7.5) приводит к немедленному заключению, сделанному Купером: взаимодействие между электронами является притягивающим, а уравнение Шрёдингера, соответствующее потенциалу (7.5), всегда имеет дискретный электронный уровень, лежащий ниже Ферми поверхности. Последнее следует из того, что в пределе $r \rightarrow \infty$ потенциал электронного взаимодействия имеет кулоновский вид, что автоматически гарантирует существование дискретного уровня с отрицательной энергией.

Знание $U_{int}(r)$ позволяет рассчитать плотность распределения заряда $\rho_{ind}(r)$, индуцируемого электронами в полярной среде:

$$U_{int}(r) = -2e\varphi_{ind}(r), \quad (7.7)$$

где $\varphi_{ind}(r)$ – потенциал, индуцируемый электронами. С использованием уравнения Лапласа для $\rho_{ind}(r)$ получим:

$$\rho_{ind}(r) = \Delta_r \varphi_{ind}(r) / 4\pi. \quad (7.8)$$

Из (7.5), (7.8) для $\rho_{ind}(r)$ получим:

$$\rho_{ind} = -\frac{e}{8\pi r_0^2 r \tilde{\epsilon}} \exp(-r/2r_0). \quad (7.9)$$

Из (7.9) следует, что плотность индуцированного заряда обращается в бесконечность при $r = 0$. При этом, однако, полный индуцированный заряд Q_{ind} :

$$Q_{ind} = \int \rho_{ind}(r) d^3r \quad (7.10)$$

конечен и равен:

$$Q_{ind} = -2e/\tilde{\epsilon}. \quad (7.11)$$

Таким образом, нерелятивистская квантовая теория взаимодействия электрона с полярной средой даёт конечное значение индуцируемого заряда, в отличие от квантовой электродинамики, в которой взаимодействие электрона с поляризацией вакуума приводит к величине индуцируемого заряда, по абсолютной величине равной исходному (проблема нуль заряда) [Ландау 1954]. В нерелятивистской квантовой теории этому соответствовало бы: $\epsilon_\infty = 1$, $\epsilon_0 = \infty$, то есть среде с неполяризующимися электронными оболочками ионов и бесконечной статической диэлектрической проницаемостью.

При рассмотрении образования связанного состояния Купер не принимал во внимание кулоновского отталкивания между электронами. При учёте отталкивания полный потенциал U_{tot} принимает форму:

$$U_{tot}(r) = U_{int}(r) + U(r). \quad (7.12)$$

В отсутствие экранирования $U(r) = e^2/\epsilon_\infty r$ и дискретный уровень в потенциале U_{tot} (7.12) существует при условии: $3\epsilon_0 > 4\epsilon_\infty$. В общем случае для $U(r)$ следует использовать экранированное выражение. Например, в приближении Томаса-Ферми $U(r) = (e^2/\epsilon_\infty r) \exp(-r/r_{TF})$, где r_{TF} – радиус Томаса-Ферми. Это изменяет условие существования дискретного

уровня, делая это условие менее жёстким. Отметим, что Купер не использовал выражение (7.5). Вместо этого он использовал упрощённое выражение для Фурье компонент потенциала взаимодействия: $U_{\text{int}}(k) = v/V$ для $E_F \leq \hbar^2 k^2 / 2m \leq E_F + \delta$, $v = \text{const}$ и $U_{\text{int}}(k) = 0$ для других значений k , что приводит к взаимодействию вида: $U_{\text{int}}(r) \approx \sin(\sqrt{2\mu_e E_F} r / \hbar) / r$ и энергии дискретного уровня Δ :

$$\Delta = \delta \exp[-1/v\rho(E_F)], \quad (7.13)$$

что соответствует радиусу состояния $\bar{r} \approx \hbar^2 k_F / m\Delta$, где $\rho(E_F)$ – плотность состояний вблизи Ферми уровня. В силу сделанных приближений, Купер не рассматривал вопроса об энергетической выгодности образования дискретного уровня, который сводится к исследованию вопроса об энергии биполяронного состояния.

8. Биполярны промежуточной силы связи

Для ответа на вопрос о величине полной энергии в задаче Купера вернёмся к гамильтониану (7.3). Из формулы (7.3) следует, что точное решение биполяронной проблемы определяется волновой функцией $\psi(r)$, содержащей только относительные координаты r и, следовательно, являющейся трансляционно-инвариантной.

Усреднение \tilde{H} по $\psi(r)$ приводит к гамильтониану \bar{H} :

$$\bar{H} = \frac{1}{2} \left(\sum_k \vec{k} a_k^+ a_k \right)^2 + \sum_k a_k^+ a_k + \sum_k \bar{V}_k (a_k + a_k^+) + \bar{T} + \bar{U}, \quad (8.1)$$

$$\bar{V}_k = 2V_k \langle \psi | \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} | \psi \rangle, \quad \bar{U} = \langle \psi | U(r) | \psi \rangle, \quad \bar{T} = -2 \langle \psi | \Delta_r | \psi \rangle.$$

Гамильтониан (8.1) отличается от гамильтониана (2.3) заменой в (2.3) величины V_k на \bar{V}_k и добавлением к гамильтониану постоянных \bar{T} и \bar{U} .

По этой причине, повторяя вывод, приведенный в разделе 3, для энергии биполярона E_{bp} получим:

$$E_{bp} = \Delta E + \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 + \bar{T} + \bar{U}, \quad (8.2)$$

где ψ и f_k находятся из условия минимума биполяронной энергии по отношению к ψ и f_k . С учётом того, что величина энергии отдачи ΔE , входящей в (8.2), в пределе слабой связи равна $\Delta E = \sum (\hbar^2 k^2 / 2M_e) f_k^2$, мы можем представить f_k в виде:

$$f_k = \frac{\bar{V}_k}{\omega_k + \hbar^2 k^2 / 2M_e}. \quad (8.3)$$

Будем искать минимум энергии (8.2), выбрав пробную волновую функцию ψ в гауссовском виде:

$$|\psi(r)|^2 = \left(\frac{2}{\pi l^2} \right)^{3/2} \exp(-2r^2 / l^2), \quad (8.4)$$

где l – вариационный параметр. Подставляя (8.3) в (8.4) в (8.2) и минимизируя полученное выражение по l , представляем выражение для E в виде:

$$E = -\frac{1}{24} \left[\frac{16}{\sqrt{\pi}} - \frac{8}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(1-\eta)} \right]^2 \alpha^2 \hbar \omega, \quad (8.5)$$

$$l = 12 (\hbar^2 \tilde{\varepsilon} / m e^2) / \alpha \left[\frac{16}{\sqrt{\pi}} - \frac{8}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(1-\eta)} \right], \quad (8.6)$$

где l имеет смысл характерного размера куперовской пары. Из (8.5), (8.6) вытекает условие существования дискретного уровня (т.е. существования биполяронного состояния) в пределе $\alpha \rightarrow 0$: $\varepsilon_0 > 1.4\varepsilon_\infty$, которое близко к критерию, полученному в предыдущем разделе.

Выражение (8.5), хотя и соответствует выигрышу в энергии куперовской пары (т.е. биполяронного состояния) для $\alpha < 1.4$, отвечает метастабильному состоянию. Причина состоит в том, что биполяронное состояние (8.5) нестабильно относительно распада на два индивидуальных поляронных состояния с энергией $E = -2\alpha\hbar\omega$, которое выполняется в пределе $\alpha \rightarrow 0$.

9. Биполярон сильной связи

В случае сильной связи энергия отдачи ΔE определяется выражением (5.7). Из выражения (8.2) можно получить уравнения для определения энергии биполярона, варьируя E_{bp} по f_k и ψ . Так как решение полученных таким образом уравнений представляет большие трудности, для фактического определения энергии биполярона используем прямой вариационный подход, полагая [Лахно 2013]:

$$f_k = -N\bar{V}_k \exp(-k^2 / 2\mu) \quad (9.1)$$

и выбирая волновую функцию в виде (8.4), где N , μ , l – вариационные параметры. При $N=1$ выражение (9.1) воспроизводит результаты работы [Лахно 2010], а при $N=1$, $\mu \rightarrow \infty$ – результаты работы [Lakhno p.621 2012].

Подстановка (9.1), (8.4) в выражение для полной энергии (8.2) после минимизации по параметру N приводит к следующему выражению для E :

$$E(x, y; \eta) = \Phi(x, y; \eta) \alpha^2, \quad (9.2)$$

$$\Phi(x, y; \eta) = \frac{6}{x^2} + \frac{20.25}{x^2 + 16y} - \frac{16\sqrt{x^2 + 16y}}{\sqrt{\pi}(x^2 + 8y)} + \frac{4\sqrt{2/\pi}}{x(1-\eta)}.$$

Здесь x , y – варьируемые параметры: $x = l\alpha$, $y = \alpha^2 / \mu$, $\eta = \varepsilon_\infty / \varepsilon_0$.

Обозначим Φ_{\min} минимальное значение функции Φ от параметров x и y .

На рис. 9.1 приведена зависимость Φ_{\min} от параметра η . На рис. 9.2

показана зависимость x_{\min} , y_{\min} от параметра η .

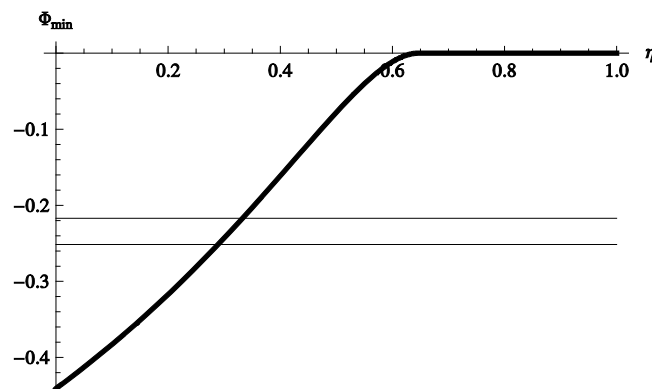


Рис. 9.1. График $\Phi_{\min}(\eta)$.

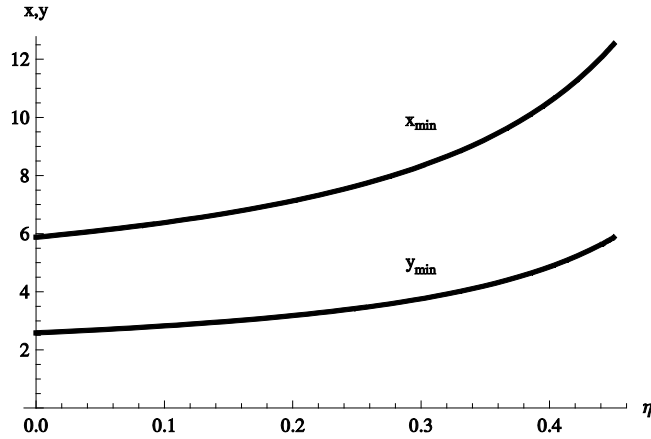


Рис. 9.2. Графики $x_{\min}(\eta)$, $y_{\min}(\eta)$.

Из рис. 9.1 следует, что $E_{\min}(\eta=0) = -0.440636\alpha^2$ – самое низкое из всех ранее полученных вариационным способом значений энергии основного состояния биполярона. Горизонтальные линии на рис. 9.1 соответствуют энергиям $E_1 = -0.217\alpha^2$ и $E_2 = -0.2515\alpha^2$, где $E_1 = 2E_{p1}$, E_{p1} – энергия основного состояния полярона Пекара (1.3); $E_2 = 2E_{p2}$, E_{p2} – энергия основного состояния трансляционно-инвариантного полярона (5.14). Пересечение этих линий с кривой $E_{\min}(\eta)$ дает критические значения параметров $\eta = \eta_{c1} = 0.3325$ и $\eta = \eta_{c2} = 0.289$. При $\eta > \eta_{c2}$ происходит распад биполярона на два трансляционно-инвариантных полярона, при $\eta > \eta_{c1}$ происходит распад биполярона на пекаровские поляроны. Значения минимизирующих параметров x_{\min} , y_{\min} для этих значений η равны: $x_{\min}(0) = 5.87561$, $y_{\min}(0) = 2.58537$, $x_{\min}(0.289) = 8.58537$, $y_{\min}(0.289) = 3.68098$, $x_{\min}(0.3325) = 8.88739$, $y_{\min}(0.3325) = 4.03682$.

Критическое значение константы электрон-фононной связи α для образования ТИ-биполярона, определяемое из сравнения выражений для энергий в пределе слабой связи (удвоенная энергия полярона слабой связи $E = -2\alpha\hbar\omega_0$) и сильной связи ($E = -0,440636\alpha^2\hbar\omega_0$), составляет $\alpha_c \approx 4,54$ и является самой низкой из оценок сделанных вариационным методом. Подчеркнём условность последней величины. Гамильтониан (8.1) совпадает по структуре с одноэлектронным гамильтонианом (2.3),

следовательно, как и в случае полярона, энергия биполярона, согласно [Gerlach 1991], является аналитической функцией α . По этой причине в точке $\alpha = \alpha_c$ энергия биполярона не имеет никаких особенностей и биполяронное состояние существует во всём диапазоне изменения параметров α и η : $0 < \alpha < \infty$; $0 < \eta < 1 - 1/2\sqrt{2}$, при которых $E < 0$.

Вопрос о существовании значения α_c , при котором возможен распад биполяронного состояния на отдельные поляроны, требует проведения расчётов при промежуточной силе связи. В частности, возможен сценарий, в котором энергия биполярона для некоторых значений η будет меньше энергии двух отдельных поляронов при любых значениях α , т.е. биполяронное состояние существует всегда. Отметим, что для полученного основного состояния с высокой точностью выполняется теорема вириала.

Проблема возникновения высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) и ее объяснение образованием биполяронных состояний рассматривались в большом числе статей и обзоров [Devreese 2009], [Каширина 2010], [Александров 1992], [Alexandrov 1996]. В этих работах существование ВТСП объясняется бозе-конденсацией биполяронного газа. Температура бозе-конденсации $T_0 = 3.31\hbar^2 n_0^{2/3} / k_B m_{bp}$, которая полагается равной критической температуре сверхпроводящего перехода T_c , при $m_{bp} \approx 10m$ в зависимости от концентрации биполяронов n варьируется в широком диапазоне от $T_0 = 3K$ для $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ до $T_0 \approx 300K$ при $n \approx 10^{21} \text{ см}^{-3}$. В последнем случае концентрация биполяронов настолько значительна, что в случае биполяронного газа, так же как и в случае куперовских пар, должен проявиться составной характер биполяронов, при котором биполярон перестает вести себя как отдельная частица, а при еще больших концентрациях биполярон должен распадаться на поляроны. В соответствии с (8.4), характерный размер биполяронного состояния равен l и в размерных единицах равен:

$l_{corr} = \hbar_2 \tilde{\epsilon} x(\eta / me^2)$ и l_{corr} имеет смысл корреляционной длины, а зависимость $x(\eta)$ определяется рис. 9.2. Из рис. 9.2 следует, что во всем диапазоне изменения η , в котором биполярное состояние стабильно, величина x меняется слабо: в пределах от $x(\eta = 0) \approx 6$ до $x(\eta = 0.289) \approx 8$.

Таким образом, даже при $\eta = \eta_c$ критическая величина концентрации, при которой может быть заметным составной характер биполярона, имеет порядок $n_c \cong 10^{21} \text{ см}^{-3}$. Этот результат свидетельствует в пользу возможности биполяронного механизма ВТСП в оксидах меди. Теорию сверхпроводимости на основе ТИ-биполяронов мы рассмотрим в Гл. 3.

10. Фононное взаимодействие электронов в трансляционно-инвариантной теории сильной связи

В случае сильной связи представляет интерес рассчитать взаимодействие между электронами как функцию расстояния между ними. С использованием (7.4) для энергии электрон-фононного взаимодействия [Lakhno 2016] для f_k , определяемых (9.1), $U_{int}(r)$ имеет вид:

$$U_{int}(\tilde{r}) = -\sqrt{\frac{x^2 + 16y}{x^2 + 8y}} \frac{1}{\tilde{r}} F\left(\frac{2\tilde{r}}{\sqrt{16y + x^2}}\right), \quad F(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt, \quad (10.1)$$

где $\tilde{U}_{int}(\tilde{r}) = U_{int}(r) / (4me^4 / \hbar^2 \tilde{\epsilon}^2)$ и $\tilde{r} = (e^2 m / \hbar^2 \tilde{\epsilon}) r$ – безразмерные переменные.

Величины $x = x(\eta)$, $y = y(\eta)$ определяются из условия минимума функционала (8.2). На рис. 10.1 показаны зависимости $\tilde{U}_{int}(\tilde{r})$ для ряда значений параметра η . Видно, что для малых \tilde{r} потенциал взаимодействия не зависит от \tilde{r} , для промежуточных значений зависимость близка к линейной, а при больших \tilde{r} имеет кулоновский вид: $\tilde{U}_{int}(\tilde{r}) \approx 1/\tilde{r}$. Из рис. 10.1 также следует, что в точке $\eta = \eta_c = 0,289$, т.е. в точке, в которой ТИ-биполярон распадается на ТИ-поляроны, взаимодействие $\tilde{U}_{int}(r)$ не демонстрирует скачков и меняется непрерывно при изменении η вплоть до значения $\eta = 1 - 1/2\sqrt{2}$, при котором полная

энергия ТИ-биполярона $E_{bp} = \phi\alpha^2$ обращается в ноль. Полное взаимодействие должно также включать кулоновское взаимодействие $U(r)$:

$$U_{tot}(r) = U_{int}(r) + U(r), \quad (10.2)$$

как это показано на рис. 10.1. Оно выглядит как кулоновское взаимодействие при малых r и имеет близкую к линейной зависимость при промежуточных значениях r (это наиболее отчётливо видно на рис. 10.1 f для $\eta = 0,6$). Это несколько напоминает взаимодействие между кварками с отталкивающим, а не притягивающим, как в случае кварков, кулоновским потенциалом (поляронная модель кварков рассматривалась в [Iwao 1976]).

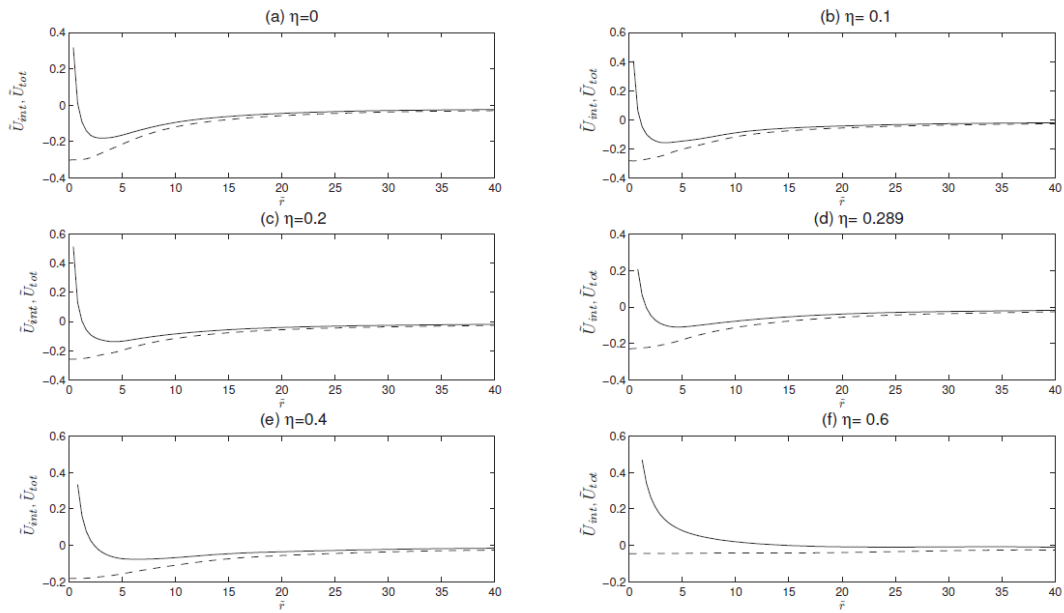


Рис. 10.1. Зависимость потенциала \tilde{U}_{int} (пунктир) и полного потенциала \tilde{U}_{tot} (прямая) от η .

Знание $U_{int}(r)$ позволяет рассчитать плотность распределения индуцируемого между электронами заряда $\rho_{ind}(r)$. Полагая

$$U_{int}(r) = -2e\phi_{ind}(r), \quad (10.3)$$

где $\phi_{ind}(r)$ – потенциал, индуцируемый между электронами, получим уравнение Пуассона для $\rho_{ind}(r)$:

$$\Delta_r \phi_{ind}(r) = 4\pi\rho_{ind}(r). \quad (10.4)$$

С использованием (10.1), (10.3) и (10.4) для $\rho_{ind}(r)$ получим:

$$\rho_{ind}(r) = \frac{32}{\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{e}{\varepsilon} \left(\frac{me^2}{\hbar^2 \tilde{\varepsilon}} \right)^3 \tilde{\rho}(\tilde{r}), \quad (10.5)$$

$$\tilde{\rho}(\tilde{r}) = \frac{1}{(x^2 + 16y) \sqrt{x^2 + y^2}} \exp\left(-\frac{8\tilde{r}}{(16y + x^2)}\right).$$

Полный заряд Q_{ind} , индуцируемый между электронами:

$$Q_{ind} = \int \rho_{ind}(r) d^3r, \quad (10.6)$$

будет равен:

$$Q_{ind} = \sqrt{\frac{16y + x^2}{8y + x^2}} \frac{2e}{\tilde{\varepsilon}}. \quad (10.7)$$

Здесь уместно заметить, что плотность заряда, индуцируемого в полярной среде как функция центра масс $\rho_{bp}(R)$, определяется выражением:

$$\rho_{bp}(R) = -e \int \langle \Psi_{bp}^*(R, r) | \Psi_{bp}(R, r) \rangle d^3r \sim \frac{1}{V}, \quad (10.8)$$

где $|\Psi_{bp}(R, r)\rangle$ даётся выражением (11.13). Таким образом, плотность индуцируемого в полярной среде заряда в случае ТИ-биполярона равна нулю. На рис. 10.2 показана зависимость $f = \sqrt{(16y + x^2)/(8y + x^2)}$ как функция от параметра η . Из неё следует, что величина Q всегда больше, чем величина $2e/\tilde{\varepsilon}$, соответствующая биполярону со спонтанно нарушенной симметрией, которые совпадают только в пределе $\eta \rightarrow 1 - 1/2\sqrt{2}$, при котором расстояние между поляронами с нарушенной трансляционной симметрией равно бесконечности.

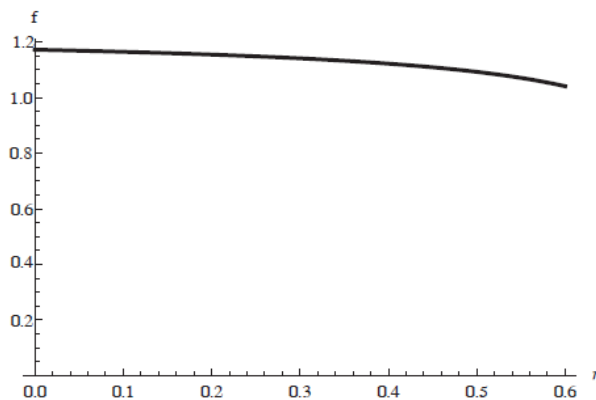


Рис. 10.2. Зависимость функции $f = \sqrt{(16y + x^2)/(8y + x^2)}$ от η .

Отметим также, что часто используемое представление о межполяронном взаимодействии в биполярном состоянии в случае ТИ-биполяронов представляется бессмысленным, т.к. ТИ-биполярон нельзя представлять составленным из отдельных поляронов (в этом смысле ситуация здесь аналогична конфайнменту кварков).

11. Функционал основного состояния. Анзац Тулуба

Для диагонализации квадратичной формы (3.4) можно использовать преобразование Боголюбова-Тябликова [Тябликов 1975]. Обозначим через α_k операторы физических частиц, в которых H_{KB} – диагональный оператор.

Диагонализуем квадратичную форму посредством преобразования:

$$\begin{aligned} a_k &= \sum_{k'} M_{1kk'} \alpha_{k'} + \sum_{k'} M_{2kk'}^* \alpha_{k'}^+, \\ a_k &= \sum_{k'} M_{1kk'}^* \alpha_{k'}^+ + \sum_{k'} M_{2kk'} \alpha_{k'}, \end{aligned} \quad (11.1)$$

так чтобы выполнялось:

$$[a_k, a_{k'}^+] = [\alpha_k, \alpha_{k'}^+] = \delta_{kk'}, \quad [H_0, \alpha_k^+] = \omega_k \alpha_k^+. \quad (11.2)$$

Из свойств унитарного преобразования (11.1) следует:

$$\begin{aligned} M_2 M_1^+ &= M_1^* M_2^T, \\ (M_1^+)^{-1} &= M_1 - M_2^* (M_1^*)^{-1} M_2. \end{aligned} \quad (11.3)$$

Преобразование операторов, обратное (11.1), с использованием (11.3)

примет вид:

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \sum_{k'} M_{1kk'}^* a_{k'} - \sum_{k'} M_{2kk'}^* a_{k'}^+, \\ \alpha_k^+ &= \sum_{k'} M_{1kk'} a_{k'}^+ - \sum_{k'} M_{2kk'} a_{k'}. \end{aligned} \quad (11.4)$$

Согласно [Тулуб 1960, 1961] матрицы M_1 и M_2 имеют вид:

$$\begin{aligned} (M_{1,2})_{kk'} &= \frac{1}{2} (\omega_k \omega_{k'})^{-1} (\omega_k \pm \omega_{k'}) \left[\delta(k - k') + (\mathbf{k}\mathbf{k}') f_k f_{k'} \frac{2(\omega_k \omega_{k'})^{1/2}}{(\omega_{k'}^2 - \omega_k^2 \pm i\varepsilon) D_{\pm}(\omega_k^2)} \right], \\ D_{\pm}(\omega_k^2) &= 1 + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{f_k^2 k^4 \omega_k}{\omega_k^2 - \omega_p^2 \mp i\varepsilon} dk, \end{aligned} \quad (11.5)$$

где верхний знак в правой части (11.5) относится к M_1 , а нижний знак к M_2 . В результате диагонализации квадратичная форма (3.4) принимает вид:

$$H_{KB} = \Delta E + \sum_k E_k \alpha_k^+ \alpha_k. \quad (11.6)$$

Функционал основного состояния $\Lambda_0|0\rangle$ выбирается из условия:

$$\alpha_k \Lambda_0|0\rangle = 0. \quad (11.7)$$

Чтобы установить явный вид функционала Λ_0 , удобно использовать для операторов α_k , α_k^+ фоковское представление [Новожилов 1957], [Novozhilov 1961], сопоставляющее оператору α_k^+ некоторое c -число \bar{a}_k , а оператору α_k оператор $d/d\bar{a}_k$. Тогда условие (11.7) с использованием (11.4) примет вид:

$$\left(\sum_k M_{1kk'}^* \frac{d}{d\bar{a}_{k'}} - \sum_k M_{2kk'} \bar{a}_{k'} \right) \Lambda_0|0\rangle = 0. \quad (11.8)$$

Непосредственной подстановкой в (11.8) легко убедиться, что решение уравнения (11.8) имеет вид:

$$\Lambda_0 = C \left\{ \exp \frac{1}{2} \sum_{k,k'} a_k^+ A_{kk'} a_{k'}^+ \right\} \quad (11.9)$$

где C – некоторая постоянная, обеспечивающая унитарность оператора Λ_0 . Для этого достаточно вернуться в (11.9) к величинам \bar{a}_k вместо a_k^+ . Таким образом, оператор Λ_0 представляет собой оператор сжатия (см. Приложение Д). Матрица A удовлетворяет соотношениям:

$$A = M_2^* (M_1^*)^{-1}, \quad A = A^T. \quad (11.10)$$

Таким образом, энергия основного состояния, соответствующая функционалу Λ_0 , равна:

$$\langle 0 | \Lambda_0^+ H_{KB} \Lambda_0 | 0 \rangle = \Delta E. \quad (11.11)$$

В Приложении А показано, что $\langle 0 | \Lambda_0^+ H_1 \Lambda_0 | 0 \rangle \equiv 0$.

Из (11.9), (2.2), (2.5) следует, что волновая функция основного состояния полярона $|\psi\rangle_p$ имеет вид:

$$|\psi\rangle_p = C \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k \mathbf{r}\right] \exp\left[\sum_k f_k(a_k^+ - a_k)\right] \Lambda_0 |0\rangle. \quad (11.12)$$

Соответственно, волновая функция биполярона $|\psi\rangle_{bp}$ с учетом (7.3), (2.4) выражается как:

$$|\psi\rangle_{bp} = C \psi(r) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k \mathbf{R}\right] \exp\left[\sum_k f_k(a_k^+ - a_k)\right] \Lambda_0 |0\rangle. \quad (11.13)$$

Из (11.12), (11.13) следует, что волновые функции полярона и биполярона делокализованы по всему пространству и не могут быть представлены в виде анзаца (1.2).

Из (11.12), (11.13) следует, что причина, по которой попытка Ли, Лоу и Пайнса [Lee 1953] исследовать энергию основного состояния полярона во всем диапазоне изменения α была неуспешной, состоит в выборе плохой пробной функции (2.4), в которой отсутствовал множитель, соответствующий функционалу Λ_0 .

Необходимо, однако, подчеркнуть, что, несмотря на радикальное улучшение качества пробной функции введением в функции Ли, Лоу и Пайнса множителя Λ_0 , позволяющего рассматривать случаи как слабой, так и сильной связи, получаемые с ее помощью результаты не являются точными. Тот факт, что волновая функция Тулуба представляет собой анзац, следует из ее свойств:

$$\langle 0 | \Lambda_0^+ H_1 \Lambda_0 | 0 \rangle = 0, \quad E = \langle 0 | \Lambda_0^+ H_0 \Lambda_0 | 0 \rangle, \quad H_0 \Lambda_0 | 0 \rangle = E \Lambda_0 | 0 \rangle. \quad (11.14)$$

Будучи анзацем, решение Тулуба дает решение задачи о поляроне в определенном классе функций, обладающих структурой $\Lambda_0 |0\rangle$. Тот факт, что анзац Тулуба не является точным решением задачи, следует хотя бы из того, что само по себе использование выражения (3.20) для расчета энергии, например, в случае слабой связи, дает для E величину: $E = -\alpha - 1/6(1/2 - 4/3\pi)\alpha^2$ [Тулуб 1960]. Для получения точного коэффициента при α^2 в разложении энергии по степеням α (1.1) следует по теории возмущений учесть вклад гамильтониана H_1 [Röseler 1968].

Из факта делокализованности волновых функций (11.12), (11.13) вытекают многочисленные важные следствия, например свойство аддитивности вкладов в энергию полярона и биполярона различных ветвей поляризационных колебаний атомов, входящих в состав элементарной ячейки кристалла, Гамильтониан Фрёлиха в этом случае для полярона примет вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + \sum_{j=1}^l \sum_k V_{jk} (a_{jk} e^{ikr} + a_{jk}^+ e^{-ikr}) + \sum_{j=1}^l \sum_k \hbar\omega_{jk}^0 a_{jk}^+ a_{jk}, \quad (11.15)$$

где $j=1, \dots, l$ – нумерует фоновые ветви, с которыми электрон взаимодействует с силой, определяемой величиной матричных элементов V_{jk} . После устранения из гамильтониана координат электрона посредством преобразования Гейзенберга

$$S_1 = \prod_j \exp\left(-i \sum_{j,k} \mathbf{k} a_{jk}^+ a_{jk}\right) \mathbf{r} \quad (11.16)$$

получим вместо (2.3) гамильтониан:

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m} \left(\sum_{j,k} \hbar \mathbf{k} a_{jk}^+ a_{jk} \right)^2 + \sum_{j,k} V_{jk} (a_{jk} + a_{jk}^+) + \sum_{j,k} \hbar\omega_{jk}^0 a_{jk}^+ a_{jk}. \quad (11.17)$$

Таким образом, если бы не первый член в правой части (11.17), мы бы имели независимые вклады от разных фоновых ветвей в полный гамильтониан. Найдём условия, при которых это выполняется. Для этого посмотрим, во что переходит первый член в правой части (11.17) после преобразования Ли, Лоу и Пайнса:

$$S_2 = \exp\left[\sum_{j,k} f_{jk} (a_{jk}^+ - a_{jk}) \right]. \quad (11.18)$$

В результате применения (11.18) к гамильтониану (11.17) последний примет вид:

$$H = \sum_j (H_{j0} + H_{j1}) + H_{\text{int}}, \quad (11.19)$$

где первый член в правой части есть сумма гамильтонианов независимых ветвей, имеющих вид (3.2)-(3.5) с v_{jk} , f_{jk} , a_{jk} , ω_{jk}^0 вместо v_k , f_k , a_k , ω_k^0 . В гамильтониан H_{int} будут входить члены двух видов:

$$\sum_{\substack{j,j',k,k' \\ j \neq j'}} \mathbf{k}\mathbf{k}' f_{jk}^2 f_{j'k'}^2, \quad (11.20)$$

$$\sum_{\substack{j,j',k,k' \\ j \neq j'}} \mathbf{k}\mathbf{k}' a_{jk}^+ a_{jk} a_{j'k'}^+ a_{j'k'}. \quad (11.21)$$

Для чётных функций $f_{j,k}$, которыми являются (5.9), члены вида (11.20) равны нулю.

При вычислении энергии $E = \langle 0 | \Lambda_0^+ H \Lambda_0 | 0 \rangle$ для волновых функций $\Lambda_0 | 0 \rangle$, где:

$$\Lambda_0 = C \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{j,k,k'} a_{jk}^+ A_{jkk'} a_{jk'}^+ \right),$$

члены вида (11.21) обратятся в нуль по тем же причинам, что и гамильтониан H_1 в (3.2). Действительно, входящее в выражение

$$\sum_{k,k'} \mathbf{k}\mathbf{k}' \langle 0 | \Lambda_0^+ \sum_{j \neq j'} a_{jk}^+ a_{jk} a_{j'k'}^+ a_{j'k'} | 0 \rangle \quad (11.22)$$

среднее есть не что иное, как норма вектора:

$$\sum_j a_{j,k}^+ a_{j,k} \Lambda_0 | 0 \rangle$$

и, стало быть, положительна. Тогда при замене $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ выражение (11.22) изменит знак и, таким образом, должно быть равно нулю. В случае биполярона аналогично легко показать, что биполяронный гамильтониан $H_{\text{вр}}$ будет давать тот же спектр, что и гамильтониан: $\sum H_{\text{вр},j}$, где $H_{\text{вр},j}$ – гамильтониан биполярона для j -ой фононной ветви.

Для гамильтониана Фрёлиха, в котором фигурирует много фононных ветвей, величины $V_{j,k}$ будут равны:

$$V_{jk} = \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{j0}}{\tilde{\epsilon}_j V}}, \quad (11.22)$$

где $\tilde{\varepsilon}_j^{-1} = \varepsilon_j^{-1} - \varepsilon_{j+1}^{-1}$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_\infty$, $\varepsilon_{l+1} = \varepsilon_0$, $\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \dots < \varepsilon_l$, $j = 1, 2, \dots, l$. Отметим, что поляризационный потенциал φ_{tot} , создаваемый всеми ветвями, равен:

$$\varphi_{tot} = -\sum_{j=1}^l e / \varepsilon_j r = -e / \tilde{\varepsilon}.$$

12. Дискуссия о полноте теории Тулуба

В работах [Klimin 2012, 2013] был поставлен вопрос о полноте теории Тулуба [Тулуб 1960, 1961]. Возражения авторов работ [Klimin 2012, 2013] основывались на работе Порша и Роселера [Porsch 1967], которая воспроизводит результаты теории Тулуба. Однако в последнем разделе своей статьи Порш и Роселер рассмотрели вопрос о том, что произойдет, если в теории Тулуба заменить бесконечный предел интегрирования на конечный, а затем перейти к бесконечному пределу. Сюрпризом оказалось то, что в этом случае одновременно с обрезанием интегрирования по фононным волновым векторам в функционале полной энергии полярона к последнему необходимо добавить член δE^{PR} , который дает неисчезающий вклад, если верхний предел устремить к бесконечности [Porsch 1967], [Klimin 2013]. На основании этого результата авторы работ [Klimin 2012, 2013] пришли к выводу, что Тулуб не учел эту добавку и, таким образом, его теория не полна.

Чтобы разрешить этот парадокс, рассмотрим функцию $\Delta(s)$, определяемую формулой (3.14) (соответственно (3.19) в непрерывном случае). Согласно (3.14), (3.19) нули этой функции дают вклад в величину энергии "отдачи полярона" ΔE , определяемой (3.16) и, согласно (3.15), определяются из решения уравнения:

$$1 = \frac{2}{3} \sum_k \frac{k^2 f_k^2 \omega_k}{s - \omega_k^2}. \quad (12.1)$$

Если обрезание в сумме, фигурирующей в правой части (12.1), отсутствует, то решение уравнения (12.1) дает спектр значений s ,

определяемый частотами ν_{k_i} , лежащими между соседними значениями ω_{k_i} и $\omega_{k_{i+1}}$ для всех волновых векторов k_i . Эти частоты определяют значение энергии отдачи:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_{k_i} (\nu_{k_i} - \omega_{k_i}) \quad (12.2)$$

Посмотрим, что происходит с вкладом частот ν_{k_i} в ΔE в той области волновых векторов k , в которой f_k стремится к нулю, но нигде в точности не обращается в нуль. Из (12.1) следует, что при $f_k \rightarrow 0$ решения уравнения (12.1) будут стремиться к ω_{k_i} : $\nu_{k_i} \rightarrow \omega_{k_i}$. Соответственно, вклад в ΔE области волновых векторов, в которой $f_k \rightarrow 0$, будет также стремиться к нулю.

В частности, если мы введем некоторое k^0 , такое что в области $k^0 > k$ величины f_k будут малы, мы получим для ΔE выражение:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_{k_i \leq k^0} (\nu_{k_i} - \omega_{k_i}), \quad (12.3)$$

не содержащее никаких добавочных членов. Это соответствует тому, что в функционале Тулуба мы можем поставить верхний предел k^0 , и никаких добавочных членов при этом не возникает.

Например, если для исследования минимума функционала Тулуба (3.20), (5.7) выбрать пробную функцию f_k , не содержащую обрезания, в виде [Лакно В Д 2013]:

$$\begin{aligned} f_k &= -V_k \exp(-k^2/2a^2(k)), \\ a(k) &= \frac{a}{2} \left[1 + \operatorname{th} \left(\frac{k_b - k}{a} \right) \right], \end{aligned} \quad (12.4)$$

где a – параметр пробной функции Тулуба (5.9), k_b удовлетворяет условию $a \ll k_b \ll k_{oc}$, $k_{oc} = a\sqrt{3\lambda/4}$ – величина волнового вектора, при котором интеграл Тулуба (5.12) имеет максимум [Тулуб 1961], [Lakno p.1855 2012], то с использованием (12.4) в пределе $a \rightarrow \infty$ получим для интеграла $q(1/\lambda)$ выражение:

$$q\left(\frac{1}{\lambda}\right) \approx 5.75 + 6\left(\frac{a}{k_b}\right)^3 \exp\left(-\frac{k_b^2}{a^2}\right). \quad (12.5)$$

Второй член в правой части (12.5) исчезает при $k_b/a \rightarrow \infty$, и мы получаем, как и следовало ожидать, результат Тулуба: $q(1/\lambda) \approx 5.75$.

Уравнение (12.1), однако, имеет особенность. Даже в случае непрерывного спектра, при $f_k = 0$, если $k > k^0$, оно имеет изолированное решение v_{k^0} , отличающееся от максимальной частоты ω_{k^0} на конечную величину. Это изолированное решение приводит к дополнительному вкладу в ΔE :

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{1}{2} \sum_{k_i < k^0} (v_{k_i} - \omega_{k_i}) + \delta E^{PR}, \\ \delta E^{PR} &= \frac{3}{2} (v_{k^0} - \omega_{k^0}), \end{aligned} \quad (12.6)$$

где v_{k^0} имеет смысл "плазменной частоты" [Porsch 1967]. Таким образом, здесь отсутствует непрерывный переход от случая $f_k \rightarrow 0$ при $k > k^0$ к случаю $f_k = 0$ при $k > k^0$. Как показано прямым вычислением [Приложение E] вклада в (12.6) слагаемого с "плазменной частотой" δE^{PR} , даже при $k^0 \rightarrow \infty$ теория Порша и Роселера не переходит в теорию Тулуба.

В теории Тулуба мы выбираем такие f_k , которые приводят к минимуму функционала полной энергии полярона. В частности, выбор пробной функции в виде (12.4) гарантирует нам отсутствие вклада "плазменной частоты" в величину полной энергии и при практических расчетах можно выбирать обрезанную f_k , не вводя при этом в функционал Тулуба никаких дополнительных членов [Lakhno p.1855 2012].

Подводя итог дискуссии, отметим несостоятельность критических замечаний [Klimin 2012, 2013]. Несостоятельность этих критических замечаний была показана в работах [Lakhno p.1855 2012], [Приложении E] и в воспроизведенной здесь работе [Лажно 2013]. В настоящее время

теория Тулуба и полученные на ее основе результаты [Каширина 2012], [Лахно 2010, 2013], [Lakhno p.621 2012] не вызывают сомнений.

13. Следствия, вытекающие из существования трансляционно-инвариантных поляронов и биполяронов

Согласно полученным результатам, основное состояние ТИ-полярона представляет собой делокализованное состояние электрон-фононной системы: вероятность нахождения электрона в любой точке пространства одинакова. Явный вид волновой функции основного состояния приведен в разделе 11. Делокализованы как электронная плотность, так и амплитуды фононных мод, соответствующих перенормированным взаимодействиям частоты ν_{q_i} .

Важно отметить, что согласно (3.15) перенормированные фононные частоты ν_{q_i} в случае ТИ-полярона лежат по энергии выше, чем неперенормированные частоты оптических фононов и, следовательно, выше, чем перенормированные частоты полярона со спонтанно нарушенной симметрией [Лахно 1995].

Понятие поляронной потенциальной ямы (образованная локальными фононами [Лахно 1995]), в которой локализован электрон, т.е. самозахваченное состояние, в трансляционно-инвариантной теории отсутствует. Соответственно, индуцированный поляронный заряд для ТИ-полярона равен нулю. Отсутствие локализованной "фононной шубы" у ТИ-полярона позволяет предположить, что его эффективная масса не слишком сильно отличается от эффективной массы электрона. Энергия основного состояния ТИ-полярона меньше энергии полярона Пекара и дается формулой (5.15) (для полярона Пекара энергия определяется (1.6)).

Таким образом, при равном нулю полном импульсе полярона имеется энергетическая щель между ТИ-поляронным состоянием и пекаровским

состоянием, т.е. состоянием с нарушенной трансляционной инвариантностью. ТИ-полярон является бесструктурной частицей (результаты исследований структуры пекаровского полярона суммированы в работе [Лакно 1995]).

Согласно ТИ-теории полярона, термины «полярон большого радиуса» (ПБР) и «полярон малого радиуса» (ПМР) являются условными, так как в обоих случаях состояние электрона делокализовано по кристаллу. Различие между ПБР и ПМР в ТИ-теории состоит в том, что для ПБР выполняется неравенство $k_{char}a < \pi$, а для ПМР $k_{char}a > \pi$, где a – постоянная решетки, k_{char} – характерное значение фононных волновых векторов, которые дают основной вклад в энергию полярона. Сделанное утверждение справедливо не только для полярона Пекара-Фрѐлиха, но и для всего класса поляронов, у которых константа связи не зависит от волнового вектора электрона, как это имеет место, например, в случае холстейновского полярона. В классе поляронов с константой связи, зависящей от волнового вектора электрона, указанные критерии могут не выполняться (как это имеет место, например, в модели Си- Шриффера-Хигера [Marchand 2010]).

Указанные особенности ТИ-поляронов определяют их физические свойства, качественно отличные от свойств пекаровских поляронов. При наличии в кристалле небольших локальных нарушений ТИ-полярон остается в делокализованном состоянии. Так, например, в ионном кристалле с вакансиями образование F -центров делокализованными поляронными состояниями будет происходить только при некотором критическом значении статической диэлектрической постоянной ϵ_{0c} . При $\epsilon_0 > \epsilon_{0c}$ в кристалле будут присутствовать делокализованные ТИ-поляроны и свободные вакансии. При $\epsilon_0 = \epsilon_{0c}$ будет происходить переход из делокализованного состояния в локализованное на вакансии состояние (коллапс волновой функции). Такое поведение ТИ-поляронов

качественно отличается от поведения пекаровских поляронов, которые локализируются на вакансиях при любом значении ϵ_0 . Это объясняет, в частности, отсутствие наблюдений поглощения (т.е. структуры) свободным поляроном Пекара, так как в этом случае реализуется ТИ-полярон. Поглощение появляется только при образовании связанного полярона Пекара, т.е. F -центра. Сделанные утверждения подтверждаются также рядом последних работ, рассматривающих поляроны Холстейна [Hague 2008], [Mischenko 2009], [Ebrahimnejad 2012].

Отметим, что изменениям должна подвергнуться только физическая интерпретация свободных поляронов сильной связи. Подавляющее большинство результатов по физике поляронов сильной связи относятся к связанным (на вакансиях или дефектах решетки) поляронным состояниям пекаровского типа и не требуют какой-либо коррекции.

Учет трансляционной инвариантности в случае полярона дает небольшое изменение в оценке основного состояния, однако это приводит к качественно иному представлению о свойствах такого состояния. В работе Тулуба [Тулуб 1961] в части, посвященной рассеянию ТИ-полярона, показано, что при увеличении константы электрон-фононной связи при достижении некоторого ее критического значения рассеяние полярона на оптических фононах обращается в ноль. Таким образом, при константах связи, превышающих критическое значение, полярон будет сверхпроводящим. Хотя в ионных кристаллах основным механизмом рассеяния электронов является рассеяние на оптических фононах [Schultz 1959], могло бы показаться, что вклад акустических фононов в этом случае также необходимо учитывать. Однако, как это следует в общем случае из закона сохранения энергии и импульса, рассеяние ТИ-полярона на акустических фононах будет происходить только при скорости полярона, превышающей скорость звука [Киттель 1967].

В отличие от поляронов, ТИ-биполяроны обладают гораздо большей энергией связи. Это приводит к важным физическим следствиям. В частности, при наличии в кристалле небольших локальных нарушений ТИ-биполярон будет оставаться в делокализованном состоянии. Так, например, в ионном кристалле с вакансиями образование F' -центров делокализованными биполяронными состояниями будет происходить только при некотором критическом значении статической диэлектрической постоянной ε_{0c_1} . При значении $\varepsilon_0 > \varepsilon_{0c_1}$ в кристалле будут делокализованные ТИ-биполяроны и свободные вакансии. При $\varepsilon_0 = \varepsilon_{0c_1}$ будет происходить переход из делокализованного состояния ТИ-биполярона в локализованное на вакансии состояние, т.е. в F' -центр. Такое поведение ТИ-биполяронов качественно отличается от поведения биполяронов со спонтанно нарушенной симметрией пекаровского типа [Каширина 2010], которые локализуются на вакансиях при любом значении ε_0 .

Делокализованные при $P=0$ ТИ-биполяроны, где P – полный импульс биполярона, будут отделены энергетической щелью от биполяронных состояний с нарушенной трансляционной инвариантностью, которые описываются локализованной волновой функцией. Как и в случае поляронов, при значении константы связи, превышающем некоторое критическое, ТИ-биполяроны становятся сверхпроводящими. Как известно, объяснение высокотемпературной сверхпроводимости на основе биполяронного механизма бозе-конденсации сталкивается с трудностью, связанной с большой массой биполяронов и, как следствие, низкой температурой бозе-конденсации. Эта трудность отсутствует в трансляционно-инвариантной биполяронной теории сверхпроводимости (см. Гл. 3). Следует подчеркнуть, что отмеченные выше свойства ТИ-биполяронов придают им сверхпроводящие качества даже в отсутствие их бозе-конденсации, а большая энергия связи биполяронов делает такой

сценарий сверхпроводимости реальным даже в сильно дефектных кристаллах.

14. Методы квантовой теории поля и ТИ-поляроны

В настоящее время теория Тулуба и полученные на ее основе количественные результаты не вызывают сомнений. Рассматриваемая квантовополевая теория является непертурбативной и может воспроизводить не только пределы сильной и слабой связи, но и режим промежуточной связи.

Одним из наиболее эффективных методов расчета поляронов и биполяронов в этом диапазоне силы связи считается метод интегрирования по траекториям [Feynman 1975]. Этот подход без должной модификации не является трансляционно-инвариантным, поскольку в этом методе главный вклад в уровни энергии дают классические решения (т.е. экстремумы экспоненты от классического действия, входящей в интеграл по траекториям). При этом такие решения в силу трансляционной инвариантности являются не изолированными стационарными точками, а принадлежат непрерывному семейству классических решений, получаемых в результате действия на исходное классическое решение оператора трансляций. Соответственно, приближение стационарной фазы в трансляционно-инвариантной системе неприменимо.

В квантовой теории поля для восстановления трансляционной инвариантности разработаны подходы, основанные на введении коллективных координат в функциональный интеграл [Раждараман 1985] которые, однако, вплоть до настоящего времени в теории полярона не использовались. По этой причине неудивительно, что использованный в теории полярона метод интегралов по траекториям

приводит к результату, совпадающему с полуклассической теорией полярона сильной связи [Gerlach 1988].

В последнее время в теории полярона разработан такой мощный вычислительный метод, как квантовый метод Монте-Карло [Мищенко 2005], [Кашурников 2010]. Этот метод, сам по себе являясь лишь инструментом расчета, без указанной выше модификации не в состоянии воспроизвести результаты анзаца Тулуба. В случае же диаграммного метода Монте-Карло препятствием для проверки анзаца Тулуба в пределе сильной связи является необходимость вычисления диаграмм очень высокого порядка.

Подведем общий итог полученных результатов. Анзац Пекара (1.2) представляет исходную посылку о форме решения, которая была подтверждена в ходе ее многочисленных проверок и доказательств. За более чем восьмидесятилетнюю историю развития теории полярона (если начало отсчета вести от заметки Ландау [Ландау 1969]) за анзацем (1.2) утвердилось мнение как об асимптотически точном решении задачи о поляроне в пределе сильной связи.

Анзац Тулуба (§11) представляет другую посылку о форме решения, структура которого определяется видом функции $\Lambda_0|0\rangle$. В рамках этой посылки решение Тулуба также является асимптотически точным. Ввиду того, что решение Тулуба дает для полярона более низкое значение энергии, с вариационной точки зрения предпочтение следует отдать анзацу Тулуба.

Таким образом, теорию полярона никоим образом нельзя считать завершенной теорией. В рамках анзаца Тулуба предстоит огромная работа по пересмотру многих концепций (например сверхпроводимости: Гл. 3) и положений в физике конденсированных сред. Расширение области применения анзаца Тулуба на другие разделы квантовой теории поля может привести к радикальному пересмотру многих результатов, представляющихся в настоящее время несомненными, и наоборот. Так,

например, несепарабельность биполярного состояния в поляронной модели кварков [Iwao 1976] (роль фононов играет глюонное поле) даёт естественное объяснение их конфайнмента. В работе [Laksho 2014] отмечено, что в ТИ-теории нет необходимости использовать механизм Хиггса спонтанного нарушения симметрии для получения масс элементарных частиц.

15. Трансляционно-инвариантные экситоны

В этом разделе рассматриваются экситоны большого радиуса в полярных кристаллах. Показано, что трансляционно-инвариантное описание экситонов, взаимодействующих с фононным полем, приводит к отличному от нуля вкладу фононов в энергию основного состояния экситона только в случае слабой или промежуточной силы электрон-фононного взаимодействия. Сделан вывод о невозможности существования самозахваченных экситонов в пределе сильной связи. Обсуждаются особенности спектров поглощения и излучения трансляционно-инвариантных экситонов в фононном поле. Найдены условия, при которых водородоподобная модель экситона остается справедливой в условиях электрон-фононного взаимодействия.

Введение. Теория экситонов представляет обширную главу современной физики конденсированных сред [Нокс 1966], [Агранович 1968], [Давыдов 1968], [Рашба 1985], [Veta 1986]. Одним из ее разделов является теория экситонов в полярных средах [Kuper 1963], [Devreese 1984]. Как и в случае поляронов, описание свободных экситонов в однородной и изотропной полярной среде должно быть трансляционно-инвариантным (ТИ). Это приводит к многочисленным следствиям. Будучи бозонами, экситоны, как и биполярны, способны образовывать бозе-конденсат. Однако экспериментальное подтверждение такой возможности было получено совсем недавно [Kogan 2017]. Ряд теорий

сверхпроводимости также основан на участии экситонов в образовании бозе-конденсата.

Обширная литература по экситонам подробно освещает многочисленные явления, связанные с экситонами. По этой причине мы остановимся только на некоторых качественных отличиях, к которым приводит трансляционно-инвариантная теория электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) от теории самозахваченных экситонов в полярных средах.

В большинстве современных работ по экситонам при интерпретации их спектральных линий наличие окружения, в частности, полярной среды (в случае полярных кристаллов) попросту игнорируется (см. обзор [Abmann 2020] и цитированную в нем литературу). Если влияние среды учитывать, то четкая картина спектральных линий экситонов должна была бы отсутствовать. На опыте же отчетливо видны хорошо различимые пики, соответствующие переходам в высоковозбужденные состояния с очень большим энергетическим номером. Представляется совершенно необъяснимым, каким образом наличие окружения и сильного ЭФВ, которые должны приводить к сдвигам и уширениям линий перехода экситона, а также к искажениям формы его спектра, оставляют близлежащие линии переходов в высоковозбужденные состояния различимыми.

В результате многочисленных теоретических исследований этого вопроса сформировалось представление о существенном вкладе ЭФВ в энергию связи экситона, выразившееся в замене простой водородоподобной модели на модифицированную, в которой учет поляризационного облака, окружающего электрон и дырку, то есть поляронного эффекта, достигается заменой кулоновского взаимодействия на экранированное. Наиболее популярными потенциалами взаимодействия, используемыми при интерпретации экспериментальных наблюдений, являются потенциалы Хакена [Haken

1958], Баджаджа [Bajaj 1974], и Поллмана - Баттнера [Pullmann 1977]. В подавляющем же большинстве работ более эффективным оказывается использование простейшей водородоподобной модели.

Можно дать следующее объяснение неудаче модельных потенциалов [Naken 1958], [Bajaj 1974], [Pullmann 1977]. Дело в том, что модельные потенциалы [Naken 1958], [Bajaj 1974], [Pullmann 1977] были получены для аппроксимации энергии связи экситона в основном состоянии, а затем использованы для расчета уровней энергии в таком потенциале. В действительности правильным был бы подход, в котором каждому возбужденному состоянию сопоставлялся бы свой (самосогласованный) потенциал, например так, как это было сделано в работе [Лакно 1983] для F-центров. Такая задача, однако, ввиду ее большой сложности решена не была. Как будет показано в данной работе, в действительности решение такой задачи и не требуется, поскольку в случае сильного ЭФВ и наличия трансляционной инвариантности точный спектр экситона является водородоподобным. Этим и объясняется успех его повсеместного применения.

Таким образом, главный результат состоит в том, что в ТИ системах самозахваченные (самосогласованные) состояния экситонов, вызванные ЭФВ, невозможны, так же как невозможны самозахваченные состояния полярона и биполярона [Лакно 2010, 2013, 2015], [Lakno 2012], [Каширина 2012]. В то же время, как будет показано ниже, наличие трансляционной инвариантности приводит к важным особенностям в спектрах ТИ-экситонов.

Гамильтониан экситона в полярном кристалле. Гамильтониан экситона в полярном кристалле представляет собой гамильтониан Пекара-Фрелиха, который описывает взаимодействие электрона и дырки друг с другом и оптическими фононами:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_{r_2} + \sum_k \hbar\omega_0(k)a_k^+a_k - \frac{e^2}{\epsilon_\infty|r_1-r_2|} + \quad (15.1)$$

$$+ \sum_k (V_k e^{ikr_1} a_k - V_k e^{ikr_1} a_k + H.c.),$$

$$V_k = \frac{e}{|k|} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0(k)}{V\tilde{\epsilon}}}, \quad \omega_0(k) = \omega_0, \quad \tilde{\epsilon}^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1},$$

где e – заряд электрона, m_1 и m_2 – масса электрона и дырки, ϵ_∞ и ϵ_0 – оптическая и статическая диэлектрические проницаемости, r_1 и r_2 – координаты электрона и дырки, $\omega_0(k)$ – фоновая частота, которая в случае оптических фононов не зависит от k и равна ω_0 .

Гамильтониан (15.1) соответствует случаю непрерывной полярной среды, то есть случаю экситона Ванье-Мотта в полярной среде. Разные знаки в гамильтониане взаимодействия (15.1) соответствуют разным знакам заряда электрона и дырки.

После перехода в гамильтониане (15.1) от r_1 и r_2 к координатам центра масс R и относительным координатам r :

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{M} \mathbf{r}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{M} \mathbf{r}, \quad M = m_1 + m_2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{M}, \quad (15.2)$$

получим:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + \sum_k \hbar\omega_0(\mathbf{k}) a_k^+ a_k - \frac{e^2}{\epsilon_\infty |r|} + \sum_k V_k a_k [e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}+m_2\mathbf{r}/M)} - e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}-m_1\mathbf{r}/M)}] + H.c. \quad (15.3)$$

После устранения в (15.3) координат центра масс экситона посредством оператора Гейзенберга $S = \exp(-i/\hbar \sum \hbar k R a_k^+ a_k)$ и усреднения полученного гамильтониана по волновой функции относительного движения $\psi(r)$ получим:

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \left(\sum_k \mathbf{k} a_k^+ a_k \right)^2 + \sum_k \hbar\omega_0(k) a_k^+ a_k + \sum_k [\bar{V}_k a_k + H.c.] + \bar{T} + \bar{U}, \quad (15.4)$$

$$\bar{T} = -\frac{\hbar^2}{2M} \int \psi^* \Delta_r \psi d^3r, \quad \bar{U} = -\frac{e^2}{\epsilon_\infty} \int \psi^* \frac{1}{|r|} \psi d^3r,$$

$$\bar{V}_k = V_k \langle \psi | \exp i\mathbf{k} r m_2 / M - \exp(-i\mathbf{k} r m_1 / M) | \psi \rangle.$$

Рассмотрим разные предельные случаи для этого гамильтониана.

Основное состояние экситона в полярном кристалле в случае слабого и промежуточного электрон-фононного взаимодействия. Вклад ЭФВ в энергию экситона в случае слабой силы связи при $m_1 \neq m_2$

отличен от нуля и приводит к понижению энергии экситона. Это автоматически следует из выражения (15.4), которое отличается от случая полярона заменами $V_k \rightarrow \bar{V}_k$; $m_1, m_2 \rightarrow \mu, M$ и добавлением к гамильтониану постоянных \bar{T} и \bar{U} . В результате для энергии основного состояния покоящегося экситона в случае слабой и промежуточной силы связи, согласно Ли, Лоу и Пайнсу [Lee 1953], получим:

$$E = \bar{T} + \bar{U} - \sum_k \frac{|\bar{V}_k|^2}{\hbar\omega_0(k) + \hbar^2 k^2 / 2M}. \quad (15.5)$$

Согласно [Gerlach 1996], величина энергии основного состояния в этом пределе равна:

$$E = -(\alpha_1 + \alpha_2)\hbar\omega_0 - R_0 \frac{\mu_p}{\mu}, \quad (15.6)$$

$$R_0 = \mu e^4 / 2\hbar^2 \varepsilon_0^2, \quad \mu_p = \frac{m_1^p m_2^p}{m_1^p + m_2^p}, \quad m_i^p = m_i(1 + \alpha_i/6),$$

$$\alpha_i = \frac{1}{2} \frac{e^2 u_i}{\hbar\omega_0 \tilde{\varepsilon}}, \quad u_i = \left(\frac{2m_i \omega_0}{\hbar} \right)^{1/2},$$

где $\alpha_i, i=1,2$ имеют смысл констант ЭФВ для электрона и дырки соответственно.

Из (15.6) следует, что в отсутствие статического кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой ($\varepsilon_0 = \infty$) имеет место обычный поляронный сдвиг в энергии электрона и дырки, движущихся независимо. В другом предельном случае, когда ЭФВ отсутствует $\tilde{\varepsilon} = \infty$, из (15.6) следует обычное выражение для эффективного атома водорода в основном состоянии.

Основное состояние экситона в полярном кристалле в случае сильного электрон-фононного взаимодействия. Гамильтониан (15.4) не зависит от координат центра масс экситона R . Отсюда следует, что самозахват экситона, то есть образование локализованного в R -пространстве экситона, невозможен. Это является следствием того, что полный импульс экситона коммутирует с гамильтонианом, соответственно, собственные волновые функции гамильтониана

одновременно являются собственными волновыми функциями оператора полного импульса \mathbf{P} , то есть плоскими волнами в R -пространстве.

Другой важный вывод, вытекающий из вида (15.4), состоит в том, что в пределе сильной связи с фононами экситон не является поляризующимся. Другими словами, в пределе сильного ЭФВ экситон ведет себя как свободный экситон в неполярной среде.

Покажем это в случае, когда $\omega_0(k)$ не зависит от k . В этом случае гамильтониан (15.4) совпадает по структуре с биполяронным, рассмотренным в [Лахно 2010, 2013, 2015], [Lakhno 2012], [Каширина 2012]. Повторяя расчет, проведенный в этих работах для биполярона в пределе сильной связи, для энергии основного состояния из (15.4) получим:

$$E = \Delta E + 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 + \bar{T} + \bar{U}, \quad (15.7)$$

$$|\psi(r)|^2 = (2/\pi l^2)^{3/2} \exp(-2r^2/l^2), \quad (15.8)$$

$$f_k = \pm c(V_k/\hbar\omega_0) \exp(-k^2/a^2), \quad (15.9)$$

где знак «+» в (15.9) относится к случаю $m_1 < m_2$, а знак «-» к случаю $m_1 > m_2$; a , l , c – вариационные параметры, входящие в вариационные функции ψ и f_k , ΔE – так называемая энергия отдачи [Лахно 2010, 2013, 2015], [Lakhno 2012], [Каширина 2012].

Подставляя (15.8), (15.9) в (15.7) для энергии основного состояния, получим выражение:

$$E = 0,633 \frac{\hbar^2 a^2}{M} - \frac{e^2}{\sqrt{2\pi\tilde{\epsilon}}a} \left(\frac{1}{\sqrt{\frac{l^2 m_2^2}{8M^2} + \frac{1}{a^2}}} - \frac{1}{\sqrt{\frac{l^2 m_1^2}{8M^2} + \frac{1}{a^2}}} \right)^2 + \frac{3\hbar^2}{2\mu l^2} - 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{e^2}{\epsilon_\infty l}, \quad (15.10)$$

в котором минимизация по c уже проведена.

Отметим, что выражение (15.10) дает решение двухчастичной задачи с разными массами и в случае отталкивания между частицами, если изменить знак «-» на «+» в круглой скобке в (15.10) и перед последним членом в правой части (15.10). В этом случае при $m_1 = m_2$ и $a = 8/(\sqrt{2}l)$ это

выражение перейдет в полученное для биполярона в работе [Лахно 2010].

Выражение (15.10) получено для случая сильной связи, когда $a \rightarrow \infty$. Можно, однако, показать, что $E = E(l, a)$, не имеет минимума в этом пределе. Единственный минимум, который имеет $E(l, a)$ соответствует значениям $l = (3\sqrt{\pi/8}\hbar^2\varepsilon_\infty)/(\mu e^2)$, $a = 0$, $E_{\min} = -(4/3\pi)\mu e^4/\hbar^2\varepsilon_\infty^2$, которые отвечают случаю свободного экситона.

Таким образом, наше исходное предположение, сделанное при выводе (15.10), о существовании фононного вклада в энергию экситона в случае сильного ЭФВ оказалось ошибочным. Полученный результат свидетельствует о том, что искомый фононный вклад в энергию экситона, что соответствует поляризующемуся экситону, может быть отличным от нуля только при конечных значениях a , то есть при конечных значениях константы ЭФВ.

Отсюда следует, что при достаточно больших значениях констант ЭФВ электронов и дырок, когда энергия поляронного экситона близка к энергии свободного экситона, энергетически более выгодным может стать распад экситона на два отдельных полярона с энергиями E_p^e и E_p^h для электрона и дырки соответственно.

Условием устойчивости экситонов относительно такого распада является выполнение неравенства:

$$|E^{\text{exc}}| \geq |E_p^h| + |E_p^e|. \quad (15.11)$$

В случае сильной связи с использованием выражений для энергии свободного экситона $E^{\text{exc}} = -\mu e^4/2\varepsilon_\infty^2\hbar^2$ и ТИ-поляронов:

$$E_p^{e,h} = -0,06286m_{1,2}e^4/\tilde{\varepsilon}^2\hbar^2 \quad [\text{Лахно } 2010, 2013, 2015], \quad [\text{Lakhno } 2012],$$

[Каширина 2012] область устойчивости экситона, согласно (15.11) будет определяться условием:

$$0,5 - 0,5\sqrt{1 - 0,5\varepsilon_\infty^2/\tilde{\varepsilon}^2} < m_{1,2}/M < 0,5 + 0,5\sqrt{1 - 0,5\varepsilon_\infty^2/\tilde{\varepsilon}^2}. \quad (15.12)$$

Из (12) следует, что для выполнения условия стабильности экситона величина статической диэлектрической проницаемости ϵ_0 должна быть меньше величины $3.4\epsilon_\infty$.

Обратим также внимание на то, что функционал (15.10) при стремлении какой-либо из масс к бесконечности не переходит в функционал F-центра, поскольку такой переход отвечал бы потере трансляционной инвариантности исходной системы. Как было показано в Гл. 1, раздел 13, свободный ТИ полярон будет захватываться кулоновским притягивающим зарядом F-центра, только при некотором критическом значении статической диэлектрической постоянной. Соответственно, в случае свободных электронных и дырочных ТИ поляронов такой захват с образованием экситонного состояния будет происходить только при выполнении условия (12).

Спектр ТИ-экситона. Для нахождения спектра гамильтониана (15.3) будем искать решение задачи (15.3) в виде:

$$\Psi = |\psi(r)\rangle |X(R, \{a_k\})\rangle. \quad (15.13)$$

Тогда среднее по $|\psi(r)\rangle$ значение гамильтониана (15.3) будет иметь вид:

$$\hat{H} = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R + \sum_k \hbar \omega_0(k) a_k^+ a_k + \sum_k \bar{V}_k [e^{ikR} a_k + H.c.] + \bar{T} + \bar{U}, \quad (15.14)$$

который с точностью до постоянных \bar{T} и \bar{U} и замены V_k на \bar{V}_k , определяемой (15.4), совпадает с гамильтонианом полярона. Ниже будем полагать $\hbar=1$.

Следуя [Gerlach 1999], выберем волновую функцию $|X\rangle$, входящую в (15.13), в трансляционно-инвариантном виде:

$$|X(\mathbf{P})\rangle = \left[c_p e^{i\mathbf{P}\mathbf{R}} + \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{k_1, \dots, k_N} c_{\mathbf{P}, k_1, \dots, k_N} \cdot e^{i(\mathbf{P}-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2-\dots-\mathbf{k}_N)\mathbf{R}} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ \dots a_{k_N}^+ \right] |0\rangle, \quad (15.15)$$

где c_p и $c_{\mathbf{P}, k_1, \dots, k_N}$ – нормировочные постоянные, $|0\rangle$ – вакуумная волновая функция, \mathbf{P} – вектор собственных значений оператора полного импульса:

$$\hat{P} = -i\partial / \partial \mathbf{R} + \sum_{i=1}^{\infty} \mathbf{k}_i a_{k_i}^+ a_{k_i}. \quad (15.16)$$

Так как оператор полного импульса (15.16) коммутирует с гамильтонианом \bar{H} , то волновая функция $|X(\mathbf{P})\rangle$ одновременно является их собственной функцией:

$$\begin{aligned}\hat{H}|X(\mathbf{P})\rangle &= E(\mathbf{P})|X(\mathbf{P})\rangle, \\ \hat{P}|X(\mathbf{P})\rangle &= P|X(\mathbf{P})\rangle.\end{aligned}\quad (15.17)$$

Пусть $|X(\mathbf{P})\rangle$ является волновой функцией основного состояния. Тогда, согласно [Gerlach 1999], волновая функция однофононного возбужденного состояния $|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle$

$$|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle = a_{k_j}^+ |X(\mathbf{P})\rangle, \quad (15.18)$$

где \mathbf{K}_j имеет смысл полного импульса в j -ом возбужденном состоянии, будет обладать свойствами:

$$\begin{aligned}\hat{P}|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle &= \mathbf{K}_j|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle = (\mathbf{P} + \mathbf{k}_j)|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle, \\ \hat{H}|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle &= \varepsilon(\mathbf{K}_j)|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle = (E(\mathbf{P}) + \omega_{k_j})|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle = (E(\mathbf{K} - \mathbf{k}_j) + \omega_{k_j})|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle.\end{aligned}\quad (15.19)$$

Таким образом, спектр возбужденных состояний имеет вид:

$$\varepsilon(\mathbf{K}) = E(\mathbf{K}_j - \mathbf{k}_j) + \omega_0(\mathbf{k}_j), \quad \omega_0(\mathbf{k}_j) = \omega_{k_j}. \quad (15.20)$$

Относительно величины $E(\mathbf{K}_j - \mathbf{k}_j)$ в [Gerlach 1999] было показано:

$$E(\mathbf{K}_j - \mathbf{k}_j) \leq E(0) + (\mathbf{K}_j - \mathbf{k}_j)^2 / 2M. \quad (15.21)$$

В действительности, согласно [Lakhno 2018], в этом случае вместо неравенства в (15.21) имеет место точное равенство, и при $\mathbf{K}_j = 0$ спектр имеет вид:

$$\varepsilon(\mathbf{k}_j) = E(0) + \omega_0(\mathbf{k}_j) + \mathbf{k}_j^2 / 2M. \quad (15.22)$$

Отметим, что в общем случае волновая функция возбужденного состояния, содержащего N фононов, имеет вид:

$$|\psi_{k_1, \dots, k_N}\rangle = a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ \dots a_{k_N}^+ |X(\mathbf{P})\rangle, \quad (15.23)$$

для неё выполняется неравенство:

$$\varepsilon(k_1, \dots, k_N) \leq E(0) + \sum_{i=1}^N \omega_0(\mathbf{k}_i) + (\mathbf{K} - \mathbf{k}_1 - \dots - \mathbf{k}_N)^2 / 2M, \quad (15.24)$$

где \mathbf{K} – полный импульс, соответствующий N -фононным возбуждениям.

Отметим также, что в случае экситона, когда имеется набор электронных возбуждений, нумеруемых индексом n (под n можно понимать набор квантовых чисел), вместо (15.22) получим:

$$\varepsilon_1(k=0) = E_1(0) = E^{\text{exc}} \quad (15.25)$$

$$\varepsilon_n(k \neq 0) = E_n(0) + \omega_0(\mathbf{k}) + \mathbf{k}^2/2M, \quad n = 1, 2, \dots$$

Особенности поглощения и излучения света ТИ-экситонами.

Рассмотрим случай оптических фононов, когда $\omega_0(\mathbf{k})$ не зависит от \mathbf{k} , то есть случай полярных кристаллов. Для прямых экситонов, согласно (15.25), помимо обычного дискретного спектра $E_n(0)$ имеется квазинепрерывный спектр с энергиями $E_n(0) + \omega_0 + k^2/2M$, который делает различимым спектр $E_n(0)$ только при условии $\omega_0 > |E_1(0) - E_2(0)|$. При выполнении условия:

$$|\varepsilon_1 - \varepsilon_{n_c+1}| > \omega_0 > |\varepsilon_1 - \varepsilon_{n_c}| \quad (15.26)$$

различимыми будут только n_c первых уровней экситона. Этот результат можно использовать для исследования мягких фононных мод, связанных со структурными фазовыми переходами в кристаллах, например в купратных сверхпроводниках. Так, если вдали от фазового перехода условие (15.26) выполняется для $n_c = 2$, то оптический переход экситона из основного в первое возбужденное состояние будет давать вклад в поглощение. В точке фазового перехода, когда $\omega_0 \approx 0$, этот вклад будет отсутствовать, поскольку все дискретные уровни экситона $E_n(0)$ попадают в квазинепрерывный спектр.

Как указано в [Лакно 2010, 2013, 2015], [Lakno 2012], [Каширина 2012], спектр возбуждений (15.25) можно трактовать как спектр перенормированных ЭФВ фононов, которые представляют собой исходный фонон, с которым связаны электрон и дырка. Рассеяние такими фононами света с частотой ν будет приводить к появлению в рассеянном свете сателлитных частот $\nu_{n,k,+}^{\text{exc}} = \nu + |\varepsilon_n(k)|$ и $\nu_{n,k,-}^{\text{exc}} = \nu - |\varepsilon_n(k)|$.

Таким образом, в зависимости от величин входящих в эти выражения параметров возможен более сложным образом устроенный спектр поглощения и излучения ТИ-экситона по сравнению со спектром свободного экситона. Так, например, при выполнении условия (15.26) с $n_2 = 2$ возможно поглощение (испускание) света без изменения главного квантового числа экситона n . В этом случае кривая поглощения (излучения) будет иметь характерное двугорбое распределение интенсивности с максимумом при $\nu_{n,k,\pm}^{exc} \approx \nu \pm \omega_0$ [Snoke 2014].

Как и биполярны, ТИ-экситоны, будучи бозонами, могут испытывать бозе-конденсацию, которая была предсказана в работах [Келдыш 1964, 1968]. В отличие от биполяронного бозе-газа, к которому применимо статистически равновесное описание, для экситонного газа, находящегося в квазиравновесном фотовозбужденном состоянии, такое описание может быть применимо только для долгоживущих экситонных состояний, которые могут реализоваться в полуметаллах, бесщелевых полупроводниках, системах наноточек или в непрямых полупроводниках.

В работе [Kogan 2017] экситонную конденсацию, по-видимому, удалось наблюдать в полуметаллическом соединении TiSe_2 . Ввиду того, что ТИ-экситонный гамильтониан (15.4) аналогичен ТИ-биполяронному, все результаты, полученные при статистическом описании ТИ-биполяронного газа применимы к случаю ТИ-экситонного газа. В частности, для температуры бозе-конденсации ТИ-экситонного газа получим [Lakhno 2018]:

$$T_c(\omega_0) = (F_{3/2}(0)/F_{3/2}(\omega_0/T_c))^{2/3} T_c(0),$$

$$T_c(0) = 3,31 \hbar^2 n_{exc}^{2/3} / M, \quad F_{3/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{t^{1/2} dt}{e^{t+x} - 1},$$

где n_{exc} – концентрация ТИ-экситонов. Соответственно, фазовый переход в бозе-конденсатную экситонную фазу должен быть второго рода со скачком теплоемкости при переходе.

Заключение. В данном разделе дан ответ на фундаментальный вопрос о роли поляронных эффектов в физике экситонов. Несмотря на то что важная роль ЭФВ для экситонов в полярных средах была установлена в большом числе экспериментов, вопрос, почему в этих условиях водородоподобная модель оказывается справедливой, вплоть до настоящего времени оставался открытым [Baranowski 2020]. В настоящем разделе показано, что в случае экситон-фононного взаимодействия, описываемого гамильтонианом Фрёлиха, водородоподобная модель оказывается применимой, если энергия перехода в возбужденное состояние не превышает энергию оптического фонона.

Модель полярона Пекара-Фрёлиха является неизменным компонентом широкого круга проблем, связанных с описанием свойств частицы, взаимодействующей с бозонным резервуаром. Исходно введенная для описания поведения электронов, взаимодействующих с фононами в кристаллах, эта модель нашла применение в таких разных областях, как сильно коррелированные электронные системы, квантовая информация, физика высоких энергий. В последнее время она активно используется для описания примесных атомов. Полученные в работе результаты, в частности, объясняют четко различимую структуру высоковозбужденных (ридберговских) атомов в окружении бозе-конденсата [Camargo 2018].

В заключение отметим, что как в теории полярона, так и в теории экситона, взаимодействующего с фононами, широко распространено мнение о возможности самозахваченных поляронных или экситонных состояний. Так, например, по аналогии с поляроном, самозахваченные экситонные состояния рассматривались в работах [Дыкман 1988, 1953, 1952], [Пекар 1979], [Sumi 1977], [Shimamura 1983], [Song 1996]. В них считалось, что при превышении константами ЭФВ некоторого критического значения экситон захватывается создаваемым им

самосогласованным потенциалом, приводя к возможности аннигиляции электрона и дырки и исчезновению экситона. Считалось также, что в случае очень сильного ЭФВ энергия деформированной экситоном решетки может превосходить энергию экситонов в жесткой решетке. Изменение энергии таких деформированных экситонов, будучи отрицательным по отношению к экситонам в жесткой решетке, может сделать выгодным самопроизвольное образование экситонов в кристаллах с малой величиной щели, например в бесщелевых полярных полупроводниках (экситонная материя [Veta 1986], [Хакен 1980]).

Полученные в работе результаты исключают возможность образования самозахваченных экситонных состояний в трансляционно-инвариантных системах. Выводы же о возможности в них самозахваченных экситонов основаны либо на плохом выборе пробных вариационных функций, либо на ошибочных вычислениях с использованием таких функций.

Глава 2. Полярон большого радиуса Холстейна и проблема спонтанного нарушения симметрии

Построена трансляционно-инвариантная теория для холстейновского полярона большого радиуса, энергия которого ниже, чем найденная Холстейном. Трансляционно-инвариантному решению соответствует делокализованная волновая функция. Сделан вывод об отсутствии спонтанного нарушения симметрии в рассматриваемой системе.

На основе модели Холстейна-Хаббарда рассмотрена возможность образования биполаронных состояний в дискретных молекулярных цепочках. Рассчитана фазовая диаграмма, определяющая стабильность биполаронных состояний в таких цепочках.

1. Введение

В предыдущей главе был рассмотрен вопрос о том, должно ли решение задачи обладать той же симметрией, что и гамильтониан. В данной главе мы рассмотрим одномерный случай ввиду его большой актуальности. В классической одномерной решётке (молекулярная цепочка) обладающий трансляционной симметрией блоховский электрон будет всегда терять исходную симметрию, если допустить возможность деформации такой решётки электроном. Этот вопрос в случае одномерного молекулярного кристалла был впервые рассмотрен в работе Холстейна [Holstein 1959]. Если атомы решётки рассматривать квантовомеханически, то сделанное утверждение уже не будет справедливым. В квантовой решётке симметрия электрон-фононной системы сохраняется, если взаимодействие электрона с решёткой, определяемое константой взаимодействия g , не слишком сильное. При величине g , превосходящей некоторое критическое значение, согласно [Holstein 1959], симметрия нарушается и образуется локализованное самозахваченное состояние. Утверждение [Holstein 1959] о том, что в пределе сильной связи

непрерывно образуется самозахваченное поляронное состояние, противоречит, однако, тому факту, что полный импульс системы электрона и фононов в идеальной цепочке, обладающей трансляционной симметричной решёткой, должен сохраняться. Поскольку полный импульс системы коммутирует с гамильтонианом, то оператор импульса и оператор гамильтониана должны иметь общий набор собственных функций. Однако оператор полного импульса имеет в качестве собственных функций плоские волны, т.е. делокализованные состояния, в то время как оператору гамильтониана в пределе сильной связи соответствуют локализованные волновые функции самозахваченного состояния. Анализ этого противоречия были посвящены работы [Gerlach 1988, 1991], [Löwen 1988], в которых было показано, что для всех значений константы связи состояния должны быть делокализованы. В случае полярона Пекара-Фрёлиха такие решения в пределе сильной связи были изучены в предыдущей главе. В частности, было показано, в пределе сильной связи делокализованные состояния обладают более низкой энергией, чем нарушающие симметрию локализованные состояния полярона.

В данной главе мы применим подход [Тулуб 1961] к задаче о поляроне Холстейна сильной связи большого радиуса [Holstein 1959]. Будет показано, что в этом случае, как и в случае полярона Пекара-Фрёлиха, в пределе больших g минимум достигается в классе делокализованных волновых функций.

2. Полярон Холстейна в пределе сильной связи. Нарушенная трансляционная инвариантность

Согласно [Lakhno 2006], гамильтониан Холстейна в одномерной молекулярной цепочке в континуальном пределе имеет вид (Приложение Ж):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \sum_k V_k (a_k e^{ikx} + a_k^+ e^{-ikx}) + \sum_k \hbar \omega_k^0 a_k^+ a_k, \quad (2.1)$$

$$V_k = \frac{g}{\sqrt{N}}, \quad \omega_k^0 = \omega_0,$$

где a_k^+ , a_k – операторы фононного поля, m – эффективная масса электрона, ω_0 – частота оптического фонона, N – число атомов в цепочке.

Для дальнейшего полезно привести некоторые результаты, относящиеся к гамильтониану (2.1) в пределе сильной связи. В теории Холстейна [Holstein 1959], как и в теории Пекара [Пекар 1951], считается, что волновая функция основного состояния имеет вид:

$$\Psi = \psi(x) \Phi(q_1, \dots, q_k, \dots), \quad (2.2),$$

где $\psi(x)$ – волновая функция электрона, не зависит от фононных переменных, Φ – фононная волновая функция. Энергия основного состояния определяется из условия минимума полной энергии E :

$$E = T - \Pi, \quad T = \frac{1}{2m} \int |\nabla \psi|^2 dx, \quad \Pi = \frac{g^2 a}{\hbar \omega_0} \int |\psi|^4 dx, \quad (2.3)$$

где a – постоянная решётки. Введём масштабное преобразование волновой функции $\psi(x)$, сохраняющее её нормировку:

$$\psi(x) = |\xi|^{1/2} \tilde{\psi}(|\xi|x). \quad (2.4)$$

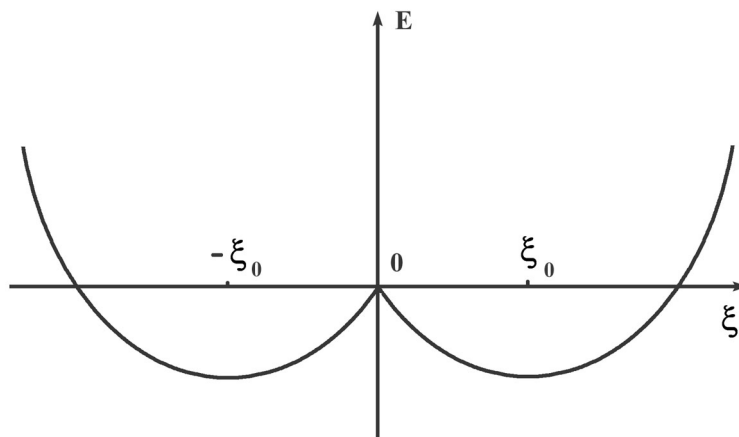


Рис. 2.1 Зависимость $E(\xi)$ от параметра ξ .

В результате с использованием (2.3), из (2.2) получим:

$$E(\xi) = |\xi|^2 T - |\xi| \Pi. \quad (2.5)$$

На рис. 2.1 показана зависимость $E(\xi)$.

Рис. 2.1 иллюстрирует причину спонтанного нарушения глобальной симметрии исходно симметричного делокализованного состояния, состоящей в том, что этому состоянию ($\xi = 0$) отвечает максимум функционала E . Минимуму функционала в точках $\pm \xi_0$ соответствуют энергия и волновая функция $\psi(x)$:

$$E(\pm \xi_0) = -\frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{mr^2}, \quad \psi(x) = \pm \left(\sqrt{2r} \operatorname{ch} \frac{x - x_0}{r} \right)^{-1}, \quad r = \frac{\hbar^3 \omega}{mg^2 a}, \quad (2.6)$$

где x_0 соответствует положению центра поляронной ямы в минимуме энергии.

В окрестности этого минимума можно осуществлять квантование, восстанавливая тем самым нарушенную симметрию. При таком восстановлении автоматически появляется голдстоуновский бозон (нулевая фононная мода).

Подобный подход реализуется в моделях элементарных частиц [Svartholm 1969]. Так, например, в стандартной модели осуществляется спонтанное нарушение не глобальной, как в рассмотренном случае, а локальной симметрии калибровочных полей. При этом голдстоуновские бозоны не возникают, а поля становятся массивными.

Во всех случаях в этих моделях симметрия спонтанно нарушается, а заново восстановленная оказывается ниже исходной. Ниже мы покажем на примере модели Холстейна, что такой подход может приводить к неверным результатам.

3. Трансляционно–инвариантная теория

В предыдущем разделе были изложены результаты теории сильной связи с нарушенной трансляционной инвариантностью. В этом разделе изложен общий трансляционно-инвариантный подход,

воспроизводящий результаты [Тулуб 1961] применительно к гамильтониану Холстейна.

Для того чтобы сделать описание трансляционно-инвариантным, исключим координаты электрона из гамильтониана (2.1) посредством преобразования Гейзенберга (2.2) и используем преобразование Ли, Лоу и Пайнса (3.1) Гл. 1. Повторяя расчёт раздела 3 предыдущей главы вместо (3.12) Гл. 1, получим:

$$\det\left|(s - \omega_k^2)\delta_{kk'} - z_k z_{k'}\right| = \prod_k \left(s - \omega_k^2\right) \left(1 - \sum_k \frac{z_{k'}^2}{s - \omega_{k'}^2}\right). \quad (3.1)$$

Соответственно, величина $\Delta(s)$ равна:

$$\Delta(s) = \left(1 - \sum_k \frac{z_{k'}^2}{s - \omega_{k'}^2}\right). \quad (3.2)$$

В результате для $D(s)$ вместо (3.19 глава 1) получим:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_k (v_k - \omega_k). \quad (3.3)$$

$$\Delta(s) = D(s), \quad D(s) = 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 \omega_k}{s - \omega_k^2} dk. \quad (3.4)$$

С использованием (3.4) в частном случае $\vec{P} = 0$ получим выражение для энергии основного состояния оператора H_0 :

$$E = -\frac{1}{8\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln D(s) + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k f_k^2. \quad (3.5)$$

Выражение для полной энергии E , определяемое (3.5), применимо для всего диапазона изменения константы связи g . В следующем разделе мы рассмотрим случай слабой связи.

4. Случай слабой связи

Величины f_k в выражении для полной энергии E должны находиться из условия минимума: $\delta E / \delta f_k$, которое приводит к следующему интегральному уравнению для определения f_k :

$$f_k = -\frac{V_k}{(1 + k^2 / 2\mu_k)}, \quad \mu_k^{-1} = \frac{\omega_k}{2\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \frac{1}{(s - \omega_k^2) D(s)}. \quad (4.1)$$

В случае слабой связи уравнения (4.1) можно решать по теории возмущений. В первом приближении при $g \rightarrow 0$, $D(s) = 1$ и величина μ_k^{-1} равна:

$$\mu_k^{-1} = \frac{\omega_k}{2\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \frac{1}{(s - \omega_k^2)} = 1. \quad (4.2)$$

Соответственно, для f_k из (4.1) получим:

$$f_k = -\frac{V_k}{(1 + k^2/2)}. \quad (4.3)$$

Таким образом, в первом приближении по g :

$$\begin{aligned} E &= \Delta E + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k f_k^2, \\ \Delta E &= -\frac{1}{8\pi i} \oint_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln D(s), \\ \ln D(s) &\approx -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 \omega_k}{s - \omega_k^2} dk. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Переходя в (4.4) от суммирования к интегрированию по формуле: $\sum_k = \frac{1}{2\pi} \int dk$ и подставляя (4.3) в (4.4), с учётом выражения (2.1) для V_k из (4.4) получим известное выражение для энергии электрона в пределе слабой связи:

$$E = -g^2 \sqrt{ma^2 / 2\hbar^3 \omega_0}, \quad (4.5)$$

которое мы записали в размерных единицах.

Для расчёта следующих членов разложения энергии по степеням g можно воспользоваться подходом, разработанным в работах [Тулуб 1961], [Porch 1967].

5. Случай сильной связи

Перейдём теперь к рассмотрению сильной связи. Для выяснения характера решения в этой области обратимся к аналитическим свойствам функции $D(s)$ (3.4). Представим с этой целью функцию $D(s)$ в виде:

$$D(s) = D(1) + \frac{s-1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 \omega_k}{(\omega_k^2 - 1)(\omega_k^2 - s)} dk. \quad (5.1)$$

Где $D(1)$ – значение $D(s)$ при $s=1$:

$$D(1) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 \omega_k}{\omega_k^2 - 1} dk \equiv 1 + Q. \quad (5.2)$$

Из (5.1), (5.2) следует, что $D^{-1}(s)$ удовлетворяет интегральному уравнению:

$$\frac{1}{D(s)} = \frac{1}{1+Q} + \frac{s-1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 \omega_k}{(s - \omega_k^2)(\omega_k^2 - 1) |D(\omega_k^2)|^2} dk, \quad (5.3)$$

откуда получаем:

$$\Delta E = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 \omega_k dk}{2(1+Q)} + \frac{1}{4\pi^2} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 p^2 f_p^2 \omega_p (\omega_k \omega_p + \omega_k (\omega_k + \omega_p) + 1)}{(\omega_k + \omega_p)^2 (\omega_p^2 - 1) |D_+(\omega_p^2)|^2} dp dk, \quad (5.4)$$

$$D_{\pm}(\omega_p^2) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 \omega_k dk}{\omega_k^2 - \omega_p^2 \pm i\epsilon}. \quad (5.5)$$

Для расчёта энергии полярона в пределе сильной связи выберем пробную функцию f_k в виде:

$$f_k = N g e^{-k^2 / 2a^2}, \quad (5.6)$$

где N и a – вариационные параметры. В результате для величины ΔE получим:

$$\Delta E = \frac{a^2}{32} (1 + 2q_T), \quad (5.7)$$

где q_T – интеграл Тулуба [Тулуб 1961]:

$$q_T = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{e^{-y^2} (1 - \Omega(y)) dy}{v^2(y) + \pi y^2 e^{-2y^2} / 4},$$

$$\Omega(y) = 2y^2 \left\{ (1 + 2y^2) y e^{y^2} \int_y^{\infty} e^{-t^2} dt - y^2 \right\}, \quad (5.8)$$

$$v(y) = 1 - y e^{-y^2} \int_0^y e^{t^2} dt - y e^{y^2} \int_y^{\infty} e^{-t^2} dt,$$

для которого с высокой точностью в [Тулуб 1961] было получено приближённое значение: $q_T \approx 5.75$.

С использованием (3.5), (5.7), (5.6) для энергии основного состояния получим:

$$E = \Delta E + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k f_k^2 \approx \frac{12.5}{32} a^2 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(1 - \frac{N}{2\sqrt{2}} \right) g^2 a N. \quad (5.9)$$

Минимизация энергии основного состояния по параметрам a и N даёт для энергии основного состояния полярона следующую величину:

$$E \approx -0.2037 \frac{ma_0^2}{\hbar^2} \frac{g^4}{\hbar^2 \omega_0^2}, \quad (5.10)$$

которую мы привели в размерных единицах. Полученный результат фундаментален, поскольку полученное значение энергии лежит ниже, чем холстейновского полярона (2.6).

Выбор пробной функции в виде (5.6) приводит к выполнению теоремы вириала: $2T = \Pi$, $W = 3E$, где W – энергия электрона. Отметим, что само по себе выполнение теоремы вириала ничего не говорит о том, нарушена симметрия в рассматриваемом состоянии или нет, и в случае холстейновского полярона теорема вириала выполняется как в случае нарушенной симметрии (раздел 2), так и в состоянии с трансляционной симметрией, рассмотренной в этом разделе.

Приравнивая значения энергии слабой связи (4.5) и сильной связи (5.10), можно, как это обычно делается в теории полярона, получить значение безразмерной константы связи $g_c = g/\hbar\omega_0$, при котором происходит переход от слабой к сильной связи:

$$g_c \approx 1.864 \sqrt{\hbar/ma_0^2\omega_0}. \quad (5.11)$$

Подчеркнём, однако, что никакого скачкообразного перехода от слабой и промежуточной силы связи к режиму сильной связи не происходит. Состояние полярона для всех значений константы связи остаётся делокализованным, и $E(g)$ является аналитической функцией g [Gerlach 1988], [Löwen 1988]. Этот вывод автоматически вытекает также из аналитических свойств функции $D(s)$.

6. ТИ-полярон Холстейна и проблема квантования в окрестности классического решения

Возвращаясь к исходной гипотезе Ландау о потере симметрии электронной волновой функции вследствие образования электроном самозахваченного локализованного состояния можно констатировать её

ошибочность. Это видно уже из гамильтониана (2.1), который после гейзенберговского канонического преобразования (2.2) Гл. 1 вообще не содержит электронных координат. Отсюда следует, что общий вид решения уравнения Шрёдингера для гамильтониана (2.1):

$$\Psi = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(P - \sum_k \hbar k a_k^+ a_k\right)x\right\} \Lambda_0\{a_k\}|0\rangle, \quad (6.1)$$

где $\Lambda_0\{a_k\}$ функционал операторов поля $|0\rangle$ – вакуумная волновая функция, представляет собой плоские волны. Существенно, что электронные и фононные переменные, в отличие от случая нарушенной симметрии (раздел 2), в (6.1) не разделяются.

Согласно рис. 2.1, с классической точки зрения, такое решение является неустойчивым: любое бесконечно малое изменение классической орбиты в этой точке приведёт к нарастанию амплитуд отклонения траектории электрона, приводя к их конечным значениям. Квантово-механическое рассмотрение расширяет пространство допустимых состояний и приводит к возможности устойчивых колебаний вблизи классически неустойчивой точки $\xi = 0$.

У квантово-механических состояний, определяемых решением (6.1), отсутствует их классический аналог. В частности, из (6.1) следует, что для найденного решения понятие локализованной в пространстве классической поляронной ямы отсутствует, т.к. плоская волна не может поддерживать конечную величину смещений всех атомов из своих положений равновесия.

Неприменимость адиабатического приближения (2.2) в трансляционно-инвариантных системах можно также качественно проиллюстрировать следующим рассуждением. Критерием применимости адиабатического приближения является малость отношения к m/M , где M – масса атома решётки. При $m/M \rightarrow 0$, т.е. когда масса атома стремится к бесконечности, его можно рассматривать как классическую частицу. Соответственно, поле смещений можно

рассматривать как классическое. Тогда разделение движений, определяемое (2.2), становится физически очевидным: локализованный электрон, описываемый волновой функцией $\psi(x)$, совершая финитное движение, быстро осциллирует в потенциальной яме, и тяжёлые атомы воспринимают только его усреднённое движение, не успевая подстраиваться в каждый момент времени к положению электрона в пространстве. Другими словами, электрон представляется в виде статического заряда, распределённого с плотностью $|\psi(x)|^2$.

Физическая ситуация изменяется, если электрон делокализован. В этом случае он совершает инфинитное движение, давая возможность за бесконечно большое время даже бесконечно тяжёлому атому сместиться на конечную величину к моменту своего нахождения вблизи этого атома. Таким образом, адиабатическое приближение (2.2) в этом случае оказывается несправедливым. Соответственно, неприменимым становится представление о поле смещений как о классическом.

Тот факт, что делокализованное решение обладает более низкой энергией по сравнению с локализованным, приводит к многочисленным физическим следствиям, аналогичным обсуждавшимся в предыдущей главе в случае полярона Пекара-Фрёлиха. Прежде всего, по аналогии с электроном в идеальной жёсткой решётке, в которой блоховские электроны являются сверхпроводящими, в деформируемой решётке при равной нулю температуре сверхпроводящими будут делокализованные поляроны, описываемые волновой функцией (6.1). Попытки разделить электрон-фононную систему на полярон и фононное поле, в котором происходит движение полярона с целью расчёта его подвижности [Мельников 1974], в силу (6.1), для трансляционно-инвариантного полярона оказывается невозможным. При наличии в решётке дефектов трансляционно-инвариантные поляроны не будут ими захватываться, если выигрыш в энергии, обусловленный локализацией полярона на дефекте, не будет больше, чем выигрыш в энергии при образовании

трансляционно-инвариантного полярона. В этом состоит качественное отличие трансляционно-инвариантных поляронов от холстейновских поляронов со спонтанно нарушенной симметрией, поскольку последние будут локализовываться на дефекте при сколь угодно малой величине потенциала ловушки.

Ввиду того, что глобальная симметрия для трансляционно-инвариантных поляронов сохраняется, голдстоуновские моды в их спектре будут отсутствовать, в то время как для холстейновского полярона нулевая мода в фононном спектре всегда будет присутствовать. Отметим также, что в случае трансляционно-инвариантных поляронов в фононном спектре будут отсутствовать локальные моды, возникающие при образовании холстейновского полярона [Мельников 1977], [Shaw 1978].

При этом значения перенормированных частот делокализованных фононных мод ν_k в случае трансляционно-инвариантных поляронов всегда лежат по энергии выше ω_k , в то время как для полярона сильной связи со спонтанно нарушенной симметрией они лежат ниже значения ω_k .

Вышеизложенные результаты свидетельствуют о том, что для получения делокализованных состояний, сохраняющих трансляционную инвариантность, вообще говоря, нет никакой необходимости устраивать спонтанное нарушение симметрии в исходном некантованном гамильтониане системы, т.е. нет необходимости в процедуре, предложенной Хиггсом для введения массы элементарных частиц [Higgs 1964]. Показано также, что исследование экстремумов соответствующего классического гамильтониана не в состоянии дать информацию о том, в окрестности какого экстремума следует решать квантовую задачу. В рассмотренном нами примере гамильтониана Холстейна таким экстремумом является максимум классического гамильтониана. Аналогичным образом дело обстоит и в случае полярона

Пекара-Фрѐлиха [Лакно 2010], [Lakhno Sol.St.Comm. 2012, 2013], [Каширина 2012].

7. Трансляционно-инвариантный биполярон в модели Холстейна

Вопрос о возможности сверхпроводимости в квазиодномерных системах – полимерах и биополимерах – давно привлекал внимание исследователей [Williams 1992], [Ishiguro 1998], [Toyota 2007], [Inzelt 2008], [Lebed 2008], [Altmore 2013]. В настоящее время в качестве одного из возможных механизмов сверхпроводимости рассматривается биполяронный механизм. Считается, что в трёхмерных системах биполяронный газ образует Бозе-конденсат, обладающий сверхпроводящими свойствами. Хорошо известно, что в одно- и двумерных системах условия для образования биполяронов более благоприятны, чем в трёхмерном случае. Основной проблемой в этом случае является то обстоятельство, что в одно- и двумерных системах Бозе-конденсация оказывается невозможной [Ginzburg 1968].

В предыдущей главе было введено представление о трансляционно-инвариантных поляронах и биполяронах. Такие квазичастицы при определённых условиях могут обладать сверхпроводящими свойствами даже в отсутствие их Бозе-конденсации. В главе 1 были рассмотрены трёхмерные трансляционно-инвариантные поляроны и биполяроны. В связи со сказанным выше представляет интерес рассмотреть условия образования трансляционно-инвариантных биполяронов в низкоразмерных системах. В данном разделе полученные выше результаты применяются к квазиодномерному случаю, отвечающему холстейновской модели полярона.

В предыдущем разделе была построена трансляционно-инвариантная теория 1D-полярона, основанная на гамильтониане Холстейна. В случае

двух электронов гамильтониан Холстейна в одномерном случае в континуальном пределе имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2m}\Delta_{x_1} - \frac{1}{2m}\Delta_{x_2} + \sum_k [V_k(e^{ikx_1} + e^{ikx_2})a_k + h.c.] + \sum_k \hbar\omega_k^0 a_k^+ a_k + U(x_1 - x_2),$$

$$V_k = \frac{g}{\sqrt{N}}, \quad \omega_k^0 = \omega_0, \quad (7.1)$$

где $U(x_1 - x_2)$ – энергия кулоновского отталкивания двух электронов, имеющая вид:

$$U(x_1 - x_2) = \Gamma\delta(x_1 - x_2), \quad (7.2)$$

где Γ – некоторая константа, $\delta(x)$ – дельта-функция.

В случае с нарушенной трансляционной инвариантностью состояние биполярона описывается локализованной волновой функцией $\Psi = \Psi(x_1, x_2)$ и в пределе сильной связи функционал полной энергии $\bar{H} = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ согласно [Kashirina 2010] определяется выражением:

$$\bar{H} = -\frac{1}{2m} \sum_{i=1,2} \langle \Psi | \Delta_{x_i} | \Psi \rangle - \sum_k \frac{V_k^2}{\hbar\omega_0} \langle \Psi | e^{ikx_1} + e^{ikx_2} | \Psi \rangle^2 + \langle \Psi | U(x_1 - x_2) | \Psi \rangle. \quad (7.3)$$

Точное решение задачи (7.3) является сложной вычислительной задачей [Kashirina 2014] [Emin 1992]. Для целей данного раздела, однако, для иллюстрации свойств основного состояния с нарушенной симметрией воспользуемся прямым вариационным методом. С этой целью выберем пробную волновую функцию в виде $\Psi(x_1, x_2) = \varphi(x_1)\varphi(x_2)$. Отметим, что выбор пробной функции в таком виде соответствует точному решению задачи (7.3) в случае $U = 0$, т.е. в случае отсутствия кулоновского взаимодействия между электронами.

В результате для функционала энергии основного состояния из (7.3) получим:

$$\bar{H} = \frac{1}{m} \int |\nabla_x \varphi(x)|^2 dx - \left(\frac{4g^2 a_0}{\hbar\omega_0} - \Gamma \right) \int |\varphi(x)|^4 dx, \quad (7.4)$$

где a_0 – постоянная решётки. Вариация (7.4) по $\varphi(x)$ при условии нормировки приводит к уравнению Шрёдингера:

$$\frac{\hbar^2}{m} \Delta_x \varphi + 2 \left(\frac{4g^2 a_0}{\hbar \omega_0} - \Gamma \right) \varphi^2 |\varphi + W \varphi = 0, \quad (7.5)$$

решения которого имеют вид:

$$\varphi(x) = \pm \left(\sqrt{2r} \operatorname{ch} \frac{x - x_0}{r} \right)^{-1}, \quad r = \frac{2\hbar^2}{m \left(\frac{4g^2 a_0}{\hbar \omega_0} - \Gamma \right)}, \quad (7.6)$$

$$W = -\frac{1}{2} \left(\frac{4g^2 a_0}{\hbar \omega_0} - \Gamma \right)^2 \frac{m}{2\hbar^2}, \quad E_{bp} = -\frac{1}{6} \left(\frac{4g^2 a_0}{\hbar \omega_0} - \Gamma \right)^2 \frac{m}{2\hbar^2},$$

где x_0 – произвольная константа, $E_{bp} = \bar{H}$ – энергия основного состояния биполярона. Отметим, что энергия основного состояния полярона E_p даётся выражением (5.10).

Введём обозначение:

$$\gamma = \Gamma \hbar \omega_0 / a_0 g^2. \quad (7.7)$$

Из (7.6) следует, что для:

$$\gamma > 4 \quad (7.8)$$

существование биполярона невозможно. В случае:

$$2 < \gamma < 4 \quad (7.9)$$

метастабильное биполяронное состояние распадается на отдельные поляронные состояния. При

$$\gamma < 2 \quad (7.10)$$

биполяронное состояние будет стабильно.

Отметим, что выбор более сложных пробных функций не изменит качественной картины, изменяя только численные коэффициенты (7.8) - (7.10).

Ввиду произвольного положения центра масс биполярона x_0 обсуждаемое состояние биполярона обладает бесконечным вырождением. Любое сколь угодно малое возмущение решётки ведёт к устранению вырождения и локализации биполяронного состояния на дефекте с притягивающим потенциалом. Качественно отличная ситуация реализуется в случае трансляционно-инвариантного биполярона, рассматриваемого в следующем разделе.

8. Трансляционно-инвариантная теория биполярона

В системе центра масс гамильтониан (7.1) принимает вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_e}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu_e}\Delta_r + \sum_k 2V_k \cos \frac{kr}{2} (e^{ikR} + h.c.) + \sum_k \hbar\omega_k^0 a_k^+ a_k + U(r), \quad (8.1)$$

$$R = (x_1 + x_2)/2, \quad r = (x_1 - x_2), \quad M_e = 2m, \quad \mu_e = m/2.$$

В дальнейшем мы будем использовать единицы, полагая $\hbar = 1$, $\omega_0 = 1$, $M_e = 1$ (соответственно $\mu_e = 1/4$).

Координата центра масс R в гамильтониане (8.1) может быть исключена посредством канонического преобразования Гейзенберга:

$$\hat{S}_1 = \exp \left\{ -i \sum_k ka_k^+ a_k R \right\}. \quad (8.2)$$

В результате, преобразованный гамильтониан $\tilde{H} = \hat{S}_1^{-1} H \hat{S}_1$ примет вид:

$$\tilde{H} = -2\Delta_r + \sum_k 2V_k \cos \frac{kr}{2} (a_k^+ + a_k) + \sum_k a_k^+ a_k + U(r) + \frac{1}{2} \left(\sum_k ka_k^+ a_k \right)^2. \quad (8.3)$$

Из (8.3) следует, что точное решение проблемы биполярона определяется волновой функцией $\psi(r)$, зависящей только от относительных координат r , и, таким образом, автоматически является трансляционно-инвариантным.

Усредняя гамильтониан (8.3) по $\psi(r)$, для усреднённого гамильтониана получим:

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \bar{T} + \sum_k \bar{V}_k (a_k^+ + a_k) + \sum_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \left(\sum_k ka_k^+ a_k \right)^2 + \bar{U}, \\ \bar{V}_k &= 2V_k \langle \psi | \cos \frac{kr}{2} | \psi \rangle, \quad \bar{U} = \langle \psi | U(r) | \psi \rangle, \quad \bar{T} = -2 \langle \psi | \Delta_r | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Применяя к гамильтониану (8.4) преобразование Ли, Лоу и Пайнса:

$$\hat{S}_2 = \exp \left\{ \sum_k f_k (a_k - a_k^+) \right\}, \quad (8.5)$$

получим:

$$\tilde{\tilde{H}} = \hat{S}_2^{-1} \bar{H} \hat{S}_2, \quad \tilde{\tilde{H}} = H_0 + H_1, \quad (8.6)$$

где:

$$H_0 = \bar{T} + 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 + \frac{1}{2} \left(\sum_k kf_k \right)^2 + \bar{U} + H_{KB}, \quad (8.7)$$

$$H_{KB} = \sum_k \omega_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \sum_{k,k'} kk' f_k f_{k'} (a_k a_{k'} + a_k^+ a_{k'}^+ + a_k^+ a_{k'} + a_k a_{k'}^+), \quad (8.8)$$

$$H_1 = \sum_k (V_k + f_k \omega_k) (a_k + a_k^+) + \sum_{k,k'} k k' f_{k'} (a_k^+ a_k a_{k'} + a_k^+ a_{k'}^+ a_k) + \frac{1}{2} \sum_{k,k'} k k' a_k^+ a_{k'}^+ a_k a_{k'}, \quad (8.9)$$

$$\omega_k = \omega_0 + \frac{k^2}{2} + k \sum_{k'} k' f_{k'}^2. \quad (8.10)$$

Согласно Приложению А, вклад в энергию \hat{H}_1 обращается в ноль при соответствующем выборе собственной функции гамильтониана H_0 , приводящей квадратичную форму H_{KB} к диагональному виду. Диагонализация H_{KB} приводит к полной энергии добавки ΔE :

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_k (v_k - \omega_k) = -\frac{1}{8\pi i} \int_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln D(s), \quad (8.11)$$

где v_k – перенормированные взаимодействием с электроном фононные частоты. В рассматриваемом нами одномерном случае:

$$D(s) = 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k \omega_k}{s - \omega_k^2} dk. \quad (8.12)$$

Фигурирующий в (8.11) контур интегрирования C тот же, что и в главе 1.

Повторяя проведённые в разделе 3 вычисления, в рассматриваемом нами одномерном случае получим в пределе сильной связи для ΔE следующее выражение:

$$\Delta E = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 dk}{2(1+Q)} + \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 p^2 f_p^2 \omega_p (\omega_k \omega_p + \omega_k (\omega_k + \omega_p) + 1)}{(\omega_k + \omega_p)^2 (\omega_p^2 - 1) |D_+(\omega_p^2)|^2} dp dk, \quad (8.13)$$

$$D_+(\omega_p^2) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2 f_k^2 \omega_k dk}{\omega_k^2 - \omega_p^2 - i\varepsilon}.$$

В результате из (8.7), (8.8) для полной энергии биполярона E получаем следующее выражение:

$$E = \Delta E + 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 + \bar{T} + \bar{U}. \quad (8.14)$$

9. Вариационный расчёт энергии биполяронного состояния

Мы могли бы получить точные уравнения для определения энергии биполярона, варьируя выражение (8.14) по ψ и f_k . Полученные в результате решения такого уравнения величины ψ и f_k после

подстановки в выражение (8.14) определяют полную энергию биполярона E . Ввиду того, что нахождение решения уравнения, получаемого варьированием E , представляет большие сложности, воспользуемся вариационным подходом. С этой целью выберем в качестве пробных функций ψ и f_k в виде:

$$\psi(r) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{l}} e^{-r^2/l^2}, \quad (9.1)$$

$$f_k = -Nge^{-k^2/2a^2}, \quad (9.2)$$

где N, l, a – вариационные параметры. Подстановка (9.1), (9.2) в (8.14) после минимизации по N приводит к следующему выражению для определения E :

$$E_{bp} = \frac{ma_0^2}{\hbar^2} \frac{g^4}{\hbar^2 \omega_0^2} \min_{(x,y)} E(x,y;\gamma), \quad (9.3)$$

$$E(x,y;\gamma) \approx 2 \left(0.390625x^2 + \frac{2}{y^2} - \frac{4x}{\sqrt{\pi}(1+x^2y^2/16)} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\gamma}{y} \right). \quad (9.4)$$

Выражение для биполяронной энергии приведено в размерных единицах. Результаты минимизации функции $E(x,y,\gamma)$ по безразмерным параметрам x, y представлены на рис. 9.1 для различных величин параметра γ . Из рис. 9.1 следует, что, в отличие от биполярона с нарушенной симметрией (неравенство 7.8), трансляционно-инвариантный биполярон существует при всех значениях параметра γ .

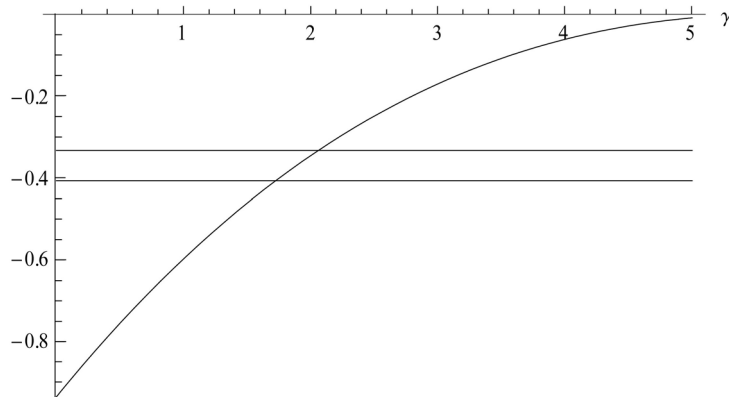


Рис. 9.1. Зависимость E_{\min} от γ .

В области

$$\gamma > 3.02 \quad (9.5)$$

трансляционно-инвариантный биполярон стабилен по отношению к его распаду на два отдельных холстейновских полярона, но остаётся нестабильным по отношению к его распаду на отдельные трансляционно-инвариантные поляроны.

Для

$$\gamma < \gamma_c = 2.775 \quad (9.6)$$

трансляционно-инвариантный биполярон стабилен относительно распада на два индивидуальных полярона. Заметим, что при $\gamma=0$ энергия ТИ-биполона равна $E_{bp} = -1,87104ma_0^2g^4/\hbar^4\omega_0^2$, т.е. лежит гораздо ниже, чем точное значение энергии биполона с нарушенной симметрией, которое, согласно (7.6), равно: $E_{bp} = -(4/3)ma_0^2g^4/\hbar^4\omega_0^2$. Энергия ТИ-биполона также лежит ниже вариационной оценки энергии биполона со спонтанно нарушенной симметрией (7.6) для всех значений γ [Kashirina 2014].

Безразмерные параметры x , y , входящие в (9.4), связаны с вариационными параметрами a , l (9.1), (9.2) соотношениями: $a = (2ma_0^2g^2/\hbar^3\omega_0)x$, $l = (\hbar^3\omega_0/2ma_0^2g^2)y$. Параметр l определяет характерный размер электронной пары, т.е. длину корреляции $L(\gamma)$, чья зависимость от γ определяется выражением:

$$L(\gamma) = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{\hbar\omega_0}{g^2} y_{\min}(\gamma). \quad (9.7)$$

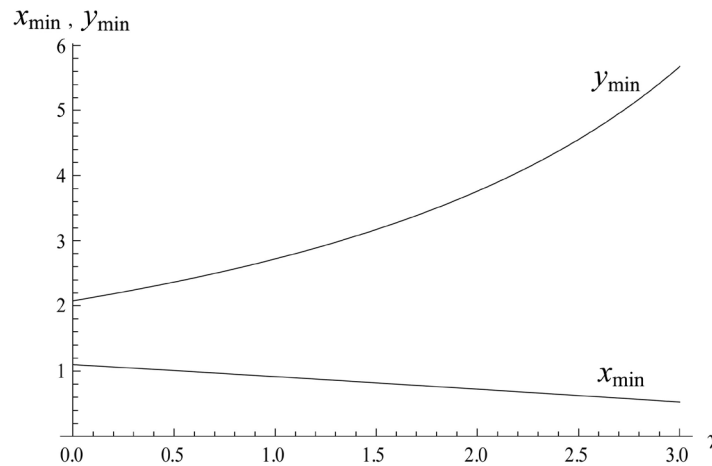


Рис. 9.2. Зависимость x_{\min} , y_{\min} от γ .

Зависимости y_{\min} и x_{\min} от γ представлены на рис. 9.2. Из рис. 9.2 следует, что корреляционная длина $L(\gamma)$ в области стабильности биполярона $0 < \gamma < \gamma_c$ не меняется сильно и для своего критического значения $\gamma_c = 2,775$ величина $L(\gamma)$ примерно втрое превосходит величину $L(0)$, т.е. корреляционную длину в отсутствие кулоновского отталкивания. Это качественно отличается от случая биполярона с нарушенной симметрией, для которого соответствующая величина, согласно (7.6), для $\gamma = \gamma_c$ обращается в бесконечность.

10. О возможности биполяронных состояний в дискретных цепочках

Для описания электронов в дискретной одномерной молекулярной цепочке используется модель Хаббарда, гамильтониан которой имеет вид [Holstein 1959] [Proville 1998]:

$$\hat{H} = \eta \sum_{(i,j),\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_j \hbar\omega \left(a_j^+ a_j + \frac{1}{2} \right) + \sum_j g \hat{n}_j (a_j^+ + a_j) + \sum_j U \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow}, \quad (10.1)$$

где $\hat{n}_{j\sigma} = c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma}$, $\hat{n}_j = \hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow}$, $c_{j\sigma}^+$, $c_{j\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона со спином σ на j -м сайте; η – матричный элемент перехода между ближайшими сайтами (i, j); g – константа взаимодействия электрона с колебаниями цепочки; U – параметр кулоновского отталкивания; $\hbar\omega$ – энергия колебаний осциллятора. Под сайтом в рассматриваемом случае понимается двухатомная молекула, рассматриваемая как осциллятор.

В одномерном случае, безотносительно к конкретному типу молекулярной цепочки, биполяронные состояния для гамильтониана (10.1) рассматривались в работе [Proville 1998]. Однако анализа устойчивости биполяронных состояний относительно распада на одиночные поляронные состояния в ней не проводилось.

Согласно [Proville 1998], основное состояние гамильтониана (10.1) – волновая функция вида:

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} c_{i\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ |0\rangle, \quad (10.2)$$

где $|0\rangle$ – вакуумная волновая функция, $\psi_{ij} = \psi_{ji}$, $\sum_{ij} |\psi_{ij}|^2 = 1$. В адиабатическом приближении, когда $1/4(\hbar\omega/2g)^4 \ll 1$, волновые функции ψ_{ij} удовлетворяют уравнению:

$$\eta(\Delta\psi)_{ij} + (-\kappa(\rho_i + \rho_j) + U\delta_{i-j})\psi_{ij} = W\psi_{ij}, \quad (10.3)$$

$$\rho_i = 1/2 \sum_k (|\psi_{ik}|^2 + |\psi_{ki}|^2),$$

где $\kappa = 4g^2/\hbar\omega$, Δ – дискретный оператор Лапласа:

$$(\Delta\psi)_{ij} = \psi_{i-1,j} + \psi_{i+1,j} + \psi_{i,j-1} + \psi_{i,j+1}.$$

Отметим, что при $\kappa = 0$, $U = 0$, $N \rightarrow \infty$, где N – число сайтов в цепочке, спектр разрешенных энергий W представляет собой замкнутый интервал $[-4\eta, 4\eta]$, где -4η – удвоенное значение дна зоны проводимости дырки в цепочке.

Локализованным состояниям дырок соответствуют значения энергий W , лежащих ниже удвоенного значения энергии, соответствующей дну зоны проводимости.

Из выражений (10.1)–(10.3) следует, что полная энергия биполяронного состояния, отсчитанная от дна зоны проводимости, равна:

$$E_{bp} = W + \frac{\kappa}{2} \sum_{i,j} |\psi_{ij}|^2 (\rho_i + \rho_j) + 4\eta. \quad (10.4)$$

Условие стабильности биполяронных состояний определяется неравенством:

$$|E_{bp}| > 2|E_p|, \quad (10.5)$$

где

$$E_p = \lambda + \frac{\kappa}{4} \sum_i |\psi_i|^4 + 2\eta \quad (10.6)$$

и $\psi_i \left(\sum_i |\psi_i|^2 = 1 \right)$ имеет смысл волновой функции однополяронного основного состояния электрона с соответствующей энергией λ , определяемой уравнением:

$$\eta(\Delta\psi)_i - \frac{\kappa}{2} |\psi_i|^2 \psi_i = \lambda \psi_i, \quad (\Delta\psi)_i = \psi_{i-1} + \psi_{i+1}. \quad (10.7)$$

В качестве примера рассмотрим полинуклеотидную цепочку, в которой роль сайта выполняет комплементарная уотсон-криковская пара G/C, где G-гуанин, C-цитозин. Переносчиком заряда в такой цепочке являются дырки.

Для дуплекса Poly(G)/Poly(C) значения параметров $\eta = 0,084$ эВ и $\kappa = 0,5267$ эВ взяты такими же, как в работе [Lakhno IQC 2010]. В рассматриваемом случае заряженных частиц (дырок) параметр $U \neq 0$. Его точная величина неизвестна, но примерная величина может быть получена из следующих соображений. Для локализованных на одном нуклеотиде двух дырок энергия кулоновского отталкивания примерно равна $e^2/2\epsilon_\infty l$, где ϵ_∞ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость молекулы; l – характерный размер нуклеотида. Для ДНК эти величины имеют порядок величины $\epsilon_\infty = 2$ [Balabaev 1991], $l = 3 \text{ \AA}$, что дает значение $U \approx 1$ эВ. При таком значении параметра U локализация на одном сайте невозможна. Более низким значением энергии обладает состояние, когда дырки локализованы на двух соседних сайтах или на большем числе сайтов.

Основные биполярные и поляронные состояния, т.е. решения уравнений (10.3) и (10.7), рассчитывались минимизацией функционалов $E_{bp}(\psi_{ij})$ (10.4) и $E_p(\psi_i)$ (10.6) с условиями симметрии и нормировки при $\eta = 0,084$ эВ в области параметров κ , U , содержащей указанные выше их значения для дуплекса Poly(G)/Poly(C). На рис. 10.1 показана диаграмма устойчивости биполярных состояний, определяемая неравенством

(10.5), полученная интерполяцией методом наименьших квадратов по 40 рассчитанным точкам.

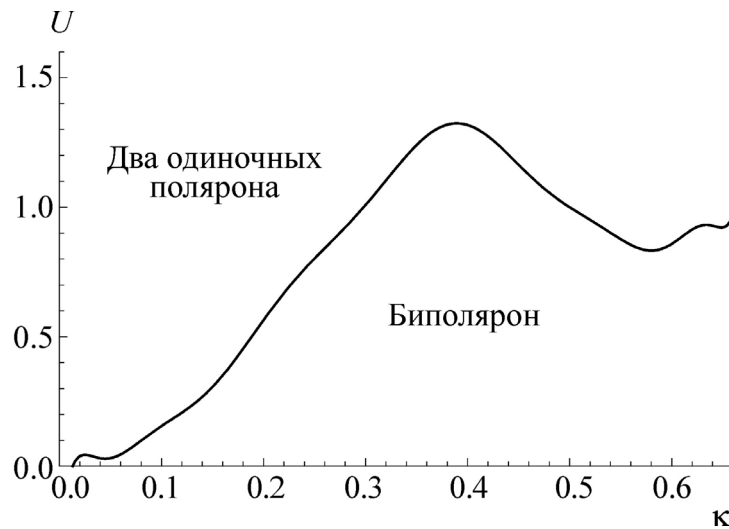


Рис. 10.1. Область стабильности $|E_{bp}| > 2|E_p|$ биполярона;
 $\eta=0,084$ эВ

Из уравнений (10.3), (10.4) и (10.6), (10.7) при $\kappa \rightarrow \infty$ имеем:

$$|E_{bp}| = |U - \kappa| = U - \kappa > 2|E_p| = 2|\kappa/4| = \kappa/2.$$

Отсюда получаем, что при больших κ границей области асимптотически является прямая: $U = (3/2)\kappa$, что видно из численного расчета на рис. 10.1. При $\kappa \rightarrow \infty$ очевидно $U \rightarrow 0$, $U < \kappa$.

Из (10.3), (10.4) следует, что при $U = \infty$, т.е. когда дырки находятся друг от друга на большом расстоянии, биполяронное состояние переходит в два одиночных поляронных состояния. В этом случае в континуальном пределе полная энергия биполярона (10.4) в восемь раз ниже, чем соответствующая энергия полярона (10.6): $E_{bp}/E_p = 8$. В силу теоремы вириала это соотношение выполняется и для собственных энергий полярона и биполярона: $W/\lambda = 8$. В дискретном случае можно лишь утверждать, что если в поляронном уравнении (10.7) взять удвоенное значение κ , то получим вдвое меньшее по абсолютной величине собственное значение, чем у биполярона.

На рис. 10.2 а–г приведены плотности заряда $p_i = 2 \sum_j |\psi_{ij}|^2$ различных типов биполяронов для $\eta = 0,084$ эВ, $\kappa = 0,5267$ эВ, $N = 31$. Приведенное на рис. 10.2 а решение с $U=0$ могло бы соответствовать френкелевским биэкситонным автолокализованным состояниям. Отметим, что в случае $U=0$ биполяронное состояние стабильно для любых значений параметров, причем наинижему по энергии состоянию соответствует двухчастичное состояние, локализованное на одном сайте.

Из выражений (10.3)–(10.7) следует, что при $\kappa \geq 4U$ основное состояние отвечает локализации дырок на одном сайте. При $\kappa \leq 4U$ энергетически выгодным становится локализация на двух или большем числе сайтов (рис. 10.2 в, г). В последнем случае при $\kappa > 4\eta$ состояние локализовано на двух сайтах. В области значений параметров $\kappa > 4\eta$, $\kappa > 4U$ дырки локализованы на отдельных сайтах. Энергия дырок, локализованных на двух соседних сайтах, мало отличается от энергии дырок, локализованных на двух сайтах, далеко отстоящих друг от друга. Можно сказать, что биполяронное состояние в этом случае слабо стабильно относительно распада на два отдельных поляронных состояния. В области значений $\kappa \leq 4\eta$ биполяронное состояние локализовано на более чем двух сайтах.

Из рисунка 10.2 а–г видно, что в области стабильности связанное биполяронное состояние образуют поляроны, находящиеся на расстоянии 0, 1, 2 и 3 постоянных решетки.

Для количественной оценки протяженности биполяронных состояний введем величины P_1 и P_2 :

$$P_1 = \sum_i |i - i_0| p_{i-i_0}, \quad P_2 = \frac{1}{\sum_i p_i^2},$$

i_0 – центр симметрии биполярона, p_i – плотность заряда.

P_1 определяет характерный размер биполярона, P_2 определяет характерный размер полярона (характерный размер пиков в

двухцентральной конфигурации). При $U=0$, когда имеет место одноцентровая конфигурация, P_1 и P_2 имеют один порядок величины. Для биполяронов на рис. 10.2 значения этих величин равны: $P_1 = 1,65$, $P_2 = 0,28$ (рис. 10.2а); $P_1 = 17,5$, $P_2 = 0,72$ (рис. 10.2б); $P_1 = 24,7$, $P_2 = 1$ (рис. 10.2в); $P_1 = 26,1$, $P_2 = 1,04$ (рис. 10.2г).

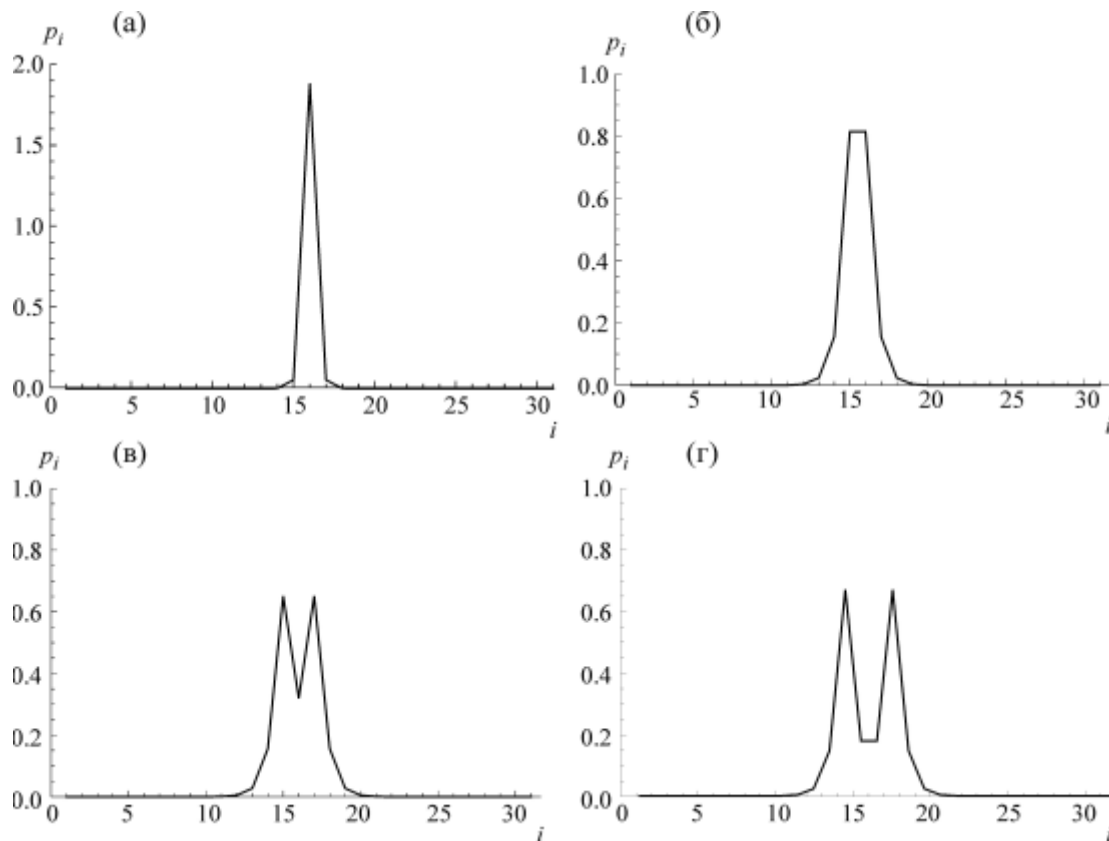


Рис. 10.2 Плотности заряда (ρ_i) биполяронов различных типов

при: $U = 0$ эВ (а); $U = 0,33$ эВ (б); $U = 0,6$ эВ (в); $U = 0,75$ эВ (г),

где U – параметр кулоновского отталкивания.

Таблица 10.1 Энергии связи биполяронов $\Delta = |E_{bp}| - 2|E_p|$ ($\eta = 0,084$ эВ)

| | | | | | | |
|------------|--------|---------|----------|----------|---------|--------|
| $U = 1$ | * | * | 0,000025 | 0,000125 | * | * |
| $U = 0,75$ | * | * | 0,0001 | 0,00045 | 0,00047 | 0,001 |
| $U = 0,5$ | * | * | 0,0005 | 0,0018 | 0,0027 | 0,0097 |
| $U = 0,25$ | * | 0,00047 | 0,0028 | 0,009 | 0,022 | 0,062 |
| $U = 0$ | 0,0037 | 0,015 | 0,05 | 0,112 | 0,203 | 0,283 |
| κ | 0,1 | 0,1975 | 0,296 | 0,395 | 0,5267 | 0,66 |

Примечание. Энергии связи биполярона Δ в эВ (* – биполярон нестабилен: $\Delta < 0$). Величины U и κ в эВ.

В таблице 10.1 приведены энергии связи биполяронов $\Delta = |E_{bp}| - 2|E_p|$ для ряда значений параметров из области стабильности рис. 10.1.

Из таблицы 10.1 следует, что когда биполярон максимально стабилен, т.е. в случае $U = 0$, энергия связи биполярона для значений параметров ДНК $\kappa = 0,5267$ эВ: $\Delta = |E_{bp}| - 2|E_p| = 0,203$ эВ. С увеличением U энергия связи биполярона уменьшается.

Полученные результаты свидетельствуют о возможности биполяронных состояний в однородных нуклеотидных цепочках.

Как следует из рис. 10.1, вблизи значения $\kappa = 0,5267$ эВ на фазовой диаграмме имеется большой локальный минимум, где величина U хотя и меньше единицы, но лежит вблизи этого значения. Так как величина U была нами оценена лишь приближенно, то возможно, что точное значение этой величины удовлетворит условию образования биполяронных состояний. Для величины κ в настоящее время также отсутствует точное значение. Более того, значение κ может сильно меняться в зависимости от внешних условий. Значение $\kappa \approx 0,5$ эВ соответствует «сухой» молекуле ДНК. Из таблицы 10.1 следует, что при $\kappa = 0,4 \div 0,5$ эВ и $U = 0,75$ эВ величина $\Delta \approx 5 \cdot 10^{-4}$ эВ, что соответствует температуре сверхпроводящего перехода $T_c \approx 6$ К. В растворе значение κ может сильно возрасти (согласно [Voityuk J. S. P. 2005], [Voityuk J. P. S. 2005] примерно в пять раз). В этом случае с очень большой вероятностью условия образования биполяронов будут выполняться.

Отметим, что ранее на возможность биполяронных состояний в коротких (шестисайтовых) неоднородных олигонуклеотидных цепочках обращалось внимание в работе [Apalkov 2006]. Согласно [Apalkov 2006] локализация пар в таких цепочках должна происходить на дуплетах, триплетах и квадруплетах гуанинов. Основной проблемой, связанной с возможностью сверхпроводящего состояния в ДНК, является необходимость существования носителей тока (электронов или дырок) в молекуле, поскольку сама по себе ДНК является диэлектриком. В эксперименте [Kasumov 2001] при измерении проводимости молекула

ДНК прикреплялась к двум рений-углеродным электродам, лежащим на слюдяной подложке. Зазор между электродами в [Kasumov 2001] создавался выжиганием лазером полосы (толщиной $\approx 0,5$ мкм), которая представляла собой слюду с оставшимися на ней не связанными друг с другом островками из рений-углеродных атомов. По нашему мнению, появление носителей тока в ДНК могло быть обусловлено контактом прикрепленной к подложке молекулы с рений-углеродными островками зазора.

Глава 3. Трансляционно-инвариантные биполяроны и сверхпроводимость

Излагается трансляционно-инвариантная биполярная теория сверхпроводимости, основанная, как и теория Бардина–Купера–Шриффера, на гамильтониане Фрёлиха. Роль куперовских образований в ней играют ТИ-биполяроны, представляющие собой связанные пары пространственно-делокализованных электронов с малой корреляционной длиной связанного состояния. Наличие Ферми поверхности приводит к стабилизации вблизи нее таких состояний и возможности их бозе-эйнштейновской конденсации (БЭК).

Теория приводит к естественному объяснению существования предшествующей сверхпроводимости псевдощелевой фазы и дает оценку температуры перехода T^* из нормального в псевдощелевое состояние. Показано, что температура БЭК ТИ-биполяронов определяет температуру сверхпроводящего перехода T_c , которая зависит не от эффективной массы биполярона, а от обычной массы зонного электрона. Это снимает ограничение на верхний предел T_c для сильного электрон-фононного взаимодействия. Естественное объяснение получает угловая зависимость сверхпроводящей щели, которая определяется угловой зависимостью фононного спектра.

Показано, что большое число экспериментов по термодинамическим и транспортным характеристикам, джозефсоновскому туннелированию и фотоэмиссионной спектроскопии с угловым решением (ARPES) высокотемпературных сверхпроводников не противоречит концепции ТИ-биполярного механизма сверхпроводимости в этих материалах. На основе изложенной теории обсуждаются возможные пути повышения T_c и создания комнатных сверхпроводников.

1. Случай слабого ЭФВ. Теория БКШ

В БКШ решается многоэлектронная задача в предположении, что электроны взаимодействуют только с фононным полем и не взаимодействуют друг с другом. Таким образом, рассматривается ансамбль независимых электронов в фононном поле. Такая картина

БКШ обосновывается ферми-жидкостной моделью металла, согласно которой вместо сильно взаимодействующих друг с другом электронов можно рассматривать невзаимодействующие квазичастицы, то есть идеальный ферми-газ в фононном поле. Одноэлектронный гамильтониан Фрѐлиха (В.1) в этом случае можно записать в виде, пригодном для описания любого числа электронов:

$$H = \sum_{p,s} \varepsilon_p c_{p,s}^+ c_{p,s} + \sum_q \omega(q) a_q^+ a_q + \sum_{\substack{p,q,s \\ p'-p=q}} V_q c_{p,s}^+ c_{p',s} a_q^+ + H.c., \quad (1.1)$$

$$\varepsilon_p = p^2 / 2m - E_F, \quad \omega(q) = s_0 q,$$

где $c_{p,s}^+$, $c_{p,s}$ – операторы рождения и уничтожения электронов с импульсом p и спином s , s_0 – скорость звука. В (1.1) энергия электронных состояний отсчитывается от уровня Ферми E_F .

В случае металлов, для которых используется БКШ:

$$V_q = G(\omega(q)/2V)^{1/2},$$

G – константа взаимодействия. Для слабого ЭФВ с использованием теории возмущений операторы фононов a_q^+ , a_q можно исключить и получить вместо (1.1) гамильтониан:

$$H = \sum_{p,s} \varepsilon_p c_{p,s}^+ c_{p,s} + \sum_{p,p',k,s,s'} V_k^2 \frac{\hbar \omega(k)}{(\varepsilon_{p+k} - \varepsilon_k)^2 - \hbar^2 \omega^2(k)} c_{p+k,s}^+ c_{p'-k,s'}^+ c_{p',s'} c_{p,s}. \quad (1.2)$$

В теории БКШ делается важное приближение: считается, что основной вклад во взаимодействие вносят только процессы в интервале энергий $|\varepsilon_p - \varepsilon_{p'}| < \hbar \omega_D$ вблизи уровня Ферми, где ω_D – дебаевская частота фонона.

В этом интервале энергий коэффициент перед электронными операторами в члене взаимодействия заменяется константой g .

Теория БКШ основана на выборе пробной функции в виде суперпозиции куперовских пар с $p = -p'$, $s = -s'$. Таким образом, в БКШ вместо (1.2) рассматривается гамильтониан:

$$H = \sum_{p,s} \varepsilon_p c_{p,s}^+ c_{p,s} - g \sum_{p,k} c_{p+k,\uparrow}^+ c_{-p-k,\downarrow}^+ c_{-p,\downarrow} c_{p,\uparrow} = \sum_{p,s} \varepsilon_p c_{p,s}^+ c_{p,s} - g \sum_p c_{p,\uparrow}^+ c_{-p,\downarrow}^+ \sum_{p'} c_{-p',\downarrow} c_{p',\uparrow} \quad (1.3)$$

Гамильтониан (1.3) можно диагонализировать посредством канонического преобразования:

$$\begin{aligned}
c_{p,\uparrow} &= u_p \xi_{p,\uparrow} + v_p \xi_{-p,\downarrow}^+, & c_{-p,\downarrow} &= u_p \xi_{-p,\downarrow} + v_p \xi_{p,\uparrow}^+, \\
c_{p,\uparrow}^+ &= u_p \xi_{p,\uparrow}^+ + v_p \xi_{-p,\downarrow}, & c_{-p,\downarrow}^+ &= u_p \xi_{-p,\downarrow}^+ - v_p \xi_{p,\uparrow}.
\end{aligned}
\tag{1.4}$$

В результате для гамильтониана (1.3) получается:

$$H = E_0 + \sum_p E_p (\xi_{p,\uparrow}^+ \xi_{p,\uparrow} + \xi_{-p,\downarrow}^+ \xi_{-p,\downarrow}),
\tag{1.5}$$

$$E_p = \sqrt{\left(\frac{p^2}{2m} - E_F\right)^2 + \Delta^2}, \quad \Delta = 2g \sum_p' u_p v_p, \quad u_p^2 = 1 - v_p^2 = (1 + \varepsilon_p / E_p) / 2,$$

где штрих в выражении для Δ означает, что суммирование ведется по состояниям, лежащим в тонком слое поверхности Ферми, где взаимодействие отлично от нуля, $|v_p|^2$ дает вероятность того, что состояние $(p, \uparrow, -p, \downarrow)$ занято, а $|u_p|^2$ – вероятность того, что оно свободно.

Полученные результаты отвечают случаю $T=0$. В частности, энергия основного состояния рассматриваемой системы, отсчитываемая от энергии системы в нормальном состоянии (т.е. с $\Delta=0$), равна:

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = -\frac{1}{2} N(0) \Delta^2, \quad \Delta = 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{N(0)g}\right),
\tag{1.6}$$

$$|\Psi\rangle = \prod_{p_1 \dots p_N} (u_p + v_p c_{p,\uparrow}^+ c_{-p,\downarrow}^+) |0\rangle,$$

где $N(0)$ – плотность состояний электронов на уровне Ферми в нормальной фазе, N – число электронов.

Таким образом, образование спаренных состояний приводит к понижению энергии системы на величину $N(0)\Delta^2/2$ и возникновению сверхпроводимости. Из (1.5) следует, что плотность элементарных возбуждений $\rho(E_p) \rightarrow \infty$ при $E_p \rightarrow \Delta$. В ТИ-биполярной теории СП это соответствует образованию бозе-конденсата спаренных электронов с бесконечной плотностью состояний при энергии, равной энергии биполярона, которая отделена щелью от непрерывного спектра возбуждений.

Вопрос о числе спаренных электронов, то есть куперовских пар, в теории БКШ в разных источниках трактуется по-разному. Так, например, часто утверждается (см. например [Вайскопф 1983]), что электроны спарены только в узком слое поверхности Ферми так, что их

число N_s равно $N_s = (\Delta/E_F)N$. При $\Delta/E_F \cong 10^{-4}$ спаренными оказывается лишь небольшая доля электронов.

Теория БКШ, однако, дает однозначный ответ: при $T=0$ $N_s = N/2$ (что непосредственно следует из выражения для волновой функции (1.6)), то есть все электроны находятся в спаренном состоянии.

Чтобы разрешить это противоречие, рассмотрим вклад w_p в полную энергию сверхпроводника, который вносит пара в состоянии $(p, \uparrow - p, \downarrow)$:

$$w_p = \varepsilon_p - E_p. \quad (1.7)$$

Из (1.7) следует, что $w_{p_F} = -\Delta$. В нормальном состоянии ($\Delta=0$) такая пара вносила бы энергию $w_{p_F}^N = 0$, то есть $\delta w_{p_F} = w_{p_F}^s - w_{p_F}^N = -\Delta$. Соответственно, на дне зоны проводимости, то есть при $p=0$ из (1.7) получим: $w_0^s = -2E_F - \Delta^2/2E_F$. В нормальном состоянии такая пара вносила бы энергию $w_0^N = -2E_F$, соответственно, $\delta w_0 = w_0^s - w_0^N = -\Delta^2/2E_F$. Отсюда следует, что пары, находящиеся в глубине под поверхностью Ферми, вне слоя шириной Δ , в приближении БКШ вносят очень маленький вклад в энергию СП порядка $\delta w_0/\delta w_{p_F} = \Delta/2E_F \sim 10^{-4}$ от того вклада, который вносят пары в слое Δ . Таким образом, хотя все электроны в БКШ спарены, их вклад в зависимости от энергии пары будет разным – отличным от нуля он будет только в тонком слое поверхности Ферми. Этим и разрешается указанное выше противоречие: хотя все электроны спарены, вклад в энергию дает только небольшое число пар: $N_s = N\Delta/E_F$, которое и называют «числом пар» в СП.

По этой причине, чтобы не совершить ошибки при расчете какой-либо из характеристик СП, когда ответ неочевиден, следует включать в расчет все спаренные состояния электронов.

Например, при расчете лондоновской глубины проникновения магнитного поля в СП в теории БКШ в ее расчет следует включать все спаренные состояния электронов, а при расчете критического

магнитного поля, при котором происходит разрушение СП, достаточно их оценки в слое Δ .

Отметим, что в недавних экспериментах Божовича [Božovič 2016] было показано, что вклад в лондоновскую глубину проникновения в ВТСП дает только небольшая доля полного числа электронов. Это означает, что теория БКШ к ним неприменима, и взаимодействие нельзя считать слабым. Этот вопрос мы рассмотрим в разделе 9.

2. Гамильтониан Пекара-Фрëлиха. Канонические преобразования

Прежде, чем перейти к изложению теории СП в пределе сильного ЭФВ, дадим краткий обзор результатов теории ТИ-биполяронов.

При описании биполяронов, следуя [Лакно 2010], [Lakho 2012, 2019], [Каширина 2012], будем исходить из гамильтониана Пекара-Фрëлиха в магнитном поле:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}}_1 - \frac{e}{c} \mathbf{A}_1 \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}}_2 - \frac{e}{c} \mathbf{A}_2 \right)^2 + \sum_k \hbar \omega_k^0 a_k^+ a_k + \sum_k (V_k e^{ikr_1} a_k + V_k e^{ikr_2} a_k + H.c.) + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad (2.1)$$

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

где $\hat{\mathbf{p}}_1, \mathbf{r}_1, \hat{\mathbf{p}}_2, \mathbf{r}_2$ – импульсы и координаты первого и второго электрона, $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}(\mathbf{r}_1)$, $\mathbf{A}_2 = \mathbf{A}(\mathbf{r}_2)$ – вектор-потенциал внешнего магнитного поля в точках нахождения первого и второго электронов соответственно; величина U описывает кулоновское отталкивание между электронами. Мы записали Гамильтониан (2.1) в общем виде. В случае ВТСП, которые являются ионными кристаллами V_k – функция волнового вектора k , соответствующая взаимодействию электронов с оптическими фононами:

$$V_k = \frac{e}{k} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0}{\tilde{\epsilon}V}} = \frac{\hbar\omega_0}{ku^{1/2}} \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2}, \quad u = \left(\frac{2m\omega_0}{\hbar} \right)^{1/2}, \quad \alpha = \frac{1}{2} \frac{e^2 u}{\hbar\omega_0 \tilde{\epsilon}}, \quad (2.2)$$

$$\tilde{\epsilon}^{-1} = \epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon_0^{-1}, \quad \omega_k^0 = \omega_0,$$

где e – заряд электрона; ϵ_{∞} и ϵ_0 высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости; α – константа электрон-фононного взаимодействия; V – объем системы, ω_0 – частота оптического фонона.

Ось z выбрана вдоль направления индукции магнитного поля \mathbf{B} , и используется симметричная калибровка:

$$\mathbf{A}_j = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}_j,$$

для $j = 1, 2$. Для рассматриваемого ниже синглетного состояния биполярона вклад от спинового слагаемого равен нулю.

В системе центра масс гамильтониан (2.1) примет вид:

$$H = \frac{1}{2M_e} \left(\hat{\mathbf{p}}_R - \frac{2e}{c} \mathbf{A}_R \right)^2 + \frac{1}{2\mu_e} \left(\hat{\mathbf{p}}_r - \frac{e}{2c} \mathbf{A}_r \right)^2 + \sum_k \hbar \omega_k^0 a_k^+ a_k + \sum_k 2V_k \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} (a_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} + H.c.) + U(|\mathbf{r}|), \quad (2.3)$$

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad M_e = 2m, \quad \mu_e = m/2, \quad \mathbf{A}_R = 1/2 B(-y, x, 0), \\ \mathbf{A}_r = 1/2 B(-Y, X, 0), \quad \hat{\mathbf{p}}_R = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 = -i\hbar \nabla_R, \quad \hat{\mathbf{p}}_r = (\hat{\mathbf{p}}_1 - \hat{\mathbf{p}}_2)/2 = -i\hbar \nabla_r,$$

где x ; y и X ; Y – компоненты векторов \mathbf{r} , \mathbf{R} соответственно.

Подвергнем гамильтониан H каноническому преобразованию Гейзенберга [Heisenberg 1930], [Rosenfeld 1932]:

$$S_1 = \exp i \left(\mathbf{G} - \sum_k \mathbf{k} a_k^+ a_k \right) \mathbf{R}, \quad (2.4)$$

$$\mathbf{G} = \hat{\mathbf{P}}_R + \frac{2e}{c} \mathbf{A}_R, \quad \hat{\mathbf{P}}_R = \hat{\mathbf{p}}_R + \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k, \quad (2.5)$$

где \mathbf{G} – величина, коммутирующая с гамильтонианом и поэтому являющаяся сохраняющейся величиной, т.е. c -числом, $\hat{\mathbf{P}}_R$ – полный импульс в отсутствие магнитного поля.

В результате действия S_1 на оператор поля, получим:

$$S_1^{-1} a_k S_1 = a_k e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}}, \quad S_1^{-1} a_k^+ S_1 = a_k^+ e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}. \quad (2.6)$$

Соответственно, преобразованный гамильтониан $\tilde{H} = S_1^{-1} H S_1$ примет вид:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & \frac{1}{2M_e} \left(\mathbf{G} - \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k - \frac{2e}{c} \mathbf{A}_R \right)^2 + \frac{1}{2\mu_e} \left(\hat{\mathbf{p}}_r - \frac{e}{2c} \mathbf{A}_r \right)^2 + \sum_k \hbar \omega_k^0 a_k^0 a_k + \\ & \sum_k 2V_k \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} (a_k + a_k^+) + U(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.7)$$

В дальнейшем будем полагать:

$$\mathbf{G} = 0. \quad (2.8)$$

Физический смысл условия (2.8) состоит в равенстве нулю полного импульса (т.е. отсутствие тока) в объеме образца. Это требование вытекает из эффекта Мейснера, согласно которому ток в объеме СП должен быть равен нулю. Мы используем этот факт в разделе 7 при определении лондоновской глубины проникновения λ .

Будем искать решение стационарного уравнения Шрёдингера, соответствующего гамильтониану (2.7), в виде:

$$\begin{aligned} \Psi_H(r, R, \{a_k\}) &= \phi(R) \Psi_{H=0}(r, R, \{a_k\}) \\ \phi(R) &= \exp \left(-i \frac{2e}{\hbar c} \int_0^R \mathbf{A}_R \cdot d\mathbf{R}' \right), \quad \Psi_{H=0}(r, R, \{a_k\}) = \psi(r) \Theta(R, \{a_k\}). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Здесь $\Psi_{H=0}(r, R, \{a_k\})$ – волновая функция биполярона в отсутствие магнитного поля. Явный вид функций $\psi(r)$ и $\Theta(R, \{a_k\})$ дается выражением (11.13) Гл. 1.

Усреднение \tilde{H} по волновым функциям $\phi(R)$ и $\psi(R)$ даёт:

$$\bar{H} = \frac{1}{2M_e} \left(\sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k \right)^2 + \sum_k \hbar \tilde{\omega}_k a_k^+ a_k + \sum_k \bar{V}_k (a_k + a_k^+) + \bar{T} + \bar{U} + \bar{\Pi}, \quad (2.10)$$

где:

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \frac{1}{2\mu_e} \langle \psi | \left(\hat{\mathbf{p}}_r - \frac{e}{2c} \mathbf{A}_r \right)^2 | \psi \rangle, \quad \bar{U} = \langle \psi | U(r) | \psi \rangle, \\ \bar{\Pi} &= \frac{2e^2}{M_e c^2} \langle \phi | \mathbf{A}_R^2 | \phi \rangle, \quad \hbar \tilde{\omega}_k = \hbar \omega_k^0 + \frac{2\hbar e}{M_e c} \langle \phi | \mathbf{k} \mathbf{A}_R | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.11)$$

В дальнейшем в этом разделе будем полагать $\hbar=1$, $\omega_k^0 = \omega_0 = 1$, $M_e = 1$. Из (2.10) следует, что биполяронный гамильтониан отличается от поляронного гамильтониана заменой в последнем величины V_k на \bar{V}_k и добавлением к поляронному гамильтониану $\bar{T}, \bar{U}, \bar{\Pi}$.

С использованием канонического преобразования Ли, Лоу и Пайнса:

$$S_2 = \exp \left\{ \sum_k f_k (a_k^+ - a_k) \right\}, \quad (2.12)$$

где f_k – вариационные параметры, имеющие смысл величины смещения осцилляторов поля из своих равновесных положений:

$$S_2^{-1} a_k S_2 = a_k + f_k, \quad S_2^{-1} a_k^+ S_2 = a_k^+ + f_k, \quad (2.13)$$

для гамильтониана \tilde{H} :

$$\tilde{H} = S_2^{-1} \tilde{H} S_2, \quad \tilde{H} = H_0 + H_1, \quad (2.14)$$

получим:

$$\begin{aligned} H_0 &= 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 \tilde{\omega}_k + \frac{1}{2} \left(\sum_k \mathbf{k} f_k^2 \right)^2 + H_{KB} + \bar{T} + \bar{U} + \bar{\Pi}, \\ H_{KB} &= \sum_k \omega_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \sum_{k,k'} \mathbf{k} \mathbf{k}' f_k f_{k'} (a_k a_{k'} + a_k^+ a_{k'}^+ + a_k^+ a_{k'} + a_k a_{k'}^+), \end{aligned} \quad (2.15)$$

где:

$$\omega_k = \tilde{\omega}_k + \frac{k^2}{2} + \mathbf{k} \sum_{k'} \mathbf{k}' f_{k'}^2. \quad (2.16)$$

Гамильтониан H_1 содержит линейные, тройные и четверные по операторам рождения и уничтожения члены. Его явный вид приведён в Приложении А.

Далее, как показано в Приложении А, использование канонического преобразования Боголюбова–Тябликова [Тябликов 1975] для перехода от операторов a_k^+ , a_k к новым операторам α_k^+ , α_k :

$$a_k = \sum_{k'} M_{1kk'} \alpha_{k'} + \sum_{k'} M_{2kk'}^* \alpha_{k'}^+, \quad a_k^+ = \sum_{k'} M_{1kk'}^* \alpha_{k'}^+ + \sum_{k'} M_{2kk'} \alpha_{k'}, \quad (2.17)$$

в которых H_{KB} – диагональный оператор, обращает в ноль математическое ожидание H_1 в отсутствие внешнего магнитного поля. Вклад H_1 в спектр преобразованного гамильтониана, когда магнитное поле отлично от нуля, обсуждается в разделе 3.

В новых операторах α_k^+ , α_k гамильтониан (2.15) примет вид

$$\begin{aligned} \tilde{H} &\approx E_{bp} + \sum_k v_k \alpha_k^+ \alpha_k, \\ E_{bp} &= \Delta E_r + 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k \tilde{\omega}_k f_k^2 + \bar{T} + \bar{U} + \bar{\Pi}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

где ΔE_r – так называемая "энергия отдачи". Общее выражение для $\Delta E_r = \Delta E_r \{f_k\}$ было получено в разделе 3 Гл. 1 [Тулуб 1961]. Конкретный

расчёт энергии основного состояния E_{bp} осуществляется посредством минимизации (2.18) по f_k и ψ и в отсутствие магнитного поля был проведён в Гл. 1.

Заметим, что в теории полярона с нарушенной симметрией диагональный электрон-фононный гамильтониан имеет вид (2.18) [Miyake 1994]. Этот гамильтониан может быть интерпретирован как гамильтониан полярона и системы связанных с ним перенормированных реальных фононов или как гамильтониан, который обладает спектром квазичастичных возбуждений, определяемым (2.18) [Левинсон 1973]. В последнем случае возбуждённые состояния полярона представляют собой фермиевские квазичастицы.

В случае биполярона ситуация становится качественно отличной, поскольку биполярон является бозе-частицей, чей спектр определяется (2.18). Очевидно, газ из таких частиц может испытывать конденсацию Бозе-Эйнштейна. Трактовка (2.18) как биполярона и связанных с ним перенормированных фононов не препятствует их БЭК, поскольку требуемое для БЭК постоянство частиц автоматически выполняется ввиду коммутации полного числа перенормированных фононов с гамильтонианом (2.18).

Входящие в (2.18) перенормированные частоты ν_k , согласно (3.15) главы 1, определяются секулярным уравнением для величины s :

$$1 = \frac{2}{3} \sum_k \frac{k^2 f_k^2 \omega_k}{s - \omega_k^2}, \quad (2.19)$$

решения которого дают спектр значений $s = \{\nu_k^2\}$.

3. Энергетический спектр ТИ-биполярона

Гамильтониан (2.18) удобно представить в виде:

$$\tilde{H} = \sum_{n=0,1,2,\dots} E_n \alpha_n^+ \alpha_n, \quad (3.1)$$

$$E_n = \begin{cases} E_{bp}, & n = 0; \\ E_{bp} + \omega_{k_n}, & n \neq 0; \end{cases} \quad (3.2)$$

где в случае трёхмерного ионного кристалла \mathbf{k}_n – вектор с компонентами:

$$k_{n_i} = \pm \frac{2\pi(n_i - 1)}{N_{a_i}}, \quad n_i = 1, 2, \dots, \frac{N_{a_i}}{2} + 1, \quad i = x, y, z, \quad (3.3)$$

N_{a_i} – число атомов вдоль i -ой кристаллографической оси. Докажем справедливость выражения для спектра (3.1), (3.2). Поскольку операторы α_n^+ , α_n подчиняются бозевским перестановочным соотношениям:

$$[\alpha_n, \alpha_{n'}^+] = \alpha_n \alpha_{n'}^+ - \alpha_{n'}^+ \alpha_n = \delta_{n, n'}, \quad (3.4)$$

то их можно считать операторами рождения и уничтожения ТИ-биполяронов. Энергетический спектр ТИ-биполяронов, согласно (2.19), определяется секулярным уравнением:

$$F(s) = 1, \quad (3.5)$$

где:

$$F(s) = \frac{2}{3} \sum_n \frac{k_n^2 f_{k_n}^2 \omega_{k_n}^2}{s - \omega_{k_n}^2}.$$

Уравнение (3.5) удобно решать графически (рис. 3.1).

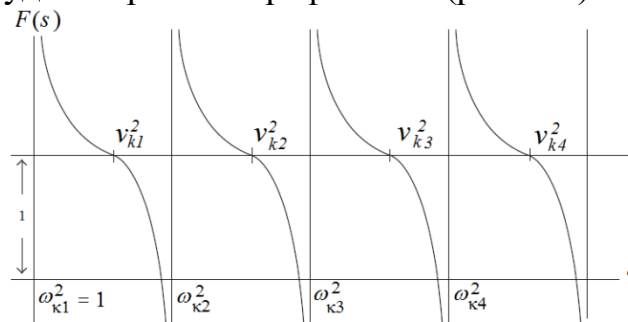


Рис. 3.1. Графическое решение уравнения (3.5).

Из рис. 3.1. следует, что частоты v_{k_n} лежат между частотами ω_{k_n} и $\omega_{k_{n+1}}$. Таким образом, спектр v_{k_n} , как и спектр ω_{k_n} , является квазинепрерывным: $v_{k_n} - \omega_{k_n} = O(N^{-1})$, что и доказывает справедливость (3.1), (3.2).

Отсюда следует, что спектр ТИ-биполярона имеет щель между основным состоянием E_{bp} и квазинепрерывным спектром, равную ω_0 .

В отсутствие внешнего магнитного поля входящие в выражение для ω_k (2.16) функции f_k не зависят от направления волнового вектора \mathbf{k} . При наличии внешнего магнитного поля f_k нельзя считать изотропной величиной, соответственно, нельзя полагать равным нулю последний член в выражении (2.16) для ω_k . Кроме того, угловая зависимость в спектре ω_k в магнитном поле содержится и в члене $\tilde{\omega}_k$, входящем в величину ω_k . В силу того, что в рассматриваемой изотропной системе имеется только одно выделенное направление, задаваемое вектором \mathbf{B} , для ω_k из (2.16) получим:

$$\omega_{k_n} = \omega_0 + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2M_e} + \frac{\eta}{M_e} (\mathbf{Bk}_n), \quad (3.6)$$

где η – некоторая скалярная величина. Заметим, что вклад H_1 в спектр (3.6) приводит к зависимости η от $|\mathbf{k}|$ и (\mathbf{kB}) . Для слабого магнитного поля в длинноволновом пределе (когда применим гамильтониан Фрелиха) мы можем пренебречь такой зависимостью и считать η постоянной величиной.

Для магнитного поля, направленного вдоль оси z , выражение (3.6) можно представить в виде:

$$\omega_{k_n} = \omega_0 + \frac{\hbar^2}{2M_e} (k_{zn} + k_z^0)^2 + \frac{\hbar^2}{2M_e} (k_{xn}^2 + k_{yn}^2) - \frac{\eta^2 B^2}{2\hbar^2 M_e}. \quad (3.7)$$

Отметим, что формулу (3.7) можно обобщить на актуальный в дальнейшем анизотропный случай, когда в направлениях k_x и k_y :

$M_{ex} = M_{ey} = M_{\parallel}$, а в направлении k_z : $M_{ez} = M_{\perp}$ (разделы 7, 8).

Формула (3.7) в этом случае примет вид:

$$\omega_{k_n} = \omega_0 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} (k_{zn} + k_z^0)^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} (k_{xn}^2 + k_{yn}^2) - \frac{\eta^2 B^2}{2\hbar^2 M_{\perp}}, \quad (3.7')$$

если магнитное поле направлено вдоль оси z , и:

$$\omega_{k_n} = \omega_0 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} k_{zn}^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} (k_{xn} + k_x^0)^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} k_{yn}^2 - \frac{\eta^2 B^2}{2\hbar^2 M_{\perp}}, \quad (3.7'')$$

если магнитное поле направлено по оси x .

Ниже мы рассмотрим случай низкой концентрации ТИ-биполяронов в кристалле. В этом случае, как будет показано в следующем разделе, с хорошей точностью можно рассматривать их как идеальный бозе-газ, свойства которого определяются гамильтонианом (3.1).

4. Неидеальный газ ТИ-биполяронов

Будучи заряженным, газ из ТИ-биполяронов никак не может быть идеальным, поскольку между биполяронами должно существовать кулоновское взаимодействие. Из теории неидеального газа известно, что учёт взаимодействия между частицами приводит к качественным изменениям в его спектральных свойствах. Согласно [Боголюбов 1947], даже в случае короткодействующего взаимодействия учёт последнего приводит к появлению в спектре щели, отсутствующей в идеальном газе. Ещё более значительных изменений можно ожидать при наличии дальнедействующего кулоновского взаимодействия. В этом разделе мы ограничимся отсутствием магнитного поля.

Логическая схема развиваемого ниже подхода такова:

- а) вначале рассматривается частный случай, когда имеются только два электрона, взаимодействующих с фоновым полем. Это классическая задача о биполяроне [Лакно 2015];
- б) затем рассматривается многоэлектронная задача, приводящая к представлению о ферми-жидкости. Для этой многоэлектронной задачи рассматривается случай двух дополнительных электронов, находящихся над поверхностью Ферми (вблизи поверхности) связанных ЭФВ (задача Купера) [Lakhno 2016];
- в) далее считается, что почти все электроны, лежащие в энергетическом слое $[E_F + E_{pol}, E_F]$, где E_F – энергия Ферми, E_{pol} – энергия полярона, находятся в ТИ-поляронном состоянии; соответственно, все электроны в узком слое $[E_F + E_{bp} / 2 - \delta E, E_F + E_{bp} / 2 + \delta E]$, $\delta E \rightarrow 0$ находятся в ТИ-

биполярном состоянии, где E_{bp} – энергия ТИ-биполярона. Сконденсированный биполяронный газ приводит к бесконечной плотности электронных состояний в этом слое;

г) биполярны рассматриваются как заряженные бозоны, помещённые в электронную ферми-жидкость (поляронный газ), экранирующую взаимодействие между биполяронами, и задача сводится к задаче о неидеальном заряженном бозе-газе;

д) найденный спектр такой задачи используется для расчёта статистических свойств газа из ТИ-биполяронов.

Чтобы построить теорию неидеального газа ТИ-биполяронов, необходимо знать спектр состояний отдельного ТИ-биполярона в полярной среде. Этот вопрос был подробно рассмотрен в (разделе 5). Как показано в [Lakhno 2016], этот спектр состояний будет тем же самым, что и ТИ-биполяронов, образующихся вблизи поверхности Ферми. Таким образом, ТИ-биполярны в слое $[E_F + E_{bp}/2, E_F]$ можно рассматривать как ТИ-биполяронный бозе-газ, находящийся в поляронном газе [Lakhno 2017]. Если считать, что ТИ-биполярны не взаимодействуют друг с другом, то такой газ можно считать идеальным. Его свойства будут полностью определены, если известен спектр отдельного ТИ-биполярона.

При рассмотрении теории идеального газа и сверхпроводимости на основе бозе-частиц из ТИ-биполяронов кулоновское взаимодействие между электронами учитывается только в парах, т.е. при рассмотрении задачи об отдельном биполяроне. Гамильтониан такой системы, согласно [Лакно 2015], [Lakhno 2019], имеет вид:

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k \alpha_k^+ \alpha_k, \quad (4.1)$$

$$\varepsilon_k = E_{bp} \Delta_{k,0} + (\omega_0 + E_{bp} + k^2 / 2M_e)(1 - \Delta_{k,0}), \quad (4.2)$$

где α_k^+ , α_k – операторы рождения и уничтожения ТИ-биполяронов: ε_k – спектр ТИ-биполяронов, полученный в разделе 3; $\omega_0(\mathbf{k}) = \omega_0$ энергия

оптического фонона; $\Delta_{k,0} = 1$ для $k = 0$ и $\Delta_{k,0} = 0$ для $k \neq 0$. Выражение (4.1), (4.2) можно переписать в виде:

$$H_0 = E_{bp} \alpha_0^+ \alpha_0 + \sum_k' (\omega_0 + E_{bp} + k^2 / 2M_e) \alpha_k^+ \alpha_k, \quad (4.3)$$

где штрих в сумме в правой части (4.3) означает, что в суммировании отсутствует член с $k = 0$. Выделение в (4.1) члена с $k = 0$ соответствует выделению бозе-конденсата, где:

$$\alpha_0 = \sqrt{N_0}, \quad (4.4)$$

N_0 – число ТИ-биполяронов в конденсатном состоянии. Таким образом, в теории идеального газа из ТИ-биполяронов первый член есть просто $E_{bp} N_0$. При построении теории неидеального бозе-газа ТИ-биполяронов будем исходить из гамильтониана:

$$H = E_{bp} N_0 + \sum_k' (\omega_0 + E_{bp}) \alpha_k^+ \alpha_k + \sum_k' t_k \alpha_k^+ \alpha_k + 1/2V \sum_k' V_k \alpha_{k-k}^+ \alpha_{k+k}^+ \alpha_k \alpha_k, \quad (4.5)$$

$$t_k = k^2 / 2M_e,$$

в котором к гамильтониану H_0 (4.1) добавлен последний член, описывающий взаимодействие биполяронов, V_k – матричный элемент взаимодействия биполяронов. Последние два члена в (4.5) в точности соответствуют гамильтониану заряженного бозе-газа [Foldy 1961]. Следуя стандартной процедуре выделения бозе-конденсата, получим из (4.5) гамильтониан:

$$H = E_{bp} N_0 + \sum_k' (\omega_0 + E_{bp}) \alpha_k^+ \alpha_k + \sum_k' [(t_k + n_0 V_k) \alpha_k^+ \alpha_k + 1/2 n_0 V_k (\alpha_k \alpha_{-k} + \alpha_k^+ \alpha_{-k}^+)], \quad (4.6)$$

где $n_0 = N_0 / V$ – плотность частиц в бозе-конденсате.

Далее, с использованием преобразования Боголюбова:

$$\alpha_k = u_k b_k - v_k b_{-k}^+,$$

$$u_k = [(t_k + n_0 V_k + \varepsilon_k) / 2\varepsilon_k]^{1/2},$$

$$v_k = [(t_k + n_0 V_k - \varepsilon_k) / 2\varepsilon_k]^{1/2}, \quad \varepsilon_k = [2n_0 V_k t_k + t_k^2]^{1/2}, \quad (4.7)$$

в новых операторах получим гамильтониан

$$H = E_{bp} N_0 + U_0 + \sum_k' (\omega_0 + E_{bp} + \varepsilon_k) b_k^+ b_k, \quad (4.8)$$

$$U_0 = \sum_k (\varepsilon_k - t_k - n_0 V_k),$$

где U_0 – энергия основного состояния заряженного бозе-газа без учёта его взаимодействия с поляризацией кристалла. Таким образом, спектр возбуждений неидеального газа ТИ-биполяронов имеет вид:

$$E_k = E_{bp} + u_0 + \left(\omega_0(\mathbf{k}) + \sqrt{k^4 / 4M_e^2 + k^2 V_k n_0 / M_e} \right) (1 - \Delta_{k,0}), \quad (4.9)$$

где $u_0 = U_n / N$, N – полное число частиц. Если отсчитывать энергию возбуждений от энергии основного состояния биполярона в неидеальном газе, полагая $\Delta_k = E_k - (E_{bp} + u_0)$, то для Δ_k при $k \neq 0$ получим:

$$\Delta_k = \omega_0(\mathbf{k}) + \sqrt{k^4 / 4M_e^2 + k^2 V_k n_0 / M_e}. \quad (4.10)$$

Полученный спектр означает, что ТИ-биполяронный газ имеет в спектре щель Δ_k между основным и возбуждёнными состояниями, т.е. обладает сверхтекучестью. Будучи заряженным, такой газ автоматически будет сверхпроводящим. Для определения конкретного вида спектра необходимо знать величину V_k . Если бы мы рассматривали только заряженный бозе-газ с положительным однородным фоном, создаваемым жёстким ионным остовом, то входящая в (4.9) величина V_k в отсутствие экранировки была бы равна $V_k = 4\pi e_B^2 / k^2$, соответственно, второй член в подкоренном выражении (4.9) был бы равен $\omega_p^2 = 4\pi n_0 e_B^2 / M_e$, где ω_p – плазменная частота бозонного газа, e_B – заряд бозона ($2e$ – для ТИ-биполярона). В действительности, если учесть экранировку, то V_k примет вид $V_k = 4\pi e^2 / k^2 \varepsilon_B(k)$, где $\varepsilon_B(k)$ – диэлектрическая проницаемость заряженного бозе-газа, которая была вычислена в [Nore 1975, 1976]. Полученное для $\varepsilon_B(k)$ в [Nore 1975, 1976], выражение слишком громоздко и здесь не приводится. В рассматриваемом нами случае бозе-газа ТИ-биполяронов такая модификация V_k , однако, недостаточна. Как было показано в [Lakho 2016] (Гл. 4), биполяроны составляют лишь небольшую часть заряженных частиц в системе. Их основная доля приходится на

электронный газ, в который погружены биполяроны. Именно электронный газ даёт основной вклад в экранировку взаимодействия между биполяронами. Для учёта такой экранировки для V_k нужно использовать выражение $V_k = 4\pi e^2 / k^2 \varepsilon_B(k) \varepsilon_e(k)$, где $\varepsilon_e(k)$ – диэлектрическая проницаемость электронного газа (Приложение 3). Наконец, если учесть подвижность ионного остова, то окончательно величина V_k примет вид: $V_k = 4\pi e^2 / k^2 \varepsilon_B(k) \varepsilon_e(k) \varepsilon_\infty \varepsilon_0$, где ε_∞ , ε_0 – высокочастотная и статическая диэлектрические постоянные.

В результате для Δ_k получим:

$$\Delta_k = \omega_0(\mathbf{k}) + k^2 / 2M_e \sqrt{1 + \chi(k)}, \quad (4.11)$$

$$\chi(k) = (2M_e \omega_p)^2 / k^4 \varepsilon_B(k) \varepsilon_e(k) \varepsilon_\infty \varepsilon_0. \quad (4.12)$$

Для оценки величины $\chi(k)$ в (4.11) рассмотрим длинноволновый предел. В этом пределе $\varepsilon_e(k)$ имеет томас-фермиевский вид: $\varepsilon_e(k) = 1 + \kappa^2 / k^2$, где $\kappa = 0,815 k_F (r_s / a_B)^{1/2}$, $a_B = \hbar^2 / M_e e^2$, $r_s = (3/4\pi n_0)^{1/3}$, соответственно, согласно [Hore 1975, 1976], величина $\varepsilon_B(k)$ равна: $\varepsilon_B(k) = 1 + q_s^4 / k^4$, $q_s = \sqrt{2M_e \omega_p}$.

Учитывая, что при вычислении термодинамических функций основной вклад дают значения k : $k^2 / 2M_e \approx T$, где T – температура, для величины $\chi(k)$ получим оценку $\chi \sim T / E_F \varepsilon_\infty \varepsilon_0$, где E_F – энергия Ферми. Таким образом, спектр экранированного ТИ-биполяронного газа мало отличается от спектра идеального газа ТИ-биполяронов (4.2). Заметим, что в силу экранировки величина корреляционной энергии u_0 в (4.10) оказывается много меньше, чем вычисленная без учёта экранировки в [Foldy 1961] и, для реальных значений параметров, много меньше, чем энергия биполярона $|E_{bp}|$. Отметим также, что в силу экранировки газ из ТИ-биполяронов не переходит в вигнеровский кристалл при сколь угодно малой плотности биполяронов.

5. Статистическая термодинамика газа ТИ-биполяронов низкой плотности

В соответствии с результатом предыдущего раздела рассмотрим идеальный бозе-газ ТИ - биполяронов, представляющий собой систему из N частиц, находящихся в объёме V . Обозначим через N_0 число частиц в нижнем одночастичном состоянии, а через N' – число частиц в более высоких состояниях. Тогда:

$$N = \sum_{n=0,1,2,\dots} \bar{m}_n = \sum_n \frac{1}{e^{(E_n - \mu)/T} - 1}, \quad (5.1)$$

или:

$$N = N_0 + N', \quad N_0 = \frac{1}{e^{(E_{bp} - \mu)/T} - 1}, \quad N' = \sum_{n \neq 0} \frac{1}{e^{(E_n - \mu)/T} - 1}. \quad (5.2)$$

Заменяя в выражении для N' (5.2) суммирование на интегрирование по квазинепрерывному спектру (3.1), (3.2), (3.7) и полагая в (5.2) $\mu = E_{bp}$, получим из (5.1), (5.2) уравнение для определения критической температуры бозе-конденсации T_c :

$$C_{bp} = f_{\tilde{\omega}_H}(\tilde{T}_c), \quad (5.3)$$

$$f_{\tilde{\omega}_H}(\tilde{T}_c) = \tilde{T}_c^{3/2} F_{3/2}(\tilde{\omega}_H / \tilde{T}_c), \quad F_{3/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^{x+\alpha} - 1},$$

$$C_{bp} = \left(\frac{n^{2/3} 2\pi\hbar^2}{M_e \omega^*} \right)^{3/2}, \quad \tilde{\omega}_H = \frac{\omega_0 - \eta^2 H^2 / 2M_e}{\omega^*}, \quad \tilde{T}_c = \frac{T_c}{\omega^*},$$

где $n=N/V$. В этом разделе мы рассмотрим случай отсутствия магнитного поля: $H=0$. На рис. 5.1 приведено графическое решение уравнения (5.3) для значений параметров $M_e = 2m = 2m_0$, где m_0 – масса свободного электрона в вакууме, $\omega^* = 5 \text{ мЭВ} (\approx 58 \text{ K})$, $n = 10^{21} \text{ см}^{-3}$ и значений: $\tilde{\omega}_1 = 0.2$; $\tilde{\omega}_2 = 1$; $\tilde{\omega}_3 = 2$; $\tilde{\omega}_4 = 10$; $\tilde{\omega}_5 = 15$; $\tilde{\omega}_6 = 20$; $\tilde{\omega}_H = \tilde{\omega} = \tilde{\omega}_0 / \omega^*$; $\omega_{H_{cr}} = \omega_H$; для $\tilde{T} = \tilde{T}_c$.

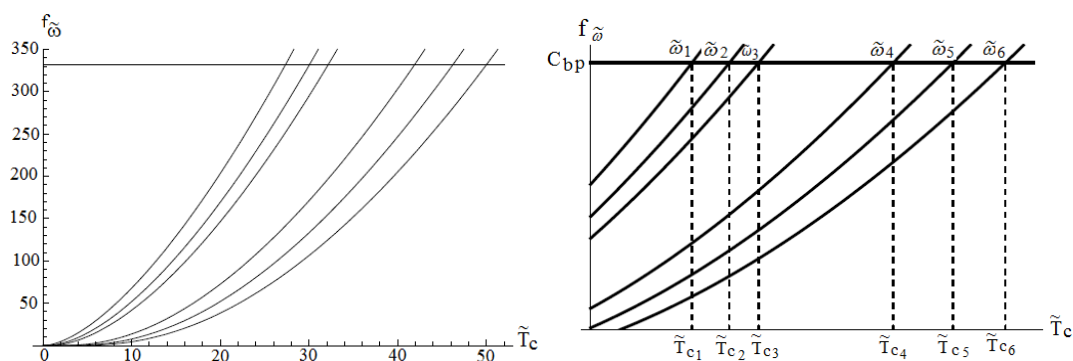


Рис. 5.1 Решение уравнения (5.3) с $C_{bp} = 331.3$ и

$\tilde{\omega}_i = \{0.2; 1; 2; 10; 15; 20\}$, которым соответствует $\tilde{T}_{ci} : \tilde{T}_1 = 27.3$;

$$\tilde{T}_{c_2} = 30; \tilde{T}_{c_3} = 32; \tilde{T}_{c_4} = 42; \tilde{T}_{c_5} = 46.2; \tilde{T}_{c_6} = 50.$$

Из рис.5. 1 следует, что критическая температура растёт с ростом фоновой частоты $\tilde{\omega}_0$. Соответствующие выбранным значениям параметров отношения критических температур T_{ci}/ω_{0i} приведены в Таблице 5.1. Из Таблицы 5.1 следует вывод о том, что критическая температура ТИ-биполярного газа всегда выше, чем в случае идеального бозе-газа (ИБГ). Из рис. 5.1 также следует, что увеличение концентрации ТИ-биполяронов n будет приводить к увеличению критической температуры, а увеличение массы электрона m – к её снижению.

В Таблице 5.1 даны рассчитанные значения характеристик бозе-газа ТИ-биполяронов с концентрацией $n = 10^{21} \text{ см}^{-3}$ $\tilde{\omega}_i = \omega_i / \omega^*$, $\omega^* = 5 \text{ мЭВ} (\approx 58 \text{ К})$, ω_i – энергия оптического фонона; T_{ci} – критическая температура перехода, q_i – скрытая теплота перехода из конденсатного в надконденсатное состояние; $-\Delta(\partial C_{vi} / \partial \tilde{T}) = \partial C_{vi} / \partial \tilde{T} \Big|_{\tilde{T}=T_{ci}+0} - \partial C_{vi} / \partial \tilde{T} \Big|_{\tilde{T}=T_{ci}-0}$ – скачок теплоемкости при СП переходе, $\tilde{T} = T / \omega^*$; $C_s = C_v(T_c - 0)$, $C_n = C_v(T_c + 0)$. Расчеты проведены для концентрации ТИ-биполяронов $n = 10^{21} \text{ см}^{-3}$ и эффективной массы зонного электрона $m = m_0$. В таблице приведены также значения концентраций ТИ-биполяронов n_{bpi} для ВТСП $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ исходя из экспериментального значения температуры перехода $T_c = 93 \text{ К}$.

Таблица 5.1.

| i | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|--------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| $\tilde{\omega}_i$ | 0 | 0.2 | 1 | 2 | 10 | 15 | 20 |
| T_{ci} / ω_{0i} | ∞ | 136.6 | 30 | 16 | 4.2 | 3 | 2.5 |
| q_i / T_{ci} | 1.3 | 1.44 | 1.64 | 1.8 | 2.5 | 2.8 | 3 |
| $-\Delta \left(\frac{\partial C_{vi}}{\partial \tilde{T}} \right)$ | 0.11 | 0.12 | 0.12 | 0.13 | 0.14 | 0.15 | 0.15 |
| $C_{vi}(T_c - 0)$ | 1.9 | 2.16 | 2.46 | 2.7 | 3.74 | 4.2 | 1,6 |
| $\frac{(C_s - C_n)}{C_n}$ | 0 | 0.16 | 0.36 | 0.52 | 1.23 | 1.53 | 1.8 |
| $n_{bpi} \cdot \text{см}^3$ | $16 \cdot 10^{19}$ | $9.4 \cdot 10^{18}$ | $4.2 \cdot 10^{18}$ | $2.0 \cdot 10^{18}$ | $1.2 \cdot 10^{17}$ | $5.2 \cdot 10^{14}$ | $2.3 \cdot 10^{13}$ |

При $\tilde{\omega} = 0$ результаты переходят в известный предел ИБГ. В частности, из (5.3) при $\tilde{\omega} = 0$ следует выражение для критической температуры ИБГ:

$$T_c = 3.31 \hbar^2 n^{2/3} / M_e. \quad (5.4)$$

Подчеркнём, однако, что в (5.4) входит $M_e = 2m$, а не масса биполярона. Это снимает проблему низкой температуры конденсации, возникающей как в теории ПМР, так и в теории ПБР, в которых в выражении (5.4) фигурирует масса биполярона [Александров 1992], [Alexandrov 1996], [Ogg 1946], [Винецкий 1975, 1992], [Пашицкий 1987], [Emin 1989, 2017]. Другой важный результат состоит в том, что критическая температура T_c для выбранных значений параметров значительно превосходит энергию щели ω_0 .

Из (5.1), (5.2) следует, что

$$\frac{N'(\tilde{\omega})}{N} = \frac{\tilde{T}^{3/2}}{C_{bp}} F_{3/2} \left(\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}} \right), \quad (5.5)$$

$$\frac{N_0(\tilde{\omega})}{N} = 1 - \frac{N'(\tilde{\omega})}{N}. \quad (5.6)$$

На рис. 5.2 приведены температурные зависимости числа надконденсатных частиц N' и числа частиц, находящихся в конденсате N_0 для вышеуказанных значений параметров $\tilde{\omega}_i$.

Из рис. 5.2 следует, что, как и следовало ожидать, число частиц в конденсате растёт с увеличением щели $\tilde{\omega}_i$.

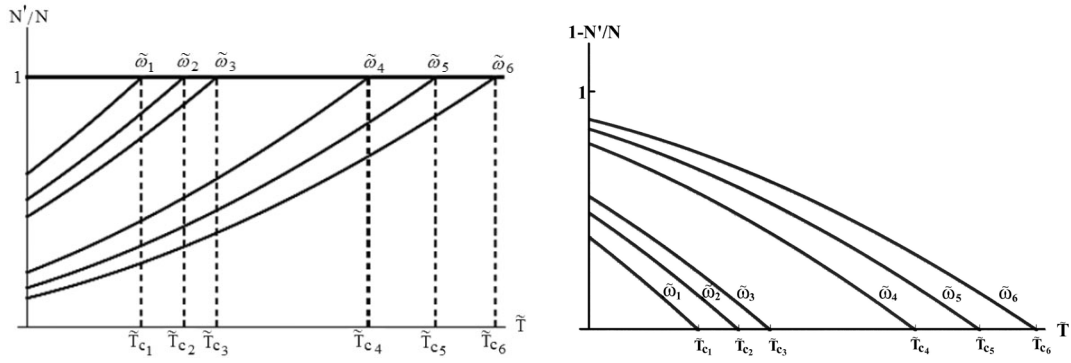


Рис. 5.2. Температурные зависимости относительного числа надконденсатных частиц N'/N и частиц, находящихся в конденсате $N_0/N = 1 - N'/N$, для значений параметров $\tilde{\omega}_i$, приведённых на рис. 5.1.

Энергия ТИ-биполярного газа E определяется выражением:

$$E = \sum_{n=0,1,2,\dots} \bar{m}_n E_n = E_{bp} N_0 + \sum_{n \neq 0} \bar{m}_n E_n. \quad (5.7)$$

С использованием (3.1), (3.2) для удельной энергии (т.е. энергии, приходящейся на один ТИ-биполярон) $\tilde{E}(\tilde{T}) = E / N \omega^*$, $\tilde{E}_{bp} = E_{bp} / \omega^*$ из (5.7) получим:

$$\tilde{E}(\tilde{T}) = \tilde{E}_{bp} + \frac{\tilde{T}^{5/2}}{C_{bp}} F_{3/2} \left(\frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}} \right) \left[\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}} + \frac{F_{5/2} \left(\frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}} \right)}{F_{3/2} \left(\frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}} \right)} \right], \quad (5.8)$$

$$F_{5/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} dx}{e^{x+\alpha} - 1}$$

где $\tilde{\mu}$ определяется из уравнения:

$$\tilde{T}^{3/2} F_{3/2} \left(\frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}} \right) = C_{bp}, \quad \tilde{\mu} = \begin{cases} 0, & \tilde{T} \leq \tilde{T}_c \\ \tilde{\mu}(\tilde{T}), & \tilde{T} \geq \tilde{T}_c \end{cases}. \quad (5.9)$$

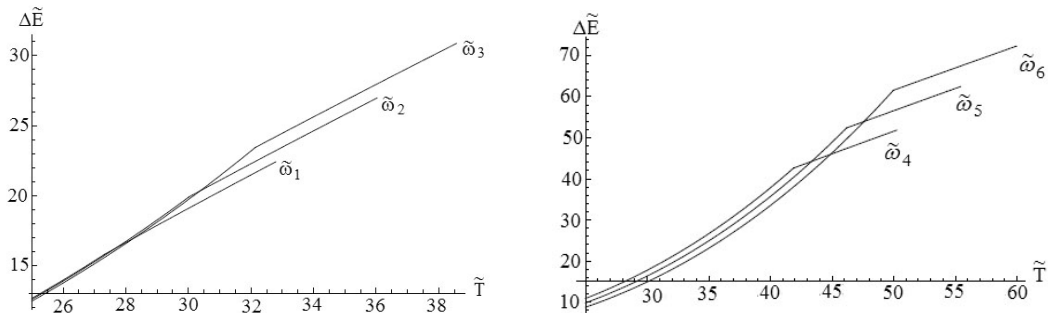


Рис. 5.3 Температурные зависимости $\Delta \tilde{E}(\tilde{T}) = \tilde{E}(\tilde{T}) - \tilde{E}_{bp}$ для значений параметров $\tilde{\omega}_i$, приведённых на рис. 5.1, 5.2

Связь $\tilde{\mu}$ с химическим потенциалом системы μ даётся соотношением $\tilde{\mu} = (\mu - E_{bp})/\omega^*$. Из (5.8)-(5.9) также следуют выражения для свободной энергии: $\Delta F = -2\Delta E/3$, $\Delta F = F(T) - F(0)$, $\Delta E = E(T) - E(0)$, и энтропии $S = -\partial F/\partial T$.

На рис. 5.3 приведены температурные зависимости $\Delta\tilde{E} = \tilde{E} - \tilde{E}_{bp}$ для вышеуказанных значений параметров $\tilde{\omega}_i$. Точки излома на кривых $\Delta\tilde{E}_i(\tilde{T})$ соответствуют значениям критических температур T_{ci} .

Полученные зависимости позволяют найти теплоёмкость ТИ-биполярного газа: $C_v(\tilde{T}) = d\tilde{E}/d\tilde{T}$. Из (5.8) для $C_v(\tilde{T})$ при $\tilde{T} \leq \tilde{T}_c$ получим:

$$C_v(\tilde{T}) = \frac{\tilde{T}^{3/2}}{2C_{bp}} \left[\frac{\tilde{\omega}^2}{\tilde{T}^2} F_{1/2}\left(\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}}\right) + 6\left(\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}}\right) F_{3/2}\left(\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}}\right) + 5F_{5/2}\left(\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}}\right) \right], \quad (5.10)$$

$$F_{1/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{x}} \frac{dx}{e^{x+\alpha} - 1}.$$

Из (5.10) следует известная экспоненциальная зависимость теплоёмкости при низких температурах $C_v \sim \exp(-\omega_0/T)$, обусловленная наличием энергетической щели ω_0 .

На ис. 5.4 приведены температурные зависимости теплоёмкости $C_v(\tilde{T})$ для вышеуказанных значений параметров $\tilde{\omega}_i$. В Таблице 5.1 для значений параметров $\tilde{\omega}_i$ приведены величины скачков теплоёмкости:

$$\Delta \frac{\partial C_v(\tilde{T})}{\partial \tilde{T}} = \frac{\partial C_v(\tilde{T})}{\partial \tilde{T}} \Big|_{\tilde{T}=T_c+0} - \frac{\partial C_v(\tilde{T})}{\partial \tilde{T}} \Big|_{\tilde{T}=T_c-0} \quad (5.11)$$

в точках перехода.

Полученные зависимости позволяют найти скрытую теплоту перехода $q = TS$, S – энтропия надконденсатных частиц. В точке перехода эта величина равна: $q = 2T_c C_v(T_c - 0)/3$, где $C_v(T)$ определяется формулой (5.10), и для вышеуказанных значений параметров $\tilde{\omega}_i$ приведена в Таблице 5.1.

Выше мы рассмотрели термодинамические характеристики бозе-конденсата с изотропным фоновым спектром. В действительности в большинстве ВТСП материалов СП щель зависит от волнового вектора. Так, например, в YBCO с оптимальным допированием зависимость щели от \vec{k} имеет вид:

$$\omega_0(\vec{k}) = \Delta_0 |\cos k_x a - \cos k_y a| + \omega_0, \quad (5.12)$$

где $\omega_0(\vec{k})$, согласно вышеизложенному, является фононной частотой. В ТИ-биполярной теории первый член в правой части (5.12) соответствует вкладу волны d-типа, а второй член вкладу – волны s-типа.

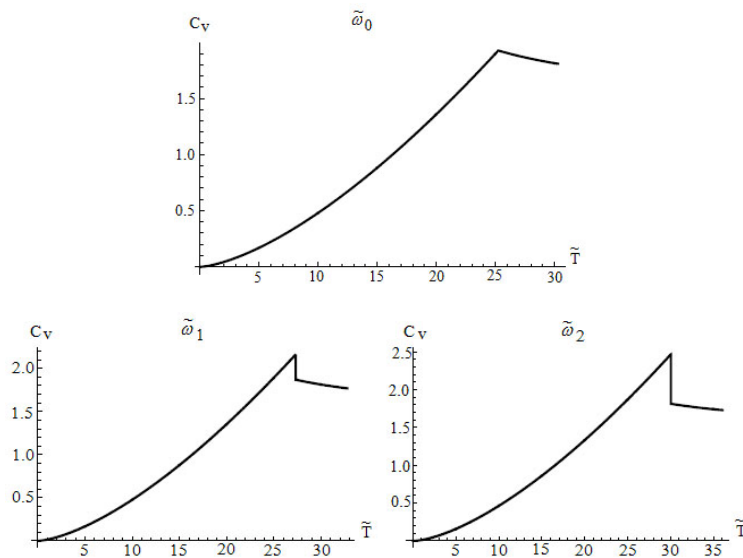
При расчёте термодинамических свойств газа ТИ-биполяронов величина $\omega_0(\vec{k})$ входит в выражение для спектра v_k в виде:

$$v_k = E_{bp} \Delta_{k,0} + (E_{bp} + \omega_0(\vec{k}) + k^2/2M)(1 - \Delta_{k,0}), \quad (5.13)$$

где: $\Delta_{k,0} = 1$ для $k=0$ и $\Delta_{k,0} = 0$ для $k \neq 0$. В результате для величины N' , определяемой (5.2):

$$N' = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3k \frac{1}{e^{(v_k - \mu)/T} - 1}, \quad (5.14)$$

можно сделать следующую оценку. Из (5.12) и (5.13) вытекает следующее условие, когда основной вклад в (5.14) даёт волна s-типа.



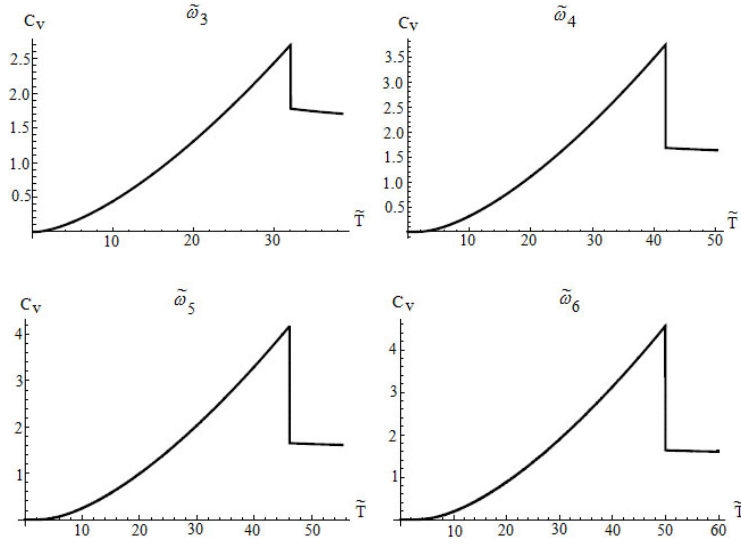


Рис. 5.4. Температурные зависимости теплоёмкости для различных значений параметров $\tilde{\omega}_i$: $\omega_0 = 0$; $\tilde{T}_c = 25.2$; $C_v(\tilde{T}_{c0}) = 2$;

$$\begin{aligned}
 \omega_1 = 0.2; \quad \tilde{T}_{c1} = 27.3; \quad C_v(\tilde{T}_{c1} - 0) = 2.16; \quad C_v(\tilde{T}_{c1} + 0) = 1.9; \\
 \omega_2 = 1; \quad \tilde{T}_{c2} = 30; \quad C_v(\tilde{T}_{c2} - 0) = 2.46; \quad C_v(\tilde{T}_{c2} + 0) = 1.8; \\
 \omega_3 = 2; \quad \tilde{T}_{c3} = 32.1; \quad C_v(\tilde{T}_{c3} - 0) = 2.7; \quad C_v(\tilde{T}_{c3} + 0) = 1.78; \\
 \omega_4 = 10; \quad \tilde{T}_{c4} = 41.9; \quad C_v(\tilde{T}_{c4} - 0) = 3.7; \quad C_v(\tilde{T}_{c4} + 0) = 1.7; \\
 \omega_5 = 15; \quad \tilde{T}_{c5} = 46.2; \quad C_v(\tilde{T}_{c5} - 0) = 4.2; \quad C_v(\tilde{T}_{c5} + 0) = 1.65; \\
 \omega_6 = 20; \quad \tilde{T}_{c6} = 50 \quad C_v(\tilde{T}_{c6} - 0) = 4.6; \quad C_v(\tilde{T}_{c6} + 0) = 1.6.
 \end{aligned}$$

Учитывая, что основной вклад в интеграл (5.14) дают значения $k \approx \sqrt{2MT}$ и $ka \ll 1$, из (5.12) и (5.13) получим $\Delta_0 |\cos k_x a - \cos k_y a| \cong \Delta_0 Ma^2 / \hbar^2 \ll 1$. Таким образом, при $\omega_0 \geq \Delta_0 Ma^2 T / \hbar^2$ основной вклад в интеграл будет давать волна s-типа. В этом случае полученные выше результаты останутся без изменения. Так, например, в случае YBCO величина ω_0 / Δ_0 составляет $\approx 0,15$ [Smilde 2005], [Kirtley 2006], и условие s-приближения в этом случае выполняется с высокой точностью.

6. Статистическая термодинамика 1D газа ГИ-биполяронов

Спектр холстейновского 1D биполярона, как и в 3D-случае, определяется уравнением $D(s) = 0$, где $D(s)$ определяется выражением (3.4), глава 2, и имеет вид $E_n = E_{BP}$, $n = 0$; $E_n = E_{BP} + \omega_0 + k_n^2 / 2$, $n \neq 0$, $k_n = \pm 2\pi(n-1) / N_a$, $n = 1, 2, \dots, N_a / 2 + 1$. С использованием (5.1), (5.2) для

критической температуры Бозе-конденсации получим вместо (5.3) следующее выражение:

$$C_{1D} = \phi_{\tilde{\omega}}(T_C), \quad (6.1)$$

$$\phi_{\tilde{\omega}} = \tilde{T}_C^{1/2} F_{1/2}(\tilde{\omega}/\tilde{T}_C), \quad F_{1/2}(\alpha) = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x}(e^{x+\alpha} - 1)},$$

$$C_{1D} = 2\sqrt{2}\pi \frac{n\hbar}{M^{1/2}\omega^{*1/2}}, \quad \omega^* = \omega_0/\omega, \quad \tilde{T}_C = T/\omega^*,$$

где $n = N/L$ – число биполяронов на единицу длины. На рис. 6.1 показано графическое решение уравнения (6.1) для значений параметров: $\omega^* = 5 \text{ мЭВ} (\approx 58 \text{ К})$, $n = 10^7 \text{ см}^{-1}$ и значений $\tilde{\omega}_1 = 0,2$; $\tilde{\omega}_2 = 1$; $\tilde{\omega}_3 = 2$; $\tilde{\omega}_4 = 10$; $\tilde{\omega}_5 = 15$; $\tilde{\omega}_6 = 20$; $C_{1D} = 34,69$.

Из рис. 6.1 следует, что критическая температура растёт с увеличением фоновой частоты и обращается в ноль при $\omega = 0$. Равенство $T_C = 0$ при $\omega = 0$, соответствует хорошо известному результату, что Бозе-конденсация в одномерном случае невозможна.

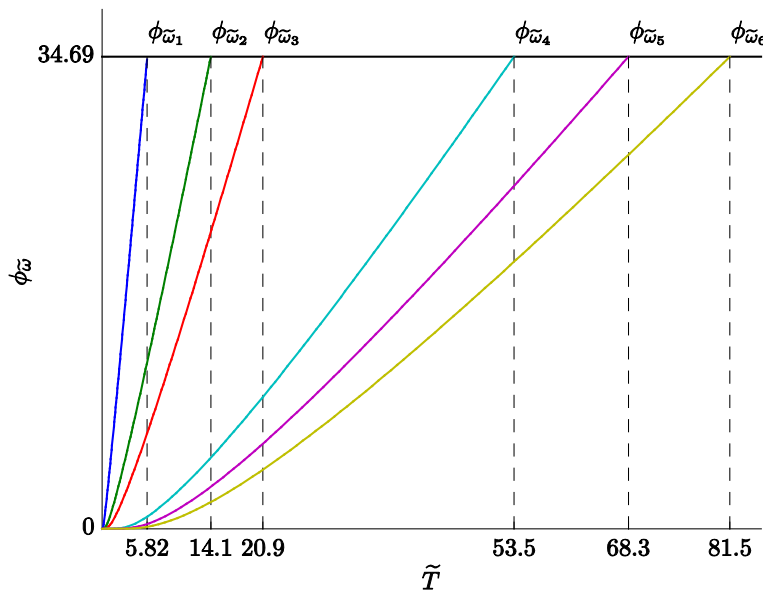


Рис. 6.1. Решения уравнения (6.1) с $C_{1D} = 34,69$ и $\tilde{\omega}_i = 0,2; 1; 2; 10; 15; 20$, которым соответствуют: $\tilde{T}_c : \tilde{T}_{c1} = 5,8$; $\tilde{T}_{c2} = 14$; $\tilde{T}_{c3} = 20,9$; $\tilde{T}_{c4} = 53,5$; $\tilde{T}_{c5} = 68,3$; $\tilde{T}_{c6} = 81,5$.

Из рис. 6.1 также следует, что при увеличении концентрации биполяронов критическая температура возрастает, а при увеличении эффективной массы электрона m убывает.

Из (5.1), (5.2) следует, что:

$$\frac{N'(\tilde{\omega})}{N} = \frac{\tilde{T}^{1/2}}{C_{1D}} F_{1/2}\left(\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}}\right), \quad (6.2)$$

$$\frac{N_0(\tilde{\omega})}{N} = 1 - \frac{N'(\tilde{\omega})}{N}. \quad (6.3)$$

На рис. 6.2 показаны температурные зависимости числа надконденсатных частиц N' и числа частиц N_0 , находящихся в конденсате, для различных значений параметров $\tilde{\omega}_c = \tilde{\omega}(T_c)$.

Из рис. 6.2, как и следовало ожидать, следует, что число частиц в конденсате растёт при увеличении энергии щели ω_i .

Для удельной энергии биполярного газа (5.7) с использованием вышеприведённого выражения для спектра 1D-биполярона получим:

$$\tilde{E} = \tilde{E}_{BP} + \Delta\tilde{E}, \quad \tilde{E}(\tilde{T}) = E/N\omega^*, \quad \tilde{E}_{BP} = E_{BP}/\omega^*, \quad (6.3)$$

$$\Delta\tilde{E} = \frac{\tilde{T}^{3/2}}{C_{1D}} F_{1/2}\left(\frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}}\right) \left[\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{T}} + \frac{F_{3/2}\left(\frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}}\right)}{F_{1/2}\left(\frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}}{\tilde{T}}\right)} \right], \quad (6.4)$$

где химический потенциал μ определяется из уравнения:

$$C_{1D} = \tilde{T}^{1/2} F_{1/2}\left(\frac{\tilde{\omega} - \tilde{\mu}(\tilde{T})}{\tilde{T}}\right), \quad \tilde{\mu} = \begin{cases} 0, & \tilde{T} < \tilde{T}_c \\ \tilde{\mu}(\tilde{T}), & \tilde{T} > \tilde{T}_c \end{cases}. \quad (6.5)$$

Связь между $\tilde{\mu}$ и химическим потенциалом системы μ определяется выражением: $\tilde{\mu} = (\mu - E_{BP})/\omega^*$. Формулы (6.4), (6.5) приводят к следующему выражению для термодинамического потенциала Ω : $\Delta\Omega = -2\Delta E$, $\Delta\Omega = \Omega(T) - \Omega(0)$, $\Delta E = E(T) - E(0)$ и энтропии $S = -\partial\Omega/\partial T$ ($F = -2E$, $S = -\partial F/\partial T$).

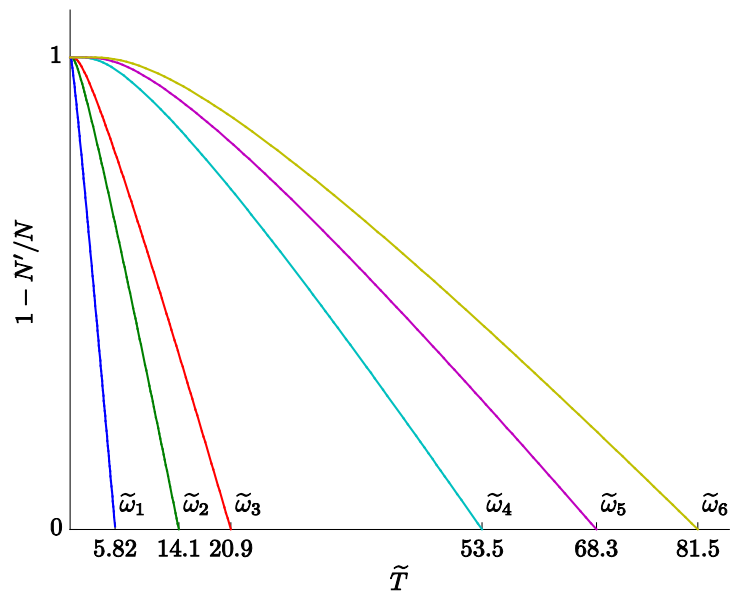


Рис. 6.2. Температурные зависимости относительного числа надконденсатных частиц (соответственно сконденсированных частиц $N_0/N = 1 - N'/N$) для значений параметров $\tilde{\omega}_i$, приведённых на рис. 6.1.

На рис. 6.3 показаны температурные зависимости $\Delta\tilde{E} = \tilde{E} - \tilde{E}_{BP}$ для вышеприведённых значений $\tilde{\omega}_i$. Точки излома в зависимостях $\Delta\tilde{E}_i(\tilde{T})$ соответствуют значениям критических температур T_{c_i} .

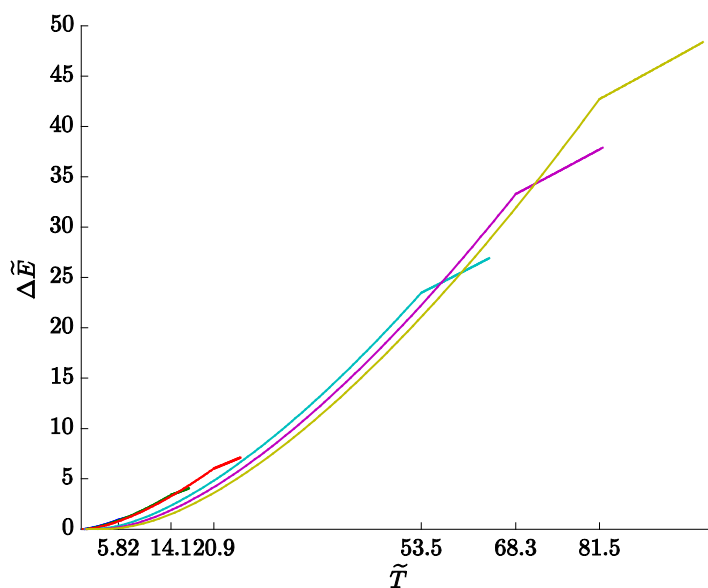


Рис. 6.3. Температурные зависимости $\Delta\tilde{E} = \tilde{E}(\tilde{T}) - \tilde{E}_{BP}$ для значений параметров $\tilde{\omega}_i$, приведённых на рис. 6.1.

Полученные зависимости позволяют определить теплоёмкость газа 1D ТИ-биполяронов: $C_V(\tilde{T}) = d\tilde{E} / d\tilde{T}$.

На рис. 6.4 показаны температурные зависимости $C_V(\tilde{T})$ для вышеприведённых значений параметров $\tilde{\omega}_i$.

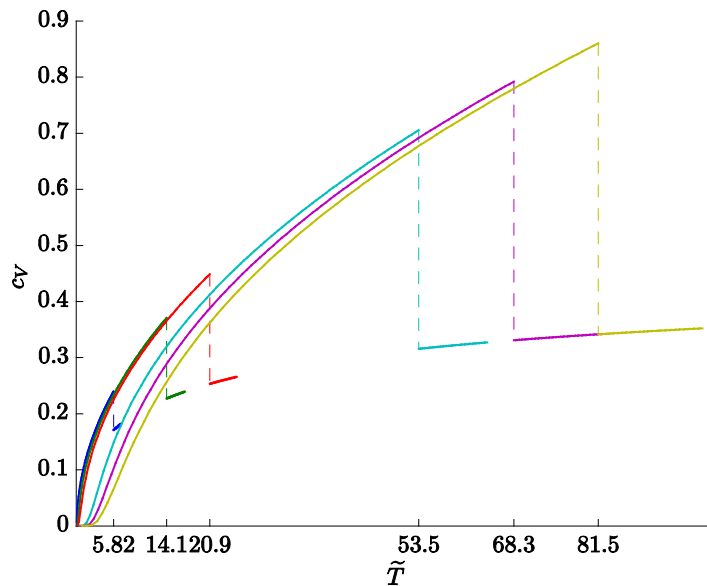


Рис. 6.4. Температурные зависимости теплоёмкостей для значений параметров $\tilde{\omega}_i$, приведённых на рис. 6.1. (численные значения скачков теплоёмкостей приведены в Таблице 6.1)

В Таблице 6.1 приведены численные значения скачков теплоёмкости (5.11) для значений параметров $\tilde{\omega}_i$ в точках перехода.

Таблица 6.1.

| i | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|--|---------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| $\tilde{\omega}_i$ | 0.2 | 1 | 2 | 10 | 15 | 20 |
| \tilde{T}_{c_i} | 5.82 | 14.11 | 20.87 | 53.47 | 68.33 | 81.5 |
| $C_V(\tilde{T}_{c_i} - 0)$ | 0.24 | 0.37 | 0.45 | 0.71 | 0.79 | 0.86 |
| $C_V(\tilde{T}_{c_i} + 0)$ | 0.17 | 0.23 | 0.25 | 0.32 | 0.33 | 0.34 |
| $\frac{\partial C_V(\tilde{T}_{c_i} - 0)}{\partial \tilde{T}}$ | 20.88 $\cdot 10^{-3}$ | 13.51 $\cdot 10^{-3}$ | 11.16 $\cdot 10^{-3}$ | 7.11 $\cdot 10^{-3}$ | 6.33 $\cdot 10^{-3}$ | 5.83 $\cdot 10^{-3}$ |
| $\frac{\partial C_V(\tilde{T}_{c_i} + 0)}{\partial \tilde{T}}$ | 10.22 $\cdot 10^{-3}$ | 4.72 $\cdot 10^{-3}$ | 3.24 $\cdot 10^{-3}$ | 1.19 $\cdot 10^{-3}$ | 0.89 $\cdot 10^{-3}$ | 0.73 $\cdot 10^{-3}$ |
| Δ | -10.66 $\cdot 10^{-3}$ | -8.79 $\cdot 10^{-3}$ | -7.93 $\cdot 10^{-3}$ | -5.92 $\cdot 10^{-3}$ | -5.44 $\cdot 10^{-3}$ | -5.11 $\cdot 10^{-3}$ |

Полученные зависимости дают возможность найти теплоту перехода $q = TS$, где S – энтропия надконденсатных частиц. В точках перехода эта величина будет равна $q = 2T_c \cdot C_V(T_c - 0) = d\tilde{E}/d\tilde{T}$, где \tilde{E} определяется формулами (6.3), (6.4). Значения теплот перехода q_i для вышеуказанных значений параметров $\tilde{\omega}_i$ приведены в Таблице 6.1.

7. Токовые состояния ТИ-биполярного газа

Как известно, отсутствие магнитного поля в объёме сверхпроводника обусловлено существованием компенсирующих это поле поверхностных токов. Так, из условия (2.8) следует, что:

$$\mathbf{P}_R = -\frac{2e}{c}\mathbf{A}_R, \quad (7.1)$$

т.е. в сверхпроводнике существует незатухающий ток \mathbf{j} :

$$\mathbf{j} = \frac{2en_0\mathbf{P}_R}{M_e^*} = -\frac{4e^2n_0}{M_e^*}\mathbf{A}_R, \quad (7.2)$$

(где M_e^* – эффективная масса биполярона), приводящий к эффекту Мейснера, где n_0 – концентрация сверхпроводящих носителей тока: $n_0 = N_0/V$. Сравнивая (7.2) с известным феноменологическим выражением для поверхностного тока \mathbf{j}_S [Шмидт 1997]

$$\mathbf{j}_S = -\frac{c}{4\pi\lambda^2}\mathbf{A} \quad (7.3)$$

и полагая $\mathbf{A} = \mathbf{A}_R$, из равенства $\mathbf{j} = \mathbf{j}_S$ из (7.2), (7.3) получим известное выражение для лондоновской глубины проникновения λ :

$$\lambda = \left(\frac{M_e^*c^2}{16\pi e^2 n_0} \right)^{1/2}. \quad (7.4)$$

Равенство «микроскопического» выражения для тока (7.2) его «макроскопическому» значению не может быть точным. Соответственно, равенство $\mathbf{A} = \mathbf{A}_R$ также является приближённым, так как \mathbf{A}_R представляет собой вектор-потенциал в точке, где находится центр масс двух электронов, в то время как в теории Лондонов \mathbf{A}_R – это

вектор-потенциал в точке, где находится частица. По этой причине более реальным было бы считать рассматриваемые величины пропорциональными. В этом случае выражение для глубины проникновения имеет вид:

$$\lambda = \text{const} \left(\frac{M_e^* c^2}{16\pi e^2 n_0} \right)^{1/2}, \quad (7.4')$$

где постоянный множитель (порядка 1) в (7.4') должен определяться из сравнения с экспериментом.

Выражение (7.1) было получено в случае изотропной эффективной массы носителей тока. В действительности оно имеет более общий характер и не изменяется при учёте анизотропии эффективных масс. Так, например, в слоистых ВТСП материалах кинетическая энергия носителей тока в гамильтониане (2.1) должна быть заменена выражением:

$$T_a = \frac{1}{2m_{\parallel}} \left(\hat{\mathbf{p}}_{\parallel} - \frac{e}{c} \mathbf{A}_{\parallel} \right)^2 + \frac{1}{2m_{\parallel}} \left(\hat{\mathbf{p}}_{2\parallel} - \frac{e}{c} \mathbf{A}_{2\parallel} \right)^2 + \frac{1}{2m_{\perp}} \left(\hat{\mathbf{p}}_{\perp} - \frac{e}{c} \mathbf{A}_{\perp} \right)^2 + \frac{1}{2m_{\perp}} \left(\hat{\mathbf{p}}_{2\perp} - \frac{e}{c} \mathbf{A}_{2\perp} \right)^2, \quad (7.5)$$

где $\hat{\mathbf{p}}_{1,2\parallel}, \mathbf{A}_{1,2\parallel}$ – операторы импульса и вектора-потенциала в плоскостях слоёв (ab-плоскостях); $\hat{\mathbf{p}}_{1,2\perp}, \mathbf{A}_{1,2\perp}$ – соответствующие величины в перпендикулярном плоскостям направлении (вдоль оси c); m_{\parallel}, m_{\perp} – эффективные массы в плоскостях и в перпендикулярном направлении.

В результате преобразования:

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= x, & \tilde{y} &= y, & \tilde{z} &= \gamma z, \\ \tilde{A}_{\tilde{x}} &= A_x, & \tilde{A}_{\tilde{y}} &= A_y, & \tilde{A}_{\tilde{z}} &= \gamma^{-1} A_z, \\ \tilde{p}_{\tilde{x}} &= p_x, & \tilde{p}_{\tilde{y}} &= p_y, & \tilde{p}_{\tilde{z}} &= \gamma^{-1} p_z, \end{aligned} \quad (7.6)$$

где $\gamma^2 = m_{\perp} / m_{\parallel}$, γ - параметр анизотропии, кинетическая энергия \tilde{T}_a оказывается изотропной. Отсюда следует, что: $\tilde{\mathbf{P}}_R + (2e/c)\tilde{\mathbf{A}}_R = 0$. Тогда из (7.6) следует, что соотношение (7.1) оказывается справедливым и в анизотропном случае. Из сказанного следует, что:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{R\parallel} &= -\frac{2e}{c} \mathbf{A}_{R\parallel}, & \mathbf{P}_{R\perp} &= -\frac{2e}{c} \mathbf{A}_{R\perp}, \\ \mathbf{j}_{\parallel} &= 2en_0 \mathbf{P}_{R\parallel} / M_{e\parallel}^*, & \mathbf{j}_{\perp} &= 2en_0 \mathbf{P}_{R\perp} / M_{e\perp}^*. \end{aligned} \quad (7.7)$$

Магнитное поле, направленное перпендикулярно плоскости слоёв, будет индуцировать токи, текущие в плоскости слоёв. При проникновении в образец такое поле будет затухать вдоль плоскости слоёв. Обозначим лондоновскую длину проникновения для магнитного поля перпендикулярного плоскости слоёв (H_{\perp}) через λ_{\perp} , а для магнитного поля, параллельного плоскости слоёв (H_{\parallel}), – через λ_{\parallel} .

Отсюда вытекают выражения для лондоновских длин проникновения магнитного поля в образец:

$$\lambda_{\perp} = \left(\frac{M_{e\perp}^* c^2}{16\pi e^2 n_0} \right)^{1/2}, \quad \lambda_{\parallel} = \left(\frac{M_{e\parallel}^* c^2}{16\pi e^2 n_0} \right)^{1/2}. \quad (7.8)$$

Для λ_{\parallel} и λ_{\perp} часто используют также обозначения λ_{ab} и λ_c соответственно.

Из (7.8) следует, что:

$$\frac{\lambda_{\perp}}{\lambda_{\parallel}} = \left(\frac{M_{e\perp}^*}{M_{e\parallel}^*} \right)^{1/2} = \gamma^*. \quad (7.9)$$

Из (7.8) также следует, что лондоновская длина проникновения зависит от температуры:

$$\lambda^2(0)/\lambda^2(T) = n_0(T)/n_0(0). \quad (7.10)$$

В частности, при $\omega=0$ с использованием (5.4) получим: $\lambda(T) = \lambda(0) \left(1 - (T/T_c)^{3/2} \right)^{-1/2}$. Сравнение полученной зависимости с другими подходами даётся в §11.

Обычно считается, что бозе-система становится сверхпроводящей вследствие взаимодействия между частицами. Существование щели в спектре ТИ-биполярнонов может приводить к их конденсации даже в отсутствие взаимодействия между частицами, и критерий сверхтекучести Ландау

$$v = \hbar\omega_k / P, \quad (7.11)$$

где P – удельный импульс биполяронного конденсата, может выполняться даже для невзаимодействующих частиц. Из условия (7.11) вытекает выражение для максимальной величины плотности тока

$$j_{\max} = env_{\max} :$$

$$j_{\max} = en_0 \sqrt{\frac{2\hbar\omega_0}{M_e^*}}. \quad (7.12)$$

В заключение этого раздела отметим, что все сказанное относилось к локальной электродинамике. Соответственно, выражения, полученные для λ , справедливы только при условии $\lambda \gg \xi$, где ξ – корреляционная длина, определяющая характерный размер пары, т.е. характерный масштаб изменения волновой функции $\psi(r)$ в (2.9). Это условие, как правило, выполняется в ВТСП материалах. В обычных сверхпроводниках выполняется обратное неравенство. Нелокальное обобщение электродинамики сверхпроводников было сделано Пиппардом [Pippard 1950], согласно которому, связь между \mathbf{j}_s и \mathbf{A} в выражении (7.3) может быть записана в виде:

$$\mathbf{j}_s = \int Q(r-r') \mathbf{A}(r') dr', \quad (7.13)$$

где Q – некоторый оператор, радиус действия которого обычно полагается равным ξ . В пределе $\xi \gg \lambda$ это приводит к увеличению абсолютного значения длины проникновения магнитного поля в сверхпроводник, которое становится равным $(\lambda^2 \xi)^{1/3}$ [Pippard 1950].

8. Термодинамические свойства ТИ-биполярного газа в магнитном поле

То, что бозе-конденсация идеального бозе-газа в магнитном поле невозможна [Schafroth 1955] не означает, что механизм БЭК нельзя использовать при описании сверхпроводимости в магнитном поле. Это следует из того факта, что в объёме сверхпроводника магнитное поле тождественно равно нулю. В то же время, отвлекаясь от проблемы сверхпроводимости, нет никаких препятствий рассматривать бозе-газ помещённым в магнитное поле. Представляет интерес исследовать этот вопрос применительно к газу из ТИ-биполяронов.

Прежде всего отметим, что из выражения для $\tilde{\omega}_H$, даваемого (5.3), следует, что при $\omega_0 = 0$ бозе-конденсация ТИ-биполяронов оказывается невозможной, если $H \neq 0$. Для обычного идеального заряженного бозе-газа этот вывод был впервые сделан в [Schafroth 1955]. Вследствие того, что в спектре ТИ-биполяронов имеется щель между основным и возбуждёнными состояниями (раздел 5), для газа ТИ-биполяронов этот вывод при $\omega_0 \neq 0$ становится несправедлив.

Из выражения для $\tilde{\omega}_H$ (5.3) следует, что существует максимальная величина магнитного поля H_{\max} , равная:

$$H_{\max}^2 = \frac{2\omega_0 \hbar^2 M_e}{\eta^2}. \quad (8.1)$$

При $H > H_{\max}$ однородное сверхпроводящее состояние невозможно. Как это следует из (2.11), (2.16), величина η состоит из двух частей $\eta = \eta' + \eta''$. Величина η' опеределяется интегралом, входящим в выражение для $\tilde{\omega}_k$ (2.16). По этой причине η' зависит от формы поверхности образца. Величина η'' определяется суммой, входящей в выражение для $\tilde{\omega}_k$ (2.16), и слабо зависит от формы поверхности образца. Отсюда следует, что величина η может меняться при изменении формы поверхности образца и тем самым приводить к изменению величины H_{\max} . С использованием (8.1) для $\tilde{\omega}_H$ определяемой (5.3) получим:

$$\tilde{\omega}_H = \tilde{\omega} \left(1 - H^2 / H_{\max}^2 \right). \quad (8.2)$$

Для заданной температуры T обозначим $H_{cr}(T)$ величину магнитного поля, при которой сверхпроводимость исчезает. Этому значению поля, согласно (8.2), соответствует $\tilde{\omega}_{H_{cr}}$:

$$\tilde{\omega}_{H_{cr}}(T) = \tilde{\omega} \left(1 - H_{cr}^2(T) / H_{\max}^2 \right). \quad (8.3)$$

Температурная зависимость величины $\tilde{\omega}_{H_{cr}}(T)$ может быть найдена из уравнения (5.3):

$$C_{bp} = \tilde{T}^{3/2} F_{3/2} \left(\tilde{\omega}_{H_{cr}}(\tilde{T}) / \tilde{T} \right).$$

Решение этого уравнения имеет вид, приведённый на рис. 5.1.

С использованием (7.1) и температурной зависимости, приведённой на рис. 5.1, можно найти температурную зависимость $H_{cr}(\tilde{T})$:

$$\frac{H_{cr}^2(\tilde{T})}{H_{max}^2} = 1 - \frac{\omega_{H_{cr}}(\tilde{T})}{\tilde{\omega}}. \quad (8.4)$$

Для $\tilde{T} \leq \tilde{T}_{ci}$ эти зависимости приведены на рис. 8.1.

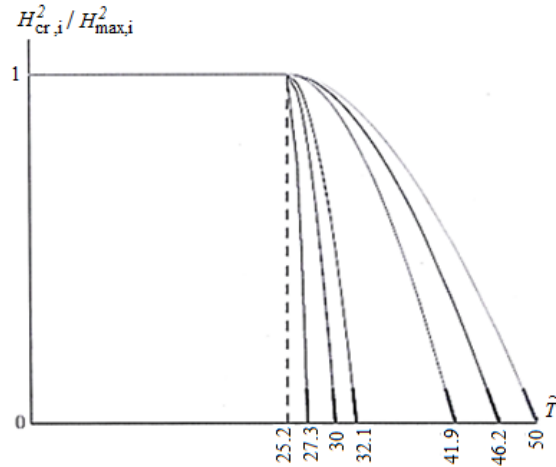


Рис. 8.1 Температурная зависимость $H_{cr,i}^2 / H_{max,i}^2$ на интервале $[0; T_{c,i}]$ для значений параметров $\tilde{\omega}_i$, данных на рис. 5.1.

Согласно рис. 8.1, $H_{cr}(\tilde{T})$ достигает своего максимума при конечной температуре $\tilde{T}_c(\tilde{\omega} = 0) \leq \tilde{T}_c(\omega_{0i})$. Из рис. 8.1 следует, что при температуре ниже, чем $\tilde{T}_c(\tilde{\omega} = 0) = 25.24$, дальнейшее понижение температуры уже не изменяет величины критического поля $H_{cr}(\tilde{T})$ независимо от величины щели $\tilde{\omega}$.

Введём также понятие температуры перехода $T_c(H)$ в магнитном поле H . На рис. 8.2 приведены зависимости $T_c(H)$, вытекающие из рис. 8.1 и определяемые соотношениями:

$$C_{bp} = \tilde{T}_{c,i}^{3/2}(H) F_{3/2}(\tilde{\omega}_{H,i} / \tilde{T}_{c,i}(H)), \quad \tilde{\omega}_{H,i} = \tilde{\omega}_{H=0,i} [1 - H^2 / H_{max,i}^2].$$

Из рис. 8.2 следует, что критическая температура перехода $\tilde{T}_c(H)$ изменяется скачком при достижении магнитным полем значения $H_{max,i}$.

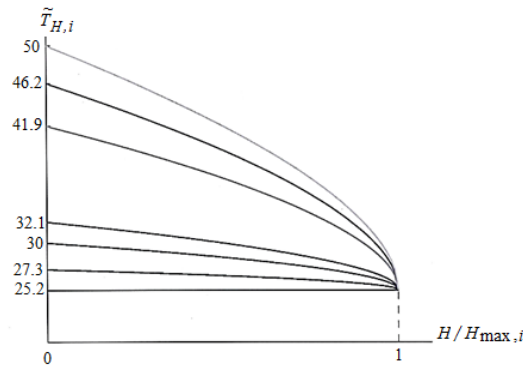


Рис. 8.2 Зависимость критической температуры перехода $\tilde{T}_{H,i}$ от магнитного поля H для значений параметров $\tilde{\omega}_i$, используемых для рис. 5.1.

Для решения вопроса о типе фазового перехода в магнитном поле будем исходить из известного соотношения, связывающего свободные энергии в сверхпроводящем и нормальном состояниях:

$$F_S + H^2/8\pi = F_N, \quad (8.5)$$

где F_S и F_N – свободные энергии единицы объёма сверхпроводящего и нормального состояний соответственно:

$$F_S = \frac{N}{V} E_{bp}(H=0) - \frac{2}{3} \Delta E(\omega_{H=0}) \frac{N}{V}, \quad F_N = \frac{N}{V} E_{bp}(H) - \frac{2}{3} \Delta E(\omega_H) \frac{N}{V},$$

где $\Delta E = E - E_{bp}$, $E = \omega^* \tilde{E}$, где \tilde{E} определяется формулой (5.8).

Дифференцируя (8.5) по температуре и учитывая, что $S = -\partial F / \partial T$, для теплоты перехода q получим:

$$q = T(S_N - S_S) = -T \partial(F_N - F_S) / \partial T = -T \frac{H_{cr}}{4\pi} \frac{\partial H_{cr}}{\partial T}. \quad (8.6)$$

Соответственно, для разности энтропий $S_S - S_N$ получим:

$$S_S - S_N = \frac{H_{cr}}{4\pi} \left(\frac{\partial H_{cr}}{\partial T} \right) = \frac{H_{max}^2}{8\pi\omega^*} (\tilde{S}_S - \tilde{S}_N). \quad (8.7)$$

На рис. 8.3 показана зависимость разности энтропий (8.7) от температуры для различных значений критических температур $T_c(\tilde{\omega}_i)$, приведённых на рис. 5.1. Представленные на рис. 8.3 зависимости могут показаться странными по крайней мере в двух отношениях:

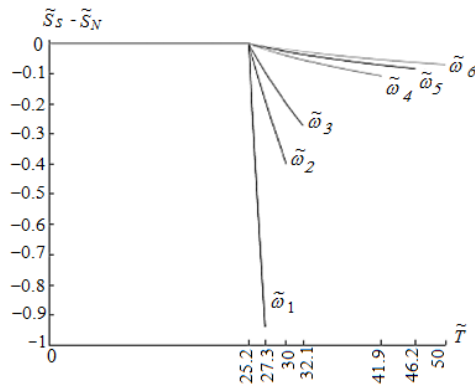


Рис. 8.3 Температурные зависимости разностей энтропий в сверхпроводящем и нормальном состояниях для параметров $\tilde{\omega}_i$, используемых для рис. 8.1, 8.2.

1. В БКШ и теории Гинзбурга-Ландау в самой критической точке T_c разность энтропий обращается в ноль в соответствии с формулой Рутгерса. На рис. 8.3 энтропия является монотонной функцией \tilde{T} и не обращается в ноль при $T = T_c$.

2. По абсолютной величине разность $|\tilde{S}_S - \tilde{S}_N|$ при приближении к предельной точке $\tilde{T}_c = 25.2$, которая соответствует значению $\tilde{\omega} = 0$, казалось бы, должна не возрастать, а уменьшаться, обращаясь в ноль при $\tilde{\omega} = 0$.

Что касается второго пункта, то это действительно имеет место для $|\tilde{S}_S - \tilde{S}_N|$, поскольку величина максимального поля H_{\max} и, соответственно, множителя $H_{\max}/8\pi$, связывающего величины $S_S - S_N$ и $\tilde{S}_S - \tilde{S}_N$ при $\tilde{\omega} = 0$, обращается в ноль.

Что касается первого пункта, то, как будет показано ниже, формула Рутгерса для бозе-конденсата ТИ-биполяронов оказывается неприменимой.

В Таблице 8.1 приводятся значения величины $\tilde{S}_S - \tilde{S}_N$ для значений критических температур, соответствующих различным значениям $\tilde{\omega}_{H_{cr,i}}$. Полученные результаты приводят к ряду фундаментальных следствий.

1. Кривая зависимости $H_{cr}(T)$ (рис. 8.1) имеет нулевую производную, $dH_{cr}(T)/dT = 0$ при $T=0$. Этот результат находится в соответствии с теоремой Нернста, согласно которой энтропия, определяемая (8.6) при $T=0$, равна нулю.

2. Согласно рис. 8.1, $H_{cr}(T)$ – это монотонно спадающая с увеличением T кривая при $T > T_c(\tilde{\omega} = 0)$, а при $T \leq T_c(\tilde{\omega} = 0)$ – постоянная величина. Отсюда следует, что $\partial H_{cr}(T)/\partial T < 0$ при $T > T_c(\tilde{\omega} = 0)$. Следовательно, в интервале температур $[T_c(\tilde{\omega} = 0), T_c(\tilde{\omega})] S_S < S_N$, а в интервале $[0, T_c(\tilde{\omega} = 0)] S_S = S_N$.

Отсюда следуют важные выводы:

1. Переход в интервале $[0, T_c(\tilde{\omega} = 0)]$ происходит без поглощения или выделения скрытой теплоты, т.к. в этом случае $S_S = S_N$. То есть экспериментально он будет виден как фазовый переход второго рода. В действительности в области $[0, T_c(\tilde{\omega} = 0)]$ фазовый переход в сверхпроводящее состояние является фазовым переходом бесконечного рода, поскольку в этой области производные любого порядка от разности свободных энергий $F_S - F_N$, согласно (8.5) и рис. 8.1, обращаются в ноль.

2. Переход в магнитном поле из сверхпроводящего в нормальное состояние в интервале $[T_c(\tilde{\omega} = 0), T_c(\tilde{\omega})]$ которому соответствует $S_S < S_N$, происходит с поглощением скрытой теплоты. Наоборот, при переходе в этом интервале из нормального в сверхпроводящее состояние скрытая теплота выделяется. Фазовый же переход в интервале $[0, T_c(\tilde{\omega} = 0)]$, не сопровождается поглощением или выделением скрытой теплоты, являясь фазовым переходом бесконечного рода.

С учётом того, что удельная теплоёмкость вещества определяется формулой $C = T(\partial S / \partial T)$, разность удельных теплоёмкостей

сверхпроводящего и нормального состояния, согласно (8.7), запишется в виде:

$$C_S - C_N = \frac{T}{4\pi} \left[\left(\frac{\partial H_{cr}}{\partial T} \right)^2 + H_{cr} \frac{\partial^2 H_{cr}}{\partial T^2} \right]. \quad (8.8)$$

Из этого соотношения обычно получают известную формулу Рутгерса, полагая в (8.8) критическое поле $H_{cr}(T_c) = 0$ при $T = T_c$ и оставляя в скобке в правой части (8.8) только первый член:

$$(C_S - C_N)_R = \frac{T}{4\pi} \left(\frac{\partial H_{cr}}{\partial T} \right)_{T_c}^2.$$

Легко, однако, видеть, что в точке $T = T_c$ величина $\omega_{H_{cr}}$, определяемая рис. 5.1, для всех значений температуры имеет конечную производную по T и, следовательно, согласно (8.4), бесконечную производную $\partial H_{cr} / \partial T$ при $T = T_c$. Таким образом, второй член в квадратной скобке (8.8) обращается в $-\infty$, оставляя эту скобку конечной величиной. В результате правильное выражение для разности теплоёмкостей рассматриваемой нами модели бозе-газа должно определяться формулой:

$$C_S - C_N = \frac{T}{8\pi} \frac{\partial^2}{\partial T^2} H_{cr}^2(T) = \frac{H_{\max}^2}{8\pi\omega^*} (\tilde{C}_S - \tilde{C}_N), \quad (8.9)$$

$$\tilde{C}_S - \tilde{C}_N = \tilde{T} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{T}^2} (H_{cr}^2(T) / H_{\max}^2).$$

В Таблице 8.1 приводятся значения величины $\tilde{C}_S - \tilde{C}_N$ для значений критических температур, соответствующих различным значениям $\tilde{\omega}_{H_{cr,i}}$.

Отметим, что, согласно полученным результатам, максимум скачка теплоемкости имеет место при нулевом магнитном поле и уменьшается с увеличением величины магнитного поля, обращаясь в ноль при $H = H_{cr}$, что находится в полном соответствии с экспериментальными данными (раздел 11). Сравнение скачков теплоёмкости, приведённых на рис. 5.4, с выражением (8.9) позволяет вычислить величину H_{\max} . Полученные таким образом значения H_{\max} для различных значений ω_i

приведены в Таблице 8.1. Эти значения однозначно определяют значения постоянных η в формулах (3.7'), (3.7'').

Таблица 8.1. Величины H_{\max} разностей энтропий $\tilde{S}_S - \tilde{S}_N$ и разностей теплоемкостей $\tilde{C}_S - \tilde{C}_N$ в сверхпроводящем и нормальном состояниях, определяемых соотношениями (8.7) и (8.9), представлены для температур перехода \tilde{T}_{C_i} для тех же значений $\tilde{\omega}_{H_{cr,i}}$, что и на рис. 5.1.

| i | $\tilde{\omega}_{H_{cr,i}}$ | \tilde{T}_{C_i} | $\tilde{S}_S - \tilde{S}_N$ | $\tilde{C}_S - \tilde{C}_N$ | $H_{\max} \cdot 10^{-3}$ Ое |
|-----|-----------------------------|-------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| 0 | 0 | 25.2 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 0.2 | 27.3 | -0.94 | -11.54 | 2.27 |
| 2 | 1 | 30 | -0.4 | -2.18 | 7.8 |
| 3 | 2 | 32.1 | -0.27 | -1.05 | 13.3 |
| 4 | 10 | 41.9 | -0.1 | -0.19 | 47.1 |
| 5 | 15 | 46.2 | -0.08 | -0.12 | 64.9 |
| 6 | 20 | 50 | -0.07 | -0.09 | 81.5 |

Из сказанного следует, что температурное разложение Гинзбурга–Ландау для критического поля вблизи критической температуры T_c неприменимо для бозе-конденсата ТИ-биполяронов. Поскольку температурная зависимость $H_{cr}(T)$ определяет температурные зависимости всех термодинамических величин, то этот вывод справедлив для всех таких величин. Как было отмечено во введении, этот вывод является следствием того, что теория БКШ в силу своей неаналитичности по константе связи ни при каких условиях не переходит в теорию биполярного конденсата.

Выше был рассмотрен изотропный случай. В анизотропном случае из формул (3.7'), (3.7'') следует, что:

$$H_{\max}^2 = H_{\max\perp}^2 = \frac{2\omega_0 M_{\perp} \hbar^2}{\eta^2}, \quad \mathbf{B} \parallel \mathbf{c}, \quad (8.10)$$

т.е. в случае, когда магнитное поле направлено перпендикулярно плоскости слоёв, и:

$$H_{\max}^2 = H_{\max\parallel}^2 = \frac{2\omega_0 M_{\parallel} \hbar^2}{\eta^2}, \quad \mathbf{B} \perp \mathbf{c}, \quad (8.11)$$

в случае, когда магнитное поле лежит в плоскости слоёв. Из (8.10), (8.11) следует, что:

$$\frac{H_{\max\perp}^2}{H_{\max\parallel}^2} = \sqrt{\frac{M_{\perp}}{M_{\parallel}}} = \gamma. \quad (8.12)$$

Из (8.4), (8.11), (8.12) для критического поля $H_{cr}(\tilde{T})$ в перпендикулярном и параллельном к плоскости слоёв направлениях получим:

$$H_{cr\parallel,\perp}(\tilde{T}) = H_{\max\parallel,\perp} \sqrt{1 - \omega_{H_{cr}}(\tilde{T})/\tilde{\omega}}. \quad (8.13)$$

Из (8.8) следует, что отношение $H_{cr\parallel}(\tilde{T})/H_{cr\perp}(\tilde{T})$ не зависит от температуры. Сравнение полученных зависимостей с экспериментом проводится в главе 4.

9. Трансляционно – инвариантные биполярны и псевдощелевая фаза

Одним из наиболее удивительных и загадочных явлений высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) считается существование псевдощелевой фазы при температуре выше критической температуры сверхпроводящего (СП) перехода [Norman 2005], [Vishik 2010], [Timusk 1999], [Huefner 2008], [Lee 2006]. В псевдощелевой фазе спектральная плотность состояний вблизи поверхности Ферми обнаруживает щель при $T > T_c$, где T_c – температура СП перехода, которая существует вплоть до значений температур $T^*(T^* > T_c)$, выше которых псевдощель исчезает. В настоящее время объяснение этого явления сводится к двум возможностям. Согласно первой, считается, что при $T > T_c$ в образце сохраняются некогерентные электронные пары, а при $T > T_c$ их движение становится когерентным и они переходят в СП состояние. При $T > T^*$ пары разрушаются и псевдощелевое состояние исчезает [Randeria 1998], [Franz 2007], [Emery 1995], [Curty 20036]. Согласно второй, переход в псевдощелевую фазу не связан со сверхпроводимостью, а обусловлен образованием некоторой фазы со

скрытым параметром порядка или фазы со спиновыми флуктуациями [Moon 2009], [Садовский 2001], [Bardeen 1957].

В настоящее время все более доминирующей точкой зрения на природу псевдощели ВТСП становится первая, которая связана с представлением о существовании спаренных электронных состояний при $T > T_c$. Вопрос же о природе самих спаренных состояний при этом остается открытым. В данной книге в качестве спаренных электронных состояний мы рассматриваем трансляционно-инвариантные биполярны.

ТИ-биполяронная теория СП, основанная на гамильтониане электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) Пекара-Фр  лиха, когда ЭФВ, в отличие от теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) [Bardeen 1957], нельзя считать слабым, была построена в работах [Lakhno 2018, 2019 Physica C, 2019 Cond. Mat.] (см. также обзор [Lakhno 2020]), результаты которых изложены в главах 1 и 2. Роль куперовских пар в этой теории играют ТИ-биполярны, корреляционный размер которых (≈ 1 нм) много меньше, чем у куперовских пар ($\approx 10^3$ нм). Согласно [Lakhno 2018, 2019 Physica C, 2019 Cond. Mat., 2020] в ВТСП материалах ТИ-биполярны образуются вблизи поверхности Ферми и представляют собой заряженный бозе-газ, способный испытывать конденсацию Бозе-Эйнштейна (БЭК) при высокой критической температуре, которая определяет температуру СП перехода.

В отличие от куперовских пар, ТИ-биполярны имеют собственный спектр возбуждений (Гл. 2):

$$E_k^{bp} = E_{bp} \Delta_{k,0} + (\omega_0 + E_{bp} + k^2/2M_e)(1 - \Delta_{k,0}), \quad (9.1)$$

$$M_e = 2m, \quad \Delta_{k,0} = 1 \text{ для } k=0 \text{ и } \Delta_{k,0} = 0 \text{ для } k \neq 0,$$

где E_{bp} – энергия основного состояния ТИ-биполярона (отсчитываемого от уровня Ферми), ω_0 – частота оптического фонона, m – масса зонного

электрона (или дырки), k – волновой вектор, нумерующий возбужденные состояния ТИ-биполярона.

Этот спектр имеет щель, которая в изотропном случае равна частоте оптического фонона ω_0 . При этом случаю слабого ЭФВ соответствует неравенство $\omega_0 \gg |E_{bp}|$, случаю сильной связи – $\omega_0 \ll |E_{bp}|$ и $\omega_0 \sim |E_{bp}|$ в случае промежуточной силы связи. Согласно [Lakhno 2018, 2019 Physica C, 2019 Cond. Mat., 2020] число ТИ-биполяронов N_{bp} при температуре $T=0$ равно: $N_{bp} \cong N\omega_0/2E_F$, где N – полное число электронов (дырок), E_F – энергия Ферми, то есть $N_{bp} \ll N$.

Картина СП, в основе которой лежит представление о ТИ-биполяроне, как о фундаментальном бозоне, ответственном за сверхпроводящие свойства, объясняет многие термодинамические и спектроскопические свойства ВТСП (см. Гл. 4). По этой причине представляет интерес рассмотреть вопрос о температуре перехода T^* в псевдощелевое состояние.

Температура псевдощелевой фазы. Очевидно, что температура перехода из псевдощелевой фазы в нормальную T^* в рассматриваемой модели определяется распадом ТИ-биполяронов на отдельные ТИ-поляроны. С термодинамической точки зрения, величина T^* должна определяться из условия, при котором свободная энергия ТИ-биполяронного газа превосходит свободную энергию ТИ-поляронного газа, определяемую спектром ТИ-поляронов:

$$E_k^p = E_p \Delta_{k,0} + (\omega_0 + E_p + k^2/2m)(1 - \Delta_{k,0}), \quad (9.2)$$

где E_p – энергия основного состояния полярона.

Для дальнейшего существенно, что число ТИ-биполяронов в ВТСП соединениях $N_{bp} \ll N$. При $n = N/V = 10^{21} \text{ см}^{-3}$, где V – объем системы, типичные значения n_{bp} составляют порядок $n_{bp} \sim 10^{18} \div 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (Гл. 4). Учитывая, что $T^* > T_C$, для расчета статистической суммы биполяронного газа Z_{bp} вблизи T^* можно использовать классическое

приближение, условием которого в области стабильности биполярного газа является выполнение неравенства:

$$T^* > T > T_C. \quad (9.3)$$

В этом случае выражение для статистической суммы ТИ-биполярного газа имеет вид:

$$Z_{bp} = \frac{1}{h^{3N_{bp}} N_{bp}!} \prod_{i=1}^{N_{bp}} \int d^3 k_i e^{-E_{k_i}^{bp}/T} = \left[e^{-(\omega_0 + E_{bp})/T} \left(\frac{2\pi M_e T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{eV}{N_{bp}} \right]^{N_{bp}} \quad (9.4)$$

где $e \approx 2,781$ – основание натуральных логарифмов, $h = 2\pi\hbar$ – постоянная Планка.

Соответственно, для статистической суммы ТИ-поляронного газа, образовавшегося в результате распада ТИ-биполяронов, аналогично (9.4) получим:

$$Z_p = \left[e^{-(\omega_0 + E_p)/T} \frac{(2\pi m T)^{3/2}}{h^3} \frac{eV}{2N_{bp}} \right]^{2N_{bp}}. \quad (9.5)$$

Условие устойчивости ТИ-биполярного газа относительно его распада на ТИ-поляронный газ имеет вид:

$$Z_{bp} \geq Z_p, \quad (9.6)$$

где равенство отвечает случаю равновесия между обоими газами, которое соответствует уравнению для определения температуры T^* перехода из нормальной в псевдощелевую фазу.

Подстановка (9.4), (9.5) в (9.6) приводит к условию:

$$\Delta = |E_{bp}| + \omega_0 - 2|E_p| \geq \frac{3}{2} T \ln \kappa T, \quad \kappa = \left(\frac{e}{4} \right)^{2/3} \frac{\pi m}{n_{bp}^{2/3} h^2}. \quad (9.7)$$

В случае равенства из (9.7) следует уравнение для определения T^* :

$$z = W e^W, \quad T^* = \kappa^{-1} e^W, \quad z = 2\kappa\Delta/3. \quad (9.8)$$

На рис. 9.1 показано решение $W=W(z)$ (функция Ламберта) (9.8) при условии выполнения ограничения (9.3).

Оно существует на интервале $-e^{-1} < z < \infty$. На интервале $-e^{-1} < z < 0$ функция Ламберта отрицательна. Требование (9.3) приводит к условию: $-2,28 < W < \infty$. С учетом выражения для температуры СП перехода (5.3):

$$T_C = T_C(\omega_0) = (F_{3/2}(0)/F_{3/2}(\omega_0/T_C))^{3/2} T_C(0), \quad (9.9)$$

$$T_C(0) = 3,31\hbar^2 n_{bp}^{2/3} / M_e, \quad F_{3/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{t^{1/2} dt}{e^{t+x} - 1},$$

для T^* из (9.8) получим следующее выражение:

$$T^* \approx 9,8(F_{3/2}(\omega_0/T_C)/F_{3/2}(0))^{2/3} T_C \exp W. \quad (9.10)$$

Так, например, при $\omega_0 \approx T_C$ из (9.10) получим $T^* \approx 3T_C(1)\exp W$, где $T_C(1)$ определяется (9.9): $T_C(1) \approx 3,3T_C(0)$, то есть при $W=0$ псевдощелевая температура T^* более чем втрое превосходит температуру СП перехода T_C .

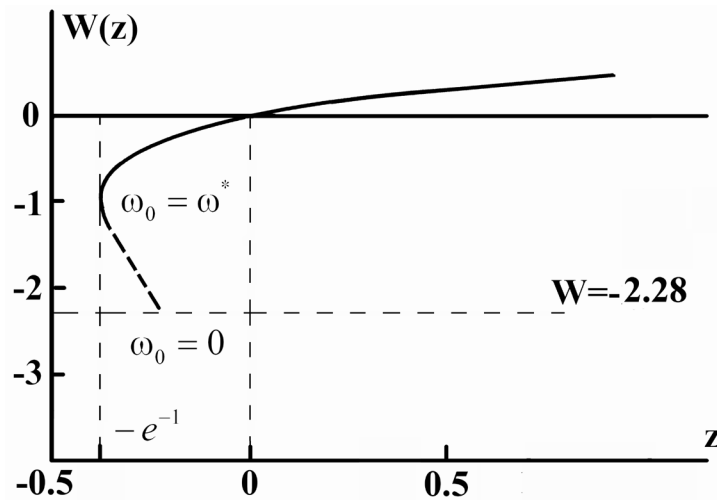


Рис. 9.1. Решение $W(z)$ уравнения (9.8).

При $\omega_0 \gg T_C$ температура псевдощелевой фазы $T^* \gg T(1)$. В этом случае для оценки T^* можно использовать вытекающую из (9.8) приближенную формулу:

$$T^* \approx \frac{2}{3} \Delta / \ln \frac{2}{3} \kappa \Delta, \quad \kappa |\Delta| > 3/2. \quad (9.11)$$

Рассматриваемый предел, однако, редко наблюдается в эксперименте. Отсюда можно сделать вывод, что в ВТСП материалах основной вклад в ЭФВ, приводящий к СП, дают фононные частоты с $\omega_0 < T_C$ (10 мэВ). Эта оценка на порядок меньше оценок фононных частот, которым обычно приписывают главный вклад в СП. Из (9.11) также следует, что T^* растет с увеличением концентрации n_{bp} лишь логарифмически, в то время как $T_C \sim n_{bp}^{2/3}$. Отсюда следует, что при некотором значении n_{bp} может

выполняться условие $T^* < T_c$, что соответствует исчезновению псевдощелевой фазы, как это следует из вида точного решения уравнения (9.8). В ВТСП материалах это наблюдается при увеличении допирования до оптимальной величины, при которой псевдощелевая фаза перестает существовать.

Изотопический коэффициент для псевдощелевой фазы. Построенная в предыдущем разделе ТИ-биполярная теория псевдощелевой фазы позволяет исследовать ее изотопические свойства.

Из (9.8) следует, что, как и СП фаза, псевдощелевая фаза обладает изотопическим эффектом. Согласно (9.8), изотопический коэффициент:

$$\alpha^* = -d \ln T^* / d \ln M, \quad (9.12)$$

где M – масса атома, заменяемого на его изотоп, с учетом того, что $\omega_0 \sim M^{-1/2}$, принимает вид:

$$\alpha^* = \frac{\omega_0}{3T^*} \frac{1}{1+W(z)}, \quad (9.13)$$

из (9.13) и рис. 9.1 следует, что для нижней ветви: $W(z) < -1$ и $\alpha^* < 0$ соответственно, для верхней ветви: $W(z) > -1$ и $\alpha^* > 0$. Отметим, что верхняя ветвь соответствует $\omega_0 > \omega^*$, а нижняя ветвь $\omega_0 < \omega^*$, где $\omega^* \approx T_c$.

Из (9.10), (9.13) следует, что:

$$W = \ln \left[c (F_{3/2}(0) / F_{3/2}(\omega_0 / T_c))^{2/3} T^* / T_c \right], \quad (9.14)$$

где $c \approx 0,1$. На рис. 9.2 показан график зависимости $\alpha^*(\omega_0)$

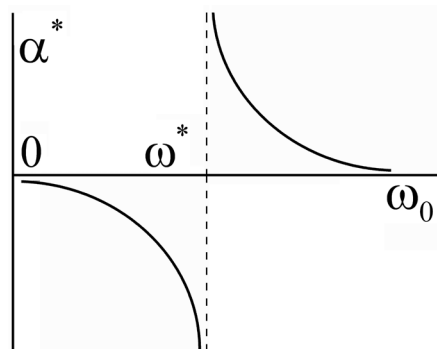


Рис. 9.2. Зависимость изотопического коэффициента для псевдощелевой температуры T^* от фононной частоты ω_0 ($\omega^* \approx T_c$).

Таким образом, в зависимости от величины фононной частоты ω_0 коэффициент α^* может иметь любой знак и величину: $\alpha^* < 0$ при $\omega_0 < \omega^*$ и $\alpha^* > 0$ при $\omega_0 > \omega^*$. При $\omega_0 = \omega^*$ изотопический коэффициент обращается в бесконечность: $\alpha^*(\omega^* \pm 0) = \pm\infty$. Полученные результаты свидетельствуют о том, что изотопная экспонента расходуется при $\omega_0 \rightarrow \omega^*$, т.е. при $T^* \approx T_c$ (рис. 9.2). Большие отрицательные значения изотопического коэффициента в псевдощелевом состоянии экспериментально наблюдались в работах [Rubio 2020], [Bendele 2017], [Furrer 2005]. Отметим, что отрицательные значения изотопического коэффициента в ряде случаев наблюдались и в обычных СП [Bill 1998], превосходя по абсолютной величине значение изотопического коэффициента монокристаллических систем $\alpha=0,5$, даваемое теорией БКШ. Согласно изложенной теории, это возможно при $T^* \approx T_c$.

Изотопический коэффициент для псевдощелевой фазы в магнитном поле. Согласно (3.6), спектр ТИ-биполярона в магнитном поле \vec{B} определяется модифицированным выражением (9.1):

$$E_k^{bp} = E_{bp} \Delta_{k,0} + (\omega_0 + E_{bp} + k/2M_e + \eta_{bp}(\mathbf{Bk})/2M_e)(1 - \Delta_{k,0}), \quad (9.15)$$

где величина η_{bp} , согласно (8.1), связана с первым критическим полем СП B_{\max} соотношением:

$$\eta_{bp} = \sqrt{\frac{2\omega_0 M_e}{B_{\max}}}.$$

Спектр ТИ-полярона будет определяться соотношением (9.2), поскольку в слабых полях $B < B_{\max}$ магнитное поле оставляет его практически неизменным (B_{\max} , будучи первым критическим полем, всегда много меньше величины квантующего магнитного поля ТИ-полярона).

Проводя вычисления, аналогичные разделу 2, получим те же самые соотношения, что и в разделах 2, 3, в которых следует заменить ω_0 на $\tilde{\omega}_0 = \omega_0(1 + B^2/B_{\max}^2)$. Так, например, график зависимости $\alpha(\tilde{\omega}_0)$, определяемый рис. 9.2, в магнитном поле будет графиком зависимости $\alpha(\tilde{\omega}_0)$. Отсюда следует, что при $\tilde{\omega}_0 < \omega^*$ увеличение поля будет приводить

к большим отрицательным значениям изотопического коэффициента, а при $\tilde{\omega}_0 > \omega^*$ – к меньшим положительным значениям α^* . В частности, возможна ситуация, когда при некотором значении поля изотопический коэффициент, будучи отрицательным, при увеличении поля обращается в бесконечность в точке $\tilde{\omega}_0 = \omega^*$ и становится положительным при $\tilde{\omega}_0 > \omega^*$. Представляет интерес проверить эти выводы экспериментально.

Обсуждение. В данном разделе показано, что наличие псевдощелевого состояния и нестандартное поведение изотопического коэффициента в ВТСП материалах может быть объяснено на основе электрон-фононного взаимодействия без привлечения других сценариев [Labbe 1987], [Radtko 1994], [Schüttler 1995], [Nazarenko 1996], [Greco 1999].

В настоящее время продолжается дискуссия о природе псевдощелевой фазы в ВТСП материалах. Из приведенного рассмотрения следует, что псевдощель является универсальным эффектом и должна возникать при появлении в системе ТИ-биполяронов. Тот факт, что в течение длительного времени наличие псевдощелевой фазы связывалось с побочными явлениями, обусловлено наблюдением этой фазы даже в обычных СП [Medicherla 2007], [Chainani 2001], [Yokooya 2002], [Sacéré 2010], [Mondal 2011], [Thakur 2013], в которых наличие псевдофазы объяснялось кристаллографическим беспорядком или понижением размерности, обычно наблюдаемой в разупорядоченных металлах.

В связи с этим важными представляются недавние эксперименты с таким ВТСП, как MgB_2 [Patil 2017]. В отличие от оксидных керамик, MgB_2 не обладает магнитным порядком и, по предположению сторонников внешней природы псевдощелевого состояния, не должен обладать псевдощелью. Чтобы исключить другие возможности, связанные с разупорядочением, эффектами низкой размерности и др., в эксперименте [Patil 2017] использовались высокосовершенные кристаллы. Проведенные в [Patil 2017] эксперименты убедительно

показали наличие псевдощелевого состояния в MgB_2 и ответственность за это состояние ЭФВ. Полученные результаты дают веские доказательства в пользу ТИ-биполярного механизма образования псевдощелевого состояния.

На изложенную здесь простую картину могут накладываться эффекты, связанные со спиновыми флуктуациями, образованием волн зарядовой (CDW) и спиновой (SDW) плотности, волн плотности сконденсированных пар (PDW) и плотности связей (BDW), образованием страйпов (так, например, гигантский изотопический эффект, вызванный ЭФВ, наблюдался в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ вблизи температуры упорядочения заряженных страйпов при замене ^{16}O на ^{18}O [Lanzara 1999]), кластеров, другими типами взаимодействий. Рассмотренный здесь ТИ-биполярный механизм образования псевдощелевой фазы и объяснение на его основе изотопических эффектов в ВТСП материалах представляются также важными ввиду универсальности этого механизма.

В настоящее время имеется лишь небольшое число экспериментов по изучению изотопического эффекта в псевдощелевой фазе. Предложенные в этом разделе эксперименты по влиянию магнитного поля на изотопический коэффициент для температуры перехода в псевдощелевую фазу являются новыми. Соответствие результатов эксперимента теоретическим предсказаниям свидетельствовало бы о справедливости предположения о ТИ-биполярном механизме ВТСП.

В работе [Ляхно Препринт 2020] было высказано предположение о биполярной природе волны зарядовой плотности, соответственно, волны парной плотности в ВТСП (Гл. 6). Если это предположение принять, то фигурирующую в статье величину E_{bp} следует относить к величине $E_{bp}(P_{CDW})$, где P_{CDW} – волновой вектор волны зарядовой плотности: $P_{CDW} = P_{PDW}$. Часть ТИ-биполяронов, которая может существовать при температуре, превышающей температуру образования

CDW, имеет отличный от P_{CDW} импульс и тем самым конечное время жизни, определяя “размазанный” переход между псевдощелевой и нормальной фазами.

10. Скейлинговые соотношения

Скейлинговые соотношения играют важную роль в теории сверхпроводимости, способствуя поиску новых высокотемпературных сверхпроводников с рекордными параметрами. Такие соотношения могут быть обобщением большого числа экспериментов, не имея при этом надёжного теоретического обоснования, или быть выведены исходно из не очень надёжного теоретического построения, но впоследствии иметь очень широкое экспериментальное подтверждение. В качестве примера можно привести закон Уемуры, рассмотренный ниже.

Изложенная теория позволяет дать естественное объяснение некоторым важным скейлинговым соотношениям. В частности, в этом разделе будет дан вывод формулы Александра [Alexandrov 1999], [Alexandrov, Kabanov 1999] и скейлингового закона Хомеса.

Формула Александра. Как было отмечено выше (раздел 3), в анизотропном случае формула (5.3) приобретает вид:

$$\tilde{T}_c = F_{3/2}^{-2/3} (\tilde{\omega} / \tilde{T}_c) \left(\frac{n_{bp}}{M_{\parallel}} \right)^{2/3} \frac{2\pi\hbar^2}{M_{\perp}^{1/3} \tilde{\omega}^*}. \quad (10.1)$$

Удобно перейти в формуле (10.1) от трудно измеряемых в эксперименте величин n_{bp} , M_{\parallel} , M_{\perp} к величинам, непосредственно измеряемым экспериментально:

$$\lambda_{ab} = \left[\frac{M_{\parallel}}{16\pi n_{bp} e^2} \right]^{1/2}, \quad \lambda_c = \left[\frac{M_{\perp}}{16\pi n_{bp} e^2} \right]^{1/2}, \quad R_H = \frac{1}{2en_{bp}}, \quad (10.2)$$

где $\lambda_{ab} = \lambda_{\parallel}$, $\lambda_c = \lambda_{\perp}$ – лондоновские длины проникновения в плоскости слоёв и перпендикулярном направлении, соответственно; R_H –

постоянная Холла. В выражениях (10.2) скорость света полагается равной единице: $c=1$. С использованием соотношений (10.2), из (10.1) получим:

$$k_B T_c = \frac{2^{1/3}}{8} F_{3/2}^{-2/3}(\tilde{\omega}/\tilde{T}_c) \frac{\hbar^2}{e^2} \left(\frac{eR_H}{\lambda_{ab}^4 \lambda_c^2} \right)^{1/3}. \quad (10.3)$$

В формуле (10.3) величина eR_H измеряется в см^3 , λ_{ab} , λ_c – в см , T_c – в кельвинах.

Учитывая, что в большинстве ВТСП материалов $\tilde{\omega} \approx \tilde{T}_c$ и что функция $F_{3/2}(\tilde{\omega}/\tilde{T}_c)$ мало меняется вблизи $\tilde{\omega} \approx \tilde{T}_c$, с использованием значения $F_{3/2}(1) = 0,428$ из (10.3) для T_c получим:

$$T_c \cong 8.7 \left(\frac{eR_H}{\lambda_{ab}^4 \lambda_c^2} \right)^{1/3}. \quad (10.4)$$

Формула (10.4) отличается от формулы Александрова [Alexandrov 1999], [Alexandrov, Kabanov 1999] лишь численным коэффициентом, равным в [Alexandrov 1999], [Alexandrov, Kabanov 1999] 1,64. Как показано в [Alexandrov 1999], [Alexandrov, Kabanov 1999], формула (10.4) практически без исключений правильно описывает связь между параметрами для всех известных ВТСП материалов. Из (10.1) следует, что соотношение Уемуры [Uemura 1989, 1991], является частным случаем формулы (10.4).

Из (10.3), (10.4) в изотропном случае следует также известный закон линейной зависимости T_c от обратной величины квадрата лондоновской длины проникновения.

Закон Хомеса. Закон Хомеса утверждает, что для сверхпроводящих материалов выполняется скейлинговое соотношение [Homes 2004], [Zaanen2004]:

$$\rho_s = C \sigma_{DC}(T_c) T_c, \quad (10.5)$$

где ρ_s – плотность сверхтекучей компоненты при $T=0$, $\sigma_{DC}(T_c)$ – проводимость постоянного тока при $T=T_c$, C – постоянная, равная

$\approx 35 \text{ см}^2$ для обычных сверхпроводников и для ВТСП материалов для тока, текущего в плоскости слоёв.

Входящая в (10.5) величина ρ_S связана с плазменной частотой ω_p известным соотношением $\rho_S = \omega_p^2$ [Erdmenger 2012] ($\omega_p = \sqrt{4\pi n_S e_S^2 / m_S^*}$, где n_S – концентрация сверхпроводящих носителей тока; m_S^* , e_S – масса и заряд сверхпроводящих носителей тока). Используя это соотношение, соотношение $\sigma_{DC} = e_n^2 n_n \tau / m_n^*$, где n_n – концентрация носителей тока при $T = T_C$, m_n^* , e_n – масса и заряд носителей тока при $T = T_C$, и соотношение $\tau \sim \hbar / T_C$, где τ – минимальное планковское время для рассеяния электронов в критической точке [Erdmenger 2012], из (10.5), в предположении $e_S = e_n$, $m_S = m_n$, получим:

$$n_S(0) \cong n_n(T_C). \quad (10.6)$$

В рассматриваемом нами сценарии бозе-конденсации ГИ-биполяронов закон Хомеса в форме (10.6) становится почти очевидным. Действительно, при $T = T_C$ ГИ-биполяроны являются стабильными состояниями (их развал происходит при температуре, равной энергии псевдощели, которая намного превышает T_C). Их концентрация при $T = T_C$ равна n_n и, стало быть, эти биполяроны при $T = T_C$ начинают образовывать конденсат, концентрация которого $n_S(T)$ достигает максимума $n_S(0) = n_n(T_C)$ при $T = 0$ (т.е. когда биполяроны полностью переходят в сконденсированное состояние), что соответствует соотношению (10.6). Отметим, что в рамках теории БКШ объяснить закон Хомеса представляется практически невозможным.

Глава 4. Сравнение с экспериментом

Большинство экспериментов по ВТСП материалам условно можно разделить на термодинамические и спектроскопические. В данной главе рассматриваются основные эксперименты, относящиеся к обеим группам, объяснение которых даётся на основе ТИ-биполярной теории.

1. Термодинамические эксперименты

Успех теории БКШ связан с успешным объяснением ряда экспериментов в обычных металлических сверхпроводниках, в которых ЭФВ не является сильным. Есть основание считать ЭФВ в высокотемпературных керамических СП достаточно сильным [Meevasana 2006], [Meevasana, Ingle 2006], [Mishchenko 2008], и для них теория БКШ плохо применима. В этом случае может быть полезным использование описания свойств ВТСП на основе теории биполяронов. Как известно, специально построенная для описания СП с сильным ЭФВ теория Элиашберга [Элиашберг 1960] неприменима к описанию биполярных состояний [Alexandrov 2003, 1994]. Перечислим некоторые эксперименты по ВТСП, которые находятся в соответствии с ТИ-биполярной теорией.

Согласно основным, имеющимся на сегодняшний день теориям СП (БКШ, RVB, t-J теориям [Bardeen 1957], [Anderson 1997], [Изюмов 1997]), при низких температурах все носители тока должны быть спарены (т.е. плотность сверхпроводящих электронов совпадает со сверхтекучей плотностью). В недавних экспериментах по передопированным СП [Vožovič 2016] было показано, что это не так – лишь небольшая часть носителей тока оказалась в спаренном состоянии. Анализ этой ситуации, проведённый в [Zaanen 2016], показывает, что полученные в [Vožovič 2016] результаты не вписываются в существующие теоретические конструкции. Вышеизложенная ТИ-

биполярная теория СП даёт ответ на вопрос работы [Zaanen 2016] – куда исчезла большая часть электронов в исследованных сверхпроводниках? Он состоит в том, что лишь небольшая часть электронов $n_{bp} : n_{bp} \approx n \omega_0 / E_F \ll n$, находящихся вблизи поверхности Ферми, оказываются спаренными и определяют сверхпроводящие свойства ВТСП материалов.

В действительности, однако, развитая в данной работе теория ЭФВ применима для недодопированных СП и плохо применима для описания экспериментов с передопированными образцами, использованными в [Vožovič 2016]. В частности, мы не можем ожидать в недодопированных образцах линейной зависимости критической температуры от плотности СП электронов, наблюдавшейся в [Vožovič 2016]. Скорее эта зависимость будет нелинейной, как это следует из уравнения (5.3).

Для описания передопированного режима недавно была построена теория [Shaginyan 2017], основанная на идее Ферми-конденсации, разработанной в [Dukelsky 1997], являющаяся обобщением теории БКШ, в которой было показано, что число СП носителей тока составляет лишь малую часть их общего числа, что находится в соответствии с результатами [Vožovič 2016].

Таким образом, мы можем заключить, что результаты, полученные в [Vožovič 2016], являются весьма общими и имеют место как в передопированном, так и в недодопированном случае (см. также [Vožovič 2017]).

Мы также можем ожидать линейной зависимости сопротивления от T при $T > T_c$ как в передопированном, так и в недодопированном случае, поскольку число биполяронов мало по сравнению с полным числом электронов, если ЭФВ является доминирующим, а кристалл – изотропным (Гл. 6).

В противоположность работе [Shaginyan 2017] в недавней работе [Pashitskii 2016] было показано, что линейная зависимость T_c от числа

куперовских пар, наблюдавшаяся в [Vožovič 2016] по передопированным $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_2\text{O}$ кристаллам, может быть объяснена с точки зрения БКШ, если основываться на плазмонном механизме СП. Тем не менее, представляется, что специальный случай, рассмотренный в [Pashitskii 2016], не может объяснить общий характер результатов, полученный в [Vožovič 2016].

Вопрос о несоответствии БКШ результатам [Vožovič 2016] и другими теориями СП также рассматривался в недавней работе [Hai 2018], в которой разработана простая модель биполярной СП и было показано, что число биполярных носителей тока должно быть мало по сравнению с полным числом электронов. Результаты, полученные в [Hai 2018], подтверждают результаты [Laksho 2019, 2018, 2019(1)] о малой доле спаренных состояний в пределе низких температур.

Другим важным свидетельством в пользу биполярного механизма СП являются эксперименты по измерению шума туннельного тока в гетероструктурах LSCO/LCO/LSCO, выполненные в работе [Zhou 2019].

Согласно этим экспериментам, спаренные состояния носителей тока существуют и при $T > T_c$, то есть их образование предшествует образованию сверхпроводящей фазы, что является решающим подтверждением применимости биполярной картины к высокотемпературным оксидам. Этот вывод подтверждают также результаты терагерцовой спектроскопии [Vilbro 2011].

На рис. 5.3 Гл. 3. показаны типичные зависимости $E(\tilde{T})$. Из них следует, что в точке перехода энергия является непрерывной функцией \tilde{T} . Это означает, что на сам переход энергию затрачивать не надо и переход является фазовым переходом 2-го рода в полном соответствии с экспериментом. В то же время переход бозе-частиц из конденсатного состояния в надконденсатное связан с энергозатратами, которые определяются величиной q (Гл. 3., раздел 5, Таблица 5.1), определяющей

скрытую теплоту перехода бозе-газа, что делает такой переход фазовым переходом 1-го рода.

Рассмотрим в качестве примера ВТСП $YBa_2Cu_3O_7$ (YBCO) с температурой перехода $90 \div 93$ К, объёмом элементарной ячейки: $0,1734 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$, концентрацией дырок $n \approx 10^{21} \text{ см}^{-3}$. Согласно оценкам [Горьков 1988], энергия Ферми равна $E_F = 0,37$ эВ. Концентрацию ТИ-биполяронов в $YBa_2Cu_3O_7$ найдём из уравнения (5.3):

$$\frac{n_{bp}}{n} C_{bp} = f_{\tilde{\omega}}(\tilde{T}_c),$$

с $\tilde{T}_c = 1,6$. В Таблице 5.1 главы 3 приводятся значения $n_{bp,i}$ для значений параметров $\tilde{\omega}_i$, приведённых в (раздел 5, Гл. 3). Из Таблицы 5.1 следует, что $n_{bp,i} \ll n$. Таким образом, только малая часть носителей тока находится в биполярном состоянии. Отсюда следует, в соответствии с результатами раздела 4 Гл. 3, что кулоновское взаимодействие биполяронов будет заэкранировано неспаренными электронами, что оправдывает рассматриваемое нами приближение невзаимодействующего газа ТИ-биполяронов.

Согласно излагаемому подходу, для возникновения СП необходимо образование спаренных состояний. Необходимое условие образования таких состояний вблизи поверхности Ферми, согласно [Lakhno 2017], имеет вид: $E_{bp} < 0$. Соответственно, величина псевдощели, согласно результатам раздела 4 Гл. 3, будет равна:

$$\Delta_1 = |E_{bp} + u_0|. \quad (1.1)$$

Естественно, эта величина не зависит от вектора \mathbf{k} , но зависит от концентрации носителей тока, т.е. от уровня допирования.

В изложенном простейшем варианте теории СП щель ω_0 не изменяется при переходе из конденсированного в неконденсированное состояние, т.е. при переходе из сверхпроводящего в несверхпроводящее состояние и, стало быть, ω_0 имеет смысл также и псевдощели:

$$\Delta_2 = \omega_0(\mathbf{k}), \quad (1.2)$$

которая зависит от волнового вектора \mathbf{k} .

Многочисленные дискуссии о проблеме щели и псевдощели исходят из утверждения, что энергетическая щель в ВТСП определяется энергией связи куперовских пар, что приводит к неразрешимым противоречиям (см. обзоры [Damascelli 2003, Norman 2005, Lee 2014, Hashimoto 2014, Timusk 1999], посвящённые этой проблеме).

В действительности величина СП щели Δ_2 , определяемая (1.2), вообще говоря, не имеет никакого отношения к энергии спаренных состояний, которая определяется E_{bp} . Согласно (8.5), (9.2) Гл. 1, как при малых значениях константы ЭФВ α , так и при больших α энергия биполярона $|E_{bp}| \sim \alpha^2 \omega_0$, т.е. $|E_{bp}|$ вообще не зависит от ω_0 .

Так, например, в рамках излагаемой нами концепции становится очевидным ответ на вопрос, почему псевдощель Δ_2 имеет ту же анизотропию, что и СП щель – это одна и та же щель. Очевидным становится также ответ на вопрос, почему щель и псевдощель слабо зависят от температуры. В частности, понятным становится, почему при СП переходе щель возникает сразу и не обращается в ноль при $T = T_c$ (не БКШ поведение). Часто дискутируемый вопрос, какой параметр порядка следует сопоставить псевдощелевой фазе (т.е. является ли псевдощелевая фаза отдельным состоянием материи [Norman 2005]), в рамках изложенной теории представляется лишённым смысла.

В настоящее время существует много методов измерения щели: фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES), рамановская (комбинационная) спектроскопия, туннельная сканирующая спектроскопия, магнитное нейтронное рассеяние и др. Согласно [Timusk 1999], для максимальной величины щели Y BCO (6.6) (в антинодальном направлении в ab -плоскости) было получено $\Delta_1/T_c \approx 16$. Это даёт для $|E_{bp}| \approx 80$ мэВ.

Определим теперь характерную энергию фононов, ответственных за образование ТИ-биполяронов и сверхпроводящих свойств оксидных керамик, т.е. величину СП щели Δ_2 . С этой целью воспользуемся сравнением рассчитанных значений скачков теплоёмкостей с экспериментальными данными.

Скачок теплоёмкости, вычисленный теоретически (Гл. 3, рис. 5.4), совпадает с экспериментальными значениями в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [Overend 1994] при $\tilde{\omega} = 1,5$, т.е. при $\omega = 7,5$ мэВ. Это соответствует концентрации ТИ-биполяронов $n_{bp} = 2,6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. С учётом того, что $|E_{bp}| \approx 0,44\alpha^2\omega$ [Лажно 2015], $|E_{bp}| = 80$ мэВ, $\omega = 7,5$ мэВ для константы ЭФВ α получим: $\alpha \approx 5$, что заведомо лежит за пределами применимости БКШ.

Как известно, в теории БКШ скачок теплоёмкости равен: $(C_s - C_n)/C_n = 1,43$, где C_s – теплоёмкость в сверхпроводящей фазе, а C_n – в нормальной фазе, и не зависит от параметров модельного гамильтониана. Как следует из численных расчётов, приведённых на рис. 5.4 и в таблице 5.1 в главе 3, в отличие от теории БКШ, величина скачка зависит от фононной частоты. Таким образом, изложенный подход предсказывает существование изотопического эффекта для скачка теплоёмкости.

Отметим, что при расчёте температуры перехода считалось, что эффективная масса M_e в главе 3, в уравнении (5.3) не зависит от направления волнового вектора, то есть был рассмотрен изотропный случай.

В анизотропном случае, выбирая в качестве координатных главные оси вектора \mathbf{k} , получим величину $(M_{ex}M_{ey}M_{ez})^{1/3}$ вместо эффективной массы M_e . В слоистых ВТСП материалах значения эффективных масс, лежащих в плоскости слоёв M_{ex}, M_{ey} близки по величине. Полагая в этом случае $M_e = M_{ex} = M_{ey} = M_{\parallel}$, $M_{ez} = M_{\perp}$, получим вместо величины C_{bp} ,

определяемой в главе 3, (5.3), величину $\tilde{C}_{bp} = C_{bp}/\gamma$, $\gamma^2 = M_{\perp}/M_{\parallel}$ – параметр анизотропии. Таким образом, учет анизотропии эффективных масс даёт для концентрации n_{bp} величину $\tilde{n}_{bp} = \gamma n_{bp}$. Следовательно, учёт анизотропии может на порядок и более увеличить оценку концентрации ТИ-биполяронов. Если для $YBa_2Cu_3O_7$ принять оценку $\gamma^2 = 30$ [Marouchkine 2004], то для концентрации ТИ-биполяронов получим: $\tilde{n}_{bp} = 1.4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, что оставляет в силе общий вывод: в рассматриваемом случае лишь малая часть носителей тока находится в ТИ-биполярном состоянии. Ситуация может измениться, если параметр анизотропии очень велик. Так, например, в слоистых ВТСП $Bi-Sr-Ca-Cu-O$ параметр анизотропии $\gamma > 100$, соответственно концентрация ТИ-биполяронов в этих соединениях может быть одного порядка с полной концентрацией носителей тока.

Другой важный вывод, к которому приводит учёт анизотропии эффективных масс – зависимость температуры перехода T_c не от n_{bp} и M_{\parallel} по отдельности, а только от их отношения, что непосредственно следует из (5.3) в главе 3. Это явление известно как закон Уемуры. В предыдущем разделе было получено более общее соотношение, известное как формула Александра, частным случаем которой является закон Уемуры.

В числе экспериментов, в которых участвует внешнее магнитное поле, важнейшую роль играют эксперименты по измерению лондоновской глубины проникновения λ . В $YBa_2Cu_3O_7$ для λ при $T=0$ в работе [Buckel 2004] было получено $\lambda_{ab} = 150 \div 300 \text{ нм}$, $\lambda_c = 800 \text{ нм}$. Такой же порядок этих величин приводится в большом числе работ [Edstam 1994, Panagoroulos 1998, Pereg-Barnea 2004, Bonn 1993]. В работе [Pereg-Barnea 2004] (см. также ссылки в этой статье) показано, что анизотропия длин λ_a и λ_b в купратных плоскостях в зависимости от типа кристаллической структуры может составлять 30%. Если принять

получаемое в большинстве работ значение $\lambda_a = 150 \text{ nm}$ и $\lambda_c = 800 \text{ nm}$, то для параметра анизотропии, согласно (7.9) в главе 3, получим $\gamma^{*2} \approx 30$ - значение, обычно используемое для кристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.

Температурная зависимость $\lambda^2(0)/\lambda^2(T)$ изучалась во многих работах (см. [Vonn 1993] и ссылки в ней). На рис. 1.1 показано сравнение различных кривых для $\lambda^2(0)/\lambda^2(T)$. В работе [Vonn 1993] показано, что в высококачественных кристаллах $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ температурная зависимость $\lambda^2(0)/\lambda^2(T)$ хорошо аппроксимируется простой зависимостью $1-t^2$, $t = T/T_c$. На рис. 1.2 показано сравнение экспериментальной зависимости $\lambda^2(0)/\lambda^2(T)$ с теоретической зависимостью:

$$\frac{\lambda^2(0)}{\lambda^2(T)} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \frac{F_{3/2}(\omega/T)}{F_{3/2}(\omega/T_c)}, \quad (1.3)$$

вытекающей из (7.10), (5.5), (5.6) в главе 3. Таким образом, имеется хорошее согласие между экспериментом и теоретической зависимостью (1.3).

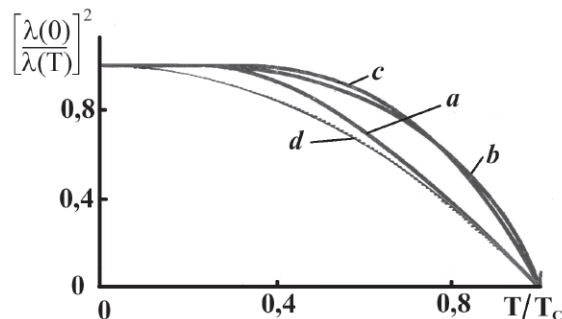


Рис. 1.1 Глубина проникновения магнитного поля теории БКШ (a – локальное приближение, b – нелокальное приближение); эмпирическое правило $\lambda^2 \sim 1 - (T/T_c)^4$ (c) [Моделунг 1972]; $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (d) [Vonn 1993].

Разработанная теория позволяет провести сравнение с экспериментом температурной зависимости величины критического магнитного поля в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [Wu 1990]. Поскольку построенная в разделе 8, Гл. 3 теория описывает однородное состояние газа ТИ-биполяронов, то рассматриваемое критическое поле соответствует однородной мейснеровской фазе. В работе [Wu 1990] для такого поля используется

обозначение H_{c1} , которое связано с обозначениями разделе 8, Гл. 3 соотношениями: $H_{c1} = H_{cr}$, $H_{c1\parallel} = H_{cr\perp}$, $H_{c1\perp} = H_{cr\parallel}$. Для сравнения с экспериментом используем ранее полученные значения параметров для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$: $\tilde{\omega} = 1.5$, $\tilde{\omega}_c = 1.6$.

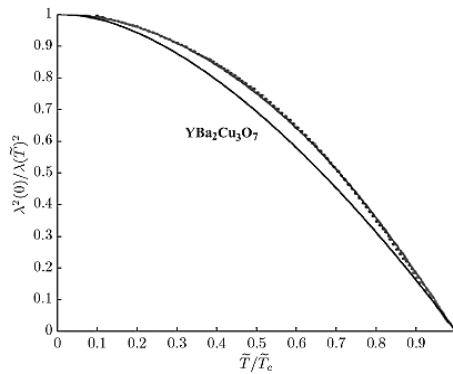


Рис. 1.2. Сравнение теоретической зависимости $\lambda^2(0)/\lambda^2(T)$ (сплошная линия), полученной в [Lakshno 2019], с экспериментальной зависимостью [Vonn 1993] (точечная кривая).

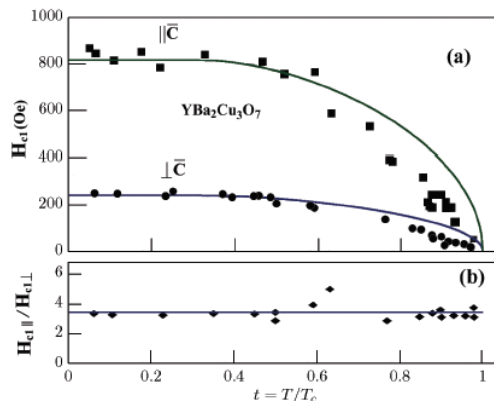


Рис.1.3. Сравнение рассчитанных (непрерывные кривые) и экспериментальных значений H_{c1} (квадраты, круги, ромбы [Wu 1990]) для случаев $\parallel c$ и $\perp c$.

На рис. 1.3 показано сравнение экспериментальных зависимостей $H_{c1\perp}(T)$ и $H_{c1\parallel}(T)$ [Wu 1990] с теоретическими зависимостями (8.13) Гл. 3, где для $H_{\max\parallel,\perp}(T)$ взяты экспериментальные значения: $H_{\max\parallel}(T) = 240$, $H_{\max\perp}(T) = 816$. Приведённые на рис. 1.3 результаты подтверждают вывод (раздела 8, Гл. 3) о независимости отношений $H_{cr\perp}(T)/H_{cr\parallel}(T)$ от температуры.

Из соотношений (7.9), (8.10), (8.11) в главе 3 следует, что:

$$(\gamma^*)^2 = \frac{M_{\perp}^*}{M_{\parallel}^*} \propto \frac{\lambda_{\perp}^2}{\lambda_{\parallel}^2}; \quad \frac{H_{\max\perp}^2}{H_{\max\parallel}^2} = \gamma^2 = 11.6. \quad (1.4)$$

Выбор для параметра анизотропии значения $\gamma^2 = 11.6$, определяемого соотношениями (1.4), отличается от значения $(\gamma^*)^2 = 30$, использованного выше. Это различие, по-видимому, обусловлено различием анизотропий поляронных эффективных масс $M_{\parallel,\perp}^*$ и электронных зонных масс.

Наличие щели ω_0 в ВТСП керамиках доказывается многочисленными спектроскопическими экспериментами (ARPES) по угловой зависимости ω_0 от \mathbf{k} при малых $|\mathbf{k}|$ [Damascelli 2003; Norman 2005; Lee 2014; Hashimoto 2014; Timusk 1999]. Наличие d -симметрии в угловой зависимости $\omega_0(\mathbf{k})$, по-видимому, связано с появлением псевдощели и перестройкой Ферми системы в систему Ферми-дуг, обладающую d -симметрией. В экспериментах по туннельной спектроскопии величина ω_0 может проявлять себя как наличие субщелевой структуры на фоне измерения псевдощели $\Delta_1 (\Delta_1 \gg \omega_0)$. Такая структура неоднократно наблюдалась в оптимально допированных $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ и $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ (BCCO) в области 5÷10 мэВ [Maggio-Aprile 1995; Pan 2000; Hoogenboom 2000], что совпадает с вышеприведённой оценкой ω_0 .

Большую совокупность экспериментов составляет измерение зависимости величины щели и псевдощели от уровня допирования x . Уже ранние эксперименты по изучению магнитной восприимчивости и найтовского сдвига выявили наличие псевдощели, появляющейся при $T^* > T_c$. Последующие многочисленные эксперименты выявили особенности $T - x$ фазовой диаграммы: T^* увеличивается, а T_c уменьшается при уменьшении допирования [Damascelli 2003; Norman 2005; Lee 2014; Hashimoto 2014; Timusk 1999]. Как показано в [Lakhno 2017], такое поведение можно объяснить особенностями существования биполяронов в полярном газе.

В [Lakhno 2017] также отмечается, возможно, общий характер 1/8 аномалии (рис. 1.4) в ВТСП системах [Schriffer Ed 2007].

Приведенное выше условие стабильности $E_{bp} < 0$ означает, что наличие Ферми газа радикально меняет критерий стабильности биполяронов, который в отсутствие фермиевского окружения принимает вид $E_{bp} < 2E_p$. На факт такой стабилизации было впервые указано в работах [Shanenko 1996; Smondyrev 2000]. Этот факт играет важную роль при объяснении концентрационных зависимостей T_c от x . В реальных ВТСП материалах величина константы ЭФВ скорее всего имеет промежуточное значение. Тогда в области малых концентраций в отсутствие фермиевского окружения ТИ-биполяроны нестабильны относительно их распада на отдельные поляроны и СП при малых x невозможна. Она возникает при конечных x , когда имеется ярко выраженная Ферми-поверхность, стабилизирующая образование биполяронов (см. Гл. 6). Это соответствует большому числу экспериментов по ВТСП материалам. Простой термодинамический анализ показывает, что при конечной температуре ТИ-биполяроны стабильны при выполнении критерия: $|E_{bp} - 2E_p| \geq T$ (Гл. 3., раздел 9). Таким образом, характерная температура T^* , соответствующая псевдощелевой фазе равна: $T^* \approx |E_{bp} - 2E_p|$.

Сам переход в псевдощелевую фазу, связан с образованием ТИ-биполяронов при $T < T^*$ и сильно размыт по температуре в полном соответствии с экспериментом. Отметим, что $T^* \ll |E_{bp}|$ и примерно в 1,5 ÷ 2 раза превышает T_c .

При увеличении допирования при $x > x_{opt}$, где x_{opt} , величина оптимального допирования, СП переходит в передопированный режим, когда число биполяронов становится настолько большим, что они начинают перекрываться, т.е. происходит переход в режим БКШ с малыми T_c .

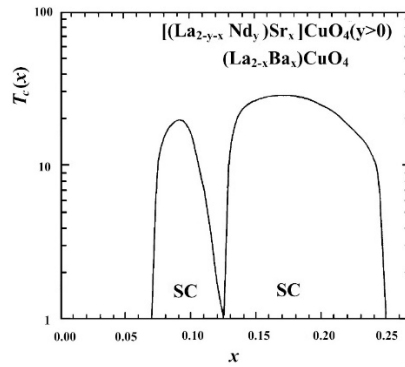


Рис. 1.4. Зависимость $T_c(x)$ для высокотемпературных сверхпроводников с $1/8$ аномалией.

В заключение этого раздела отметим, что многолетняя дискуссия о природе щели и псевдощели в ВТСП материалах во многом связана с методологической проблемой измерения, когда различные методы измерения в действительности измеряют не одно и то же, а совершенно разные величины. В рассматриваемом нами случае ARPES измеряет $\omega_0(\mathbf{k})$, в то время как туннельная спектроскопия – величину $|E_{bp}|$. Ниже мы подробнее рассмотрим эти вопросы.

2. Спектроскопические эксперименты

Как показано в предыдущем разделе, развитая теория хорошо совмещается с термодинамическими характеристиками ВТСП материалов, а также с их магнитными характеристиками. Этих фактов, однако, недостаточно, чтобы однозначно судить о непротиворечии ТИ-биполярной теории СП другим экспериментальным фактам.

В настоящее время имеется большое число методов, позволяющих изучать свойства спаренных состояний и вытекающие из этих свойств следствия. Цель этого раздела – проанализировать, в какой мере данные современных спектроскопических методов, включающих туннельную сканирующую микроскопию (СТМ), сопутствующие ей методы квазичастичной интерференции, методы фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES), нейтронного и

рамановского (комбинационного) рассеяния совместимы с представлениями о ТИ-биполярном механизме ВТСП.

Туннельные характеристики. Туннельные характеристики в случае ТИ-биполярной теории СП имеют свои особенности. Как обычно, при рассмотрении туннельных явлений, например, при рассмотрении джозефсоновского перехода из сверхпроводника в нормальный металл через туннельный контакт, будем отсчитывать энергию от основного состояния СП. В ТИ-биполярной теории СП основным состоянием является биполярное, энергия которого лежит ниже уровня Ферми этого СП в нормальном состоянии на величину энергии биполярона $|E_B|$. Таким образом, при туннельном контакте СП с нормальным металлом уровень Ферми нормального металла будет совпадать с энергией основного состояния СП. Отсюда следует, что одночастичный ток для такого контакта будет иметь обычный вид (рис. 2.1).

Особенность возникает при рассмотрении двухчастичного тока. Эта особенность связана с тем, что спектр возбуждённых состояний ТИ-биполярона отделён от основного состояния величиной фононной частоты ω_0 . По этой причине, вольт-амперная характеристика двухчастичного тока будет иметь вид, изображённый на рис. 2.1, с заменой $|E_B/2|$ на ω_0 . В итоге, суммарная вольт-амперная характеристика будет иметь вид рис. 2.2.

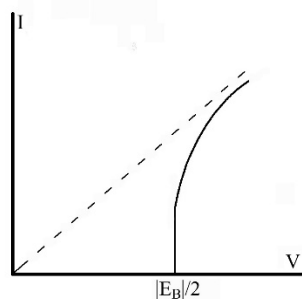


Рис. 2.1. Вольт-амперная характеристика одночастичного тока

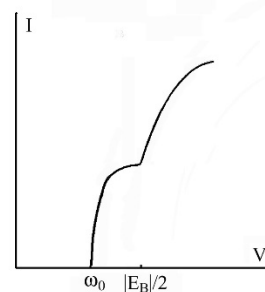


Рис. 2.2. Вольт-амперная характеристика полного тока

Кривая $I-V$ изображена в случае $\omega_0 < |E_B|/2$. В противоположном случае величины ω_0 и $|E_B|/2$ следует поменять местами. Область $I-V$ кривой на рис. 2.2, определяемой значениями $\omega_0 < V < |E_B|/2$, соответствует кинку, который отсутствует в БКШ теории.

Со спектральной точки зрения, кинк соответствует переходу от одночастичного спектра электронов с энергией, лежащей ниже E_F на величину $|E_B|/2$, к двухчастичному ТИ-биполярному спектру возбуждённых состояний, который в одночастичной схеме лежит в области $(E_F - |E_B|/2 + \omega_0/2, E_F)$, как это показано на рис. 2.3.

Приведённая на рис. 2.3 зависимость $E(k)$ соответствует ARPES наблюдениям кинков в большом числе ВТСП материалов (см., например, обзор [Garcia 2010]). Так, например, согласно [Garcia 2010], в хорошо изученном купрате Bi2212 энергия кинка ($|E_B|/2$) составляет 70 мэВ.

В пользу фононной природы кинка свидетельствуют также наблюдение изотопического эффекта вблизи энергии кинка [Iwasawa 2008], независимость энергии кинка от величины допирования [Zhou 2003], независимость энергии кинка от природы носителей тока: согласно [Park 2008], электронно и дырочно допированные купраты имеют одинаковую энергию кинка.

На рис. 2.4 изображена типичная для ВТСП зависимость dI/dV от V , соответствующая приведённой на рис. 2.3 зависимости I от V . На ней кинку соответствует провал справа от высокого пика.

Заметим, что в силу того, что ТИ-биполярны существуют и при $T > T_c$, кривая dI/dV при температуре выше критической будет качественно сохранять вид, изображённый на рис. 2.4. Таким образом, величина $|E_B|/2$ будет играть роль псевдощели в одночастичных переходах, а $|E_B|$ – роль псевдощели в двухчастичных переходах. Этот вывод находится в полном соответствии с многочисленными

туннельными экспериментами в ВТСП [Garcia 2010], [Giubileo 2002, 2001].

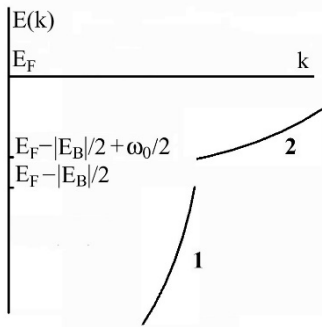


Рис. 2.3. Кинку соответствует щель при переходе с нормальной ветви 1 на ТИ-биполяронную ветвь 2 при энергии, равной $E_F - |E_B|/2$

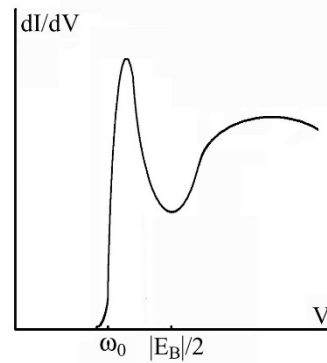


Рис. 2.4. Зависимость кондактанса dI/dV от V , соответствующего вольт-амперной характеристике, изображённой на рис. 2.3

Фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES). Наряду с СТМ, одним из прямых методов, дающих информацию о свойствах сверхпроводящей щели, является метод фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением [Damascelli 2003]. Будучи дополненным данными СТМ и данными метода квазичастичной интерференции, этот метод даёт наиболее полные данные о свойствах СП щели. В последнее время получил развитие также метод двойной фотоэлектронной спектроскопии, являющийся обобщением ARPES на случай двух частиц, в котором осуществляется фотоэмиссия двух электронов с определёнными импульсами k_1 и k_2 и соответствующими этим импульсам энергиями E_1 и E_2 [Hattass 2008]. Несмотря на обилие данных, полученных методом ARPES, природа ВТСП щели остаётся до сих пор неясной. В большой степени это связано с тем, что вплоть до настоящего времени отсутствовала единая теория ВТСП. Если исходить из того, что СП механизм обусловлен куперовским спариванием, то в случае сильного фрёлиховского ЭФВ это приводит к рассматриваемой нами ТИ-биполяронной теории ВТСП.

Согласно этой теории, в отличие от биполяронов с нарушенной симметрией, ТИ-биполяроны делокализованы в пространстве, и поляризационная потенциальная яма у них отсутствует (поляризационный заряд равен нулю). Согласно разделу 3, Гл. 3, ТИ-биполярон имеет в спектре щель, имеющую фононную природу. В ТИ-биполяронной теории СП биполяроны образуются вблизи поверхности Ферми в форме заряженного бозе-газа (погружённого в электронный газ), который конденсируется на уровне, лежащем ниже уровня Ферми на величину, равную энергии основного состояния биполярона, что приводит к СП состоянию (раздел 5, Гл. 3). Спектр возбуждений такого газа имеет щель, равную фононной частоте. В этом разделе мы покажем, что фотоэмиссионный спектр, получаемый в ARPES, содержит как раз такую щель, а рассмотренная нами в предыдущем пункте щель $|E_B|/2$, определяемая из двухчастичного тока методом СТМ, не имеет отношения к измерениям щели методом ARPES.

С этой целью будем исходить из общего выражения для измеряемой в ARPES интенсивности поглощения света $I(\mathbf{k}, \omega)$ в виде:

$$I(\mathbf{k}, \omega) = A(\mathbf{k}, \omega)F(\omega)M(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.1)$$

В случае измеряемой методом ARPES интенсивности поглощения света ТИ-биполяронами, фигурирующие в (2.1) величины, имеют другой смысл, нежели в случае одноэлектронной фотоэмиссии.

В случае рассматриваемого нами бозе-конденсата \mathbf{k} имеет смысл импульса бозона, а ω – энергии бозона, $A(\mathbf{k}, \omega)$ – однобозонная спектральная функция, $F(\omega)$ – функция распределения Бозе-Эйнштейна, $M(\mathbf{k}, \omega)$ – матричный элемент, описывающий переходы из начального в конечное состояние бозона.

В нашем случае роль заряженного бозона, принимающего участие в поглощении света, выполняет биполярон, спектр энергий которого определяется выражением (3.1), (3.2), Гл. 3 [Lakhno 2018, 2019]:

$$\varepsilon_k = E_B \Delta_{k,0} + (E_B + \omega_0(\mathbf{k}) + k^2 / 2M)(1 - \Delta_{k,0}), \quad (2.2)$$

где $\Delta_{k,0} = 1$, если $k = 0$, $\Delta_{k,0} = 0$, если $k \neq 0$, функция распределения которого равна $F(\omega) = [\exp(\omega - \mu) - 1]^{-1}$. При $\mathbf{k} = 0$ ТИ-биполярон находится в основном состоянии, а при $\mathbf{k} \neq 0$ – в возбуждённом состоянии с энергией $E_B + \omega_0(\mathbf{k}) + k^2/2M$, где $\omega_0(\mathbf{k})$ – зависящая от волнового вектора фононная частота, $M = 2m$, m – эффективная масса электрона.

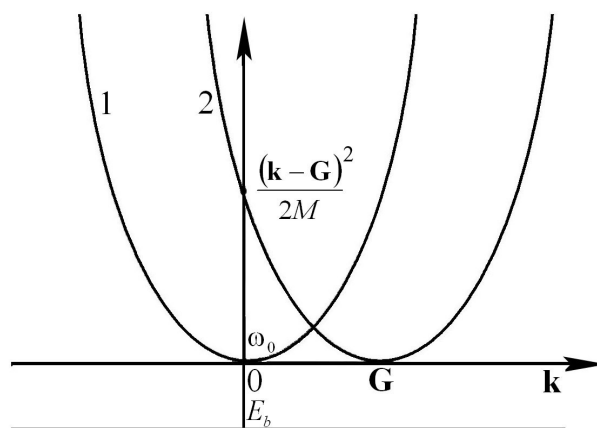


Рис. 2.5. Схематическое изображение перехода биполярона в возбуждённое состояние в результате поглощения кванта света

Для дальнейшего анализа важно отметить, что энергия биполяронных возбужденных состояний, отсчитываемая в уравнении (2.2) от E_B , может быть проинтерпретирована как энергия фонона $\omega_0(\mathbf{k})$ и кинетическая энергия двух электронов, связанных с этим фононом. Последняя в схеме расширенных зон имеет вид: $(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2/2M$, где \mathbf{G} – обратный вектор решётки (рис. 2.5). В методе ARPES измеряется спектр начальных состояний, который в рассматриваемом нами случае представляет собой спектр низколежащих возбуждений ТИ-биполярона. В связи с этим можно пренебречь вкладом в этот спектр одно – и двухчастичных возбуждений электронного (поляронного) газа, в который погружены биполяроны, поскольку плотность состояний ТИ-биполяронов вблизи их основного состояния намного больше плотности состояний электронного спектра. Таким образом, мы заведомо исключаем

рассмотрение таких явлений, как осцилляция Гааза-ван Альфвена и Шубникова-де Гааза [Vignolle 2008, Yelland 2008, Helm 2009]. Ввиду того, что кинетическая энергия, соответствующая вектору обратной решётки (или целому числу векторов обратной решётки) очень велика, из всего спектра биполярона, определяемого (2.2), мы должны учесть только уровни E_B с $k=0$ и $E_B + \omega_0(\mathbf{k})$ с $k \neq 0$ в качестве спектра начальных состояний. Другими словами, с использованием спектральной функции $A(\omega, \mathbf{k}) = -(1/\pi)\text{Im}G(\omega, \mathbf{k})$, где $G(\omega, \mathbf{k}) = (\omega - \varepsilon_k - i\varepsilon)^{-1}$ – функция Грина биполярона, выражение для интенсивности (1) может быть представлено в виде:

$$I(\mathbf{k}, \omega) \sim \left((\omega - E_B)^2 + \varepsilon_1^2 \right)^{-1} \cdot \left((\omega - E_B - \omega_0(\mathbf{k}))^2 + \varepsilon_2^2 \right)^{-1}, \quad (2.3)$$

который является подгонкой функции распределения F с $\mu = E_B$ и функции Грина G посредством лоренцианов, где ε_1 и ε_2 определяют ширину бозевского распределения и биполяронных уровней соответственно (матричный элемент $M(\mathbf{k}, \omega)$, входящий в (2.1), имеет плавную зависимость от энергии и волнового вектора, поэтому этой зависимостью можно пренебречь).

Таким образом, в результате поглощения света парой электронов (исходно находящихся в биполяронном состоянии) методом ARPES измеряется кинетическая энергия электронов с импульсами k_e , которые выбиваются из образца в вакуум в результате поглощения фотона с энергией $\hbar\nu$. Закон сохранения энергии в этом случае принимает вид:

$$\hbar\nu = \omega_0(\mathbf{k}) + \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2}{2M} = \xi + \frac{k_e^2}{m_0}, \quad (2.4)$$

$$\xi = 2\Phi_0 + |E_B|,$$

что иллюстрирует рис. 2.6, где Φ_0 – работа выхода электронов из образца, m_0 – масса свободного электрона в вакууме. Согласно рис. 2.6, при образовании биполярона вблизи энергии Ферми E_F энергия двух электронов становится равной $2E_F + E_B$.

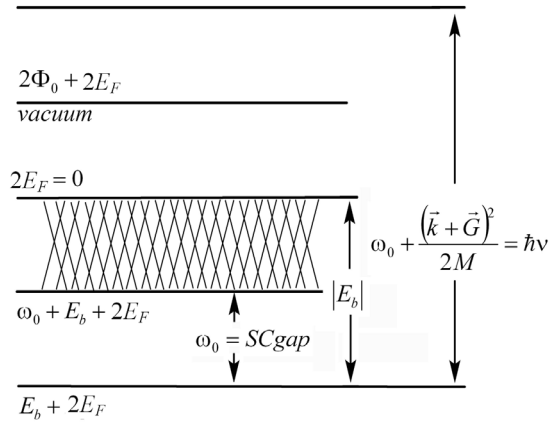


Рис. 2.6. Схема энергетических уровней при измерении спектра методом ARPES. Заштрихована область непрерывного спектра, лежащего ниже уровня Ферми

При этом электроны переходят из состояния с p_F , где p_F – фермиевский импульс, в некоторое состояние с импульсом p под поверхностью Ферми (т.к. $E_B < 0$). В методе ARPES измеряется спектр начальных состояний, отсчитываемых от энергии $2 \cdot p^2 / 2m$, соответствующей энергии двух электронов с импульсом p . В результате в ARPES измеряется энергия $\omega_i = 2E_F + E_B - p^2 / m$.

Таким образом, если биполярон с энергией $\omega = \omega_i = E_B + 2v_F(p_F - p)$, лежащей в области существования биполяронного газа $(2E_F + E_B, 2E_F)$, где v_F – скорость фермиевского электрона, поглощает фотон с энергией $\hbar\nu$, то образующийся в ходе распада биполярона фотон фиксируется в методе ARPES как щель $\omega_0(\mathbf{k})$, а два электрона с кинетической энергией k_e^2 / m_0 , определяемой (2.4), эмитируются из образца.

В рассматриваемом сценарии в каждом акте поглощения света из образца эмитируют два электрона с одинаковыми импульсами. Это явление может быть обнаружено методом ARPES, если электронный детектор поместить прямо на поверхность образца, поскольку кинетическая энергия разлёта эмитируемой пары электронов в вакууме

(не скомпенсированная притягивающим потенциалом в биполярном состоянии) составляет несколько электрон-вольт.

Таким образом, методом ARPES, согласно изложенному, измеряется фоннная частота $\omega_0(k)$, которая сопоставляется СП щели, и, следовательно, в купратных ВТСП с $d_{x^2-y^2}$ симметрией её угловая зависимость даётся выражением $\omega_0(\mathbf{k}) = \Delta_0 |\cos k_x a - \cos k_y a|$.

С точки зрения фоннной спектроскопии идентификация такого типа фоннных мод затруднена их небольшим числом (равным числу биполяронов) по сравнению с числом обычных фононов, равным числу атомов в кристалле. Спектральная зависимость фоннных частот определяется как ион-ионными взаимодействиями, так и взаимодействием с электронной подсистемой кристалла. Расчет нормальных колебаний для плоской квадратной решетки атомов без учета вклада электрона приводит к d – типу симметрии их спектра [Emin 2017], [Окомельков 2002]. Применительно к CuO_2 СП плоскостям оксидных керамик фононы в направлении $\text{Cu} - \text{O} - \text{Cu}$ связей (антинодальное направление) будут иметь щель, а в направлении $\text{Cu} - \text{Cu}$ связей, т.е. вдоль диагонали элементарной ячейки (нодальное направление) щель будет отсутствовать.

При расчете электронного вклада в фоннный спектр необходимо также учитывать связь между распределением электронной плотности и положениями ионов на CuO_2 плоскости, наблюдаемую в STM/STS экспериментах с высоким пространственным разрешением [Lawler 2010].

Указанная угловая зависимость $\omega_0(k)$ приводит к угловой зависимости интенсивности $I(\omega_i, \mathbf{p}) \sim A(\omega_i, \mathbf{p})$, определяемой уравнением (2.3) (рис. 2.7), которая обычно наблюдается в ARPES экспериментах [Damascelli 2003], [Borisenko 2001, Shen 2004]. Вид зависимости (ω_i, \mathbf{p}) предполагает, что имеется также симметричная относительно уровня

Ферми зависимость пиков поглощения от p . Эта зависимость не приведена на рис. 2.7, так как вследствие малой заселённости состояний с $p > p_F$ их интенсивность поглощения будет очень мала [Matsui 2003].

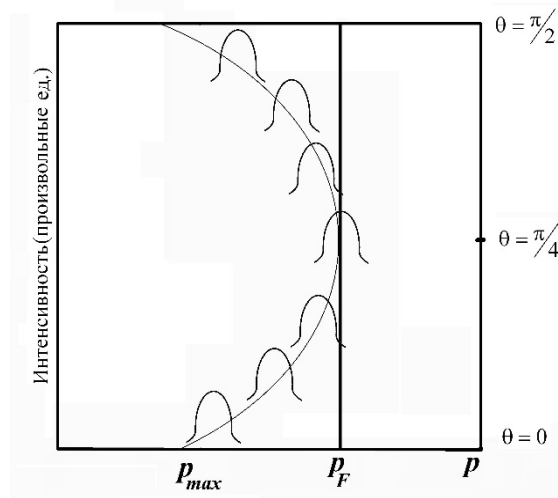


Рис. 2.7. Схематическое изображение угловой зависимости интенсивности поглощения согласно (2.3) для $\omega = \omega_i$

Экспериментальная проверка эффекта эмиссии TI-биполяронов как целого важна для понимания механизма спаривания. Так, согласно [Shen 2004], только один электрон должен эмитироваться из образца с дисперсией начальных состояний, определяемых при $p \neq 0$ формулой:

$\varepsilon_p^{Bog} = \sqrt{(p^2 / 2m - E_F)^2 + \Delta^2(p)}$ (где ε_p^{Bog} – спектр боголюбовской квазичастицы), отличной от спектра (2.2).

Использование спектров ε_p^{Bog} и (2.2) для описания угловой зависимости интенсивности приводит к качественному согласию с данными ARPES с доступным на сегодняшний день разрешением. Эксперименты с более высоким разрешением должны дать ответ на вопрос о том, носит ли СП конденсат в купратах фермионный характер или TI-биполяронный?

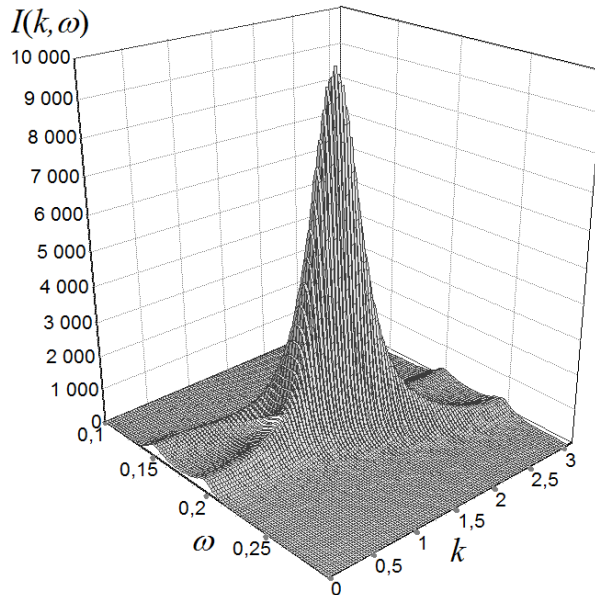


Рис. 2.8. Зависимость интенсивности поглощения $I(k, \omega)$ (произвольные единицы) от k и ω (эВ), определяемой (2.3), для параметров: $|E_B| = 0,2$ эВ, $\Delta_0 = 0,05$ эВ, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0,01$ эВ и волнового вектора k в антинодальном направлении. Постоянная решётки полагается равной единице

Из спектра $\omega_0(k)$ следует, что в нодальном направлении купратных сверхпроводников константа ЭФВ становится бесконечной. Таким образом, для биполяронов в этом случае реализуется режим сильной связи (см. Гл. 6.). На рис. 2.8 показана типичная зависимость интенсивности поглощения $I(\omega, \mathbf{p})$, наблюдаемая в экспериментах ARPES [Borisenko 2001].

Изображённая на рис. 2.8 зависимость следует из выражения для интенсивности (2.2) со спектральной функцией, которая соответствует спектру ТИ-биполярона (2.3) и которая не может быть получена из спектральной функции (2.3) из работы [Matsui 2003], в которой для спектра используется боголюбовский спектр ε_p^{Bog} , а вместо бозевского распределения $F(\omega)$ используется фермиевская функция распределения. Этот результат может рассматриваться как аргумент в пользу ТИ-биполяронного механизма СП.

Рассмотренные выше особенности в спектре поглощения ARPES будут себя проявлять также в туннельных экспериментах в форме

тонкой структуры (кинков) на измеряемых вольт-амперных характеристиках. Для этого, в отличие от традиционных ARPES измерений с высокоэнергетичными источниками фотонов ($\hbar\nu = 20-100$ эВ), для наблюдения этих особенностей необходимо использовать источники низкоэнергетичных фотонов ($\hbar\nu = 6-7$ эВ) и с более высоким, чем обычное, разрешением по импульсам [Vishik 2010, Plumb 2010, Anzai 2010, Rameau 2009].

В работе [Kouzakov 2003] также теоретически была рассмотрена возможность наблюдения эмиссии куперовских пар методом ARPES для обычных СП. В частности, авторы [Kouzakov 2003] показали наличие пика в эмиссионном токе куперовских пар, соответствующего нулевой энергии связи занятых двухэлектронных состояний. Рассмотренный в [Kouzakov 2003] пик соответствует переходу с энергией $\hbar\nu$, определяемой (2.4) с энергией связи ~ 1 мэВ, что находится на пределе точности измерений методом ARPES. В случае высокотемпературных сверхпроводников энергия связи может быть в десятки раз больше, что делает в них более реальной проверку рассматриваемых эффектов. Основным отличием полученных здесь результатов от полученных в [Kouzakov 2003] является наличие угловой зависимости пика поглощения рис. 2.7, 2.8, характерной для ВТСП материалов.

Обсудим кратко температурную зависимость интенсивности $I(\omega, \mathbf{p})$. Согласно уравнению (2.1), она определяется температурной зависимостью $F(\omega)$.

Для $T < T_c$, где T_c – температура СП перехода $F(\omega) \cong N_0(T)$ для $\omega = E_B$, где $N_0(T)$ – число бозонов (биполяронов) в конденсате, которое определяет температурную зависимость интенсивности поглощения. Величина $N_0(T)$ уменьшается при увеличении T и, вообще говоря, обращается в ноль при температуре СП перехода, обращая в ноль интенсивность поглощения. В действительности, однако, этого не

происходит, т.к. в ноль обращается только бозе-конденсатная часть. Согласно ТИ-биполярной теории СП при $T > T_c$, биполярны существуют и в отсутствие конденсата. В этом случае заселённость основного состояния таких биполяронов будет уменьшаться с ростом температуры, обращаясь в ноль при температуре T^* , соответствующей переходу из псевдощелевого в нормальное состояние.

Этот вывод подтверждается экспериментами ARPES в СП и псевдощелевой фазах [Varelogiannis 1998], в которых продемонстрировано, что угловая зависимость СП щели d -типа аналогична угловой зависимости плотности состояний в псевдощелевой фазе. В то же время имеются существенные отличия между экспериментальными данными ARPES в СП и псевдощелевой фазах. В СП фазе пик интенсивности поглощения расположен ниже уровня Ферми, что соответствует резкому спектральному пику плотности состояний бозе-конденсата, определяемого уравнением (2.3), в то время как в псевдощелевой фазе этот пик будет отсутствовать ввиду отсутствия в ней конденсата [Norman 2005]. В этих условиях, ввиду роста заселённости возбуждённых биполярных состояний с ростом температуры, интенсивность пика поглощения в ARPES экспериментах будет с ростом температуры уменьшаться и достигать минимума в антинодальном направлении и максимума – в нодальном.

Нейтронное рассеяние. Рассеяние нейтронов является мощным способом исследования свойств и строения кристаллов, широко используемых в современной физике. С помощью нейтронов можно определить атомное строение, установить магнитную структуру, получить информацию о спектральных характеристиках различных возбуждений в кристаллах, жидкостях и т.д.

Метод нейтронного рассеяния играет одну из ключевых ролей в исследовании ВТСП. В рассматриваемой нами модели сверхпроводимости, основанной на бозе-конденсации ТИ-биполяронов,

налетающий на исследуемую систему нейтрон (в нашем случае такой системой является ТИ-биполярный конденсат), выводит её из состояния термодинамического равновесия и при этом изменяется состояние самого падающего нейтрона. Регистрируя энергию и импульс падающего рассеиваемого нейтрона, мы получаем информацию о возбуждениях, которые возможны в исследуемой системе.

Как известно, поперечное сечение неупругого рассеяния σ на системе частиц одного типа при температуре $T = \beta^{-1}$ в единицу телесного угла Ω имеет вид:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{M_n^2}{(2\pi)^3} \frac{k_f}{\hbar^4 k_i} |V(\mathbf{k})|^2 N \frac{S(\mathbf{k}, \omega)}{1 - e^{-\beta\omega}} \quad (2.5)$$

где N число частиц в системе, M_n – масса нейтрона, $\hbar\mathbf{k} = \hbar(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)$ – величина переданного при рассеянии импульса, где \mathbf{k}_i и \mathbf{k}_f – начальный и конечный импульсы нейтрона, соответственно; ω – переданная в результате рассеяния энергия; $V(\mathbf{k})$ – Фурье-компонента потенциала взаимодействия нейтрона с рассеивающей частицей; $S(\mathbf{k}, \omega)$ динамический структурный фактор, связанный с корреляционной функцией типа плотность-плотность соотношением:

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \int d^3r \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\hbar} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\omega t / \hbar} \langle [\rho(r, t), \rho(0, 0)] \rangle, \quad (2.6)$$

где $\rho(r, t) = \Psi^+(r, t)\Psi(r, t)$ – оператор плотности частиц в гейзенберговском представлении, $\langle \dots \rangle$ – термодинамическое среднее.

В случае обычного идеального бозе-газа (ИБГ), частицы которого обладают спектром $\varepsilon_k = k^2/2M$ расчёт структурного фактора $S(\mathbf{k}, \omega)$ был проведён в [Jackson 1973], [Александров 1975], [Hohenberg 1966]. В рассматриваемом нами случае идеального газа ТИ-биполяронов со спектром $\varepsilon_0 = 0$ и $\varepsilon_{k \neq 0} = \omega_0 + k^2/2M$, которому соответствует функция распределения $F(\mathbf{k})$:

$$F(\mathbf{k}) = n_0(\mathbf{k})\delta(\mathbf{k}) + [\exp\beta\varepsilon_k - 1]^{-1}, \quad T < T_c \quad (2.7)$$

$$F(\mathbf{k}) = [\exp\beta(\varepsilon_k - \mu) - 1]^{-1}, \quad T \geq T_c$$

где $n_0(\mathbf{k})$ – концентрация ТИ-биполяронов в бозе-конденсате, μ – химический потенциал, выражение для структурного фактора (2.6) примет вид:

$$S(\mathbf{k}, \omega) = S_0(\mathbf{k}, \omega) + S_1(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.8)$$

$$S_0(\mathbf{k}, \omega) = n_0 \left[(1 + F(\mathbf{k})) \delta(\omega - \omega_0 - k^2/2M) - F(\mathbf{k}) \delta(\omega + \omega_0 + k^2/2M) \right]$$

$$S_1(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2\pi M}{\hbar^4 \beta k (1 - e^{-\beta\omega})} \cdot \ln \frac{1 - \exp\left\{-\beta \left[\omega_0 + M(\omega + k^2/2M)^2 / 2k^2 - \tilde{\mu} \right]\right\}}{1 - \exp\left\{-\beta \left[\omega_0 + M(\omega - k^2/2M)^2 / 2k^2 - \tilde{\mu} \right]\right\}},$$

$$\tilde{\mu} = \mu - E_{\text{bp}}; \quad \tilde{\mu} = 0, \quad T \leq T_c; \quad \tilde{\mu} = \tilde{\mu}(T), \quad T > T_c.$$

Отсюда следует, что при $T \rightarrow 0$, когда $F(\mathbf{k}) \rightarrow 0$, процессы с поглощением энергии отсутствуют и остаются только процессы с передачей энергии.

В выражении (2.8) формфактор $S_0(\mathbf{k}, \omega)$ определяет возбуждения отдельных ТИ-биполяронов в бозе-конденсате, а $S_1(\mathbf{k}, \omega)$ – вклад ТИ-биполяронов, находящихся в надконденсатном состоянии.

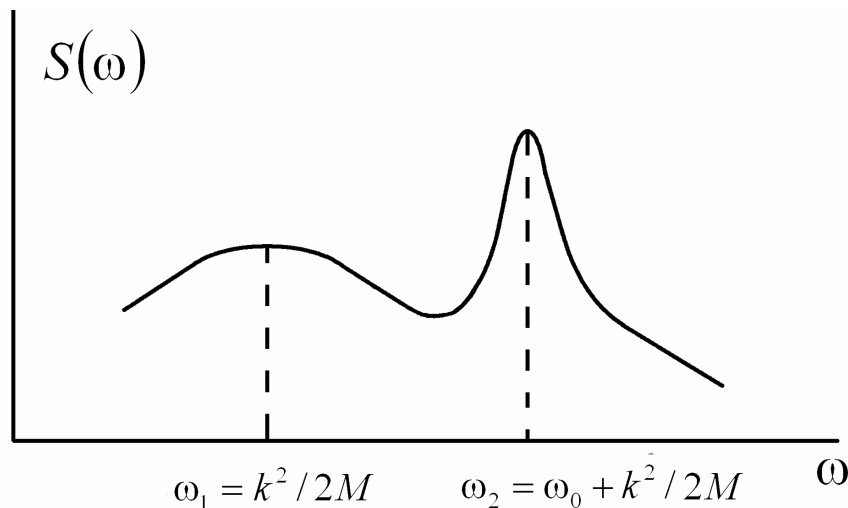


Рис. 2.9. Зависимость формфактора рассеяния от энергии нейтрона.

Из (2.8) следует, что при $\omega > 0$ формфактор имеет два пика. На рис. 2.9 приведена функция $S(\mathbf{k}, \omega)$ для некоторого фиксированного значения \mathbf{k} , которая имеет один (размытый) пик при энергии $\omega = \omega_1 = k^2/2M$ (он определяется $S_1(\vec{k}, \omega)$), а второй (более острый) при энергии $\omega = \omega_2 = \omega_0 + k^2/2M$ (он определяется $S_0(\vec{k}, \omega)$), (рис. 2.9). Разность энергий между двумя пиками ω_0 , согласно ТИ-биполярной теории, определяет

величину сверхпроводящей щели. При $\omega_0 = 0$ два пика сливаются в один, который соответствует ИБГ.

Из (2.8) следует, что при $T = T_c$ максимум при $\omega = \omega_2$ исчезает, поскольку в этом случае $n_0 = 0$. Максимум при $\omega = \omega_1$ сохраняется и при $T > T_c$ и исчезает только при $T = T^*$, где T^* – температура перехода в псевдофазу. При $T = 0$, напротив, исчезает максимум при $\omega = \omega_1$, а максимум при $\omega = \omega_2$ становится максимально острым и интенсивным.

Описанная картина находится в соответствии с имеющимися экспериментами [Song 2015]. Этих данных, однако, недостаточно для однозначного вывода о фононной или магнонной природе нейтронного пика. В реальном эксперименте пик в нейтронном рассеянии, который появляется при $T < T_c$ получают посредством вычитания рассеяния в нормальной и сверхпроводящей фазах. Таким образом, величине СП щели сопоставляют энергию $\omega_2 = \omega_0 + k^2/2M$, поскольку пик с $\omega = \omega_1$ при таком подходе автоматически вычитается. Это может приводить как к завышению величины щели, так и к искажению её угловой зависимости.

Отметим, что метод нейтронного рассеяния активно использовался для определения наличия сверхтекучей компоненты в ${}^4\text{He}$, предположительно представляющей собой бозе-конденсатное состояние, в которое переходит часть атомов гелия при $T < T_c$ [Jackson 1973], [Александров 1975], [Hohenberg 1966], [Cowley 1968], [Harling 1970], как это впервые предполагалось в работе [London 1938].

Теория рассеяния нейтронов на образующимся при $T < T_c$ бозе-конденсате, рассматриваемого как идеальный газ, приводит к выводу о наличии острого пика, обусловленного наличием конденсата, положение которого совпадает с положением максимума широкого пика, связанного с надконденсатными возбуждениями (что соответствует $\omega_0 = 0$). Это обстоятельство создает большие трудности в выделении бозе-конденсатного вклада. Согласно сказанному выше, это затруднение

отсутствует в случае бозе-конденсата ТИ-биполяронов, в котором соответствующие пики разнесены на величину ω_0 , что делает перспективным применение метода неупругого рассеяния для изучения свойств бозе-конденсата ВТСП материалов.

Комбинационное рассеяние. Несмотря на то, что комбинационное рассеяние не даёт углового разрешения [Devereaux 2007], полученные на его основе экспериментальные данные также свидетельствуют о фононной природе щели в ВТСП. Как было показано в Гл. 1, спектр, определяемый (2.2), может быть интерпретирован как спектр перенормированных фононов. Рассеяние такими фононами света с частотой ν будет приводить к появлению в рассеянном свете спутанных частот $\nu_+^B = \nu + |\varepsilon_k^B|$ и $\nu_-^B = \nu - |\varepsilon_k^B|$, где ε_k^B определяется (2.2). В случае широких зон проводимости, т.е. когда выполняется неравенство $G^2/M \gg \max \omega_0(k)$, расщеплённые линии ν_{\pm}^B перекрываются и образуют зону с максимумом, смещённым к стоксовской ветви ν_- . Так как в рассматриваемой модели биполяронный газ помещён в поляронный газ с числом биполяронов, много меньшим числа поляронов, то интенсивность биполяронных спутанов будет много слабее интенсивности ТИ-поляронных спутанов: $\nu_+^P = \nu + |\varepsilon_k^P|$ и $\nu_-^P = \nu - |\varepsilon_k^P|$, $\varepsilon_k^P = E_P \Delta_{k,0} + (\omega_0 + k^2/2m) \cdot (1 - \Delta_{k,0})$, E_P – энергия ТИ-полярона. Как и в случае обычного комбинационного рассеяния, интенсивность рассеяния на поляронах и биполяронах будет много слабее интенсивности рэлеевского рассеяния, соответствующего частоте ν .

В экспериментах по комбинационному рассеянию [Мисочко 2003], действительно, при $T < T_C$ появляется широкий пик, который, согласно рассматриваемой интерпретации, соответствует уширенным частотам $\nu_{\pm}^{B,P}$. В полном соответствии с экспериментом, положение этого пика не зависит от температуры. В теории комбинационного рассеяния, основанной на БКШ, напротив, положение пика должно соответствовать

ширине щели СП и при $T = T_C$ соответствующая этой ширине частота должна обращаться в ноль.

Результаты комбинационного рассеяния также подтверждают, что ТИ-биполярны не разрушаются при $T = T_C$, а продолжают существовать в псевдощелевой фазе. Измерение температурной зависимости интенсивности комбинационного рассеяния основано на вычитании интенсивности поглощения в нормальной и сверхпроводящей фазах. Получаемая разность, согласно излагаемому подходу, полностью определяется рассеянием на бозе-конденсате и в полном согласии с экспериментом является температурно зависимой, обращаясь в ноль при $T = T_C$.

Важно отметить, что многие спектроскопические эксперименты основаны на методе вычитания. ТИ-теория предполагает, что если при измерении щели каким-либо спектроскопическим методом вычитать из результатов её измерения в СП или псевдофазе результаты измерения, полученные в нормальной фазе, то щель будет видна, а если вычитать из измерений щели в СП фазе соответствующие измерения в псевдофазе, то щель будет не видна. Это также может быть использовано для экспериментальной проверки ТИ-теории.

3. Изотопический эффект

Изотопический эффект играет центральную роль в сверхпроводимости. Наличие изотопического эффекта сыграло решающую роль в установлении фононного механизма СП в обычных сверхпроводниках. Отсутствие этого эффекта в оптимально допированных высокотемпературных сверхпроводниках послужило основой отказа от фононного механизма в ВТСП и, как следствие, от теории Бардина–Купера–Шриффера [Bardeen 1957]. В последние годы, однако, большое число новых экспериментальных фактов вынуждает

вернуться к электрон-фононному взаимодействию, как к доминирующему в объяснении эффекта ВТСП. В то же время, непосредственное использование теории БКШ и ее различных модификаций не в состоянии эти экспериментальные факты объяснить [Bill 1998].

Причиной, по-видимому, является то, что теория БКШ, основываясь на ЭФВ рассматривает это взаимодействие как слабое, в то время как в случае ВТСП это взаимодействие оказывается сильным. Обобщение теории БКШ на случай сильного ЭФВ – теория Элиашберга, оказалась не в состоянии объяснить многие важные явления, сопутствующие ВТСП, например псевдощелевое состояние. Для преодоления этих трудностей в работах автора [Lakhno 2018, 2019, 2019(1)] (Гл. 1-3), была построена трансляционно – инвариантная (ТИ) биполярная теория ВТСП, в которой роль куперовских пар выполняют ТИ–биполярны.

Цель этого раздела – объяснить изотопические эффекты, наблюдаемые в ВТСП, на основе ТИ – биполярной теории.

Изотопический эффект сыграл решающую роль в установлении электрон-фононного ЭФВ механизма сверхпроводящего состояния и обосновании теории Бардина–Купера–Шиффера [Bardeen 1957] для обычных металлов. В теории БКШ коэффициент α определяется из экспериментально установленного для обычных металлов соотношения:

$$T_c M^\alpha = const \quad (3.1)$$

где T_c – температура СП перехода, M – масса атома, заменяемого на его изотоп. Из (3.1) следует, что:

$$\alpha = -d \ln T_c / d \ln M \quad (3.2)$$

В теории БКШ величина коэффициента α положительна и близка к значению $\alpha \cong 0,5$ что хорошо согласуется с экспериментом в обычных металлах. Большая величина наблюдаемого в обычных металлах изотопического коэффициента свидетельствует о доминирующей роли в них ЭФВ и применимости для их описания теории БКШ.

Напротив, в высокотемпературных сверхпроводящих керамиках в области их оптимального допирования изотопический коэффициент как правило очень мал ($\sim 10^{-2}$), что послужило основанием считать в них ЭФВ малым и вызвало необходимость рассмотрения других механизмов СП [Bill 1998].

Как известно, теория БКШ, развитая для случая слабого ЭФВ неприменима в случае ВТСП, в которых ЭФВ нельзя считать слабым. В этом случае может быть использована трансляционно-инвариантная (ТИ) биполярная теория СП, (причины, по которым теория Элиашберга [Элиашберг 1960], используемая в случае сильного ЭФВ, может быть неприменимой для описания ВТСП обсуждаются во Введении).

Согласно ТИ – биполярной теории температура СП перехода T_c определяется уравнением (5.3) Гл. 3:

$$T_c(\omega_0/T_c) = (F_{3/2}(0)/F_{3/2}(\omega_0/T_c))^{2/3} T_c(0) \quad (3.3)$$

$$T_c(0) = 3,31 \hbar^2 n_{b_p}^{2/3} / M_e, \quad M_e = 2m,$$

$$F_{3/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{t^{1/2} dt}{e^{t+x} - 1},$$

где n_{b_p} – концентрация ТИ-биполяронов, ω_0 – частота оптического фонона, m – масса зонного электрона (дырки), $\hbar = h/2\pi$, h – постоянная Планка.

Из (3.2) и (3.3) следует выражение для изотопического коэффициента:

$$\alpha = \frac{0,5}{1 + \Phi(y)} \quad (3.4)$$

$$\Phi(y) = 3y \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{t} dt}{e^{(y+1)/y-1}} \bigg/ \int_0^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{t}(e^{(1+ty)/y-1})}$$

где $y = T_c / \omega_0$.

График функции $\alpha(T_c / \omega_0)$ приведен на рис. 3.1

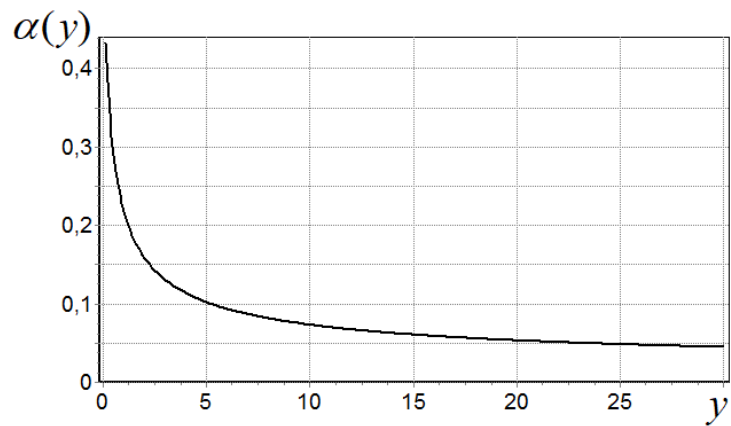


Рис. 3.1 Зависимость изотопического коэффициента α от величины T_c/ω_0 .

Из рис. 3.1 следует, что в случае $(T_c/\omega_0) \gg 1$, который может соответствовать оптимально допированным ВТСП: высокие T_c и сильное ЭФВ (низкие ω_0 и большая величина константы ЭФВ: $\alpha_{eph} \sim \omega_0^{-1/2}$) изотопический коэффициент будет мал ($\alpha \rightarrow 0$ при $T_c \rightarrow \infty$), в полном соответствии с экспериментом [Bill 1998], [Chen 2007], [Franck 1994, 1991], [Batlogg 1987], [Zech 1994].

В противоположном случае: $T_c/\omega_0 \ll 1$, который соответствует случаю слабого ЭФВ изотопический коэффициент достигает своего максимального значения $\alpha=0,5$, как и в теории БКШ, соответствующей случаю слабого ЭФВ.

Отметим, что согласно (3.4), изотопический коэффициент различных образцов будет одинаковым при одинаковом отношении T_c/ω_0 .

Из рис. 3.1 следует, что для типичных величин α , величина фононной частоты ω_0 не превышает T_c . Для ВТСП с $T_c = 100\text{K}$ это приводит к величине ω_0 меньше, чем 8.6 мэВ.

Совершенно иная картина возникает для изотопического коэффициента лондоновской длины проникновения:

$$\beta = -\frac{M}{\lambda} \frac{d\lambda}{dM}, \quad (3.5)$$

где λ – лондоновская глубина проникновения:

$$\lambda = \left(\frac{M_e^* c^2}{16\pi e^2 n_0} \right)^{1/2}, \quad (3.6)$$

c – скорость света, e – заряд электрона, M_e^* – масса биполярона, n_0 – концентрация ТИ-биполяронов в бозе конденсате, $n_0 = N_0/V$, N_0 – число ТИ-биполяронов в конденсате (Гл. 3):

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{T^{3/2}}{c_{b_p}} F_{3/2}(\omega_0/T), \quad (3.7)$$

N – полное число биполяронов, $c_{b_p} = \left(\frac{n^{2/3} 2\pi\hbar^2}{M_e \omega^*} \right)^{3/2}$, $\tilde{T} = T/\omega^*$, ω^* – произвольный масштабный множитель с размерностью энергии, $n = N/V$.

Как отмечено выше, масса ТИ-биполярона не слишком сильно отличается от $2m$, где m – масса зонного электрона и слабо зависит от ω_0 . По этой причине будем считать, что вся зависимость от ω_0 определяется входящей в (3.6) концентрацией ТИ-биполяронов в конденсате n_0 , связанной с ω_0 соотношением (3.7). В результате из (3.5)-(3.7) для изотопического коэффициента β получим:

$$\beta = -\frac{1}{2} \frac{\tilde{\omega}_0 \tilde{T}^{1/2} N}{c_{b_p} N_0} Li_{1/2}(e^{-\omega_0/T}), \quad (3.8)$$

$$Li_{1/2}(Z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{t}} \frac{dt}{Z^{-1} e^t - 1}.$$

Из (3.8) следует, что в пределе низких температур, когда $\omega_0/T \gg 1$,

$$Li_{1/2}(e^{-\omega_0/T}) = e^{-\omega_0/T}:$$

$$\beta = -\frac{1}{2} \frac{\tilde{\omega}_0 \tilde{T}^{1/2}}{c_{b_p}} e^{-\omega_0/T}, \quad (3.9)$$

то есть изотопический коэффициент экспоненциально мал.

В случае $\omega_0/T \ll 1$, $Li_{1/2}(e^{-\omega_0/T}) = \sqrt{\pi T/\omega_0}$ изотопический коэффициент равен:

$$\beta = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\tilde{\omega}_0^{1/2} \tilde{T} N}{N_0 c_{b_p}} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\tilde{\omega}_0^{3/2} N}{N_0 c_{b_p}} \left(\frac{T}{\omega_0} \right). \quad (3.10)$$

Отметим, что в отличие от коэффициента α , который положителен, коэффициент β для лондоновской глубины проникновения отрицателен,

что находится в соответствии с экспериментом. Тот факт, что в пределе низких температур (3.9) изотопический коэффициент β , обусловленный ЭФВ пренебрежимо мал, находится в согласии с БКШ [Bill 1998]. Отсюда, в частности, следует, что в пределе слабого допирования (когда $T_c \rightarrow 0$) изотопический коэффициент для лондоновской глубины проникновения β в противоположность изотопическому коэффициенту α для T_c (который в этом случае велик) будет очень мал. Эксперимент, однако, показывает, что величина β при оптимальном допировании (при котором значение T_c максимально) в пределе низких температур может достигать больших значений. Так, например, в оптимально допированном ВТСП $YBa_2Cu_3O_7$ при $T = 0$ величина $|\beta(0)| \approx 0,2$ [Khasanov 2004]. Отсюда следует, что главный вклад в этом случае может давать неадиабатический механизм или нефононные механизмы [Bill 1998]. В качестве примера ВТСП, в котором вклад неадиабатичности и нефононных механизмов по-видимому мал можно привести слабо передопированный $La_{2-x}Sr_xCu_{1-y}Zn_yO_4$, для которого при $T = 0$ изотопический коэффициент β в соответствии с развитой теорией обращается в ноль [Tallon 2005]. Экспериментальные результаты по изотопической зависимости длины проникновения в $La_{2-x}Sr_xCu_{1-y}Zn_yO_4$ часто объясняют за счет изотопической зависимости эффективной массы носителей тока:

$$\Delta M_{bp} / M_{bp} = 2\Delta\lambda / \lambda + \Delta n_0 / n_0. \quad (3.11)$$

Так, утверждается, что мы можем пренебречь изменением n_0 за счет изотопического эффекта, и весь эффект может быть приписан изменению эффективной массы M_{bp} [Zhao 1997]. Это утверждение могло бы быть верным в случае применимости теории БКШ, в которой величина n_0 совпадает с полным числом электронов в нормальной фазе. В теории БКШ, однако, эффективная масса носителей тока не зависит от

масс атомов решетки. Как показано в [Lakhtno 2018], n_0 представляет лишь малую часть от числа нормальных электронов. Это подтверждается экспериментами Божовича [Božović 2016]. Как было показано выше, использование этого обстоятельства позволяет объяснить изотопический эффект для лондоновской глубины проникновения изотопической зависимостью величины n_0 .

При высоких температурах, напротив, основной вклад вблизи T_c может давать фононный механизм, определяемый (3.10) (согласно [Bill 1998(1)] для величины $\alpha = 0.025$, наблюдаемой в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ получено: $\beta \sim -0.6$ для $T/T_c \sim 0.95$).

Полученные результаты позволяют объяснить наблюдаемые особенности поведения изотопического коэффициента α для T_c в высокотемпературных сверхпроводниках, в частности его малую величину при оптимальном допировании и его большую величину для слабого допирования, на основе одного лишь электрон – фононного взаимодействия. Более сложным является вопрос об изотопическом коэффициенте β для лондоновской глубины проникновения λ и его температурной зависимости. Электрон-фононное взаимодействие объясняет большие значения β для оптимально допированных ВТСП материалов только вблизи температуры СП перехода T_c . В случае низких температур теория объясняет пренебрежимо малые значения $\beta(0)$ в таком ВТСП как $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-y}\text{Zn}_y\text{O}_4$ и не объясняет больших значений $\beta(0)$ в других ВТСП соединениях. В работе [Bill 1998] такое несоответствие с развитой теорией и БКШ объясняют тем, что во многих ВТСП материалах при низких температурах главную роль играют эффекты неадиабатичности, приводящие к большим значениям $\beta(0)$.

4. Заключительные замечания

В изложенной теории, как и в БКШ, импульс центра масс биполяронов \mathbf{P} (соответственно \mathbf{G} в магнитном поле) равен нулю. Согласно этой теории СП состояние представляет собой биполяронный однородный БЭК. Теория может быть обобщена на случай движущегося БЭК с $\mathbf{P} \neq 0$, остающегося при своем движении однородным (см. Гл. 5). При этом возникают интересные особенности (Гл. 6). В настоящее время активно обсуждается также возможность образования неоднородного БЭК в форме так называемых волн плотности сконденсированных пар (PDW), разрушающих трансляционную инвариантность [Lee 2014], [Seo 2008, Berg 2009, Agterberg 2008, Zelli 2012, Chen 2004] (см. Гл. 6). Ситуация здесь, однако, отличается от обсуждаемой проблемы поляронов и биполяронов с нарушенной или присутствующей ТИ симметрией. К сценарию СП с PDW, включая наличие волн зарядовой (CDW) или спиновой плотности (SDW) [Pepin 2014], [Freire 2015], [Wang 2015(1), 2015(2)], приводит дискретность кристалла, не учитываемая в континуальной модели ЭФВ. Вопрос о конкуренции CDW механизма СП с биполяронным механизмом для ПМР в сжатом вакууме рассматривался, например в [Grzybowski 2007].

Модуляция плотности БЭК при волновом векторе, соответствующем нестингу, приводит к появлению в спектре щели, которую во многих работах отождествляют с СП щелью [Lee 2014], [Seo 2008, Berg 2009, Agterberg 2008, Zelli 2012, Chen 2004, Pepin 2014, Freire 2015], [Wang 2015(1), 2015(2)]. В этом случае ТИ-биполяронная щель ω_k , будучи универсальной, обладала бы атрибутами псевдощели, проявляя себя в виде низкоэнергетической тонкой структуры в спектре кондактанса оптимально допированных СП [Maggio-Aprile 1995, Pan 2000, Hoogenboom 2000].

В рассматриваемом подходе мы практически не использовали какую-либо специфику механизма спаривания электронов или дырок. Так, например, как в модели Хаббарда, так и в $t-J$ модели при описании ВТСП оксидов меди те же самые дырки принимают участие как в формировании антиферромагнитных флуктуаций, так и в спаривании, обусловленном обменом этими флуктуациями. Если взаимодействие дырок с магнитными флуктуациями приводит к образованию ТИ-магнитополяронов, обладающих спектром $\omega_0(k)$, то этот спектр является также и спектром магнонов, перенормированным их взаимодействием с дырками (связанные магноны). По этой причине становится оправданным утверждение, что RVB сверхпроводник является просто предельным случаем БКШ СП с сильным взаимодействием [Kivelson 1990] (в этом случае роль поляронов и биполяронов выполняют холоны и бихолоны).

Очевидно, что d -симметрия является спецификой купратных ВТСП и не представляет собой неперемногого требования существования ВТСП. Так, например, такое соединение, как сульфид серы (H_3S), демонстрирует рекордное значение температуры перехода: $T_c = 203\text{ K}$ (под высоким давлением [Drozdov 2015]), не обладает магнитным порядком, но в нём имеется сильное ЭФВ. Ещё более рекордное значение T_c под высоким давлением недавно получено в соединении LaH_{10} с $T_c = 260\text{ K}$ [Somayazulu 2019], также характеризуется сильным ЭФВ и отсутствием магнитного порядка. Наконец, комнатные температуры перехода были получены в соединении, не обладающим магнитным порядком, на основе H_3S и метана CH_4 (при давлении в 1.4 млн. атм.) в работе [Snider 2020].

Тем не менее, вопрос о механизме спаривания в соединениях с магнитным порядком всё ещё остаётся открытым. Если таким механизмом является взаимодействие носителей тока с магнитными флуктуациями, то в рассматриваемом подходе частицами,

склеивающими в пары электроны, будут не фононы, а магноны. При переходе из псевдофазы в нормальную фазу эта склеивающая мода исчезает, что приводит к распаду биполярона на два отдельных полярона с испусканием фонона (магнона).

В псевдощелевой фазе возможно наличие большого числа различных щелей, обусловленных присутствием фононов, магнонов, плазмонов и других типов элементарных возбуждений. В этом случае СП щель будет определяться типом элементарных возбуждений, имеющих максимальную силу взаимодействия с носителями тока.

С точки зрения ТИ-биполяронной теории возможная общая итоговая картина ВТСП выглядит следующим образом.

Согласно изложенному, в основе микроскопической теории лежит ТИ-биполяронный ЭФВ механизм. Из теории следует, что для достижения высоких T_c необходимо в первую очередь повышать концентрацию ТИ-биполяронов. В оксидных керамиках это достигается наличием в них АФ порядка и страйпов.

Выполняя роль микроскопических доменных стенок страйпы, имея ферромагнитный порядок, притягивают к себе электроны (дырки). За счет обменного взаимодействия энергия электронов (дырок) в страйпах ниже, чем в остальной матрице (аналог ферронов Нагаева [Нагаев 1979] с учетом вклада в их образование поляронов [Ляхно 1976] и магнотрикционных эффектов [Ляхно 1978]), соответственно концентрация электронов (дырок) в них повышена. Для восстановления зарядового равновесия ТИ-биполяроны перетекают из областей, занимаемых страйпами в матрицу, повышая тем самым в ней концентрацию ТИ-биполяронов и в целом T_c образца. Такое перераспределение приводит к появлению волны плотности пар PDW (повышенная концентрация биполяронов в матрице и пониженная в страйпах) и волны зарядовой плотности CDW (повышенная концентрация электронов (дырок) в страйпах и пониженная в матрице).

Описанный механизм позволяет целенаправленно конструировать СП материалы, работающие при комнатной T_c . Как указывалось [Lakho 2019], для реализации этой цели можно использовать неоднородное легирование, делая периферийную область ВТСП кабеля легированной магнитными примесями, оттягивающим электроны (дырки) от сердцевины провода. В итоге, можно получить провод с повышенной концентрацией ГИ-биполяронов на его оси и как следствие его высокую T_c .

Глава 5. Движущийся ТИ-биполярный бозе-конденсат

В предыдущих главах был рассмотрен случай покоящегося бозе-конденсата ТИ-биполяронов. В данной главе рассматривается обобщение на случай движущегося бозе-конденсата.

1. Введение

Трансляционно-инвариантная теория биполяронов приводит к выводу, что в ВТСП материалах они представляют собой почти идеальный бозе-газ или бозе-жидкость, если речь идёт об их бозе-конденсате, которые могут двигаться. В качестве примера неидеальной бозе-жидкости можно привести такую квантовую жидкость как ^4He . Различие между идеальной и неидеальной бозе-жидкостью проявляется в спектре их элементарных возбуждений. В неидеальной бозе-жидкости, при малых импульсах, имеется фононная ветвь $\varepsilon = sk$, где s – скорость звука: $s = \partial P / \partial \rho$, где P – давление, ρ – плотность жидкости, а при больших k спектр становится квадратичным: $\varepsilon = \varepsilon(k_0) + (k - k_0)^2 / 2M$ – который получил название ротонного.

В идеальной бозе-жидкости давление не зависит от плотности, т.е. $s = 0$, и линейная часть в спектре отсутствует. Такой спектр (с $k_0 = 0$) был рассмотрен в своей первоначальной работе Ландау [Ландау 1941]. Как было показано выше, такой спектр соответствует газу ТИ-биполяронов.

Принципиальное отличие ТИ-биполярного бозе-газа от сверхтекучей бозе-жидкости в гелии состоит в том, что элементарные квазичастицы ТИ-биполярного газа заряжены, а элементарные возбуждения в гелии нейтральны.

Таким образом, сверхпроводимость представляет собой сверхтекучесть заряженного бозе-газа. Такая точка зрения приводит к возможности использования результатов теории сверхтекучести

применительно к сверхпроводимости при макроскопическом описании последней.

2. Движущийся бозе-конденсат ТИ-биполяронов

В работе 1941 года [Ландау 1941] Ландау построил двухжидкостную теорию сверхтекучего гелия II как альтернативную теориям Лондона [Лондона 1938] и Тиссы [Tisza 1938], связывавших это явление с конденсацией Бозе-Эйнштейна. Эти две крайние точки зрения примирил Боголюбов, который на примере слабо неидеального бозе-газа воспроизвёл фонон-ротонный спектр двухжидкостной модели Ландау и показал, что сверхтекучая компонента в этом случае представляет собой конденсат бозе-частиц [Боголюбов 1947]. Этого, однако, не произошло в случае сверхпроводимости. Как было указано БКШ [Bardín 1957], куперовские пары в обычных металлах мало пригодны на роль бозе-частиц в силу их огромного перекрытия. Идея, что сверхтекучесть и сверхпроводимость родственные явления, укрепилась только после открытия ВТСП, когда обнаружилось, что спаренные состояния в этих материалах обладают малой корреляционной длиной.

В настоящее время имеется большое число претендентов на роль фундаментальной бозе-частицы, ответственной за ВТСП. Конкурируют, однако, в основном две точки зрения. Согласно одной, механизм спаривания обусловлен, как и в случае БКШ, электрон-фононным взаимодействием [Bardín 1957]. Согласно другой, спаривание носителей тока обусловлено магнитными флуктуациями [Scalapino 2018].

Не вдаваясь в детали аргументации в пользу той или другой точки зрения, выберем в качестве спектра фундаментального бозона, ответственного за ВТСП, спектр ТИ-биполярона. Теория ВТСП на основе теории ТИ-биполяронов была нами ранее построена с использованием его спектра возбуждённых состояний:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \omega_0 + \mathbf{k}^2 / 2M, \quad \mathbf{k} \neq 0, \quad (2.1)$$

где $M = 2m$, m – эффективная масса зонного электрона, который в точности совпадает с ротонным спектром в теории сверхтекучести Ландау [Ландау 1941].

При $T = 0$ все биполярны находятся в конденсированном состоянии. Если бозе-конденсат движется относительно кристаллической решётки образца, то полный импульс бозе-конденсата относительно решётки будет равен \mathbf{P} :

$$\mathbf{P} = \sum \mathbf{k} \bar{m}(\mathbf{k}), \quad (2.2)$$

где $\bar{m}(\mathbf{k})$ – бозевская функция распределения ТИ-биполяронов. В сконденсированном состоянии каждый из ТИ-биполяронов имеет один и тот же импульс: $\mathbf{k}_u = M_{bp} \mathbf{u}$, где \mathbf{u} – скорость ТИ-биполярона в конденсате (то есть скорость бозе-конденсата), M_{bp} – масса ТИ-биполярона. Соответственно, функция распределения $\bar{m}(\mathbf{k})$ в этом случае будет равна:

$$\bar{m}(\mathbf{k}) = N_0 \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_u), \quad (2.3)$$

где N_0 – число биполяронов в конденсате, которое при $T = 0$ равно полному числу ТИ-биполяронов N . Таким образом, полный импульс бозе-конденсата при $T = 0$ очевидно будет равен: $\mathbf{P} = N_0 M_{bp} \mathbf{u} = N M_{bp} \mathbf{u}$.

Рассмотрим теперь случай отличной от нуля температуры $T < T_c$, где T_c – температура сверхпроводящего перехода. В этом случае часть биполяронов находится в возбуждённом состоянии. Находясь в возбуждённом состоянии, биполярон может взаимодействовать с другими возбуждениями и дефектами кристалла. Такое взаимодействие приводит к тому, что газ возбуждённых состояний, находясь в равновесии с решёткой, как целое покоится относительно решётки. В то же время, газ возбуждений не в состоянии тормозить конденсатную часть, поскольку не может обмениваться с ней импульсом [Лифшиц 1978]. В итоге, функция распределения всех ТИ-биполяронов будет иметь вид:

$$\bar{m}(\mathbf{k}) = N_0 \Delta(\mathbf{k}) + \left[\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mathbf{k}\mathbf{u}}{T}\right) - 1 \right]^{-1} (1 - \Delta(\mathbf{k})), \quad (2.4)$$

где $\varepsilon(\mathbf{k})$ – спектр возбуждённых состояний ТИ-биполярона, \mathbf{u} – скорость бозе-конденсата относительно кристаллической решётки. Здесь учтено, что если спектр возбуждений ТИ-биполярона в системе покоящегося бозе-конденсата имеет вид $\varepsilon(\mathbf{k})$, то в системе, где газ возбуждений покоится (т.е. в системе, связанной с решёткой), соответствующий спектр будет иметь вид $\varepsilon(\mathbf{k}) - \mathbf{k}\mathbf{u}$.

Подстановка (2.1), (2.4) в (2.2) приводит к следующей величине полного импульса $\vec{\mathbf{P}}'$ возбуждений в системе покоящегося конденсата:

$$\mathbf{P}' = -M_{bp} \mathbf{u} N', \quad (2.5)$$

$$N'/V = (MT/2\pi\hbar^2)^{3/2} F_{3/2}(\tilde{\omega}/T), \quad (2.6)$$

$$F_{3/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha} - 1} dx, \quad (2.7)$$

$$\tilde{\omega} = \omega_0 - Mu^2/2, \quad (2.8)$$

где V – объём кристалла, $N' = N - N_0$. Таким образом, полный импульс ТИ-биполярона в лабораторной системе отсчёта, то есть в системе, связанной с кристаллической решёткой, будет равен:

$$\mathbf{P} = (N - N')M_{bp} \mathbf{u} = N_0 M_{bp} \mathbf{u}. \quad (2.9)$$

Из (2.6)-(2.8) следует, что существует предельная скорость движения бозе-конденсата u_c :

$$u < u_c, \quad u_c = \sqrt{2\omega_0/M}. \quad (2.10)$$

Условие (2.10) в точности соответствует критерию сверхтекучести Ландау:

$$u < \varepsilon(\mathbf{k})/k. \quad (2.11)$$

Из (2.6)-(2.8) следует, что выражение для температуры сверхпроводящего перехода (которое получается из (2.6) при $N' = N$) будет тем же, что и (5.3), Гл. 3 с заменой в нём величины ω_0 на $\tilde{\omega}_0$, определяемой (2.8). Отсюда следует, что температура сверхпроводящего перехода зависит от скорости движения бозе-конденсата и достигает

своей максимальной величины при $u = 0$. С увеличением скорости конденсата T_c уменьшается и достигает своего минимального значения: $T_c = 3,31\hbar^2 n^{2/3}/M$, $n = N/V$ – концентрация ТИ-биполяронов, при $u = u_c$.

Что же произойдёт, если скорость движения бозе-конденсата превысит критическую скорость, то есть если выполнится неравенство $u > u_c$? Интеграл в (2.7) в этом случае не существует и стационарное движение оказывается невозможным. При $\mathbf{P} > \mathbf{P}_c = N_0 M_{bp} \mathbf{u}_c$ импульс от возбуждений начинает передаваться конденсату, тормозя его до тех пор, пока скорость конденсата не станет равной u_c .

3. Бозе конденсат в магнитном поле

Рассмотрим теперь случай, когда образец помещён в магнитное поле. В силу эффекта Мейснера магнитное поле приводит в движение бозе-конденсат в приповерхностном слое образца толщиной порядка лондоновской глубины проникновения. Так как магнитное поле не проникает внутрь образца, то основная масса бозе-конденсата, содержащегося в образце, будет неподвижна. Общее магнитное поле, действующее на отдельные биполяроны, включает в себя как внешнее поле, так и поле, создаваемое самим движущимся бозе-конденсатом. Рассмотрим вклад в ток от поля, создаваемого самим движущимся бозе-конденсатом, которое обозначим через \mathbf{V} .

Согласно (3.6), Гл. 3, спектр возбуждений бозе-конденсата ТИ-биполяронов в магнитном поле напряжённостью \mathbf{V} имеет вид:

$$\varepsilon_B(k) = \omega_0 + \frac{k^2}{2M} + \frac{\eta}{M} (\mathbf{V}\mathbf{k}) - \mathbf{k}\mathbf{u}. \quad (3.1)$$

Из (3.1) следует, что в случае магнитного поля все вышеприведённые формулы не изменяют своего вида, если в них заменить скорость \mathbf{u} на $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u} - \eta\mathbf{V}/M$. Поле, создаваемое движущимся бозе-конденсатом со скоростью $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, в каждой точке образца \mathbf{r} будет всегда перпендикулярно

$\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Таким образом, в магнитном поле вместо величины $\tilde{\omega}_0$, определяемой (2.8), получим величину $\tilde{\omega}_{0,B}$, равную:

$$\tilde{\omega}_{0,B} = \omega_0 \left(1 - \frac{u^2}{u_c^2} - \frac{B^2}{B_{\max}^2} \right), \quad (3.2)$$

где $B_{\max} = \sqrt{2M\omega_0/\eta}$. Величина B_{\max} имеет смысл максимальной величины магнитного поля (при $T=0$), при которой существует сверхпроводимость при $\mathbf{u} = 0$ (первое критическое поле).

Согласно полученным результатам, движущийся приповерхностный бозе-конденсат должен обладать значительно более низкой температурой конденсации $T_c(\mathbf{u})$, чем покоящийся в толще образца конденсат, у которого температура конденсации $T_c(\mathbf{u} = 0, \mathbf{B} = 0) > T_c(\mathbf{u} \neq 0, \mathbf{B} \neq 0)$, как это следует из (2.6)-(2.8), (3.2).

Из (3.2) следует, что для положительности величины $\tilde{\omega}_{0,B}$ должно выполняться условие:

$$u < u_c \sqrt{1 - B^2 / B_{\max}^2}. \quad (3.3)$$

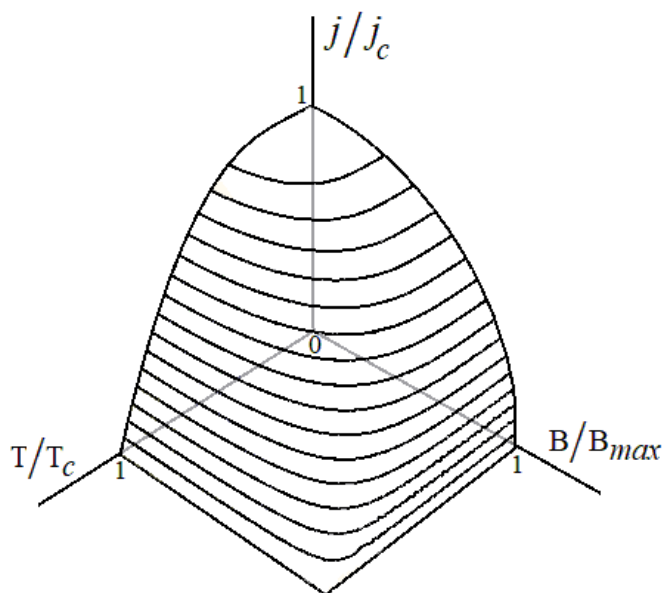


Рис. 3.1. Зависимость критического тока от магнитного поля и температуры.

Отсюда вытекает, что зависимость величины критического тока в сверхпроводнике от магнитного поля B , имеет вид:

$$j_c(B) = j_c(0) \sqrt{1 - B^2 / B_{\max}^2}, \quad j_c(0) = 2en_0u_c, \quad (3.4)$$

где n_0 – концентрация ГИ-биполяронов в бозе-конденсате.

С учётом температурной зависимости $n_0(T)$ (Гл. 3, рис. 6.2) получим из (3.4) обычную зависимость для критической величины плотности тока $j_c(B, T)$ как функцию температуры и магнитного поля B , представленную на рис. 3.1

Выражение (3.2) было получено в предположении, что величина \mathbf{B} есть поле, создаваемое движущимся бозе-конденсатом. Однако, согласно правилу Силсби [Silsbee 1917], действие поля \mathbf{B} не зависит от того создается ли оно током, проходящим по сверхпроводнику (то есть движущимся бозе-конденсатом), или генерируется внешним источником. Таким образом, рис. 3.1 можно рассматривать как зависимость критического тока от внешнего магнитного поля и температуры.

4. Эффект Литтла-Паркса

Эффект Литтла–Паркса [Little, Parks 1962] связан с тем фактом, что квантование магнитного потока в неодносвязанном СП вызывается соответствующим квантованием тока, текущего вокруг каждого отверстия в образце. Квантование тока приводит к осцилляциям скорости носителей сверхпроводящего тока. Поскольку температура сверхпроводящего перехода зависит от скорости бозе-конденсата, то её осцилляции приводят к соответствующим осцилляциям температуры сверхпроводящего перехода. Исследование этого явления в последнее время привлекло большое внимание исследователей в связи с возможностью его использования для повышения критической температуры в СП [Sochnikov 2010], [Gennes 1981], [Staley 2012], [Liu 2001].

Так как в настоящее время общепринятой теории высокотемпературной сверхпроводимости нет, то нет и общепринятого объяснения эффекта Литтла–Паркса в ВТСП материалах. Цель данного раздела построить теорию эффекта Литтла–Паркса на основе трансляционно-инвариантной биполяронной теории.

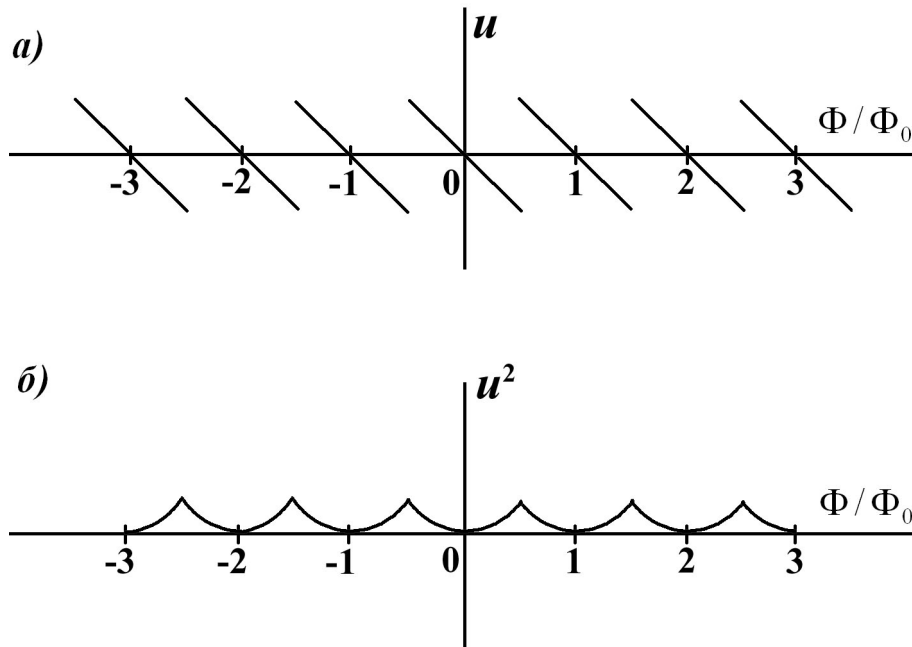


Рис. 4.1 Зависимость величины u от магнитного потока, проходящего через отверстие цилиндра а), зависимость величины u^2 и, следовательно, $\Delta T_c \sim u^2$ от магнитного потока б). [Тинкхам 1980]

С использованием (3.1) мы можем получить выражение аналогичное (2.5) – (2.8), в которое вместо $\tilde{\omega}_0$, определяемой (2.8), входит величина $\tilde{\omega}_{0,B}$, определяемая (3.2). Из общих соотношений для квантования флюксоида Φ' получим: $\Phi' = n\Phi_0$, $n = 1, 2, \dots$, $\Phi_0 = \pi\hbar c/e$, который в случае биполяронного бозе-конденсата имеет вид:

$$\Phi' - \Phi = \frac{c}{2e} \oint M_{bp} \mathbf{u} d\mathbf{R}, \quad \Phi = \oint A d\mathbf{R}, \quad (4.1)$$

где Φ – магнитный поток, проходящий через контур интегрирования \mathbf{R} : $\Phi = \int \mathbf{V} d\mathbf{S}$. В случае тонкостенного цилиндра, соответствующего условиям эксперимента Литтла–Паркса, выражение для скорости бозе-конденсата ТИ-биполяронов принимает вид:

$$u = \frac{\hbar}{M_{bp}R} \left(n - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad (4.2)$$

где R – радиус цилиндра. Уравнение (4.2) описывает осцилляции скорости бозе-конденсата ТИ-биполяронов (рис. 4.1) что приводит к осцилляциям температуры сверхпроводящего перехода T_c [Tinkham 1975]. С использованием (2.5)-(2.7), и (3.2) и полагая $\tilde{\omega} = \tilde{\omega}_0 + \Delta\tilde{\omega}$, где $\tilde{\omega}_0 = \omega_0(1 - \Phi^2/\Phi_c^2)$, $\Delta\tilde{\omega} = -\omega_0 u^2/u_c^2$, где Φ_c – критический магнитный поток, соответствующий критическому магнитному полю B_c , для малых отклонений $\Delta\tilde{\omega}$ для отклонений критической температуры от определяемой (2.6) получим:

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = \frac{\xi^2}{R^2} \left(n - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2, \quad (4.3)$$

$$\xi^2 = -\frac{1}{3(2\pi)^{3/2}} \frac{M^2}{M_{bp}^2} \frac{1}{n_{bp}^{2/3}} \left(\frac{MT_c}{n_{bp}^{2/3} \hbar^2} \right)^{1/2} Li_{1/2}(e^{-\alpha}), \quad (4.4)$$

$$Li_{1/2}(e^{-\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{t}} \frac{dt}{e^{t+\alpha} - 1}, \quad (4.5)$$

$$\alpha = \frac{\omega_0}{T_c} \left(1 - \frac{\Phi^2}{\Phi_c^2} \right), \quad (4.6)$$

где n_{bp} – концентрация ТИ-биполяронов. Формула (4.3) определяет амплитуду осцилляций T_c при изменении магнитного потока Φ . Несмотря на осциллирующее поведение ΔT_c в зависимости от магнитного потока, выражение (3.2) предполагает, что существует максимально возможное значение магнитного потока $\Phi_{\max} = \Phi_c = \pi R^2 B_c$, соответствующее максимальному значению магнитного поля, при котором возможно существование бозе-конденсата с $T_c(\Phi = \Phi_c, u = 0) = 3,31 \hbar^2 n_{bp}^{2/3} / M$.

При низких критических температурах: $\alpha \gg 1$, $Li_{1/2}(e^{-\alpha}) \cong e^{-\alpha}$, а при высоких $\alpha \ll 1$, $Li_{1/2}(e^{-\alpha}) \approx \sqrt{\pi/\alpha}$. С использованием выражений (4.3), (4.4) для $\alpha \cong 1$, $n_{bp} = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [Lakhno 2018], $m = m_0$, $M \approx M_{bp}$, $R = 100 \text{ нм}$ для $\Delta T_c / T_c$ получим: $\Delta T_c / T_c \approx 10^{-4}$, что близко к оценке, полученной на основе

БКШ [Tinkham 1975]. Из (4.3), (4.4) также следует, что для $\omega_0/T_c \ll 1$ (соответственно $\alpha \ll 1$) отношение: $\Delta T_c/T_c \approx 10^{-4}(T_c/\omega_0)^{1/2}$ может быть много больше полученного на основе БКШ теории.

Эффект Литтла–Паркса обычно используется для проверки фундаментальных положений теории сверхпроводимости, в частности, для доказательства спаривания носителей тока в сверхпроводниках. Полученные результаты могут быть также использованы, для обнаружения мягких фононных мод, для которых $\omega_0 \rightarrow 0$ (см. [Kimura 2005]), которые обычно сопутствуют структурной неустойчивости и фазовым переходам в ВТСП материалах. В этом случае можно ожидать аномальных величин осцилляций $\Delta T_c/T_c$.

В настоящее время основными методами исследования мягких фононных мод являются неупругое рассеяние рентгеновских лучей и неупругое нейтронное рассеяние [Wakimoto 2004], [Reznik 2010]. Точность этих методов ограничивается энергиями в несколько миллиэлектрон-вольт. В итоге, оценка величины $(T_c/\omega_0)^{1/2}$ даст небольшой коэффициент: <10 . Для реальных значений T_c в несколько десятков градусов, это может приводить к трудностям в интерпретации данных, полученных на основе эффекта Литтла–Паркса.

Этот вывод подтверждается наблюдениями аномального смягчения фононных мод в семействе соединений $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ [Kimura 2005] для значений x близких к тем, для которых отношение $\Delta T_c/T_c$ может быть аномально большим [Sochnikov 2010], которые связывались в [Sochnikov 2010] с возможностью формирования вихрей и их взаимодействия с осциллирующим током.

Полученные здесь результаты основаны на идее бозе-конденсации ТИ-биполярнов, обладающих малой корреляционной длиной (≈ 1 нм). Это верно, только в случае сильного ЭФВ, когда константа ЭФВ аномальна велика. Условие $\alpha_{ph} \approx \infty$ выполняется только при $\omega_0 \rightarrow 0$, так

как $\alpha_{ph} \sim \omega_0^{-1/2}$. Таким образом, биполярны, формируемые взаимодействием с такими фоновыми модами будут иметь наименьшую энергию, по сравнению с формируемыми другими ветвями фононного спектра и, таким образом, именно эти фононы будут формировать бозе-конденсат и приводить к аномалиям в эффекте Литтла–Паркса (см. Гл. 6).

Выражения (4.3)-(4.6) также показывают, что в общем случае, когда смягчение фононных мод мало, для достижения максимальных амплитуд осцилляций T_c в ВТСП материалах необходимо использовать максимальные значения магнитного потока $\Phi \rightarrow \Phi_c$. В этом случае сколь угодно малое отклонение скорости бозе-конденсата от своего равновесного значения $u = 0$ будет приводить к конечным изменениям T_c .

Глава 6. Трансляционно-инвариантные биполяроны и волны зарядовой плотности

Установлена связь между теориями сверхпроводимости, основанными на представлении о волнах зарядовой плотности (ВЗП), и трансляционно-инвариантной (ТИ) биполяронной теорией. Показано, что ВЗП формируются в псевдощелевой фазе из биполяронных состояний за счет коновской аномалии, образуя волну плотности пар (ВПП), при волновых векторах, соответствующих нестингу. Образуюсь в псевдощелевой фазе, ВЗП при температуре ниже температуры сверхпроводящего перехода сосуществуют со сверхпроводимостью, а их амплитуда уменьшается при образовании бозе-конденсата из ТИ-биполяронов, обращаясь в ноль при температуре, равной нулю.

1. Трансляционно-инвариантные биполяроны и волны зарядовой плотности в высокотемпературных сверхпроводниках

В настоящее время отсутствует единое мнение о микроскопической природе высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). Вместе с тем, имеются феноменологические модели, такие как модель Гинзбурга-Ландау [Larkin 2005], модель волн зарядовой плотности (ВЗП) или волн парной плотности (ВПП), а также волн спиновой плотности, позволяющие описывать многочисленные эксперименты ВТСП [Grüner 1994]. В этих моделях ничего не говорится о природе спаренных состояний, участвующих в СП. В рассматриваемой монографии под спаренными состояниями понимаются трансляционно-инвариантные (ТИ) биполяронные состояния, образуемые сильным электрон-фононным взаимодействием, аналогичные куперовским парам. Согласно этому подходу, ТИ-биполяроны представляют собой плоские волны с малой корреляционной длиной, способные образовывать конденсат Бозе-Эйнштейна с высокой температурой перехода, обладающий СП свойствами. Связь теории Бардина-Купера-Шриффера [Bardeen 1957]

(БКШ) с теорией Гинзбурга-Ландау была установлена в [Горьков 1959]. Цель данной работы – установить связь между ТИ-биполярной теорией СП и ВЗП (ВПП).

Общие соотношения для спектра движущегося ТИ-биполярона.

Согласно вышеизложенному, ТИ-биполяроны образуются при температуре T^* значительно более высокой, чем температура СП перехода T_c . При $T_c < T < T^*$ и в отсутствие поверхности Ферми с резкой границей ансамбль ТИ-биполяронов представлял бы собой идеальный газ, частицы которого обладали бы спектром $s = \{v_k^2(\mathbf{P})\}$ определяемым дисперсионным уравнением (3.5), Гл. 3:

$$1 = \frac{2}{3} \sum_k \frac{k^2 |f_k|^2 \omega_k}{s - \omega_k^2}, \quad (1.1)$$

$$\omega_k = \omega_0(\mathbf{k}, \mathbf{P}) - \frac{\mathbf{k}\mathbf{P}}{M} + \frac{k^2}{2M} - \frac{\mathbf{k}}{M} \sum_{k'} \mathbf{k}' |f_{k'}|^2,$$

$f_k = f_k(\mathbf{k}, \mathbf{P})$ – параметры, определяющие энергию основного состояния ТИ-биполярона $E_{bp}(\mathbf{P})$, \mathbf{P} – полный импульс ТИ-биполярона, $M = 2m$, где m – масса зонного электрона (дырки), $\omega_0(\mathbf{k}, \mathbf{P})$ – фононная частота в электронном газе, в окружении которого находятся ТИ-биполярны (см. Приложение И).

Волновая функция ТИ-биполярона с волновым вектором \mathbf{P} будет иметь вид:

$$|\Psi(\mathbf{P})\rangle_{bp} = e^{i\mathbf{P}\mathbf{R}} |\Psi(0)\rangle_{bp}, \quad (1.2)$$

где \mathbf{R} – координаты центра масс биполярона. Явный вид волновой функции $|\Psi(0)\rangle_{bp}$ с нулевым импульсом дается (11.13), Гл. 1. Выражение для \mathbf{P} можно получить, вычисляя математическое ожидание оператора полного импульса \mathbf{P} :

$$\mathbf{P} = \langle \Psi(\mathbf{P}) | \hat{\mathbf{P}} | \Psi(\mathbf{P}) \rangle = M\mathbf{u} + \sum_k \mathbf{k} |f_k|^2, \quad (1.3)$$

где \mathbf{u} – скорость ТИ-биполярона. Полагая $\mathbf{P} = M_{bp}\mathbf{u}$, где M_{bp} – масса биполярона, для M_{bp} из (1.3) получим:

$$M_{bp} = \frac{M}{1-\eta}, \quad \eta = \frac{\mathbf{P}}{\mathbf{P}^2} \sum_k \mathbf{k} |f_k|^2. \quad (1.4)$$

С использованием (1.4) выражение для ω_k из (1.1) можно переписать в виде:

$$\omega_k = \omega_0(\mathbf{k}, \mathbf{P}) + \frac{k^2}{2M} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{P}}{M_{bp}}. \quad (1.5)$$

Из (1.4) следует, что в случае слабой и промежуточной связи (когда ТИ-биполярные состояния при $\mathbf{P} = 0$ метастабильны), точный вид $f_k(\mathbf{k}, \mathbf{P})$ известен и выражение для эффективной массы ТИ-биполярона будет иметь простой вид: $M_{bp} = M(1 + \alpha/6)$, где α – константа электрон-фононной связи, то есть масса M_{bp} равна сумме масс индивидуальных поляронов. При больших α хорошие аппроксимации для f_k имеются только для $\mathbf{P} = 0$. По этой причине расчет эффективной массы ТИ-биполярона сильной связи представляет большие трудности.

ТИ-биполярны и волны зарядовой плотности. При наличии Ферми-поверхности с резкой границей рассматриваемый ТИ-биполяронный газ будет иметь особенности. Так, если на этой поверхности существуют достаточно большие фрагменты, которые можно совместить посредством переноса одного из фрагментов на вектор \mathbf{P} , то при достаточной величине этих фрагментов связь между ними будет достаточно сильной, что приведет к пайерлсовской деформации решетки в направлении такого нестинга. Проигрыш в энергии, связанный с деформацией решетки, будет компенсироваться выигрышем в энергии биполяронного газа, образующего волну зарядовой плотности с волновым вектором $\mathbf{P} = \mathbf{P}_{CDW}$. Наличие выигрыша в энергии ТИ-биполярона вытекает из уравнения (1.1), решение которого приводит к спектру ТИ-биполярона :

$$E_k(\mathbf{P}) = \begin{cases} E_{bp}(\mathbf{P}), & k = 0 \\ E_{bp}(\mathbf{P}) + \omega_0(\mathbf{P}, \mathbf{k}) + \frac{k^2}{2M} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{P}}{M_{bp}}, & k \neq 0 \end{cases} \quad (1.6)$$

то есть, $E_k = E_{bp} + \omega_k$, и $v_k = \omega_k$ при $k \neq 0$. Выигрыш в энергии обусловлен так называемой аномалией Кона [Kohn 1959], согласно которой при $\mathbf{P} = \mathbf{P}_{CDW}$ происходит смягчение фоновой частоты (в 1D-металле $\mathbf{P}_{CDW} = 2k_F$, $\omega_0(2k_F) = 0$, где k_F – импульс Ферми) $\omega_0(\mathbf{P}_{CDW}, k) = \omega_{CDW}$ и, как следствие, большое понижение в энергии E_{bp} ввиду резкого возрастания константы электрон-фононного взаимодействия $\alpha \sim 1/\omega_{CDW}^{1/2}$ (Приложение И). При $\omega_{CDW} \rightarrow 0$ $\alpha_{CDW} \rightarrow \infty$, соответственно, $M_{bp} \rightarrow \infty$ и ВЗП оказывается практически неподвижной.

Выражение для $E_{bp}(\mathbf{P})$ в общем случае сложно, и даже в случае $\mathbf{P} = 0$ для него имеются только вариационные оценки (Гл. 1). Можно предположить, что общий вид зависимости E_{bp} от \mathbf{P} будет δ -образным, в котором δ -образному минимуму будет соответствовать $\mathbf{P} = \mathbf{P}_{CDW}$ (рис. 1.1).

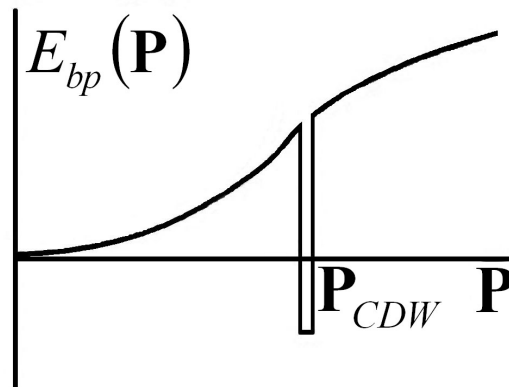


Рис. 1.1 Спектр ТИ-биполярона для волны зарядовой плотности.

При таком спектре ТИ-биполяроны будут переходить в состояние с минимумом энергии $E_{bp}(\mathbf{P}_{CDW})$, образуя единую волну зарядовой плотности, состоящую из спаренных состояний, определяемую выражением (1.2).

Отсюда следует, что при T_{CDW} , $T_{bp} > T_c$, где $T_{CDW} = |E_{bp}(\mathbf{P}_{CDW}) - E_{bp}(0)|$, $T_{bp} = |E_{bp}(0) - 2E_p(0)|$, $E_p(0)$ – энергия основного состояния полярона, псевдощель предшествует СП. Если при этом выполняется условие

$T_{CDW} > T_{bp}$, то псевдощель представляет собой когерентную псевдофазу, а при $T_{bp} > T_{CDW}$ когерентной псевдофазе предшествует некогерентная фаза свободных пар. Если неравенство $T_{CDW}, T_{bp} > T_c$ не выполняется, то достигается равенство T_c наименьшей из величин T_{CDW} или T_{bp} . В любом случае сверхпроводящая фаза сосуществует с псевдощелевой, которая исчезает при $T = 0$, когда все пары находятся в бозе-конденсате и ВЗП амплитуда обращается в ноль.

Образование ВЗП приводит к нарушению трансляционной инвариантности вплоть до температуры, равной температуре сверхпроводящего перехода T_c . При $T < T_c$ неоднородное состояние с ВЗП перестает быть термодинамически выгодным и образуется трансляционно-инвариантная фаза с восстановленной симметрией и переходом ТИ-биполяронов в бозе-конденсатное состояние. Энергетическая выгодность такой фазы вытекает из выражений (1.5), (1.6), согласно которым однородный бозе-конденсат обладает более низкой энергией при условии

$$\mathbf{P} < M_{bp} \sqrt{2\omega_0(\mathbf{P}, k) / M}. \quad (1.7)$$

Отметим, что рассмотренная картина во многих отношениях близка к модели сверхпроводимости Фрëлиха [Fröhlich 1954]. В модели Фрëлиха полагалось, что два электрона с противоположными импульсами (как в БКШ) на поверхности Ферми связаны взаимодействием с фононом с волновым вектором \mathbf{P}_{CDW} ($2k_F$ в 1D случае), образуя тем самым заряженный фонон. Будучи бозонами, такие фононы могут в макроскопическом числе находиться в одном состоянии с волновым вектором \mathbf{P}_{CDW} , образуя ВЗП (зарядовую волну Фрëлиха). Такая волна, однако, не будет сверхпроводящей, поскольку всегда имеющийся в реальных кристаллах пиннинг или ее рассеяние нормальными носителями будет тормозить такую волну. Главное отличие ТИ-биполярного описания от подхода Фрëлиха состоит в образовании

бозе-конденсата из ТИ-биполяронов (образующих волну заряженных фононов Фр е́лиха), который и отвечает за сверхпроводимость.

Сравнение с экспериментом. Для конкретности рассмотрим случай такого ВТСП, как YBCO. Вектор CDW в YBCO лежит в ab плоскости и имеет два равновозможных направления: вдоль оси a ($\mathbf{P}_{CDW,x}$) и вдоль оси b ($\mathbf{P}_{CDW,y}$), соответствующие антинодальным направлениям. При $T_c < T < T^*$ этим направлением \mathbf{P}_{CDW} соответствуют отличные от нуля мягкие фононные моды $\omega_0(\mathbf{P}_{CDW}, k)$. Наличие ВЗП в этих направлениях в YBCO было установлено в большом количестве экспериментов, в том числе по ядерному магнитному резонансу [Wu 2011, 2013, 2015], резонансному неупругому рассеянию рентгеновских лучей [Ghiringhelli 2012, Achkaz 2012, Blackburn 2013], резонансному рассеянию и дифракции жестких рентгеновских лучей [Comin 2014, Chang 2012]. Соответствующее смягчение фононных мод при образовании ВЗП наблюдалось в [Tascon 2014].

Еще большего смягчения фононных мод можно ожидать при $T < T_c$. Соответствующая нодальному направлению фононная мода может обращаться в ноль, что соответствует отсутствию щели в нодальном направлении. Экспериментальное подтверждение этому было получено [Comin 2014] для такого соединения, как $Bi_2Sr_{2-x}La_xCuO_{6+\delta}$ (Bi2201) с использованием комбинированных методов резонансного рассеяния рентгеновских лучей, сканирующей туннельной микроскопии и методов фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением. В случае YBCO с $\omega_0(\mathbf{P}_{CDW}, k) = \Delta_0 |\cos k_x a - \cos k_y a|$ (абсолютная величина параметра порядка ВЗП или энергия щели [Comin 2015], [Chowdhury 2014], которая в ТИ-биполярной теории является частотой перенормированного фонона) согласно (1.7), любое значение \mathbf{P}_{CDW} приводит к неустойчивости ВЗП и формированию в этом направлении СП фазы с сохранением в антинодальном направлении псевдощелевого состояния.

Отметим, что в изложенном подходе различие между ВЗП и ВПП теориями исчезает и $\mathbf{P}_{CDW} = \mathbf{P}_{PDW}$ [Hamidian 2016] (с современным состоянием вопроса по теории и эксперименту с ВПП в высокотемпературных сверхпроводниках, ультрахолодных атомных газах, мезоскопических устройствах можно ознакомиться по обзору [Agterberg 2020]).

2. Трансляционно-инвариантные биполярны и пиннинг ВЗП

Как было отмечено в предыдущем разделе, впервые на возможность волны зарядовой плотности двигаться, не испытывая сопротивления, то есть на возможность ВЗП сверхпроводимости, обратил Фрёлх [Fröhlich 1954]. Считается, что препятствием этому служит пиннинг ВЗП на дефектах решётки и рассеяние ВЗП на нормальных носителях тока.

Представляет интерес обсудить эту проблему на основе микроскопической теории ВЗП, рассмотренной в предыдущем разделе. Согласно полученным выше результатам, в высокотемпературных сверхпроводниках ВЗП формируются в псевдощелевой фазе из биполярных состояний за счёт коновской аномалии, образуя волну плотности пар при волновых векторах $P = P_{CDW}$, соответствующих нестингу.

Обозначим $E_{bp}^{pin}(P)$ – энергию ТИ-биполярона в ВЗП в состоянии её пиннинга, $E_{bp}(P)$ – энергию свободного ТИ-биполярона, то есть в состоянии депиннинга. Тогда движению ВЗП в электрическом однородном поле будет соответствовать уравнение Шрёдингера, которое в импульсном представлении будет иметь вид:

$$-i\hbar F \frac{d\Psi(P)}{dP} + (\Delta E(P) - W)\Psi(P) = 0, \quad (2.1)$$

где $\Psi(P)$ и W – волновая функция и энергия ТИ-биполярона в импульсном представлении, $\Delta E(P) = E_{bp}(P) - E_{bp}^{pin}(P)$ – энергия связи

биполярона на примеси, $F = 2eE$, где $2e$ – заряд биполярона, E – напряжённость приложенного электрического поля.

Решение этого уравнения имеет вид:

$$\Psi(P) \sim \exp i\phi(P), \quad (2.2)$$

$$\phi(P) = \frac{1}{\hbar F} \left(WP - \int_0^P \Delta E_{bp}(P') dP' \right).$$

Так как в случае ВЗП максимум распределения фазы $\phi(P)$ в (2.2) по импульсам соответствует $P = P_{CDW}$, то из условия $\phi'_{P=P_{CDW}} = 0$ вытекает $W = \Delta E_{bp}(P_{CDW})$, а условие депиннинга примет вид:

$$\phi(P = P_{CDW}) = 2\pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.3)$$

Условие (2.3) соответствует тому, что фаза волны остаётся неизменной при малом изменении импульса. При невыполнении условия (2.3) фаза $\phi(P)$ представляет собой быстро осциллирующую функцию P , что приводит к осцилляциям знака зарядовой плотности в ВЗП. В итоге, при малом изменении P сила, действующая со стороны поля, также будет менять знак, оставляя тем самым волну в пиннинге.

Из (2.3) вытекает выражение для критической величины поля F_n , при котором происходит депиннинг:

$$F_n = \frac{1}{2\pi\hbar n} \left(P_{CDW} \Delta E_{bp}(P_{CDW}) - \int_0^{P_{CDW}} \Delta E_{bp}(P') dP' \right). \quad (2.4)$$

Из (2.4) следует, что F_1 является максимально возможным полем, при котором пиннинг сохраняется. При $F > F_1$ стационарное значение фазы невозможно и происходит генерация колебаний тока, обусловленная осцилляциями ВЗП. Отметим, что разрушение пиннинга может происходить и в более слабом поле: $F_n < F_1$, $n = 2, 3, \dots$. Возможно также появление и большего числа обертонов критического поля. Природа возникновения при $F > F_n$ стохастических колебаний связана с тем, что при выполнении этого условия ВЗП в поле движется ускоренно и её импульс увеличивается, соответственно условие, (2.3) перестаёт выполняться, что приводит к торможению волны до тех пор, пока не

выполнится (2.3). Это объясняет причину того, что проводимость систем с ВЗП не превышает проводимость нормальных систем, в которых ВЗП отсутствует.

Отметим, что пиннинг происходит, только если выполняется условие $\Delta E(P) > 0$. В противном случае энергетически более выгодным является свободное биполярное состояние с энергией $E_{bp}(P)$. При этом в состоянии пиннинга биполярон, будучи захваченным дефектом, теряет свою трансляционную инвариантность, вследствие чего его энергия повышается. По этой причине для фактической реализации пиннинга требуется достаточно большая глубина потенциальной ямы дефекта. При невыполнении этого условия ТИ-биполярон остаётся свободным и при $P = P_{CDW}$ не испытывает рассеяния на фононах, так как $\alpha_{CDW} \gg 1$. Отсутствие рассеяния ТИ-биполярона на оптических фононах было впервые показано в работе Тулуба [Тулуб 1961]. Волна зарядовой плотности, образованная ТИ-биполяронами, в этом случае становится «сверхпроводящей», в соответствии с гипотезой Фрёлиха о возможности сверхпроводимости на основе ВЗП [Fröhlich 1954].

3. Странные металлы

Согласно изложенным в первом разделе результатам, свойства псевдощелевой фазы определяются соотношениями между T_{CDW} , T_{bp} и T_c . Как было показано выше, для стабильности псевдощелевой фазы требуется выполнение условия $|E_{bp} - 2E_p| < T^*$. Это означает, что, даже несмотря на возможную энергетическую проигрышность биполяронных состояний перед поляронными, их вклад в термодинамические свойства при $T < T^*$ доминирует. Такое доминирование, однако, может отсутствовать в транспортных свойствах. В любом случае при $T > T^*$ доминирующий вклад как в термодинамические характеристики, так и в транспортные дают ТИ-поляроны. При $T < |E_p|$ их энергия лежит глубже

проводящего слоя Ферми-поверхности, их концентрация много меньше концентрации электронов, соответственно, под поверхностью Ферми они представляют собой проводящий невырожденный фермионный газ. Как и в случае ТИ-биполяронов, в силу коновской аномалии, когда импульс ТИ-полярона соответствует нестингу, соответствующая константа ЭФВ велика, что приводит к их большой эффективной массе. Отсюда следует, что при конечной величине нестинга ТИ-поляроны обладают малой скоростью (плохой металл). При $T > T^{**} \cong |E_p|$ ТИ-поляроны распадаются на обычные электроны и фононы, и плохой (или странный) металл становится обычным металлом.

Поскольку концентрация ТИ-поляронов как в псевдощелевой, так и в «странной» фазе мала, обусловленное ими электросопротивление ρ будет пропорционально числу фононов и при $\omega_0 < T$ линейно растёт с температурой:

$$\rho \sim T/\omega_0, \quad T > T_c. \quad (3.1)$$

Такая зависимость отличает странные металлы от обычных, в которых в области достаточно низких температур ($T < 0,2\omega_0 \ll E_F$) электросопротивление описывается выражением [Садовский 2021]

$$\rho(T) = \rho_0 + a_{ee} \left(\frac{T}{E_F} \right)^2 + a_{ep} \left(\frac{T}{\omega_0} \right)^5, \quad (3.2)$$

где ρ_0 – остаточное сопротивление при нулевой температуре, второе слагаемое в правой части – вклад электрон-электронного рассеяния, третье – вклад электрон-фононного рассеяния.

Линейная зависимость (3.1) при $T > T_c$ обычно наблюдается в передопированных купратах ($T^* \approx T_c$) во всём интервале изменения температур $T > T_c$. Переход от линейной зависимости сопротивления при $T > T^*$ к нелинейной зависимости при $T < T^*$ свидетельствует о переходе от фазы странного металла к псевдощелевой фазе, в которой может доминировать ВЗП/ВПП механизм. Этот вывод подтверждается

экспериментами в ВТСП $\text{La}_{1,6-x}\text{Nd}_{0,4}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, в которых сверхпроводимость при $T > T_c$ подавлялась внешним магнитным полем [Daou 2009].

Отметим, что в силу анизотропии СП щели такой же анизотропией будет обладать и ρ . В частности, можно ожидать минимума в рассеянии ТИ-поляронов (биполяронов) в нодальном направлении, так как при достаточно большой константе ЭФВ рассеяние ТИ-поляронов на оптических фононах согласно [Тулуб 1961] будет отсутствовать. При оптимальном допировании этот вывод подтверждается экспериментами с передопированными ВТСП $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ [Taillefer 2006], [Abdel-Jawad 2006].

Послесловие

После открытия высокотемпературной сверхпроводимости стало ясно, что теория БКШ не применима для объяснения этого явления. Появилось большое число теорий, основанных на нефононном механизме взаимодействия, которые подкреплялись различными экспериментами.

Широко распространено мнение, что ВТСП – очень сложное явление, требующее для объяснения учета различных механизмов взаимодействия электронов с кристаллической решеткой, идущее вразрез с эпиграфом к монографии.

Изложенный в монографии подход, как и БКШ, основан на электрон-фононном механизме. Подробно изложен метод решения задачи о взаимодействии одной и двух частиц в фононном поле. Полученные решения используются для построения трансляционно-инвариантной биполярной теории сверхпроводимости с сильным электрон-фононным взаимодействием. Показано, что такой подход в состоянии объяснить многие эксперименты по ВТСП и может быть обобщен на другие механизмы.

Учитывая вышесказанное, построенную теорию сверхпроводимости на основе электрон-фононного взаимодействия, в действительности следует рассматривать как некоторую схему действий для описания свойств реальных материалов. Число различных соединений, обладающих ВТСП свойствами, составляет многие тысячи, а число публикаций по ВТСП – многие сотни тысяч. Поэтому под построением микроскопической теории ВТСП, по-видимому, следует понимать некоторую идеологическую концепцию, роль которой может выполнить рассмотренный в книге ТИ-биполярный механизм.

ПРИЛОЖЕНИЯ

А. Гамильтониан H_1

Гаимльтониан H_1 , фигурирующий в (3.2) Гл. 1, имеет вид:

$$H_1 = \sum_k (V_k + f_k \hbar \omega_k) (a_k + a_k^+) + \sum_{k,k'} \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{m} f_{k'} (a_k^+ a_k a_{k'} + a_k^+ a_{k'}^+ a_k) + \frac{1}{2m} \sum_{k,k'} \mathbf{k}\mathbf{k}' a_k^+ a_{k'}^+ a_k a_{k'}, \quad (\text{A.1})$$

где $\hbar \omega_k$ дается выражением (3.5). Подействуем оператором H_1 на функционал Λ_0 (11.9) Гл. 1. Покажем, что величина $\langle 0 | \Lambda_0^+ H_1 \Lambda_0 | 0 \rangle = 0$. Действительно, действие H_1 на Λ_0 на члены, содержащие нечетное число операторов в H_1 (т.е. на первый и второй члены в H_1), всегда будет содержать их нечетное число и величина математического ожидания от этих членов обратится в ноль.

Рассмотрим математическое ожидание последнего члена в H_1 :

$$\langle 0 | \Lambda_0^+ \sum_{k,k'} \vec{k}\vec{k}' a_k^+ a_{k'}^+ a_k a_{k'} \Lambda_0 | 0 \rangle. \quad (\text{A.2})$$

Функция $\langle 0 | \Lambda_0^+ a_k^+ a_{k'}^+ a_k a_{k'} \Lambda_0 | 0 \rangle$ представляет норму вектора $a_k a_{k'} \Lambda_0 | 0 \rangle$ и будет положительно определенной при всех значениях k и k' . Если в (A.2) заменить $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, то всё выражение изменит свой знак, и поэтому (A.2) также равно нулю. Таким образом, $\langle 0 | \Lambda_0^+ H_1 \Lambda_0 | 0 \rangle = 0$.

Б. К решению уравнения (3.10), Гл. 1

Следуя [Тулуб ТМФ], введём функцию Грина $G_{kk'}(t)$:

$$G_{kk'}(t) = i \langle T [q_k(t), q_{k'}(0)] \rangle,$$

Фурье-компоненты которой удовлетворяют уравнению:

$$(\omega_k^2 - \omega^2) G_{kk'}(\omega) + 2 \sum_{k''} \mathbf{k}\mathbf{k}'' \sqrt{\omega_k \omega_{k''}} f_k f_{k''} G_{k''k'}(\omega) = \delta_{kk'}. \quad (\text{B.1})$$

Для $f_k = 0$, то есть в отсутствие взаимодействия, получим:

$$\langle k | G_{\pm}^0(\omega) | k' \rangle = \frac{\delta_{kk'}}{\omega_k^2 - \omega^2 \mp i\varepsilon}.$$

Тогда решение уравнения (Б.1) имеет вид:

$$\langle k|G_{\pm}^0(\omega)|k'\rangle = \frac{\langle k|G_{\pm}^0|k'\rangle}{D(\omega^2)}, \quad (\text{Б.2})$$

где $D(\omega^2)=D(s)$ определяется (3.19) Гл. 1.

Спектр возбуждений рассматриваемой системы, отсчитываемый от энергии основного состояния, определяется полюсами $\langle k|G_{\pm}^0(\omega)|k'\rangle$ на вещественной оси и, согласно (Б.2), имеет вид $\omega = \omega_k$, соответствующий значениям ω , при которых $D(\omega^2) = 0$.

Матрицы M_{\pm} , фигурирующие в преобразовании Боголюбова (11.1) Гл. 1

$$\begin{aligned} a_k &= (M_+)_{kk'} \alpha_{k'} + (M_-^*)_{kk'} \alpha_{k'}^+, \\ a_k^+ &= (M_+^*)_{kk'} \alpha_{k'}^+ + (M_-)_{kk'} \alpha_{k'}, \end{aligned} \quad (\text{Б.3})$$

где по повторяющимся индексам подразумевается суммирование, связаны с решениями (3.10) Гл. 1 соотношениями:

$$\begin{aligned} (M_{\pm})_{kk'} &= \frac{1}{2} \frac{\omega_k \pm \omega_{k'}}{(\omega_k \omega_{k'})^{1/2}} \langle k|\Omega_{\pm}|k'\rangle, \\ \langle k|\Omega_{\pm}|k'\rangle &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \frac{2(\mathbf{k}\mathbf{k}') f_k f_{k'} (\omega_k \omega_{k'})^{1/2}}{(\omega_{k'}^2 - \omega_k^2 \mp i\varepsilon) D_{\pm}(\omega_k^2)}, \end{aligned}$$

где Ω – унитарная матрица Мёллера [Швебер 1963]. Унитарность преобразования (Б.3) была доказана в [Тулуб 1960].

В. Аналитические свойства функции $D(s)$

Покажем, что (5.4) Гл. 1, (5.5) Гл. 1 следуют из (5.1) Гл. 1, (5.2) Гл. 1. С этой целью заметим, что аналитические свойства $D(s)$, указанные в [Тулуб 1961], непосредственно вытекают из (3.19) Гл. 1. Действительно, полюс $D(s)$ может лежать только на вещественной оси, т.к. в силу положительной определенности $\omega_k k^4 f_k^2$ в (3.19) уравнение

$$1 + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{\omega_k k^4 f_k^2 (\omega_k^2 - s_0 + i\varepsilon)}{(\omega_k^2 - s_0)^2 + \varepsilon^2} dk = 0 \quad (\text{В.1})$$

может выполняться лишь при $\varepsilon = 0$. Кроме того, $D(s)$ является монотонно возрастающей функцией s ввиду того, что $D'(s) > 0$ при $s < 1$ и

при $s_0 \rightarrow \infty$ $D(s)$ обращается в единицу. Поэтому $D(s)$ не может иметь нулей при $-\infty < s_0 < 1$. На этом основании функция $(s-1)D(s)$ может быть представлена в виде:

$$\frac{1}{(s-1)D(s)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C+p} \frac{ds'}{(s'-s)(s'-1)D(s')}, \quad (\text{B.2})$$

где контур интегрирования в интеграле Коши (B.2) показан на рис. 4.2 Гл. 1. Подынтегральная функция в (B.2) имеет полюс при $s'=1$ и разрез от $s'=1$ до $s' \rightarrow \infty$. Выполняя интегрирование в (B.2) по верхнему и нижнему берегам разреза, получим интегральное уравнение (5.5) Гл. 1.

Г. Расчёт энергии отдачи ΔE

Приведем подробный расчет величины ΔE (5.7) Гл. 1 с использованием пробной функции (5.9) Гл. 1.

С этой целью для расчета действительной части, входящей в (5.7) Гл. 1 величины $D(\omega_p^2)$ воспользуемся формулой Сохоцкого:

$$\frac{1}{\omega_k^2 - \omega_p^2 - i\varepsilon} = P \frac{1}{\omega_k^2 - \omega_p^2} + i\pi\delta(\omega_k^2 - \omega_p^2),$$

$$\text{Re} D(\omega_p^2) = 1 + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty f_k^2 k^4 P \frac{\omega_k}{(\omega_k^2 - \omega_p^2)} dk.$$

Удобно представить $\text{Re} D$ в виде:

$$\text{Re} D = 1 + I_1 + I_2,$$

$$I_1 = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty f_k^2 k^4 \frac{dk}{(\omega_k + \omega_p)}, \quad I_2 = P \frac{\omega_p}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{f_k^2 k^4 dk}{(\omega_k - \omega_p)(\omega_k + \omega_p)}.$$

Подставляя в эти выражения f_k в виде (5.9), для I_1 получим:

$$I_1 = \frac{8\alpha}{3\sqrt{2}\pi} \int_0^\infty e^{-k^2/a^2} dk - \frac{8\alpha(p^2 + 4)}{3\sqrt{2}\pi} \int_0^\infty \frac{e^{-k^2/a^2}}{k^2 + p^2 + 4} dk.$$

Полагая $k/a = \tilde{k}$, в пределе сильной связи ($a \rightarrow \infty$) для I_1 получим:

$$I_1 = \frac{8\alpha a}{3\sqrt{2}\pi} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{\pi}{2} \tilde{p} e^{\tilde{p}^2} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\tilde{p}} e^{-t^2} dt \right) \right].$$

Соответственно, для I_2 получим:

$$I_2 = P \frac{4\alpha\omega_p}{3\pi\sqrt{2}} \int_0^\infty \frac{e^{-k^2/a^2} k^2 dk}{(\omega_k - \omega_p)(\omega_k + \omega_p)}.$$

Этот интеграл можно представить в виде:

$$I_2 = I_{20} + I_{21},$$

где:

$$I_{20} = \frac{16\alpha\omega_p}{3\pi\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\omega_p - 1}{p^2 + 2}\right) \int_0^\infty \frac{e^{-k^2/a^2}}{k^2 + p^2 + 4} dk,$$

$$I_{21} = \frac{16\alpha\omega_p(\omega_p - 1)}{3\pi\sqrt{2}(p^2 + 2)} P \int_0^\infty \frac{e^{-k^2/a^2}}{k^2 - p^2} dk.$$

Для входящих в I_{20} и I_{21} интегралов получим:

$$\int_0^\infty \frac{e^{-k^2/a^2}}{k^2 + p^2 + 4} dk = \frac{1}{a} \left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\tilde{p}} e^{-t^2} dt \right] \frac{\pi e^{\tilde{p}^2}}{2 \tilde{p}},$$

$$P \int_0^\infty \frac{e^{-k^2/a^2}}{k^2 - p^2} dk = -\frac{\sqrt{\pi}}{a} \frac{e^{-\tilde{p}^2}}{\tilde{p}} \int_0^{\tilde{p}} e^{t^2} dt.$$

В результате для I_2 получим:

$$I_2 = \frac{2\alpha a \tilde{p}}{3\sqrt{2}} e^{\tilde{p}^2} \left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\tilde{p}} e^{-t^2} dt \right] - \frac{4\alpha a \tilde{p}}{3\sqrt{2}} e^{\tilde{p}^2} \int_0^{\tilde{p}} e^{t^2} dt.$$

Окончательно для $\text{Re} D$ получим:

$$\text{Re} D = 1 + \frac{4\alpha a}{3\sqrt{2}\pi} \left(1 - \tilde{p} e^{\tilde{p}^2} \int_{\tilde{p}}^\infty e^{-t^2} dt - \tilde{p} e^{-\tilde{p}^2} \int_{\tilde{p}}^\infty e^{t^2} dt \right).$$

Этот результат воспроизводит величину, даваемую формулой (5.10)

Гл. 1. Для мнимой части $\text{Im} D$ по формуле Сохоцкого получим:

$$\text{Im} D = \frac{1}{3\pi} \int_0^\infty f_k^2 k^4 \omega_k \delta(\omega_k^2 - \omega_p^2) dk = \frac{1}{6\pi} f_p^2 p^3.$$

В результате для $|D(\omega_k^2)|$ получим:

$$|D|^2 = (\text{Re} D)^2 + (\text{Im} D)^2 = \frac{2}{9} \alpha^2 a^2 \left[e^{-2\tilde{p}^2} \tilde{p}^2 + \frac{8}{2\pi} \left(1 - \tilde{p} \int_{\tilde{p}}^\infty e^{-t^2} dt - \tilde{p} e^{-\tilde{p}^2} \int_{\tilde{p}}^\infty e^{t^2} dt \right)^2 \right].$$

Первый член в формуле (5.7) легко вычисляется и равен

$$\frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4 f_k^2}{(1+Q)} dk = \frac{3}{16} a^2.$$

При вычислении второго слагаемого в (5.7) выделим в нем интеграл I_p :

$$I_p = \int_0^\infty e^{-k^2/a^2} \frac{k^2 (\omega_k \omega_p + \omega_k (\omega_k + \omega_p) + 1)}{(\omega_k + \omega_p)^2} dk.$$

При $a \rightarrow \infty$ он равен:

$$I_p = a^3 \frac{\sqrt{\pi}}{4} \left(1 - \tilde{p}^3 e^{\tilde{p}^2} \int_{\tilde{p}}^\infty e^{-t^2} dt (2 + 4\tilde{p}^2) + 2\tilde{p}^4 \right) = \frac{a^3 \sqrt{\pi}}{4} (1 - \Omega(\tilde{p})),$$

где:

$$\Omega(\tilde{p}) = 2\tilde{p} \left\{ (1 + 2\tilde{p}^2) \tilde{p} e^{\tilde{p}^2} \int_{\tilde{p}}^{\infty} e^{-t^2} dt - \tilde{p}^2 \right\},$$

что соответствует выражению для $\Omega(y)$ в (5.12) Гл. 1.

В итоге, для второго члена в формуле (5.7) Гл. 1 получим:

$$\frac{1}{12\pi^4} \frac{4\pi a}{\sqrt{2}} \int_0^{\infty} I_p P^4 f_p^2 \frac{\omega_p}{(\omega_p^2 - 1) D(\omega_p^2)^2} dp.$$

При $a \rightarrow \infty$ это выражение примет вид:

$$\frac{\alpha^2 a^4}{3\pi\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (1 - \Omega(\tilde{p})) \frac{e^{-\tilde{p}^2}}{|D(\omega_{\tilde{p}}^2)|^2} d\tilde{p} = \frac{3}{16} a^2 q,$$

где $q = q(0)$ дается выражением (5.12) Гл. 1. Таким образом, окончательно для ΔE (5.7) Гл. 1 получим:

$$\Delta E = \frac{3}{16} a^2 (1 + q),$$

что соответствует первому члену в правой части (5.11) Гл. 1.

Д. Сжатые состояния

Как было впервые показано в работе [Тулуба 1961], чтобы получить энергию полярона во всём диапазоне изменения α , её расчёт после двух канонических преобразований Гамильтониана Фрёлиха (Гейзенберга и Ли, Лоу, Пайнса) нужно проводить не по вакуумным волновым функциям $|0\rangle$, а по $\Lambda_0|0\rangle$, которые имеют смысл сжатых состояний. Так как Λ_0 – унитарный оператор, то для энергии основного состояния, соответствующего гамильтониану \tilde{H} (3.2) Гл. 1, можно написать:

$$E = \langle 0 | \Lambda_0^+ \tilde{H} \Lambda_0 | 0 \rangle = \langle 0 | \Lambda_0^{-1} \tilde{H} \Lambda_0 | 0 \rangle.$$

Таким образом, для операторов, входящих в \tilde{H} , согласно (11.1) Гл. 1 получим:

$$\Lambda_0^{-1} a_k \Lambda_0 = \sum_{k'} M_{1kk'} \alpha_{k'} + \sum_{k'} M_{2kk'}^* \alpha_{k'}^*,$$

т.е. оператор Λ_0 – является оператором, порождающим преобразования Боголюбова.

Чтобы прояснить физический смысл оператора Λ_0 , рассмотрим одномерный одномодовый случай, например одномерный осциллятор, основное состояние которого описывается волновой функцией $\Psi(x)$. Сжатым называется состояние $\Psi(qx)$, где коэффициент q отличен от единицы. Введём оператор G_0 , осуществляющий преобразование функции $\Psi(x)$ к виду $\Psi(qx)$:

$$e^{i\lambda\hat{G}_0}\Psi(x) = \Psi(qx),$$

где λ – произвольная постоянная, которую называют параметром сжатия. Положим:

$$\hat{G}_0 = -i\frac{\partial}{\partial \ln x}.$$

Введём функцию $\tilde{\Psi}$, такую, что $\Psi(x) = \tilde{\Psi}(\ln x)$.

Тогда:

$$e^{i\lambda\hat{G}_0}\Psi(x) = e^{i\lambda\hat{G}_0}\tilde{\Psi}(\ln x) = \tilde{\Psi}(\ln x + \lambda) = \tilde{\Psi}(\ln xe^\lambda) = \Psi(xe^\lambda).$$

Полагая здесь $q = e^\lambda$, мы видим, что оператор \hat{G}_0 действительно осуществляет требуемое преобразование. Оператор $G_0 = -i\partial/\partial \ln x = -ix\partial/\partial x = x\hat{p}$ не является эрмитовым, соответственно, не унитарен. Это связано с тем, что при сжатии в $q = e^\lambda$ раз по x во столько же раз уменьшается норма квадрата волновой функции Ψ . По этой причине вместо \hat{G}_0 удобно использовать эрмитов оператор \hat{G} , связанный с \hat{G}_0 добавлением константы:

$$\hat{G} = -i\left(x\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2}\right) = \hat{x}\hat{p} - \frac{i}{2} = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) = -i(a^2 - a^{+2})/2,$$

где a^+ , a – операторы рождения и уничтожения квантов колебаний осциллятора, и экспонента от эрмитового оператора

$$D_\lambda = e^{i\lambda\hat{G}} = e^{i\lambda/2(a^2 - a^{+2})}, \quad D_\lambda\Psi(x) = e^{\lambda/2}\Psi(e^\lambda x)$$

автоматически является унитарной. Унитарный оператор D_λ называют оператором сжатия, который может быть тоже записан в форме, использованной в работе [Тулуба 1961]:

$$D = Ce^{a^\dagger A a^\dagger},$$

где C и A подлежат определению.

Чтобы сделать это, рассмотрим на примере осциллятора, каким образом можно реализовать сжатые состояния. Пусть имеется осциллятор, которому соответствует гамильтониан $H_1 = \hat{p}^2/2m_1 + 1/2m_1\omega_1^2 x^2$ с фиксированными параметрами до момента $t \leq 0^-$. В момент $t = 0$ они мгновенно изменяются на значения m_2 и ω_2 . Так как при этом изменении параметров начальная волновая функция не изменилась, то не изменились и соответствующие ей среднеквадратичные отклонения Δx и Δp :

$$\begin{aligned}\Delta x &= \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \Psi_0^2 dx} = \sqrt{\frac{m_2 \omega_2}{m_1 \omega_1}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_2 \omega_2}} = e^{-\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_2 \omega_2}}, \\ \Delta p &= \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \hat{p}^2 \Psi_0^2 dx} = \sqrt{\frac{m_1 \omega_1}{m_2 \omega_2}} \sqrt{\frac{\hbar m_2 \omega_2}{2}} = e^{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar m_2 \omega_2}{2}}, \\ \Psi_0(x) &= \left(\frac{m_1 \omega_1}{\pi \hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m_1 \omega_1}{2\hbar} x^2\right), \quad e^{\lambda} = \sqrt{\frac{m_1 \omega_1}{m_2 \omega_2}}.\end{aligned}$$

Здесь $\lambda = 1$ соответствует вакуумному значению среднеквадратичных отклонений квантовых флуктуаций. При $\lambda \neq 1$ дисперсия квантовых флуктуаций для одной из канонически сопряжённых переменных будет меньше вакуумного значения, а для другой больше, так что соотношение неопределённости Гейзенберга $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ остаётся неизменным.

Так как операторы, входящие в гамильтониан осциллятора, при изменении параметров не меняются, то:

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m_1 \omega_1}} (a_1 + a_1^\dagger) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_2 \omega_2}} (a_2 + a_2^\dagger), \\ \hat{p} &= -i \sqrt{\frac{m_1 \omega_1 \hbar}{2}} (a_1 - a_1^\dagger) = -i \sqrt{\frac{m_2 \omega_2 \hbar}{2}} (a_2 - a_2^\dagger).\end{aligned}$$

Это можно переписать с использованием определения λ в виде:

$$\begin{aligned}a_1 + a_1^\dagger &= e^{\lambda} (a_2 + a_2^\dagger), \\ a_1 - a_1^\dagger &= e^{-\lambda} (a_2 - a_2^\dagger).\end{aligned}$$

Выражая отсюда операторы a_1 и a_1^\dagger через a_2 и a_2^\dagger , получим:

$$a_1 = a_2 \operatorname{ch} \lambda + a_2^+ \operatorname{sh} \lambda,$$

$$a_1^+ = a_2 \operatorname{sh} \lambda + a_2^+ \operatorname{ch} \lambda.$$

Последние соотношения представляют собой преобразование Боголюбова, которое сохраняет коммутационные соотношения $[a_1, a_1^+] = [a_2, a_2^+] = 1$.

Для начального гамильтониана H_1 основным состоянием является вакуумная функция $|0\rangle_1$, которая по определению обращается в ноль при действии на неё оператора a_1 :

$$a_1 |0\rangle_1 = 0.$$

Это условие, выраженное через операторы a_2 , примет вид:

$$(a_2 \operatorname{ch} \lambda + a_2^+ \operatorname{sh} \lambda) |0\rangle_1 = 0.$$

Легко проверить, что решением этого уравнения будет функция:

$$|0\rangle_1 = N(\lambda) \exp\left(-\frac{1}{2} a_2^+ a_2^+ \operatorname{th} \lambda\right) |0\rangle_2.$$

В этом можно убедиться, переходя от операторов a^+, a к фоковскому представлению, в котором оператору a^+ сопоставляется c -число \bar{a} , а оператору a – производная $d/d\bar{a}$.

Это и есть искомый вид оператора сжатия в форме Тулуба. Можно показать, что нормировочная константа $N(\lambda)$ в этом случае равна: $N(\lambda) = 1/\sqrt{\operatorname{ch} \lambda}$.

Теория сжатых состояний нашла широкое применение в квантовой оптике. В простейшем одномодовом режиме (такие режимы реализуются в резонаторах) энергия электромагнитного поля описывается рассмотренным здесь случаем одномерного осциллятора, в котором роль координаты играет электрическое поле, а импульса – магнитное поле. Таким образом, использование сжатых состояний в квантовой оптике может подавлять флуктуации либо электрического, либо магнитного полей, что исключительно важно для прецезионных измерений, например, гравитационных волн.

Е. О «неполноте» трансляционно-инвариантной теории полярона

В работе [Klimin 2012] был сделан вывод о «неполноте» трансляционно-инвариантных континуальных теорий полярона Тулуба и Гросса [Тулуб 1961], [Porsch 1967]. Этот вывод в [Klimin 2012] сделан на основе работы [Lakhno p.1855 2012], в которой как раз воспроизводятся результаты теории Тулуба [Тулуб 1961]. Таким образом, в [Klimin 2012] ставятся под сомнение также результаты работы [Klimin 2012].

В работе [Klimin 2012] утверждается, что функционал полной энергии, полученный Тулубом, должен содержать некоторый добавочный член $\delta E_R^{(PR)}$, который возникает, если в рассматриваемую континуальную модель внести внешнее обрезание. Такое внешнее обрезание рассматривалось в работе [Lakhno p.1855 2012]. С этой целью в функционале полной энергии проводилось интегрирование по фоновым волновым векторам не в бесконечных пределах, а было ограничено некоторым конечным значением q_0 . В работе [Lakhno p.1855 2012] было отмечено, что в пределе $q_0 \rightarrow \infty$ величина $\delta E_R^{(PR)} \rightarrow 0$. В противоположность этому в [Klimin 2012] было приведено выражение для $\delta E_R^{(PR)}$, которое не зависит от q_0 и не обращается в ноль при $q_0 \rightarrow \infty$.

Покажем, что в действительности величина $\delta E_R^{(PR)}$ зависит от q_0 и при фиксированных остальных значениях параметров системы $\delta E_R^{(PR)} \rightarrow 0$ при $q_0 \rightarrow \infty$. Будем исходить из выражения для $\delta E_R^{(PR)}$ [Lakhno p.1855 2012], являющегося исходным также и в [Klimin 2012]:

$$\delta E_R^{(PR)}(q_0) = \frac{3\hbar}{2} (\Omega_{q_0} - \omega_{q_0}), \quad (E.1)$$

$$\Omega_{q_0} = \left\{ \omega_{q_0}^2 + \int_0^1 d\eta \int_0^{q_0} dq \frac{\hbar q^4 f(q) \omega_q}{3\pi^2 m} \frac{2\text{Re}F(\omega_q + i\delta) + |F(\omega_q + i\delta)|^2}{|1 + F(\omega_q + i\delta)|^2} \right\}^{1/2},$$

$$F(z) = \eta \frac{\hbar}{6\pi^2 m} \int_0^{q_0} dq q^4 f^2(q) \left(\frac{1}{\omega_q + z} + \frac{1}{\omega_q - z} \right),$$

$$f_q = -(V_q / \hbar \omega_0) \exp(-q^2 / 2a^2),$$

где $\omega_q = \omega_0 + \hbar q^2 / 2m$, ω_0 – частота оптического фонона, V_q – матричный элемент ЭФВ, a – вариационный параметр. В пределе $\delta \rightarrow 0$ из (E.1) получим:

$$\Omega_{q_0}^2 - \omega_{q_0}^2 = \int_0^{q_0} dq \frac{\hbar q^4 f(q)^4 \omega_q}{3\pi^2 m}. \quad (\text{E.2})$$

С использованием выражения для V_q : $V_q = (2\pi\sqrt{2})^{1/2} \alpha^{1/2} \sqrt{\hbar^4 \omega_0^2 / m} \cdot 1/q$, где α – константа электрон-фононной связи, из (E.1), (E.2) получим:

$$\delta E_R^{(PR)} = \frac{3\hbar}{2} \Omega_{q_0} \left(\sqrt{1 + \Delta / \omega_{q_0}^2} - 1 \right), \quad (\text{E.3})$$

$$\Delta = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi} \alpha \omega_0^2 \left(\frac{\hbar a^2}{m \omega_0} \right)^{3/2} N_1 (1 + \hbar a^2 N_2 / 2m \omega_0 N_1),$$

$$N_1 = \int_0^{q_0/a} dx x^2 \exp(-x^2), \quad N_2 = \int_0^{q_0/a} dx x^4 \exp(-x^2).$$

Рассмотрим различные предельные случаи выражения (E.3). В пределе малых значений параметра обрезания: $q_0 \ll a$ – из (E.3) получим:

$$\Delta = \frac{2\sqrt{2}}{9\pi} \alpha \omega_0^2 \left(\frac{\hbar q_0^2}{m \omega_0} \right)^{3/2} \left[1 + \frac{3}{10} \left(\frac{\hbar q_0^2}{m \omega_0} \right) \right]. \quad (\text{E.4})$$

Из (E.3), (E.4) следует, что в этом пределе $\delta E_R^{(PR)}$ не зависит от параметра a . При $q_0 \ll a$ из (E.3) следует:

$$\delta E_R^{(PR)} = \frac{3\hbar}{2} \omega_{q_0} \left(\sqrt{1 + q_{0c}^4 / q_0^4} - 1 \right), \quad (\text{E.5})$$

Значение q_{0c} имеет смысл величины, при которой подынтегральное выражение в функционале Тулуба имеет максимум [Тулуб 1961], [Лажно 2010]. Из (E.5) следует, что в пределе $q_0 \ll q_{0c}$:

$$\delta E_R^{(PR)} = \frac{3\hbar}{4} \omega_{q_0} q_{0c}^4 / q_0^4, \quad (\text{E.6})$$

то есть при больших q_0 величина $\delta E_R^{(PR)} \approx q_0^{-2}$. По этой причине авторы [Klimin 2012] решили, что теория Порша и Роселера [Porsch 1967]

переходит в теорию Тулуба [Тулуб 1961] с $\delta E_R^{(PR)} = 0$. Легко, однако, видеть, что это не так. Действительно, в функционале полной энергии Тулуба, полученной Поршем и Роселером [Porsch 1967], верхний предел интегрирования должен удовлетворять условию $q_0 > q_{0c}$, которое автоматически приводит к зависимости энергии полярона от константы связи вида $E \propto \alpha^{4/3}$ [Lakhno SSC p.1855 2012]. Таким образом, теория обрезания Порша и Роселера ни в каком случае не переходит в теорию Тулуба. Использование такой несогласованной теории привело авторов работы [Klimin 2012] к выводу о «неполноте» теории Тулуба [Тулуб 1961].

Подводя итог, сформулируем окончательные выводы. В работе показано, что вывод Порша и Роселера об обращении величины $\delta E_R^{(PR)}$ в ноль при $q_0 \rightarrow \infty$ является верным. Этот результат, однако, не приводит к теории Тулуба. Таким образом, утверждение о неполноте функционала полной энергии Тулуба, сделанное Климиным и Девризом, неверно. Расчёты [Лакно 2010], [Lakhno p.621 2012], [Каширина 2012], выполненные на основе работы [Тулуб 1961], не вызывают сомнений.

Ж. Переход от дискретного к континуальному гамильтониану Холстейна

Гамильтониан Холстейна для электрона в однородной молекулярной цепочке может быть записан в виде:

$$H = -v \sum_n (c_n^+ c_{n+1} + c_{n+1}^+ c_n) + g \sum_n c_n^+ c_n (b_n^+ + b_n) + \sum_n \hbar \omega_0 \left(b_n^+ b_n + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{Ж.1})$$

где v – матричный элемент электронного перехода между ближайшими сайтами, c_n^+ , c_n – операторы рождения и уничтожения электрона на n -ом сайте, и b_n^+ , b_n – операторы рождения и уничтожения квантов колебания на n – ом сайте.

В случае слабой связи ($g/\hbar\omega_0 \ll 1$) решениями (Ж.1) являются блоховские волны, и основное состояние для энергии во втором порядке теории возмущений примет вид [Klamt 1988]:

$$E_k = -2v - \frac{g^2/\hbar\omega_0}{\sqrt{1+4v/\hbar\omega_0}}. \quad (\text{Ж.2})$$

Для $g/\hbar\omega_0 \gg 1$ Холстейн рассмотрел два предельных случая: полярон малого радиуса ($v \ll \hbar\omega_0$) и полярон большого радиуса ($v \gg \hbar\omega_0$)³.

Решениями в случае полярона малого радиуса являются трансляционно-инвариантные состояния:

$$|\Psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikn} c_n^+ e^{g/\omega_0(b_n^+ - b_n)} |0\rangle, \quad (\text{Ж.3})$$

которым соответствует энергетический спектр:

$$E_k = -2ve^{-g^2/\hbar^2\omega_0^2} \cos ka_0 - g^2/\hbar\omega_0. \quad (\text{Ж.4})$$

Для перехода к пределу полярона большого радиуса будем в (Ж.1) $|n\rangle\langle 0|$, $|0\rangle\langle n|$ использовать c_n^+ , c_n и операторы рождения и уничтожения фононов с импульсом k : a_k^+ , a_k вместо b_n^+ , b_n .

Таким образом, будем использовать соотношения:

$$\begin{aligned} c_n^+ &= |n\rangle\langle 0|, \quad c_n = |0\rangle\langle n|, \\ b_n^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k^+ e^{-ikna_0}, \quad b_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k e^{ikna_0}. \end{aligned} \quad (\text{Ж.5})$$

В результате (Ж.1) примет вид:

$$H = -v \sum_n (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{n,k} (a_k e^{ikna_0} + a_k^+ e^{-ikna_0}) |n\rangle\langle n| + \sum_k \hbar\omega_0 a_k^+ a_k. \quad (\text{Ж.6})$$

Выберем волновую функцию $|\Psi\rangle$ в виде:

$$|\Psi\rangle = \sum_n \Psi_n |n\rangle. \quad (\text{Ж.7})$$

В результате для усреднённого гамильтониана получим $\bar{H} = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$

$$\bar{H} = -v \sum_n (\Psi_n^* \Psi_{n+1} + \Psi_n \Psi_{n+1}^*) + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{n,k} |\Psi_n|^2 (a_k e^{ikna_0} + a_k^+ e^{-ikna_0}) + \sum_k \hbar\omega_0 a_k^+ a_k. \quad (\text{Ж.8})$$

³ Впервые задача о поляроне малого радиуса при $T=0$ была решена Тябликовым [Тябликов 1952].

В случае полярона большого радиуса:

$$\Psi_{n\pm 1} \approx \Psi_n \pm \frac{\partial \Psi_n}{\partial n a_0} a_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi_n}{\partial (n a_0)^2} a_0^2. \quad (\text{Ж.9})$$

Вводя непрерывную переменную $x = n a_0$ и переходя в (Ж.8) от суммирования к интегрированию получим:

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \int \Psi^* H \Psi dx, \\ H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_k (a_k e^{ikx} + a_k^+ e^{-ikx}) + \sum_k \hbar \omega_0 a_k^+ a_k, \end{aligned} \quad (\text{Ж.10})$$

где $m = \hbar^2 / 2v a_0^2$, т.е. Гамильтониан (2.1), Гл. 2.

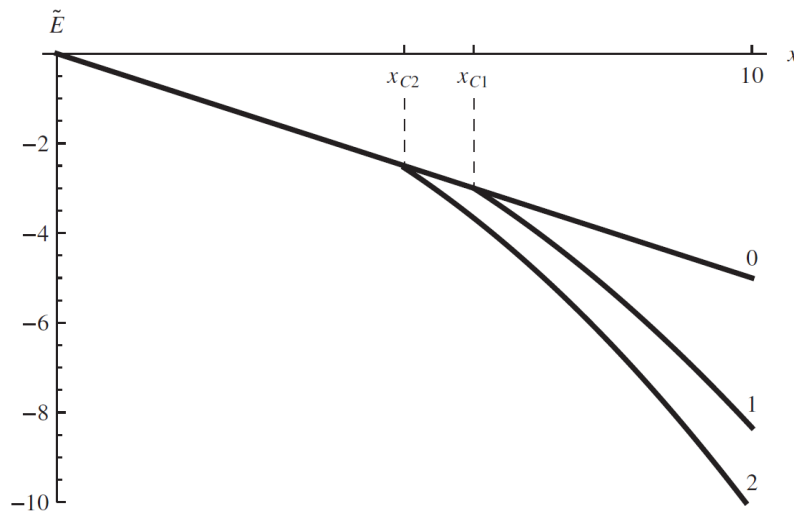


Рис. Ж.1. Зависимость энергии $\tilde{E} = E/\hbar\omega_0$ от константы связи g_c : **0)** слабая связь в континуальном пределе ($v/\hbar\omega_0 \gg 1$): $\tilde{E}_{weak} = -0.5x$, $x = \sqrt{\hbar\omega_0/v} g_c^2$, $g_c = g/\hbar\omega_0$, (4.5), Гл. 2; **1)** сильная связь: $\tilde{E}_{strong} = -0.08333x^2$, соответствующая уравнению (2.6) Гл. 2; **2)** сильная связь: $\tilde{E}_{strong} = -0.10185x^2$, соответствующая уравнению (5.10) Гл. 2. Значения $x_{C1} \approx 6$ и $x_{C2} \approx 5$ соответствуют $g_{C1} \approx 2.45^4 \sqrt{v/\hbar\omega_0}$ и $g_2 \approx 2.2^4 \sqrt{v/\hbar\omega_0}$ (5.11) Гл. 2.

В то время как для дискретного случая точное решение для гамильтониана (Ж.1) в случаи сильной связи известно и определяется уравнением (Ж.2) и (Ж.3), в континуальном пределе точное решение гамильтониана (Ж.9) для $g/\hbar\omega_0 \gg 1$ неизвестно.

Найденное здесь значение энергии (5.9) Гл. 2 для $g/\hbar\omega_0 \gg 1$ в настоящее время является самым низким (рис. Ж.1).

Интересно сравнить асимптотические выражения (2.6) Гл. 2, (5.10) Гл. 2 с какой-нибудь реальной системой. Для энергии Холстейна (2.6) Гл. 2 такое сравнение было выполнено с помощью вычислительных экспериментов с классической молекулярной цепочкой типа ДНК [Lakhno, Korshunova, 2010]. Эти результаты находятся в хорошем соответствии. Сравнение с энергией (5.10) Гл. 2 могут быть проведены только для квантовой молекулярной цепочки, с использованием, например, квантового метода Монте–Карло.

3. Об экранированном взаимодействии ТИ-биполяронов

В Гл. 3, раздел 4 было показано, что вследствие экранировки вклад взаимодействия между биполяронами в электронном газе мал и их спектр мало отличается от случая отсутствия такого взаимодействия, при этом было рассмотрено приближённое выражение для V_k . Представляет интерес показать, что использование точного выражения для V_k не меняет сделанных выводов. С этой целью рассмотрим точное выражение для V_k в формулах спектра (4.9), (4.10):

$$V_k = \frac{4\pi e^2}{k^2 \varepsilon(k)},$$

где $\varepsilon(k)$ – диэлектрическая проницаемость рассматриваемой системы, которая определяется общим соотношением:

$$\varepsilon(k) = \frac{\rho_e(k)}{\rho_e(k) + \rho_i(k)}.$$

$\rho_e(k)$ – внешний источник заряда, $\rho_i(k)$ – внутренний заряд, индуцируемый этим источником. Соответственно:

$$\frac{1}{\varepsilon(k)} = 1 + \frac{\rho_i}{\rho_e}, \quad \rho_i = \sum_n^N \rho_{i,n},$$

где $\rho_{i,n}$ – заряд, индуцируемый n -м типом поляризации. Учитывая, что неравенство:

$$1 + \frac{\rho_i}{\rho_e} = 1 + \frac{\rho_{i_1}}{\rho_e} + \dots + \frac{\rho_{i_N}}{\rho_e} < \left(1 + \frac{\rho_{i_1}}{\rho_e}\right) \dots \left(1 + \frac{\rho_{i_N}}{\rho_e}\right)$$

(неравенство Бернулли) выполняется, если все ρ_n имеют одинаковый знак и $(\rho_{i_n} / \rho_e) > -1$ (это соответствует тому, что индуцированный заряд ρ_i противоположен по знаку ρ_e и по абсолютной величине меньше внешнего источника), для диэлектрической проницаемости получим:

$$\frac{1}{\varepsilon(k)} < \frac{1}{\varepsilon_1(k)} \dots \frac{1}{\varepsilon_N(k)},$$

где $\varepsilon_n(k)$ – диэлектрические проницаемости, соответствующие различным типам поляризации. По этой причине:

$$V_k = \frac{4\pi e^2}{k^2 \varepsilon(k)} < \frac{4\pi e^2}{k^2} \prod_n \frac{1}{\varepsilon_n(k)}.$$

Таким образом, даже при оценке $V(k)$ сверху вклад этого члена в спектр, согласно результатам раздела 4, Гл. 3, оказывается мал.

И. Аномалия Кона

При описании аномалии Кона обычно исходят из гамильтониана Фрёлиха вида [Grimwall 1981]

$$H = \sum_k \varepsilon(\mathbf{k}) c_k^+ c_k + \sum_q \hbar \tilde{\omega}(\mathbf{q}) b_q^+ b_q + \sum_{k,q} g(\mathbf{q}) c_{k+\mathbf{q}}^+ c_k (b_{-\mathbf{q}}^+ + b_{\mathbf{q}}), \quad (\text{И.1})$$

где первый член соответствует свободному электронному газу; c_k^+ , c_k – операторы рождения и уничтожения электрона с энергией $\varepsilon(\mathbf{k})$. Второй член соответствует гамильтониану решетки; b_q^+ , b_q – операторы рождения и уничтожения колебаний решетки с энергией $\tilde{\omega}(\mathbf{q})$. Третий член описывает взаимодействие электронов с решеткой; $g(\mathbf{q})$ – матричный элемент взаимодействия.

Перенормировка фононных частот, соответствующая (И.1), согласно [Grimwall 1981], определяется выражением:

$$\omega^2(\mathbf{q}) = \tilde{\omega}^2(\mathbf{q}) + 2\tilde{\omega}(\mathbf{q}) |g(\mathbf{q})|^2 \text{Re}[\chi(\mathbf{q})], \quad (\text{И.2})$$

где $\omega(\mathbf{q})$ – фононы, перенормированные взаимодействием с электронным газом, поляризуемость которого определяется $\chi(\mathbf{q})$.

Аномалия Кона описывает обращение перенормированных фононных мод $\omega(\mathbf{q})$ в ноль при $\mathbf{q} = \mathbf{P}_{CDW}$.

В ТИ-биполярной теории СП [Lakhno 2018, Lakhno Phys. C 2019, Lakhno Cond. Matt 2019, Lakhno 2020] полагается, что биполяроны погружены в электронный газ. Свойства таких биполяронов описываются также гамильтонианом Фрëлиха вида (И.1), но с полем уже перенормированных фононов с энергиями $\omega(\mathbf{P}, q)$ и, соответственно, матричным элементом взаимодействия $V(\mathbf{q})$ вместо $g(\mathbf{q})$.

Отметим, что спектральное уравнение (6.1) Гл. 6 от вида $V(\mathbf{q})$ не зависит.

Экспериментальным доказательством наличия перенормированных фононов с нулевой энергией в слоистых купратных ВТСП служит отсутствие у них щели в нодальном направлении, которая по определению в ТИ-биполярной теории СП является фононной частотой.

Предметный указатель

| | |
|----------------------------------|----------------------------------|
| Автолокализованные состояния | 40 |
| Адиабатическое приближение | 31 |
| Анзац | : |
| - Пекара | 27, 28 |
| - Тулуба | 11, 53, 55 |
| Аномалия $1/8$ | 166, 167 |
| Боголюбова | |
| -преобразование | 6, 53, 222 |
| -спектр | 177 |
| Бернулли неравенство | 232 |
| Бозонного вакуума нестабильность | 21 |
| Вигнеровский кристалл | 121 |
| Вириала теорема | 49, 87 |
| Волна: | |
| -зарядовой плотности | 12, 194, 206, 212, 213, 214, 216 |
| -парной плотности | 12, 194, 206, 212, 216 |
| -спиновой плотности | 212 |
| -Фрёлиха | 211 |
| Вычитания метод | 184 |
| Гинзбурга-Ландау теория | 4, 140, 143, 207 |
| Голдстоуновский бозон | 83, 90 |
| Грина функция | 173, 218 |
| Депиннинг | 212 |
| Джозефсоновский переход | 168 |
| Динамический структурный фактор | 180 |
| ДНК | 100, 104, 105 |
| Изотопический эффект | 4, 184 |
| Индуцированный заряд | 40, 41, 44, 61 |

| | |
|--------------------------------|-------------------------|
| Интеграл по траекториям | 15, 65 |
| Каноническое преобразование | 33, 43, 107 |
| Кинк | 169, 170 |
| Коллективные координаты | 3, 30, 65 |
| Кона аномалия | 12, 206, 209, 212 |
| Корреляционная длина | 7, 50, 98 |
| Критический ток | 200, 201 |
| Кроссовер | 8 |
| Купера эффект | 9, 42, 43 |
| Ламберта функция | 147 |
| Ландау критерий сверхтекучести | 135, 197 |
| Ли-Лоу-Пайнса преобразование | 32, 43, 55, 56, 84, 112 |
| Монте-Карло метод | 15, 66 |
| Найтовский сдвиг | 165 |
| Нестинг | 208 |
| Оператор: | |
| -Гейзенберга | 31, 43, 111 |
| -сдвига | 33 |
| -сжатия | 4, 6, 21, 54, 223 |
| Пайерлса неустойчивость | 208 |
| Пиннинг | 212 |
| Плазменная частота | 60, 120, 155 |
| Планковское время | 155 |
| Плотность состояний | 45, 108 |
| Плохой металл | 215 |
| Полярон малого радиуса (ПМР) | 10 |
| Приложения: | |
| А | 33, 218 |
| Б | 34, 218 |
| В | 37, 219 |

| | |
|---------------------------|-------------------|
| Г | 38, 220 |
| Д | 54, 222 |
| Е | 60, 226 |
| Ж | 81, 228 |
| З | 121, 231 |
| И | 207, 232 |
| Ротон | 22, 195 |
| Рутгерса формула | 140, 142 |
| Секулярное уравнение | 114 |
| Силсби правило | 201 |
| Страйпы | 152, 193 |
| Флуксоид | 202 |
| Фока представление | 54 |
| Хартри уравнение | 16 |
| Хиггса механизм | 90 |
| Холстейна-Хаббарда модель | 98 |
| Экситон Ванье-Мотта | 70 |
| Элиашберга теория | 8, 9, 20, 21, 185 |
| F -центр | 62, 63, 69, 74 |
| F' -центр | 64 |

Литература

1. Агранович В.М. Теория экситонов, М.: Наука, (1968), 384 с.
2. Александров Л., Загребнов В.А., Козлов Ж.А., Парфёнов В.А., Приезжев В.Б. Высокоэнергетическое рассеяние нейтронов и бозе-конденсат в He II // ЖЭТФ, 68, 1825-1833, (1975);
[Aleksandrov L.](#), [Zagrebnoy V.A.](#), [Kozlov Zh.A.](#), [Parfenov V.A.](#), [Priezzhev V.B.](#) High energy neutron scattering and the Bose condensate in He II // Zh. Eksp. Teor. Fiz., 41, N5, 915
3. Александров А.С., Кребс А.Б. Поляроны в высокотемпературных сверхпроводниках // УФН, 162, 1, (1992) DOI:
[10.3367/UFNr.0162.199205a.0001](https://doi.org/10.3367/UFNr.0162.199205a.0001)
4. Балабаев Н.К., Лахно В.Д. Солитонные решения в теории полярона // ТМФ, 45, 139-141, (1980) DOI:
<https://doi.org/10.1007/BF01047152>
5. Бете Г. Квантовая механика (М.: Мир, 1965)
6. Боголюбов Н.Н. К теории сверхтекучести // Изв. АН СССР, Сер. Физ., 11, 77, (1947); On the theory of superfluidity // J. Phys. USSR 1947 v.11 p.23
7. Боголюбов Н.Н. Об одной новой форме адиабатической теории возмущений в задаче о взаимодействии частицы с квантовым полем // Укр. мат. журн., 2 (2), 3, (1950)
8. Боголюбов Н.Н. О новом методе в теории сверхпроводимости // ЖЭТФ, 34, вып. 1, 58, (1958)
9. Бор Н. Избранные научные труды Т.2 (М.: Наука, 1971)
10. Буймистров В.М., Пекар С.И. Квантовые состояния частиц, взаимодействующих с гармонически колеблющимся континуумом при произвольной силе связи // ЖЭТФ, 33, 1271, (1957)

11. Вайскопф В. Образование куперовских пар и природа сверхпроводящих токов // УФН, 140, 117-135, 1983, DOI: [10.3367/UFNr.0140.198305d.0117](https://doi.org/10.3367/UFNr.0140.198305d.0117)
12. Винецкий В.Л., Пашицкий Э.А. Сверхтекучесть заряженного бозе-газа и биполярный механизм сверхпроводимости // УФЖ, 20, 338 (1975).
13. Винецкий В.Л., Мередов О., Янчук В.А. Квантовая химия биполярона в изотропной континуальной среде // Теор. и Эксперим. Химия, 25, 641, (1989)
14. Винецкий В.Л., Каширина Н.И., Пашицкий Э.А. Биполяронные состояния в ионных кристаллах и проблема высокотемпературной сверхпроводимости // УФЖ 37, 77, (1992)
15. Гинзбург В.Л., Ландау Л.Д. К теории сверхпроводимости // ЖЭТФ, 20, 1064, (1950)
16. [Гинзбург](https://doi.org/10.3367/UFNr.0095.196805g.0091) В.Л. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости // УФН, 95, 91-110, (1968), DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.0095.196805g.0091>
17. Гинзбург В.Л. Сверхпроводимость: позавчера, вчера, сегодня, завтра // УФН, 170, 619, (2000) DOI: [10.3367/UFNr.0170.200006b.0619](https://doi.org/10.3367/UFNr.0170.200006b.0619)
18. Горьков А.П. [Микроскопический вывод уравнений Гинзбурга-Ландау в теории сверхпроводимости](#) // ЖЭТФ, 36, 1918, (1959)
19. Горьков Л.П., Копнин Н.Б. Высокотемпературные сверхпроводники с точки зрения эксперимента // УФН, 156, 117, (1988), DOI: [10.3367/UFNr.0156.198809d.0117](https://doi.org/10.3367/UFNr.0156.198809d.0117)
20. Гриб А.А. К вопросу об интерпретации квантовой физики // УФН, 183, 1337, (2013) DOI: [10.3367/UFNr.0183.201312d.1337](https://doi.org/10.3367/UFNr.0183.201312d.1337)
21. Давыдов А.С. Теория молекулярных экситонов, М.: Наука, (1968), 296 с.

22. Дыкман И.М., Пекар С.И. Экситоны в ионных кристаллах // ДАН СССР, т.83, с.852, (1952); Dykman I.M., Peкар S.I. Excitonic ionic crystals // Dokl. Akad. Nauk. SSSR, 83, 825, (1952)
23. Дыкман И.М., Пекар С.И. Экситоны в ионных кристаллах // Труды Института Физики АН УССР, (1953), вып.4
24. Дыкман И.М., Пекар С.И. Экситоны в ионных кристаллах / С.И. Пекар, Избранные труды, Изд-во АН УССР, Ин-т полупроводников, Киев: Наукова думка (1988), 512 с.
25. Изюмов Ю.А. Сильно коррелированные электроны: t-J модель // УФН, 167, 465-497, (1997) DOI: [10.3367/UFNr.0167.199705a.0465](https://doi.org/10.3367/UFNr.0167.199705a.0465)
26. Каширина Н.И., Лахно В.Д. Биполярон большого радиуса и взаимодействие поляронов // УФН, 180, 5, 449-473, (2010) DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.0180.201005a.0449>; Kashirina N.I., Lakhno V.D. Large-radius bipolaron and the polaron–polaron interaction // Phys Usp, 53, 431, (2010) DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.0180.201005a.0449>
27. Каширина Н.И., Лахно В.Д., Тулуб А.В. Теорема вириала и проблема основного состояния в теории полярона // ЖЭТФ, 141, 994, (2012); Kashirina N.I., Lakhno V.D., Tulub A.V. The virial theorem and the ground state problem in polaron theory // JETP, 114, 867, (2012) DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063776112030065>
28. Каширина Н.И., Лахно В.Д. Математическое моделирование автолокализованных состояний в конденсированных средах (М.: Физматлит, 2013); Kashirina N.I., Lakhno V.D. Mathematical modeling of autolocalized states in condensed media. (Fizmatlit, Moscow, 2013)
29. Каширина Н.И., Лахно В.Д. Континуальная модель одномерного биполярона Холстейна в ДНК // Мат. биол. и биоинф., 9, 430, (2014) DOI : <https://doi.org/10.17537/2014.9.430> ; Kashirina N.I.,

- Lakhno V.D. Continuum model of the one-dimensional Holstein bipolaron in DNA // Math Biol & Bioinform, 9, 430, (2014)
30. [Каширина Н.И.](#), [Лахно В.Д.](#) Биполярон в анизотропных кристаллах (произвольная связь) // Мат. биол. и биоинф., 10, 283, (2015) DOI : <https://doi.org/10.17537/2015.10.283>; Kashirina N.I., Lakhno V.D. Bipolaron in anisotropic crystals (arbitrary coupling) // Math Biol & Bioinform, 10, 283, (2015)
31. Кашурников В.А., Красавин А.В. Численные методы квантовой статистики (М.: Физматлит, 2010)
32. Келдыш Л.В., Копаев Ю.В. Возможная неустойчивость полуметаллического состояния относительно кулоновского взаимодействия // ФТТ, 6, 2791-2803, (1964); Keldysh L.V., Kopayev Yu.V. Possible instability of semimetallic State Toward Coulomb Interaction // Fiz. Tv. Tela, 6, 279, (1964)
33. Келдыш Л.В., Козлов А.Н. [Коллективные свойства экситонов в полупроводниках](#) // ЖЭТФ, 54, 978, (1968); Keldysh L.V., Kozlov A.N. Collective excitations in semiconductors // JETP, 27, N3, 521, (1967).
34. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел (М.: Наука, 1967)
35. Ландау Л.Д. Теория сверхтекучести гелия II // ЖЭТФ, 11, 592, (1941); The Theory of Superfluidity of Helium II // J. Phys. USSR., 5, 71, (1941)
36. Ландау Л.Д. К теории сверхтекучести гелия II // J. Phys. USSR, 11, 91, (1947)
37. Ландау Л.Д., Пекар С.И. Эффективная масса полярона // ЖЭТФ, 18, 419, (1948)
38. Ландау Л.Д., Абрикосов А.А., Халатников И.М. Асимптотическое выражение для гриновской функции фотона в квантовой электродинамике // ДАН СССР, 95, 1177, (1954)

39. Лахно В.Д., Нагаев Э.Л. Феррон-поляронные состояния носителей тока в антиферромагнитных полупроводниках // Физика твердого тела, 18, 3429-3432, (1976)
40. Лахно В.Д., Нагаев Э.Л. Магнитострикционные ферроны // Физика твердого тела, 20, 82-86, (1978)
41. Лахно В.Д., Балабаев Н.К. Самосогласованные решения в континуальной модели F-центра и проблема релаксированного возбужденного состояния // Оптика и спектроскопия, 55, 308-312, (1983)
42. Лахно В.Д. К проблеме основного состояния электрона проводимости в антиферромагнетик, помещённом в сильное магнитное поле // ФТТ, 26, 100-105, (1984)
43. Лахно В.Д., Чуев Г.Н. Структура полярона большого радиуса в пределе сильной связи // УФН, 165, 285, (1995) DOI: [10.3367/UFNr.0165.199503c.0285](https://doi.org/10.3367/UFNr.0165.199503c.0285)
44. Лахно В.Д. Трансляционная инвариантность и проблема биполярона // УФН, 168, 465-469, (1998) DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.0168.199804d.0465>
45. Лахно В.Д. Энергия и критическое значение параметра ионной связи трёхмерного биполярона большого радиуса // ЖЭТФ, 137, 926, (2010); Lakhno V.D. Energy and critical ionic-bond parameter of a 3D-large radius bipolaron // JETP, 110, 811, (2010) DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063776110050122>
46. Лахно В.Д. Трансляционно-инвариантная теория полярона (биполярона) и проблема квантования в окрестности классического решения // ЖЭТФ, 143, 1033, (2013) DOI: [10.7868/S0044451013060025](https://doi.org/10.7868/S0044451013060025) ; Lakhno V.D. Translation invariant theory of polaron (bipolaron) and the problem of quantizing near the classical solution // JETP, 116, 892, (2013) DOI : <https://doi.org/10.1134/S1063776113060083>

47. Лахно В.Д. Анзац Пекара и проблема сильной связи в теории полярона // УФН, 185, 317-331, (2015) DOI: [10.3367/UFNr.0185.201503d.0317](https://doi.org/10.3367/UFNr.0185.201503d.0317); Lakhno V.D. Pekar's ansatz and the strong coupling problem in polaron theory // Phys. Usp., 58, 295, (2015) DOI : <https://doi.org/10.3367/UFNe.0185.201503d.0317>
48. Лахно В.Д. Трансляционно-инвариантные биполярны и волны зарядовой плотности в высокотемпературных сверхпроводниках // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2020. N57. 13 с., DOI: <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-57>, DOI: <https://doi.org/10.20948/prepr-2020-57>
49. Левинсон И.Б., Рашба Э.И. Пороговые явления и связанные состояния в поляронной проблеме // УФН, 111, 683-718, (1973), DOI: [10.3367/UFNr.0111.197312d.0683](https://doi.org/10.3367/UFNr.0111.197312d.0683)
50. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика, часть 2, Теория конденсированного состояния (М.: Наука, Физматлит, 1978)
51. Локтев В.М. Механизмы высокотемпературной сверхпроводимости медных оксидов // Физика низких температур, 22, 3, (1996)
52. Мельников В.И., Воловик Г.Е. О поляроне в пределе сильной связи // ЖЭТФ, 65 (4), 1637-1646, (1973); Melnikov V.I., Volovik G.E. Polarons in the strong coupling limit // [Sov. Phys. JETP, 38\(4\), 819-823, \(1974\)](https://doi.org/10.1070/JETP.1974.38.04.819)
53. Мельников В.И. Связанные состояния электрона и фонона в одномерной системе // [ЖЭТФ, 72 \(6\), 2345-2349, \(1977\)](https://doi.org/10.1070/JETP.1977.72.06.2345); Mel'nikov V.I. Electron-phonon bound states in a one-dimensional system // [Sov. Phys. JETP 45\(6\), 1233-1235, \(1977\)](https://doi.org/10.1070/JETP.1977.45.06.1233)
54. Мисочко О.В. Электронное комбинационное рассеяние света в высокотемпературных сверхпроводниках // УФН, 173, 385, (2003), DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.0173.200304b.0385>

55. Мисочко О.В. Неклассические состояния возбуждений кристаллической решётки: сжатые и запутанные фононы // УФН, 183, 917-933, (2013) DOI: [10.3367/UFNr.0183.201309b.0917](https://doi.org/10.3367/UFNr.0183.201309b.0917)
56. Мищенко А.С. Диаграммный метод Монте-Карло в применении к проблемам поляронов // УФН, 175, 925, (2005) DOI: [10.3367/UFNr.0175.200509b.0925](https://doi.org/10.3367/UFNr.0175.200509b.0925)
57. Маделунг О. Теория твердого тела. М.: Наука, 1980, 416 с.; Madelung O. Festkörpertheorie I, II: Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, (1972)
58. Нагаев Э.Л. Физика магнитных полупроводников, (М: Наука, 1979)
59. Новожилов Ю.В., Тулуб А.В. Метод функционалов в квантовой теории поля // УФН, 61, 53, (1957) DOI: [10.3367/UFNr.0061.195701g.0053](https://doi.org/10.3367/UFNr.0061.195701g.0053)
60. Нокс Р. Теория экситонов, М.: Наука, (1966), 220 с.; Кнох S., Theory of excitons, New York: Academic, (1963)
61. Окомельков А.В. Спектр нормальных волн в двумерной решетке нейтральных атомов // ФТТ, 44, вып. 10, 1888-1894, (2002)
62. Пашицкий Э.А., Винецкий В.Л. Плазмонный и биполяронный механизмы высокотемпературной сверхпроводимости // Письма в ЖЭТФ, Приложения, 46, 124 (1987)
63. Пекар С.И. Локальные квантовые состояния электронов в идеальном ионном кристалле // ЖЭТФ, 16, 341, (1946)
64. Пекар С.И. Автолокализация электрона в диэлектрической инерционно-поляризующейся среде // ЖЭТФ, 16, 335, (1946)
65. Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов (М.-Л.: ГИТТЛ, 1951); Translations: Pekar S.I. Untersuchungen über die Elektronentheorie der Kristalle (Berlin, Akad.-Verl., 1954); Pekar S.I. Research in Electron Theory of Grystals (USA, Department of

- Commerce, Washington, 25, D.C.: United States Atomic Energy Commission, Division of Technical Information, 1963)
66. Пекар С.И., Рашба Э.И., Шека В.И. Свободный и автолокализованный экситон Ванье-Мотта в ионных кристаллах и энергия активации их теплового перехода друг в друга // ЖЭТФ, 76, 251-256, (1979)
 67. Раждараман Р. Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля (М.: Мир, 1985)
 68. Рашба Э.И., Стредж М.Д. (ред.) Экситоны, М., (1985), 534 с.; Rashba E.I., Sturge M.D. (eds.): Excitons, North Holland, Amsterdam, (1982), 496 p.
 69. Садовский М.В. Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках // УФН, 171, 539, (2001) DOI: [10.3367/UFNr.0171.200105c.0539](https://doi.org/10.3367/UFNr.0171.200105c.0539)
 70. Садовский М.В. Иллюзия планковской релаксации в металлах // УФН, 191, 182-198, (2021) DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2020.08.038821>
 71. Смандырев М.А. Диаграммы в модели полярона // ТМФ, 68, 29, (1986) DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01017794>
 72. Супрун С.Г., Мойжес Б.Я. О роли электронной корреляции в образовании биполярона Пекара // Физика твердого тела. Т. 24. №5. -С. 1571-1573, (1982)
 73. Тайш М.К., Салэ Б.Э.А. Сжатые состояния света // УФН, 161, 101, (1991) DOI: [10.3367/UFNr.0161.199104d.0101](https://doi.org/10.3367/UFNr.0161.199104d.0101)
 74. Тинкхам М. Введение в сверхпроводимость, М.: Атомиздат, (1980), 310 с.
 75. Тулуб А.В. Учет отдачи в нерелятивистской квантовой теории поля // Вестник Ленинградского университета, №22, серия физики и химии, вып.4, 104-118, (1960)

76. Тулуб А.В. Медленные электроны в полярных кристаллах // ЖЭТФ, 41, 1828, (1961); Tulub A.V. Slow electrons in polar crystals // Sov Phys JETP, 14, 1301, (1962)
77. Тулуб А.В. Комментарий к теории полярон-фононного рассеяния // ТМФ, 185(1), 199-212, (2015) DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8946>
78. Тябликов С.В. Адиабатическая теория возмущений в задаче о взаимодействии частиц с квантованным полем // ЖЭТФ, 21, 377, (1951)
79. Тябликов С.В. Об энергетическом спектре электрона в полярном кристалле // ЖЭТФ, 23, 381, (1952)
80. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма (М.: Наука, 1975)
81. Фейнман Р. Статистическая механика (М.: Мир, 1975)
82. Фирсов Ю.А. Поляроны (М.: Наука, 1975)
83. Хакен Х. Квантовополевая теория твердого тела, (М.: Наука, 1980, 341 с.)
84. Швебер С. Введение в релятивистскую квантовую теорию поля. (М.: Иностран. литература, 1963, 842 с.)
85. Шикин В.Б., Монарха Ю. П. Свободные электроны на поверхности жидкого гелия в присутствии внешних полей // ЖЭТФ, 65, 751, (1973); Shikin V.B., Monarkha Yu.P. Free electrons on the surface of liquid helium in the presence of external fields // JETP, 38, 373, (1973)
86. Шляйх В.П. Квантовая оптика в фазовом пространстве, (М.: Физматлит, 760 с., 2005); W.P. Schleich, Quantum optics in Phase Space // Wiley-VCH, Berlin, (2001)
87. Шмидт В.В. Введение в физику сверхпроводников, М.: МЦНМО, (2000), 397 с.

88. Шумовский А.С. Каноническое преобразование Боголюбова и коллективные состояния бозе-полей // ТМФ, 89, 438-445, (1991)
89. Элиашберг Г.М. Взаимодействие электронов с колебаниями решетки в сверхпроводнике // [ЖЭТФ, 38\(3\), 966-976, \(1960\)](#);
Eliashberg G.M. Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor // [Sov. Phys. JETP, 11\(3\), 696-702, \(1960\)](#)
90. Abdel-Jawad M., Kennett M.P., Balicas L., Carrington A., Mackenzie A.P., Mckenzie R.H. Hussey N.L. Anisotropic scattering and anomalous normal-state transport in a high-temperature superconductor // Nature Physics, 2, 821-825, (2006) DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys449>
91. Abmann M., Bayer M. Semiconductor Rydberg Physics // Adv. Quantum Technol., 1900134, (2020) DOI: [10.1002/quite.201900134](https://doi.org/10.1002/quite.201900134)
92. Achkaz A.J., Sutarto R., Mao X., He F., Frano A., Blanco-Canosa S., Le Tacon M., Ghiringhelli G., Braicovich L., Minola M., Moretti Sala M., Mazzoli C., Liang R., Bonn D.A., Hardy W.N., Keimer B., Sawatzky G.A., Hawthorn D.G. Distinct charge orders in the planes and chains of ortho-III ordered $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ identified by resonant elastic X-ray scattering // Phys. Rev. Lett. 109, 167001, (2012) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.167001>
93. Adamowski J., Gerlach B., Leshke H. Strong-coupling limit of polaron energy, revisited // Phys. Lett. A, 79, 249, (1980) DOI: [10.1016/0375-9601\(80\)90263-7](https://doi.org/10.1016/0375-9601(80)90263-7)
94. Adamowski J., Bednarek S. Stability of large bipolarons // J. Phys.: Condens. Matter, 4, 2845, (1992) DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/4/11/012>
95. Agterberg D.F. Tsunetsugu H. Dislocations and vortices in pair-density-wave superconductors // Nature Phys., 4, 639-642, (2008) DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys999>

96. Agterberg D.F., Seamus Davis J.C., Edkins S.D., Fradkin E., Van Harlingen D.J., Kivelson S.A., Lee P.A., Radzihovskiy L., Tranquada J.M., Wang Y. The Physics of Pair-Density waves: Cuprate Superconductors and Beyond // Annual Review of Condensed Matter Physics, 11, 231-270, (2020) DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031119-050711>.
97. Alexandrov A., Ranninger J. Bipolaronic superconductivity // Phys. Rev B, 24, 1164, (1981)
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.24.1164>
98. Alexandrov A.S., Mott N.F. Bipolarons // Rep. Progr. Phys., 57, 1197, (1994) DOI: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/57/12/001>
99. Alexandrov A.S., Mott N. Polarons and Bipolarons (Singapore: World Scientific, 1996)
100. Alexandrov A.S., Kornilovitch P.E. Mobile Small Polaron // Phys. Rev. Lett., 82, 807, (1999)
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.807>
101. Alexandrov A.S. Comment on “Experimental and Theoretical Constraints of Bipolaronic Superconductivity in High T_c Materials: An Impossibility” // Phys. Rev. Lett. 82, 2620 (1999) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.2620>
102. Alexandrov A.S., Kabanov V.V. Parameter-free expression for superconducting T_c in cuprates // Phys. Rev. B, 59, 13628, (1999)
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.13628>
103. Alexandrov A.S. Theory of Superconductivity. Weak to strong coupling, (IOP publishing, Bristol, UK, 2003)
104. Allcock G.R. On the polaron rest energy and effective mass //Advan. Phys., 5, 412, (1956)
105. Altmore F., Chang A.M. One dimensional superconductivity in nanowires, (Wiley, Germany, 2013)

106. Anderson P.W. Model for the Electronic Structure of Amorphous Semiconductors // Phys. Rev. Lett, 34, 953, (1975) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.34.953>
107. Anderson P.W. The Theory of Superconductivity in the High- T_c Cuprates, (Princeton Series in Physics 1997, Princeton Univ. Press)
108. Anzai H., Ino A., Kamo T., Fujita T., Arita M., Namatame H., Taniguchi M., Fujimori A., Shen Z.-X., Ishikado M., Uchida S. Energy-dependent enhancement of the electron-coupling spectrum of the underdoped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ superconductor // Phys. Rev. Lett., 105, 227002, (2010) DOI: [10.1103/Phys. Rev. Lett.105.227002](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.227002)
109. Apalkov V., Chakraborty T. Fractional Quantum Hall States of Dirac Electrons in Graphene // Phys. Rev. B, 73, 113103, (2006) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.113103>
110. Askerzade I. Unconventional Superconductors 153, of Springer Series in Material Science, (Springer, Berlin, Germany, 2012)
111. Bajaj K.K. Effect of electron-phonon interaction on the binding energy of a wannier exciton in a polarizable medium // Solid State Commun., 15, 1221-1224, (1974)
112. Balabaev N.K. Lakhno V.D. Spectral properties of the polaron model of a protein // SPIE, 1403, 478, (1991) DOI: <https://doi.org/10.1117/12.57276>
113. Baranowski M., Plochocka P. Excitons in Metal-Halide Perovskites // Adv. Energy Mater, 1903659, (2020) DOI: [10.1002/ae hm.201903659](https://doi.org/10.1002/ae hm.201903659)
114. Bardeen J., Cooper L.N. Schrieffer J.R. Theory of superconductivity // Phys. Rev., 108, 1175, (1957) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175>
115. Barentzen H. Effective electron-hole interaction for intermediate and strong electron-phonon coupling // Phys. Stat. Sol. (b), 71, 245, (1975) DOI: <https://doi.org/10.1002/pssb.2220710125>

116. Basko D.M., Conwell E.M. Effect of solvation on hole motion in DNA // Phys. Rev. Lett., 88, 098102, (2002) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.098102>
117. Batlogg B., Kourouklis G., Weber W., Cava R.J., Jayaraman A., White A.E., Short K.T., Rupp L.W., Rietman E.A. Nonzero isotope effect in $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$ // Phys. Rev. Lett., 59, 912, (1987) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.59.912>
118. Bednorz J.G., Muller K.A. Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system // Z. Physik B - Condensed Matter, 64, 189, (1986) DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01303701>
119. Bendele M., von Rohr F., Guguchia Z., Pomjakushina E., Conder K., Bianconi A., Simon A., Bussmann-Holder A., Keller H. Evidence for strong lattice effect as revealed from huge unconventional oxygen isotope effects on the pseudogap temperature in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ // Phys. Rev. B, 95, 014514, (2017) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.014514>
120. Benneman K.H., Ketterson J.B. Superconductivity: conventional and unconventional superconductors 1–2. (Springer, New York, 2008)
121. Berg E., Fradkin E., Kivelson S.A. Charge-4e superconductivity from pair-density-wave order in certain high-temperature superconductors // Nature Phys., 5, 830-833, (2009) DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys1389>
122. Bilbro L.S., [Aguilar R.](#) Valdés, [Logvenov G.](#), [Pelleg O.](#), [Božović I.](#), [Armitage N.P.](#) Temporal correlations of superconductivity above the transition temperature in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ probed by terahertz spectroscopy // Nat. Phys., 7, 298-302, (2011) DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys1912>
123. Bill A., Kresin V.Z., Wolf S.A. Isotope effect for the penetration depth in superconductors // Phys. Rev. B, 57, 10814, (1998) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.10814>

124. Bill A., Kresin V.Z., Wolf S.A. The isotope Effect in Superconductors, in “Pair Correlation in Many Fermions Systems”, V.Z. Kresin (ed.), Plenum Press, New York, USA, 1998, DOI: [10.1016/j.physc.2011.02.001](https://doi.org/10.1016/j.physc.2011.02.001)
125. Blackburn E., Chang J., Hücker M., Holmes A.T., Christensen N.B., Liang R., Bonn D.A., Hardy W.N., Rütt U., Gutowski O., Zimmermann M.V., Forgan E.M., Hayden S.M. X-ray diffraction observations of a charge-density-wave order in superconducting ortho-II $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.54}$ single crystals in zero magnetic field // Phys. Rev. Lett., 110, 137004 (2013) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.137004>
126. Bloch I., Dalibard J., Zwirger W. Many-body physics with ultracold gases // Rev. Mod. Phys., 80, 885, (2008) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.80.885>
127. Bonn D.A., Ruixing Liang, Riseman T.M., Baar D.J., Morgan D.C., Kuan Zhang, Dosanjh P., Duty T.L., MacFarlane A., Morris G.D., Brewer J.H., Hardy W.N., Kallin C., Berlinsky A.J. Microwave determination of the quasiparticle scattering time in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$ // Phys. Rev. B, 47, 11314, (1993) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.11314>
128. Borisenko S.V., Kordyuk A.A., Legner S., Dürr C., Knupfer M., Golden M.S., Fink J., Nenkov K., Eckert D., Yang G., Abell S., Berger H., Forró L., Liang B., Maljuk A., Lin C.T., Keimer B. Estimation of matrix-element effects and determination of the Fermi surface in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ systems using angle-scanned photoemission spectroscopy // Phys. Rev. B, 64, 094513, (2001) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.094513>
129. Božovič I., He X., Wu J., Bollinger A.T. Dependence of the critical temperature in overdoped copper oxides on superfluid density // Nature, 536, 309, (2016) DOI: <https://doi.org/10.1038/nature19061>

130. Božovič I., Wu J., He X., Bollinger A.T. On the origin of high-temperature superconductivity in cuprates // Proc. SPIE, Oxide-based Materials and Devices VIII, 10105, 1010502, (2017) DOI: <https://doi.org/10.1117/12.2261512>
131. Braunstein S.L. Squeezing as an irreducible resource // Phys. Rev. A, 71, 055801, (2005) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.71.055801>
132. Buckel W., Kleiner R. Superconductivity: Fundamentals and Applications: Wiley-VCH, Weinheim, 2-nd Edition, (2004).
133. Camargo F., Schmidt R., Whalen J.D., Ding R., Woehl G., Yoshida Jr.S., Burgdörfer J., Dunning F.B., Sadeghpour H.R., Demler E., Kilian T.C. Creation of Rydberg Polarons in Bose gas // Phys. Rev. Lett., 120, 083401, (2018) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.083401>
134. Cai L., Tabata H., Kawai T. Self-assembled DNA networks and their electrical conductivity // Appl. Phys. Lett., 77, 3105, (2000) DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1323546>
135. Carbotte J.P. Properties of boson-exchange superconductors // Rev. Mod. Phys., 62, 1027, (1990) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.62.1027>
136. Chainani A., Yokoya T., Kiss T., Shin S., Nishio T., Uwe H. Electron-phonon coupling induced pseudogap and the superconducting transition in $\text{Ba}_{0.67}\text{K}_{0.33}\text{BiO}_3$, // Phys. Rev. B, 64, 180509, (2001) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.180509>
137. Chang J., Blackburn E., Holmes A.T., Christensen N.B., Larsen J., Mesot J., Liang R., Bonn D.A., Hardy W.N., Watenphul A., Zimmermann M.V., Forgan E.M., Hayden M. Direct observation of competition between superconductivity and charge density wave order in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ // Nat. Phys., 8, 871-876, (2012) DOI: [10.1038/NPHYS2456](https://doi.org/10.1038/NPHYS2456)

138. Chakraverty B.K., Ranninger J., Feinberg D. Experimental and Theoretical Constraints of Bipolaronic Superconductivity in High T_c Materials: An Impossibility // *Phys. Rev. Lett.*, 81, 433, (1988) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.81.433>
139. Chatterjee A., Mukhopadhyay S. Polarons and Bipolarons. An Introduction // CRC Press, Taylor & Francis Group, (2018) DOI: <https://doi.org/10.1201/9781315118635>
140. Chen H.-D., Vafek O., Yazdani A., Zhang S.-C. Pair density wave in the pseudogap state of high temperature superconductors // *Phys. Rev. Lett.*, 93, 187002, (2004) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.187002>
141. Chen Q., Stajic J., Tan S., Levin K. BCS-BEC Crossover: From High Temperature Superconductors to Ultracold Superfluids // *Phys. Rep.*, 412, 1 (2005) DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2005.02.005>
142. Chen X.-J., Liang B., Ulrich C., Lin C.-T., Struzhkin V.V., Wu Z., Hemley R.J., Mao H., Lin H.-Q. Oxygen isotope effect in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+4+\delta}$ ($n=1,2,3$) single crystals // *Phys. Rev. B*, 76, 140502(R) (2007) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.140502>
143. Chowdhury D., Sachdev S. Density-wave instabilities of fractionalized Fermi liquids // *Phys. Rev. B*, 90, 245136, (2014) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.245136>
144. Conwell E.M., Rakhmanova S.V. Polarons in DNA // *PNAS*, 97, 4556, (2000) DOI : <https://doi.org/10.1073/pnas.050074497>
145. Comin R., Frano A., Yee M.M., Yoshida Y., Esaki H., Schierle E., Weschke E., Sutarto R., He F., Soumyanarayanan, Yang He, Tacon M.Le., Efimov I.S., Hoffman J.E., Sawatzky G.A., Keimer B., Damascelli A. Charge order driven by Fermi-arc instability in $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+5}$ // *Science*, 343, 390 (2014) DOI: [10.1126/science.1242996](https://doi.org/10.1126/science.1242996)

146. Comin R., Sutarto R., He F., de Silva Neto E.H., Chanviere L., Frano A., Liang R., Hardy W.N., Bonn D.A., Yoshida Y., Eisaki H., Achkar A.J., Hawthorn D.G., Keiwer B., Sawatzky G. A., Damascelli A. Symmetry of charge order in cuprates // *Nature materials*, 14, 796-800, (2015) DOI: <https://doi.org/10.1038/nmat4295>
147. Cooper L.N. Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas // *Phys. Rev.*, 104, 1189, (1956) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.104.1189>
148. Cooper L.N., Feldman D. (eds.) *BCS: 50 years* (World Sci. Publ. Co, Singapore, 2011)
149. Cowley R.A., Woods A.D.B. Neutron Scattering from Liquid Helium at High Energies // *Phys. Rev. Lett.*, 21, 787, (1968) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.21.787>
150. Cucchietti F.M., Timmermans E. Strong-Coupling Polarons in Dilute Gas Bose-Einstein Condensates // *Phys. Rev. Lett.*, 96, 210401, (2006) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.210401>
151. Curty P., Beck H. Thermodynamics and Phase Diagram of High Temperature Superconductors // *Phys. Rev. Lett.*, 91, 257002, (2003) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.257002>
152. Damascelli A., Hussain Z., Shen Z.-X. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors // *Rev. Mod. Phys.*, 75, 473, (2003) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.75.473>
153. Daou R., Doiro-Leyrand N., LeBoeuf D., Li S.Y., Laliberte F., Cyr-Choiniere D., Jo Y.J., Balicas L., Yan J.-Q., Zhou J.-S., Goodenough J.B., Taillefer L. Linear temperature dependence of resistivity and change in the Fermi surface at the pseudogap critical point of a high-T superconductor // *Nature Physics*, 5, 31-34, (2009) DOI: <https://doi.org/10.1038/NPHYS1109>

154. Devereaux T.P., Hackl R. Inelastic light scattering from correlated electrons // *Rev. Mod. Phys.*, 79, 175, (2007) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.79.175>
155. Devreese J.T. Polarons in ionic crystals and polar semiconductors (Amsterdam: North-Holland, 1972)
156. Devreese J.T., Peeters F.M. Polarons and excitons in polar semiconductors and ionic crystals (N.Y.: Plenum, 1984)
157. Devreese J.T., Alexandrov A.S. Fröhlich polaron and bipolaron: recent developments. // *Rep. Prog. Phys.*, 72, 066501, (2009) DOI: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/72/6/066501>
158. Drechsler M., Zwirger W. Crossover from BCS superconductivity to Bose condensation // *Ann. Phys.*, 1, 15, (1992) DOI: <https://doi.org/10.1002/andp.19925040105>
159. Drozdov A.P., Eremets M.I., Troyan I.A., Ksenofontov V., Shylin S.I. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system // *Nature*, 525, 73, (2015) DOI: <https://doi.org/10.1038/nature14964>
160. Dukelsky J., Khodel V.A., Schuck P., [Shaginyan](#) V.R. Fermion condensation and non Fermi liquid behavior in a model with long range forces // *Z. Phys. B*, 102, 245, (1997) DOI: <https://doi.org/10.1007/s002570050286>
161. Eagles D.M. Possible Pairing without Superconductivity at Low Carrier Concentrations in Bulk and Thin-Film Superconducting Semiconductors // *Phys. Rev.*, 186, 456, (1969) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.186.456>
162. Ebrahimnejad H., Bercin M. Trapping of three-dimensional Holstein polarons by various impurities // *Phys. Rev. B*, 85, 165117, (2012) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.165117>

163. Edstam J., Olsson H.K. London penetration depth of YBCO in the frequency range 80-700 GHz // *Physica B*, 194-196, Part 2, 1589-1590 (1994) DOI: [https://doi.org/10.1016/0921-4526\(94\)91294-7](https://doi.org/10.1016/0921-4526(94)91294-7)
164. Emery V.J., Kivelson S.A. Importance of phase fluctuations in superconductors with small superfluid density // *Nature*, 374, 434-437, (1995) DOI: <https://doi.org/10.1038/374434a0>
165. Emin D. Self-trapping in quasi-one-dimensional solids // *Phys. Rev. B*, 33, 3973, (1986) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.3973>
166. Emin D. Formation, motion, and high-temperature superconductivity of large bipolarons // *Phys. Rev. Lett.*, 62, 1544, (1989) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.1544>
167. Emin D., Ye J., Beckel C.L. Electron-correlation effects in one-dimensional large-bipolaron formation // *Phys. Rev. B*, 46, 10710, (1992) DOI: <https://doi.org/10.1103/physrevb.46.10710>
168. Emin D. *Polarons* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2013)
169. Emin D. Dynamic d-symmetry Bose condensate of a planar-large-bipolaron-liquid in cuprate superconductors // *Phil. Mag.*, 31, 2931-2945, (2017) DOI: <https://doi.org/10.1080/14786435.2017.1354137>
170. Erdmenger J., Kerner P., Muller S. Towards a holographic realization of Homes' law // *J. High Energy Phys.*, 10, 21, (2012) DOI: [https://doi.org/10.1007/JHEP10\(2012\)021](https://doi.org/10.1007/JHEP10(2012)021)
171. Feynman R.P. Slow Electrons in a Polar Crystal // *Phys. Rev.*, 97, 660, (1955)
172. Fialko N.S., Lakhno V.D. Nonlinear dynamics of excitations in DNA // *Phys. Lett. A*, 278, 108, (2000) DOI: [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(00\)00755-6](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(00)00755-6)
173. Fink F.-W., Schonenberg C. Electrical conduction through DNA molecules // *Nature*, 398, 407, (1999) DOI: <https://doi.org/10.1038/18855>

174. Firsov Yu.A., Kabanov V.V., Kudinov E.K., Alexandrov A.S.
Comment on “Dynamical properties of small polarons” // Phys. Rev. B, 59, 12132, (1999) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.12132>
175. Foldy L. Charged Boson Gas // Phys. Rev. B, 124, 649, (1961) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.649>
176. Franck J.P. Experimental studies of the isotope effect in high temperature superconductors, in: Physical Properties of High Temperature Superconductors IV, Ginsberg D.M. (ed.) (World Scientific, Singapore, 1994) p.189; DOI: <https://doi.org/10.1142/2244>
177. Franck J.P., Jung J., Mohamed M.A-K., Gygax S., Sproule G.I. Observation of an oxygen isotope effect in superconducting $(Y_{1-x}Pr_x)Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ // Phys. Rev. B, 44, 5318, (1991) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.44.5318>
178. Franz M. Importance of fluctuations // Nat. Phys., 3, 686-687, (2007) DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys739>
179. Freire H., de Carvalho V.S., Pepin C. Renormalization group analysis of the pair-density-wave and charge order within the fermionic hot-spot model for cuprate superconductors // Phys. Rev. B, 92, 045132, (2015) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.045132>
180. Fröhlich H., Pelzer H., Zienau S. XX. Properties of slow electrons in polar materials // Philos. Mag., 41, 221, (1950) DOI: <https://doi.org/10.1080/14786445008521794>
181. Fröhlich H. On the Theory of superconductivity: The one dimensional case // Proceedings of the Royal Society A, 223, (1154): 296-305, (1954) DOI: <https://doi.org/10.1098/rspa.1954.0116>
182. Furrer A. Neutron Scattering Investigations of Charge Inhomogeneities and the Pseudogap State in High-Temperature Superconductors, in Superconductivity in Complex Systems, Structure and Bonding, Series Mingos M.P.(ed), Vol. 114, Müller K.A.,

- Bussmann-Holder A. (eds.) (Springer, Berlin Heidelberg, 2005) DOI: [10.1007/b12231](https://doi.org/10.1007/b12231)
183. Garcia D.R., Lanzara A. Through a lattice darkly: shedding light on electron – phonon coupling in high T_c cuprates // *Adv. Cond. Mat.*, ID 807412, (2010) DOI: <https://doi.org/10.1155/2010/807412>
184. de Gennes P.-G. Champ critique d'une boucle supraconductrice ramifiée, *C.R. Acad. // Sci. Ser. II*, 292, 279 (1981)
185. Gerlach B., Löwen H. Absence of phonon-induced localization for the free optical polaron and the corresponding Wannier exciton-phonon system // *Phys. Rev. B*, 37, 8042, (1988) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.8042>
186. Gerlach B., Löwen H. Analytical properties of polaron systems or: Do polaronic phase transitions exist or not? // *Rev. Mod. Phys.*, 63, 63, (1991) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.63.63>
187. Gerlach B. Ground-State energy of an exciton-(LO) phonon system in two and three dimensions: general outline and three dimensional case // *Phys. Rev. B*, 54, 12841-12851, (1996) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.12841>
188. Gerlach B., Kalina F. Energy spectrum of the optical polaron at finite total momentum // *Phys. Rev. B*, 60, 10886-10897, (1999) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.10886>
189. Ghiringhelli G., Le Tacon M., Minola M., Blanco-Canosa S., Mazzoli C., Brookes N.B., Luca G.M., Frano A., Hawthorn D.G., He F., Loew T., Moretti Sala M., Peeters D.C., Salluzzo M., Schierle E., Sutarto R., Sawatzky C.A., Weschke E., Keimer B., Braicovich L. Long-range incommensurate charge fluctuations in (Y,Nd) $Ba_2Cu_3O_{6+x}$ // *Science*, 337, 821-825 (2012) DOI: [10.1126/science.1223532](https://doi.org/10.1126/science.1223532)
190. Giorgini S., Pitaevskii L.P., Stringari S. Theory of ultracold atomic Fermi gases // *Rev. Mod. Phys.*, 80, 1215, (2008) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.80.1215>

191. Giubileo F., Roditchev D., Sacks W., Lamy R., Klein J. Strong coupling and double gap density of states in superconducting MgB₂ // Phys. Rev. Lett., 87, 17708, (2001) DOI: <https://doi.org/10.1209/epl/i2002-00415-5>
192. Giubileo F., Roditchev D., Sacks W., Lamy R., Thanh D.X., Klein J., Miraglia S., Fruchart D., Marcus J., Monod Ph. Two gap state density in MgB₂: a true bulk property of a proximity effect? // Phys. Rev. Lett., 58, 764, (2002) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.177008>
193. Glauber R.J. Photon correlations // Phys. Rev. Lett., 10, 84, (1963) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.10.84>
194. Greco A., Zeyner R. Electronic correlations, electron-phonon interaction, and isotope effect in high-T_c cuprates // Phys. Rev., B60, 1296, (1999) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.1296>
195. Griffin A., Snoke D.W., Stringari S. (eds.) Bose-Einstein Condensation. (Cambridge U.P., New-York, 1996).
196. Grimwall G. The electron-phonon Interaction in Metals, (North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1981)
197. Gross E.P. Small Oscillation Theory of the Interaction of a Particle and Scalar Field // Phys. Rev., 100, 1571, (1955) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.100.1571>
198. Gross E.P. Strong coupling polaron theory and translational invariance // Ann. Phys. 99 1 (1976) DOI: [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(76\)90082-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(76)90082-8)
199. Grusdt F., Astrakharchik G.E., Demler E. Bose polarons in ultracold atoms in one dimension: Beyond the Fröhlich paradigm // New J. Phys., 19, 103035, (2017) DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aa8a2e>
200. Grüner G. Density waves in Solids, (Addison-Wesley, Reading 1994)

201. Grzybowski P., Micnas R. Superconductivity and Charge-Density Wave Phase in the Holstein Model: a Weak Coupling Limit // Acta Physica Polonica A, 111, 455, (2007) DOI: <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.111.453>
202. Gunnarsson O., Rösch O. Interplay between electron-phonon and Coulomb interactions in cuprates // J. Phys. Condens Matter, 20, 043201, (2008) DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/04/043201>
203. Hague J.P., Kornilovitch P.E., Alexandrov A.S. Trapping of lattice polarons by impurities // Phys. Rev. B, 78, 092302, (2008) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.092302>
204. Haken H. Die Theorie des Exzitons im festen Körper // Fortschr. Phys., 6, 271, (1958)
205. Hakioglu T., Ivanov V.A., Shumovsky A.S., Tanatar B. Phonon Squeezing via correlations in the superconducting electron-phonon interaction // Phys. Rev. B, 51, 15363, (1995) DOI: [10.1103/physrevb.51.15363](https://doi.org/10.1103/physrevb.51.15363)
206. Hamidian M.N., Edkins S.D., Sang Hyun Joo, Kostin A., Eisaki H., Uchida S., Lawler M.J., Kim E.-A., Mackenzie A.P., Fujita K., Lee Jinho, Seamus Davis J.C. Detection of a Cooper-pair density wave in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ // Nature, 532, 343, (2016) DOI: [10.1038/nature17411](https://doi.org/10.1038/nature17411)
207. Hang Z. New type of Cooper pairing in systems with strong electron-phonon interaction // Phys. Rev. B, 37, 7419, (1988) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.7419>
208. Hang Z. Variational ground state of a systems with strong electron-phonon interaction // Phys. Rev. B, 38, 11865, (1988) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.11865>
209. Hang Z. Variational treatment of the strong electron-phonon interaction // J. Phys. Condens. Matter., 1, 1641-1651, (1989)

210. Hang Z. Reconsideration of a simple model for bipolarons // Sol. St. Comm., 65, 731-734, (1988) DOI : [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(88\)90374-2](https://doi.org/10.1016/0038-1098(88)90374-2)
211. Hang Z. Squeezed polarons in one dimension // Phys. Lett. A, 131, 115-118, (1988)
212. Hai G-Q., Candido L., Brito B., Peeters F. Electron pairing: from metastable electron pair to bipolaron // Journal of Physics Comm., 2, 035017, (2018) DOI: <https://doi.org/10.1088/2399-6528/aaace0>
213. Harling O.K. High-Momentum-Transfer Neutron-Liquid-Helium Scattering Bose Condensation // Phys. Rev. Lett., 24,1046, (1970) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.24.1046>
214. Hashimoto M., Vishik I.M., [He Rui-Hua](#), [Devereaux T.P.](#), [Shen Z.-X.](#) Energy gaps in high-transition-temperature cuprate superconductors // Nat. Phys., 10, 483, (2014) DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys3009>
215. Hattass M., Jahnke T., Schössler S., Czasch A., Schöffler M., Schmidt L.Ph.H., Ulrich B., Jagutzki O., Schumann F.O., Winkler C., Kirschner J., Dörner R., Schmidt-Böcking H. Dynamics of two-electron photoemission from Cu(111) // Phys. Rev. B, 77, 165432, (2008) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.165432>
216. Heeger A.J., Kivelson S., Schrieffer J., Su W.-P. Solitons in conducting polymers // Rev. Mod. Phys., 60, 781, (1988) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.60.781>
217. Heisenberg W. Die Selbstenergie des Elektrons // ZS F Phys., 65,4, (1930) DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01397404>
218. Helm T., Kartsovnik M.V., Bartkowiak M., Bittner N., Lambacher M., Erb A., Wosnitza J., Gross R. Evolution of the Fermi Surface of the Electron-Doped High-Temperature Superconductor $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ Revealed by Shubnikov-de Haas Oscillations // Phys. Rev. Lett., 103, 157002, (2009) DOI: [10.1103/PhysRevLett.103.157002](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.157002).

219. Higgs P.W. Broken symmetries and the masses of gauge Bosons // Phys. Rev. Lett., 13, 508-509, (1964) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.13.508>.
220. Höhler G.Z. Wechselwirkung eines nichtrelativistischen Teilchens mit einem skalaren Feld für mittlere Kopplung // I [Zeitschrift für Physik](#), 140, 192–214, (1955) DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01349378>
221. Hohenberg P.C., Platzman P.M. High-energy neutron // Phys. Rev., 152, 198, (1966) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.152.198>
222. Holstein T. Studies of polaron motion: part 1. The molecular-crystal model // Ann. Phys., 8, 325, (1959) DOI: [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(59\)90002-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90002-8)
223. Holstein T. Studies of polaron motion: Part II. The “small” polaron // Annals of Physics, 8, 343-389, (1959) DOI: [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(59\)90003-X](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90003-X)
224. Homes C.C., [Dordevic S.V.](#), [Strongin M.](#), [Bonn D.A.](#), [Ruixing Liang](#), [Hardy W.N.](#), [Seiki Komiya](#), [Yoichi Ando](#), [Yu G.](#), [Kaneko N.](#), [Zhao X.](#), [Greven M.](#), [Basov D.N.](#), [Timusk T.](#) A universal scaling relation in high-temperature superconductors // Nature 430, 539 (2004) DOI: <https://doi.org/10.1038/nature02673>
225. Hoogenboom B.W., Renner Ch., [Revaz B.](#), [Maggio-Aprile I.](#), [Fischer O.](#) Low-energy structures in vortex core tunneling spectra in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ // Physica C: Superconductivity, 332, 440, (2000) DOI: [10.1016/S0921-4534\(99\)00720-0](https://doi.org/10.1016/S0921-4534(99)00720-0)
226. Hore S.R., Frankel N.E. Dielectric response of the charged Bose gas in the random-phase approximation // Phys. Rev. B, 12, 2619, (1975) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.12.2619>
227. Hore S.R., Frankel N.E. Zero-temperature dielectric response of the charged Bose gas in a uniform magnetic field // Phys. Rev. B, 14, 1952, (1976) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.1952>

228. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // Proc. R Soc. Lond A, 276, 238, (1963) DOI: <https://doi.org/10.1098/rspa.1963.0204>
229. Huefner S., Hossain M.A., Damascelli A., Sawatzky G.A. Two Gaps Make a High Temperature Superconductor? // Rep. Progr. Phys., 71, 062501, (2008) DOI: [10.1088/0034-4885/71/6/062501](https://doi.org/10.1088/0034-4885/71/6/062501)
230. Iadonisi G., Ranninger J., de Filips G. Polarons in Bulk Materials and Systems with Reduced Dimensionality, (IOS Press, 2006), Amsterdam, Oxford, Tokio, Washington D.C.
231. Inzelt G. Conducting polymers. (Springer, 2008)
232. Ishiguro T., Yamaji K., Saito G. Organic superconductors. (Springer, Berlin, 1998)
233. Iwao S. Quark-Polaron Model of Fundamental Particles // Lett. Nuovo Cimento, 15, 331, (1976)
234. Iwasawa H., Douglas J.F., Sato K., Masui T., Yoshida Y., Sun Z., Eisaki H., Bando H., Ino A., Arita M., Shimada K., Namatame H., Taniguchi M., Tajima S., Uchida S., Saitoh T., Dessau D.S., Aiura Y. Isotopic Fingerprint of Electron-Phonon Coupling in High- T_c Cuprates // Phys. Rev. Lett., 101, 157005, (2008) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.157005>
235. Jackson H.W. Reexamination for a Bose-Einstein condensate in superfluid He^4 // Phys. Rev. A, 10, 278-294, (1973) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.10.278>
236. Jackson S.A., Platzman P.M. Polaronic aspects of two-dimensional electrons on films of liquid helium // Phys. Rev. B, 24, 499-502, (1981) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.24.499>
237. Junior L.A.R., Stafström S. Polaron Stability in molecular semiconductors: theoretical insight into the impact of the temperature, electric field and the system dimensionality // Phys. Chem. Chem.

- Phys., 17, 88973-8982, (2015) DOI:
<https://doi.org/10.1039/C4CP06028H>
238. Kakani S.L., Kakani S. Superconductivity, (Anshan, Kent, UK, 2009).
239. Kamerlingh Onnes H. The superconductivity of Mercury // Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden, Nos.122 and 124, (1911)
240. Kandemir B.S., Altanhan T. Some properties of large polarons with squeezed states // J. Phys. Condens. Mat., 24, 4505-4514, (1994) DOI:
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/6/24/012>
241. Kandemir B.S., Cetin A. Impurity magnetopolaron in a parabolic quantum dot: the squeezed-state variational approach // J. Phys. Condens. Mat., 17, 667-677, (2005) DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/17/4/009>
242. Kashirina N.I., Lakhno V.D., Sychyov V.V. Electron Correlations and Spatial Configuration of the Bipolaron // Phys. Status Solidi B, 234, 563-570, (2002) DOI: [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(200211\)234:2<563::AID-PSSB563>3.0.CO;2-E](https://doi.org/10.1002/1521-3951(200211)234:2<563::AID-PSSB563>3.0.CO;2-E)
243. Kashirina N.I., Lakhno V.D., Sychyov V.V. Correlation effects and Pekar bipolaron (arbitrary electron–phonon interaction) // Phys. Status Solidi B, 239, 174, (2003) DOI:
<https://doi.org/10.1002/pssb.200301818>
244. Kashirina N.I., Lakhno V.D., Sychyov V.V. Polaron effects and electron correlations in two-electron systems: Arbitrary value of electron-phonon interaction // Phys. Rev. B, 71, 134301, (2005) DOI:
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.134301>
245. Kasumov Yu., Kociak M., Guéron S., Reulet B., Volkov V.T., Klinov D.V., Bouchiat H. Proximity-Induced Superconductivity in DNA // Science, 291, 280 (2001) DOI:
<https://doi.org/10.1126/science.291.5502.280>.

246. Kervan N., Altanhan T., Chatterjee A. A variational approach with squeezed-states for the polaronic effects in quantum dots // Phys. Lett. A, 315, 280-287, (2003) DOI : [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(03\)01011-9](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(03)01011-9)
247. Ketterle W., Zwierlein M.W. Making, probing and understanding ultracold Fermi gases in: Ultra-cold Fermi gases, (M. Inguscio, W. Ketterle, C. Salomon, eds., p.95 IOS Press, Amsterdam, 2007).
248. Khasanov R., Eshchenko D.G., Luetkens H., Morenzoni E., Prokscha T., Suter A., Garifianov N., Mali M., Roos J., Conder K., Keller H. Direct Observation of the Oxygen Isotope Effect on the In-Plane Magnetic Field Penetration Depth in Optimally Doped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ // Phys. Rev. Lett., 92, 057602, (2004) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.057602>
249. Kimura H., Noda Y., Goka H., Fujita M., Yamada K., Shirane G. Soft Phonons and Structural Phase Transitions in $\text{La}_{1.875}\text{Ba}_{0.125}\text{CuO}_4$ // J. Phys. Soc. Jpn. 74, 445- 449, (2005) DOI: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.445>
250. Kirtley J.R., Tsuei C.C., Ariando C.J.M. Verwijs, Harkema S., Hilgenkamp H. Angle-resolved phase sensitive determination of the in-plane gap symmetry in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ // Nature Physics, 2, 190-194, (2006) DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys215>
251. Kivelson S.A., Rokhsar D.S. Bogoliubov quasiparticles, spinons, and spin-charged decoupling in superconductors // Phys. Rev. B, 41, 11693, (1990) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.11693>
252. Klamt A. Tight-binding polarons. I. A new variational approach to the molecular-crystal model // J. Phys. C: Solid State Phys., 21, 1953, (1988) DOI: <https://doi.org/10.1088/0022-3719/21/10/014>
253. Klimin S.N., Devreese J.T. Comments on “Translation-invariant bipolarons and the problem of high-temperature superconductivity” //

- Sol. St. Comm., 152, 1601, (2012) DOI:
<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.05.013>
254. Klimin S.N., Devreese J.T. Reply to “On the cutoff parameter in the translation-invariant theory of the strong coupling polaron” // Sol. St. Comm., 153, 58, (2013) DOI:
<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.10.012>
255. Kogan A., Rak M.S., Vig S., Husain A.A., Flicker F., Joe Y.II., Venema L., MacDougall G.J., Chiang T.C., Fradkin E., van Wezel J., Abbamonte P. Signatures of exciton condensation in a transition metal dichalogenide // Science, 358, 1314-1317, (2017) DOI:
[10.1126/science.aam6432](https://doi.org/10.1126/science.aam6432)
256. Kohn W. Image of the Fermi Surface in the Vibration Spectrum of a Metal // Phys. Rev. Lett., 2, 393-394, (1959) DOI: [10.1103 / PhysRevLett2.393](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.2.393)
257. Korepin V.E., Essler F.H. (eds.) Exactly solvable models of strongly correlated electrons // Advanced series in mathematical physics, v 18. World Scientific, Singapore (1994)
258. Kouzakov K.A., Berakdar J. Photoinduced Emission of cooper pairs from superconductors // Phys. Rev. Lett., 91, 257007, (2003), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.257007>
259. Kresin V.Z., Wolf S.A. Colloquium: Electron-Lattice interaction and its impact on high T_c superconductivity // Rev. Mod. Phys., 81, 481-501, (2009) DOI: [10.1103/RevModPhys.81.481](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.481)
260. Kruchinin S., Nagao H., Aono S. Modern Aspects of superconductivity. Theory of superconductivity, (World Sci., River Edge, NJ USA, 2011).
261. Kuper C.G., Whitfield G.D. Polarons and Excitons (Edinburgh: Oliver&Boyd Ltd, 1963)

262. Labbe J., Bok J. Superconductivity in Alkaline-Earth-Substituted La_2CuO_4 : A Theoretical Model // *Europhys. Lett.*, 3, 1225, (1987)
DOI: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/3/11/012>
263. Landau L.D. On the motion of electrons in a crystal lattice // *Phys. Z. Sowjetunion*, 3, 644, (1933); Ландау Л.Д. Собрание трудов, т. I, стр. 90 (М.:Наука, 1969)
264. Lakhno V.D. (ed.) *Polarons and Applications* (Chichester: Wiley, 1994)
265. Lakhno V.D., in “Modern Methods for Theoretical Physical Chemistry of Biopolymers”, Starikov E.B., Lewis J.P., Tanaka S. (eds.) Elsevier Science Ltd. 640 pp., (2006)
266. Lakhno V.D. DNA nanobioelectronics // *Int. J. Quantum Chem.*, 108,1970, (2008) DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.21717>
267. Lakhno V.D. New method of soft modes investigation by Little-Parks effect // arxiv:1908.05735, Cond-mat, supr-con.
268. Lakhno V.D., Korshunova A.N. Formation of Stationary Electronic States in Finite Homogeneous Molecular Chains // *Math. Biol. Bioinformatics*, 5, 1, (2010) DOI: [10.17537/2010.5.1](https://doi.org/10.17537/2010.5.1) [arXiv: 1305.5732 [cond-mat.other]]
269. Lakhno V.D. Davydov's Solitons in a Homogeneous Nucleotide Chain // *Int. J. Quant. Chem.* 110, 127, (2010) DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.22264>.
270. Lakhno V.D., Sultanov V.B. On the possibility of bipolaronic states in DNA // *Mol. Biophysics*, 56, 210, (2011) DOI: <https://doi.org/10.1134/S0006350911020175>
271. Lakhno V.D., Sultanov V.B. Possibility of a (bi)polaron high-temperature superconductivity in Poly A/ Poly T DNA duplexes // *J. Appl. Phys.*, 112, 064701, (2012) DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4752875>

272. Lakhno V.D. Translation-invariant bipolarons and the problem of high temperature superconductivity // Solid. State. Commun., 152, 621, (2012) DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.01.013>
273. Lakhno V.D. On the cutoff parameter in the translation-invariant theory of the strong coupling polaron (response to comments [8] on the paper V.D. Lakhno, SSC 152 (2012) 621) // 152, 1855, (2012) DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.07.019>
274. Lakhno V.D. On the inconsistency of Porsch-Röseler cutoff theory. (reply to [[arXiv:1208.1166v2](https://arxiv.org/abs/1208.1166v2)]) // *arXiv:1211.0382*
275. Lakhno V.D. Large-radius Holstein polaron and the problem of spontaneous symmetry breaking // Prog. Theor. Exp. Phys., 2014, 073I01, (2014) DOI: <https://doi.org/10.1093/ptep/ptu075>
276. Lakhno V.D. TI-bipolaron theory of superconductivity. *arXiv:1510.04527 [cond-mat.supr-con]* (2015)
277. Lakhno V.D. A translation invariant bipolaron in the Holstein model and superconductivity // Springer Plus, 5, 1277, (2016) DOI: <https://doi.org/10.1186/s40064-016-2975-x>
278. Lakhno V.D. Phonon interaction of electrons in the translation-invariant strong-coupling theory // Mod. Phys. Lett. B, 30, 1650031, (2016) DOI: <https://doi.org/10.1142/S0217984916500317>
279. Lakhno V.D. Peculiarities in the concentration dependence of the superconducting transition temperature in the bipolaron theory of Cooper pairs // Mod. Phys. Lett. B, 31, 1750125, (2017) DOI: <https://doi.org/10.1142/S0217984917501251>
280. Lakhno V.D. Superconducting Properties of 3D Low-Density Translation-Invariant Bipolaron Gas // Adv. Cond. Matt. Phys., 2018, ID1380986 (2018) DOI: <https://doi.org/10.1155/2018/1380986>
281. Lakhno V.D. Superconducting properties of a nonideal bipolaron gas // Phys. C: Supercond. Its Appl., 561, 1-8, (2019) DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physc.2018.10.009>

282. Lakhno V.D. Superconducting Properties of 3D Low-Density TI-Bipolaron Gas in Magnetic Field // Condensed Matter, 4, 43, (2019)
DOI: <https://doi.org/10.3390/condmat4020043>
283. Lakhno V.D. Translational-Invariant Bipolarons and Superconductivity // Condensed Matter, 5, 30, (2020) DOI: <https://doi.org/10.3390/condmat5020030>
284. Lanzara A., Zhao G-M., Saini N.L., Bianconi A., Conder K., Keller H., Müller K.A. Oxygen-isotope shift on the charge-stripe ordering temperature in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ from x-ray absorption spectroscopy // J. of Phys.: Condensed Matter, 11(48), L 541-L546, (1999), DOI: [10.1088/0953-8984/11/48/103](https://doi.org/10.1088/0953-8984/11/48/103)
285. Larkin A., Varlamov A. Theory of fluctuations in superconductors (Oxford University Press, Oxford 2005)
286. [Lawler](#) M.J., [Fujita](#) K., [Lee](#) Jinhwan, [Schmidt](#) A.R., [Kohsaka](#) Y., [Kim](#) Ch.K., [Eisaki](#) H., [Uchida](#) S., [Davis](#) J.C., [Sethna](#) J.P., [Kim](#) Eun-Ah, Intra-unit-cell electronic nematicity of the high- T_c copper-oxide pseudogap states // Nature, 466, 347, (2010) DOI: [10.1038/nature09169](https://doi.org/10.1038/nature09169)
287. Lebed A.G. (ed.) The physics of organic superconductors and conductors. (Springer series in materials science, Springer, Berlin (2008))
288. Lee T.D., Low F., Pines D. The motion of slow electrons in a polar crystal // Phys. Rev., 90, 297, (1953) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.90.297>
289. Lee P.A., Nagaosa N., Wen X-G. Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity // Rev. Mod. Phys., 78, 17, (2006) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.78.17>
290. Lee P.A. Amperean Pairing and the Pseudogap Phase of Cuprate Superconductors // Phys. Rev. X, 4, 031017, (2014) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.4.031017>

291. Lewis F.D., Wu Y. Dynamics of superexchange photoinduced electron transfer in duplex DNA // J. Photochem. Photobiol., 2, 1 (2001) DOI: [https://doi.org/10.1016/S1389-5567\(01\)00008-9](https://doi.org/10.1016/S1389-5567(01)00008-9).
292. Lieb E.H., Yamazaki K. Ground State Energy and Effective Mass of the Polaron // Phys. Rev., 11, 728-733, (1958) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.111.728>
293. Lieb E.H., Thomas L.E. Exact Ground State Energy of the Strong Coupling Polaron // Commun. Math., 183, 511–519, (1997) DOI: <https://doi.org/10.1007/s002200050040>
294. Little W.A., Parks R.D. Observation of Quantum Periodicity in the Transition Temperature of a Superconducting Cylinder // Phys. Rev. Lett., 9, 9, (1962) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.9.9>
295. Liu Y., Zadorozhny Y., Rosario M.M., Rock B.Y., Carrigan P.T., Wang H. Destruction of the Global Phase Coherence in Ultrathin, Doubly Connected Superconducting Cylinders // Science, 294, 2332, (2001) DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1066144>
296. London F. The λ -Phenomenon of Liquid Helium and the Bose-Einstein Degeneracy // Nature, 141, 643-644, (1938) DOI : <https://doi.org/10.1038/141643a0>
297. Löwen H. Absence of phase transitions in Holstein systems // Phys. Rev. B, 37, 8661, (1988) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.8661>
298. Maggio-Aprile I., Renner Ch., Erb A., Walker E., Fischer Ø. Direct Vortex Lattice Imaging and Tunneling Spectroscopy of Flux Lines on Y Ba₂Cu₃O₇ // Phys. Rev. Lett., 75, 2754, (1995) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.2754>
299. Manske D. Theory of Unconventional Superconductors, (Springer, Heidelberg, Germany, 2004)
300. Marchand D.J.J., De Filippis G., Cataudella V., Berciu M., Nagaosa N., Prokof'ev N.V., Mishchenko A.S., Stamp P.C.E. Sharp Transition

- for Single Polarons in the One-Dimensional Su-Schrieffer-Heeger Model // Phys. Rev. Lett., 105, 266605, (2010) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.266605>
301. Marouchkine A. Room-Temperature Superconductivity: Cambridge Int. Sci. Publ., Cambridge, (2004).
302. Marsiglio F., Carbotte J.P. Gap function and density of states in the strong-coupling limit for an electron-boson system // Phys. Rev. B, 43, 5355, (1991) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.5355>
303. Matsui H., Sato T., Takahashi T., Wang S.-C., Yang H.-B., Ding H., Fujii T., Watanabe T., Matsud A. BCS-like Bogoliubov quasiparticles in high- T_c superconductors observed by angle-resolved photoemission spectroscopy // Phys. Rev. Lett., 90, 217002, (2003) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.217002>
304. [Medicherla](#) V.R.R., [Patil](#) S., [Singh](#) R.S., [Maiti](#) K. Origin of ground state anomaly in LaB_6 at low temperatures // Appl. Phys. Lett., 90, 062507, (2007) DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2459779>
305. Meevasana W., Devereaux T.P., Nagaosa N., Shen Z.-X., Zaanen J. Calculation of overdamped c-axis charge dynamics and the coupling to polar phonons in cuprate superconductors // Phys. Rev. B, 74, 174524, (2006) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.174524>
306. Meevasana W., Ingle N.J.C., Lu D.H., Shi J.R., Baumberger F., Shen K.M., Lee W.S., Cuk T., Eisaki H., Devereaux T.P., Nagaosa N., Zaanen J., Shen Z.-X. Doping Dependence of the Coupling of Electrons to Bosonic Modes in the Single-Layer High-Temperature $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ Superconductor // Phys. Rev. Lett., 96, 157003, (2006) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.157003>
307. de Mello E.V.L., Ranninger J. Dynamical properties of small polarons // Phys. Rev. B, 55, 14872, (1997) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.14872>

308. de Mello E.V.L., Ranninger J. Reply to “Comment on ‘Dynamical properties of small polarons’ ” // Phys. Rev. B, 59, 12135, (1999)
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.12135>
309. Micnas R., Ranninger J., Robaszkiewicz S. Superconductivity in narrow-band systems with local nonretarded attractive interactions // Rev. Mod. Phys., 62, 113, (1990) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.62.113>
310. Mishchenko A.S., Nagaosa N., Shen Z.-X., De Filippis G., Cataudella V., Devereaux T.P., Bernhard C., Kim K.W., Zaanen J. Charge Dynamics of Doped Holes in High T_c Cuprate Superconductors: A Clue from Optical Conductivity // Phys. Rev. Lett., 100, 166401, (2008) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.166401>
311. Mishchenko A.S., Nagaosa N., Alvermann A., Fehske H., De Filippis G., Cataudella V., Sushkov O.P. [Localization-delocalization transition of a polaron near an impurity](#) // Phys. Rev. B, 79, 180301, (2009) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.180301>
312. Miyake S.J. Strong-Coupling Limit of the Polaron Ground State // J. Phys. Soc. Jpn., 38, 181-182, (1975) DOI: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.38.181>
313. Miyake S.J. The Ground State of the Optical Polaron in the Strong-Coupling Case // J. Phys. Soc. Jpn., 41, 747-752, (1976) DOI: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.41.747>
314. Miyake S.J. Bound Polaron in the Strong-coupling Regime // Polarons and Applications, V.D. Lakhno (ed.), Wiley, Leeds, 219 (1994).
315. Mondal M., Kamlapure A., Chand M., Saraswat G., Kumar S., Jesudasan J., Benfatto L., Tripathi V., Raychaudhuri P. Phase Fluctuations in a Strongly Disordered s-Wave NbN Superconductor Close to the Metal-Insulator Transition // Phys. Rev. Lett., 106, 047001, (2011) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.047001>

316. Moon E., Sachdev S. Competition between spin density wave order and superconductivity in the underdoped cuprates // Phys. Rev. B, 80, 035117, (2009) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.035117>
317. Moriya T., Ueda K. Spin fluctuations and high temperature superconductivity // Adv. Phys., 49, 555, (2000) DOI: <https://doi.org/10.1080/000187300412248>
318. Nagy P. The polaron squeezed states // J. Phys. Condens. Mat., 2, 10573-10579, (1991)
319. Nazarenko F., Dagotto E. Possible phononic mechanism for dx_2-y_2 superconductivity in the presence of short-range antiferromagnetic correlations // Phys. Rev., B53, R. 2987, (1996) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.R2987>
320. Norman M.R., Pines D., Kallin C. The pseudogap: friend or foe of high T_c ? // Adv. Phys., 54, 715, (2005) DOI: <https://doi.org/10.1080/00018730500459906>
321. Novozhilov Y.V., Tulub A.V. The Method of Functionals in the Quantum Theory of Fields (N.Y.: Gordon and Beach, 1961)
322. Nozières P., Schmitt-Rink S. Bose condensation in an attractive fermion gas: From weak to strong coupling superconductivity // J. Low Temp. Phys., 59, 195, (1985) DOI: <https://doi.org/10.1007/BF00683774>.
323. Offenhüsser A., Rinaldi R. (eds.) Nanobioelectronics for electronics, biology, and medicine, (Springer, New York , 2009)
324. Ogg Jr. R.A. Superconductivity in solid metal-ammonia solutions // Phys. Rev., 70, 93, (1946) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.70.9>
325. Okahata Y., Kobayashi T., Tanaka K., Shimomura M. Anisotropic Electric Conductivity in an Aligned DNA Cast Film // J. Am. Chem. Soc., 120, 6165, (1998) DOI: <https://doi.org/10.1021/ja980165w>

326. Overend N., Howson M.A., Lawrie I.D. 3D X-Y scaling of the specific heat of Y Ba₂Cu₃O₇ single crystals // Phys. Rev. Lett., 72, 3238, (1994) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.72.3238>
327. de Pablo P. J., Moreno-Herrero F., Colchero J., Herrero J. Gómez, Herrero P., Baró A. M., Ordejón Pablo, Soler José M. Artacho Emilio, Absence of dc-Conductivity in λ -DNA // Phys. Rev. Lett., 85, 4992, (2000) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.4992>.
328. Pan S.H., Hudson E.W., Gupta A.K., Ng K.-W., Eisaki H., Uchida S., Davis J. C. STM Studies of the Electronic Structure of Vortex Cores in Bi₂Sr₂CaCu₂O₈ // Phys. Rev. Lett., 85, 1536, (2000) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.1536>
329. Panagopoulos C., Cooper J.R., Xiang T. Systematic behavior of the in-plane penetration depth in d-wave cuprates // Phys. Rev. B, 57, 13422, (1998) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.13422>
330. Park S.R, Song D.J., Leem C.S., Kim Ch., Kim C., Kim B.J., Eisaki H. Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy of Electron-Doped Cuprate Superconductors: Isotropic Electron-Phonon Coupling // Phys. Rev. Lett., 101, 117006, (2008) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.117006>
331. Pashitskii E.A. The critical temperature as a function of the number of Cooper pairs, and the superconductivity mechanism in a layered LaSrCuO Crystal // Low Temp. Phys., 42, 1184, (2016) DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4973010>
332. Patil S., Medicherla V.R.R., Ali K., Singh R.S., Manfrinetti P., Wrubl F., Dhar S.K., Maiti K. Observation of pseudogap in MgB₂ // Journ. of Phys.: Cond. Matter, 29, 465504, (2017) DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8aa2>
333. Pepin C., de Carvalho V.S., Kloss T., Montiel X. Pseudogap, charge order, and pairing density wave at the hot spots in curpate

- superconductors // Phys. Rev. B, 90, 195207, (2014) DOI:
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.195207>
334. Pereg-Barnea T., [Turner P.J.](#), [Harris R.](#), [Mullins G.K.](#), [Bobowski J.S.](#), [Raudsepp M.](#), [Ruixing Liang](#), [Bonn D.A.](#), [Hardy W.N.](#) Absolute values of the London penetration depth in Y Ba₂Cu₃O_{6+y} measured by zero field ESR spectroscopy on Gd doped single crystals // Phys. Rev. B, 69, 184513, (2004) DOI: [10.1103/PhysRevB.69.184513](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.184513)
335. Pieri P., Strinati G.C. Strong-coupling limit in the evolution from BCS superconductivity to Bose-Einstein condensation // Phys. Rev. B, 61, 15370, (2000) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.15370>.
336. Pippard A.B. Field variation of the superconducting penetration depth // Proc. Roy. Soc. (London) A203, 210 (1950)
337. Plakida N.M. High Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory and Applications, (Springer, Heidelberg, Germany 2010)
338. Plumb N.C., Reber T.J., Koralek J.D., Sun Z., Douglas J.F., Aiura Y., Oka K., Eisaki H., Dessau D.S. Low-energy (<10mev) feature in the nodal electron self-energy and strong temperature dependence of the Fermi velocity in Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ} // Phys. Rev. Lett., 105, 046402, (2010) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.046402>
339. Porath D., Bezryadin A., de Vries S., Dekker C. Direct measurement of electrical transport through DNA molecules // Nature, 403, 635, (2000) DOI: <https://doi.org/10.1038/35001029>
340. Porsch M., Röseler J. Recoil Effects in the Polaron Problem // Phys. Status Soliti B, 23, 365, (1967) DOI: <https://doi.org/10.1002/pssb.19670230138>
341. Proville L., Aubry S. Mobile bipolarons in the adiabatic Holstein–Hubbard model in one and two dimensions // Phys. D, 113, 307, (1998) DOI: [https://doi.org/10.1016/S0167-2789\(97\)00283-2](https://doi.org/10.1016/S0167-2789(97)00283-2)

342. Pullmann J., Büttner H. Effective Hamiltonians and bindings energies of Wannier excitons in polar semiconductors // Phys. Rev., 16, 4480, (1977) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.16.4480>
343. Radtke R.J., Norman M.R. Relation of extended Van Hove singularities to high-temperature superconductivity within strong-coupling theory // Phys. Rev. B, 50, 9554, (1994) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.9554>
344. Rameau J.D., Yang H.B., Gu G.D., Johnson P.D. Coupling of low-energy electrons in the optimally doped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ superconductor to an optical phonon mode // Phys. Rev. B, 80, 184513, (2009) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.184513>
345. Randeria M. Precursor Pairing Correlations and Pseudogaps // Varenna Lectures, arXiv: cond-mat/9710223 [cond-mat.str-el], (1997)
346. Randeria M., Trivedi N. Pairing correlations above T_c and pseudogaps in underdoped cuprates // J. Phys. Chem. Sol., 59, 1754, (1998) DOI: [https://doi.org/10.1016/S0022-3697\(98\)00099-7](https://doi.org/10.1016/S0022-3697(98)00099-7)
347. Reznik D. Giant Electron-Phonon Anomaly in Doped La_2CuO_4 and Other Cuprates // Adv. Cond. Mat. Phys., 2010, ID 523549, (2010) DOI: <https://doi.org/10.1155/2010/523549>
348. Ribeiro L.A., da Cunha W.F., de Oliveria Neto P.H., Gargano R., Magela e Silva G. Effects of temperature and electric field induced phase transitions on the dynamics of polarons and bipolarons // New Journal of Chemistry, 37, 2829-2836, (2013) DOI: <https://doi.org/10.1039/C3NJ00602F>
349. Rosenfeld L. Ubereine mögliche Fassung des Diracschen Prigramms zur Quanten elektrodynamik und deren formalin Zusammenhang mit der Heisenberg-Paulischen Theorie // Zs. f. Phys., 76, 729 (1932)
350. Röseler J. A new variational ansatz in the polaron theory // Phys. Status Solidi B, 25, 311, (1968) DOI: <https://doi.org/10.1002/pssb.19680250129>

351. Rubio Temprano D., Mesot J., Janssen S., Conder K., Furrer A., Mutka H., Müller K.A. Large Isotope Effect on the Pseudogap in the High-Temperature Superconductor $\text{HoBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ // Phys. Rev. Lett., 84, 1990, (2020) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.1990>
352. Sacépé B., Chapelier C., Baturina T.I., Vinokur V.M., Baklanov M.R., Sanque M. Pseudogap in a thin film of a conventional superconductor // Nat. Commun., 1, 140, (2010) DOI: <https://doi.org/10.1038/ncomms1140>
353. Sacha K., Timmermans E. Self-localized impurities embedded in a one-dimensional Bose-Einstein condensate and their quantum fluctuations // Phys. Rev. A, 73, 063604, (2006) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.73.063604>
354. Seo K., Chen H.-d., Hu J. Complementary pair-density-wave and d-wave-checkerboard orderings in high-temperature superconductors // Phys. Rev. B, 78, 094510 (2008) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.094510>
355. Shaginyan V.R., Stephanovich V.A., Msezane A.Z., [Japaridze](#) G.S., [Popov](#) K.G. The Influence of Topological Phase Transition on the Superfluid Density of Overdoped Copper Oxides // Phys. Chem. Chem. Phys, 19, 21964, (2017) DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CP02720F>
356. Schafroth M.R. Superconductivity of a Charged Ideal Bose Gas // Phys. Rev., 100, 463 (1955) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.100.463>
357. Schleich W.P. Quantum optics in phase space, (Wiley-VCH, Berlin, 2001)
358. Schmidt V.V. The Physics of Superconductors, Muller P., Ustinov A.V. (eds.) Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, (1997)
359. Schrieffer J.R. Theory of Superconductivity, (Westview Press, Oxford, UK 1999)

360. Schrieffer J.R. (ed.) Handbook of High-Temperature Superconductivity. Theory and Experiment, J.S. Brooks Associated Ed., Springer, (2007), 626 p, Springer Science + Business Media, LLC.
361. Schüttler H.-B., Holstein T. Dynamics and transport of a large acoustic polaron in one dimension // Ann. Phys., 166, 93, (1986)
362. Schüttler H.-B., Pao G.-H. Isotope Effect in d-Wave Superconductors // Phys. Rev. Lett., 75, 4504, (1995) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.4504>
363. Schultz T.D. Slow Electrons in Polar Crystals: Self-Energy, Mass, and Mobility // Phys. Rev., 116, 526, (1959) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.116.526>
364. Schuster G.B. Long-Range Charge Transfer in DNA, (Heidelberg: Springer, 2004)
365. Selyugin O.V., Smondyrev M.A. Phase Transition and Padé Approximants for Fröhlich Polarons // Phys. Status Solidi B, 155, 155, (1989) DOI: <https://doi.org/10.1002/pssb.2221550114>
366. Shanenko A.A., Smondyrev M.A., Devreese J.T. Stabilization of Bipolarons by Polaron Environment // Solid St. Comm., 98, 1091, (1996) DOI: [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(96\)00077-4](https://doi.org/10.1016/0038-1098(96)00077-4)
367. Shaw P.B., Whitfield G. Vibrational excitations of a one-dimensional electron-phonon system in strong coupling // Phys. Rev. B, 17, 1495, (1978) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.17.1495>
368. Shen K.M., Ronning F., Lu D.H., Lee W.S., Ingle N.J.C., Meevasana W., Baumberger F., Damascelli A., Armitage N.P., Miller L.L., Kohsaka Y., Azuma M., Takano M., Takagi H., Shen Z.-X. Missing quasiparticles and the chemical potential puzzle in the doping evolution of the cuprate superconductors // Phys. Rev. Lett., 93, 267002, (2004) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.267002>

369. Shimamura S., Matsura M. Internal-motion dependence of self-trapping of a Wannier exciton // Solid State Communications, 45, 547-550, (1983) DOI: [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(83\)90133-3](https://doi.org/10.1016/0038-1098(83)90133-3)
370. Silsbee F.B. Note on electrical conduction in metals at low temperatures // J. Franklin Inst., 184, 111, (1917)
371. Sinha K.P., Kakani S.L. Fermion local charged boson model and cuprate Superconductors, Proceedings – National Academy of Sciences, India. Section A, Physical Sciences 72, 153, (2002)
372. Smilde H.J.H., Golubov A.A., Rijnders A.G., Dekkers J.M., Harkema S., Blank D.H.A., Rogalla H., Hilgenkamp H. Almixtures to d-Wave Gap Symmetry in Untwinned YBa₂Cu₃O₇ Superconducting Films Measured by Angle-Resolved Electron Tunneling // Phys. Rev. Lett., 95, 257001, (2005) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.957001>
373. Smondyrev M.A., Fomin V.M. Pekar-Fröhlich bipolarons. In: Polarons and applications, Proceedings in Nonlinear Science, Lakhno V.D. (ed.), (Wiley, 1994).
374. Smondyrev M.A., Shanenko A.A., Devreese J.T. [Stability criterion for large bipolarons in a polaron-gas background](#) // Phys. Rev. B, 63, 024302, (2000) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.024302>
375. Snider E., Dasenbrock N., McBride R., Ddebessai M., Vindana H., Vencatasamy K., Lamber K.V., Salamat A., Dias R.P. Room-temperature superconductivity in a carbonaceous sulfur hydride // Nature, 586, 373-377, (2020) DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2801-z>
376. Snoke D., Kavoulakis G.M. Bose-Einstein condensation of excitons in Cu₂O: progress over 30 years // Reports on Progress in Physics, 77, 116501, (2014) DOI: [10.1088/0034-4885/77/11/116501](https://doi.org/10.1088/0034-4885/77/11/116501)
377. Sochnikov I., Shaulov A., Yeshurun Y., Logvenov G., Božovič I. Large oscillations of the magnetoresistance in nanopatterned high-

- temperature super- conducting films // Nature Nanotech. 5, 516 (2010)
DOI: <https://doi.org/10.1038/nnano.2010.111>
378. Somayazulu M., Ahart M., Mishra A.K., Geballe Z.M., Baldini M., Meng Y., Struzhkin V.V., Hemley R.J. Evidence for Superconductivity above 260 K in Lanthanum Superhydride at megabar pressures // Phys. Rev. Lett., 122(2), 027001, (2019) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.027001>
379. Song K.S., Williams R.T. Self-Trapped Excitons, (second edition), Springer, (1996), 401 p.
380. Song Y., Dai P. High-Temperature Superconductors in «Neutron Scattering-Magnetic and Quantum Phenomena», By Fernandez-Alonzo F., Price D.L. (eds.) v.48, «Experimental Methods in the Physical Sciences», Treatise Lucatorto T., Baldwin K., Yates J.T. (eds.) p.145-193, Elsevier, Amsterdam, (2015)
381. Staley N.E., Liu Y. Manipulating superconducting fluctuations by the Little-Parks-de Gennes effect in ultrasmall Al loops // PNAS, 109(37), 14819-14823, (2012) DOI: <https://doi.org/10.1073/pnas.1200664109>
382. Starikov E.B., Lewis J.P., Tanaka S. Modern methods for theoretical physical chemistry of biopolymers, (Elsevier: Amsterdam, Boston, Tokyo, 2006)
383. Storm A.J., Van Noort J., de Vries S., Dekker C. Insulating behavior for DNA molecules between nanoelectrodes at the 100 nm length scale // Appl. Phys. Lett., 79, 3881, (2001) DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1421086>
384. Sumi A. Phase Diagram of an Exciton in the Phonon Field // J. Phys. Soc. Jpn., 43, 1286-1294, (1977) DOI: <https://doi.org/10.1143/JTPJ.43.1286>
385. Svartholm N. (ed.) Elementary particle physics, (Stokh., 1969)

386. Tacon M. Lee, Bosak A., Souliou S.M., Dellea G., Loew T., Heid R., Bohnen K-P., Chiringhelli G., Krisch M., Keimer B. Inelastic X-ray scattering in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$ reveals giant phonon anomalies and elastic central peak due to charge-density wave formation // *Nat. Phys.*, 10, 52-58, (2014) DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys2805>
387. Taillefer L. High-temperature superconductivity: Electrons scatter as they pair // *Nature Physics*, 2, 809-810, (2006) DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys478a>
388. Tallon J.L., Islam R.S., Storey J., Williams G.V.M., Cooper J.R. Isotope Effect in the Superfluid Density of High-Temperature Superconducting Cuprates: Stripes, Pseudogap, and Impurities // *Phys. Rev. Lett.*, 94, 237002, (2005) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.237002>
389. Tempere J., Casteels W., Oberthaler M.K., Knoop S., Timmermans E., Devreese J.T. Feynman path-integral treatment of the bec-impurity polaron // *Phys. Rev. B*, 80, 184504, (2009) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.184504>
390. Thakur S., Biswas D., Sahadev N., Biswas P.K., Balakrishnan G., Maiti K. Complex spectral evolution in a BCS superconductor, ZrB_{12} // *Sci. Rep.*, 3, 3342, (2013) DOI: <https://doi.org/10.1038/srep03342>
391. Timusk T., Statt B. The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey // *Rep. Progr. Phys.*, 62, 61-122, (1999) DOI: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/62/1/002>
392. Tinkham M. Introduction to superconductivity, McGraw-Hill Book Company, 1975
393. Tisza L. Transport Phenomena in Helium II // *Nature*, 141, 913, (1938) DOI: <https://doi.org/10.1038/141913a0>
394. Tkach M.V., Seti J.O., Voitsekhivska O.M., Pytiuk O.Y. Renormalized energy of ground and first excited state of Frohlich

- polaron in the range of weak coupling // Condensed Matter Physics, 18, 33707,1-12, (2015)
395. Tohyama T. Recent progress in physics of high-temperature superconductors. //Jpn. J. Appl. Phys., 51, 010004, (2012) DOI: <https://doi.org/10.1143/JJAP.51.010004>
396. Toyota N., Land M., Müller J. Low dimensional molecular metals // Springer series in solid-state sciences, 154. Springer; GmbH & Co., Berlin (2007)
397. Toyozawa Y. Self-Trapping of an Electron by the Acoustical Mode of Lattice Vibration. I // Progr. Theor. Phys., 26, 29, (1961) DOI: <https://doi.org/10.1143/PTP.26.29>
398. Uemura Y.J., Luke G.M., Sternlieb B.J., Brewer J.H., Carolan J.F., Hardy W.N., Kadono R., Kempton J.R., Kiefl R.F., Kreitzman S.R., Mulhern P., Riseman T.M., Williams D.Ll., Yang B.X., Uchida S., Takagi H., Gopalakrishnan J., Sleight A.W., Subramanian M.A., Chien C.L., Cieplak M.Z., Xiao Gang, Lee V.Y., Statt B.W., Stronach C.E., Kossler W.J., Yu X.H. Universal correlations between T_c and n_s/m^* (carrier density over effective mass) in high- T_c cuprate superconductors // Phys. Rev. Lett., 62, 2317, (1989) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.2317>
399. Uemura Y.J., Le L.P., Luke G.M., Sternlieb B.J., Wu W.D., Brewer J.H., Riseman T.M., Seaman C.L., Maple M.B., Ishikawa M., Hinks D.G., Jorgensen J.D., Saito G., Yamochi H. Basic similarities among cuprate, bismuthate, organic, Chevrel-phase, and heavy-fermion superconductors shown by penetration-depth measurements // Phys. Rev. Lett., 66, 2665, (1991) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.66.2665>
400. Uemura Y.J. Bose-Einstein to BCS crossover picture for high- T_c cuprates // Phys. C Supercond., 282–287,194, (1997) DOI: https://doi.org/10.1007/3-540-46511-1_12

401. Vansant P., Smondyrev M.A., Peeters F.M., Devreese J.T. Exact equations for bipolarons in the strong-coupling limit // *J. Phys. A*, 27, 7925, (1994) DOI: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/27/23/035>
402. Varelogiannis G. Orthorhombicity mixing of s-and d-gap components in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ without involving the chains // *Phys. Rev. B*, 57, R732, (1998) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.R732>
403. Verbist G., Peeters F.M., Devreese J.T. Large bipolarons in two and three dimensions // *Phys. Rev. B*, 43, 2712, (1991) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.2712>
404. Verbist G., Smondyrev M.A., Peeters F.M., Devreese J.T. Strong-coupling analysis of large bipolarons in two and three dimensions // *Phys. Rev. B*, 45, 5662, (1992) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.45.5262>
405. Veta M., Kanzaki H., Toyozawa K., Hanamura E. *Excitonic Processes in Solids*, Springer, Berlin, (1986)
406. Vidmar L., Bonča J., Maekawa S., Tohyama T. Bipolaron in the t - J Model Coupled to Longitudinal and Transverse Quantum Lattice Vibrations // *Phys. Rev. Lett.*, 103, 186401, (2009) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.186401>
407. Vignolle B., Carrington A., Cooper R.A., French M.M.J. Quantum oscillations in an overdoped high- T_c superconductor // *Nature*, 455, 952, (2008) DOI: [10.1038/nature07323](https://doi.org/10.1038/nature07323)
408. Vishik I.M., Lee W. S., He R-H, Hashimoto M., Hussain Z., Devereaux T.P., Shen Z-X. ARPES studies of cuprate Fermiology: superconductivity, pseudogap and quasiparticle dynamics // *New J. Phys.*, 12, 105008, (2010) DOI: [10.1088/1367-2630/12/10/105008](https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/10/105008)
409. Vishik I.M., Lee W.S., Schmitt F., Moritz B., Sasagawa T., Uchida S., Fujita K., Ishida S., Zhang C., Devereaux T.P., Shen Z.X. Doping-dependent nodal Fermi velocity of the high-temperature superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ revealed using high-resolution angle-

- resolved photoemission spectroscopy // Phys. Rev. Lett., 104, 207002, (2010) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.207002>
410. Voityuk A.A. Charge transfer in DNA: Hole charge is confined to a single base pair due to solvation effects // J. Chem. Phys., 122, 204904, (2005) DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1924551>
411. Voityuk A.A. Are Radical Cation States Delocalized over GG and GGG Hole Traps in DNA? // J. Phys. Chem., 109, 10793, (2005) DOI: <https://doi.org/10.1021/jp050985c>
412. Wakimoto S., Lee S., Gehring P.M., Birgeneau R.J., Shirane G. Neutron Scattering Study of Soft Phonons and Diffuse Scattering in Insulating $\text{La}_{1.95}\text{Sr}_{0.05}\text{CuO}_4$ // J. Phys. Soc. Jpn., 73, 3413-3417, (2004) DOI: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.73.3413> .
413. Wang Y., Agterberg D.F., Chubucov A. Interplay between pair- and charge-density-wave orders in underdoped cuprates // Phys. Rev. B, 91, 115103, (2015) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.115103>
414. Wang Y., Agterberg D.F., Chubucov A. Coexistence of charge-density-wave and pair-density-wave orders in underdoped cuprates // Phys. Rev. Lett., 114, 197001, (2015) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.197001>
415. Wentzel G. Zur Paartheorie der Kernkrafte // Helv. Phys. Acta, 15, 111, (1942)
416. Williams J.M., Ferraro J.R., Thorn R.J., Carlson K.D., Geiser U., Wang H.H., Kini A.M., Whangbo M.H. Organic Superconductors (Including Fullerenes: Synthesis, Structure, Properties, and Theory), (Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992).
417. Wu Dong-Ho, Sridhar S. Pinning forces and lower critical fields in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ crystals: Temperature dependence and anisotropy // Phys. Rev. Lett., 65, 2074, (1990) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.2074>

418. Wu T., Mayaffre H., Krämer S., Horvatič M., Berthier C., Hardy W.N., Liang R., Bonn D.A., Julien M.-H. Magnetic-field-induced charge-stripe order in the high temperature superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_4$ // *Nature*, 477, 191-194, (2011) DOI: <https://doi.org/10.1038/nature10345>
419. Wu T., Mayaffre H., Krämer S., Horvatič M., Berthier C., Kuhns P.L., Reyes A.P., Liang R., Hardy W.N., Bonn D.A., Julien M.-H. Emergence of charge order from the vortex state of high temperature superconductor // *Nat. Commun.*, 4, 2113, (2013) DOI: [10.1038/ncomms3113](https://doi.org/10.1038/ncomms3113)
420. Wu T., Mayaffre H., Krämer S., Horvatič M., Berthier C., Hardy W.N., Liang R., Bonn D.A., Julien M.-H. Incipient charge order observed by NMR in the normal state of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ // *Nat. Commun.*, 6, 6438 (2015) DOI: [10.1038/ncomms7438](https://doi.org/10.1038/ncomms7438)
421. Yelland E.A., Singleton J., [Mielke](#) C.H., [Harrison](#) N., [Balakirev](#) F.F., [Dabrowski](#) B., [Cooper](#) J.R. Quantum oscillations in the underdoped cuprate $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ // *Phys. Rev. Lett.*, 100, 047003, (2008) DOI: [10.1103/PhysRevLett.100.047003](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.047003)
422. Yokoya T., Chainani A., Kiss T., Shin S., Hirata K., Kameda N., Tamegai T., Nishio T., Uwe H. High-resolution photoemission study of low- T_c superconductors: Phonon-induced electronic structures in low- T_c superconductors and comparison with the results of high- T_c cuprates // *Physica C*, 378-381, 97-101, (2002) DOI: [https://doi.org/10.1016/S0921-4534\(02\)01389-8](https://doi.org/10.1016/S0921-4534(02)01389-8)
423. Yoo K.-H., Ha D. H., Lee J.-O., Park J. W., Kim Jinhee, Kim J. J., Lee H.-Y., Kawai T., Han Yong Choi, Electrical Conduction through Poly(dA)-Poly(dT) and Poly(dG)-Poly(dC) DNA Molecules // *Phys. Rev. Lett.*, 87, 198102, (2001) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.198102>

424. Zaanen J. Superconductivity: why the temperature is high // Nature 430, 512 (2004) DOI: <https://doi.org/10.1038/430512a>
425. Zaanen J. Condensed-matter physics: Superconducting electrons go Missing // Nature, 536, 282, (2016) DOI: <https://doi.org/10.1038/536282a>
426. Zech D., Keller H., Conder K., Kaldis E., Liarokapis E., Poulakis N., Müller K.A. Site-selective oxygen isotope effect in optimally doped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ // Nature, 371, 681-683, (1994) DOI: <https://doi.org/10.1038/371681a0>
427. Zelli M., Kallin C., Berlinsky A.J. Quantum oscillations in a π -striped superconductor // Phys. Rev. B, 86, 104507, (2012) DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.104507>
428. Zhang Yan-Min, Ze Cheng, Study of Two-Mode Squeezed Magnetopolarons // Commun. Theor. Phys., 47, 747-751, (2007)
429. Zhao G.-M., Hunt M., Conder K., Keller H., Müller K. Oxygen isotope effects in the manganites and cuprates: Evidence for polaronic charge carriers. // Phys. C Supercond., 282–287 (Pt 1), 202–205, (1997)
430. Zhou X.J., [Yoshida T.](#), [Lanzara](#), [Bogdanov P.V.](#), [Kellar S.A.](#), [Shen K.M.](#), [Yang W.L.](#), [F. Ronning F.](#), [Sasagawa T.](#), [Kakeshita T.](#), [Noda T.](#), [Eisaki H.](#), [Uchida S.](#), [Lin C.T.](#), [Zhou F.](#), [Xiong J.W.](#), [Ti W.X.](#), [Zhao Z.X.](#), [Fujimori](#), [Hussain Z.](#), [Shen Z.-X.](#) Universal nodal Fermi velocity // Nature, 423, 398, (2003) DOI: <https://doi.org/10.1038/423398a>
431. Zhou P., Chen L., Liu Y., Sochnikov I., Bollinger A.T., Han M.-G., Zhu Y., He X., Božovič I., Natelson D. Electron pairing in the pseudogap state revealed by shot noise in copper oxide junctions // Nature, 572, 493–496, (2019) DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1486-7>

432. Ziman J.M. Electrons and phonons. (Claredon Press, Oxford, 1960)
433. Zwerger W (ed.) The BCS-BEC Crossover and the Unitary Fermi Gas Lecture Notes in Physics: Springer, (Berlin, Heidelberg, 2012).

Оглавление

| | |
|---|----|
| Предисловие | 3 |
| Введение | 7 |
| 1. История вопроса | 7 |
| 2. Полярон и фундаментальные проблемы нерелятивистской квантовой теории поля | 13 |
| Глава 1. Анзац Пекара и проблема сильной связи в теории полярона | 25 |
| 1. Введение. Анзац Пекара..... | 25 |
| 2. Бескоординатный гамильтониан. Слабая связь..... | 31 |
| 3. Бескоординатный гамильтониан. Общий случай..... | 33 |
| 4. Предел слабой связи в теории Тулуба | 36 |
| 5. Сильная связь | 37 |
| 6. Индуцированный заряд трансляционно-инвариантных поляронов и поляронов с нарушенной трансляционной симметрией | 40 |
| 7. Фононное взаимодействие электронов в трансляционно- инвариантной теории | 42 |
| 8. Биполароны промежуточной силы связи | 45 |
| 9. Биполарон сильной связи..... | 47 |
| 10. Фононное взаимодействие электронов в трансляционно- инвариантной теории сильной связи..... | 50 |
| 11. Функционал основного состояния. Анзац Тулуба | 53 |
| 12. Дискуссия о полноте теории Тулуба | 58 |
| 13. Следствия, вытекающие из существования трансляционно- инвариантных поляронов и биполаронов..... | 61 |
| 14. Методы квантовой теории поля и ТИ-поляроны | 65 |
| 15. Трансляционно – инвариантные экситоны | 67 |

| | |
|--|-----------|
| Глава 2. Полярон большого радиуса Холстейна и проблема спонтанного нарушения симметрии..... | 80 |
| 1. Введение | 80 |
| 2. Полярон Холстейна в пределе сильной связи. Нарушенная трансляционная инвариантность..... | 81 |
| 3. Трансляционно–инвариантная теория..... | 83 |
| 4. Случай слабой связи..... | 84 |
| 5. Случай сильной связи | 85 |
| 6. ТИ-полярон Холстейна и проблема квантования в окрестности Классического решения..... | 87 |
| 7. Трансляционно-инвариантный биполярон в модели Холстейна | 91 |
| 8. Трансляционно-инвариантная теория биполярона | 93 |
| 9. Вариационный расчёт энергии биполяронного состояния | 95 |
| 10. О возможности биполяронных состояний в дискретных цепочках | 98 |

| | |
|---|------------|
| Глава 3. Трансляционно-инвариантные биполяроны и сверхпроводимость | 106 |
| 1. Случай слабого ЭФВ. Теория БКШ..... | 106 |
| 2. Гамильтониан Пекара-Фрёлиха. Канонические преобразования..... | 110 |
| 3. Энергетический спектр ТИ-биполярона | 114 |
| 4. Неидеальный газ ТИ-биполяронов | 117 |
| 5. Статистическая термодинамика газа ТИ-биполяроно низкой плотности | 122 |
| 6. Статистическая термодинамика 1D газа ТИ-биполяронов..... | 128 |
| 7. Токовые состояния ТИ-биполяронного газа..... | 133 |
| 8. Термодинамические свойства ТИ – биполяронного газа в магнитном поле | 136 |

| | |
|--|------------|
| 9. Трансляционно – инвариантные биполярны и псевдощелевая фаза | 144 |
| 10. Скейлинговые соотношения | 153 |
| Глава 4. Сравнение с экспериментом | 156 |
| 1. Термодинамические эксперименты | 156 |
| 2. Спектроскопические эксперименты | 167 |
| 3.Изотопический эффект..... | 184 |
| 4.Заключительные замечания | 191 |
| Глава 5. Движущийся ТИ-биполяронный бозе-конденсат | 195 |
| 1. Введение | 195 |
| 2. Движущийся бозе-конденсат ТИ-биполяронов..... | 196 |
| 3. Бозе конденсат в магнитном поле | 199 |
| 4. Эффект Литтла–Паркса..... | 201 |
| Глава 6. Трансляционно-инвариантные биполярны и волны зарядовой плотности | 206 |
| 1. Трансляционно-инвариантные биполярны и волны зарядовой плотности в высокотемпературных сверхпроводниках . | 206 |
| 2. Трансляционно-инвариантные биполярны и пиннинг ВЗП..... | 212 |
| 3. Странные металлы | 214 |
| Послесловие..... | 217 |
| Приложения: | |
| А. Гамильтониан H_1 | 218 |
| Б. К решению уравнения (3.10), Гл. 1 | 218 |
| В. Аналитические свойства функции $D(s)$ | 219 |

| | |
|---|-----|
| Г. Расчёт энергии отдачи ΔE | 220 |
| Д. Сжатые состояния | 222 |
| Е. О «неполноте» трансляционно-инвариантной теории полярона | 226 |
| Ж. Переход от дискретного к континуальному гамильтониану Холстейна | 228 |
| З. Об экранированном взаимодействии ТИ-биполяронов | 231 |
| И. Аномалия Кона..... | 232 |
| Предметный указатель | 234 |
| Литература..... | 237 |

