

ПОЛЯРОНЫ

ПОД РЕДАКЦИЕЙ
Ю. А. ФИРСОВА



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
Москва 1975

Полярны. Сборник под ред. Ю. А. Фирсова. Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», 1975.

Данная книга посвящена теории полярнов. В ней с единой точки зрения излагаются основные теоретические методы, используемые для описания взаимодействия электронов с колебаниями решетки при сильной, промежуточной и слабой связи и при произвольной ширине «исходной» (не перенормированной за счет электрон-фононного взаимодействия) разрешенной энергетической зоны. Подробно изучаются как полярнон большого, так и полярнон малого радиуса. Излагается общая теория кинетических и оптических явлений в слабо легированных полупроводниках при зонном, туннельном и перескоковом механизмах переноса. Особенное внимание уделено тем аспектам теории, которые не могут быть изучены в рамках стандартного кинетического уравнения. Теория применяется к полярнонным полупроводникам, т. е. к полупроводникам, носителями тока в которых являются полярны. Обсуждается вопрос о применимости моделей полярнонов большого и малого радиусов к различным веществам с ионной решеткой.

Книга состоит из двух частей: часть I. *Дж Аппель*, Полярны, перевод с английского А. Г. Аронова под редакцией Ю. А. Фирсова, часть II. *Ю. А. Фирсов*, Полярны малого радиуса. Явления переноса.

Рис. 69, табл. 4, библиогр. 424 названия.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
-----------------------	---

ЧАСТЬ I

ПОЛЯРОНЫ

Дж. Анпель

(перевод с английского А. Г. Аронова)

Глава I

Введение	13
--------------------	----

§ 1. Поляроны большого или малого радиуса?	14
--	----

Глава II

Собственные состояния полярона большого радиуса	20
---	----

§ 2. Гамильтониан Фрелиха	20
-------------------------------------	----

§ 3. Слабая и промежуточная сила связи	25
--	----

§ 4. Сильная связь	30
------------------------------	----

§ 5. Метод интегралов по траекториям	37
--	----

§ 6. Метод функций Грина	46
------------------------------------	----

Глава III

Подвижность поляронов большого радиуса	52
--	----

§ 7. Постановка задачи	52
----------------------------------	----

§ 8. Приближение уравнения Больцмана	54
--	----

§ 9. Приближение матрицы плотности	64
--	----

§ 10. Эксперимент	78
-----------------------------	----

Глава IV

Собственные состояния полярона малого радиуса	93
---	----

§ 11. Зоны поляронов малого радиуса при $T = 0$	95
---	----

§ 12. Зоны поляронов малого радиуса при $T \neq 0$	108
--	-----

§ 13. Нарушение зонной модели для полярона малого радиуса. Локализованные поляроны малого радиуса	117
---	-----

Глава V

Подвижность поляронов малого радиуса	134
--	-----

§ 14. Различные теории явлений переноса поляронами малого радиуса	134
---	-----

§ 15. Дрейфовая подвижность на основе обычной теории явлений переноса	137
---	-----

§ 16. Дрейфовая подвижность, полученная на основе формулы Кубо	146
§ 17. Холловская подвижность	161
§ 18. Высокочастотная подвижность	171
§ 19. Термо-э. д. с.	178
§ 20. Эксперимент	181

ЧАСТЬ II

ПОЛЯРОНЫ МАЛОГО РАДИУСА. ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА

Ю. А. Фирсов

Введение	207
----------	-----

Глава I

Математический формализм для описания процессов переноса в узельном (R)- и в смешанном (k — R)-представлениях. Общие формулы для электропроводности, их стохастическая интерпретация	220
--	-----

§ 1. Вводные замечания	220
§ 2. Представление формулы Кубо для электропроводности через коррелятор дипольных моментов	221
§ 3. Исходный гамильтониан при произвольной силе связи электронов с фононами	224
§ 4. Каноническое преобразование в теории ПМР	227
§ 5. Описание движения носителя тока по узлам решетки с помощью функции условной вероятности	231
§ 6. Результаты графической техники в узельном представлении	233
§ 7. Приближенные методы решения системы уравнений для функций $P_{mm'}$	236
§ 8. Основная формула для дрейфовой подвижности ПМР	242
§ 9. Различные способы вычисления подвижности в узельном представлении и степень их точности	245
§ 10. Общие выражения для подвижности в (k — R)-представлении	249
§ 11. Связь с методом КП	254
§ 12. Стохастическая интерпретация функций $P(k, k', t)$ и $F(k, R, t)$	256
§ 13. Обсуждение полученных результатов	259

Глава II

Статическая электропроводность	262
--------------------------------	-----

§ 1. Вводные замечания	262
§ 2. Вероятности перескоков при высоких температурах	264
§ 3. Подвижность поляронов малого радиуса при высоких температурах	267
§ 4. Время релаксации для поляронов малого радиуса	270
§ 5. Вероятности недиагональных переходов при низких температурах	274
§ 6. Подвижность поляронов малого радиуса при низких температурах	276

§ 7. Подвижность поляронов малого радиуса в области промежуточных температур	278
§ 8. Локальные колебания, обусловленные локализацией электрона на узле	280

Глава III

Высокочастотная проводимость	284
§ 1. Вводные замечания	284
§ 2. «Внутризонное» поглощение	285
§ 3. Междузонные оптические переходы	289

Глава IV

Явления переноса в сильном электрическом поле	297
§ 1. Вводные замечания	297
§ 2. Выражение для тока в сильном электрическом поле	299
§ 3. Представление электропроводности в виде ряда по степеням W_E/Ω_E	304
§ 4. Общие формулы для электропроводности ПМР в произвольном электрическом поле	310
§ 5. Случай узких исходных зон (малые J) и не очень сильных электрических полей	313
§ 6. Случай не слишком узких зон и достаточно сильных электрических полей	315
§ 7. Обсуждение полученных результатов	316

Глава V

Эффект Холла	320
§ 1. Вводные замечания	320
§ 2. Постановка задачи о вычислении холловской подвижности	326
§ 3. Приближенный способ нахождения перескокового вклада в μ_{xy} для ПМР	329
§ 4. Вывод обобщенного кинетического уравнения переноса в произвольных магнитном и электрическом полях	332
§ 5. Процедура линеаризации по внешнему электрическому полю	336
§ 6. Общие выражения для $\mu_{xy}^{(a)}$ в теории ПМР	340
§ 7. Результаты вычислений μ_{xy}^t для ПМР	346
§ 8. Холловская подвижность в теории ПМР	349
§ 9. Заключительные замечания	360

Математические приложения	365
--	------------

П.1. Формула Кубо в представлении операторов дипольного момента	365
П.2. Графическая техника в узельном представлении для ПМР	367
П.3. Экспоненциальная малость вероятностей недиагональных переходов $W_{m_2, m_1}^{m_2, m_1}$	379

П.4. Анализ графиков для вершин $\Gamma_{\text{тип}}^{\text{тип}}$	384
П.5. Оценка точной функции распределения полярона по импульсам $n(k)$	386
П.6. Графическая техника при наличии пространственной дисперсии	389
П.7. Вычисление вероятности перескока $W_b(g)$ при произвольных η_2	394
П.8. Вычисление $n(k_{\perp})$ для ПМР	401
П.9. Элементы графической техники в k -представлении при $N \neq 0$, $E \neq 0$	402
Литература	410

ПРЕДИСЛОВИЕ

Полярны — это носители тока в веществах с ионным типом связи, находящиеся в особом автолокализованном состоянии, которое возникает за счет поляризации ими своего окружения в решетке. Естественно, что те конденсированные среды, в которых перенос осуществляется поляронами, могут сильно отличаться от обычных веществ по своим кинетическим, оптическим, фотоэлектрическим и прочим свойствам.

Различают полярны большого и малого радиуса. В первом случае радиус полярона много больше постоянной решетки, а во втором — меньше ее. В зависимости от величины безразмерной константы связи α , характеризующей силу электрон-фононного взаимодействия, для полярнов большого радиуса используется следующая условная классификация: $\alpha < 1$ — случай слабой связи, $1 < \alpha < 10$ — случай промежуточной связи, $\alpha > 10$ — случай сильной связи.

Предлагаемая вниманию читателей книга в основном посвящена изложению теоретических представлений о поляронах, однако в ней отражены и некоторые наиболее важные экспериментальные достижения в этой области.

Необходимость в такой книге уже давно назрела.

Во-первых, единственная книга на эту тему, монография С. И. Пекара «Исследования по электронной теории кристаллов», вышедшая более 20 лет тому назад, была посвящена теории полярнов большого радиуса при очень сильной связи. Все достижения за последние 20 лет в теории полярнов большого радиуса в случае слабой и промежуточной связи и в теории полярнов малого радиуса в ней, естественно, не отражены.

Во-вторых, за последние 15—20 лет были проведены обширные экспериментальные исследования новых типов веществ, носители тока в которых по современным представлениям должны были бы находиться в полярном состоянии. К ним прежде

всего относятся сильно ионные кристаллы, оксиды и халькогениды переходных металлов и редких земель, молекулярные кристаллы, органические полупроводники, стекла и т. д.

Итак, развитие теории поляронов тесно связано с современной тенденцией изучения новых веществ. Это, конечно, очень важный факт. Однако, когда мы говорим о значении теоретических исследований по физике поляронов, следует принимать во внимание и некоторые другие факторы.

Во-первых, методические успехи, достигнутые в этой области, несомненно, окажутся полезными в других областях теории.

Действительно, задача о поляроне большого радиуса является хорошей моделью для апробации приближенных математических методов квантовой теории поля, разработанных применительно к случаям сильной и промежуточной связи частицы с полем. Именно поэтому теорией поляронов занимались такие крупные специалисты по теории поля, как Р. Фейнман.

Задача о кинетике поляронов малого радиуса фактически сводится к построению микроскопической теории случайных блуждений по узлам решетки как классических, так и с учетом квантовых эффектов. Естественно, что в столь общей постановке эта задача должна представлять интерес для многих смежных областей, например при изучении диффузии легких атомов (или ионов) и экситонов малого радиуса.

Во-вторых, физические идеи, развитые в теории поляронов, оказались весьма плодотворными для понимания проблемы в целом ряде смежных областей. Так, например, понятие о поляроне стало широко использоваться в химии при описании сольватированных электронов. Конденсоны — это естественное обобщение поляронных концепций на случай гомеополярных кристаллов. На основании аналогии с поляроном была недавно сформулирована идея о новом типе стационарного автолокализованного состояния носителя тока — флуктуоне, который возникает в том случае, когда флуктуация какого-нибудь внутреннего параметра стабилизируется полем захваченного ею носителя тока. Изучено уже несколько видов флуктуонов — «магнитные поляроны» (особое состояние носителей тока в магнитных полупроводниках), флуктуоны в растворах и в системе газ — жидкость, фазоны (электрон, локализованный у гетерофазной флуктуации), флуктуоны вблизи критических точек и точек фазового перехода 2-го рода и т. д.

В последнее время стало ясно, что за возникновение автолокализованного состояния носителей тока на узле решетки могут быть ответственны многие физические обстоятельства:

- а) деформация решетки, приводящая к образованию поляронов малого радиуса,
- б) автолокализация за счет эффекта Яна — Теллера,
- в) поляризация спинового окружения и образование спин-поляронов малого радиуса или квазиосцилляторов;
- г) автолокализация за счет поляризации электронно-дырочных пар в диэлектрике Мотта.

Движение этих объектов по узлам решетки должно описываться с помощью тех же математических методов, какие были развиты в теории поляронов малого радиуса.

В случае сильной связи экситонов с фононами, которая реализуется во многих молекулярных кристаллах, рассмотрение тоже должно вестись с помощью методов, разработанных в теории поляронов. Не прекращаются попытки использовать идеи и методы теории поляронов для описания движения ионов, введенных в жидкий гелий.

Все вышесказанное позволяет утверждать, что знакомство с теорией поляронов может оказаться полезным для весьма широкого круга лиц, работающих в самых разных областях физики твердого тела.

Дадим теперь краткую характеристику книги и укажем на некоторые особенности ее построения.

В I части книги помещен перевод обзора Дж. Апеля «Поляроны», опубликованный в 1968 г. в американском журнале *Solid State Physics*, vol. 21; II часть написана редактором перевода и посвящена вопросу «Поляроны малого радиуса. Явления переноса».

Обзор Дж. Апеля «Поляроны», переведенный А. Г. Ароновым, достаточно полно охватывает все основные вехи в развитии теории поляронов вплоть до 1967 г. В обзоре дается достаточно полное представление о физических идеях и о математическом аппарате, используемом в поляронной теории. Однако следует иметь в виду, что многие детали математических вычислений в обзоре опущены, и это делает иногда его изучение трудным. Впрочем, в случае необходимости читатель всегда сможет обратиться к оригинальным работам, ссылки на которые можно найти в соответствующих местах обзора. Кстати, редактор счел

целесообразным расширить список литературы к этой части книги в основном за счет работ, появившихся после 1967 г. В дополнительный список литературы включены работы по теории поляронов большого радиуса, конденсонов, пьезоакустических поляронов, экситонов, сильно взаимодействующих с фононами, и флуктуонов. В тех случаях, когда удавалось найти обзор, посвященный соответствующей теме, в список литературы включались только основополагающие работы, данный обзор и работы, вышедшие после обзора.

Основные достижения в теории поляронов малого радиуса после 1965 г. и некоторые наиболее важные экспериментальные результаты, полученные в этой области за последние несколько лет, отражены во II части книги, написанной Ю. А. Фирсовым. По стилю изложения эта часть книги отличается от I части тем, что в ней содержится гораздо больше сведений о математическом аппарате, используемом в теории поляронов малого радиуса. Поэтому автор надеется, что этот обзор станет настольной книгой по теории сильной электрон-фононной связи в узкозонных полупроводниках, т. е. в полупроводниках с узкими разрешенными зонами. Автор пользуется случаем, чтобы выразить искреннюю благодарность своим коллегам В. В. Брыксину, Е. К. Кудинову и И. Г. Ланг за критический просмотр II части книги и ценные замечания.

Хотя основополагающие работы по теории поляронов большого радиуса и многие фундаментальные исследования по теории поляронов малого радиуса были выполнены в СССР, все обзоры и монографии по этим вопросам последние 20 лет выходили только за рубежом. Хотелось бы надеяться, что предлагаемая вниманию советских читателей книга «Поляроны» хотя бы частично восполнит этот пробел в нашей научной литературе.

Ю. А. Фирсов

ЧАСТЬ I
ПОЛЯРОНЫ

Дж. Appel

Перевод с английского
А. Г. Арнова

ГЛАВА I

ВВЕДЕНИЕ

Проблема поляронов есть проблема поведения медленного электрона проводимости (или дырки) в полярном кристалле, который поляризует — и тем самым искажает — ионную решетку в месте своего нахождения. Поляризация, в свою очередь, воздействует на электрон и понижает его энергию. Двигаясь через кристалл, электрон переносит вместе с собой область искажения решетки. Электрон вместе с сопровождающим его самосогласованным полем поляризации можно рассматривать как квазичастицу, называемую *поляроном*. Ее эффективная масса больше, чем эффективная масса блоховского электрона. Образование полярона есть следствие динамического электрон-решеточного взаимодействия, которое ответственно также за рассеяние заряженных носителей тока, перенормировку фононных частот и экранировку взаимодействия между носителями тока.

Концепция полярона была введена Пекаром [1], который впервые рассмотрел предельный адиабатический случай, когда электрон-решеточное взаимодействие столь сильно, что позволяет описать все наиболее существенные свойства стационарного полярона, исходя из представления о движении *локализованного* электрона в созданном им самим поляризационном поле.

Проблема поляронов — это классическая проблема физики твердого тела. Она восходит еще к 1933 г., когда Ландау [2], пытаясь объяснить свойства F-центров в NaCl, выдвинул идею об автолокализации электрона. Поляронные эффекты необходимо учитывать при рассмотрении всех электронных процессов в полярных полупроводниках, и в особенности при изучении явлений переноса и оптических эффектов. Кстати, полярон описывается очень простой моделью взаимодействия частицы с квантованным полем, поэтому при решении этой задачи впервые в физике твердого тела были использованы методы квантовой теории поля (см. работы Фрелиха с сотрудниками [3]).

На сегодняшний день мы имеем несколько адекватных теорий полярона, соответствующих различной силе электрон-решеточного взаимодействия. При теоретическом изучении подвижности поляронов встает один общий вопрос: как отделить эффекты рассеяния от эффекта перенормировки энергии. При слабом электрон-решеточном взаимодействии это легко сделать с помощью

уравнения Больцмана для квазичастиц, описывающего в этом случае перенос заряда. Метод матрицы плотности, использованный Фейнманом с сотрудниками [4], создает прочную теоретическую основу для теории подвижности поляронов большого радиуса в случае сильного взаимодействия. Прыжковую проводимость поляронов малого радиуса (ПМР) впервые рассмотрели Ямашита и Куросава [5, 5a] и Холстейн [6]. Эти авторы развили теорию возмущений, в которой интеграл перекрытия между локализованными соседями рассматривался как малое возмущение. Теория ПМР приводит к температурной и частотной зависимостям прыжковой подвижности, отличающимся от соответствующих зависимостей, даваемых обычной зонной теорией. Экспериментально эти вопросы исследованы гораздо слабее, так как существует слишком мало хороших экспериментальных работ, которые проливали бы дополнительный свет на характерные свойства поляронов *).

В этой части книги мы попытаемся достаточно полно изложить современные представления о характере взаимодействия одного избыточного электрона (или дырки) с полярным кристаллом. Книга в основном посвящена собственным состояниям поляронов и их подвижности в постоянном и переменном слабых электрических полях. Эффекты, возникающие от взаимодействия поляронов друг с другом, например эффекты в вырожденных полярных полупроводниках, здесь рассматриваться не будут.

§ 1. Поляроны большого или малого радиуса?

Размер полярона определяется протяженностью искаженной области решетки, созданной избыточным электроном. В первом случае, т. е. в случае полярона большого радиуса, этот размер гораздо больше постоянной решетки. Поэтому задача нахождения собственных состояний полярона большого радиуса может быть упрощена, так как среду можно рассматривать как непрерывный колеблющийся диэлектрик, свойства которого определяются зависящей от частоты макроскопической диэлектрической постоянной. Во втором случае, когда размер искаженной области, окружающей избыточный электрон, мал, необходимо учитывать дискретность решетки. В обоих случаях математическое рассмотрение основывается на двух разных формах полного гамильтониана

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{lat} + \mathcal{H}_{int}, \quad (1.1)$$

где \mathcal{H}_{el} — электронная часть гамильтониана, состоящая из кинетической энергии электрона и его потенциальной энергии в периодической ионной решетке; \mathcal{H}_{lat} — сумма кинетической и по-

) В настоящее время в этом вопросе произошел существенный сдвиг. Появились эксперименты, в которых довольно ярко проявляются характерные свойства поляронов малого радиуса [1, 2*]. (Прим. ред.)

тенциальной энергий ионов решетки, а \mathcal{H}_{int} — электрон-решеточное взаимодействие, которое зависит от координат электрона, смещений решетки и деформации ионов. Обычно предполагается, что гамильтониан \mathcal{H}_{int} линеен по смещениям. Основная трудность в любой полярной теории состоит в том, что \mathcal{H}_{int} слишком велик, чтобы им можно было пренебречь при вычислении собственных состояний \mathcal{H} , а поэтому взаимодействие должно учитываться в нулевом порядке. В обычной зонной теории \mathcal{H}_{int} рассматривается как малое возмущение, приводящее к переходам между жесткими зонными состояниями, вычисленными для неискаженной решетки, т. е. к электрон-фононному рассеянию. В полярных веществах электрон-решеточное взаимодействие может быть настолько сильным, что оно будет приводить к явлению «автолокализации». Экспериментальное доказательство возможности автолокализации дырок было получено Кастнером и Кенцигом [7] с помощью спинового резонанса. Гамильтониан Фрелиха [8], используемый для описания полярона большого радиуса, основан на модели, в которой избыточный электрон взаимодействует с непрерывной диэлектрической средой, а не с кристаллической решеткой, содержащей один положительный и один отрицательный ион на одну элементарную ячейку. Член, описывающий взаимодействие в (1.1), имеет вид

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = - \int \mathbf{D}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{el}}) \mathbf{P}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = e \int \nabla_{\mathbf{r}} (|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{el}}|^{-1}) \mathbf{P}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.2)$$

и соответствует классическому выражению для взаимодействия между электроном, создающим индукцию,

$$\mathbf{D}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{el}}) = -e \nabla_{\mathbf{r}} (|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{el}}|^{-1})$$

и индуцированным продольным поляризационным полем $\mathbf{P}(\mathbf{r})$. Взаимодействие равно нулю для поперечных полей.

Полная продольная поляризация, обусловленная медленно движущимся электроном, состоит из двух частей

$$\mathbf{P}_{\text{tot}}(\mathbf{r}) = \mathbf{P}_{\text{ir}}(\mathbf{r}) + \mathbf{P}_{\text{opt}}(\mathbf{r}). \quad (1.3)$$

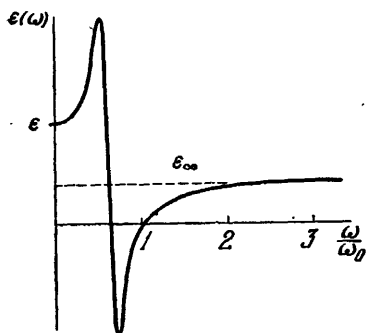
Разделение $\mathbf{P}_{\text{tot}}(\mathbf{r})$ на инфракрасную часть (часть поляризации, обусловленную относительным смещением ионов) и оптическую часть, учитывающую поляризацию каждого отдельного иона, соответствует наличию в продольной диэлектрической постоянной $\epsilon(\omega)$ низкочастотного и высокочастотного резонансов (рис. 1) [9, 9a, 9б]. Взаимодействие избыточного электрона через $\mathbf{P}_{\text{opt}}(\mathbf{r})$ малоинтересно, так как внутренние электроны следуют адиабатически за движением медленного избыточного электрона, т. е. оптическая (динамическая) часть поляризации всегда возбуждается вне зависимости от скорости движения электрона*). Поэтому это взаимодействие дает вклад в периодический потенциал

*) См. также § 5, гл. II в [3]. (Прим. ред.)

решетки в (1.1); этот член может быть учтен в приближении эффективной массы. Наиболее интересное с точки зрения электрон-решеточного взаимодействия поляризационное поле связано только с $\mathbf{P}_{\text{lr}}(\mathbf{r}) = \mathbf{P}(\mathbf{r})$. Чтобы выразить для ионной решетки связь между $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ и индукцией $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ через эффективную диэлектрическую постоянную, рассмотрим, во-первых, покоящийся пробный заряд, когда

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}_{\text{tot}}, \quad (1.4)$$

а во-вторых — пробный заряд, колеблющийся в жесткой ионной решетке (без смещений) с частотой, большей всех предельных частот оптических фононов, когда



$$\mathbf{D} = \epsilon_{\infty} \mathbf{E} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}_{\text{opt}}. \quad (1.5)$$

Здесь \mathbf{E} — вектор напряженности электрического поля. Из (1.4) и (1.5) можно найти разность между \mathbf{P}_{tot} и \mathbf{P}_{opt} , которая равна

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{r}) &= \mathbf{D}(\mathbf{r})/4\pi\epsilon^*, \\ \epsilon^{*-1} &= \epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon^{-1}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Рис. 1. Инфракрасный резонанс в вещественной части диэлектрической постоянной $\text{Re } \epsilon(0, \omega) = \epsilon(\omega)$ для NaCl. Диэлектрическая постоянная $\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} + \omega_1^2 (\epsilon - \epsilon_{\infty}) \times (\omega_1^2 - \omega^2) / [(\omega_1^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \gamma^2]$, где $\omega_1^2 = (\epsilon/\epsilon_0) \omega_0^2$ и γ — постоянная затухания. Для NaCl $\omega_0 = 4,88 \cdot 10^{13} \text{ сек}^{-1}$, $\epsilon_{\infty} = 2,33$, $\epsilon = 5,8$.

Это уравнение определяет эффективную диэлектрическую постоянную ϵ^* , обусловленную поляризационными смещениями ионов, через статическую и высокочастотную диэлектрические постоянные ϵ и ϵ_{∞} . Величина ϵ^* не есть просто разность $\epsilon - \epsilon_{\infty}$, так как смещение ионной решетки и соответствующее поляризационное поле $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ учитывает электронную поляризацию в той

мере, в какой она влияет на смещение ионов; это видно из (1.4) — (1.6).

Пусть электрическое поле есть поле, обусловленное точечным зарядом, величина которого медленно нарастает во времени («включается») в данной точке кристалла от 0 до e . Тогда \mathbf{P} есть поляризация, определенная после того, как ионы срелаксируют к своим новым положениям равновесия; при этом они деформируются вследствие электронной поляризации, и только после этого снимается поляризация электронных оболочек. Поляризация смещения $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ определяется динамическими свойствами ионной решетки через уравнения движения, которые, согласно Фрелиху [8], имеют вид

$$\gamma [\ddot{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) + \omega_0^2 \mathbf{P}(\mathbf{r})] = \mathbf{D}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\text{el}}), \quad (1.7)$$

где

$$\gamma^{-1} = \omega_0^2 / 4\pi e^* \quad (1.8)$$

и

$$\omega_0 = (\epsilon/\epsilon_\infty)^{1/2} \omega_t. \quad (1.9)$$

Частота продольного поляризованного поля ω_0 связана с помощью соотношения (1.9) с частотой поперечных колебаний ω_t (частотой остаточных лучей). Эта частота всегда больше чем ω_t , так как продольный оптический фонon сопровождается возникновением волны плотности заряда (продольное электрическое поле), что увеличивает жесткость системы из-за отталкивания*). Член в правой части уравнения (1.7), играющий роль источника, учитывает наличие избыточного электрона. В его отсутствии квантование продольного поляризованного поля приводит к обычному представлению решеточного гамильтониана в виде суммы по операторам фонonных чисел заполнения

$$\mathcal{H}_{\text{lat}} = \hbar\omega_0 \sum_q b_q^\dagger b_q$$

(в пренебрежении нулевыми колебаниями). После квантования поляризованного поля электрон-решеточное взаимодействие в уравнении (1.2) совпадает по форме с третьим членом гамильтониана Фрелиха (2.1). Собственные состояния полярона большого радиуса — это состояния блоховского типа, эффективная масса которых изменена вследствие динамического электрон-решеточного взаимодействия, приводящего к виртуальному испусканию и поглощению оптических фонonов.

Представление о поляроне малого радиуса (или локализованном поляроне) применимо, если радиус полярона, т. е. размер электронной волновой функции и самосогласованного поля, меньше постоянной решетки. Такое состояние может возникнуть при рассмотрении избыточного электрона в узкой зоне проводимости (или дырки в узкой валентной зоне) полярного вещества, если динамическое электрон-решеточное взаимодействие, определяемое некоторой константой связи (пропорциональной $(\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon^{-1})$) будет достаточно велико. Тогда блоховская волновая функция электрона соответствует скорее «локализованному» электрону в том смысле, что электрон долго находится вблизи одного иона перед тем, как перейти на следующий. Как часто происходит переход с одного иона на другой зависит от малого, но все же конечного резонансного интеграла. Если резонансный интеграл мал, а поляризованное поле, создаваемое электроном, велико из-за того, что разность $(\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon^{-1})$ не слишком мала по сравнению с единицей, то электрон может автолокализоваться.

*) О физических причинах различия между ω_t и ω_f подробнее см. в § 7, гл. II в [3]. (Прим. ред.)

При этом перекрытие между смещенными ионами становится настолько малым, а переходы между ионами — настолько редкими, что локализованное состояние оказывается почти стационарным. Волновая функция электрона и связанное с ним самоогласованное искажение решетки тогда ограничивается областью порядка элементарной ячейки.

Математическое рассмотрение проблемы полярона малого радиуса, впервые предпринятое Тябликовым [10], основывалось на приближении сильной связи по Блоху [11]. Учет смещения ионов решетки из их положения равновесия R_m приводит к тому, что член взаимодействия в поляронном гамильтониане (1.1) имеет вид

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = e \sum_m \{ [U_+(\mathbf{r} - \mathbf{X}_m) + U_-(\mathbf{r} - \mathbf{X}'_m)] - [U_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) + U_-(\mathbf{r} - \mathbf{R}'_m)] \}, \quad (1.10)$$

где m — номер ячейки, а U_+ и U_- — соответственно потенциалы в точке \mathbf{r} , создаваемые положительным ионом, находящимся в точке \mathbf{X}_m , и отрицательным ионом в точке \mathbf{X}'_m . В приближении сильной связи собственные состояния \mathcal{H} строятся как линейные комбинации локальных атомных функций. Каждая функция зависит от координат окружающих ионов, так как электрон искажает решетку в непосредственной окрестности. Поэтому электронные интегралы перекрытия, которые играют главную роль в блоховском приближении сильной связи, теперь дополнительно умножаются на интегралы перекрытия осцилляторных волновых функций решетки. Следовательно, эффективная масса полярона увеличивается. При конечных температурах берется термодинамическое среднее от осцилляторных интегралов перекрытия. Ямашита и Куросава [5], Холстейн [6] и Сьюэлл [12] нашли, что при достаточно высоких температурах поляронная зона становится настолько узкой, что зонная картина вообще перестает быть справедливой, так как неопределенность энергии, связанная с конечным временем жизни зонных поляронных состояний, становится сравнимой с шириной поляронной зоны. В этом случае в качестве стационарных состояний поляронов малого радиуса следует использовать упомянутые выше локализованные Ψ -функции, описывающие электрон, сидящий на узле. Движение электрона (квантовые переходы между такими состояниями) осуществляется путем перескоков, активированных фононами. Соответствующая дрейфовая подвижность экспоненциально растет с температурой по закону $\exp(-E_a/k_B T)$, где E_a — энергия активации для прыжка, в то время как подвижность зонного полярона уменьшается с температурой (из-за увеличения числа эффективных в рассеянии фононов) как

$$\{ \exp(\hbar\omega_0/k_B T) - 1 \}.$$

Вопрос о том, какая модель (поляроны большого или малого радиуса) лучше применима в данной физической ситуации, решается на основании энергетических соображений. Вопрос заключается в следующем: является ли выигрыш в энергии E_b за счет локализации электрона на данном узле решетки и смещения ионов решетки к новым равновесным положениям больше или меньше, чем энергия, отвечающая исходной ширине зоны. Последняя соответствует выигрышу в энергии одного электрона проводимости в жесткой решетке вследствие его тенденции делокализоваться. Эта энергия — порядка ширины зоны $2J$, где J — двухцентровый резонансный интеграл. Таким образом, критерий образования полярона малого радиуса [6] есть *)

$$E_b > 2J. \quad (1.11)$$

Для типичного полупроводника с узкими зонами (такого, как NiO), к которому, возможно, применима картина малого полярона, E_b — порядка 1 эв .

*) Критерий малости радиуса полярона может быть записан в виде

$$\frac{\Delta E}{2E_b} f(z) < 1, \quad (A)$$

где ΔE — ширина исходной зоны, $f(z)$ — некоторая функция от числа ближайших соседей z . Вопрос о виде $f(z)$ еще окончательно не решен, но, согласно [4*], $f(z) \approx z^{1/2}$. Для кубических кристаллов $\Delta E = 2zJ \equiv 12J$, т. е., согласно [4*], неравенство (A) можно переписать и так:

$$\frac{J}{E_b} z^{1/2} = \frac{J}{E_b} \sqrt{6} < 1. \quad (A')$$

(Прим. ред.)

ГЛАВА II

СОБСТВЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ ПОЛЯРОНА БОЛЬШОГО РАДИУСА

§ 2. Гамильтониан Фрелиха

Исходный гамильтониан, использованный в задаче о поляроне большого радиуса, имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m^*} + \hbar\omega_0 \sum_q b_q^+ b_q + \sum_q V_q [b_q^+ e^{iqr} - b_q e^{-iqr}], \quad (2.1)$$

где

$$V_q = i \frac{\hbar\omega_0}{qu^{1/2}} \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2}, \quad u = \left(\frac{2m^*\omega_0}{\hbar} \right)^{1/2} \quad (2.2)$$

и

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \frac{e^2 u}{\hbar\omega_0}. \quad (2.3)$$

Здесь \mathbf{r} — радиус-вектор электрона, а \mathbf{p} — его импульс. Эффективная масса m^* учитывает влияние периодического потенциала решетки на движение электрона, когда ионы находятся в своих равновесных положениях. Оболочки ионов не жесткие, и электронная поляризация, индуцированная медленным электроном проводимости, следует адиабатически за движением электрона, а поэтому она может рассматриваться как составная часть периодического потенциала. Операторы b_q , b_q^+ соответственно уничтожают и рождают продольный оптический фонон с энергией $\hbar\omega_0$ и волновым вектором q , где $q_i = (2\pi/La)n_i$. Здесь $i = 1, 2, 3$; $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{1}{2}(L-1)$, a^3 — объем кубической элементарной ячейки, а L^3 — число ячеек в объеме кристалла V (L предполагается для удобства четным). Каждая элементарная ячейка содержит один положительный и один отрицательный ион. Фононные операторы подчиняются коммутационным соотношениям для бозе-частиц

$$[b_q, b_q^+] = \delta_{qq'}, \quad [b_q, b_{q'}] = [b_q^+, b_{q'}^+] = 0. \quad (2.4)$$

Для того чтобы спектр гамильтониана \mathcal{H} был дискретным, в дальнейшем будет предполагаться, что объем V конечен. Предел $V \rightarrow \infty$ соответствует переходу к непрерывному спектру.

Гамильтониан (2.1) получен Фрелихом [8]. Чтобы найти уравнение движения (1.7) для поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, он использовал лагранжеву формулировку теории поля и затем применил стандартную процедуру квантования, что и позволило выразить гамильтониан решетки и гамильтониан взаимодействия, т. е. второй и третий члены в уравнении (2.1) соответственно через операторы рождения b_q^+ и уничтожения b_q квантованных волн поляризации. Электрон-решеточное взаимодействие в (2.1) имеет вид, аналогичный взаимодействию электронов с решеткой в металлах [13], что связано с тем, что поляризационное поле $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ и поле смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ прямо связаны друг с другом [14]

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = (N/V) e^* \mathbf{u}(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

Здесь N/V — число пар ионов в одном кубическом сантиметре, а $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ — относительное смещение ионов противоположных знаков около точки \mathbf{r} . Эффективный ионный заряд есть

$$e^* = (M\omega_0^2 V / 4\pi N)^{1/2} (1/e^*), \quad (2.6)$$

где M — приведенная масса ионов.

Основное предположение, сделанное при получении гамильтониана полярона большого радиуса, есть континуальное приближение: избыточный электрон взаимодействует с диэлектрическим континуумом, а не с кристаллической решеткой. Это — приемлемое приближение, если полярон, состоящий из электрона и индуцированной им поляризационной ямы, простирается на расстояние, много большее постоянной решетки. Тогда поле поляризационных смещений есть гладкая функция \mathbf{r} , и $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ может быть выражено через макроскопические диэлектрические постоянные ϵ_∞ и ϵ . Континуальное приближение для поляризационного поля, а следовательно и гамильтониан Фрелиха (2.1), теряет смысл, когда размер полярона становится сравнимым с постоянной решетки a . Для учета атомной структуры среды диэлектрические постоянные ϵ_∞ и ϵ , отвечающие континуальному приближению, должны быть заменены диэлектрической проницаемостью, зависящей от частоты и волнового вектора, которая определяется выражением

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}, \omega) = \epsilon(\mathbf{q}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.7)$$

или

$$\mathbf{P}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{4\pi} \left[1 - \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right] \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega), \quad (2.8)$$

где \mathbf{E} , \mathbf{D} и \mathbf{P} — продольные поля *).

*) Квантовомеханическое вычисление $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ без учета влияния локального поля можно найти в [15].

При $q \rightarrow 0$ вещественная часть $\varepsilon(q, \omega)$ описывается функцией, изображенной на рис. 1.

$$\lim_{q \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0} \operatorname{Re} \varepsilon(q, \omega) = \varepsilon \quad (\text{статическая диэлектрическая постоянная}), \quad (2.9)$$

$$\lim_{q \rightarrow 0, \omega \rightarrow \infty} \varepsilon(q, \omega) = \varepsilon_{\infty} \quad (\text{оптическая диэлектрическая постоянная}). \quad (2.10)$$

Зависимостью $\varepsilon(q, \omega)$ от волнового вектора нельзя пренебрегать, когда $2\pi/q$ становится меньше нескольких постоянных решетке (коротковолновый предел). По этой причине гамильтониан Фрелиха справедлив, только если размер полярона больше постоянной решетки. Так как $\varepsilon(q, \omega)$ зависит от микроскопических свойств полярного диэлектрика [15, 16], можно было бы попытаться с ее помощью обобщить гамильтониан Фрелиха на случай полярона малого радиуса. Трудность, однако, заключается в том, что для последовательного учета эффекта локального поля следует использовать полный тензор диэлектрической проницаемости [17].

В общем случае одноэлектронная стационарная волновая функция

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi \quad (2.11)$$

может быть разложена по полной системе собственных функций гамильтониана без взаимодействия

$$[\mathcal{H} - \mathcal{H}_{\text{int}}]\Phi = \mathcal{E}\Phi. \quad (2.12)$$

Волновые функции Φ представляют собой произведение волновой функции свободного электрона и собственной функции \mathcal{H}_{lat} , которая характеризуется числами заполнения фононов $\{n_q\}$. Полный нормированный набор функций Φ есть

$$\Phi(\mathbf{k}, \{n_q\}) = \frac{1}{V^{1/2}} \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r}) \prod_q [(b_q^+)^{n_q} / (n_q!)^{1/2}] |0\rangle, \quad (2.13)$$

где \mathbf{k} — полный волновой вектор собственного состояния:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \sum_q qn_q \quad (2.14)$$

и где $|0\rangle$ означает вакуумное решение уравнения (2.11). Поскольку взаимодействие сохраняет квазиимпульс, т. е.

$$[\mathcal{H}_{\text{int}}, -i\hbar\nabla + \sum_q qb_q^+ b_q] = 0, \quad (2.15)$$

то только функции $\Phi(\mathbf{k}, \{n_q\})$ с одним и тем же значением \mathbf{k} появляются в разложении Ψ по Φ

$$\Psi(\mathbf{k}, \{n_q\}) = \frac{1}{V^{1/2}} \sum_{\{n_q\}} \prod_q c(n_q) \exp\left[i\left(\mathbf{k} - \sum_q qn_q\right)\mathbf{r}\right] \times \\ \times [(b_q^+)^{n_q} / (n_q!)^{1/2}] |0\rangle. \quad (2.16)$$

Для определения неизвестных коэффициентов $c(n_q)$ были разработаны специальные методы, некоторые из них будут обсуждены в последующих главах.

Что касается собственных значений E , то некоторые качественные соображения о виде зависимости E от k были высказаны Хакеном [18, 19] *), Шульцем [20] и Уитфилдом и Паффом [21]. Точные собственные значения гамильтониана без взаимодействия имеют вид

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}, \{n_q\}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\mathbf{k} - \sum_q q n_q \right)^2 + \hbar \omega_0 \sum_q n_q. \quad (2.17)$$

Соответствующие кривые построены на рис. 2 (верхний рисунок). При $\mathcal{E} < \hbar \omega_0$ имеется только одно состояние для каждого k . При $\mathcal{E} \geq \hbar \omega_0$ существует большое число состояний для каждого k , при этом число их стремится к бесконечности при $V \rightarrow \infty$. Малое возмущение \mathcal{H}_{int} связывает только состояния с одним и тем же полным импульсом. Оно не только сдвигает невозмущенные уровни энергии, но и вызывает их расщепление в тех местах, где кривые пересекаются друг с другом (см. средний рис. 2).

Если применить только такого типа соображения о пересечении энергетических кривых к большому числу однофононных собственных состояний с энергией $\mathcal{E}(\mathbf{k}) \geq \hbar \omega_0$, то конечная форма $E(\mathbf{k})$ должна иметь вид, показанный на рис. 2 (нижний рисунок). Количественное обсуждение зависимости $E(\mathbf{k})$ для таких значений k , при которых $E(\mathbf{k}) - E(0) < \hbar \omega_0$, дано в следующем разделе. Результаты зависят от величины константы связи α , численные значения которой для некоторых веществ приведены в табл. I. Из четырех параметров, появляющихся в выражении для константы связи, ϵ_∞ , ϵ , ω_0 , m^* , первые три известны для многих полярных кристаллов. Четвертый параметр m^* не может быть измерен прямо. Он может быть найден при вычислении зонной структуры, или может быть извлечен из экспериментальных результатов, например из положения максимума поглощения F-центра [1].

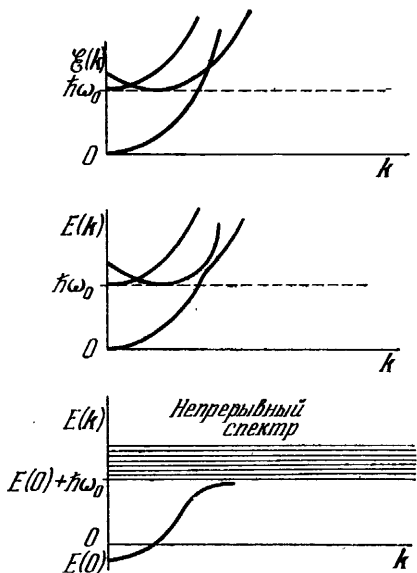


Рис. 2. Зависимость энергии полярона от импульса в свете соображений о пересечении энергетических термов [21].

*) В статье Хакена [19] имеется обзор работ по поляронам большого радиуса, которые были выполнены до 1954 г.

Вещество	ϵ_{∞}	ν	$\omega_t (10^{13} \text{сек}^{-1})$	α_0	m^*/m_0	α	Литература
LiF	1,92	9,27	3,90	6,4			[22, 23]
LiCl	2,75	10,62	3,25	4,8			[22, 23]
LiBr	3,16	10,95	4,50	3,5			[22, 23]
LiI	3,80	8,29	5,00	2,4			[22, 23]
NaF	1,74	6,00	5,25	5,9			[22, 23]
NaCl	2,25	5,62	3,63	5,0			[22, 23]
NaBr	2,62	6,10	2,55	5,0			[22, 24]
NaI	2,91	6,60	2,20	4,8			[22, 24]
KF	1,85	6,05	4,75	5,8			[22, 24]
KCl	2,13	4,68	2,71	5,8			[22, 24]
KBr	2,33	4,51	2,27	5,4	0,48	3,70	[22, 24, 25]
KI	2,69	3,94	1,91	4,8			[22, 24]
RbF	1,93	5,90	4,35	5,7			[22, 24]
RbCl	2,19	5,00	2,24	6,3			[22, 24]
RbBr	2,33	5,00	1,69	6,6			[22, 24]
RbI	2,63	5,00	1,42	5,8			[22, 24]
CsCl	2,60	7,20	1,87	6,3			[22, 24]
CsBr	2,78	6,50	3,39	4,1			[22, 24]
CsI	3,03	5,70	1,16	5,5			[22, 24]
AgCl	4,04	12,3	1,94	4,1			[24]
AgBr	4,62	13,1	1,51	4,0	0,20	1,60	[24, 26]
TlCl	5,10	31,9	1,19	3,8			[24]
TlBr	5,42	29,8	0,90	4,2			[24]
AlSb	10,6	12,0	5,92	0,20	0,39	0,12	[27—29]
GaAs	10,6	11,3	5,04	0,12	0,068	0,031	[27—29]
GaSb	15,2	16,3	4,25	0,096	0,047	0,021	[27—29]
InP	11,0	13,6	5,74	0,31	0,067	0,080	[27—29]
InAs	10,6	13,0	3,95	0,38	0,022	0,056	[27—29]
InSb	17,0	18,7	3,28	0,13	0,014	0,015	[27—29]
ZnS	5,19	8,10	7,30	1,04			[30]
CdS	5,30	9,10	6,76	1,45	0,20	0,65	[31]
CdTe	7,13	10,6	4,16	0,92	0,11	0,39	[32]
PbS	15,3	17,9	2,36	0,27	0,33	0,16	[33]
MgO	2,95	9,65	12,3	2,3			[22, 34]
BaO	4,0	34	3,3	3,2			[35]
ZnO	4,0	8,5	8,8	2,1			[36]
Cu ₂ O	4,0	9,0	5,0	2,3			[37]
SrTiO ₃ *)	5,0	320	2,32	1,83	6,0	4,5	[38, 39]
(300 °K)			1,42	0,47	6,0	1,2	[38, 39]
			0,52	0,09	6,0	0,2	[38, 39]
BaTiO ₃ *)			2,11	2,06			[38]
(475 °K)			1,39	0,36			[38]
			0,56	0,013			[38]
TiO ₂ **)	6—7,2	170	2,42	1,61			[40]
			1,38	0,11			[40]
			0,70	0,05			[40]

*) α_0 для трех оптически активных частот вычисляется по формуле

$$\alpha_j = (2\pi e^2 / \hbar \omega_{0j}^3) (2m_0 \omega_{0j} / \hbar)^{1/2} (Z_j' / \epsilon_{\infty})^2,$$

где ω_{0j} — частота продольных колебаний, а Z — эффективный заряд, полученный из уравнения движения для продольных колебаний в изотропном веществе. Частоты, приведенные в таблице, суть ω_{0j} , а не ω_t [38].

**) ω_{0j} ($j=1,2$) соответствуют продольным колебаниям в плоскости, перпендикулярной оси c ; ω_{03} — усредненная по всем направлениям наименьшая частота продольных колебаний. Частоты, приведенные в таблице, — ω_{0j} , а не ω_t .

§ 3. Слабая и промежуточная сила связи

Хотя гамильтониан Фрелиха для взаимодействия электрона с квантованным фононным полем и имеет довольно простую структуру, точное решение соответствующего уравнения Шредингера не найдено. Поэтому при решении (2.11) были использованы различные приближенные методы и среди них обычная теория возмущений, которая дает простейший метод для нахождения решений в случае слабой связи, когда $\alpha < 1$.

Фрелих с сотрудниками [3] рассматривал \mathcal{H}_{int} как малое возмущение к собственным состояниям (2.17) гамильтониана без взаимодействия с $n_q = 0$ и $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} < \hbar\omega_0$. В этом случае состояния не вырождены. Взаимодействие приводит к виртуальным переходам, при которых электрон испускает и поглощает обратно один оптический фонон. Этот процесс дает наименьший по α вклад в собственную энергию электрон-фононной системы. Он приводит к малому изменению энергии электрона

$$E(\mathbf{k}) - \mathcal{E}(\mathbf{k}) = -\frac{4\pi\alpha}{V} \left(\frac{\hbar^5 \omega_0^3}{2m^*} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \{q^2 [\mathcal{E}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - \mathcal{E}(\mathbf{k}) + \hbar\omega_0]\}^{-1}. \quad (3.1)$$

После перехода от суммирования к интегрированию для энергии полярона получим ($\alpha < 1$)

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \left(1 - \alpha \frac{\sin^{-1}(k/u)}{k/u} \right) \quad \text{при } k < u, \quad (3.2)$$

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \left(1 - \frac{\pi}{2} \frac{\alpha u}{k} \right) \quad \text{при } k > u.$$

Длина $u^{-1} = \left(\frac{\hbar}{2\omega_0 m^*} \right)^{1/2}$ есть характерный масштаб, в котором измеряется размер полярона. При $k \ll u$ первое уравнение дает

$$E(\mathbf{k}) = E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^{**}} + \dots \quad (3.3)$$

Этот результат содержит два важных эффекта электрон-фононного взаимодействия:

1. Энергия покоящегося электрона понижается на величину его собственной энергии:

$$E(0) = -\alpha \hbar \omega_0. \quad (3.4)$$

2. Изменяется эффективная масса, которая определяется формулой

$$m^{**} = m^* (1 - \alpha/6)^{-1}. \quad (3.5)$$

На рис. 3 построена зависимость E от k , согласно (3.2), для $\alpha = 1/2$. Как показано Уитфилдом и Паффом [21] и Ларсоном

[21a], на истинной кривой $E(k)$ нет излома в точке $k = u$, где, согласно (3.2), $\partial E / \partial k = -\infty$. Результаты теории возмущений справедливы, только если $\alpha < 1$ и $k \ll u$. Немного более точный результат, чем (3.1), был получен Фрелихом, Пельцером и Цинау, использовавшими волновую функцию, допускающую только бесфононные и однофононные состояния, т. е. выражение (3.7) с $c_2 = c_3 \dots c_n = 0$.

Их результат имеет вид (3.1), но квадратная скобка заменена на

$$[\mathcal{E}(k - q) - E(k) + \hbar\omega_0].$$

Замена $\mathcal{E}(k)$ на $E(k)$ соответствует приближению Тамма — Данкова [41], которое здесь применимо, поскольку фрелиховский гамильтониан может быть диагонализирован при условии, что поляронная волновая функция выражается только через однофононное и бесфононное состояние и амплитудами c_2, c_3, \dots в (3.7) можно пренебречь.

Хага [42] провел рассмотрение во втором порядке теории возмущений. Он нашел, что энергия основного состояния равна

$$E(0) = -\alpha\hbar\omega_0 - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{8} - \frac{1}{3\pi} \right] \alpha^2 \hbar\omega_0, \quad (3.6)$$

а для эффективной массы m^{**} справедлив результат Фрелиха (3.5).

Рис. 3. Зависимость энергии полярона от импульса во втором порядке теории возмущений [21]. (По оси вместо k нанесены k/u , ред.)

Результаты второго порядка теории возмущений были также получены Гурари [43], который решил уравнение Шредингера (2.11) с помощью вариационного метода. Его пробная функция имела вид (2.16). Гурари допустил состояния, которые могут содержать одновременно большое число фононов при условии, что они все имеют различные волновые векторы q , т. е. $\{n_q\}$ содержит не более одного фонона для каждого q . Эта волновая функция также не позволяет решить задачу при $k > u$, т. е. для энергий $E(k)$, лежащих выше энергии основного состояния на величину, большую $\hbar\omega_0$. Гурари показал, что энергия основного состояния $E(0)$, полученная во втором порядке теории возмущений, для всех значений α больше или равна истинной энергии основного состояния E_g (рис. 4).

Улучшенная вариационная пробная функция использовалась в теории промежуточной связи Ли и Пайнсом [44]. Волновая функция была представлена как линейная суперпозиция функций, соответствующих состояниям с одним электроном и одним

фононом, и т. д.:

$$\Psi = \frac{c_0}{V^{1/2}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) + \frac{c_1}{V^{1/2}} \sum_i \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{q}_i)\mathbf{r}] f(\mathbf{q}_i) b_{\mathbf{q}_i}^+ |0\rangle +$$

$$+ \frac{c_2}{V^{1/2}} \sum_{i,j} \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)\mathbf{r}] \frac{f(\mathbf{q}_i) f(\mathbf{q}_j)}{(2!)^{1/2}} b_{\mathbf{q}_i}^+ b_{\mathbf{q}_j}^+ |0\rangle + \dots \quad (3.7)$$

Скалярное произведение Ψ на вектор фононного состояния

$$|\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n\rangle = (n!)^{-1/2} b_{\mathbf{q}_1}^+ \dots b_{\mathbf{q}_n}^+ |0\rangle \quad (3.8)$$

дается формулой.

$$\langle \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \Psi \rangle = c_n f(\mathbf{q}_1) \dots f(\mathbf{q}_n) V^{-1/2} \exp\left[i\left(\mathbf{k} - \sum_{i=1}^n \mathbf{q}_i\right)\mathbf{r}\right]. \quad (3.9)$$

Таким образом, вероятность нахождения n фононов в поляронной волновой функции пропорциональна c_n^2 . Такой вид Ψ (величина $f(\mathbf{q})$ одинакова для всех фононов) основан на предположении, что фононы из виртуального фононного облака, окружающего электрон, испускаются независимо, т. е. нет никакой корреляции между последовательными актами испускания фононов. В действительности вследствие конечности массы электрона испускание фонона приводит к эффектам отдачи, которые обуславливают корреляцию между последовательными актами испускания фононов. Путем варьирования энергии по c_n и $f(\mathbf{k})$ для $E(\mathbf{k})$ было найдено выражение вида (3.3) с

$$E(0) = -\alpha \hbar \omega_0,$$

$$m^{**} = m^* \left(1 + \frac{\alpha}{6}\right). \quad (3.10)$$

Выражение (3.10) для $E(0)$ и m^{**} справедливы при $\alpha \leq 5$ и получены Ли, Лоу и Пайнсом [45], применившими простое каноническое преобразование гамильтониана Фрелиха, основанное на том, что квазиимпульс

$$-i\hbar\nabla + \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \quad (3.11)$$

есть интеграл движения, как это видно из (2.15). Поэтому унитарное преобразование вида

$$S = \exp\left[i\left(\mathbf{k} - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}\right)\mathbf{r}\right], \quad (3.12)$$

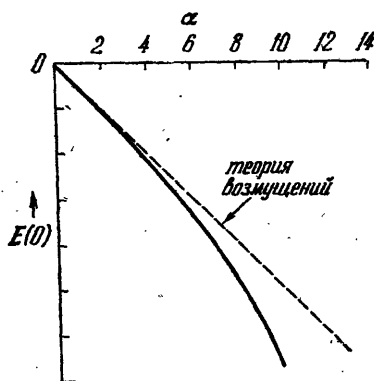


Рис. 4. Собственная энергия полярона в зависимости от константы связи α . Сплошная кривая — собственная энергия согласно теории Фейнмана [48].

где k есть полный волновой вектор, устраняет электронные координаты из гамильтониана. Новый гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H}' = S^{-1} \mathcal{H} S = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[k - \sum_q q b_q^+ b_q \right]^2 + \hbar \omega_0 \sum_q b_q^+ b_q + \sum_q V_q [b_q^+ e^{iqr} - b_q e^{-iqr}]. \quad (3.13)$$

Задача состоит в вычислении для данного k наименьшего собственного значения $E(k)$ гамильтониана \mathcal{H}' . Для этого Ли, Лоу и Пайнс выбрали пробную функцию

$$\chi = U | 0 \rangle, \quad (3.14)$$

где

$$U = \exp \left\{ \sum_q [f(q) b_q^+ - f^*(q) b_q] \right\}, \quad (3.15)$$

а $f(q)$ определяется при минимизации энергии

$$E = \langle 0 | U^{-1} \mathcal{H}' U | 0 \rangle.$$

Фононное поле, описываемое χ , и поле, описываемое Ψ , по Ли и Пайнсу [44] совпадают при частном выборе c_n . Если сравнить скалярные произведения $\langle q_1 \dots q_n | \chi \rangle$ и $\langle q_1 \dots q_n | \Psi \rangle$, то видно, что амплитуда вероятности нахождения n фононов с волновыми векторами $q_1 \dots q_n$ в фононном облаке полярона есть

$$c_n = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_q |f(q)|^2 \right] / (n!)^{1/2}. \quad (3.16)$$

Варьируя E по $f(q)$, найдем, что

$$f(q) = - \frac{V_q^*}{\hbar \omega_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} qk(1-\eta) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}}, \quad (3.17)$$

где

$$\eta = \frac{k}{k^2} \sum_q |f(q)|^2 q. \quad (3.18)$$

Эти два уравнения имеют решение при $k \ll u$:

$$\eta = \frac{\alpha/6}{1 + \alpha/6}. \quad (3.19)$$

Соответствующее минимальное значение $E(k)$ имеет вид (3.3) с

$$E(0) = -\alpha \hbar \omega_0 \quad (3.20)$$

и

$$m^{**} = m^* [1 + \alpha/6]. \quad (3.21)$$

В то время как теория промежуточной связи даёт для $E(0)$ то же значение, что и теория возмущений, для эффективной массы (m^{**}) она даёт меньшее значение, чем то, которое следует из теорий возмущений.

Ли, Лоу и Пайнсом были вычислены еще две интересные величины, а именно, среднее число виртуальных фононов, окружающих электрон, N_{Av} и плотность заряда $\rho(\mathbf{r})$, индуцируемая электроном. При $k \ll u$

$$N_{Av} = \langle \Psi | \sum_q b_q^\dagger b_q | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \alpha \left[1 + \frac{1/2}{(1 + \alpha/6)^2} \frac{k}{u} \right]^2. \quad (3.22)$$

Плотность заряда $\rho(\mathbf{r})$ может быть сразу же найдена из уравнения Пуассона, если предположить, что электростатический потенциал есть $\langle \Psi | \mathcal{H}_{int} | \Psi \rangle$. Тогда

$$\rho(\mathbf{r}) = -\frac{em^* \omega_0}{\hbar \epsilon^*} \frac{1}{r} \exp \left\{ -[u^2 - (\eta - 1) k^2]^{1/2} r \right\} \cos [(\eta - 1) kr]. \quad (3.23)$$

В NaCl длина u^{-1} порядка 10 Å. Теория Ли, Лоу, Пайнса была улучшена Ли и Пайнсом [46], которые выбрали более удачную пробную функцию Ψ , чем (3.7), для того чтобы учесть корреляцию между последовательно испускаемыми фононами. В области промежуточной силы связи $\alpha \sim 5$ авторы [46] получили более низкую энергию основного состояния, чем Ли, Лоу и Пайнс, т. е. чем по теории возмущений (табл. II).

Таблица II

Собственная энергия полярона

$E_0/\hbar\omega_0$	α					
	1	3	5	7	9	11
Фрелих и др. [3].						
Гурари [43]	-1,00	-3,00	-5,00			
Хага [42]	-1,01	-3,13	-5,31			
Ли и др. [45]	-1,00	-3,00	-5,00	-7,0		
Ли и Пайнс [46] *)	-1,00	-3,10	-5,30	-7,58	-9,95	-12,41
Гросс [47] **)	-1,01	-3,09	-5,24	-7,43	-9,65	-11,88
Фейнман [48] и Шульц [49] ***)	-1,01	-3,13	-5,44	-8,11	-11,49	-15,71
Пекар [1]				-6,83	-10,31	-14,66
Холер [50]				-6,70	-10,10	-14,33

*) Значения E_0 (выражение (11) в [46]) были сосчитаны численно Шульцем [49].

**) Значения E_0 (выражение (56) в [47]) сосчитаны Шульцем [49].

***) В табл. I Шульц привел также значения вариационных параметров, которые минимизируют энергию при $\alpha=3, 5, 7, 9, 11$.

Гросс [47] развил другую теорию промежуточной силы связи. Для интегрирования уравнения движения он использовал методы аналитической механики, учитывая при этом, что полный импульс системы электрон плюс решетка есть интеграл движения. Результаты для энергии основного состояния с точностью до нескольких процентов совпадают с результатами Ли и Пайнса [46] (табл. II).

§ 4. Сильная связь

В случае слабой связи собственные значения фрелиховского гамильтониана (2.1) линейны по константе связи α , так как влияние поляризации смещения рассматривается как малое возмущение к электронному движению. При малых значениях α , если все другие параметры постоянны, частота продольных оптических фононов велика. Поэтому поляризационное поле ионов, определяющееся динамическими свойствами решетки, следует адиабатически за медленным трансляционным движением избыточного электрона. Если, однако, электрон-решоточное взаимодействие, измеряемое величиной α , сильно, то электрон может образовать связанное состояние в индуцированном им поле поляризационных смещений и осциллировать относительно центра поляризационной ямы с частотой, большей ω_0 . На возможность такой автолокализации впервые обратил внимание Ландау [2]. Он указал, что энергетически наиболее выгодным состоянием системы избыточный электрон плюс совершенный кристалл является или «свободный» электрон, движущийся в недеформированной (или слабо деформированной) решетке, или «связанный» электрон, захваченный деформированной областью решетки (сильная связь). Собственные значения энергии пропорциональны α^2 , как можно видеть из следующей оценки, проведенной Фрелихом [8]. Захваченный деформированной областью электрон с волновой функцией ψ можно рассматривать как статическое распределение заряда с $e|\psi|^2$. Этот заряд создает поляризационное поле, взаимодействие которого с электроном описывается потенциалом e^2/e^*l , где l — характерный размер области распределения заряда, который будет найден ниже, а e^* — эффективная диэлектрическая постоянная, $e^{*-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon^{-1}$. Для заключения электрона в такую потенциальную яму требуется, чтобы его длина волны была порядка l .

Следовательно, его кинетическая энергия будет порядка $\hbar^2/2m_0l^2$, где m_0 — масса свободного электрона. Минимум полной энергии, получающийся из варьирования по l ,

$$\frac{\partial}{\partial l} \left[-\frac{e^2}{e^*l} + \frac{\hbar^2}{2m_0l^2} \right] = 0, \quad (4.1)$$

есть

$$E_{\min} = -\frac{1}{2} \frac{e^4 m_0}{e^{*2} \hbar^2}, \quad \frac{1}{l} = \frac{e^2 m_0}{e^* \hbar^2}; \quad (4.2)$$

таким образом, $E_{\min} \sim \alpha^2$. Это рассмотрение годится, только когда электрон движется много быстрее, чем атомы решетки. Решение этой задачи в рамках метода самосогласованного поля было впервые проведено Пекаром [51], который предполагал, что динамика системы ионов может быть описана классической механикой. Пекар исходил из вариационного принципа для

энергии электрона (кинетическая плюс потенциальная). Экстремальная функция определяется из функционала

$$J[\psi, \mathbf{P}] = \frac{\hbar^2}{2m^*} \int |\nabla\psi|^2 dr - \int \mathbf{P} \mathbf{D} d\mathbf{r} + \frac{2\pi}{e^*} \int \mathbf{P}^2 dr, \quad (4.3)$$

где \mathbf{D} — электрическая индукция, создаваемая избыточным электроном:

$$\mathbf{D}[\psi, \mathbf{r}] = -e \int |\psi(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}|^3} d\mathbf{r}_1. \quad (4.4)$$

Для основного состояния полярона функционал $J[\psi, \mathbf{P}]$ имеет минимум по ψ и поляризации \mathbf{P} . Варьирование по \mathbf{P} при $\psi = \text{const}$ дает

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi e^*} \mathbf{D}[\psi, \mathbf{r}]. \quad (4.5)$$

Теперь функционал J зависит только от ψ . Применение вариационной процедуры Ритца приводит к следующему выражению для собственного состояния полярона:

$$\psi_0(r) = 0,1229b^{1/4} (1 + br + 0,4516b^2 r^2) e^{-br} \quad (4.6)$$

и

$$E_0 = -0,0544 \frac{m^* e^4}{\hbar^2 e^{*2}} = -0,1088 \alpha^2 \hbar \omega_0, \quad (4.7)$$

где

$$b = 0,6585 \frac{m^* e^2}{\hbar^2 e^*}. \quad (4.8)$$

Самосогласованный потенциал $eV_0(r) = \mathcal{H}_{\text{int}}$ находится с помощью (1.2), (4.4) и (4.6).

Вариационный метод может быть также применен к самосогласованному вычислению возбужденных связанных состояний. Предположим, что волновая функция наименьшего возбужденного состояния в потенциале $V_0(r)$ имеет вид

$$\psi_p^0 = C Y_1(\theta, \varphi) b r e^{-\beta r}, \quad (4.9)$$

где C и β — вариационные параметры, а Y_1 — сферическая гармоника первого порядка. Энергия системы, когда электрон находится в наименьшем возбужденном состоянии, находится минимизацией функционала $J[\psi_p^0, \mathbf{P}_0]$ по ψ при фиксированной поляризации основного состояния. Тогда полная энергия системы определится выражением

$$J[\psi_p^0(r), \mathbf{P}_0(r)] = 0,0153 \frac{m^* e^4}{\hbar^2 e^{*2}}. \quad (4.10)$$

Это есть положительная энергия системы, отвечающая состоянию, которое возникает сразу же после оптического перехода $\psi_0 \rightarrow \psi_p^0$, в течение которого поляризационное поле $\mathbf{P}_0(\mathbf{r})$ не изменяется (принцип Франка — Кондона). Однако, после того как

переход произошел, поляризация не является больше самосо- ласованной с электронной волновой функцией ψ_p^0 . Ионы релаксируют к новым положениям равновесия, т. е. испускаются по- ляризационные фононы, так что энергия возбужденного со- стояния лежит гораздо ниже $J[\psi_p^0, \mathbf{P}_0(\mathbf{r})]$ и в действительности отрицательна; только поэтому полярон и не диссоциирует. Ча- тота оптического перехода $\psi_0 \rightarrow \psi_p^0$ дается формулой

$$h\nu_{p0} = J[\psi_p^0, \mathbf{P}_0] - 3E_0 = 0,0697 \frac{m^* e^4}{\hbar^2 \epsilon^*} = 0,1395 \alpha^2 \hbar \omega_0. \quad (4.11)$$

Здесь E_0 определяется из (4.5) и представляет собой энергию электрона относительно нижнего края зоны проводимости, по

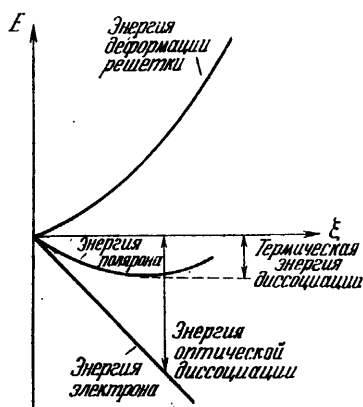


Рис. 5. Энергия деформации решетки, энергия поляризации электрона и поляронная энергия как функции координаты смещения ξ в статическом приближении.

абсолютной величине она равна тер- мической энергии диссоциации по- лярона. Энергия фотодиссоциаци- полярона больше чем $|E_0|$ на энер- гию, которая еще осталась в дефор- мированной решетке сразу посл- того, как имела место диссоциация. Из (4.5) и (4.6) видно, что поляри- зационная и деформационная энер- гии, запасенные решеткой, равны $\frac{2\pi}{e^*} \int \mathbf{P}^2 d\mathbf{r} = 2|E_0|$, так что энерги- фотодиссоциации есть $3|E_0|$. В про- цессе термической диссоциации по- лярона деформационная энерги- $2|E_0|$ возвращается решетке. Раз- личие между термической и оптиче- ской энергиями диссоциации есть следствие принципа Франка — Кон- дона, который утверждает, что координаты атомов решетки не изменяются за время перехода, а также что относительные ске- рости атомов решетки остаются неизменными*). Другое каче- ственное объяснение разницы в энергиях термической и оптиче- ской диссоциаций — в том, что в последнем случае электрон пе- реносится из своего основного состояния в наинизшее состояни- непрерывного спектра, энергия которого вычисляется с потенциа- лом $V_0(\mathbf{r})$, самосогласованным с основным состоянием (рис. 5)

В первоначальной работе Пекара [51] предполагалось, что полярон не движется**). В действительности полярон може- двигаться как целое, так как электрон может локализоваться в любой ячейке. Эффективная масса m^{**} , описывающая непре-

*) Подробнее этот вопрос разобран в § 9 гл. II в [3]. (Прим. ред.)

**) В § 1 гл. I своей монографии [1] С. И. Пекар отмечает, что он ни- когда не считал, что электрон, локализованный в поляронной яме, не прини- мает участия в электропроводности. (Прим. ред.)

рывный энергетический спектр низколежащих поляронных состояний в случае сильной связи была вычислена Ландау и Пекаром [52]. Авторы применили вариационную процедуру к функционалу вида (4.3), в которой учитывалась еще и кинетическая энергия ионов. Записывая \mathbf{P} , \mathbf{D} и ψ как функции от $(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)$, авторы [52] минимизировали полную энергию для малых значений скорости v . Результат имел вид $E = E_0 + m^{**}v^2/2$. Для волновой функции ψ_0 , даваемой выражением (4.6), эффективная масса есть

$$m^{**} = \frac{1}{4\pi\omega_0^2\epsilon^*} \int \left(\frac{\partial D[\psi_0]}{\partial x} \right)^2 d\mathbf{r} = \frac{1}{48} m^* \alpha^4. \quad (4.12)$$

Для хартриевской волновой функции $\psi_0(r) \propto (1 + cr)e^{-dr}$, где c и d — вариационные параметры, Ландау и Пекар нашли $m^{**} = 0,0232m^*\alpha^4$. Если использовать выражение (4.12) для нахождения m^{**} в NaCl с $\alpha = 8,9$ ($\epsilon = 5,6$, $\epsilon_\infty = 2,3$, $\omega_0 = 4,9 \cdot 10^{13}$ сек $^{-1}$, $m^*/m_0 = 2,78$) [1], то $m^{**} = 321m_0$. «Статическое» приближение в случае сильной связи было использовано для оценки энергии связи автолокализованного электрона в NaCl. Из формулы Пекара (4.7) можно найти, что E_0 порядка 0,3 эв. Маркхем и Зейтц [53] провели более детальные вычисления, используя обрезанный кулоновский потенциал, параметры которого определялись с помощью метода Мотта и Литтлтона [54], позволяющего учесть дискретность решетки. Вычисления самосогласованного поля дали $|E_0| = 0,68$ эв. Это есть энергия, требуемая для того, чтобы оптически возбудить захваченный электрон в зону проводимости. Термическая энергия активации меньше (0,13 эв), так как она учитывает упругую энергию, запасенную полем поляризационных смещений и возвращаемую решетке, когда захваченный электрон термически освобождается. Отношение термической и оптической энергий активации — 1:5, вместо 1:3 для полярона Пекара. Низкое значение термической энергии активации приводит к мысли, что автолокализацию возможно лучше всего наблюдать при низких температурах и ее не следует отождествлять с образованием F-центра. Альтернативный механизм, энергетически более выгодный, чем автолокализация, был предложен де Буром*). Он предположил, что избыточный электрон может быть захвачен вакансией отрицательного иона. Пекар и Дейген [56] использовали статическое приближение для вычисления энергии связи F-центрального электрона. Для этой цели в экстремальной функции (4.3) учитывалась потенциальная энергия вакансии в решетке

$$J_F[\psi, \mathbf{P}] = J[\psi, \mathbf{P}] - \frac{Ze^2}{\epsilon} \int \frac{|\psi|^2}{r} d\mathbf{r}, \quad (4.13)$$

*) Модель де Бура описана Зейтцем [55].

где Z — валентность катиона. Использование вариационной процедуры Ритца с пробной волновой функцией

$$\psi_F = b(1 + cr)e^{-dr}, \quad (4.14)$$

где b, c, d — вариационные параметры, дает для энергии основного состояния

$$E_F = -\frac{27}{56} \frac{m^* e^4}{\hbar^2} \left(\frac{Z^2}{e^2} + \frac{4}{3} \frac{Z}{ee^*} + \frac{1}{3e^{*2}} \right). \quad (4.15)$$

Эта энергия соответствует энергии максимума F-центральной полосы поглощения. Для NaCl она равна 2,65 эв, если $m^* = 2,78m_0$. Численное значение m^* , определенное для NaCl с помощью теории F-центров Пекара, однако, сомнительно, так как размер F-центра в NaCl сравним с постоянной решетки a . Континуальное приближение требует, чтобы размер полярона был много больше a .

Были сделаны различные попытки улучшить теорию сильной связи Ландау — Пекара. Математическая проблема в том, чтобы учесть динамическую корреляцию электрона и ионов. В приближении Хартри, т. е. в статическом приближении, электрон чувствует только среднее поле колеблющихся ионов. Это среднее поле совпадает с полем, создаваемым покоящимися ионами, находящимися в смещенных положениях равновесия. Соответствующее основное состояние дается уравнениями (4.6) и (4.7). Такой же результат получил Пекар [1] другим способом, а именно: (а), используя адиабатическое приближение Борна — Оппенгеймера [57] для волновой функции электрона плюс решетки

$$\Psi(\mathbf{r}, \xi_q) = \psi(\mathbf{r}, \xi_q) \chi(\xi_q) \quad (4.16)$$

и (б), вычисляя волновую функцию электрона в статическом приближении, когда ионы фиксированы и их положения определяются набором нормальных координат ξ_{q_i} (совокупность нормальных координат ионов обозначим ξ_q). Затем Пекар [58] улучшил расчет, учтя движение полярона. В силу трансляционного вырождения задачи об электроне в непрерывной диэлектрической среде положение полярона не фиксировано, т. е. если $\psi(\mathbf{r})$ и $V(\mathbf{r}, \xi_0)$ — самосогласованное решение, то $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ и $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \xi_0)$ — также самосогласованное решение задачи, где \mathbf{R} — произвольный вектор, а ξ_0 описывает набор нормальных координат для равновесной конфигурации.

Расчет начинается с нахождения энергии электрона для произвольной заданной конфигурации ионов. Энергия получается минимизацией функционала

$$E[\psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \xi_q] = \frac{\hbar^2}{2m^*} \int |\nabla\psi|^2 d\mathbf{r} - \int \mathbf{P}(\mathbf{r}, \xi_q) \mathbf{D}[\psi, \mathbf{r}] d\mathbf{r} \quad (4.17)$$

по ψ при фиксированной поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r}, \xi_q)$. В приближении (4.16) форма электронной волновой функции не меняется, когда

полярон движается по кристаллу, и слабо отличается от $\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R})$, даваемой (4.6). Центр электронной волновой функции \mathbf{R} определяется требованием, чтобы энергия $E_0[\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \xi_q]$ была минимальной при изменении \mathbf{R}

$$\frac{\partial E_0}{\partial R_i} = - \int \mathbf{P}(\mathbf{r}, \xi_q) \frac{\partial D[\mathbf{r}, \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R})]}{\partial R_i} d\mathbf{r} = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (4.18)$$

Эти три уравнения связывают компоненты \mathbf{R} с поляризацией, т. е. с набором нормальных координат ξ_q .

Далее рассмотрение динамики ионной решетки ведется с помощью адиабатического приближения. В гамильтониане электронная энергия E_0 выступает в качестве потенциальной энергии

$$\mathcal{H}_0 = E_0 + \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sum_q \left[(\xi_q - \xi_q^{(R)})^2 - \frac{\partial^2}{\partial \xi_q^2} \right], \quad (4.19)$$

$$\xi_q^{(R)} = \left(\frac{4\pi}{\hbar \omega_0 \epsilon^*} \right)^{1/2} \mathbf{P}_q^{(R)}, \quad (4.20)$$

$$\mathbf{P}_q^{(R)} = \int \mathbf{P}[\mathbf{r}, \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R})] (q/q) \chi_q(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (4.21)$$

$$\chi_q(\mathbf{r}) = \left(\frac{2}{V} \right)^{1/2} \begin{cases} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}), & \text{если } q_x < 0, \\ \sin(\mathbf{q}\mathbf{r}), & \text{если } q_x \geq 0. \end{cases} \quad (4.22)$$

Гамильтониан колебаний решетки, используемый Пекаром, отличается от фрелиховского гамильтониана (2.1), так как последний получается с помощью комплексных нормальных координат бегущих плоских волн, в то время как первый содержит вещественные нормальные координаты ξ_q стоячих волн $\chi_q(\mathbf{r})$, нормированных на объем V . Согласно (4.22) для каждого q существует одна стоячая волна $\sin(\mathbf{q}\mathbf{r})$ или $\cos(\mathbf{q}\mathbf{r})$. Для того чтобы найти собственные состояния (4.19), необходимо преобразовать нормальные координаты. $N = L^3$ старых координат ξ_q (где N — число поляризационных мод) заменяются на

$$\left. \begin{array}{l} \xi'_q = \xi_q - \xi_q^{(R)} \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} (N-6) \text{ нормальными координатами,} \quad (4.23)$$

$$\xi'_{q_l} = (\xi_{q_l}^2 + \xi_{-q_l}^2)^{1/2}, \quad l = 1, 2, 3, \quad (4.24)$$

$$R_i = R_i(\xi_q), \quad i = 1, 2, 3. \quad (4.25)$$

Результаты для поляронных собственных состояний не зависят от выбора шести старых координат $\xi_{\pm q_l}$ в (4.24). После преобразования гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = E_0 + \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sum_q' \left(\xi_q'^2 - \frac{\partial^2}{\partial \xi_q'^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial R_i^2} + \mathcal{H}_{\text{int}}^*, \quad (4.26)$$

где E_0 дается (4.7), второй член в (4.26) соответствует энергии смещенных решеточных осцилляторов, третий член учитывает трансляционную энергию полярона, а $\mathcal{H}_{\text{int}}^*$ есть эффективное взаимодействие, обусловленное переходами полярона. Штрих в сумме означает, что суммирование проводится по всем \mathbf{q} , кроме $-\mathbf{q}_l$ ($l = 1, 2, 3$). Когда электрон вводится в диэлектрическую среду, число колебательных степеней свободы уменьшается на три; «высвободившиеся» три степени свободы ионной решетки носят не колебательный, а трансляционный характер и характеризуют движение полярона в решетке*). Собственные функции и собственные состояния $\mathcal{H} - \mathcal{H}_{\text{int}}^*$ даются выражением

$$\Psi(\mathbf{k}, \{n_{\mathbf{q}_l}\}) = V^{-1/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \prod_{\mathbf{q}}' \varphi_{n_{\mathbf{q}}}(\xi_{\mathbf{q}}'), \quad (4.27)$$

где $\varphi_{n_{\mathbf{q}}}$ — хорошо известные собственные функции осциллятора

$$E(\mathbf{k}, \{n_{\mathbf{q}}\}) = E(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} \left(n_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right), \quad (4.28)$$

а энергия полярона имеет вид

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - \frac{3}{2} \hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^{**}}. \quad (4.29)$$

Энергия покоя $E(k=0)$ на $3/2 \hbar \omega_0$ меньше энергии, вычисленной в статическом приближении по Хартри. Эффективная масса полярона оказывается равной массе, полученной Ландау и Пекаром (выражение (4.12)).

Холер [50, 59] существенно улучшил вариационную процедуру Пекара. Он лучше учел корреляцию между электроном и решеткой, чем Пекар [58], так как не использовал для Ψ выражение (4.16), а представил ее в виде суперпозиции по хартриевским состояниям с фазовыми множителями, подобно тому, как строится блоховская волновая функция из линейной комбинации атомных орбиталей. Волновая функция Холера, учитывающая трансляционную симметрию, имеет вид

$$\Psi = \int d\mathbf{R} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \exp \left[\sum_{\mathbf{l}} g(\mathbf{q}_{\mathbf{l}}) b_{\mathbf{q}_{\mathbf{l}}}^+ \exp(-i\mathbf{q}_{\mathbf{l}}\mathbf{R}) \right] |0\rangle,$$

где электронная волновая функция ψ и фононная функция $g(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}}$ выбираются особо и содержат свободные параметры для того, чтобы минимизировать энергию. Предполагая, что ψ есть гауссова функция, а фононная функция имеет вид

$$-i(4\pi\alpha/V)^{1/2} \exp[(-\beta^2 q^2/8) - i\eta\mathbf{q}\mathbf{R}],$$

где β и η — параметры, Холер [59] нашел для энергии основного состояния полярона то же выражение, что и Пекар (выражение (4.29)).

*) Введение в кристалл электрона, состояние которого адиабатически следует за движением ионов, не меняет общего числа степеней свободы.

Значение эффективной массы оказалось, однако, в два раза меньше, чем в теории Ландау—Пекара. Теория применима также в области слабого и промежуточного взаимодействия и при определенном выборе ψ и g совпадает с теорией возмущений и теорией Ли, Лоу и Пайнса соответственно [59, 60].

Теория поляронов в случае сильного взаимодействия была поставлена на строгую математическую основу в работах Боголюбова [61] и Тябликова [62]. Эти авторы развили адиабатическую теорию возмущений, в которой кинетическая энергия фононного поля рассматривалась как малое возмущение. Трансляционное вырождение учитывалось *ab initio*, т. е. оно снималось еще до того, как проводилась теория возмущений. Получение нового гамильтониана и решение соответствующего волнового уравнения является сложной математической проблемой, которая детально обсуждалась Олкоком [63, 64]. В нулевом, или адиабатическом, приближении гамильтониан Боголюбова—Тябликова приводит к тому же выражению для энергии основного состояния и эффективной массы, что и гамильтониан Пекара. Однако поправки, соответствующие первому приближению, все еще не найдены.

§ 5. Метод интегралов по траекториям

Использование фейнмановского метода [65] интегралов по траекториям в теории поляронов основано на физической гипотезе о том, что взаимодействие лишнего электрона с решеткой, с ее многими колебательными степенями свободы, можно отобразить с помощью одночастичного потенциала притяжения, который правильно описывает реакцию решетки на движение электрона. В теории Пекара [58] этот потенциал находился с помощью специального вида произведения волновых функций основного состояния, что соответствует приближенному описанию реакции решетки на движение электрона статическим обрезанным кулоновским потенциалом*). Фейнман [48] более точно аппроксимирует взаимодействие электрона с решеткой, заменяя его взаимодействием электрона с фиктивной частицей. С этой целью он применяет метод интегралов по траекториям, который есть квантовомеханический аналог принципа Гамильтона аналитической механики

$$\delta S = \delta \int_{t'}^{t''} L(\dot{x}_i, x_i) dt = 0, \quad (5.1)$$

где δ означает вариацию интеграла действия S при фиксированных значениях t' и t'' . Вариация приводит к уравне-

*) Кулоновский потенциал обрезается на малых расстояниях (сравнимых с радиусом полярона) из-за размазанности заряда электрона в пределах поляронной ямы. (Прим. ред.)

ниям Лагранжа для обобщенных координат x_i ; решения $x_i(t; c_1, c_2, \dots, c_n)$, где $i = 1, 2, \dots, n$, описывают движение системы (c_i — постоянные интегрирования). Так же как и в классической механике, в теории интегралов по траекториям интеграл действия S играет фундаментальную роль. Для частиц с одной степенью свободы интеграл по траекториям может быть представлен следующим образом [66]:

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \int \dots \int \frac{dx_1}{A} \dots \frac{dx_n}{A} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{i=0}^n L(\dot{x}_i, x_i) \right] = \\ = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt L(\dot{x}, x) \right] \mathcal{D}x(t), \quad (5.2)$$

где

$$\int_{t'}^{t''} dt L(\dot{x}, x)$$

есть классическое действие S , а $\varepsilon = (t'' - t')/(n + 1)$. Каждый путь $x_0 = x' \rightarrow x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \dots \rightarrow x_n \rightarrow x_{n+1} = x''$ умножается на фазовый множитель, который есть классическое действие в единицах \hbar , т. е. интеграл по времени от лагранжиана вдоль этого пути K имеет простой физический смысл. Это есть амплитуда вероятности нахождения частицы в точке x'' в момент времени t'' , если раньше в момент t' она находилась в точке x' . Другими словами, если $\psi(x', t')$ есть решение уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H}\psi, \quad (5.3)$$

то волновая функция в момент времени $t'' > t'$ дается [67]

$$\psi(x'', t'') = \int K(x'', t''; x', t') \psi(x', t') dx'. \quad (5.4)$$

K есть гриновская функция линейного уравнения (5.3) и может быть представлена в виде *)

$$K(x'', t''; x', t') = \sum_j \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_j (t'' - t') \right] \psi_j(x'') \psi_j^*(x'), \quad (5.5)$$

где E_j и ψ_j — собственные значения и собственные функции \mathcal{H} соответственно. В частности, истинная энергия основного со-

*) Уравнение (5.5) можно найти, представляя интеграл по путям в виде драковской функции преобразования

$$K(x'', t''; x', t') = \langle x'', t'' | x', t' \rangle \text{ для } t'' > t',$$

где $|x', t' \rangle$ — собственное состояние гейзенберговского оператора $x(t')$ (которое может быть записано обычным способом, как $\psi_x'(x, t')$) с собствен-

стояния E_g может быть найдена из (5.5), так как E_g определяет асимптотику K для больших мнимых времен $\tau = i(t'' - t')$

$$K(x'', t' - i\tau; x', t') \sim \exp(-E_g \tau / \hbar) \quad (5.6)$$

при $\tau \rightarrow \infty$.

Скорость затухания не зависит от x'' и x' . Для того чтобы оценить поляронный интеграл по путям для больших τ , Фейнман сначала вычислил интеграл действия для поляронного гамильтониана (2.1), а затем, используя вариационный метод, нашел верхнюю границу для E_g .

Интеграл действия содержит поляронный лагранжиан L , который для модели Фрелиха имеет вид [8]

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{R}}^2 - 4\pi e \sum_q \frac{1}{q} P_q(t) \chi_q(\mathbf{R}) + \frac{1}{2} \gamma \sum_q [P_q^2(t) - \omega_0^2 P_q^2(t)], \quad (5.7)$$

где $\gamma = 4\pi/\epsilon^* \omega_0^2$, а q -я фурье-компонента вектора поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ определена следующим образом:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \sum_q (q/q) P_q(t) \chi_q(\mathbf{r}). \quad (5.8)$$

Функция $\chi_q(\mathbf{r})$ дается формулой (4.22). Так как решеточные моды не взаимодействуют друг с другом, то, согласно (5.7), лагранжиан q -й моды есть

$$L_q = \frac{1}{2} \gamma (P_q^2 - \omega_0^2 P_q^2) - \frac{4\pi e}{q} \chi_q(\mathbf{R}) P_q, \quad (5.9)$$

где $\mathbf{R}(t)$ — траектория электрона. Уравнение (5.9) есть лагранжиан гармонического осциллятора, на который действует вынуждающая сила. *Существенно, что в поляронной теории интеграл по траекториям для осциллятора, на который действует вынуждающая сила, может быть найден в замкнутой форме.*

Фейнмановский метод оценки интеграла по путям [68] для

$$L = (m/2)(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) + \Gamma(t) x \quad (5.10)$$

состоит в представлении траектории $x(t)$ в виде классической траектории $\bar{x}(t)$ и отклонения от нее, т. е. $x(t) = \bar{x}(t) + y(t)$.

ным значением x' , т. е.

$$x(t') | x', t' = x' | x', t',$$

где оператор

$$x(t') = \exp(i\mathcal{H}t') x \exp(-i\mathcal{H}t'),$$

а собственное состояние

$$| x', t' \rangle = \exp(i\mathcal{H}t') | x' \rangle.$$

Тогда

$$K(x'', t''; x', t') = \langle x'' | \exp\left[\frac{1}{2} \mathcal{H}(t'' - t')\right] | x' \rangle.$$

Подставляя в правую часть тождество $\sum_j \Psi_j^*(\mathbf{r}) \Psi_j(\mathbf{r})$, где Ψ_j — собственное состояние \mathcal{H} , получим (5.5). Я признателен д-ру Р. Скалеттеру за его замечания по этому вопросу.

Классическая траектория удовлетворяет граничным условиям $\bar{x}(t') = x'$ и $\bar{x}(t'') = x''$. Тогда действие состоит из двух членов

$$S = \bar{S} + S_y = \frac{m}{2} \left[\int_{t'}^{t''} (\dot{\bar{x}}^2 - \omega^2 \bar{x}^2) dt + \int_{t'}^{t''} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt \right]. \quad (5.11)$$

Член, линейный по y , исчезает после интегрирования по частям с использованием уравнения движения по классической траектории

$$m(\ddot{\bar{x}} + \omega^2 \bar{x}) = \Gamma(t). \quad (5.12)$$

Если $\bar{x}(t)$ — решение (5.12), то классическое действие имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \frac{1}{2} m [\bar{x}(t) \dot{\bar{x}}(t)]_{t'}^{t''} + \frac{1}{2} \int_{t'}^{t''} \Gamma(t) \bar{x}(t) dt = \\ &= \frac{m\omega}{2 \sin \omega(t'' - t')} [(x''^2 + x'^2) \cos \omega(t'' - t') - 2x'x'' + \\ &+ \frac{2x''}{m\omega} \int_{t'}^{t''} dt \Gamma(t) \sin \omega(t - t') + \frac{2x'}{m\omega} \int_{t'}^{t''} dt \Gamma(t) \sin \omega(t'' - t') - \\ &- \frac{2}{(m\omega)^2} \int_{t'}^{t''} dt \Gamma(t) \sin \omega(t'' - t) \int_{t'}^t ds \Gamma(s) \sin \omega(s - t')]. \quad (5.13) \end{aligned}$$

Из (5.2), (5.11) и (5.13) для интеграла по путям получим

$$\begin{aligned} K(x'', t''; x', t') &= e^{i\bar{S}} \int \exp \left[i \int_{t'}^{t''} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt \right] \mathcal{D}y(t) = \\ &= \left[\frac{m\omega}{2\pi i \sin \omega(t'' - t')} \right]^{1/2} e^{i\bar{S}}. \quad (5.14) \end{aligned}$$

Интегрирование по $y(t)$, т. е. по траекториям свободного осциллятора, развивающегося от $y=0$ при $t=t'$ до $y=0$ при $t''=t$, не тривиально и было найдено Монроллом [69]*). Соот-

*) Интегрирование.

$$K(x'', t''; x', t') =$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \int \dots \int \frac{dy_1}{A} \dots \frac{dy_n}{A} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_0^n \{ [(y_{i+1} - y_i)/\varepsilon]^2 - \omega^2 y_i^2 \} \right)$$

начинается с такого преобразования независимых переменных, чтобы квадратичная форма в экспоненте, имеющая вид треугольной матрицы, перешла в отрицательно определенную квадратичную форму. Затем интеграл может быть представлен как произведение интегралов Френеля,

ответственно интеграл по путям для нормальных координат $P_q(t)$ имеет вид

$$K_q(P'_q, t''; P_q, t') = \left[\frac{\gamma \omega_0}{2\pi i \sin \omega_0 (t'' - t')} \right]^{1/2} e^{i\bar{S}_q}. \quad (5.15)$$

С помощью этого выражения интеграл по путям для полярона принимает простой вид

$$\begin{aligned} K(R'', P'_q, t''; R', P'_q, t') &= \\ &= \int \dots \int \mathcal{D}R(t) \mathcal{D}P_q(t) \exp \left[i \int_{t'}^{t''} L(R, \dot{R}; P_q, \dot{P}_q) dt \right] = \\ &= \int \mathcal{D}R(t) \exp \left(i \int_{t'}^{t''} \frac{m \cdot \dot{R}^2}{2} dt \right) \prod_q K_q(P'_q, t''; P_q, t'), \end{aligned} \quad (5.16)$$

где $\mathcal{D}P_q(t)$ означает $\mathcal{D}P_{q_1}(t) \mathcal{D}P_{q_2}(t) \dots$.

Записывая интеграл по путям в виде (5.5) для больших мнимых времен $i(t'' - t') = \tau'' - \tau'$, получим, что скорость асимптотического убывания поляронного интеграла по путям определяет энергию основного состояния

$$\begin{aligned} K(R'', P'_q, \tau''; R', P'_q, \tau') &= \\ &= \sum_j \psi_j(R'', P'_q) \psi_j^*(R', P'_q) \exp[-E_j(\tau'' - \tau')], \end{aligned} \quad (5.17)$$

где ψ_j есть точное стационарное состояние системы: электрон плюс решетка. Для того чтобы устранить нормальные координаты P_q из (5.16), сначала перейдем в осцилляторном интеграле по путям от координатного представления (P_q) к представлению чисел заполнения (n_q). Соответствующее унитарное преобразование имеет вид

$$\begin{aligned} G_{n''n'}(t'', t') &= \int dx'' \int dx' \langle n'', t''; x'', t'' \rangle K(x'', t''; x', t') \langle x', t'; n', t' \rangle = \\ &= \int dx'' \int dx' \varphi_{n''}^*(x'', t'') K(x'', t''; x', t') \varphi_{n'}(x', t'), \end{aligned} \quad (5.18)$$

где $\varphi_n(x, t) = \langle x, t; n, t \rangle$ (см. сноску на стр. 38) — волновая функция гармонического осциллятора в состоянии n

$$\varphi_n(x, t) = \varphi_n(x) \exp[-i(n + 1/2)\omega t]. \quad (5.19)$$

С помощью (5.18) каждый интеграл по траекториям для осциллятора K_q в (5.16) заменяется на $G_{00}^q(t'', t')$. Унитарное преобразование не меняет затухание члена с $j = 0$ в (5.17). К тому же можно выбрать осцилляторные интегралы по траекториям $G_{n''n'}$ для фононного вакуума с $n \doteq n' = 0$, так как нас

интересует именно основное состояние. Интегрирование (5.18) для $G_{00}^q(t'', t')$ с использованием (5.15) для K_q дает

$$G_{00}^q = \exp \left[-\frac{1}{4\gamma\omega_0} \int_{t'}^{t''} \int_{t'}^{t''} \Gamma_q(t) \Gamma_q(s) \exp(-i\omega_0|t-s|) dt ds \right], \quad (5.20)$$

где $\Gamma_q(t) = \frac{4\pi e}{q} \chi_q[\mathbf{R}(t)]$ (см. (5.9)). Подставляя (5.20) в (5.16) и вычисляя $\prod_q G_{00}^q$, получим после простых алгебраических выкладок формулу Фейнмана для интеграла по траекториям ($\hbar = m^* = \omega_0 = 1$)

$$K(\mathbf{R}'', \tau''; \mathbf{R}', \tau') = \int \mathcal{D}\mathbf{R}(\tau) \left\{ \exp \left[-\int_{\tau'}^{\tau''} \frac{1}{2} \left(\frac{d\mathbf{R}}{d\tau} \right)^2 d\tau \right] + \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \int_{\tau'}^{\tau''} \int_{\tau'}^{\tau''} d\tau d\sigma \frac{\exp(-|\tau-\sigma|)}{|\mathbf{R}(\tau) - \mathbf{R}(\sigma)|} \right\}. \quad (5.21)$$

Второй член в интеграле действия S , который пропорционален α , представляет собой точную реакцию решетки на движение электрона при $T=0$. В S появляется запаздывающее взаимодействие электрона с самим собой вместо мгновенного электрон-решеточного взаимодействия, содержащего нормальные координаты P_q поля поляризационных фононов.

Вычисление интеграла по траекториям для больших значений $\mathcal{J} = \tau'' - \tau'$ приводит, согласно (5.6), к точной энергии основного состояния. Трудность, однако, заключается в том, что этот интеграл (5.21) не может быть вычислен в замкнутой форме. Только в том случае, когда действие есть квадратичная форма по \mathbf{R} и $\dot{\mathbf{R}}$, интеграл по траекториям может быть вычислен. Для того чтобы оценить (5.21) для больших \mathcal{J} , Фейнман [48] использовал вариационный принцип. Действие S_1 выбирается так, чтобы в некотором грубом приближении оно соответствовало S , но в то же время было бы настолько простым, что позволяло бы вычислить в замкнутой форме соответствующий интеграл по траекториям. Фейнман пишет:

$$\begin{aligned} \int e^S \mathcal{D}\mathbf{R}(\tau) &= \int \exp(S - S_1) \exp(S_1) \mathcal{D}\mathbf{R}(\tau) \equiv \\ &\equiv \exp \langle S - S_1 \rangle \int \exp(S_1) \mathcal{D}\mathbf{R}(\tau), \end{aligned} \quad (5.22)$$

где среднее от $S - S_1$ определено следующим образом:

$$\langle S - S_1 \rangle = \int (S - S_1) e^{S_1} \mathcal{D}\mathbf{R}(\tau) / \int e^{S_1} \mathcal{D}\mathbf{R}(\tau). \quad (5.23)$$

В основу вариационного принципа положено неравенство

$$\int e^{S} \mathcal{D}R(\tau) \geq e^{(S-S_1)} \int e^{S_1} \mathcal{D}R(\tau). \quad (5.24)$$

После вычислений среднее $\langle S - S_1 \rangle$ оказывается пропорциональным \mathcal{J} [66]

$$\langle S - S_1 \rangle = s\mathcal{J}. \quad (5.25)$$

С помощью (5.23) и (5.24) верхнюю границу для истинной энергии основного состояния E_g , можно выразить через E_1 , т. е. через наименьшую энергию для действия S_1 ,

$$E_g \leq E_0 = E_1 - s, \quad (5.26)$$

где

$$E_1 = - \lim_{\mathcal{J} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{J}} \ln \left[\int e^{S_1} \mathcal{D}R(\tau) \right]. \quad (5.27)$$

Выбирается ряд возможных пробных функций S_1 для нахождения верхней границы E_0 энергии основного состояния. Если

$$S_1 = - \frac{1}{2} \int \left(\frac{dR}{d\tau} \right)^2 d\tau, \quad (5.28)$$

то

$$E_0 = - a\hbar\omega_0, \quad (5.29)$$

что соответствует результату теории возмущений (2.4). Таким образом, результат теории возмущений есть верхняя граница для E_0 , как было также показано Гурари [43] и Ли и Пайнсом [46]. Если S_1 выбрать в виде

$$S_1 = - \frac{1}{2} \int \left(\frac{dR}{d\tau} \right)^2 d\tau + \int V[R(\tau)] d\tau \quad (5.30)$$

и $V = Z/r$, где Z — свободный параметр, то наименьшая энергия для S_1 есть

$$E_0 = - 0,098\alpha^2\hbar\omega_0, \quad \alpha \gg 1. \quad (5.31)$$

Этот вид V соответствует статическому приближению Ландау с пробной функцией (4.6). Наконец, действие S_1 можно выбрать так, чтобы частица была связана потенциалом гармонического осциллятора $V[R(\tau) - R(\tau')]$ с фиктивной частицей в точке $R(\tau')$. Жесткость и приведенная масса электрона и фиктивной частицы, грубо говоря, есть вариационные параметры пробного действия S_1 , которое представляется в виде

$$S_1 = - \frac{1}{2} \int \left(\frac{dR}{d\tau} \right)^2 d\tau - \frac{C}{2} \int [R(\tau) - R(\tau')]^2 e^{-\omega|\tau-\tau'|} d\tau d\tau', \quad (5.32)$$

где C и ω — свободные параметры, которые выбираются так, чтобы минимизировать E_1 . Для $\omega \sim 1$, т. е. тогда, когда пробное действие S_1 имеет приблизительно ту же временную экспоненту во взаимодействии, что и истинное действие S , Фейнман,

минимизируя по $v = (\omega^2 + 4C/\omega)^{1/2}$, нашел

$$E_0 = -(\alpha + 0,98\alpha^2/10^2 + 0,6\alpha^3/10^3 + 0,14\alpha^4/10^4 + \dots) \hbar\omega_0, \quad \alpha \leq 1 \quad (5.33)$$

и

$$E_0 = -(0,106\alpha^2 + 2,83) \hbar\omega_0, \quad \alpha \gg 1. \quad (5.34)$$

Для $\alpha = 5$ оба выражения (5.33) и (5.34) согласуются с точностью до 3%, так что для всех практических целей уравнением (5.33) можно пользоваться для $\alpha < 5$, а уравнением (5.34) — для $\alpha > 5$. Численные значения E_0 были найдены Шульцем [49] минимизацией на машине по ω и v . Результаты представлены в табл. II.

Расчет эффективной массы полярона m^{**} с помощью метода интеграла по траекториям обоснован не так хорошо, как расчет энергии основного состояния. При конечном импульсе невозможно построить вариационный принцип, который учитывал бы сохранение полного квазиимпульса системы (2.15). Для того чтобы найти m^{**} , Фейнман рассматривает все траектории, для которых начальная координата равна нулю, а конечная $R = U\mathcal{J}$, где U — мнимая скорость. С помощью вариационного метода выражение для соответствующего интеграла по траекториям (5.21) имеет вид для больших \mathcal{J}

$$K(R, \mathcal{J}; 0, 0) \sim \exp\left(-E_0 - \frac{1}{2} m^{**} U^2\right). \quad (5.35)$$

В результате получается

$$\frac{m^{**}}{m_0} = 1 + \frac{1}{3\sqrt{\pi}} \alpha v^3 \int_0^\infty [F(\tau)]^{-1/2} e^{-\tau} \tau^2 d\tau, \quad (5.36)$$

где

$$F(\tau) = \omega^2 \tau + [(v^2 - \omega^2)/v] [1 - e^{-v\tau}]. \quad (5.37)$$

Используя для ω и v те значения, которые минимизировали энергию основного состояния (5.33) и (5.34), получим для массы полярона

$$m^{**} = \left(1 + \frac{1}{6} \alpha + 0,025\alpha^2 + \dots\right) m^*, \quad \alpha \leq 1, \quad (5.38)$$

$$m^{**} = \frac{16}{81\pi^4} \alpha^4 m^*, \quad \alpha \gg 1. \quad (5.39)$$

Эти результаты количественно согласуются с результатами теории слабой и промежуточной связи § 3 и теории сильной связи § 4 соответственно (ср. уравнения (4.12) и (5.39)). Так как значения m^{**} , вычисленные с помощью (5.38) и (5.39), не сшиваются гладко, то для промежуточных значений α следует исходить из общего выражения для m^{**} , даваемого (5.36). Шульц

[49] использовал его для того, чтобы оценить m^{**} как функцию α , взяв наилучшие значения ω и ν , т. е. те значения, которые минимизируют $E_0(\alpha)$.

При конечных температурах фейнмановскую теорию поляронов сформулировали Осака [70] и Кривоглаз и Пекар [71]. Они вычислили сумму состояний системы (т. е. шпур оператора Гиббса) электрона плюс решетка в форме фейнмановского интеграла по путям (5.16). Сумма состояний системы связана со свободной энергией Гельмгольца, которая минимизируется при данной температуре по параметрам ω и ν . Таким образом находится средняя энергия полярона как функция температуры. С увеличением температуры (при фиксированном α) значения собственной энергии и эффективной массы падают. Когда $T \rightarrow \infty$, собственная энергия стремится к нулю, а $m^{**} \rightarrow m^*$. Осака объясняет эти результаты тем, что когда фононы становятся свободными их энтропия возрастает по сравнению с энтропией фононов, связанных с электроном. Влияние магнитного поля на свободную энергию полярона рассматривалось Хеллворсом и Платцманом [72], которые обобщили фейнмановский метод интегралов по траекториям для фрелиховского гамилтониана, содержащего магнитное поле. При слабых полях есть два члена, которые дают в свободной энергии зависимость H^2 . Первый член, пропорциональный T^{-1} , соответствует диамагнетизму свободных частиц с фейнмановской массой m^{**} , а второй член есть обычного вида атомный диамагнетизм, не зависящий от температуры. Он отражает внутреннюю структуру полярона при большой константе взаимодействия.

Задача полярон — примесь рассматривалась Платцманом [31] также с помощью фейнмановской техники интегралов по траекториям. Он нашел основное состояние электрона, взаимодействующего одновременно с кулоновским потенциалом и полярными колебаниями решетки. Результат используется для оценки энергии ионизации в CdS, равной энергии свободного полярона минус энергия связанного полярона. Единственным свободным параметром является m^*/m_0 . Найдено согласие между теоретическим и наблюдаемым значениями энергии ионизации, если $m^*/m_0 = 0,2$, что соответствует $\alpha = 0,65$. В случае слабой связи $\alpha \leq 1$ Неттел [73] также рассмотрел задачу о примесях в полярных кристаллах, используя многочастичную теорию Кона мелких примесных состояний в неполярных кристаллах [74]. Волновая функция примесного электрона раскладывается по точным многочастичным собственным функциям, описывающим движение полярона по кристаллу без примесей, но содержащему n валентных электронов и один избыточный электрон. Коэффициенты разложения для основного состояния примесного полярона удовлетворяют уравнению эффективной массы в импульсном представлении. Фурье-преобразование этого уравнения дает водородоподобное уравнение Шредингера

для примесного полярона. В этом уравнении эффективная масса равна m^{**} , а кулоновский потенциал экранируется диэлектрической постоянной, равной статической диэлектрической постоянной ϵ .

§ 6. Метод функций Грина

Этот метод основан на часто используемом в квантовой теории поля формализме теории возмущений, зависящей от времени. Преимущество этого метода при решении многочастичных задач физики твердого тела заключается в том, что без нахождения многочастичных собственных функций могут быть вычислены определенные динамические величины, называемые гриновскими функциями (пропагаторами), которые описывают поведение лишь небольшого числа частиц. Функции Грина могут быть достаточно прямо связаны с экспериментальными величинами такими, как энергия основного состояния системы или электрическая проводимость. В частности, одночастичная гриновская функция, описывающая амплитуду вероятности нахождения частицы при g'' , t'' , если она была введена при g' , t' , полезна для нахождения приближенных собственных значений энергии многочастичной системы. В нашем случае эта система состоит из одного электрона и ионной решетки. Мы хотим найти приближенные собственные состояния, соответствующие «одетой» частице или квазичастице. Квазичастицей в нашем случае является полярон, состоящий из электрона, одетого виртуальным фононным облаком. Энергии этих квазичастичных возбуждений содержат как вещественную, так и мнимую части; мнимая часть связана с конечным временем жизни квазичастицы, которая есть только приближенное собственное состояние системы электрон плюс решетка. При конечных температурах T соответствующая одночастичная гриновская функция определяет квазичастицы с зависящей от температуры собственной энергией, массой и временем жизни. Обсуждение общих свойств гриновских функций при $T = 0$ и $T \neq 0$ и, в частности, правила для построения и оценки фейнмановских диаграмм теории возмущений для собственной энергии электрона, взаимодействующего с фононным полем, можно найти в монографии [75] на стр. 124.

Метод функций Грина был применен к проблеме полярона Уитфилдом и Паффом [76, 21] и Пайнсом [77]. В то время как последний рассматривает взаимодействие электрона с поляризационными фононами как возмущение и находит ряд теории возмущений для электронной гриновской функции и собственной энергии при $T = 0$, первые авторы устраняют фононные нормальные координаты из уравнения движения для электронной гриновской функции, а затем рассматривают с помощью теории возмущений (при $T \neq 0$) результирующее электрон-

электронное взаимодействие, которое является запаздывающим подобно действию в фейнмановских интегралах для полярона.

При $T=0$ электронная и фононная гриновские функции, определенные Фрелиховским гамильтонианом в представлении вторичного квантования ($\hbar=1$)

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q}) b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} V_{\mathbf{q}} (b_{-\mathbf{q}}^{\dagger} - b_{\mathbf{q}}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}, \quad (6.1)$$

имеют вид

$$G(\mathbf{k}, t'' - t') = -i \langle \Psi_{\mathbf{g}} | T [a_{\mathbf{k}}(t'') a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t')] | \Psi_{\mathbf{g}} \rangle; \quad (6.2)$$

$$D(\mathbf{q}, t'' - t') = -i \langle \Psi_{\mathbf{g}} | T [b_{\mathbf{q}}(t'') b_{\mathbf{q}}^{\dagger}(t')] | \Psi_{\mathbf{g}} \rangle. \quad (6.3)$$

Здесь \mathcal{H} эквивалентен (2.1), если пренебречь дисперсией фононов (это можно увидеть, если записать \mathcal{H} через электронные операторы $\psi(\mathbf{r})$ «поля частиц», см. § 6 гл. II в [75]); $\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, а $\Psi_{\mathbf{g}}$ — волновая функция основного состояния. Электронная гриновская функция G содержит операторы рождения $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t)$ и уничтожения $a_{\mathbf{k}}(t)$ для электрона с волновым вектором \mathbf{k} , где

$$a_{\mathbf{k}}(t) = e^{i\varepsilon(\mathbf{k})t} a_{\mathbf{k}} e^{-i\varepsilon(\mathbf{k})t}, \quad (6.4)$$

$a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ удовлетворяют антикоммутиационным соотношениям для фермиевских операторов. Физический смысл гриновской функции в том, что она есть амплитуда вероятности нахождения в системе частицы с импульсом \mathbf{k} в момент t'' , которая была введена в систему в более ранний момент t'

$$\langle \Psi_{\mathbf{g}} | a_{\mathbf{k}}(t'') a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t') | \Psi_{\mathbf{g}} \rangle = iG(\mathbf{k}, t'' - t'). \quad (6.5)$$

Так как фейнмановский интеграл по траекториям $K(\mathbf{R}, t''; 0, t')$ есть амплитуда вероятности нахождения частицы в точке \mathbf{R} в момент t'' , если она была в точке $\mathbf{R} = 0$ в момент t' , то очевидно, что

$$iG(\mathbf{k}, t'' - t') = \int K(\mathbf{R}, t''; 0, t') \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}) \frac{d\mathbf{R}}{(2\pi)^3}. \quad (6.6)$$

В выражении для G и D появляется оператор упорядочения по времени T , определенный следующим образом:

$$\begin{aligned} T \{A(t'') B(t')\} &= A(t'') B(t') \quad \text{при } t'' > t', \\ &= \pm B(t') A(t'') \quad \text{при } t'' < t', \end{aligned} \quad (6.7)$$

где знак минус относится к ферми-частицам, а знак плюс — к бозе-частицам. Среднее ожидаемое значение упорядоченного произведения операторов берется по электронному и фононному вакууму, который представляет собой основное состояние \mathcal{H} (во вторичном квантовании), $|\Psi_{\mathbf{g}}\rangle = |0\rangle = |0\rangle_{\text{el}} |0\rangle_{\text{ph}}$. Соответствующая гриновская функция гармонического кристалла имеет

простой вид

$$D(\mathbf{q}, t'' - t') = D_0(\mathbf{q}, t'' - t') = -i \frac{\omega(\mathbf{q})}{2} \exp[-i\omega(\mathbf{q})(t'' - t')], \quad t'' > t'. \quad (6.8)$$

Фурье-преобразование по времени определяет фононную гриновскую функцию, зависящую от энергии

$$D_0(\mathbf{q}, t'' - t') = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp[-i\omega(t'' - t')] D_0(\mathbf{q}, \omega), \quad (6.9)$$

где

$$D_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\omega(\mathbf{q})}{2} \left\{ \frac{1}{\omega - \omega(\mathbf{q}) + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega(\mathbf{q}) - i\delta} \right\}. \quad (6.10)$$

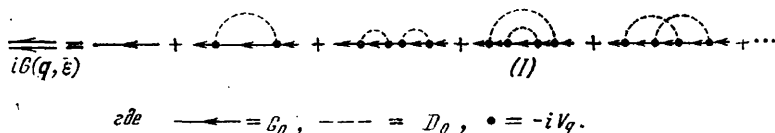
Величина $i\delta$ характеризует путь обхода полюса при интегрировании по ω . Функция Грина $D_0(\mathbf{q}, \omega)$ имеет полюс при $(\omega(\mathbf{q}) - i\delta)$, соответствующий рождению фонона с волновым вектором \mathbf{q} , и полюс при $(-\omega(\mathbf{q}) + i\delta)$, соответствующий уничтожению фонона. Гриновская функция электрона находится в форме ряда теории возмущений по электрон-фононному взаимодействию. Пренебрегая этим взаимодействием из (6.2) для свободной функции Грина, получим

$$G_0(\mathbf{k}, t'' - t') = -i \exp[-i\varepsilon(\mathbf{k})(t'' - t')], \quad t'' > t'. \quad (6.11)$$

Фурье-преобразование по времени определяет зависящую от энергии функцию Грина электрона

$$G_0(\mathbf{k}, \varepsilon) = [\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}) + i\delta]^{-1}. \quad (6.12)$$

Она имеет полюс под вещественной осью, который определяет энергию свободного электрона. Если $t' > t''$, тогда $G_0 = 0$ согласно (6.2). Для практического нахождения точной функции Грина электрона G используется ряд теории возмущений фейнмановских диаграмм, который имеет вид (I):



Согласно простым правилам вычисления диаграмм, которые были установлены Пайнсом [77], импульсы и энергия должны сохраняться в каждой вершине. Невозможно просуммировать все диаграммы, появляющиеся в бесконечном ряду (I). Однако с помощью величины, известной под названием неприводимой собственно-энергетической части, определенный класс диаграмм, соответствующий вкладу в неприводимую собственно-энергетическую часть, может быть просуммирован, например диаграммы, не имеющие пересечений фононных линий (скажем,

таких, как в последнем члене в (I)). Если предположить, что диаграммами с пересечениями можно пренебречь, то гриновская функция электрона имеет вид

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G, \quad (6.13)$$

где неприводимая собственно-энергетическая часть Σ дается диаграммным разложением (II):

$$\Sigma(q, \varepsilon) = \text{---} \overset{\text{---}}{\text{---}} \text{---} + \text{---} \overset{\text{---}}{\text{---}} \text{---} + \dots = -iV_q \frac{iD_0(q, \omega)}{i\delta(k-q, \varepsilon-\omega)} - iV_q.$$

(II)

Очевидно, что подстановка (II) в (6.13) приводит к появлению всех диаграмм (I), кроме диаграмм с пересечением. Уравнение (6.13) есть определяющее уравнение для собственной энергии; его можно записать так:

$$G = (G_0^{-1} - \Sigma)^{-1} = [\varepsilon - \varepsilon(k) - \Sigma(k, \varepsilon) + i\delta]^{-1}. \quad (6.14)$$

Энергия полярона дается полюсом G

$$E(k) = \varepsilon(k) + \Sigma[k, E(k)]. \quad (6.15)$$

Вычисление собственной энергии с помощью первого члена в (II) приводит к результату второго порядка теории возмущений (3.4) и (3.5), в то время как суммирование ряда диаграмм дает нелинейное интегральное уравнение для собственной энергии:

$$\Sigma(k, \varepsilon) = \int \frac{dq}{(2\pi)^3} \frac{|V_q|^2}{\varepsilon - (k-q)^2/2m^* + \omega - \Sigma(k-q, \varepsilon - \omega) + i\delta}. \quad (6.16)$$

Точное решение этого уравнения может быть найдено только численными методами. Приближенное решение, дающее более высокую собственную энергию, чем теория возмущений, было найдено Уитфилдом и Паффом [76]. Таким образом, интегральное уравнение (6.16) недостаточно для вычисления собственной энергии полярона. Пренебрежение диаграммами с пересечениями фононных линий соответствует предположению, что фононы поглощаются по времени в порядке, обратном тому, в котором они испускались: $q_1, q_2, \dots, q_n \rightarrow q_n, \dots, q_2, q_1$. Тогда вершинными поправками к собственной энергии электрона, соответствующими диаграммам с пересечением, можно пренебречь. Это предположение справедливо для вырожденных систем, в которых $\mu \gg \hbar\omega_0$ (здесь μ — энергия Ферми). На этом основано получение нелинейного интегрального уравнения для собственной энергии (энергетической щели) куперовской пары в сверхпроводнике [78]. При вычислении собственной энергии одного электрона, когда $\mu \leq \hbar\omega_0$, поправками к вершинам нельзя пренебрегать.

При конечных температурах T Уитфилд и Пафф получили уравнение для электронной функции Грина, которое содержит

эффективное электрон-электронное взаимодействие вместо электрон-фононного взаимодействия. Электронная и фононная гриновские функции при $T \neq 0$ определяются соответственно

$$G(\mathbf{k}, t'' - t') = -i \langle T \{ a_{\mathbf{k}}(t'') a_{\mathbf{k}}^+(t') \} \rangle, \quad (6.17)$$

$$D(\mathbf{q}, t'' - t') = -i \langle T \{ b_{\mathbf{q}}(t'') b_{\mathbf{q}}^+(t') \} \rangle, \quad (6.18)$$

где

$$\langle X \rangle = \text{Sp} [e^{-\beta \mathcal{H}} X] / \text{Sp} [e^{-\beta \mathcal{H}}]. \quad (6.19)$$

Шпур берется по электронному вакууму \mathcal{H} , $\beta = 1/k_B T$. Граничные условия можно найти, подставляя $i\tau$ в (6.19) вместо β [75]; они имеют вид

$$D(\mathbf{k}, 0 - t') = D(\mathbf{k}, -i\beta - t'), \quad (6.20)$$

$$G(\mathbf{k}, t'' - t') = 0, \quad t'' < t'. \quad (6.21)$$

При наличии электронного вакуума уравнение движения для функции Грина фононов имеет простой вид, $\omega(\mathbf{q}) = \omega_0$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t''} - \omega_0 \right) D(\mathbf{q}, t'' - t') = \delta(t'' - t'). \quad (6.22)$$

Решение этого уравнения есть гриновская функция свободных фононов

$$D_0(\mathbf{q}, t'' - t') = \begin{cases} i \exp[-i\omega_0(t'' - t')] / [\exp(-\omega_0\beta) - 1], & t'' > t' \\ -i \exp[-i\omega_0(t'' - t')] / [\exp(\omega_0\beta) - 1], & t'' < t'. \end{cases} \quad (6.23)$$

Уравнение движения для электронной функции Грина содержит электрон-фононное взаимодействие, которое «перепутывает» электронную и фононную функции Грина

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial t''} - \frac{k^2}{2m^*} \right) G(\mathbf{k}, t'' - t') = \\ & = \delta(t'' - t') - i \frac{4\pi\alpha}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^2} \int_{t'}^{t''} dt [D_0(\mathbf{q}, t - t'') + D_0(\mathbf{q}, t'' - t)] \times \\ & \quad \times \langle T \{ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t'') \rho_{\mathbf{q}}(t) a_{\mathbf{k}}^+(t') \} \rangle. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Это — точное уравнение; $\rho_{\mathbf{q}} \equiv \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}$. Электрон-фононное взаимодействие исключено, а его влияние заменяется запаздывающим взаимодействием электрона с самим собой.

Пространственно-временная зависимость этого двухэлектронного взаимодействия $V(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}', t'' - t')$ может быть сразу написана, если предположить, что $\omega(\mathbf{q}) = \omega_0$. Тогда

$$D_0(\mathbf{q}, t'' - t') = D_0(t'' - t'),$$

$$V(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}', t'' - t') = \alpha \hbar \omega_0 \frac{(\hbar/2m^* \omega_0)^{1/2} \omega_0}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'|} [D_0(t'' - t') + D_0(t' - t'')]. \quad (6.25)$$

Для того чтобы решить (6.24), необходимо найти подходящую аппроксимацию для двухчастичной функции Грина, появляю-

щейся в правой части этого уравнения. Разумное приближение может заключаться в факторизации, которая в многоэлектронной теории приводит к приближению Хартри — Фока, т. е.

$$\langle T \{ a_{k-q}(t'') \rho_q(t) a_k^\dagger(t') \} \rangle \approx -G(k-q, t''-t) G(k, t-t'). \quad (6.26)$$

Такая факторизация четырехфермионной функции Грина была бы точной, если бы промежуточные состояния соответствовали фононному вакууму. В действительности промежуточные состояния могут содержать любое число фононов; из-за электрон-решеточного взаимодействия $a_k^\dagger(t')|0\rangle$ приводит, по истечении времени t' , к состоянию решетки, содержащему или ни одного фонона, или один, или несколько фононов. Приближение, эквивалентное приближению Хартри — Фока, приводит к интегральному уравнению для $\Sigma_{\text{ХФ}}(k, \epsilon)$, которое есть не что иное, как уравнение (6.16), полученное Пайнсом. Таким образом, приближение (6.26) соответствует в теории возмущений суммированию всех диаграмм, кроме диаграмм с пересечением фононных линий. Уитфилд и Пафф [76] решили приближенно интегральное уравнение (6.16) и нашли $\Sigma_{\text{ХФ}}$. Их результат заключается в том, что энергия покоящегося полярона больше энергии, полученной во втором порядке теории возмущений. Это показывает, что фейнмановские графики с пересечением фононных линий важны по крайней мере для $E(0)$. Зависимость энергии от импульса имеет резкий пик при $E(k) = E(0) + \hbar\omega_0$, а $\partial E/\partial k \rightarrow 0$, когда энергия приближается к энергии оптического фонона. Этот результат для $E(k)$ полярона определенно ближе к истинной кривой, чем результат второго порядка теории возмущений, показанный на рис. 3.

Для того чтобы получить результаты Ли, Лоу и Пайнса для промежуточной силы связи с помощью теории возмущений, зависящей от времени, Херинген тщательно проанализировал диаграммное представление собственной энергии, обратив особое внимание на эффект отдачи электрона, который обуславливает корреляцию между последовательно испускаемыми фононами. Он нашел подпоследовательность в диаграммном разложении по степеням: а) константы связи α и б) энергии отдачи, что приводит к результатам теории для промежуточной связи [79].

Каданов и Ривзин [80] нашли интересную формальную связь между точной функцией Грина полярона $G(k, \epsilon)$ для электрона, взаимодействующего с продольным поляризационным полем, и фейнмановской моделью полярона для электрона, взаимодействующего с фиктивной частицей через потенциал гармонического осциллятора. Было получено простое выражение для одно-временной ($t'' = t'$) функции Грина через функцию Грина, соответствующую фейнмановской модели полярона и описываемую лагранжианом (5.32).

ГЛАВА III

ПОДВИЖНОСТЬ ПОЛЯРОНОВ БОЛЬШОГО РАДИУСА

§ 7. Постановка задачи

Электрический ток, создаваемый поляронами в приложенном внешнем однородном электрическом поле E , имеет обычный вид

$$j = \sigma E, \quad (7.1)$$

где σ — диагональная компонента тензора электропроводности, который в решетке кубической симметрии изотропен.

Дрейфовая подвижность поляронов μ может быть определена через электропроводность

$$\sigma = ne\mu, \quad (7.2)$$

где n — концентрация поляронов, а e — электрический заряд, равный заряду свободного электрона. Дрейфовую подвижность можно рассматривать как среднюю скорость n поляронов в единичном электрическом поле. Если существует время релаксации τ , которое описывает релаксацию возмущенного распределения поляронов к распределению Максвелла — Больцмана под влиянием рассеяния, то дрейфовая подвижность есть

$$\mu = \frac{e}{m^{**}} \langle \tau \rangle, \quad (7.3)$$

где для изотропного времени релаксации $\tau = \tau(E)$,

$$\langle \tau(E) \rangle = \frac{4}{3\pi^{1/2} (k_B T)^2} \int_0^{\infty} \tau(E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) E^{3/2} dE. \quad (7.4)$$

Дрейфовая подвижность отличается от холловской подвижности

$$\mu_H = R\sigma, \quad (7.5)$$

если постоянная Холла R не равна просто $(nec)^{-1}$. В слабых магнитных полях, где циклотронная частота $\omega_c = eH/cm^{**}$ много меньше частоты столкновений τ^{-1} , постоянная Холла есть [81]

$$R = -\frac{1}{nec} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}, \quad (\omega_c \tau)^2 \ll 1, \quad (7.6)$$

где $e > 0$ — заряд электрона. В сильных магнитных полях R не зависит ни от степени вырождения носителей, ни от энергетической зависимости τ и имеет вид [82]

$$R_{\infty} = -\frac{1}{nec}, \quad (\omega_c \tau)^2 \gg 1. \quad (7.7)$$

Это условие сильного поля экспериментально трудно выполнить, в частности, в области промежуточных и высоких температур $k_B T \gtrsim \hbar \omega_0$, где доминирует рассеяние на оптических фононах. Поэтому для нахождения подвижности обычно пользуются постоянной Холла в слабых полях. При низких температурах подвижность полярона определяется рассеянием поляронов на примесях и акустических фононах. Примесное рассеяние упругое, и соответствующее время релаксации легко вычислить, если известно взаимодействие между квазичастицей, т. е. поляроном, и примесью. В чистых кристаллах при низких температурах, когда еще слабо возбуждены оптические фононы, доминирует рассеяние на акустических фононах. Изменение энергии полярона при его рассеянии на акустических фононах мало. Кроме того, матричный элемент взаимодействия полярона с длинноволновым акустическим фононом меньше матричного элемента взаимодействия полярона с электрическим полем дипольных моментов, связанных с поляризационными волнами. Поэтому рассеяние на акустических фононах можно рассматривать в приближении времени релаксации вплоть до температур $T \leq 1^\circ \text{K}$.

При высоких температурах $k_B T \gtrsim \hbar \omega_0$ доминирует рассеяние на оптических фононах. Как было указано Шульцем [49], имеются две трудности при вычислении соответствующей подвижности поляронов. Первая трудность в том, чтобы определить основные процессы рассеяния оптических фононов. Не существует хорошей теории движущихся поляронов, за исключением теории медленных поляронов с энергией $E(\mathbf{k}) - E(0) < \hbar \omega_0$. Из-за неупругого характера взаимодействия матричный элемент между поляронными состояниями должен оцениваться для конечных состояний с энергией $E(\mathbf{k}) - E(0) > \hbar \omega_0$. Таким образом, должна быть известна волновая функция полярона, обладающего такой энергией, которая была бы достаточна, чтобы полярон мог спонтанно испустить оптический фонон. Кроме того, конечная плотность состояний, входящая в вероятность перехода, зависит от закона дисперсии поляронов при высоких энергиях. Вторая трудность возникает при использовании уравнения Больцмана. Кон и Латтинджер [83] показали, что условием (достаточным) справедливости уравнения Больцмана при рассеянии на случайных центрах является либо слабость взаимодействия с ними, либо малость их концентрации. Первое предположение, сделанное при получении уравнения Больцмана, есть так называемое приближение «случайных фаз», согласно которому существует представление, в котором матрица плотности

диагональна в каждый момент времени [84]. Это предположение может быть оправдано случайностью потенциала возмущения, создаваемого тепловым движением частиц решетки. Второе предположение, особенно для нас важное, состоит в том, что время между последовательными столкновениями, которое порядка τ , больше времени длительности столкновений [84]

$$\tau > \hbar/k_B T. \quad (7.8)$$

Это условие выполняется, если последовательные акты рассеяния хорошо отделены по времени друг от друга. Должна отсутствовать интерференция между столкновениями так, чтобы поперечное сечение рассеяния для испускания или поглощения одного фонона не зависело от наличия других фононов. При сильном взаимодействии это условие удовлетворяется только при низких температурах, где τ велико и определяется другими механизмами рассеяния, а не рассеянием полярона на оптических фононах. Тем не менее в следующей части предполагается, что условие (7.8) справедливо также и при высоких температурах. Необходимо помнить, что теория подвижности, основанная на уравнении Больцмана и обсуждаемая ниже, есть теория слабой связи в том смысле, что перенос поляронного заряда описывается в предположении существования хорошо определенных квазичастиц, участвующих в единичных актах рассеяния и подчиняющихся уравнению Больцмана. В этой теории вычисление подвижности полярона проводится аналогично тому, как это делается при взаимодействии между электронами и оптическими фононами в неполярных кристаллах [85]; отличается только константа взаимодействия, а зонная масса заменяется на массу полярона. Совершенно другое приближение в задаче о подвижности полярона было использовано Фейнманом, Хеллворсом, Иддингсом и Платцманом (ФХИП) [4]. Они определили подвижность полярона, вычисляя функцию линейного отклика в электрическом поле через фейнмановский интеграл по путям, при этом в действии учитывалось влияние электрического поля на движение полярона. Этот метод и его результаты будут обсуждаться в отдельной части ниже, а сравнение теории с экспериментом — в § 10.

§ 8. Приближение уравнения Больцмана

А. Рассеяние одним оптическим фононом. Основная проблема, возникающая в уравнении Больцмана для поляронной функции распределения $f(E)$ в электрическом поле

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_t = 0, \quad (8.1)$$

заключается в вычислении скорости изменения f вследствие столкновений поляронов с оптическими фононами. Обычная

форма столкновительного члена

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c = -\frac{\dot{f} - f_0}{\tau} \quad (8.2)$$

применяется, если существует универсальное время, которое описывает релаксацию возмущенного распределения f к равновесному распределению f_0 после выключения электрического поля. Тогда подвижность вычисляется с помощью (7.3). Иначе говоря, необходимо решить некоторым приближенным методом интегральное уравнение (8.1), для того чтобы найти \dot{f} и тем самым — электрический ток \dot{j} . Необходимое условие существования времени релаксации: энергия, испускаемая или поглощаемая поляроном при столкновении, должна быть мала по сравнению с его начальной энергией, которая порядка $k_B T$. При низких температурах, когда $kT \ll \hbar\omega_0$, для поляронов, рассеивающихся на одном оптическом фоне, это условие не выполняется. При высоких температурах, которыми мы здесь интересуемся, существует время релаксации, и оно может быть легко вычислено. С этой целью запишем столкновительный член в виде

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c = -\frac{L^3 a^3}{8\pi^3 k_B T} \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f'_0 (1 - f_0) (\phi - \phi') d\mathbf{k}', \quad (8.3)$$

где $f'_0 = f_0(\mathbf{k}')$ и т. д. $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ есть вероятность переходов в единицу времени*), а возмущенная функция распределения ϕ дается выражением

$$f = f_0 - \phi(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (8.4)$$

Время релаксации $\tau(E)$ дается уравнениями (8.2) и (8.3). Поскольку часть исходного электрон-решеточного взаимодействия \mathcal{H}_{int} , ответственная за образование полярона, не выделена точно, то и взаимодействие, вызывающее переходы, точно не известно. Остаточное взаимодействие $\mathcal{H}_{\text{int}}^*$ отличается от электрон-решеточного взаимодействия \mathcal{H}_{int} . Шульц [49] учитывал это различие, разумно предполагая, что полярон-решеточная система описывается гамильтонианом вида

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{\text{pol}} + \mathcal{H}_{\text{int}}^* + \mathcal{H}_{\text{lat}}^* = \\ &= E(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{q}} Z_{\mathbf{q}}^{1/2} V_{\mathbf{q}} [b_{\mathbf{q}}^+ e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - b_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}] + \hbar\omega_0 \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}, \end{aligned} \quad (8.5)$$

где $Z_{\mathbf{q}}$ — эффективный экранирующий множитель или перенормирующий множитель, введенный из-за различия между электроном и поляроном, а $b_{\mathbf{q}}^+$ и $b_{\mathbf{q}}$ — модифицированные фоновые операторы рождения и уничтожения. Используя $\mathcal{H}_{\text{int}}^*$ (8.5) для

*) Это, обычно используемое в теории явлений переноса определение вероятности перехода в конечное состояние \mathbf{k}' , $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, не содержит конечной плотности состояний.

вероятности перехода в случае однофононного рассеяния, получим

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k} | \mathcal{H}_{\text{int}} | \mathbf{k}' \rangle|^2 \delta[E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}) \mp \hbar\omega_0] = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} Z_q^2 |V_q|^2 \{ N \delta[E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}) - \hbar\omega_0] + \\ &\quad + (N+1) \delta[E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}) + \hbar\omega_0] \}, \quad (8.6) \end{aligned}$$

где

$$N = \frac{1}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1} \quad (8.7)$$

есть среднее число фононов при температуре T , а $|\mathbf{k}\rangle$ означает состояние полярона, описываемое плоской волной с энергией $E(\mathbf{k}) = E(0) + \hbar^2 k^2 / 2m^{**}$. Знаки минус и плюс относятся к поглощению и испусканию оптического фонона соответственно*). С помощью (8.3) и (8.6) можно получить скорость изменения f вследствие столкновений между поляронами и фононами, которая аналогична по своему виду скорости изменения f , полученной Хауварсом и Зондхеймером [87], в случае взаимодействия электронов и оптических фононов в кристалле, содержащем неполяризуемые ионы. Если предположить, что электрическое поле направлено вдоль x , так что $\phi(\mathbf{k}) = k_x C(E)$, то (8.6) принимает вид

$$\begin{aligned} \left(\frac{df}{dt} \right)_c &= \\ &= - \frac{2\alpha \hbar \omega_0^2}{u \partial E / \partial k} \frac{\partial f_0}{\partial E} \int_{q_1}^{q_2} \frac{Z_q^2 dq}{q} \left\{ (N+1) \frac{f_0(E + \hbar\omega_0)}{f_0(E)} \left[\left(1 + \frac{\hbar\omega_0}{2E} - \frac{q^2}{2k^2} \right) \times \right. \right. \\ &\quad \times C(E + \hbar\omega_0) - C(E) \left. \right] + N \frac{f_0(E - \hbar\omega_0)}{f_0(E)} \times \\ &\quad \times \left[\left(1 - \frac{\hbar\omega_0}{2E} - \frac{q^2}{2k^2} \right) C(E - \hbar\omega_0) - C(E) \right] \left. \right\}, \quad (8.8) \end{aligned}$$

где

$$\left. \begin{aligned} q_1 &= (2m^{**}/\hbar^2)^{1/2} [(E + \hbar\omega_0)^{1/2} - E^{1/2}], \\ q_2 &= (2m^{**}/\hbar^2)^{1/2} [(E + \hbar\omega_0)^{1/2} + E^{1/2}] \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{для процессов} \\ \text{поглощения} \end{array} \quad (8.9)$$

и

$$\left. \begin{aligned} q_1 &= (2m^{**}/\hbar^2)^{1/2} [E^{1/2} - (E - \hbar\omega_0)^{1/2}], \\ q_2 &= (2m^{**}/\hbar^2)^{1/2} [E^{1/2} + (E - \hbar\omega_0)^{1/2}] \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{для процессов} \\ \text{испускания.} \end{array} \quad (8.10)$$

При высоких температурах $k_B T \gg \hbar\omega_0$, когда существует время релаксации, интегрирование в уравнении (8.8) легко проводится

*) Уравнение (8.6) было также найдено Е. М. Конвелл [86].

для $Z_q = 1$, что даёт $(\partial f / \partial t)_e$ в виде (8.2) со временем релаксации

$$\tau = \frac{1}{2\alpha\omega_0} \left(\frac{zE}{k_B T} \right)^{1/2}, \quad z = \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \ll 1. \quad (8.11)$$

Соответствующая формула для подвижности полярона, согласно (7.3), имеет вид

$$\mu = \frac{4}{3\pi^{1/2}} \frac{ez^{1/2}}{m^{**}\alpha\omega_0}, \quad z \ll 1. \quad (8.12)$$

При низких и промежуточных температурах, когда время релаксации не существует, для вычисления подвижности электронов, взаимодействующих с поляризационными фононами [14, 84], был использован вариационный принцип Колера [88]. Результат имеет вид

$$\mu = \frac{4}{3\pi^{1/2}} \frac{e}{m^{**}\alpha\omega_0} [G(z)(e^z - 1)/z^{1/2}], \quad (8.13)$$

где $G(z)$ есть функция порядка 1, определенная Хауварсом и Зондхеймером [87]. При $z \ll 1$ функция $G(z)$ стремится к 1 и (8.13) переходит в высокотемпературную формулу (8.12). При $z \gg 1$ функция $G(z)$ стремится к постоянной, умноженной на $z^{1/2}$, так что низкотемпературная подвижность изменяется как e^z . Экспоненциальная температурная зависимость подвижности, характерная для рассеяния на оптических фононах, число заполнения которых есть $(e^z - 1)^{-1}$, была впервые найдена Фрелихом [89]. Вышеприведенные формулы для подвижности μ применимы в случае слабой связи, когда $\alpha \leq 1$. В случае сильной связи $\alpha \gg 1$ Пекар [58] сформулировал теорию подвижности полярона на основе своего гамильтониана (4.26) для полярон-фононной системы. При вычислении стационарных состояний полярона с помощью гамильтониана (4.26) пренебрегалось эффективным взаимодействием полярона с колебаниями смещенных осцилляторов решетки. Взаимодействие состоит из двух частей $\mathcal{H}_{1, \text{int}}^1 + \mathcal{H}_{2, \text{int}}^2$, приводящих к одно- и двухфононному рассеянию соответственно. Здесь мы рассмотрим только однофононное рассеяние; двухфононные процессы обсуждаются в следующем параграфе. Однофононное взаимодействие по Пекару имеет вид

$$\mathcal{H}_{1, \text{int}}^1 = \frac{\hbar^2}{2m^{**}} \sum_q' \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \xi_q^{(R)}}{\partial R_i^2} \frac{\partial}{\partial \xi_q'}, \quad (8.14)$$

где R_i ($i = 1, 2, 3$) — координаты полярона, а $\xi_q^{(R)}$ — значения нормальных координат кристалла, соответствующих равновесным положениям частиц решетки после того, как электрон помещен в точку R , а решетка отрелаксировала, ξ_q' — новые нормальные координаты смещенных осцилляторов, которые даются уравнениями (4.23) — (4.25). Вычисление матричных элементов

\mathcal{H}_{int} между стационарными состояниями $\Psi(\mathbf{k}, \{n_q\})$, определенными выражением (4.27), можно провести до конца, поскольку $\xi_q^{(R)}$ вычисляются непосредственно из (4.20) и (4.21). Подвижность полярона при низких температурах имеет вид

$$\mu = \frac{e}{2m^{**}\alpha\omega_0} \left(\frac{m^*}{m^{**}} \right)^{1/2} \frac{(1+x)^8}{(1+1/7x)^2} (e^z - 1), \quad z \gg 1, \quad (8.15)$$

а при высоких температурах

$$\mu = \frac{0,733}{\pi^{1/2}} \frac{e\alpha z^{-1/2}}{(m^*m^{**})^{1/2}\omega_0}, \quad z \ll 1. \quad (8.16)$$

Здесь $x = 0,0232\alpha^2$. Результат Пекара для температурной зависимости подвижности полярона при низких температурах (8.15) согласуется с результатом (8.13), полученным с помощью вариационного принципа Колера. Интересно, что как функция величины α подвижность растет как α^6 (для $\alpha \geq 8$), так как $m^{**} \sim \alpha^4$ (см. также § 9, В)*.

Б. Двухфононное рассеяние. Резонансное рассеяние. Вероятность перехода для однофононного рассеяния (8.6) содержит один член, связанный с испусканием фонона $\sim (N+1)$, и второй член, связанный с поглощением фонона $\sim N$. Так как вероятность испускания фонона при низких и промежуточных температурах, когда $k_B T \leq \hbar\omega_0$, много больше вероятности поглощения фонона, то можно предположить, что вслед за каждым актом поглощения фонона немедленно следует испускание фонона. Сумма вероятностей переходов двух последовательных процессов приблизительно равна вероятности перехода с поглощением фонона. Кроме того, такой двойной процесс является упругим процессом, так как энергия фонона не зависит от q . Поэтому начальному и конечному состояниям полярона для такого двойного процесса отвечают состояния с малой энергией, для которых закон дисперсии такой же, как у свободной частицы с эффективной массой m^{**} . Такой двойной процесс называется резонансным рассеянием, по аналогии с резонансной флюоресценцией, известной из атомных спектров. Шульц [49] показал, что для вычисления вероятности перехода такого двойного процесса для полярон-фононной системы, описываемой идеализированным гамильтонианом (8.5), не требуется знания точных волновых функций поляронов с высокой энергией в промежуточном состоянии. Вероятность перехода полярона из начального состояния с импульсом \mathbf{k} в конечное с импульсом \mathbf{k}' в телесном угле $d\Omega'$ около \mathbf{k}' есть

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d\Omega' = \\ = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} N d\Omega' \rho' \int d\mathbf{k}_i d\Omega_i k_i^2 \frac{|\langle \mathbf{k} | \mathcal{H}_{\text{int}} | \mathbf{k}_i \rangle|^2 |\langle \mathbf{k}_i | \mathcal{H}_{\text{int}} | \mathbf{k}' \rangle|^2}{[E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_i)]^2 + \frac{1}{4} \beta^2 (\mathbf{k}_i)}, \quad (8.17) \end{aligned}$$

*) При $x \gg 7$ подвижность μ растет пропорционально α^5 . (Прим. ред.)

где $\rho' = \rho(k')$ — конечная плотность состояний, равная

$$\rho(k') = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{k'^2}{(\partial E/\partial k)_{k=k'}}. \quad (8.18)$$

Закон сохранения энергии требует $E(k') = E(k)$, так как энергия фонона есть константа $\hbar\omega_0$. В промежуточном состоянии полярон обладает волновым вектором k_i и энергией $E(k_i) + \frac{1}{2}i\beta^2(k_i)$. Мнимая часть этой энергии учитывает малое время жизни поларона в промежуточном состоянии. Скорость распада этого состояния с испусканием оптического фонона равна

$$\beta(k_i) = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\Omega' \rho' |\langle k' | \mathcal{H}_{\text{int}}^* | k_i \rangle|^2 N. \quad (8.19)$$

Если $k = k' \rightarrow 0$, тогда $\beta(k_i) \rightarrow 0$ и вероятность перехода становится изотропной, т. е. она зависит от $|k' - k|$. Поэтому $W(k, k') = W(|k' - k|)$ и равна средней $\frac{1}{4\pi} \int d\Omega' W(k, k')$. Шульц проинтегрировал (8.17) по углам $\frac{1}{4\pi} \int d\Omega'$, подставил вместо $k_i^2 dk_i$ величину $\frac{dk_i}{dE_i} k_i^2 dE_i$ и принял, что

$$\frac{1}{2} \beta_i (E - E_i)^2 + \frac{1}{4} \beta_i^2 \approx \pi \delta(E - E_i), \quad (8.20)$$

и тогда из уравнений (8.17) — (8.20) получил для вероятности перехода

$$\begin{aligned} W(k, k') d\Omega' &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{d\Omega'}{4\pi} N \int d\Omega_i dE_i \rho_i |\langle k_i | \mathcal{H}_{\text{int}}^* | k \rangle|^2 \delta(E - E_i) = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} d\Omega' \rho_r N |\langle k_r | \mathcal{H}_{\text{int}}^* | k \rangle|^2. \end{aligned} \quad (8.21)$$

Индекс r означает промежуточное состояние, в котором сохраняется энергия (согласно (8.20)), $E(k_r) = E(k) + \hbar\omega_0$. Матричный элемент имеет вид

$$|\langle k_r | \mathcal{H}_{\text{int}}^* | k \rangle| = Z_r^{1/2} V_{k_r}.$$

Основной результат состоит в том, что вероятность перехода для двойного процесса (8.21) точно равна вероятности перехода с поглощением оптического фонона, т. е. первому члену в (8.6). Соответствующее время релаксации имеет вид

$$\frac{1}{\tau} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} W(k, k') (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta d\psi, \quad (8.22)$$

где $\sin \theta d\theta d\psi = d\Omega'$. Так как вероятность W изотропна, то, подставляя (8.21) в (8.22), получим

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} 4\pi \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{k_r^2}{\hbar v_r} V_{k_r}^2 Z_r N. \quad (8.23)$$

Время релаксации не зависит от энергии полярона, а зависит от резонансного волнового вектора k_r , резонансной скорости $v_r = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial k} \right)_{k=k_r}$ и экранирующего фактора $Z_r = Z_{q=k_r}$. Для времени релаксации, не зависящего от энергии, подвижность, согласно (7.3), равна $e\tau/m^{**}$. Поэтому подвижность в случае резонансного рассеяния есть

$$\mu = \frac{e}{2m^{**}\alpha\omega_0} \frac{v_r}{Z_r (2\hbar\omega_0/m^*)^{1/2}} (e^z - 1), \quad z \gg 1. \quad (8.24)$$

Предполагая, что энергия полярона $E(k) = E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^{**}}$, его начальный импульс $k \sim 0$, резонансный импульс k_r есть $\left(\frac{2m^{**}\omega_0}{\hbar} \right)^{1/2}$, а резонансная скорость $v_r = \left(\frac{2\hbar\omega_0}{m^*} \right)^{1/2}$, получим, что подвижность равна

$$\mu = \frac{e}{2m^{**}\alpha\omega_0 Z_r} \left(\frac{m^*}{m^{**}} \right)^{3/2} (e^z - 1), \quad z \gg 1. \quad (8.25)$$

В случае слабой связи константа перенормировки $Z_r = 1$. В случае сильной связи можно показать, что $Z_r = e^{1/\alpha^2}$ (см. § 9, В). Как функция α подвижность растет для $\alpha > 4$. Этот результат совместно с результатом Пекара (8.15) будет обсуждаться в § 9, В.

В 1955 г. Лоу и Пайнс [90] исследовали полярон-фононное рассеяние и получили для вероятности рассеяния результат, подобный результату Шульца для резонансного рассеяния. Авторы вычислили вероятность перехода с помощью формулы для S -матрицы, полученной Лоу [91] для фермион-бозонного рассеяния. При вычислении матрицы рассеяния в качестве начальных и конечных состояний полярона использовались состояния, соответствующие низким энергиям, полученные в теории промежуточной связи Ли, Лоу и Пайнсом [45]. Поляронные волновые функции, использованные в качестве промежуточных состояний, содержат только бесфононный и однофононный члены. В этом случае результат для подвижности полярона подобен результату Шульца

$$\mu = \frac{e}{2m^{**}\alpha\omega_0} \left(\frac{m^*}{m^{**}} \right)^3 f(\alpha) e^z, \quad z \gg 1, \quad (8.26)$$

где функция $f(\alpha) = 1$ для $\alpha = 0$ и меняется при малых α как α^2 ; $f(\alpha)$ — медленно растущая функция α и достигает при $\alpha = 7$ значения 1,4.

Изящный метод получения подвижности полярона, обусловленной резонансным рассеянием при низких температурах, был дан Кадановым [92]. Его расчет основан на уравнении Больцмана для распределения поляронов, каждый из которых описывается фейнмановской моделью осциллятора (5.32). Его результат отличается от результата ФХИП (см. (9.46)) только отсутствием множителя $3/2z$.

Двухфононное рассеяние, существенно отличное от резонансного рассеяния, обсуждалось Пекаром [1] для случая сильной связи $\alpha \gg 1$. В то время как резонансное рассеяние соответствует рассмотрению полярон-решеточного взаимодействия, линейного по смещениям во втором порядке теории возмущений, двухфононное рассеяние, рассмотренное Пекаром, получается из-за члена взаимодействия в его гамильтониане, билинейного по смещениям. Этот член имеет вид

$$\mathcal{H}_{2, \text{int}}^* = \frac{\hbar^2}{2m^{**}} \sum_{q, q_1} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \xi_q^{(R)}}{\partial R_i} \frac{\partial \xi_{q_1}^{(R)}}{\partial R_i} \frac{\partial^2}{\partial \xi_q' \partial \xi_{q_1}'}, \quad (8.27)$$

где R_i — координаты полярона, $\xi_q^{(R)}$ определяется уравнением (4.20), а ξ_q' — нормальные координаты смещенных осцилляторов решетки, определяемые выражениями (4.23) — (4.25). Член взаимодействия $\mathcal{H}_{2, \text{int}}^*$ в гамильтониане Пекара (4.26) имеет не исчезающие матричные элементы между начальным и конечным состоянием полярона $\Psi(\mathbf{k}, \{n_q\})$ (4.27), если одновременно поглощаются или испускаются два фонона или если один фонон поглощается и один испускается. Двухфононное поглощение или испускание не дают значительного вклада в полную вероятность перехода $\mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ вследствие ограниченности фазового объема из-за законов сохранения энергии и импульса. Двойной процесс, когда первый фонон поглощается и одновременно испускается второй фонон, отличается от резонансного рассеяния, обусловленного виртуальными переходами второго порядка. Для вклада в подвижность, обусловленного $\mathcal{H}_{2, \text{int}}^*$, Пекар нашел

$$\mu = \frac{144}{\pi^{1/2}} \frac{e}{(m^{**}m^*)^{1/2} \alpha \omega_0} \frac{e^2 - 1}{z^{1/2}}, \quad z \gg 1 \quad (8.28)$$

при низких температурах и

$$\mu = \frac{144}{\pi^{1/2}} \frac{e z^{1/2}}{(m^{**}m^*)^{1/2} \alpha \omega_0}, \quad z \ll 1 \quad (8.29)$$

при высоких температурах. Как можно видеть из сравнения (8.28) и (8.15), при низких температурах одновременное рассеяние двух фононов менее эффективно, чем однофононное рассеяние. Однако при высоких температурах подвижность, определяемая (8.29), может стать меньше подвижности, определяемой однофононным рассеянием поляронов Пекара (8.16)*).

*) В том случае, когда $\mu_2 \leq \mu_1$ (т. е. $\hbar\omega_0/k_B T < \alpha^2/200$), но $\alpha \geq 8$, кинетическое уравнение (которое использовал Пекар) все еще применимо, ибо $\hbar/\tau \ll k_B T$, но рассеяние фактически становится многоквантовым, т. е. полярон уже очень «рыхлый», и его шуба становится очень «непрочной». При этом значение подвижности близко к $1 \text{ см}^2/\text{в} \cdot \text{сек}$. Это легко увидеть, если представить формулу (8.16) в виде

$$\mu = \frac{10^2}{\alpha z^{1/2}} \left(\frac{m_0}{m^*} \right) \frac{4,8 \cdot 10^{13}}{\omega_0} \text{ см}^2/\text{в} \cdot \text{сек}. \quad (\text{Прим. ред.})$$

В. Рассеяние на акустических фононах. Пьезоэлектрические эффекты. В полярных кристаллах, так же как и в неполярных, акустические фононы могут рассеивать «свободные» заряженные носители. В то время как в неполярных кристаллах только изменение объема, вызываемое акустическим фононом, является источником возмущения, обуславливающего рассеяние, в полярных кристаллах существует и другое возмущение движения электрона, если симметрия кристалла такова, что положения ионов не совпадают с положением центра инверсии. Такие кристаллы — пьезоэлектрики, т. е. у них появляется электрический дипольный момент при наложении деформации в определенных направлениях. В пьезоэлектрических кристаллах амплитуды колебаний двух противоположно заряженных ионов различны. В результате возникает поляризационное поле, которое дает вклад в возмущение, создаваемое акустическим фононом *). Взаимодействие полей таких электрических диполей с электронами проводимости приводит к тому, что называется пьезоэлектрическим полярным эффектом. Изменение энергии электрона вследствие пьезоэлектрического взаимодействия вычислялось Мейен и Хопфилдом [94] и Габриелем [95], которые использовали теорию возмущений во втором порядке. Для энергии была получена следующая формула:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{\pi}{2} \frac{\alpha^* k_B T}{a_0 k}, \quad k > m^* c_t / \hbar, \quad (8.30)$$

где α^* — пьезоэлектрическая константа связи, а a_0 — боровский радиус. Поправочный член справедлив для электронов, чьи скорости больше групповой скорости c_t поперечных фононов; иначе теория возмущения несправедлива.

Пьезоэлектрическая константа связи α^* определяется как среднее взаимодействие между электронами проводимости и продольным поляризационным полем, сопровождающим акустический фонон, бегущий в произвольном направлении в кристалле. Так же как и в случае оптических фононов, электрон взаимодействует только с продольным поляризационным полем; однако вклад в продольное поляризационное поле дают не только продольные фононы, но и поперечные. Величина этих продольных полей P_i определяется компонентой e_{ijk} пьезоэлектрического тензора, который является тензором третьего ранга и связывает вектор поля с тензором напряжений S_{jk}

$$P_i = -e_{ijk} S_{jk}, \quad i, j, k = 1, 2, 3, \quad (8.31)$$

*) То же имеет место в полярных кристаллах, которые не являются пьезоэлектриками, так как их пространственная группа содержит операцию инверсии (NaCl, например). Различие в массах положительных и отрицательных ионов приводит к различным амплитудам колебаний и соответствующему поляризационному полю. Его взаимодействие с электронами проводимости обсуждалось Мейером и Палдером [93].

где i — направление движения фонона. Для того чтобы в случае CdS и ZnO найти среднее от e_{ijk} для фононов, бегущих во всех направлениях, Хатсон [96] преобразовал пьезоэлектрический тензор для структуры вюрцита от прямоугольных к сферическим координатам. Через e_{rrr} обозначена компонента тензора, которая связывает продольное поле в r -направлении с компонентой напряжения S_{rr} продольного фонона, движущегося в r -направлении, $e_{r\theta r}$, $e_{r\varphi r}$ — компоненты, связывающие продольное поле в r -направлении, возникающее из-за поля напряжений S_r и $S_{\varphi r}$ поперечного фонона, движущегося в r -направлении. Изотропная константа взаимодействия α^* вычисляется в виде средних $(\dots)_{Av} = \frac{1}{4\pi} \int \int (\dots) \sin \theta d\theta d\varphi$ от пьезоэлектрических констант. В результате имеем

$$\alpha^* = (K_l^2)_{Av} + (K_t^2)_{Av}, \quad (8.32)$$

где

$$(K_l^2)_{Av} = \frac{(e_{rrr}^2)_{Av}}{\epsilon c_l}, \quad (K_t^2)_{Av} = \frac{(e_{r\theta r}^2)_{Av}}{\epsilon c_t}. \quad (8.33)$$

Здесь c_l и c_t — групповые скорости продольного и поперечного фононов соответственно. Предполагается, что диэлектрическая постоянная ϵ изотропна. В случае других структур, таких, как структура цинковой обманки, три существенных компоненты e_{rrr} , $e_{r\theta r}$, $e_{r\varphi r}$ так же легко находятся. Вернемся теперь к подвижности.

Влияние расширения, возникающего при распространении акустических фононов, на подвижность обсуждалось детально Фэнгом [81]. Для полупроводников, когда распределение носителей — бальцмановское, время релаксации имеет вид

$$\frac{1}{\tau_a} = \frac{4}{9\pi} \frac{C^2 k_B T m^{*2} v}{\hbar^4 c_l^2 \rho} = \frac{v}{l_a}, \quad (8.34)$$

где c_l — скорость звука, ρ — плотность, а C — хорошо известная константа взаимодействия, введенная Блохом [11] и Нордгеймом [97] в теории электропроводности. Константа C может быть связана с деформационным потенциалом E_1 [14]. $C \sim E_1 S$, где S — локальное напряжение [98]. Эффективная масса, фигурирующая в выражении для длины свободного пробега l_a в полярных кристаллах, есть m^* , а не m^{**} , так как электрон-фононное взаимодействие короткодействующее и не экранируется поляризацией смещения. Выраженная через l_a подвижность имеет вид

$$\mu_a = \frac{e}{m^{**}} \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{\pi}} \frac{l_a}{(k_B T / m^{**})^{1/2}}. \quad (8.35)$$

Это выражение справедливо в случае слабой связи $\alpha < 1$. Для полярона Пекара $\alpha \gg 1$ вероятность перехода под действием акустического фонона была получена Перлиным [99]. Его

вычисления приводят к формуле для подвижности, аналогичной (8.35). Подвижность в случае пьезоэлектрического рассеяния вычислялась Мейером и Полдером [93] и Гаррисоном [100]. Вычисления скорости изменения функции распределения вследствие столкновений аналогичны вычислениям для деформационного рассеяния [13], разница только в вероятности перехода. В то время как изменение энергии электрона вследствие деформационного потенциала, сопровождающего акустический фонон с волновым вектором q , есть $E_1 S \sim E_1 q a$ (a — постоянная решетки), соответствующее изменение в потенциальной энергии электрона вследствие поляризаационного поля есть eP/q , т. е. пропорционально величине ea , умноженной на пьезоэлектрическую постоянную. Различные зависимости от q вероятностей перехода приводят к различным энергетическим и температурным зависимостям времени релаксации. Так как пьезоэлектрическое поляризаационное поле P зависит от направления q , время релаксации анизотропно $\tau = \tau(\mathbf{k})$, даже если предположить, что фононный спектр изотропен. Для того чтобы найти изотропное время релаксации, вышеупомянутые авторы [93, 100] провели процедуру усреднения. Конечный результат может быть записан в форме, которую Хатсон [96] использовал для сравнения теории с экспериментом

$$\mu = \frac{16 (2\pi)^{1/2}}{3} \frac{\hbar^2 e \alpha^*}{e m^{**} (m^* k_B T)^{1/2}}, \quad (8.36)$$

где m^{**} — эффективная масса пьезоэлектрического полярона, определяемая (8.30). Константа связи α^* в CdS и ZnO равна 0,035 и 0,073 соответственно [96]. Температурная зависимость μ отличается от температурной зависимости для рассеяния на статических диполях дополнительным множителем T [101, 102], так как число длинноволновых акустических фононов, эффективных в рассеянии, пропорционально T .

§ 9. Приближение матрицы плотности

В предыдущей части дрейфовая подвижность полярона анализировалась либо на основе вычисления вероятности одно- и двухфононных переходов с последующим использованием уравнения Больцмана, либо с помощью вариационного принципа Колера для вычисления непосредственно подвижности. Эти методы теории явлений переноса не могут использоваться, если а) потенциал рассеяния настолько велик, что нарушается теория возмущений и наименьшее борновское приближение уже недостаточно для вычисления сечения одиночного акта рассеяния или б) последовательные акты рассеяния недостаточно разнесены во времени, так что уравнение Больцмана неприменимо вследствие того, что энергия полярона между актами рассеяния недостаточно точно определена. Так, условие а) имеет место, если связь между электроном и поляризаационными волнами достаточно

сильная ($\alpha \gg 1$), так что неприменима простая теория возмущений. Если бы удалось разделить эффекты перенормировки энергии и рассеяния, то *остаточное* взаимодействие между поляроном и решеткой можно было бы рассматривать как малое возмущение. В случае условия б) существует интерференция между последовательными процессами рассеяния, когда один оптический фонон поглощается, а другой оптический фонон испускается. Рассматривая комбинированные процессы поглощения и последующего испускания как простой акт упругого рассеяния, называемый резонансным рассеянием, Шульц [49] избежал трудностей, связанных с условием б). Однако его конечный результат для подвижности содержит некоторые параметры, характеризующие промежуточное состояние, которые трудно оценить. Для того чтобы преодолеть недостатки теории явлений переноса, основанной на уравнении Больцмана, Фейнман, Хеллварс, Иддингс и Платцман (ФХИП) вычислили, используя приближение матрицы плотности, функцию линейного отклика электрона, помещенного в полярную решетку и электрическое поле. Они получили импеданс как функцию частоты для произвольной силы электрон-решеточного взаимодействия и при произвольных температурах.

Метод ФХИП состоит в вычислении функции линейного отклика с помощью возмущенной матрицы плотности с полным гамильтонианом $\mathcal{H} - RE$ (E — электрическое поле). Расчет проводится в два этапа. Сначала матрица плотности преобразуется в фейнмановский интеграл по путям, в котором электрон-решеточное взаимодействие заменяется электростатическим взаимодействием электрона с его средней плотностью заряда в предыдущих положениях. Затем интеграл по траекториям раскладывается до *второго порядка по электрическому полю E* . Это позволяет получить функцию линейного отклика через коэффициент разложения, и тем самым получить импеданс и подвижность. Метод ФХИП отличается от теории линейного отклика Кубо [103], где функция отклика записывается в виде изменения матрицы плотности, *линейного по электрическому полю*. Конечно, математический метод ФХИП более сложен, чем теория уравнения Больцмана, если последнее может быть решено с помощью времени релаксации. Однако теория ФХИП дает общее и правильное выражение для импеданса при конечных температурах и, кроме того, приближенно правильную формулу для импеданса на нулевой частоте и ее зависимость от α . Поэтому эта теория обсуждается здесь более детально.

А. *Выражение импеданса через интеграл по путям*. Для того чтобы сформулировать проблему подвижности ФХИП записывают ток, создаваемый переменным электрическим полем $E_x = E_0 e^{i\omega t}$, приложенным в x -направлении, в виде ($e = 1$)

$$j(\omega) = \frac{1}{Z(\omega)} E_0 e^{i\omega t}, \quad (9.1)$$

где $Z(\omega)$ — импеданс. Подвижность определяется формулой

$$\mu^{-1} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \operatorname{Re} \{Z(\omega)\}. \quad (9.2)$$

Импеданс $Z(\omega)$ определяется через функцию линейного отклика $\phi(t)$. Функция отклика описывает изменение динамической переменной, в нашем случае изменение ожидаемого значения смещения электрона $\langle x(\tau) \rangle$ в направлении электрического поля, вызываемое импульсом электрического поля при $\tau = 0$, и определяется выражением

$$\langle x(\tau) \rangle = - \int_{-\infty}^{+\infty} i\phi(\tau - \sigma) E_x(\sigma) d\sigma, \quad (9.3)$$

где $\phi(\tau - \sigma) = 0$ для $\tau < \sigma$. Обратное преобразование для $\langle x(\tau) \rangle$ определяет обратное преобразование для $\phi(\tau)$, или импеданс

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x(\tau) \rangle e^{-i\omega\tau} d\tau &= - \int_{-\infty}^{+\infty} E_x(\sigma) d\sigma \int_{-\infty}^{+\infty} i\phi(\tau - \sigma) e^{i\omega\tau} d\tau = \\ &= -iE_x(\omega) \phi(\omega) = \frac{E_x(\omega)}{i\omega Z(\omega)}. \end{aligned} \quad (9.4)$$

Последнее выражение в правой части этого уравнения, т. е. $\langle x(\omega) \rangle = E_x(\omega)/i\omega Z(\omega)$, следует из $j(\omega) = \langle \dot{x}(\omega) \rangle$. Вычисление функции отклика $\phi(\tau)$ или ее фурье-преобразования и есть основная задача.

Для того чтобы найти $\phi(\tau)$, ФХИП выразили ожидаемое значение смещения электрона через матрицу плотности полного гамильтониана $\mathcal{H} - \mathbf{R}\mathbf{E}$, где $\mathbf{R}\mathbf{E} = xE_x$ (x есть x -компонента радиуса-вектора \mathbf{R} положения электрона). Затем было показано, что $\phi(\tau)$ может быть выражено через вторую производную от матрицы плотности по электрическому полю. Ожидаемое значение x в момент времени τ есть

$$\langle x(\tau) \rangle = \operatorname{Sp} [x\rho(\tau)], \quad (9.5)$$

где матрица плотности

$$\rho = U(\tau, a)\rho_a U'^{-1}(\tau, a). \quad (9.6)$$

Здесь ρ_a — матрица плотности системы в некоторый момент времени a задолго до момента включения поля ($E_x = 0$ при $t < a$), а U — оператор эволюции во времени, определяемый выражением

$$i \frac{\partial U(\tau, a)}{\partial \tau} = [\mathcal{H}_\tau - \mathbf{R}_\tau \mathbf{E}(\tau)] U(\tau, a) \quad (9.7)$$

или

$$U(\tau, a) = \exp \left\{ -i \int_a^\tau [\mathcal{H}_s - \mathbf{R}_s \mathbf{E}(s)] ds \right\}. \quad (9.8)$$

Индексы s (или τ) указывают, что оператор зависит от времени. При выводе выражения для функции отклика через вторую производную от шпура ρ по E_x удобно использовать фейнмановский оператор упорядочения по времени [104]. В выражении для ρ все нештрихованные операторы помещаются слева, так что самый поздний оператор стоит крайним слева, затем стоит ρ , и наконец все штрихованные операторы помещаются справа от ρ , так что самый поздний стоит крайним справа. Оператор U'^{-1} , обратный оператору эволюции U для полного гамильтониана, имеет вид

$$U'^{-1}(\tau, a) = \exp \left\{ i \int_a^\tau [\mathcal{H}'_s - R'_s E'(s)] ds \right\}. \quad (9.9)$$

Поле E не является оператором, а просто функцией s , так что $E_x(s) = E'_x(s)$.

С помощью формализма упорядочения операторов по времени функция $\langle x(\tau) \rangle$ может быть разложена в ряд по электрическому полю. В наинизшем порядке по E [105] *) получим

$$\langle x(\tau) \rangle = - \int_a^\tau i E_x(\sigma) d\sigma \text{Sp} [[x(\sigma) x(\tau) - x'(\sigma) x'(\tau)] \times \\ \times \exp \left(-i \int_a^\infty \mathcal{H}_s ds \right) \rho_a \exp \left(i \int_a^\infty \mathcal{H}'_s ds \right)], \quad (9.10)$$

где шпур есть функция отклика $\phi(\tau - \sigma)$. Тогда уравнение (9.10) совпадает с определением $\langle x(\tau) \rangle$ (9.3), так как $\phi(\tau - \sigma) = 0$ для $\tau < \sigma$ и $E_x(\sigma) = 0$ для $\sigma < a$. Далее $\phi(\tau - \sigma)$, определяемую уравнением (9.10), можно связать с членом второго порядка по электрическому полю в разложении шпура

$$g = \text{Sp} [U(b, a) \rho_a U'^{-1}(b, a)]. \quad (9.11)$$

*) Разложение $\langle x(\tau) \rangle$ по полю, учитывая временное упорядочение штрихованных и нештрихованных операторов, дает в первом порядке по E_x

$$\langle x(\tau) \rangle = \int_a^\tau i E_x(\sigma) d\sigma \text{Sp} \left[\exp \left(i \int_\tau^\infty \mathcal{H} ds \right) x(\sigma) x(\tau) \times \right. \\ \times \exp \left(-i \int_a^\infty \mathcal{H} ds \right) \rho_a \exp \left(i \int_a^\infty \mathcal{H}' ds \right) \exp \left(i \int_\tau^\infty \mathcal{H}' ds \right) \left. \right] - \\ - \int_a^\tau i E_x(\sigma) d\sigma \text{Sp} \left[\exp \left(i \int_a^\infty \mathcal{H} ds \right) \exp \left(-i \int_a^\infty \mathcal{H} ds \right) \rho_a \times \right. \\ \times \exp \left(i \int_\tau^\infty \mathcal{H}' ds \right) x'(\tau) x'(\sigma) \exp \left(-i \int_\tau^\infty \mathcal{H}' ds \right) \left. \right].$$

В этом выражении $b \rightarrow +\infty$ и $a \rightarrow -\infty$. Сравнивая (9.11) и (9.5), с одной стороны, и (9.10) и (9.5) — с другой, видим, что $\langle x(\tau) \rangle$ есть умноженная на $-i$ первая функциональная производная от g по $E_x(\tau) - E'_x(\tau)$, если поле имеет вид

$$E_x(s) = \varepsilon \delta(s - \sigma) + \eta \delta(s - \tau), \quad E'_x(s) = \varepsilon \delta(s - \sigma) - \eta \delta(s - \tau). \quad (9.12)$$

Кроме того, функция отклика есть вторая производная от g по полю. Используя (9.12) и (9.10), можно записать $\phi(\tau - \sigma)$ в виде

$$\phi(\tau - \sigma) = \frac{1}{2} (\partial^2 g / \partial \varepsilon \partial \eta)_{\varepsilon = \eta = 0}. \quad (9.13)$$

Центральная математическая проблема в работе ФХИП — это вычисление g . Для этого g преобразуется в интеграл по путям. В g появляется начальное распределение ρ_a , которое должно быть равно $\exp(-\beta \mathcal{H})$, где $\beta = 1/k_B T$. Так как время a — это время в далеком прошлом, то авторы [4] выбирают $\rho_a = Q^{-1} \exp(-\beta \sum_q \omega_q b_q^+ b_q)$, где Q^{-1} — нормировочная постоянная. Другими словами, предполагается, что в прошлом осцилляторы были в равновесии при температуре T . Энергия одного электрона и его взаимодействие — бесконечно малые порядка $1/V$ относительно энергии фононной системы, поэтому взаимодействие будет приводить электрон и решетку в равновесие с первоначальной температурой T . Выбирая таким образом ρ_a и используя U и U'^{-1} , даваемые уравнениями (9.8) и (9.9) соответственно, ФХИП преобразуют шпур от матрицы плотности в двойной интеграл по путям по $R(t)$ и $R'(t)$

$$g = \int \int e^{i\Phi} \mathcal{D}R(t) \mathcal{D}R'(t). \quad (9.14)$$

Действие Φ в этом интеграле по путям содержит часть Φ_{el} , которая зависит только от координат электрона $R(t)$ и $R'(t)$ и которая легко находится из (9.11) с помощью фейнмановской теории интеграла по путям [65], если оператор эволюции $U(b, a)$ содержит только кинетическую энергию электрона и его взаимодействие с электрическим полем. Не так просто, однако, установить уравнение (9.14) и вид Φ для электрона, взаимодействующего с решеткой. В этом случае действие Φ состоит из двух частей: Φ_{el} и Φ_{osc} . Последняя зависит от координат осцилляторов и связана с членами электрон-фононного взаимодействия в \mathcal{H} и \mathcal{H}' .

В эту часть дает вклад каждая поляризационная мода q $\Phi_{osc} = \sum_q \Phi^q$, так что g может быть записано в виде, аналогичном поляронному интегралу по путям (5.16):

$$g = \int \int \exp(i\Phi_{el}) \mathcal{D}R(t) \mathcal{D}R'(t) \prod_q g_q. \quad (9.15)$$

где $g_q = \exp(i\Phi^q)$. Функция g_q находится из шпура вида (9.11); при этом оператор эволюции определяется гамильтонианом одного осциллятора

$$U_q = \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}_q dt \right\}, \quad (9.16)$$

$$U_q^{-1} = \exp \left\{ i \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}'_q dt \right\}, \quad (9.17)$$

где

$$\mathcal{H}_q = -\frac{1}{2\gamma} \frac{\partial^2}{\partial P_q^2} + \omega_0^2 P_q^2 + \Gamma(t) P_q. \quad (9.18)$$

Зависящие от времени нормальные координаты определены уравнением (5.8), $\Gamma(t) = (4\pi e/q) \chi_q[\mathbf{R}(t)]$. Используя (9.16) и (9.17), получим, что

$$g_q = \text{Sp} [U_q \rho_a U_q^{-1}], \quad (9.19)$$

где для случая одного осциллятора $\rho_a = Q^{-1} \exp[-\beta \mathcal{H}_q(\Gamma=0)]$. Шпур вычисляется на собственных функциях свободного осциллятора $\varphi_n(P_q, t)$ (5.19), для которых

$$(\rho_a)_{nn'} = \exp(-n\beta\omega_0) [1 - \exp(-\beta\omega_0)].$$

Тогда для g_q получим

$$g_q = \sum_{n', n''} G_{n', n''}^q G_{n', n''}^{q'} \exp(-n\beta\omega_0) [1 - \exp(-\beta\omega_0)], \quad (9.20)$$

где интеграл по путям для осциллятора $G_{n', n''}^q$ дается (5.18); в $G_{n', n''}^{q'}$ функция $\Gamma(t)$ заменена на $\Gamma(t')$. В работе ФХИП проведено преобразование g_q , в результате которого устранены нормальные координаты P_q , что позволяет представить g_q в виде

$$g_q = \exp \left[\frac{i}{2} |c_q|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \{ \exp[iq\mathbf{R}(t)] - \exp[iq\mathbf{R}'(t)] \} \times \right. \\ \left. \times (y(\omega_0, t-s) \{ \exp[-iq\mathbf{R}(s)] + \exp[-iq\mathbf{R}'(s)] \} + \right. \\ \left. + ia(\omega_0, t-s) \{ \exp[-iq\mathbf{R}(s)] - \exp[-iq\mathbf{R}'(s)] \} \right] ds dt, \quad (9.21)$$

где

$$c_q = \frac{1}{q} i 2^{3/4} \pi^{1/2} \alpha^{1/2}, \quad (9.22)$$

$$y(\omega_0, t-s) = \begin{cases} \frac{1}{\omega_0} \sin \omega_0(t-s), & t > s, \\ 0, & t < s, \end{cases} \quad (9.23)$$

и

$$a(\omega_0, t-s) = \frac{1}{2\omega_0} \cos \omega_0(t-s) [1 + 2P(\beta\omega_0)], \quad (9.24)$$

где $P(\beta\omega_0) = (e^{\beta\omega_0} - 1)^{-1}$.

Используя (9.21) для $g_q = \exp(i\Phi_{\text{осц}}^q)$, можно провести суммирование по $\Phi_{\text{осц}}^q$, для того чтобы получить осцилляторную часть $\Phi_{\text{осц}}$ полного действия Φ в (9.14), т. е. в интеграле по путям для g . Результат для Φ есть ($\hbar = m^* = \omega_0 = 1$)

$$\begin{aligned} \Phi &= \Phi_{\text{el}} + \Phi_{\text{осц}} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{2} \left\{ \left[\frac{dR(t)}{dt} \right]^2 - \left[\frac{dR'(t)}{dt} \right]^2 \right\} + E(t)R(t) - E'(t)R'(t) \right) dt + \\ &+ i \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dt ds \left\{ \frac{\exp(-i|t-s|) + 2P(\beta) \cos(t-s)}{|R(t) - R(s)|} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\exp(i|t-s|) + 2P(\beta) \cos(t-s)}{|R'(t) - R'(s)|} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{2[\exp(-i|t-s|) + 2P(\beta) \cos(t-s)]}{|R'(t) - R(s)|} \right\}. \quad (9.25) \end{aligned}$$

Двойной интеграл в выражении для g (9.14) есть интеграл по всем траекториям, удовлетворяющим граничному условию $R(t) - R'(t) = 0$ при $t \rightarrow \pm \infty$. Используя (9.14) и (9.25), можно привести шпур матрицы плотности g к интегралу по путям, по виду похожему на интеграл по путям, использованный Фейнманом для определения энергии основного состояния полярона Фрелиха. Из выражения для g , справедливого для произвольных внешних полей F , можно получить $\phi(\tau - \sigma)$ согласно (9.13). Обратное преобразование $\phi(\tau - \sigma)$ определяет, согласно (9.4), импеданс.

Б. Вычисление импеданса и подвижности. Для того чтобы оценить интеграл по путям для g , ФХИП делают приближение, аналогичное тому, которое сделал Фейнман при оценке полярного интеграла по путям (ср. (5.21) и (5.32)). В некотором грубом приближении электростатическое взаимодействие электрона с его средней зарядовой плотностью в предыдущих положениях заменяется взаимодействием электрона с потенциалом гармонического осциллятора

$$\frac{1}{2} C [R(t) - R(s)]^2 \exp(-\omega|t-s|).$$

Вариационные параметры C и ω были выбраны так, чтобы наилучшим образом аппроксимировать истинное взаимодействие электрона с самим собой. Такое же приближение было использовано ФХИП для описания действия электрона, движущегося

в приложенном электрическом поле. Действие Φ (9.25) аппроксимируется так:

$$\begin{aligned} \Phi_0 = \Phi_{e1} - i \frac{C}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} & (|\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}(s)|^2 [\exp(-i\omega|t-s|) + \\ & + 2P(\beta\omega) \cos \omega(t-s)] + \\ & + [\mathbf{R}'(t) - \mathbf{R}'(s)]^2 [\exp(i\omega|t-s|) + 2P(\beta\omega) \cos \omega(t-s)] - \\ & - 2[\mathbf{R}'(t) - \mathbf{R}(s)]^2 [\exp[-i\omega(t-s)] + 2P(\beta\omega) \cos \omega(t-s)]) dt ds. \end{aligned} \quad (9.26)$$

При нулевой температуре ($P(\beta) = 0$) значения C и ω должны быть такими, чтобы они минимизировали энергию основного состояния полярона (см. § 5). При конечных температурах C и ω определялись Осака [70] и Кривоглазом и Пекаром [71] с помощью вариационного принципа для свободной энергии. Интеграл по путям

$$g_0 = \int \exp(i\Phi_0) \mathcal{D}\mathbf{R}(t) \mathcal{D}\mathbf{R}'(t) \quad (9.27)$$

может быть вычислен точно, так как Φ_0 — квадратичная форма по координатам электрона [65]. Этот результат с учетом уравнения (9.13), связывающим ϕ и g , приводит к следующей функции отклика:

$$\phi_0(\tau - \sigma) = (i/2\pi) \int_{-\infty}^{+\infty} Y_0(\omega) e^{i\omega(\tau - \sigma)} d\omega, \quad (9.28)$$

где

$$iY_0(\omega) = \phi_0(\omega) = -i(\omega^2 - v^2)/\omega^2(\omega^2 - v^2). \quad (9.29)$$

В этом приближении и при низких температурах функция отклика совпадает с функцией отклика свободной частицы с массой $m^{**} = v^2/\omega^2$. Для свободной частицы скорость в электрическом поле есть $\langle \dot{x} \rangle = (-i/m^{**}\omega) E_x(\omega)$, так что

$$i\omega Z(\omega) = -m^{**}\omega^2, \quad (9.30)$$

т. е. импеданс чисто мнимый. Значение $m^{**} (= v^2/\omega^2)$ не совпадает со значением, даваемым (5.36), но Шульц [49] показал, что эти два значения не сильно отличаются друг от друга в широкой области значений α .

Мы видели, что приближение $\Phi = \Phi_0$ в матрице плотности (9.14) приводит к индуктивному отклику свободной частицы. Поэтому это приближение недостаточно для описания резистивного движения полярона в кристаллической решетке. ФХИП, вычисляя поправку первого порядка к g_0 , нашли функцию диссипативного импеданса, т. е.

$$g = \iint e^{i\Phi} \mathcal{D}\mathbf{R} \mathcal{D}\mathbf{R}' \approx g_0 + g_1, \quad (9.31)$$

где g_0 дается (9.27) и

$$g_1 = \int \int e^{i\Phi} i (\Phi - \Phi_0) \mathcal{D}\mathcal{R} \mathcal{D}\mathcal{R}'. \quad (9.32)$$

Детальные вычисления g_1 приведены в работе ФХИП. В результате поправка первого порядка к функции отклика для полярона большого радиуса имеет вид

$$\phi_1(\omega) = -iY_0^2(\omega) \left[\chi(\omega) + \frac{4C}{\omega} \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega^2} \right], \quad (9.33)$$

где ($\hbar = m^* = \omega_0 = 1$)

$$\chi(\omega) = \int_0^\infty (1 - e^{i\omega u}) \text{Im } S(u) du, \quad (9.34)$$

$$S(u) = \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} \frac{e^{iu} + 2P(\beta) \cos u}{[D(u)]^{1/2}}, \quad (9.35)$$

$$D(u) = \frac{\omega^2}{v^2} \left\{ \frac{v^2 - \omega^2}{\omega^2 v} \left[1 - e^{iuv} + 4P(\beta v) \sin^2\left(\frac{vu}{2}\right) \right] - iu + \frac{u^2}{\beta} \right\}. \quad (9.36)$$

Здесь v и ω — удобные параметры, введенные Фейнманом для того, чтобы минимизировать энергию основного состояния полярона, их размерность — сек^{-1} . Учитывая (9.29) и (9.33) для $\phi(\omega)$, получим приближенное выражение

$$\phi(\omega) = \phi_0(\omega) + \phi_1(\omega). \quad (9.37)$$

Разложение для функции импеданса по $\phi_1(\omega)$ имеет вид

$$\omega Z(\omega) = \frac{1}{\phi(\omega)} \approx \frac{1}{\phi_0(\omega)} - \frac{\phi_1(\omega)}{\phi_0^2(\omega)}. \quad (9.38)$$

Это разложение более точное, чем $\omega Z(\omega) \approx (\phi_0 + \phi_1)^{-1}$, так как $\phi_1(\omega)$ не мала по сравнению с $\phi_0(\omega)$ для *всех* значений ω . При ω порядка частоты оптического фонона ω_0 появляются резонансы в $\phi(\omega)$. Это сразу видно, если рассматривать свободную частицу, на которую действует в качестве возмущения слабая гармоническая сила. Из

$$E_x = m^{**} (\langle \dot{x} \rangle + \omega_0^2 \langle x \rangle).$$

следует, что

$$j(\omega) = \langle \dot{x} \rangle = -(E_x/m^{**})(i\omega^{-1} + i\omega_0^2\omega^{-3}),$$

когда $(\omega_0/\omega)^2$ мало. Соответствующее выражение для ϕ_0 и ϕ_1 есть $\phi_0 = -i/m^{**}\omega^2$ и $\phi_1 = -i\omega_0^2/m^{**}\omega^4$. Таким образом, $\omega Z(\omega) = (\phi_0 + \phi_1)^{-1}$ не имеет резонансной структуры. С другой стороны, если $\omega Z(\omega)$ разложить согласно (9.38), тогда импеданс слабо связанной частицы имеет вид

$$i\omega Z(\omega) = -m^{**}(\omega_0^2 - \omega^2). \quad (9.39)$$

Это выражение имеет правильный резонансный характер, хотя и вычислялось для больших ω , так как предполагалось, что $(\omega_0/\omega)^2$ мало, что соответствует слабой гармонической силе, действующей на свободный электрон. Поэтому функция импеданса полярона записывается в виде (9.38). В это уравнение мы подставили ϕ_1 для полярона из уравнения (9.33); тогда функция импеданса имеет окончательно вид

$$i\omega Z(\omega) = -[\omega^2 - \chi(\omega)], \quad (9.40)$$

где $\chi(\omega)$ дается формулой (9.34). Первый член в правой части (9.40) — чисто индуктивный член, характерный для свободной частицы. Второй член учитывает влияние конечного времени жизни вследствие электрон-фононного взаимодействия.

В. Поведение импеданса и подвижности. Для обсуждения частотной зависимости импеданса обозначим через ω частоту, отнесенную к частоте оптического фонона ω_0 . При $T = 0$ и $\omega < 1$ интегрирование по u в (9.34) дает

$$\begin{aligned} -i\omega Z(\omega) &= \\ &= \omega^2 - \frac{2a}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\tau} (1 - \operatorname{ch} \omega\tau) \left[\frac{v^2 - \omega^2}{v^3} (1 - e^{-v\tau}) + \frac{\omega^2}{v^2} \tau \right]^{-1/2} d\tau. \end{aligned} \quad (9.41)$$

Импеданс — чисто мнимый (индуктивный) для всех частот, меньших ω_0 , т. е. при $\omega < 1$. Полярон ускоряется без диссипации под действием приложенного поля, так как нет тепловых фононов, которые могли бы рассеять полярон и замедлить его движение. Если же существуют фононы с нулевой частотой такие, как длинноволновые акустические фононы, сопротивление конечно и при $T = 0$ при любой частоте внешнего поля. Для поляронов большого радиуса сопротивление появляется при $\omega = 1$, так как в гамильтониане Фрелиха (2.1) учитывается только взаимодействие электронов с оптическими фононами. Конечно, в постоянном поле полярон в конечном счете приобретает достаточную энергию, чтобы испустить оптический фонон и тем самым диссипировать энергию. Этот эффект, однако, нелинеен по полю и существует для определения подвижности горячих электронов [106]. Выражение (9.41) для импеданса полярона при низких частотах, где $\operatorname{ch} \omega\tau \approx 1 + \frac{1}{2} \omega^2 \tau^2$ переходит в (9.30) с m^{**} , определяемой (5.36). Полярон ведет себя подобно свободной частице с массой m^{**} .

При конечных температурах (9.34) дает следующее выражение для импеданса полярона большого радиуса:

$$\operatorname{Im} \chi(\omega) = \frac{2a}{3\sqrt{\pi}} \frac{z^{3/2} \operatorname{sh}(z\omega/2)}{\operatorname{sh}(z/2)} \left(\frac{v}{\omega} \right)^3 \int_0^{\infty} \frac{\cos \omega u \cos u \, du}{(u^2 + a^2 - b \cos vu)^{3/2}}, \quad (9.42)$$

где

$$a^2 = \frac{z^2}{4} + Rz \operatorname{cth} \frac{vz}{2}, \quad R = \frac{v^2 - w^2}{w^2 v}, \quad b = \frac{Rz}{\operatorname{sh}(vz/2)}, \quad z = \hbar \omega_0 / k_B T. \quad (9.43)$$

Сначала обсудим подвижность в постоянном поле. Когда $\omega \rightarrow 0$, выражение (9.42) определяет μ как функцию от температуры; из (9.2) и (9.40) следует

$$\mu^{-1} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \operatorname{Im} \frac{\chi(\omega)}{\omega}. \quad (9.44)$$

Вариационные параметры v и w , появляющиеся в $\chi(\omega)$, рассматриваются как известные функции константы связи α и температуры, или z [49, 70]. Интеграл в (9.42) не может быть вычислен в замкнутом виде для произвольных значений z . При высоких температурах $z \ll 1$ и интеграл меняется как z^{-3} , а поэтому подвижность $\mu \sim z^{3/2}$, если v и w — константы. Из уравнения Больцмана следует $\mu \sim z^{1/2}$ (8.12). При низких температурах, $z \gg 1$, ФХИП нашли точную формулу для μ , раскладывая сначала интеграл в (9.42) по b , а затем беря предел $\omega = 0$

$$\mu = \frac{e}{2m^* \omega_0 \alpha} \frac{3}{2} \left(\frac{w}{v}\right)^3 \exp\left(\frac{v^2 - w^2}{w^2 v}\right) \frac{e^z}{z}, \quad z \gg 1. \quad (9.45)$$

Уравнение Больцмана совместно с теорией возмущений дает $\mu \sim e^z$. Эта зависимость правильна для малых значений константы связи α , поэтому (9.45) не может быть правильным при $\alpha \ll 1$. Однако если ω конечно, выражение (9.45) является хорошим приближением и в случае слабой связи, когда применимо уравнение Больцмана. Только в пределе $\omega = 0$ выражение для подвижности μ , полученное ФХИП, должно рассматриваться как грубое приближение, так как разложение обратного отклика $\phi^{-1}(\omega)$, которое приводит к (9.40) для функции импеданса, может быть правильным только при $\omega \neq 0$. Иначе как бы ни была мала α , резистивная часть $\chi(\omega)$ импеданса превышает индуктивную часть, пропорциональную ω^2 . При малых α зависимость подвижности от силы связи α есть α^{-1} , так как при $\alpha \leq 1$ энергия основного состояния имеет минимум при $v = w$. Для больших α получены значения параметров: $w \sim 1$, а $v \sim \alpha^2$ [48]. Поэтому $\mu \sim \alpha^{-7} \exp(\alpha^2)$. Платцман [105] и Шульц [66] дали качественное объяснение этого результата, согласно которому подвижность растет с ростом α для $\alpha > 4$. Существенным моментом их объяснения является то, что матричный элемент полярон-фононного взаимодействия содержит, кроме константы электрон-фононной связи, еще и фурье-преобразование поляронной волновой функции

$$Z^{1/2} = \int \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_e) |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r},$$

Функция Z играет роль экранирующего множителя, аналогичного Z_q в (8.5). Она зависит от поляронной волновой функции $\psi(\mathbf{r})$, где \mathbf{r} — радиус-вектор относительного положения электрона, находящегося в точке \mathbf{r}_e , и фиктивной частицы в точке ρ . Вспомним здесь, что фейнмановский полярон, описываемый пробным действием S_1 (выражение (5.32)), существенно эквивалентен электрону с массой m^* , связанному с фиктивной частицей с массой M через константу упругости K . Вариационные параметры фейнмановской модели полярона таковы: $\omega = (K/M)^{1/2}$ и $v = (K/\mu)^{1/2}$, где μ — приведенная масса, $\mu^{-1} = M^{-1} + m^{*-1}$. Волновая функция основного состояния такой системы является гауссовой функцией $\psi(\mathbf{r}) \sim \exp\left(-\frac{1}{2}\mu v r^2\right)$. Кроме этой функции, экранирующий множитель содержит $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_e)$. Здесь $\mathbf{r}_e = \rho + \mathbf{r}M/m^{**}$, где $m^{**} = M + m^*$, а импульс \mathbf{k} определяется законом сохранения энергии в акте рассеяния, в котором полярон и фонon имеют начальные импульсы 0 и \mathbf{k} соответственно. Конечный импульс полярона должен быть \mathbf{k} и $\hbar^2\mathbf{k}^2/2m^{**} = \hbar\omega_0$, так что $k = \sqrt{2}v/\omega$ в приведенных единицах. Теперь легко найти экранирующий множитель $Z = \exp[-(v^2 - \omega^2)/\omega^2 v]$, который пропорционален $\exp(-\alpha^2)$ для больших α . Этот вид Z основан на предположении о гауссовой форме поляронной волновой функции. Если это предположение не выполняется, даже на больших расстояниях, все эти аргументы рушатся. Хотя фейнмановский подход к задаче о поляроне достаточно удачен, он все же приближенный; приближенной является и гауссова форма волновой функции $\psi(r)$. Поэтому результат $\mu \sim \alpha^{-7} \exp(\alpha^2)$ не должен пониматься буквально*). Пекар [1] нашел, что $\mu \sim \alpha^5$ для $\alpha \gg 1$, так как его поляронная волновая функция основного состояния не была гауссовой, а имела вид (4.6). Некоторые другие авторы изучали подвижность поляронов большого радиуса с помощью метода матрицы плотности. Осака [107] получил подвижность полярона в постоянном поле, вычисляя функцию отклика $\phi(\tau)$, определенную через линейное изменение матрицы плотности в электрическом поле [103]. Функция отклика, или корреляционная функция токов, записывается через интеграл по путям. Из экспоненциального спада функции отклика Осака определяет время столкновений. В случае слабой связи и низких температур он получил для подвижности результат теории возмущений (8.13). Как функция α подвижность при низких температурах уменьшается и имеет минимум при $\alpha \approx 7$. Морита [108]

) С помощью метода адиабатической теории возмущений, развитой Боголюбовым и Тябликовым, для $\alpha \gg 1$ в [29] получено, что за исключением области экспоненциально малых по α температур (в которой основную роль играют процессы резонансного рассеяния поляронов на фонах, что и приводит к зависимости $\mu \sim \alpha^{-7} \exp(\alpha^2)$) подвижность полярона пропорциональна $1/\alpha^2$. (Прим. ред.)

вычислил подвижность на основе общей теории рассеяния, используя формулировку Гелл-Манна и Голдбергера [109].

Результат приблизительно совпадает с теорией возмущений.

Подвижность полярона получили Лангрет и Каданов [110], которые использовали формулу Кубо [103]. Они выразили корреляционную функцию токов через двухчастичную функцию Грина (в отсутствие электрического поля). Затем двухчастичная гриновская функция была разложена в ряд по одночастичным гриновским функциям и электрон-решеточному взаимодействию. Их результат в случае слабого взаимодействия совпадает с (8.13),

если для m^{**} выбрать выражение, полученное в пределе слабой связи.

В модели Фрелиха, очевидно, правильная подвижность поляронов большого радиуса при низких температурах равна

$$\mu = \frac{2z}{3} \mu_{\text{ФХИП}}, \quad (9.46)$$

где $\mu_{\text{ФХИП}}$ определяется выражением (9.45). Как было показано Кадановым [92], правильная подвижность отличается от подвижности, полученной ФХИП, т. е. от выражения (9.45), множителем $2z/3$. Выражение (9.46) совпадает с результатом теории возмущений в случае слабой связи (8.13), так как $(v/\omega)^3 \approx m^{**}/m_0$ для $\alpha < 1$. Зависимость μ от α построена на рис. 6.

Частотная зависимость импеданса, полученная ФХИП, особенно интересна, так как она показывает сильную дисперсию, характер которой зависит главным образом от α для частот больших ω_0 .

Для того чтобы найти дисперсию при низких температурах, $z \gg 1$, ФХИП разложили выражение (9.42) по степеням b

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi(\omega) = & \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} \frac{\text{sh}(\omega z/2)}{\text{sh}(z/2)} \left(\frac{v}{\omega}\right)^3 \int_0^{\infty} \frac{\cos(\omega u) \cos u}{(u^2 + a^2)^{3/2}} \times \\ & \times \left[1 + \frac{3zR e^{-z\nu/2} \cos(\nu u)}{u^2 + a^2} + \dots \right] du. \end{aligned} \quad (9.47)$$

Интегралы вычисляются по формулам

$$\int_0^{\infty} \frac{\cos(\lambda u) du}{(u^2 + a^2)^{n+1/2}} = \frac{\sqrt{\pi}}{(n-1/2)!} \left(\frac{\lambda}{2a}\right)^n K_n(\lambda a), \quad (9.48)$$

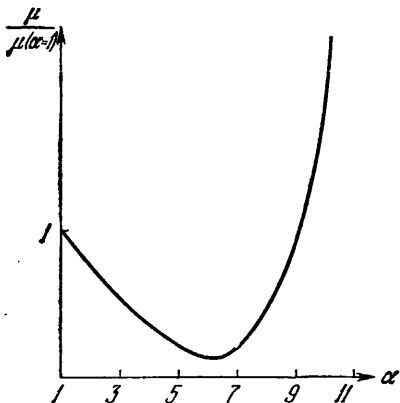


Рис. 6. Зависимость подвижности от константы электрон-фононной связи α согласно [4].

где $K_n(x)$ — модифицированная функция Бесселя [111]. Для $n = 1$ интеграл убывает как $(2\pi/\lambda)^{1/2} a^{-3/2} \exp(-\lambda a)$. Поэтому λ принимает наименьшее значение одновременно с наименьшей степенью e^{-z} ($z \gg 1$). Это позволяет ФХИП отобрать главные члены в $\text{Im } \chi(\omega)$ для каждого ω .

При $\omega < 1 + v$ и $|1 - \omega| > z^{-1}$ важны только первые члены в правой части (9.47), а поэтому

$$\text{Im } \chi(\omega) = \frac{2}{3} \alpha \left(\frac{v}{w}\right)^3 (1 - e^{-\omega z}) e^{\frac{z(\omega-1)}{2}} \times \\ \times \left[|1 - \omega|^{1/2} e^{-\frac{z|1-\omega|}{2}} e^{-R|1-\omega|} + (\omega + 1) e^{-\frac{z(\omega+1)}{2}} e^{-R(\omega+1)} \right]. \quad (9.49)$$

При $z \rightarrow \infty$ эта функция имеет порог при $\omega = 1$. Она практически равна нулю при $\omega < 1$ и порядка

$$\frac{2}{3} \alpha (v/w)^2 (\omega - 1)^{1/2} \exp[-R(\omega - 1)]$$

при $\omega > 1$ *). При $\omega = 1$ энергия внешнего поля равна энергии $\hbar\omega_0$ оптического фонона. При более высоких частотах появляются пороги, возникающие из-за наличия членов более высокого порядка в разложении (9.47). При $z \rightarrow \infty$ следующий порог появляется при $\omega = v + 1$. Он соответствует возбуждению электрона в наименьшее возбужденное состояние с энергией v относительно энергии основного состояния. Здесь уместно вспомнить, что Пекар в своем варианте теории сильной связи нашел, что энергия наименьшего возбужденного состояния полярона есть $0,14\alpha^2\hbar\omega_0$ относительно энергии основного состояния (выражение (4.41)), и эта энергия основного состояния приблизительно равна значению v , которое использовалось Фейнманом для того, чтобы минимизировать энергию полярона при $\alpha \gg 1$. В случае сильной связи электрон локализован в своей собственной поляризационной яме; энергия основного состояния полярона Пекара дается выражениями (4.6) и (4.7) **). Возбужденные состояния этой поляризационной ямы не являются стационарными, так как после оптического перехода атомы решетки будут двигаться к новым равновесным положениям. Электрон имеет конечное время жизни в возбужденном состоянии, так как атомы решетки с энергией $\hbar\omega_0$ двигаются медленно по сравнению с быстро «осциллирующим» электроном, чья энергия порядка $\alpha^2\hbar\omega_0$. Поэтому максимумы в $\text{Im } \chi(\omega)$, которые появляются, когда ω становится равной энергии таких нестабильных возбужденных состояний, уширены из-за малого времени жизни этих возбужденных

*) Множитель $(\omega - 1)^{1/2}$ есть конечная плотность состояний. Электрон имеет энергию $(\omega - 1)$ и импульс $(\omega - 1)^{1/2}$.

**) Тот факт, что в теории Пекара основное состояние вырождено из-за трансляционной симметрии, не имеет значения для оптических переходов.

состояний относительно излучения фонона (рис. 7). При увеличении α увеличивается число максимумов в $\chi(\omega)$, а ширина их уменьшается. При не слишком сильной связи, $\alpha \leq 3$, эффекты времени жизни замыывают пороговую структуру (рис. 8). Таким образом, чтобы можно было наблюдать при оптических измерениях пороговую структуру в $\text{Im} \chi(\omega)$, α должно быть порядка 5 или больше. Структура импеданса $\chi(\omega)$ вычислялась на основе Фейнмановской модели полярона, которая по существу состоит

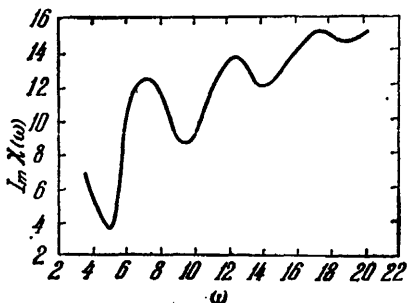


Рис. 7. Зависимость $\text{Im} \chi(\omega)$ от частоты. Частота измеряется в единицах частоты оптической моды ω_0 , а $\text{Im} \chi(\omega)$ — в единицах (m^*/ω_0) . $\alpha=5$; $\omega=2,1$; $v=4,0$ и $z=100$ [4].

из электрона, связанного гармонической силой с фиктивной частицей. Рассматривая массу

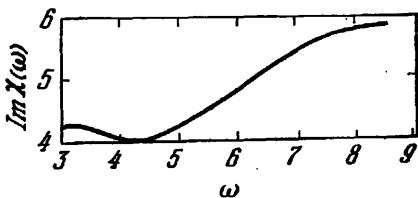


Рис. 8. Зависимость $\text{Im} \chi(\omega)$ от частоты. Частота — в единицах частоты оптической моды ω_0 , а $\text{Im} \chi(\omega)$ — в единицах (m^*/ω_0) . $\alpha=3$; $\omega=2,5$; $v=3,4$; $z=100$ [4].

частицы и силовую константу в качестве вариационных параметров в рамках Фейнмановского метода, удалось найти достаточно точные значения для собственной энергии полярона.

Можно сомневаться в том, что такая простая картина достаточна для точного описания частотной зависимости импеданса, однако качественные выводы о наличии резонансной структуры в $\text{Im} \chi(\omega)$ во всяком случае внушают доверие *).

§ 10. Эксперимент

Несмотря на то, что теоретические работы, обсужденные в предыдущих разделах, дают прочную основу для понимания собственных состояний полярона большого радиуса, дрейфовой подвижности полярона и его оптических свойств, было сделано не так уж много успешных попыток проверить эти предсказания на эксперименте.

Причина этого, во-первых, в том, что ионные кристаллы не удается получить такими же совершенными, как валентные кри-

) В [30] результаты Фейнмана и др. [4] ставятся под сомнение и отмечается, что из-за малого времени жизни франк — кондоновских состояний отдельные пики (отвечающие франк — кондоновским переходам внутри поляронной ямы) могут так сильно уширяться, что вместо кривой типа Друде — Лоренца, на которую наложены несколько сравнительно широких пиков (из рис. 7 для импеданса следует именно такая картина для коэффициента поглощения), для коэффициента поглощения получится широкий зубчатый колокол с бесфононным пиком слева. (Прим. ред.)

сталлы, например германий и кремний. Кроме того, трудно избежать малых отклонений от стехиометрии. Примеси и другие дефекты решетки, приводящие к образованию ловушек, ограничивают время жизни свободных носителей. Ловушки играют особенно большую роль в тех веществах, в которых должны быть заметны поляронные эффекты, а именно, в щелочно-галлоидных кристаллах, некоторых окислах переходных металлов и некоторых других окислах таких, как окись магния, в которых электрон-решеточное взаимодействие достаточно сильно ($\alpha \geq 3$), что соответствует случаю промежуточной или сильной связи. Однако в таких веществах примеси и другие дефекты приводят к образованию глубоких поляризационных ям, которые захватывают свободные носители; поэтому невозможно получить стационарное распределение достаточно большого числа носителей, необходимое для экспериментального наблюдения. Увеличить их концентрацию можно, освобождая заряженные носители из ловушек с помощью интенсивного света или облучая вещество электронами малой энергии. Изучая переходные процессы, можно исследовать отклик носителей на внешнее поле. Однако из таких экспериментов трудно получить данные о стационарном поведении. В других веществах, где эффекты захвата не так мешают измерению явлений переноса, малы поляронные эффекты, т. е. $\alpha \leq 1$. К таким веществам относятся многие из соединений III — V групп и некоторые из соединений II — VI групп такие, как CdS *).

Наконец, существуют полярные вещества, которые имеют многовалентные катионы и которые кристаллизуются в так называемые дефектные структуры; т. е. в зависимости от химического состава имеется определенное число свободных катионных мест. В этих веществах стационарная концентрация свободных носителей может иногда изменяться на много порядков. К этой группе веществ принадлежат сульфиды и селениды редкоземельных металлов, которые кристаллизуются в структуре фосфида

*) Взаимодействие электронов или экситонов с фононами даже при $\alpha < 1$ приводит к целому ряду интересных наблюдаемых явлений.

Если характерные времена процессов люминесценции и фотопроводимости меньше, чем время полного установления теплового равновесия в возбужденном состоянии, то в спектрах возбуждения люминесценции и фотопроводимости появляется осциллирующая структура, связанная с неполным установлением теплового равновесия в экситонных или электронных зонах. Если время релаксации энергии с испусканием оптических фононов для рассматриваемых частиц меньше, чем время релаксации с участием фононов, то период осцилляций в спектрах возбуждения равен энергии оптического фонона. В спектрах возбуждения люминесценции свободных экситонов в кристалле CdS это явление исследовалось в работе Е. Ф. Гросса, С. А. Пермогорова, В. В. Травникова, А. В. Селькина [5*]. Сравнительно сильная связь экситонов с фононами в CdS отражается на ширине экситонных линий и приводит к сравнительно большой интенсивности линий, отвечающих двухфононным процессам (фононные повторения). См. также сноску на стр. 80. (Прим. ред.)

тория, например сульфиды и селенид цезия. Однако трудно изготовить хорошие монокристаллы этих веществ, так как они обладают высокой температурой плавления.

Важно отметить, что в настоящее время существует слишком мало экспериментальных данных, чтобы сделать решающее количественное сопоставление теории и эксперимента. Если экспоненциальная температурная зависимость подвижности ясно наблюдалась во многих случаях, то циклотронный резонанс наблюдался только в некоторых веществах, так что прямая информация об эффективной массе m^{**} поляронов недостаточна. По-видимому, не было попыток измерить вклад свободных носителей в оптические постоянные щелочно-галогидных кристаллов, чтобы проверить резонансную структуру, предсказанную ФХИИ, для частотной зависимости импеданса в области частот $\omega_0 < \omega \leq 25 \omega_0$ для $\alpha \geq 3$ при низких температурах.

А. Эффективная масса. Эффективная масса полярона m^{**} фигурирует при описании следующих явлений: а) низкотемпературной теплоемкости γ [112]; б) диамагнитной восприимчивости χ [72] носителей тока (по Ландау); в) при описании энергетического спектра мелких примесных состояний [73]; г) частоты циклотронного резонанса ω_c [112]*). Измерение γ и χ требует больших концентраций поляронов, а при таких концентрациях γ и χ меняются из-за принципа Паули и взаимодействия поляронов.

Энергия основного состояния мелких примесных центров E_I зависит от m^{**} и ϵ . Эта энергия соответствует термической активации полярона из связанного состояния в поляронную зону проводимости. В некоторых веществах, таких, как соединения III — V групп, E_I может быть определено точно из температурной зависимости электрического сопротивления. Однако трудно определить m^{**} (по сравнению с m^*) из экспериментального значения E_I , так как при определении энергии основного состояния в полярных веществах поправки за счет потенциала центральной ячейки и релятивистские поправки так же важны, как и в ковалентных кристаллах Ge и Si [113]. Теория эффективной массы для связанного полярона по Неттелу [73] — это прежде всего теория основного состояния. В возбужденном состоянии электрон чувствует другое поле, самосогласованное с его волновой функцией в возбужденном состоянии. Теория Пекара [1], которая основана на континуальной модели и которая использует вариационный метод, описанный в § 4, позволяет произвести самосогласованное вычисление возбужденных примесных состояний. Экспериментально энергетический спектр связанных электронов может быть найден из оптических полос поглощения. Однако при оптическом переходе из основного состояния в возбужденное тяжелые ионы остаются на своих местах, так что

) Эффективную массу полярона можно еще извлечь из данных по магнетофононному резонансу, так, например, как это сделали для CdTe Мирс, Стрэдлинг и Инолл [6]. (Прим. ред.)

переход происходит в поле, самосогласованном с волновой функцией основного состояния. Буймистров [114] с помощью теории Пекара рассчитал соответствующие энергетические уровни в КВг. Результаты прямо не содержат эффективную массу полярона; энергетические уровни зависят от отношения m^*/m_0 , ϵ_∞ , ϵ . Таким образом, экспериментально определяя энергетическую разность между двумя уровнями, можно найти m^*/m_0 , а затем, зная ϵ_∞ и ϵ , — эффективную массу полярона m^{**} . Брандт и Браун [114а] наблюдали в AgVg низкочастотные переходы при 168 см^{-1} , что соответствует частоте $1s \rightarrow 2p$ перехода. Буймистров нашел, что разница энергий есть $1,51 \cdot 10^{-2} \text{ эв}$, или 186 см^{-1} . Он выбрал $m^*/m_0 = 0,2$ [25]. Достаточно хорошее согласие теории с экспериментом связано с тем фактом, что радиус a связанного полярона в его основном состоянии достаточно велик в КВг, а именно

$$a = (\epsilon m_0 / m^*) a_0 \approx 25 a_0 = 13,3 \text{ \AA},$$

в то время как расстояние между ближайшими соседями — ионом K^+ и ионом Vg^- — всего 3 \AA .

В общем, измерение оптических полос поглощения, соответствующих переходам между возбужденными примесными состояниями, для которых поправки от потенциала центральной ячейки малы, в веществах, подобных КВг, могут дать достаточно надежные значения отношения m^*/m_0 . Кроме того, при изменении температуры можно ожидать сдвиг оптических полос, который отражает температурную зависимость собственных состояний полярона, помимо той, которая связана с температурной зависимостью статической диэлектрической постоянной (см. §§ 12 и 13).

Наилучшим возможным экспериментом для точного определения m^{**} является измерение частоты циклотронного резонанса

$$\omega_c = eH/m^{**}c.$$

Аскарелли и Браун [25] провели на AgVg успешное измерение циклотронного резонанса на заряженных носителях в зоне проводимости, генерировавшихся светом при 18°K и при более высоких температурах. Достаточно высокая концентрация носителей достигалась фотовозбуждением их через запрещенную зону. Наблюдавшаяся частота циклотронного резонанса ω_c была меньше ω_0 в 60 раз. Поэтому поляризация решетки успевает следовать за орбитальным движением электрона, так что действительно эффективная масса полярона m^{**} определяет ω_c .

Ширина резонансной кривой при 18°K на рис. 9 соответствует подвижности $5 \cdot 10^4 \text{ см}^2/\text{в} \cdot \text{сек}$, эффективная масса полярона $m^{**} = 0,27 m_0$. Используя это значение m^{**} , авторы согласовали экспериментальное значение для холловской подвижности [115] и теоретическое значение, найденное с помощью уравнения (9.46). При этом предполагалось, что $m^* = 0,2 m_0$

и $\alpha = 1,6$, что соответствует значениям этих параметров, приведенных в табл. 1. Это определение m^* , согласующееся со значениями m^{**} и α в соответствии с уравнениями (3.5), основано на формуле ФХИП для дрейфовой подвижности, которая отличается от правильной подвижности множителем $2z/3$ (9.46). Однако при $T = 50^\circ\text{K}$ множитель $2z/3$ легко учесть, меняя $\theta_0 = \hbar\omega_0/k_B$ с 210° на 160°K . Последнее значение в пределах экспериментальной ошибки совпадает с $\theta_{\text{экс}} = 195 \pm 15^\circ\text{K}$ [103].

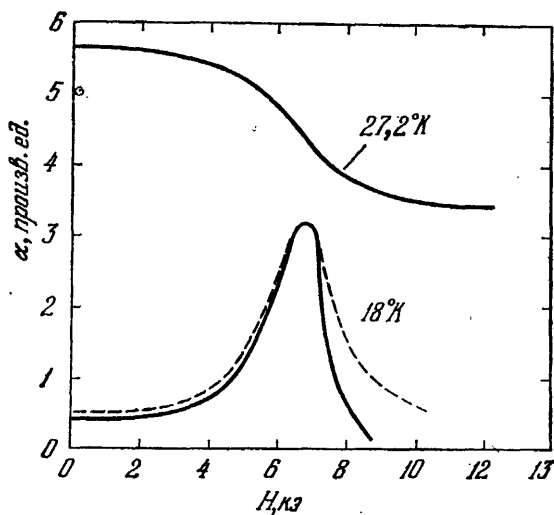


Рис. 9. Циклотронный резонанс с AgBr при 18°K и несколько более высокой температуре. Сплошная линия соответствует $m^*/m_0=0,27$. Линия быстро уширяется с увеличением температуры из-за влияния рассеяния на оптических колебаниях. Штриховая кривая построена на основе простой модели для $\omega\tau=4$ [25].

Шульц [49] указал, что температурная зависимость подвижности при низких температурах должна характеризоваться $\theta_{\text{экс}} \neq \theta_0$, так как в процессах резонансного рассеяния принимают участие коротковолновые фононы.

Микко и др. [26] наблюдали циклотронный резонанс на поляронах в KBr. Обычная резонансная техника неприменима при исследовании таких веществ, как KBr, так как очень трудно создать высокую плотность свободных носителей. Поэтому был разработан новый экспериментальный метод. К кристаллу прикладывается постоянное электрическое поле, а постоянное магнитное поле направляется параллельно электрическому. В плоскости, перпендикулярной постоянным электрическому и магнитному полям, прикладывается радиочастотное электрическое поле с частотой $\omega = 70 \text{ Гц}$. Малые токи, обусловленные фотовозбуждением F-центров, наблюдаются в зависимости от магнитного поля. Когда достигается условие циклотронного резонанса $\omega = \omega_c$, носители поглощают микроволновую мощность, в резуль-

тате чего они приобретают более высокую среднюю температуру и более низкую подвижность, что приводит к уменьшению постоянного фототока. На рис. 10 показан резонансный характер изменения фототока. Резонансный пик появляется при 27,6 кэ, что соответствует эффективной массе полярона $m^{**} = (1,1 \pm 0,1)m_0$. Экспериментальное значение для холловской подвижности при высоких температурах тогда согласуется с теоретическими значениями, рассчитанными Лангретсом [115а], если использовать зонную массу $m^* = 0,48m_0$ и $\alpha = 3,7$. Форма линии

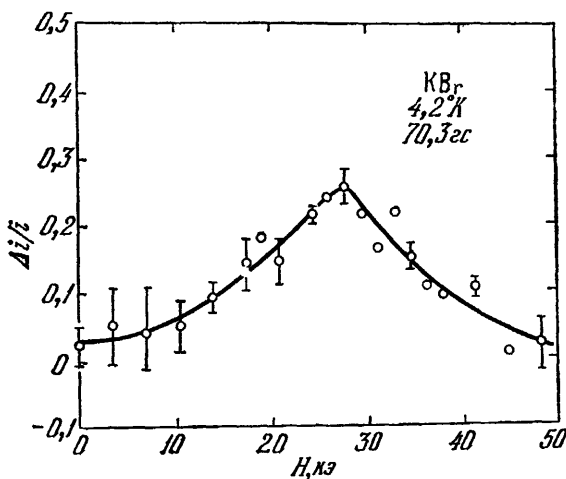


Рис. 10. Изменение сквозного фототока $\Delta i/i$ в зависимости от магнитного поля при включении микроволнового поля [26].

резонансной кривой, показанная на рис. 10 (сплошная линия), была вычислена только в предположении акустического рассеяния и рассеяния на нейтральных примесях. В случае акустического рассеяния подвижность $\mu_{ac} = 40\,000 \mu\text{м}^2/\text{в}\cdot\text{сек}$ при $4^\circ K$, а отношение μ_{ac} к подвижности в случае примесного рассеяния определяется из изменения холловской подвижности в зависимости от температуры и магнитного поля [115б].

Циклотронный резонанс наблюдался и в менее полярных веществах. Губанов и др. [116] наблюдали в Cu_2O три максимума поглощения при $4^\circ K$, которые соответствуют массам 0,7; 6 и $6,6m_0$. Первый максимум обусловлен «голым» зонным электроном, а два других были объяснены присутствием n - и p -типа поляронов. Большая эффективная масса должна быть обусловлена большим значением электронной массы m^* , так как α равна только 1. Циклотронный резонанс наблюдался также в соединениях III и V групп. Однако было обнаружено малое влияние решеточной поляризации на эффективную массу. Так, для GaP , где $\alpha = 0,1$, это изменение составляет всего 1,6%.

Бэр, Декстер [117] и Савамото [118] наблюдали при температуре жидкого гелия электронный циклотронный резонанс в CdS. Их результаты находятся в хорошем согласии друг с другом. Одиночный резонанс, наблюдавшийся Бэром и Декстером, для кристаллов, ось которых была параллельна и перпендикулярна статическому магнитному полю, дает значение $m^{**} = (0,165 \pm 0,03)m_0$ и согласуется с зонной картиной, состоящей из простого минимума зоны проводимости в центре зоны Бриллюэна. Из поглощения света на свободных носителях [119] и вращения Фарадея [120] была найдена масса $m^* = 0,22$ и $0,2m_0$ соответственно. Мейен и Хопфилд [94] *) объяснили с помощью пьезоэлектрического поляронного эффекта, почему экспериментально $m^{**} < m^*$.

Из выражения (8.30) для зависимости E от k для пьезоэлектрического полярона следует, что соответствующая эффективная масса имеет вид

$$m^{**}(k) = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1} = m^* \left(1 + \frac{\pi}{2} \frac{m^* k_B T \alpha^*}{a_0 \hbar^2 k^3} \right)^{-1}, \quad (10.1)$$

где константа пьезоэлектрической связи α^* определяется выражением (8.32). Если выбрать $m^* = 0,2m_0$, а для α^* значение, данное Хатсоном [96], $\alpha^* = 0,035$, то масса пьезоэлектрического полярона m^{**} , найденная из выражения (10.1), согласуется с циклотронной массой. Эффективная масса m^* в жесткой ионной решетке, которая учитывает влияние периодического потенциала на движение полярона, определяет поглощение свободными носителями на высоких частотах. Оптические постоянные: n — коэффициент преломления и k — коэффициент экстинкции связаны с вещественной частью высокочастотной проводимости $\sigma(\omega)$ соотношением

$$nk = 2\pi\sigma/\omega. \quad (10.2)$$

На высоких частотах проводимость $\sigma \sim 1/m^*\omega^2$. В веществах, в которых должны быть заметны поляронные эффекты, т. е. $\alpha \geq 3$, выражение «высокие частоты» означает, что частота должна превышать частоту оптического фонона более чем в 10 раз. При меньших частотах, но все же достаточно выше ω_0 , электрон-решеточное взаимодействие приведет к резонансной структуре, найденной ФХИП в импедансе $Z(\omega)$ и соответственно и в $\sigma = Z_1 / (Z_1^2 + Z_2^2)$, где $Z = Z_1 + iZ_2$. При частотах $\hbar\omega \geq 0,5$ эв трудно отделить поглощение свободными носителями от поглощения, связанного с дефектами. Пекар [1] определил m^* для NaCl, используя свою теорию F-центров (см. § 4), при интерпретации экспериментальных данных по оптическим полосам погло-

*) Другие работы по пьезоэлектрическим поляронам см. в списке дополнительной литературы. (Прим. ред.)

щения. Однако он указал, что это определение m^* не надежно для NaCl, в котором волновая функция электрона F-центра локализована внутри единичной ячейки.

Б. *Подвижность*. Надежды на то, что из одних только измерений подвижности можно воссоздать всю картину поведения поляронов большого радиуса, очень слабы, так как в низкотемпературной подвижности $\mu = Ae^2$ поляронный эффект проявляется только из-за зависимости предэкспоненциального множителя A от m^{**} (или от фейнмановских вариационных параметров ν и ω). Точно измерить A трудно, а ведь такую же температурную зависимость можно получить, если пренебречь поляронным эффектом и рассматривать взаимодействие электронов с оптическими фононами как возмущение. Кроме того, экспериментальные данные по температурной зависимости недостаточно точны для того, чтобы определить, отличается ли значительно характеристическая температура θ в выражении $z = \theta/T$ от $\theta_0 = \hbar\omega_0/k_B$, где ω_0 дается формулой (1.9). В случае резонансного рассеяния важны коротковолновые фононы, частота которых меньше ω_0 . Экспоненциальная температурная зависимость подвижности наблюдалась в галогенидах металлов KCl [121], KBr [1156], AgCl [122, 123], AgBr [115, 123]. Кроме того, для того чтобы объяснить температурную зависимость подвижности в InSb [124, 125], InAs [125, 126], InP [125], GaAs [127, 128], TiO₂ [130, 1306], Cu₂O [37, 131], ZnO [36], CdS [132], CdTe [32], PbS [33], SiC [133], SrTiO₃ [134, 134a] наряду с другими механизмами рассеяния учитывалось и рассеяние на поляризационных фононах. В двух случаях KBr и AgBr на монокристаллах измерялась подвижность как функция температуры [115, 1156] и, кроме того, наблюдался циклотронный резонанс [25, 26]. Эти результаты позволяют приближенно определить зонную массу m^* в жесткой решетке.

Как было показано Масуми на AgCl [135], Наказава и Канзаки на KCl [135a] и Микко и Брауном на KBr [136], возможно получить дополнительную информацию о рассеянии носителей в полярных кристаллах, измеряя подвижность в сильных электрических полях.

В пьезоэлектрических кристаллах таких, как ZnO и CdS, взаимодействие носителей с поляризационным полем, сопровождающим акустические фононы, приводит к подвижности, определяемой выражением (8.36). В случае ZnO подвижность может быть представлена в виде [96]

$$\mu \text{ (см}^2\text{/в} \cdot \text{сек)} = 160 \left(m_0^{3/2} / m^{**} m^{*1/2} \right) (300/T)^{1/2}, \quad (10.3)$$

где m^{**} включает поляронные эффекты, проистекающие от взаимодействия электрона как с оптическими, так и с акустическими фононами. Если $m^{**} = 0,27m_0$, а $m^* = 0,23m_0$, то $\mu = 2320 \text{ см}^2\text{/в} \cdot \text{сек}$ при $T = 100^\circ\text{K}$, в то время как экспериментальное значение подвижности [36] $\sim 10^3 \text{ см}^2\text{/в} \cdot \text{сек}$. Поэтому

в кристаллах, о которых пишет Хатсон [96], подвижность определяется другими механизмами рассеяния, а не пьезоэлектрическим. Тем не менее Хатсон [96] смог найти прямое доказательство пьезоэлектрического механизма рассеяния в ZnO, наблюдая увлечение фононов в термо-э. д. с. и сравнивая свои результаты с теорией Херринга [137]. При этом предполагалось, что пьезоэлектрическое рассеяние является единственным механизмом рассеяния фононов. Если принять, что время между столкновениями длинноволновых пьезоэлектрических фононов опреде-

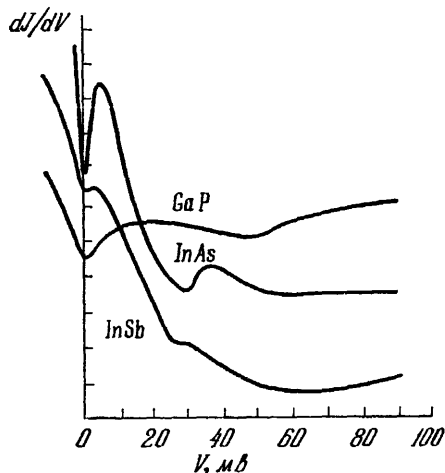


Рис. 11. Проводимость dJ/dV в произвольных единицах в зависимости от напряжения на $p-n$ -переходах, изготовленных из различных соединений III-V групп [138].

ляется рэлеевским рассеянием этих фононов на поляризующихся нейтральных примесях, то наблюдаемая и теоретическая температурная зависимость термо-э. д. с. согласуются между собой.

В. Туннельные характеристики $p-n$ -переходов, изготовленных из полярных полупроводников. Холл и другие [138] изучили вольтамперные характеристики узких $p-n$ -переходов, изготовленных из соединений III-V групп. В большинстве из этих соединений InSb, InAs, InP, AlSb и GaAs минимумы зоны проводимости и валентной зоны находятся в центре зоны Бриллюэна. Поэтому туннелирование электрона со дна зоны проводимости на дно валентной зоны происходит без участия фонона, и вольтамперная характеристика должна иметь более простую структуру, чем вольтамперная характеристика туннельных диодов, изготовленных из Ge и Si. Однако экспериментально наблюдается некоторая структура в проводимости dJ/dV в зависимости от V в области нулевого напряжения (рис. 11). Минимум при $V = 0$ более четко выражен в GaP, где $\alpha = 0,1$, чем в InAs и InSb, где α равно 0,05 и 0,02 соответственно. Авторы [138] интерпретировали уменьшение вероятности перехода при нулевом смещении как поляронный эффект. При нулевом напряжении $p-n$ -переход находится в равновесии и не совершается работа при медленном переходе электрона с одной стороны $p-n$ -перехода в другую. Во время обратного перехода электрон тянет за собой свое поляризационное поле смещения. Однако процесс туннелирования через переход происходит за время малое по сравнению со временем рассасывания поляронной ямы. Поэтому можно предположить, что полярон диссоциирует, т. е. электрон покидает поляри-

зационную яму, а энергия поляризации (или деформации) возвращается решетке путем испускания оптического фонона. После завершения процесса туннелирования электрон снова создает вокруг себя поляризационную яму. Энергия поляризации, диссипируемая в решетку каждой парой электрон + дырка (которые одновременно туннелируют через $p - n$ -переход) и равная по порядку величины $1/2(\alpha_c + \alpha_v)\hbar\omega_0$, должна восполняться внешним полем. Поэтому должна быть область прямых и обратных смещений на $p - n$ -переходе, когда ток равен нулю. То, что пороговые напряжения не четко видны на рис. 11, связано с тепловым размытием фермиевского распределения при 4°K . Минимум проводимости наблюдался также в PbTe [138].

Другое объяснение минимума в проводимости при нулевом смещении было выдвинуто Келдышем и Копаевым (КК) [139]. Они обнаружили логарифмическую сингулярность в плотности состояний около поверхности Ферми ϵ_F вследствие взаимодействия электронов с поляризационными фононами. Если же учесть затухание поляронных состояний, связанное со взаимодействием поляронов с акустическими фононами, то сингулярность превращается в острый экстремум. Авторы связывают этот экстремум с наблюдавшимся минимумом туннельного тока при малых напряжениях, когда в туннелировании через потенциальный барьер участвуют только носители около поверхности Ферми. Вычисление плотности состояний поляронов легко сделать. Сначала функция Грина электрона $G(\mathbf{k}, \epsilon)$ (6.13) вычисляется в наинизшем порядке по электрон-фононному взаимодействию. Это дает

$$G_1(\mathbf{k}, \epsilon) = [G_0^{-1}(\mathbf{k}, \epsilon) + \Sigma_0(\mathbf{k}_0, \epsilon)]^{-1}, \quad (10.4)$$

где G_0 — функция Грина свободного электрона для вырожденного электронного газа, а собственно-энергетическая часть имеет вид

$$\Sigma_0(\mathbf{k}, \epsilon) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \int d\mathbf{q} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon' V_{\mathbf{q}} \rho G_0(\epsilon', \mathbf{q}) D_0(\epsilon - \epsilon'; \mathbf{k} - \mathbf{q}). \quad (10.5)$$

Здесь D_0 — функция Грина свободных фононов, определяемая выражением (6.9). Плотность состояний полярона может быть представлена в виде [75]

$$\rho(\epsilon) = \frac{2}{\pi} \int \text{Im} G(\epsilon, \mathbf{k}) \text{sgn}(\epsilon_F - \epsilon) d\mathbf{k}. \quad (10.6)$$

Используя (10.4) и вычисляя это выражение, получим

$$\rho(\epsilon) = \frac{\rho_0}{1 + \frac{\alpha}{2\pi} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\epsilon_F}\right)^{1/2} \ln \left[\left(\frac{\epsilon}{\epsilon_F}\right)^{1/2} - 1 \right]^2}, \quad (10.7)$$

где $\rho_0 = m^{*3/2} (2e)^{1/2} / \pi^2 \hbar^3$ — плотность состояний квазисвободного электрона $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m^*$. Плотность состояний имеет

положительную особенность на поверхности Ферми. С другой стороны, ток имеет минимум при нулевом напряжении. Таким образом, влиянием электрон-фононного взаимодействия на плотность состояний объяснить экспериментальные результаты нельзя. Кроме того, Махан и Дьюке [140] нашли, что логарифмическая сингулярность в плотности состояний размывается в широкий максимум, если учесть экранировку электрон-фононного взаимодействия, обусловленную наличием других электронов. Формально это означает, что V_q в (10.5) заменяется на $V_q/\epsilon(q, \omega)$, где $\epsilon(q, \omega)$ — динамическая диэлектрическая постоянная в полярных веществах [9, 140].

Махан и Дьюке возражают также против первоначальной интерпретации аномалий проводимости, показанных на рис. 11, на том основании, что энергия электрона около поверхности Ферми в вырожденных полярных полупроводниках отлична от $\alpha\hbar\omega_0$. Это значение меняется: 1) из-за принципа Паули и 2) вследствие динамического экранирования взаимодействия электронов с полярными колебаниями решетки, обусловленного наличием других электронов. Пренебрегая экранированием и предполагая, что энергия Ферми $\epsilon_F \gg \hbar\omega_0$, вышеупомянутые авторы получили тот же результат, что Келдыш и Копаев (за исключением ошибки в знаке у КК) для собственно-энергетической части

$$\Sigma_0[k, \epsilon(k)] = -\frac{\alpha}{\pi} \left(\frac{\hbar\omega_0}{\epsilon_F} \right)^{1/2} [\epsilon(k) - \epsilon_F] \ln \left| \frac{k - k_F}{k + k_F} \right|, \quad (10.8)$$

$$\epsilon(k) \approx \epsilon_F, \quad \hbar\omega_0 \ll \epsilon_F.$$

Собственно-энергетическая часть меняет знак на поверхности Ферми и имеет максимум и минимум ниже и выше энергии Ферми $\epsilon(k_F) = \epsilon_F$ соответственно.

Чтобы установить, правильна ли физически первоначальная интерпретация минимума проводимости, интересно было бы получить этот эффект в зависимости от концентрации носителей. При малых концентрациях носителей тока, когда энергия Ферми $\epsilon_F < \hbar\omega_0$, собственно-энергетическая часть не должна существенно отличаться от собственно-энергетической части в случае одного электрона. Однако изготовить $p-n$ -переход с малыми концентрациями электронов и дырок очень трудно.

Г. Полярные эффекты в оптике. Достаточно яркий полярный эффект — это резонансная структура в частотной зависимости импеданса, предсказанная ФХИП [4] при высоких частотах $\omega > \omega_0$ в случае промежуточной и сильной связи $\alpha \geq 5$. Две имеющие отношение к делу оптические постоянные, а именно, обычный показатель преломления n и коэффициент экстинкции k , зависят от вещественной части диэлектрической постоянной $\epsilon(\omega)$ и вещественной части электропроводности $\sigma(\omega)$. Вещественная часть электропроводности зависит от вещественной и

мнимой частей импеданса, так что частотная зависимость оптических постоянных будет обладать резонансной структурой, предсказанной для $\text{Im } \chi(\omega) = \text{Re } \omega Z(\omega)$ (см. рис. 7 и 8). В таких веществах, как NaCl, поглощение на свободных носителях выше частоты остаточных лучей (reststrahlen frequency) еще не измерялось, по-видимому, из-за упомянутых уже экспериментальных трудностей *).

В восстановленном SrTiO_3 , в котором $\alpha_0 = 1,8$, для наиболее высокой оптической моды (см. табл. I) поглощение света было измерено Бэром [141]. Нет никаких указаний на резонансную структуру на кривой поглощения. Для длин волн λ от 0,7 до 2,5 $\mu\text{м}$ поглощение меняется как $\lambda^{5/2}$. Такая зависимость может быть понята на основе теории Друде — Зинера, которая в случае поляронов большого радиуса приводит к поглощению на свободных носителях $\sim \lambda^{5/2}$ из-за рассеяния на оптических фононах [141a, 141б]. Однако величина поглощения при 1 $\mu\text{м}$ в 5 раз больше того, что ожидается согласно теории ФХИП, если предположить, что $\alpha = 4$, что соответствует $m^* = 5m_0$. Поглощение на свободных носителях наблюдалось в ряде полярных соединений. Это InP [141в], GaAs [141г], ZnO [141д], CdS [119], KTaO_3 [141е]**). Зависимость поглощения от длины волны также во всех случаях может быть объяснена рассеянием свободных носителей на оптических фононах. Однако только в случае InP величина наблюдавшегося поглощения находится в хорошем согласии с теорией. Во всех других случаях наблюдавшееся поглощение в 2—4 раза больше предсказанного теоретически.

Интересный оптический эффект, возникающий при взаимодействии электрона с продольным оптическим фононом, наблюдался Джонсоном и Ларсеном [142]. Они наблюдали междузонное магнитопоглощение в InSb, измеряя пропускание в тонкой пластинке при энергиях фотонов, лежащих в области края основного поглощения. Было обнаружено, что пропускание зависит от энергии фотона и магнитного поля в области, где циклотронная частота сравнивается с частотой продольного оптического фонона. Имеющие отношение к настоящему вопросу экспериментальные результаты, а именно, изменение энергии пика междузонного поглощения с магнитным полем, показаны на рис. 12. Поглощение связано с переходами электронов с уровня Ландау ($n = 3$) тяжелых дырок в валентной зоне на уровень $n = 1$ (спин вверх) зоны проводимости. В области полей от 30 до 40 кэ наблюдается дублетная структура, которая не может быть объяснена стандартной теорией междузонного магнитопоглощения,

*) Вопрос об оптическом поглощении поляронами большого радиуса был заново рассмотрен в работах Девреева с сотрудниками (см. список дополнительной литературы), который высказал некоторые критические замечания в адрес работы ФХИП [4]. (Прим. ред.)

**) Расчеты, проведенные в [141б], справедливы лишь при $\alpha < 1$. Для InP $\alpha = 0,08$, для GaAs $\alpha = 0,031$ (см. табл. I). (Прим. ред.)

в которой пренебрегается электрон-решеточным взаимодействием. Эта теория предсказывает линейную зависимость минимумов пропускания (или пиков поглощения) от магнитного поля, что соответствует линии l_1 на рис. 12. Однако при наличии взаимодействия электрона с оптическим фононом, при магнитных полях $H \geq H_{cr}$ (где H_{cr} — поле, для которого частота циклотронного резонанса в отсутствие электрон-фононного взаимодействия $\omega_c^0 = eH/m^*c = \omega_0$) состояние $n = 1$ становится неустойчивым относительно испускания оптического фотона. Поэтому при $H > H_{cr}$ возникает дублетная структура линии поглощения.

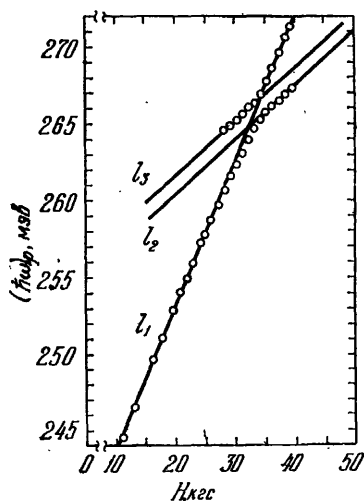


Рис. 12. Изменение положения минимумов пропускания полярного дублета с магнитным полем. Прямые линии l_1, l_2, l_3 проведены по соответствующим линейным участкам экспериментальных кривых [142].

Количественная интерпретация этих результатов была дана на основе теории Ларссена [143] собственных состояний полярона в магнитном поле. Он описывает взаимодействие электрона проводимости с магнитным полем и с продольными оптическими фононами, используя гамильтониан Фрелиха, содержащий канонический импульс $\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ (\mathbf{A} — вектор-потенциал). Взаимодействие электрона с оптическим фононом рассматривается как возмущение и энергия уровня Ландау $n = 1, p_z = 0$ ($H = H_z$) вычисляется в первом порядке по α . Результат, полученный с помощью теории возмущений Вигнера — Бриллюэна, имеет вид [143]

$$E_{WB}(n=1, p_z=0) = \frac{3}{2} \hbar \omega_c - \frac{\alpha \hbar \omega_0}{2\pi^2} \int \frac{dk}{k^2} \exp\left(-\frac{k_{\perp}^2}{\lambda^2}\right) \times \\ \times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{k_{\perp}^2}{\lambda^2}\right)^{n-1} \frac{[n - (k_{\perp}/\lambda)^2]^2}{1 + \lambda^2/2 - E_{WB} + n\lambda^2 + k_z^2}, \quad (10.9)$$

где $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$, волновые числа k_x, k_y, k_z нормированы на $(2m^*\omega_0/\hbar)^{1/2}$, параметр $\lambda = (\omega_c^0/\omega_0)^{1/2}$, а \int указывает, что берется главное значение интеграла. Этот результат справедлив в первом порядке по α , за исключением значений магнитного поля, удовлетворяющих условию $\omega_c \approx \omega_0$ или

$$1 - O(\alpha) < \frac{\omega_c}{\omega_0} < 1 + O(\alpha).$$

Имеются две характерные особенности в поведении E_{WB} ($n = 1, p_z = 0$) в зависимости от магнитного поля. Во-первых, при $\lambda^2 \rightarrow \infty$ величина E_{WB} стремится к $(1 + \lambda^2/2) \hbar \omega_0$ снизу. Во-вторых, при $\lambda^2 \geq 1$ энергия E_{WB} — двузначная функция. Две ветви поляронного спектра ясно наблюдаются на эксперименте (см. рис. 12), а более низкая ветвь, соответствующая линии l_2 , действительно меняется с магнитным полем как $(1 + \lambda^2/2) \hbar \omega_0$ до 30 кэВ. Линия l_3 на рис. 12, как и предсказывается теорией, не совпадает с l_2 ; однако l_3 почти параллельна l_2 и смещена на 1,5 МэВ вверх. Это смещение непонятно.

Экспериментальные результаты по инфракрасному магнитопоглощению обсуждались также Уайтом и Кунсом [143а]. Их теория дает результаты для дублетной структуры, аналогичные теории Ларсена. Однако она сформулирована более изящным образом, а именно, как задача о *связанных модах*: уровни Ландау $n = 0$ и $n = 1$ зоны проводимости связаны друг с другом продольным оптическим фононом. Связь удобно описывать с помощью фрелиховского гамильтониана взаимодействия \mathcal{H}_{int} , выраженного через фермиевские операторы в магнитном поле H_z . В представлении вторичного квантования $a_{k_x, k_z, n}^+$ — оператор рождения электрона с импульсом k_x, k_z и номером Ландау n . Выраженный через эти операторы гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \sum_{k_x k_z} \sum_{\mathbf{q}} [g(\mathbf{q}) a_{k_x, k_z, 0}^+ a_{k_x + q_x, k_z + q_z, 1} b_{\mathbf{q}}^+ + \text{э. с.}], \quad (10.10)$$

где $g(\mathbf{q})$ — константа связи, которая зависит от магнитного поля и α . Очевидно, из (10.10), что \mathcal{H}_{int} связывает состояние $(k_x, k_z, n = 1, n_{\mathbf{q}} = 0)$ с состоянием $(k_x + q_x, k_z + q_z, n = 0, n_{\mathbf{q}} = 1)$. Уравнение для собственных значений, подобное (10.9), получается диагонализацией полного электрон-фононного гамильтониана на состояниях, соответствующих всевозможным оптическим модам q_1, \dots, q_N . Однако сумма содержит только член с $n = 0$. Соответствующие собственные значения энергии приближенно равны

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} [E(0, k_z) + E(1, k_z) + \hbar \omega_0] + \frac{1}{2} \left\{ [E(0, k_z) - E(1, k_z) + \hbar \omega_0]^2 + 4 \sum_{\mathbf{q}} |g(\mathbf{q})|^2 \right\}^{1/2},$$

где $E(n, k_z)$ — энергия уровня Ландау со спином вверх в зоне проводимости. Верхняя ветвь \mathcal{E} соответствует линии l_1 на рис. 12, а нижняя — линии l_2 . Не должно быть никакого разделения между l_2 и l_3 . Количественное сравнение собственных значений, даваемых выражением (10.10), с экспериментальными результатами, показанными на рис. 12, приводит к хорошему

согласию при разумном выборе параметров для InSb *). Диккей и др. [143б] измерили циклотронный резонанс в InSb выше и ниже частоты остаточных лучей. Они наблюдали разрыв в зависимости частоты циклотронного резонанса от магнитного поля, когда частота циклотронного резонанса сравнивалась с частотой остаточных лучей. Эти разрывы связаны с поляронным эффектом. Если частота циклотронного резонанса становится больше частоты фонона ω_0 , то поляризация решетки не может больше следить за орбитальным движением электрона и резонансная частота уже определяется эффективной массой электрона.

) Теория эффекта Джонсона — Ларсена была развита Л. И. Коровиным и С. Т. Павловым [7—7*г]. В работе [7*] получено аналитическое выражение для коэффициента поглощения света в области $\omega_c \approx \omega_0$. Установлено, что величина расщепления пиков и ширина одного из них, в отличие от результатов Уайта и Кунса, пропорциональны $\alpha^{1/2}$. В работе [7*а] предложен метод определения константы спин-электрон-фононной связи, основанный на возможности обнаружения расщепления пика магнитооптического поглощения за счет переходов с переворотом спина.

В работах [7*б, 7*в] результаты [7*, 7*а] обобщены на случай, когда существенно пространственная дисперсия оптических фононов.

Причины несовпадения предельных значений спектра (см. l_2 и l_3 на рис. 12) выяснены в [7*г].

Исследование взаимодействия уровней электрон-фононной системы на высших гармониках циклотронного резонанса позволило выйти из области полного внутреннего отражения и наблюдать тонкие детали в поглощении света. В [7д] наблюдались разрывы («пиннинги») в зависимости максимума коэффициента поглощения света от магнитного поля при энергиях, равных сумме энергий двух фононов, а в [7е] — при частотах, равных сумме частот различных трехфононных комбинаций. В [7ж] развита общая теория «пиннингов» при $\omega_0 = eH/m^*c = \omega_0$ и, в частности, предсказано появление трех близко расположенных пиков, когда частота света $\nu = 3\omega_0$, что и было обнаружено в [7з].

В работах [8*, 9*, 10*] было показано, что в спектре полярона в магнитном поле даже при слабой электрон-фононной связи существуют дополнительные ветви спектра, которые могут быть интерпретированы как связанные состояния электрона на дне нижней зоны Ландау и оптического фонона. В работе [11*] изучена тонкая структура магнитооптического поглощения, связанная с этими состояниями. (Прим. ред.)

ГЛАВА IV

СОБСТВЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ ПОЛЯРОНА МАЛОГО РАДИУСА

Напомним наиболее существенные предположения, лежащие в основе фрелиховского полярона большого радиуса.

1) Приближение эффективной массы, согласно которому взаимодействие электрона с периодическим потенциалом учитывается через эффективную массу m^* .

2) Континуальное приближение, использующее макроскопические постоянные ϵ , ϵ_∞ для описания поляризации, связанной с ионными дипольными моментами, возникающими при смещении ионов из их положения равновесия. Ясно, что эти приближения не годятся для описания полярона малого радиуса, размеры которого приблизительно равны или меньше постоянной решетки. Следовательно, необходимо учитывать структуру решетки.

Удобной величиной, характеризующей радиус полярона при всех значениях силы связи α , является фейнмановский размер полярона r_f^*). Фейнмановский полярон может быть описан как электрон с массой m^* , связанный гармоническим потенциалом с фиктивной частицей с массой $M = m^{**} - m^*$. Силовая константа K , а характерная частота системы $\nu = (K/\mu)^{1/2}$, где $\mu^{-1} = M^{-1} + m^{*-1}$. Волновая функция системы есть гауссова функция вида $\psi(\mathbf{r}) \sim \exp(-1/2\mu\nu r^2)$, \mathbf{r} — относительная координата. Эта волновая функция определяет фейнмановский радиус полярона

$$r_f = (3/2\mu\nu)^{1/2}.$$

Шульц [49] вычислил r_f , используя значения вариационных параметров ν и ω , которые минимизируют энергию основного состояния. Результаты для r_f приведены в табл. III вместе со значением характерной длины $a^{-1} = (\hbar/2m_0\omega_0)^{1/2}$. Радиус полярона r_f вычислялся в предположении, что $m^* = m_0$. Тогда в NaCl радиус $r_f > a$. В этом случае континуальное приближение приводит к малым ошибкам в собственной энергии и эффективной массе [49]. С другой стороны, если в щелочно-галогидных кристаллах

) В случае промежуточной связи $\alpha \sim 5$ численные значения радиуса фейнмановского полярона для щелочно-галогидных кристаллов хорошо согласуются с вычисленными по формуле $a^{-1} = (\hbar^2/2m^\omega_0)^{1/2}$.

Постоянная решетки a , фейнмановский радиус полярона r_f ,
и характеристическая длина u^{-1} для различных кристаллов [49]

Кристалл	a , Å	r_f/a	$(\hbar/2m_0\omega_0)^{1/2}$, Å	Кристалл	a , Å	r_f/a	$(\hbar/2m_0\omega_0)^{1/2}$, Å
LiF	4,02	1,57	6,84	KI	7,05	2,31	18,99
NaF	4,62	1,57	8,68	RbCl	6,54	1,65	13,02
NaCl	5,63	1,81	10,88	RbBr	6,85	1,77	15,47
NaBr	5,96	2,08	12,15	RbI	7,33	2,07	16,9
NaI	6,46	2,12	13,18	Cu ₂ O	2,46	5,93	8,83
KCl	6,28	1,72	12,09	AgCl	5,54	8,43	12,5
KBr	6,58	1,88	13,76				

$m^* \geq 3m_0$, то радиус $r_f < a$, и континуальное приближение нарушается. Не существует надежных значений для m^* электронов в зоне проводимости в NaCl и других щелочно-галогидных кристаллах. Однако для дырок в валентной зоне KCl величина m^* больше m_0 . Холанд [144] нашел, что ширина наивысшей валентной зоны в KCl всего 1,5 эв, что соответствует эффективной массе порядка $5m_0$. Найденное экспериментально Параттом и Джоссеом [145] из спектров испускания рентгеновских лучей значение ширины зоны, 0,33 эв, еще меньше. Это значение учитывает влияние электронной поляризации, которую Холанд не учел в своих расчетах, основанных на модели неполяризующихся ионов. Таким образом, к дыркам в щелочно-галогидных кристаллах, а также в других веществах, таких, как NiO, картина полярона большого радиуса определено неприменима. Поэтому различные авторы пытались освободиться от предположений 1) и 2). Ниже мы сначала обсудим работу Тябликова [10] и Неттела [146], которые рассмотрели задачу о собственных состояниях полярона малого радиуса при $T = 0$, используя обобщенное приближение сильной связи, чтобы учесть поляризацию решетки. Они нашли, что отношение ширины поляронной зоны к ширине соответствующей блоховской зоны мало как $\exp(-\text{const} \cdot \alpha)$. Под блоховской зоной мы подразумеваем электронную зону в жесткой решетке, где ионы закреплены в своих положениях равновесия. В то время как Тябликов отказался только от предположения 1), Неттел отказался от обоих предположений. Он не использовал континуального приближения, и его гамильтониан содержит только незранированное кулоновское взаимодействие между частицами.

При конечных температурах собственные состояния полярона малого радиуса существенно отличаются от блоховских состояний. В работах Ямашиты и Куросавы [5] и Сьювелл [147], основанных на той же поляронной модели, что и работы Тябликова [10] и Неттела [146], соответственно, получено, что ширина

зоны экспоненциально уменьшается с температурой: $\Delta E \sim \sim \exp(-\text{const} \cdot T)$ при высоких температурах $k_B T \gg \hbar \omega_0$. При некоторой температуре T_c , которая порядка $\theta_0/2$, ширина поляронной зоны уменьшается настолько, что становится меньше, чем неопределенность в энергии зонных состояний. При этом зонная картина нарушается, и описание целесообразнее вести в терминах локализованных состояний. Тогда элементарный акт движения полярона — это активированный фононами прыжок, а обычный процесс туннелирования играет только второстепенную роль *). Холстейн [6] четко разделил два типа движения полярона. В частности, в его работе и работе Ямашиты и Куросавы [5а] содержится явное выражение для времени жизни локализованных поляронных состояний, из которых легко вычисляется дрейфовая подвижность с помощью соотношения Эйнштейна между подвижностью и коэффициентом диффузии для случайного прыжкового движения.

§ 11. Зоны поляронов малого радиуса при $T = 0$

В этом разделе мы последовательно обсудим работы Тябликова [10] и Неттелла [146]. Расчет Тябликова иллюстрирует общий эффект влияния поляризации смещения на зонные состояния полярона малого радиуса и, в частности, резкое уменьшение ширины зоны. Неттелл рассмотрел влияние смещения и электронной поляризации на собственные состояния электрона в конкретном случае — валентной зоны в КС1. Он пришел к заключению, что взаимодействие дырки с поляризующейся решеткой приводит к автолокализации дырки в ее основном состоянии.

Теория Тябликова исходит из гамильтониана, который отличается от фрелиховского гамильтониана тем, что не используется приближение эффективной массы 1). В уравнении (2.1) m^* заменяется на m_0 и добавляется потенциальная энергия электрона в периодическом потенциале $U(\mathbf{r})$, так что новый гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = p^2/2m_0 + U(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega(\mathbf{q}) b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} [b_{\mathbf{q}}^+ e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - b_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}], \quad (11.1)$$

где

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{i}{q} \left[\frac{2\pi \hbar \omega(\mathbf{q}) e^2}{V \epsilon^*} \right]^{1/2}. \quad (11.2)$$

Остается, однако, континуальное приближение для электрон-

*) Это утверждение справедливо лишь в пределе $J \rightarrow 0$. При не слишком малых J , вообще говоря, существует некоторый температурный интервал (при $T > T_c$), в котором зонное описание уже не годится, но активационные перескоки еще не дают основного вклада в подвижность. Механизм переноса в этой области температур можно условно назвать «туннельным» (см. §§ 6—8 гл. I и §§ 4—7 гл. II в части II книги). (Прим. ред.)

решеточного взаимодействия. Поэтому энергетический спектр (11.1) — это спектр блоховского электрона в периодическом поле $U(\mathbf{r})$, энергия которого сдвигается за счет взаимодействия, зависящего от α . Потенциал $U(\mathbf{r})$ имеет вид

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{m}} [U_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) + U_-(\mathbf{r} - \mathbf{R}'_m)] = U_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0) + U_\Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0), \quad (11.3)$$

где

$$U_\Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0) = \sum_{\mathbf{m} \neq 0} U_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) + \sum_{\mathbf{m}} U_-(\mathbf{r} - \mathbf{R}'_m). \quad (11.4)$$

Здесь \mathbf{R}_m — радиус-вектор положительных ионов, $\mathbf{R}_m = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3 = m\mathbf{a}$. Радиус-вектор отрицательного иона \mathbf{R}'_m отличается от \mathbf{R}_m на вектор \mathbf{a} , лежащий внутри элементарной ячейки, содержащей один положительный и один отрицательный ионы ($\alpha_i < a_i$). Потенциал $U_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0)$ выделяется из суммы, так как электрон, сильно взаимодействующий с решеткой, стремится автолокализоваться на положительном ионе, помещенном, скажем, в начале координат $\mathbf{R}_0 = 0$. Поэтому волновая функция электрона может быть записана в виде линейной комбинации атомных орбиталей, как и в блоховской теории [11] сильно связанных электронов проводимости. Если электрон локализован в точке \mathbf{R}_0 , то волновая функция имеет вид

$$\varphi(\mathbf{r}) \prod_{\mathbf{q}} \theta_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}}), \quad (11.5)$$

где произведение есть вектор состояния фононной системы, а $\theta_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}}) = (n_{\mathbf{q}}!)^{-1/2} (b_{\mathbf{q}}^+)^{n_{\mathbf{q}}} |0\rangle$. Вследствие трансляционной симметрии кристаллической решетки \mathcal{H} инвариантен относительно операции симметрии $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{R}_m$, $b_{\mathbf{q}} \rightarrow b_{\mathbf{q}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_m)$, и полная волновая функция имеет вид

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \{n_{\mathbf{q}}\}) = \sum_{\mathbf{m}}' e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_m} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \prod_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_m n_{\mathbf{q}}} \theta_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}}), \quad (11.6)$$

где электронная волновая функция $\varphi(\mathbf{r})$ и фононный вектор состояний нормированы обычным образом

$$\int |\varphi|^2 d\mathbf{r} = 1, \quad (\theta_{\mathbf{q}}^+, \theta_{\mathbf{q}}) = \sum_{n_{\mathbf{q}}} |\theta_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}})|^2 = 1. \quad (11.7)$$

Штрих в сумме (11.6) означает, что суммирование проводится только по положениям катионов. Относительно $\theta_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}})$ Тябликов предполагает, что

$$\theta_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}}) \begin{cases} \neq 0 & \text{при } n_{\mathbf{q}} = 0, 1, \\ = 0 & \text{при } n_{\mathbf{q}} \geq 2, \end{cases} \quad (11.8)$$

что соответствует слабому возбуждению решетки; $\theta_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}} = 1) = \pi_{\mathbf{q}}$.

Собственные значения \mathcal{H} (11.1) суть

$$E(\mathbf{k}) = (\Psi_{\mathbf{k}}^*, \mathcal{H}\Psi_{\mathbf{k}}) / (\Psi_{\mathbf{k}}^*, \Psi_{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{m}}' e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_m} \tilde{\mathcal{H}}_{\mathbf{m}} / \sum_{\mathbf{m}}' e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_m} I_{\mathbf{m}}^0 \theta_{\mathbf{m}}, \quad (11.9)$$

где

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\mathbf{m}} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} I_{\mathbf{m}} + J_{\mathbf{m}} + S_{\mathbf{m}}^0 \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega(\mathbf{q}) |\pi_{\mathbf{q}}|^2 e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_m} + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} (S_{\mathbf{m}}^{\mathbf{q}*} \pi_{\mathbf{q}}^* + S_{\mathbf{m}}^{\mathbf{q}} \pi_{\mathbf{q}}) \right] \theta_{\mathbf{m}}, \quad (11.10)$$

$$I_{\mathbf{m}} = \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) \Delta_r \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (11.11)$$

$$J_{\mathbf{m}} = \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) U(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (11.12)$$

$$S_{\mathbf{m}}^{\mathbf{q}} = e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_m} \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (11.13)$$

$$\theta_{\mathbf{m}} = \exp \left\{ -\sum_{\mathbf{q}} |\pi_{\mathbf{q}}|^2 [1 - \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_m)] \right\}. \quad (11.14)$$

Неизвестные функции $\varphi(\mathbf{r})$ и $\pi_{\mathbf{q}}$ определяются минимизацией $E(\mathbf{k})$. При вычислении $E(\mathbf{k})$ сделано приближение, совместимое с требованием малости размера полярона. Предполагается, что интеграл неортогональности

$$S_{\mathbf{1}}^0 \ll 1. \quad (11.15)$$

Далее, вычисление $E(\mathbf{k})$ в первом порядке по $S_{\mathbf{m}}^0$ проводится в три этапа. Сначала вычисляют $\pi_{\mathbf{q}}$, $\pi_{\mathbf{q}}^*$, варьируя $\tilde{\mathcal{H}}_0$ по π при фиксированном $\varphi(\mathbf{r})$. Затем находят $\varphi(\mathbf{r})$ минимизацией нового $\tilde{\mathcal{H}}_0$ по φ . Такое вычисление π и φ из $\tilde{\mathcal{H}}_0$ правильно, так как $E(\mathbf{k})$ вычисляется только в первом порядке по интегралу неортогональности $S_{\mathbf{m}}^0$. Третий этап — это вычисление $E(\mathbf{k})$ из (11.9) с использованием полученных выражений для π и φ .

Варьирование $\tilde{\mathcal{H}}_0$ по π при фиксированном φ дает

$$\pi_{\mathbf{q}} = -\frac{V_{\mathbf{q}}}{\hbar\omega(\mathbf{q})} S_{\mathbf{0}}^{\mathbf{q}}, \quad \pi_{\mathbf{q}}^* = -\frac{V_{\mathbf{q}}}{\hbar\omega(\mathbf{q})} S_{\mathbf{0}}^{\mathbf{q}*}. \quad (11.16)$$

Подставляя эти выражения в $\tilde{\mathcal{H}}_0$, получим

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} I_0 + J_0^0 - \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar\omega(\mathbf{q})} |S_{\mathbf{0}}^{\mathbf{q}}|^2 + J_{\Delta}^0, \quad (11.17)$$

где

$$J_0^0 = \int U_0(\mathbf{r}) |\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}, \quad (11.18)$$

$$J_{\Delta}^0 = \int [U(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r})] |\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}. \quad (11.19)$$

Здесь $U_0(\mathbf{r})$ — потенциал $U_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0)$ от положительного иона, находящегося в точке $\mathbf{R}_0 = 0$. Так как J_Δ^0 и $\int U_-(\mathbf{r} - \alpha) |\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ малы по сравнению с J_0^0 , то волновая функция $\varphi(\mathbf{r})$ находится минимизацией $\tilde{\mathcal{H}}_0$ в пренебрежении этими малыми членами. Варьирование по φ дает уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta\varphi + U_0\varphi - 2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar\omega(\mathbf{q})} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} |\varphi(\mathbf{r}')|^2 d\mathbf{r}' \varphi = E'_0\varphi. \quad (11.20)$$

Используя (11.2) для $V_{\mathbf{q}}$ и $\omega(\mathbf{q}) = \omega_0$, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta\varphi + U_0\varphi - \frac{e^2}{\epsilon^*} \int \frac{|\varphi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \varphi = E'_0\varphi, \quad (11.21)$$

где E'_0 — собственное значение энергии свободного иона, уменьшенное на энергию связи полярона, $E'_0 = E_0 - E_b$. Уравнение (11.21) для $\varphi(\mathbf{r})$ имеет тот же вид, что и уравнение Шредингера для F-центрального электрона, найденное Пекаром путем варьирования функционала $J_F(\varphi, \mathbf{P})$ (4.13) по φ при фиксированной поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$. Существенным отличием уравнения (11.21) от уравнения Шредингера для электрона на F-центре является наличие потенциальной энергии $U_0(\mathbf{r})$, которая соответствует здесь потенциальной энергии электрона в кулоновском поле иона, в то время как в теории Пекара это — экранированный потенциал электрона в поле катионной вакансии. Среднее значение потенциальной энергии U_0 порядка e^2/r_0 , где r_0 — длина порядка размера атомного состояния. Среднее значение третьего члена в уравнении (11.21) порядка $e^2/\epsilon^* r_0$. Этот член учитывает влияние поляризации кристалла на энергию атомного состояния.

С помощью $\varphi(\mathbf{r})$, определяемой уравнением (11.21), и $\pi_{\mathbf{q}}$, $\pi_{\mathbf{q}}^*$, определяемыми уравнением (11.16), можно вычислить в первом порядке по интегралу неортогональности S_m^0 энергетический спектр $E(\mathbf{k})$. Кроме того, в окрестности нижнего и верхнего краев зон энергия может быть разложена в ряд по \mathbf{k} . Во втором порядке по \mathbf{k} и первом порядке по S_m^0 ($m \neq 0$) ряд в правой части (11.9) имеет вид

$$E_I(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_I) - \frac{1}{2} \sum'_{m \neq 0} (\mathbf{k}\mathbf{R}_m)^2 (\tilde{\mathcal{H}}_m - S_m^0 \theta_m \tilde{\mathcal{H}}_0), \quad (11.22)$$

$$E_{II}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_{II}) + \frac{1}{2} \sum'_{m \neq 0} (\mathbf{k}\mathbf{R}_m)^2 (\tilde{\mathcal{H}}_m - S_m^0 \theta_m \tilde{\mathcal{H}}_0). \quad (11.23)$$

Здесь нижний край зоны определяется условием $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_m) = 1$ или $\mathbf{k}_I = 0$, а верхний край зоны — условием $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_m) = -1$, что соответствует вектору $-\mathbf{k}_{II}$, оканчивающемуся на границе

первой зоны Бриллюэна. Из уравнений (11.9) — (11.14) для энергий краев зоны в первом порядке по S_m^0 получаем

$$E(k_I) = \tilde{\mathcal{H}}_0 + \sum'_{m \neq 0} (\tilde{\mathcal{H}}_m - S_m^0 \theta_m \tilde{\mathcal{H}}_0), \quad (11.24)$$

$$E(k_{II}) = \tilde{\mathcal{H}}_0 - \sum'_{m \neq 0} (\tilde{\mathcal{H}}_m - S_m^0 \theta_m \tilde{\mathcal{H}}_0). \quad (11.25)$$

Из выражений (11.22) — (11.25) видно, что ширина зоны $E(k_{II}) - E(k_I)$, так же как и коэффициент в разложении при k^2 , зависит от величины $\tilde{\mathcal{H}}_m - S_m^0 \theta_m \tilde{\mathcal{H}}_0$. Сравнивая выражение для $\tilde{\mathcal{H}}_0$, даваемое (11.10), с E'_0 , полученными из (11.20), после умножения последнего на $\varphi^*(\mathbf{r})$ и интегрирования по \mathbf{r} получим

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = E'_0 + \sum_q [|V_q|^2 / \hbar \omega(\mathbf{q})] |S_0^q|^2 + J_\Delta^0. \quad (11.26)$$

Используя это выражение, можно представить $\tilde{\mathcal{H}}_m$ в виде

$$\tilde{\mathcal{H}}_m = \left\{ E'_0 S_m^0 + S_m^0 \sum_q [|V_q|^2 / \hbar \omega(\mathbf{q})] |S_0^q|^2 \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_m) + J_\Delta^m \right\} \theta_m. \quad (11.27)$$

Это выражение получается подстановкой E'_0 из (11.26) после проведения простых алгебраических вычислений [141]*).

В результате величина, определяющая ширину зоны и член с k^2 в $E(\mathbf{k})$, имеет вид

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_m - \tilde{\mathcal{H}}_0 S_m^0 \theta_m &= (J_\Delta^m - J_\Delta^0 S_m^0) \theta_m - \\ &- S_m^0 \theta_m \sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar \omega(\mathbf{q})} |S_0^q|^2 [1 - \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_m)], \end{aligned} \quad (11.28)$$

где

$$J_\Delta^m = \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) [U(\mathbf{r}) - U_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_0)] \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (11.29)$$

Последний шаг в вычислении ширины зоны и $E(\mathbf{k})$ около краев зон состоит в вычислении (11.28). Главной величиной

*) Подстановка дает первый член $(-\hbar^2/2m_0) J^0 S_m^0 \theta_m$. Это выражение должно равняться первому члену в $\tilde{\mathcal{H}}_m$ (11.27), т. е. $J^0 S_m^0 = J_m$, или

$$\int \int \varphi^*(\mathbf{r}') \Delta \varphi(\mathbf{r}') \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) [\varphi(\mathbf{r}) - \Delta \varphi(\mathbf{r})] d\mathbf{r}' d\mathbf{r} = 0.$$

Интеграл равен нулю, если подынтегральное выражение обращается в нуль для любого \mathbf{r} :

$$\int \varphi^*(\mathbf{r}') \Delta \varphi(\mathbf{r}') [\varphi(\mathbf{r}) - \Delta \varphi(\mathbf{r})] d\mathbf{r}' = 0.$$

Это уравнение выполняется, что можно видеть, взяв скалярное произведение с $\varphi(\mathbf{r})$. Аналогично можно показать, что

$$S_m^0 (J_0 - J_\Delta^0) = J_0^m, \quad J_m = J_\Delta^m + J_0^m.$$

является θ_m , которая играет роль осцилляторного интеграла перекрытия. Этот интеграл равен единице, если пренебречь поляризацией смещения $V_q = 0$. Тогда справа в (11.28) стоит $J_\Delta^m - J_\Delta^0 S_m^0$. В блоховской теории в приближении сильной связи членом с S_m^0 пренебрегают [86]. Здесь же θ_m появляется в $E(\mathbf{k})$ под знаком суммы вместе с S_m^0 , значение которой уменьшается быстро с увеличением R_m . Поэтому нас интересует θ_m только для малых m . Тогда приближенно получим

$$\theta_m \approx \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_q (R_m q)^2 |\pi_q|^2 \right]. \quad (11.30)$$

Для решетки с центром симметрии $|\pi_q| = |\pi_{-q}|$ и

$$\theta_m \approx \exp(-\sigma R_m^2/2), \quad (11.31)$$

где

$$\sigma = \frac{1}{3} \sum_q q^2 |\pi_q|^2. \quad (11.32)$$

Используя для π_q и π_q^* выражение (11.16) и предполагая, что $\omega(\mathbf{q}) = \omega_0$, получим, что

$$\sigma \approx \frac{2}{3} \pi (e^2/\epsilon^* \hbar \omega_0) = \frac{1}{3} \pi \alpha u^2, \quad (11.33)$$

где α — фреilihовская константа связи, а u^{-1} — характерная длина, определяемая выражением (2.2).

Теперь можно найти величину (11.28), определяющую ширину зоны и коэффициент при k^2 в зависимости поляронной энергии от \mathbf{k} около краев зон. Используя (11.16) и (11.32), получим

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_m - \tilde{\mathcal{H}}_0 S_m^0 \theta_m &= (J_\Delta^m - J_\Delta^0 S_m^0) \exp(-\frac{1}{2} \sigma R_m^2) - \\ &- \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma R_m^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \sigma R_m^2\right), \end{aligned} \quad (11.34)$$

где J_Δ^m — резонансный интеграл в жесткой решетке (11.29), величина которого порядка нескольких электрон-вольт. Для $R_m = a$ (постоянная решетки) $\sigma R_m^2 \sim 4\pi u^2 a^2$. Так как u^2 порядка $1/a^2$, то вторым членом в (11.34) можно пренебречь.

Для энергии краев зон, используя (11.24) — (11.26) и (11.34), получим

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}_I, \mathbf{k}_{II}) &= E_0' + J_\Delta^0 + \frac{e^2}{2\epsilon^*} \iint \frac{|\varphi(\mathbf{r})|^2 |\varphi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \mp \\ &\mp N_1 B \exp\left(-\frac{1}{2} \sigma R_1^2\right), \end{aligned} \quad (11.35)$$

где N_1 — число ближайших катионных соседей (6 для CsCl, 12 для NaCl), а R_1 — расстояние между двумя катионами; $B = J_\Delta^m - J_\Delta^0 S_m^0$. Вблизи краев энергия имеет вид

$$E_{I, II}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_{I, II}) \pm (\hbar^2 k^2 / 2m^{**}), \quad (11.36)$$

где

$$m^{**} = \hbar^2 \exp\left(\frac{1}{2} \sigma R_1^2\right) / 2N_1 B R_1^2. \quad (11.37)$$

Здесь N' (равное единице для CsCl и двум для NaCl) появляется из-за скалярного произведения \mathbf{kR}_m в (11.22) и (11.23). Основным результатом расчетов Тябликова состоит в том, что вследствие динамического электрон-решеточного взаимодействия ширина зоны в полярных кристаллах уменьшается экспоненциально с константой связи $\exp(-2\alpha u a^2)$, а зонная эффективная масса полярона m^* увеличивается как $\exp(2\alpha u a^2)$.

Из выражения (11.35) видно, что вследствие поляризации смещения энергетический минимум зоны проводимости понижается на величину E_b :

$$E_b = \frac{1}{2} \frac{e^2}{\epsilon^*} \iint \frac{|\varphi(\mathbf{r})|^2 |\varphi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'.$$

Энергия атомного состояния в кристалле E'_0 также отличается от энергии свободного иона на энергию поляризации E_b . Среднее значение потенциала поляризации в выражении (11.21) есть $-2E_b$, однако этот потенциал имеет вид $-e^2/\epsilon^*r$ и поэтому приводит к дополнительному сжатию волновой функции свободного иона. Соответствующее увеличение кинетической энергии электрона $+E_b$, так что результирующее изменение энергии только E_b , а не $2E_b$, как утверждал Тябликов. Другими словами, вследствие поляризации кристалла энергия свободного иона и энергия минимума зоны проводимости понижаются на одну и ту же величину E_b .

Неттел в своих расчетах собственных состояний полярона малого радиуса в KCl при $T = 0^\circ\text{K}$ отказался как от приближения эффективной массы, так и от континуального приближения. В обобщенном приближении сильной связи для дырки в валентной зоне учитывается поляризация смещения, а также возможная электронная поляризация ионов. Гамильтониан дырки в валентной зоне — это многоэлектронный гамильтониан, содержащий голое кулоновское взаимодействие между валентными электронами, ионами и валентными электронами и ионами. Предполагается, что кристалл состоит из N положительных и N отрицательных ионов. Число валентных электронов $2k = 16N$, так как каждый ион K^+ и Cl^- имеет восемь валентных электронов. Тогда поляронно-дырочный гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_{m=1}^{2k-1} \mathcal{H}_{m\text{el}} + \frac{1}{2} \sum_{m \neq n}^{2k-1} \sum_{n=1}^{2k-1} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n|} + \mathcal{H}_{\text{lat}}, \quad (11.38)$$

где \mathcal{H}_m — одноэлектронный гамильтониан, состоящий из кинетической энергии и кулоновского взаимодействия с ионным остовом. Второй член в правой части (11.38) — кулоновское взаимодействие между валентными электронами, а третий член состоит из кинетической энергии ионов и их кулоновского взаимодействия.

Собственные состояния \mathcal{H} определяются вариационным методом. Для этого вводятся пробные функции, которые содержат вариационный параметр Γ , характеризующий взаимодействие дырки с решеткой. Пробные функции соответствуют функциям обобщенной сильной связи

$$\Psi = \sum_{m=1}^{2N} \exp(ik\mathbf{R}_m) \varphi_m(\mathbf{r}, \mathbf{X}) \chi_m(\mathbf{X}, \Gamma). \quad (11.39)$$

Суммирование проводится по всем положительным и отрицательным ионам, каждый из которых может принять на себя дырку. Равновесные положения ионов в совершенном кристалле обозначены \mathbf{R}_m . Ядерные функции $\chi_m(\mathbf{X}, \Gamma)$ зависят от координат ионов \mathbf{X}_m (введено единое обозначение \mathbf{X}): χ_m описывает колебания решетки около смещенных положений равновесия, когда дырка находится в окрестности m -иона. Наконец, дырочная орбиталь φ_m заменяет одноэлектронную орбиталь в волновой функции сильной связи полярона в зоне проводимости (11.6).

Обсудим сначала дырочные орбитали φ_m , а затем ядерные функции χ_m , которые отвечают за дырочно-решеточную корреляцию. Дырочная орбиталь φ_m зависит от $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_{2k-1}$ координат $(2k-1)$ валентных электронов (общее обозначение этих координат — \mathbf{r}). Она представляет собой линейную комбинацию многоэлектронных волновых функций, каждая из которых имеет вид детерминанта Слэйтера, описывающего конфигурацию $(2k-1)$ валентных электронов. Таким образом, в совершенном кристалле с $2k$ валентными электронами волновая функция имеет вид детерминанта:

$$\Phi(\mathbf{X}) = [2M! |S(\mathbf{X})|]^{-1/2} \begin{bmatrix} u_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{X}_1) & \dots & u_1(\mathbf{r}_{2k} - \mathbf{X}_1) \\ u_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{X}_2) & \dots & u_2(\mathbf{r}_{2k} - \mathbf{X}_2) \\ \vdots & & \vdots \\ u_{2k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{X}_{2k}) & \dots & u_{2k}(\mathbf{r}_{2k} - \mathbf{X}_{2k}) \end{bmatrix}, \quad (11.40)$$

где $|S(\mathbf{X})|$ — детерминант матрицы перекрытия, определенной Левдиным [148].

С хорошей точностью величины u — это орбитали свободных ионов. Предполагается, что смещение ионов из их положений равновесия \mathbf{R}_m не влияет на u , т. е. орбитали следуют за движением ионного остова, на котором они центрированы,

$$u_M(\mathbf{r}_j \mathbf{X}_m) = u_M(\mathbf{r}_j - \mathbf{X}_m), \quad (11.41)$$

где $j = 1, 2, \dots, 2k$ — один из $2k$ валентных электронов, а M означает одну из восьми орбиталей на m -м ионе. Для неидеального кристалла, в котором один электрон отсутствует, дырочная орбиталь φ_m есть линейная комбинация волновых функций

$\Phi(M, 2\kappa)$, имеющих вид детерминантов (11.40), в котором вычеркнуты M -я строка и 2κ -й столбец (для 2κ -го электрона):

$$\Phi_m(r_1, \dots, r_{2\kappa-1}; \mathbf{X}) = \sum_M^{(m)} A_{\beta m} \Phi(M, 2\kappa). \quad (11.42)$$

Индекс (m) у суммы указывает, что суммирование по M ограничено восемью значениями M для каждого m -го иона *). Индекс β обозначает решение вариационной задачи, которая при заданном взаимодействии дырки с решеткой Γ сводится к секулярному уравнению с 2κ собственными функциями β . Для данного спина и вектора \mathbf{k} существует восемь независимых решений α . При заданном β волновая функция Ψ определяется собственными значениями $A_{\beta m}$. Для каждого иона существует восемь компонент $A_{\beta m}$, по одной на каждую орбиталь. Собственные функции Ψ содержат, кроме дырочных орбиталей φ_m , ядерные функции χ_m , которые ответственны за взаимодействие дырки с решеткой.

В блоховском приближении сильной связи $\Gamma = 0$ и A не зависели бы от квантовых чисел дырки в валентной зоне. В нашем случае дырочная волновая функция Ψ строится как линейная комбинация детерминантов атомных функций, а вес каждого детерминанта из-за дырочно-решеточной корреляции $\Gamma \neq 0$ в конце концов зависит от импульса дырки \mathbf{k} и ее спина.

Для того чтобы найти ядерные пробные функции χ_m , описывающие колебание решетки около смещенной конфигурации, когда дырка локализована на m -м ионе, нужно знать движение ядер в совершенном (без дырки) кристалле. Осцилляторная функция кристалла, не содержащего дырку, $\chi_0(\mathbf{X})$ есть волновая функция основного состояния, определяемая из уравнения

$$[T + U(\mathbf{X})]\chi_0(\mathbf{X}) = \mathcal{E}\chi_0(\mathbf{X}), \quad (11.43)$$

где T — кинетическая энергия $2N$ -ионных остатков, а потенциальная энергия U дается выражением

$$U(\mathbf{X}) = \int \Phi^*(\mathbf{X}) \mathcal{H}_u(\mathbf{X}) \Phi(\mathbf{X}) dr_1 \dots dr_{2\kappa}. \quad (11.44)$$

Здесь $\Phi(\mathbf{X})$ определяется выражением (11.40), а \mathcal{H}_u — «статический гамильтониан» кристалла

$$\mathcal{H}_u = \mathcal{H} - T. \quad (11.45)$$

Таким образом, эффективный ядерный потенциал $U(\mathbf{X})$ есть энергия основного состояния уравнения Шредингера для системы валентных электронов, найденная в адиабатическом приближении [149], когда полная собственная функция кристалла без дырки ($\Gamma = 0$) просто равна $\Phi(\mathbf{X})\chi_0(\mathbf{X})$. Разложение $U(\mathbf{X})$ вплоть до квадратичных членов по компонентам \mathbf{X} служит для

*) Здесь пренебрегается малым смешиванием от перекрытия между орбиталями u соседних ионов.

определения набора нормальных координат ξ_p ($p=1, 2, \dots, 6N$) частот нормальных колебаний ω_p . После диагонализации разложение принимает вид

$$U(\mathbf{X}) = U(\mathbf{X}^0) + \frac{1}{2} M \sum_p \omega_p^2 \xi_p^2, \quad (11.46)$$

где M — приведенная масса положительного и отрицательного ионов, а $\mathbf{X}^{(0)}$ обозначает равновесную конфигурацию $\mathbf{X}_m^{(0)} = \mathbf{R}_m$. Чтобы получить ядерные функции несовершенного кристалла, определим конфигурацию решетки $\mathbf{X}^{(m)} [\mathbf{X}_1^{(m)}, \mathbf{X}_2^{(m)}, \dots, \mathbf{X}_{2\kappa}^{(m)}]$, которая, грубо говоря, есть та конфигурация ионов, которая установится, если ввести точечный заряд $|e|$ в точку \mathbf{R}_m вместо дырки. Смещенная конфигурация $\mathbf{X}^{(m)}$ также может быть описана с помощью набора нормальных координат

$$\xi_p(\mathbf{X}^{(m)}) = \bar{\xi}_p^{(m)}, \quad p = 1, 2, \dots, 6N. \quad (11.47)$$

Через эти координаты Неттел определяет ядерную функцию χ_m несовершенного кристалла, считая, что ионы осциллируют около смещенных равновесных положений, равных $\bar{\xi}_p^{(m)}$ или $\bar{\Gamma}_{\xi_p}^{(m)}$, и предполагая, что вид осцилляторной функции χ_m не меняется при смещении и что она есть просто χ_0 . Таким образом, χ_m определяется уравнением

$$\chi_m(\mathbf{X}, \Gamma) = \chi_0(\xi_p - \Gamma_{\xi_p}^{(m)}), \quad (11.48)$$

где $\chi_0(\xi_p)$ есть волновая функция основного состояния уравнения (11.43), которое можно записать в виде

$$\sum_{p=1}^{6N} \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \xi_p^2} + U(\mathbf{X}_0) + \frac{M}{2} \omega_p^2 \xi_p^2 \right] \chi_0(\mathbf{X}) = \mathcal{E} \chi_0(\mathbf{X}) \quad (11.49)$$

и решение которого есть

$$\chi_0(\mathbf{X}) = \prod_{p=1}^{6N} (M\omega_p/\hbar\pi)^{1/4} \exp \left[-\frac{1}{2} (M\omega_p \xi_p/\hbar)^2 \right]. \quad (11.50)$$

Предположение, что осцилляторные функции — «жесткие» относительно смещений ионов, согласуется с предположением, что ионные орбитали следуют без искажения за движением ядер (см. (11.41)). Конкретный вид пробной функции Ψ определяется уравнениями (11.39), (11.42), (11.48).

Собственные значения энергии кристалла без одного валентного электрона получаются, если вычислить среднее

$$E(\mathbf{k}, \beta, \Gamma) = \int \Psi^* \mathcal{H} \Psi \, dr_1 \dots dr_{2\kappa-1} \, d\mathbf{X} \quad (11.51)$$

с помощью пробных функций Ψ .

Напомним, что индекс β обозначает решение секулярного уравнения, получающегося из (11.51). Для данного \mathbf{k} и спина

существует восемь различных $A_{\beta M}$, одно для каждой орбитали с данным спином в единичной ячейке. Окончательный результат интегрирования имеет вид

$$E(k, \beta, \Gamma) = U(\mathbf{X}^{(0)}) + \frac{1}{2} \sum_p \hbar \omega_p + \\ + \sum_{m, n} \exp[ik(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)] Y_{mn} \sum_M^{(m)} \sum_M^{(n)} A_{\beta M} A_{\beta N}^* \times \\ \times \left[S_{MN}(M/2) \sum_p \Gamma^2 \frac{\bar{\xi}_p^{(m)} \bar{\xi}_p^{(n)}}{\xi_p^{(m)} \xi_p^{(n)}} - \bar{\mathcal{E}}_{MN} \right], \quad (11.52)$$

где

$$S_{MN} = \int u_M(\mathbf{r} - \mathbf{X}_m) u_N(\mathbf{r} - \mathbf{X}_n) d\mathbf{r}, \quad (11.53)$$

$$Y_{mn} = \int \chi_m \chi_n d\mathbf{X} = \exp \left[-\frac{M}{4\hbar} \sum_p \omega_p \Gamma^2 (\bar{\xi}_p^{(m)} - \bar{\xi}_p^{(n)})^2 \right], \quad (11.54)$$

$$\bar{\mathcal{E}}_{MN} = \frac{1}{2} [\mathcal{E}_{MN}(\Gamma \mathbf{X}^{(m)}) + \mathcal{E}_{MN}(\Gamma \mathbf{X}^{(n)})], \quad (11.55)$$

$$\mathcal{E}_{MN}(\mathbf{X}^{(m)}) = \int u_M(\mathbf{r} - \mathbf{X}_m) u_N(\mathbf{r} - \mathbf{X}_n) d\mathbf{r} + \\ + \sum_{G, H} S_{G, H}^{-1} [\langle e^2/r_{12} \rangle_{MGNH} - \langle e^2/r_{12} \rangle_{GMNH}], \quad (11.56)$$

$$\langle e^2/r_{12} \rangle_{MGNH} = e^2 \int \int \frac{u_M(1) u_G(2) u_N(1) u_H(2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{r_{12}}, \quad (11.57) \\ [u_M(1) = u_M(\mathbf{r}_1 - \mathbf{X}_m) \text{ и т. д.}]$$

Следовательно, S_{MN}^{-1} — элемент матрицы, обратной матрице перекрытия, которая унитарна [143]. Первый член в правой части уравнения (11.52) — энергия связи кристалла без свободной дырки. Второй член — энергия нулевых колебаний. Третий член ответствен за взаимодействие дырки с поляризующейся решеткой. Ее диагональный член ($m = n$) имеет простой физический смысл. Первый член в скобках, который пропорционален Γ^2 , представляет собой упругую энергию, запасенную кристаллом вследствие деформации, созданной дыркой в точке \mathbf{R}_m . Второй член в скобках $\bar{\mathcal{E}}_{MN}$ может быть отождествлен с кулоновским взаимодействием дырки со всеми ионами, когда они занимают равновесные положения, и с поляризацией смещения, определяемого величиной $\Gamma \mathbf{X}^{(m)} - \mathbf{X}^{(0)}$. Сумма диагональных членов зависит от Γ как $(3\Gamma^2 - 6\Gamma)$ и достигает своего минимального значения при $\Gamma = 1$. Недиагональные члены $m \neq n$ зависят от k и очень чувствительны к Γ , поскольку осцилляторные интегралы перекрытия $Y_{mn} \approx \exp(-\text{const} \times \Gamma^2)$, где $\text{const} \approx 50$ для ближайших соседей в КС]. Эти недиагональные члены ответственны

за зонную структуру четырех валентных зон $3p\text{ Cl}^-$, $3p\text{ K}^+$, $3s\text{ Cl}^-$, $3s\text{ K}^+$ [144]. Неттел решил секулярное уравнение, получающееся для $E(\mathbf{k}, \Gamma_0, \beta)$ из (11.52), минимизируя его относительно коэффициентов $A_{\beta N}$. Он показал, что для валентной зоны, построенной из $3p\text{ Cl}^-$ орбиталей, и для значений \mathbf{k} , соответствующих нижней части блоховской зоны в недеформированной решетке, недиагональные члены понижают энергию по сравнению с той, которая дается суммой диагональных членов в (11.52). Это понижение, как функция Γ , определяется величиной $Y_{mn}(\Gamma)$. Таким образом, имеется два вклада в энергию зонного состояния, которые понижают энергию с увеличением Γ . Первый вклад, происходящий от суммы диагональных членов,

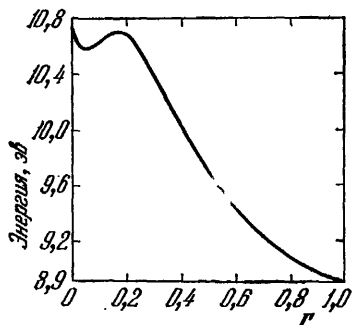


Рис. 13. Зависимость от Γ наивысшего собственного значения $3p\text{ Cl}^-$ зоны при $k_x = k_y = k_z = \pi/2a$ [146].

учитывает поляризацию смещения около дырки. Второй вклад, связанный с зависящими от \mathbf{k} недиагональными членами в уравнении (11.52), учитывает, что дырка стремится локализоваться и размыться по кристаллу. Первый вклад имеет гладкую зависимость от Γ , в то время как второй имеет минимум при малых Γ и уменьшается как $Y_{mn}(\Gamma)$ при больших Γ . Поэтому полная энергия не является монотонно убывающей функцией, а имеет вид, показанный на рис. 13, который типичен для значений \mathbf{k} , соответствующих при $\Gamma = 0$ нижней части $3p\text{ Cl}^-$

валентной зоны. Для значений \mathbf{k} , соответствующих при $\Gamma = 0$ верхней части зоны, Неттел нашел, что энергия $3p\text{ Cl}^-$ зонного состояния монотонно падает вплоть до минимума при $\Gamma = 1$. Ширина зоны пропорциональна ядерному интегралу перекрытия осцилляторных функций для ближайших соседей m и n , т. е. пропорциональна $\exp(-\text{const} \times \Gamma^2)$. Такая зависимость соответствует множителю $\theta_m \approx \exp(-2a^2\alpha u^2)$ для ближайших анионных или катионных соседей, описывающему уменьшение ширины блоховской зоны, который был найден Тябликовым.

Функция θ_m , даваемая выражением (11.14), есть интеграл перекрытия между осцилляторными волновыми функциями, соответствующими числам заполнения фононов, когда избыточный электрон локализован на узле \mathbf{R}_n и $(\mathbf{R}_n + \mathbf{R}_m)$ соответственно. Таким образом, как Тябликов, так и Неттел нашли, что ширина поляронной зоны при $T = 0^\circ\text{K}$ уменьшается по сравнению с блоховской зоной и может стать исключительно узкой из-за малости осцилляторного интеграла перекрытия, который имеет одну и ту же зависимость как от константы связи α , так и от Γ^2 . В то время как Тябликов с помощью фрелиховской константы связи α учитывает влияние электронной поляризации ионов на их сме-

щения, Неттел в первой части своей работы, рассмотренной выше, пренебрегает совсем этой поляризацией. Так как электронная поляризация стремится заэкранировать электрон-ионное взаимодействие и тем самым уменьшить смещение ионов, полученные выше значения для интегралов перекрытия $Y_{mn}(\Gamma)$ завышены.

Только что описанные расчеты можно улучшить, если учесть электронную поляризацию ионов, которой до сих пор пренебрегали. Необходимо использовать улучшенные пробные волновые функции Ψ , которые учитывают как смещения, так и электронную поляризацию. В первом разделе мы уже отмечали, что во фрелиховской континуальной модели полярона большого радиуса поляризация электронов учитывается лишь в той мере, в какой учитывается поляризация электронных оболочек ионов, смещенных (из-за присутствия избыточного заряда) из их равновесных положений.

Кроме того, некоторая часть электронной поляризации учитывалась в приближении эффективной массы, т. е. предполагалось, что в силу условия адиабатичности эта часть поляризации следит за движением электрона и дает вклад в периодический потенциал решетки. Когда же связь с решеткой сильная и применима картина полярона малого радиуса, как, например, для дырки в валентной зоне, взаимодействие дырки с решеткой будет описываться атомными потенциалами вместо макроскопических диэлектрических постоянных. Тогда электронная поляризация ионов дает два эффекта. Она приводит к сдвигу валентной зоны, что соответствует влиянию этой поляризации на диагональные члены в уравнении (11.52). Кроме того, что более важно, изменяются недиагональные члены. Во-первых, фононные интегралы перекрытия $Y_{mn}(\Gamma)$, определяющие ширину зоны, уменьшаются на многоэлектронный интеграл перекрытия

$$Z_{mn} = \int \Phi_m \Phi_n d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{2k}, \quad (11.58)$$

где Φ_m — детерминантная волновая функция типа (11.40), но орбитали свободного иона $u_M(\mathbf{r} - \mathbf{X}_M)$ заменены в ней на $u_M(\mathbf{r}, \mathbf{X}_M)$ ($M = 1, 2, \dots, 2k$), которые являются модифицированными орбиталями, учитывающими искажение хартри-фоковского потенциала свободных ионов электрическим полем положительного точечного заряда $|e|$, находящегося на m -ионе. Неттел грубо оценил Z и получил, что для ближайших соседей $Z_{mn} \sim 0, 1$. Во-вторых, меняются ядерные интегралы перекрытия из-за экранирующего действия электронной поляризации, которая уменьшает смещение ионов от их равновесных положений. Этот эффект приводит к тому, что ядерный интеграл перекрытия для ближайших катионов $Y_{Cl-Cl}(\Gamma)$ увеличивается от $\exp(-46\Gamma^2)$ до $\exp(-12\Gamma^2)$. Произведение $Z_{Cl-Cl} Y_{Cl-Cl}$ порядка 10^{-6} . Таким образом, ширина блоховской зоны $3p Cl^-$, которую Холанд оценил в $1,5 \text{ эв}$,

будет уменьшаться в 10^6 раз, если учитывается как поляризация смещения, так и электронная поляризация*). Таким образом, валентные зоны настолько узки, что любое малое возмущение периодического потенциала, даже такое, например, как возмущение, связанное с далекими дефектами решетки, приводит к локализации дырки. Кастнер и Канциг [7] наблюдали в экспериментах по электронному спиновому резонансу автолокализацию дырок в KCl. Их данные показывают, что дырка локализуется скорее на двух соседних ионах хлора, чем на одном ионе. Хотя теория Неттела ясно показывает, что дырка в валентной зоне в основном состоянии автолокализована, использованные им пробные функции не настолько точны, чтобы описать детали электронных орбиталей для дырок, наблюдавшихся Кастнером и Канцигом. В частности, вместо ионных орбиталей при построении пробных функций должны быть использованы молекулярные орбитали ван-Флековского типа [150].

§ 12. Зоны поляронов малого радиуса при $T \neq 0$

При конечных температурах зоны поляронов малого радиуса были впервые исследованы Ямашитой и Куросавой [5] и Сьювеллом [147]. Первые исходили из гамильтониана того же вида, что и Тябликов, т. е. они использовали континуальное приближение для поляризационного поля. Небольшое различие по сравнению с гамильтонианом Тябликова состоит в том, что ЯК не использовали вторичного квантования для поляризационного поля, а поэтому использовали такие же пробные волновые функции полярона, что и Неттел [146] (11.39). Расчеты Сьювелла для зон полярона малого радиуса существенно отличаются от расчетов ЯК тем, что он избегает континуального приближения и, чтобы учесть электронную поляризацию, описывает взаимодействие электрона с решеткой в виде кулоновского потенциала заэкранированного высокочастотной диэлектрической постоянной ϵ_{∞} . Ниже мы обсудим работы ЯК и Сьювелла.

Результаты ЯК для температурной зависимости ширины поляронной зоны легко получить, вычисляя температурное среднее от осцилляторных интегралов перекрытия ближайших соседей**):

$$Y_{m, m+a}(\{n_{qj}\}) = \int \chi_m \chi_{m+a} d\xi, \quad (12.1)$$

где

$$\chi_m(\{n_{qj}\}) = \sum_{j=1}^2 \prod_q \chi_{n_{qj}}(\xi_{qj}^{(m)}). \quad (12.2)$$

*) Случай $\Gamma = 0$ (отсутствие поляризации смещения) представляет некоторый интерес, так как Паратт и Джоссен [145] определили ширину блоховской зоны в KCl из рентгеновского спектра излучения. Они нашли, что ширина $3p$ Cl⁻ зоны равна 0,33 эв, по сравнению с теоретическим значением Холанда $\sim 1,5$ эв, которое не учитывает электронную поляризацию.

**) Здесь и ниже автор использует сокращение $R_m \equiv m$. (Прим. ред.).

Здесь $\chi_{n_{qj}}$ — нормированные собственные функции для уравнения гармонического осциллятора с независимыми нормальными координатами $\xi_{qj}^{(m)} = \xi_{qj} - \delta\xi_{qj}^{(m)}$ и квантовым числом n_{qj} , ξ_{qj} — нормальные координаты оптической ветви в совершенном кристалле, а $\delta\xi_{qj}^{(m)}$ — малая поправка, связанная с деформацией решетки, вызванной избыточным электроном на m -ионе. Индекс $j = 1, 2$ появляется, так как ЯК используют стоячие волны для описания поляризации смещения:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \sum'_{\mathbf{q}} [\xi_{q1} \sin(\mathbf{q}\mathbf{r}) + \xi_{q2} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r})], \quad (12.3)$$

где ξ_{qj} — вещественные нормальные координаты, а суммирование проводится по половине объема параллелепипеда, отвечающего первой зоне Бриллюэна. Для каждого \mathbf{q} существуют две стоячие волны $\sin(\mathbf{q}\mathbf{r})$ и $\cos(\mathbf{q}\mathbf{r})$. Поправки к нормальным координатам $\delta\xi_{qj}^{(m)}$ таковы:

$$\delta\xi_{qj}^{(m)} = \frac{2(2\pi\hbar)^{1/2}}{q\omega_0} \left(\frac{2\hbar\omega_0}{m_0} \right)^{1/4} \alpha^{1/2} \times \begin{cases} \sin \mathbf{q}\mathbf{R}_m, & \text{если } j=1, \\ \cos \mathbf{q}\mathbf{R}_m, & \text{если } j=2. \end{cases} \quad (12.4)$$

При $T = 0$ ширина поляронной зоны уменьшается по сравнению с блоховской зоной за счет осцилляторного интеграла перекрытия

$$Y_{m, m+a}(\{n_{qj}\} = 0) = \exp \left[- \sum_{j=1}^2 \frac{1}{V} \sum'_{\mathbf{q}} \frac{\omega_0}{2\pi\hbar} (\delta\xi_{qj}^{(m)} - \delta\xi_{qj}^{(m+a)})^2 \right]. \quad (12.5)$$

Этот результат легко проверить с помощью уравнений (12.1) и (12.2), используя функции основного состояния для гармонического осциллятора. Для того чтобы найти тепловые средние $Y_{m, m+a}(\{n_{qj}\})$, умножим произведение $\chi_{n_{qj}}(\xi_{qj}^{(m)}) \cdot \chi_{n_{qj}}(\xi_{qj}^{(m+a)})$ в осцилляторном интеграле перекрытия на статистический вес осциллятора в состоянии n_{qj} :

$$p(n_{qj}) = \frac{\exp(-n_{qj}\hbar\omega_0/k_B T)}{\sum_{n_{qj}} \exp(-n_{qj}\hbar\omega_0/k_B T)}. \quad (12.6)$$

Тогда тепловое среднее от интеграла перекрытия имеет вид

$$Y_{m, m+a}(T) = \sum_{j=1}^2 \prod'_{\mathbf{q}} \int \chi_{n_{qj}}(\xi_{qj}^{(m)}) \chi_{n_{qj}}(\xi_{qj}^{(m+a)}) p(n_{qj}) d\xi_{qj}. \quad (12.7)$$

Интеграл перекрытия такого вида определяет температурную зависимость кривых оптического поглощения F-центров. Из работы Хуанга и Риса [151] имеем

$$Y_{m, m+a}(T) = \exp[-(2N+1)S_0], \quad (12.8)$$

где через S_0 обозначена экспонента в (12.5), а

$$N = [\exp(\hbar\omega_0/k_B T) - 1]^{-1}. \quad (12.9)$$

Осцилляторный интеграл перекрытия $Y_{m,m+a}(T)$ имеет максимум при $T = 0$ и уменьшается с повышением температуры. Такую температурную зависимость можно легко понять, если посмотреть на интеграл перекрытия $\chi_{n_{qj}}(\xi_{qj}^{(m)})$ и $\chi_{n_{qj}}(\xi_{qj}^{(m+a)})$ и найти его зависимость от n_{qj} . Тогда получим, что интеграл перекрытия уменьшается с увеличением n_{qj} *). Хотя осцилляторные волновые функции и уширяются с увеличением n_{qj} , интеграл перекрытия уменьшается из-за разности фаз колебаний двух волновых функций, центрированных при $\delta\xi_{qj}^{(m)}$ и $\delta\xi_{qj}^{(m+a)}$ соответственно. В частном случае высоких температур, $\hbar\omega_0 \ll k_B T$ ширина зоны уменьшается, а эффективная масса растет как $\exp(\mp \text{const} \times T)$ соответственно. Этот результат был впервые получен ЯК.

Сьювелл [147] независимо получил этот же результат. Он исследует собственные состояния избыточного электрона при произвольных температурах в модели, в которой полное электрон-решеточное взаимодействие описывается кулоновским потенциалом. Для нахождения зонных состояний полярона малого радиуса используется обобщенное приближение сильной связи, подобное приближению Тябликова [10], Неттела [146] и Ямашиты и Куросавы [5].

Температурная зависимость вводится более аккуратно способом, слегка отличным от (12.7). Геометрическая модель полярного кристалла — это модель двух решеток Бравэ, каждая из которых состоит из одних положительных или отрицательных ионов, смещенных одна относительно другой на вектор \mathbf{a} . Поляронный гамильтониан дается выражением (1.1) с

$$\mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{int} = (p^2/2m_0) + \sum_m [U_+(\mathbf{r} - \mathbf{X}_m) + U_-(\mathbf{r} - \mathbf{X}'_m)], \quad (12.10)$$

$$\mathcal{H}_{lat} = \mathcal{H}_{opt} + \mathcal{H}_{ac} = \sum_{j=1}^4 \sum_q \frac{1}{2} (\eta_{qj}^2 + \omega_{qj}^2 \xi_{qj}^2), \quad (12.11)$$

где радиус-вектор иона $\mathbf{X}_m = \mathbf{R}_m + \mathbf{x}_m$ и где ξ_{qj} — вещественные нормальные координаты для продольных мод, $\eta = -i\hbar\partial/\partial\xi$. Предполагается, что частотный спектр имеет вид

$$\begin{aligned} \omega_{qj} &= \omega_0, & j &= 1, 2 \quad (\text{оптические моды}), \\ \omega_{qj} &= c_l q, & j &= 3, 4 \quad (\text{акустические моды}). \end{aligned} \quad (12.12)$$

Для каждого q имеются две стоячие волны, соответствующие двум значениям j , а поэтому суммирование по q ограничено по-

*) Во втором порядке по $\delta = \delta\xi_{qj}^{(m)} - \delta\xi_{qj}^{(m+a)}$ получим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n_{qj}}^*[\xi_{qj}^{(m)}] \chi_{n_{qj}}[\xi_{qj}^{(m+a)}] d\xi_{qj} = 1 + (\delta^2/4)(2n_{qj} + 1).$$

Хуанг и Рис подставляют это выражение в (12.7), берут произведение по q , суммируют по j и получают (12.8),

ловиной первой зоны Бриллюэна $-\pi/a < q_1, q_2, q_3 \leq +\pi/a$ [152]. Векторы смещений \mathbf{x}_m и \mathbf{x}'_m ионов n -х типов определяют относительное смещение \mathbf{y}_m и смещение \mathbf{z}_m центра масс

$$\mathbf{y}_m = \mathbf{x}_m - \mathbf{x}'_m, \quad (12.13)$$

$$\mathbf{z}_m = (M_+ \mathbf{x}_m + M_- \mathbf{x}'_m) / (M_+ + M_-). \quad (12.14)$$

Эти два смещения, выраженные через нормальные координаты, имеют вид

$$\mathbf{y}_m = \left(\frac{2}{NM} \right)^{1/2} \sum_q' \frac{q}{q} [\xi_{q1} \cos(\mathbf{qR}_m) + \xi_{q2} \sin(\mathbf{qR}_m)], \quad (12.15)$$

$$\mathbf{z}_m = \left(\frac{2}{N(M_+ + M_-)} \right)^{1/2} \sum_q' \frac{q}{q} [\xi_{q3} \cos(\mathbf{qR}_m) + \xi_{q4} \sin(\mathbf{qR}_m)], \quad (12.16)$$

где $1/M$ — приведенная масса ионов.

Для того чтобы найти локализованные состояния, в которых электрон связан с положительным ионом, Сьювелл поступает подобно Тябликову. Он рассматривает собственные состояния гамильтониана

$$\mathcal{H}_m = \mathcal{H} - U_\Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m), \quad (12.17)$$

где U_Δ дается уравнением (11.3). Таким образом, \mathcal{H}_m определяет движение электрона, который связан на ионе m и который чувствует индуцированное им самим поляризационное поле, обусловленное смещениями всех других ионов из их равновесных положений.

Собственные функции \mathcal{H}_m имеют вид

$$\psi_m = \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m - \mathbf{x}_m) \chi_{m, \text{lat}}, \quad (12.18)$$

где предполагается, что φ является нормированными s -функциями. Из (12.10), (12.12), (12.17) и (12.18) легко найти, что собственные значения энергии \mathcal{H}_m определяются уравнениями

$$E_m = (\psi_m | \mathcal{H}_m | \psi_m) = (\chi_m | \mathcal{H}_{m, \text{lat}} | \chi_m) + E(\mathbf{x}_m) = \mathcal{E}_{m, \text{lat}} + E(\mathbf{x}_m), \quad (12.19)$$

где $E(\mathbf{x}_m)$ — собственные значения атомного состояния φ в потенциале $U_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m - \mathbf{x}_m)$, а гамильтониан решетки полярного кристалла, содержащего избыточный электрон в состоянии φ на m -ом ионе, имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m, \text{lat}} = \mathcal{H}_{\text{lat}} + \int |\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{X}_m)|^2 \left\{ \sum_{n \neq m} [U_+(\mathbf{r} - \mathbf{X}_n) - U_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)] + \right. \\ \left. + \sum_n [U_-(\mathbf{r} - \mathbf{X}'_n) - U_-(\mathbf{r} - \mathbf{R}'_n)] \right\} d\mathbf{r}. \quad (12.20) \end{aligned}$$

Второй член в правой части есть дополнительная потенциальная энергия, обусловленная электрон-решеточным взаимодействием.

Это выражение для гамильтониана решетки преобразуется в сумму от квадратов смещенных нормальных координат и их производных. Для этого разложим \mathcal{H}_{lat} по смещениям $\mathbf{x}_m, \mathbf{x}'_m$ и пренебрежем всеми членами выше первого порядка. Тогда получим после простых алгебраических вычислений новое выражение для $\mathcal{H}_{m, \text{lat}}$.

$$\mathcal{H}_{m, \text{lat}} = \sum_{j=1}^4 \sum'_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} [\eta_{\mathbf{q}j}^2 + \omega_{\mathbf{q}j}^2 (\xi_{\mathbf{q}j} - \delta_{\mathbf{q}j}^{\xi(m)})^2] - E_b, \quad (12.21)$$

где

$$E_b = \sum_{j=1}^4 \sum'_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} \omega_{\mathbf{q}j}^2 (\delta_{\mathbf{q}j}^{\xi(m)})^2, \quad (12.22)$$

$$\delta_{\xi_{\mathbf{q}1}}^{(m)} + i\delta_{\xi_{\mathbf{q}2}}^{(m)} = \frac{1}{\sqrt{N}} B_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_m), \quad (12.23)$$

$$\delta_{\xi_{\mathbf{q}3}}^{(m)} + i\delta_{\xi_{\mathbf{q}4}}^{(m)} = \frac{1}{\sqrt{N}} C_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_m). \quad (12.24)$$

Здесь $B_{\mathbf{q}}$ и $C_{\mathbf{q}}$ имеют вид

$$B_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\omega_0^2} \left(\frac{2}{M}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{m}} \frac{\mathbf{q}}{q} \mathbf{B}(\mathbf{R}_m) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_m), \quad (12.25)$$

$$C_{\mathbf{q}} = \frac{1}{c_i^2 q^2} \left(\frac{2}{M_+ + M_-}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{m}} \frac{\mathbf{q}}{q} \mathbf{C}(\mathbf{R}_m) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_m), \quad (12.26)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{R}_m) = \int |\varphi(\mathbf{r})|^2 \nabla [gU_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) - (1-g)U_-(\mathbf{r} - \mathbf{R}'_m)] d\mathbf{r}, \quad (12.27)$$

$$\mathbf{C}(\mathbf{R}_m) = \int |\varphi(\mathbf{r})|^2 \nabla [U_+(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) + U_-(\mathbf{r} - \mathbf{R}'_m)] d\mathbf{r}, \quad (12.28)$$

$$g = M_-(M_+ + M_-). \quad (12.29)$$

Векторы $\mathbf{B}(\mathbf{R}_m)$ и $\mathbf{C}(\mathbf{R}_m)$ определяют смещения нормальных координат. После того как разложение по векторам смещений доведено до конца, в $\mathcal{H}_{m, \text{lat}}$ появляются произведения вида $\mathbf{B}(\mathbf{R}_m)\mathbf{y}_m$, которые представляют собой дополнительную потенциальную энергию решетки из-за наличия избыточного электрона и его взаимодействия с ионами. Гамильтониан решетки $\mathcal{H}_{m, \text{lat}}$ (12.21) легко получается с помощью унитарного преобразования над \mathcal{H}_{lat} . С помощью унитарного оператора смещения

$$T_m = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_l \sum'_{\mathbf{q}} \eta_{l\mathbf{q}} \delta_{\xi_{\mathbf{q}l}}^{(m)} \right\} \quad (12.30)$$

выражение (12.21) может быть представлено в виде

$$\mathcal{H}_{m, \text{lat}} = T_m \mathcal{H}_{\text{lat}} T_m^\dagger - E_b \quad (12.31)$$

и

$$\chi_{m, \text{lat}} = T_m \chi(\{n_{\mathbf{q}l}\}), \quad (12.32)$$

где χ — собственные функции \mathcal{H}_{lat} :

$$\chi(\{n_{qj}\}) = \sum_{j=1}^4 \prod_q' \chi_{n_{qj}}(\xi_{qj}). \quad (12.33)$$

Собственные значения энергии идеальной решетки суть

$$\mathcal{E}(\{n_{qj}\}) = \sum_{j=1}^4 \prod_q' \hbar \omega_{qj} \left(n_{qj} + \frac{1}{2} \right). \quad (12.34)$$

Собственные значения $\mathcal{H}_{\text{m, lat}}$ имеют вид

$$\mathcal{E}_{\text{m, lat}} = \mathcal{E}(\{n_{qj}\}) - E_b. \quad (12.35)$$

Локализованные состояния, определенные выражениями (12.18) и (12.19), могут быть выражены через собственные функции и собственные значения $\mathcal{H}_{\text{m, lat}}$, а именно, $\chi_{\text{m, lat}}$ и $\mathcal{E}_{\text{m, lat}}$, даваемые выражениями (12.32) и (12.35) соответственно. Тогда в духе приближения сильной связи стационарные состояния полного гамильтониана

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{m}} + U_{\Delta}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\text{m}})$$

ищутся в виде линейной комбинации локализованных состояний. Это дает набор N секулярных уравнений, одно уравнение для каждого положительного иона. N решений секулярной матрицы являются собственными значениями энергии гамильтониана \mathcal{H}

$$E(\mathbf{k}, \{n_{qj}\}) = \mathcal{E}(\{n_{qj}\}) + E_p(\mathbf{k}, \{n_{qj}\}), \quad (12.36)$$

где $\mathcal{E}(\{n_{qj}\})$ — собственные значения энергии идеальной решетки, характеризуемой набором $\{n_{qj}\}$ фононных чисел заполнения, а $E_p(\mathbf{k}, \{n_{qj}\})$ может рассматриваться как энергия полярона с волновым вектором \mathbf{k} , когда решетка находится в состоянии $\chi(\{n_{qj}\})$

$$E_p(\mathbf{k}, \{n_{qj}\}) = E_0 - E_b + \sum_{\text{m}} J_{\Delta}^{\text{m}}(\{n_{qj}\}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\text{m}}), \quad (12.37)$$

где E_0 — энергия атомного состояния $E(\mathbf{x}_{\text{m}})$, которая предполагается равной этой энергии при $\mathbf{x}_{\text{m}} = 0$, а E_b — поляронная энергия связи при $\mathbf{k} = 0$. Резонансный интеграл есть

$$J_{\Delta}^{\text{m}}(\{n_{qj}\}) = \langle \chi_{0 \text{ lat}} | J_{\Delta}^{\text{m}} | \chi_{\text{m, lat}} \rangle \quad (12.38)$$

и

$$J_{\Delta}^{\text{m}} = \int \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\text{m}}) U_{\Delta}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\text{m}}) \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (12.39)$$

Если $\chi_{\text{m, lat}}$ выразить через $\chi(\{n_{qj}\})$ с помощью оператора смещения T_{m} (12.32), энергия полярона E_p может быть представлена как ожидаемое значение оператора

$$E_{0p}(\mathbf{k}) = E_0 - E_b + \sum_{\text{m}} J_{\Delta}^{\text{m}} T_{\Delta}^{\dagger} T_{\text{m}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\text{m}}), \quad (12.40)$$

т. е. энергия полярона запишется в виде

$$E_p(\mathbf{k}, \{n_{qj}\}) = \chi(\{n_{qj}\}) |E_{0p}(\mathbf{k})| \chi(\{n_{qj}\}). \quad (12.41)$$

Сравнивая результаты Сьювелла (12.37) и формулу Неттела (11.52) для энергии кристалла, содержащего поляронную дырку, видно, что скалярное произведение $(\chi_{n, lat}, \chi_{m, lat})$ играет роль осцилляторного интеграла перекрытия Y_{nm} . Используя унитарный оператор смещения T_m , можно представить $\chi_{m, lat}$ в виде

$$\chi_{m, lat} = \sum_{j=1}^4 \prod_q' \chi_{n_{qj}}(\xi_{qj}^{(m)}), \quad (12.42)$$

где $\xi_{qj}^{(m)} = \xi_{qj} - \delta \xi_{qj}^{(m)}$. Таким образом, интеграл перекрытия $(\chi_{n, lat}, \chi_{m, lat})$ отличается от Y_{nm} , определяемого выражениями (12.1) и (12.2), тем, что учитываются еще и акустические смещения, т. е. здесь $j = 1, \dots, 4$, в то время как раньше было $j = 1, 2$ (см. выражение (12.3)).

Для того чтобы найти температурную зависимость зонных состояний полярона, необходимо учесть, что энергия полярона E_p (12.41) есть ожидаемое значение оператора $E_{0p}(\mathbf{k})$ между собственными состояниями $\chi(\{n_{qj}\})$ гамильтониана решетки. Поэтому энергия полярона при температуре T есть тепловое среднее $E_{0p}(\mathbf{k})$, взятое по всем состояниям решетки n_{qj} . Это дает

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\text{Sp} \{E_{0p}(\mathbf{k}) \exp[-\beta \mathcal{H}_{lat}]\}}{\text{Sp} \{\exp[-\beta \mathcal{H}_{lat}]\}}. \quad (12.43)$$

Так как \mathcal{H}_{lat} диагонален на волновых функциях χ , определяемых выражением (12.33), то вычисление температурного среднего для нахождения энергии полярона $E(\mathbf{k})$ дает тот же результат, что и взятие температурного среднего от осцилляторного интеграла перекрытия, определенного в (12.7), и умножение резонансного интеграла J_{Δ}^m на тепловое среднее $Y_{0m}(T)$. Таким образом, мы видим, что процедуры усреднения, использованные Сьювеллом и ЯК для нахождения температурной зависимости зонных состояний полярона, тождественны.

Конечный результат для энергии полярона $E(\mathbf{k})$ имеет вид

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - E_b + \sum_m J_{\Delta}^m Y_{0m}(T) \exp(ik\mathbf{R}_m), \quad (12.44)$$

где

$$Y_{0m}(T) = \text{Sp} \{T_0^{\dagger} T_m \exp(-\beta \mathcal{H}_{lat})\} / \text{Sp} \{\exp(-\beta \mathcal{H}_{lat})\}. \quad (12.45)$$

Сьювелл не пользовался формулами Хуанга и Риса [151] для нахождения теплового среднего. Для полярона, движущегося вдоль вектора решетки \mathbf{a}_m , он получил

$$Y_{0m}(T) = \exp(-S(m)), \quad (12.46)$$

где

$$S(\mathbf{m}) = S_{\text{opt}}(\mathbf{m}) + S_{\text{ac}}(\mathbf{m}) \quad (12.47)$$

и

$$S_{\text{opt}}(\mathbf{m}) = \frac{\omega_0}{N\hbar} \text{cth} \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \right) \sum_{\mathbf{q}} |B_{\mathbf{q}}|^2 \sin^2 \left(\frac{1}{2} \mathbf{a}_m \mathbf{q} \right), \quad (12.48)$$

$$S_{\text{ac}}(\mathbf{m}) = \frac{c_l}{N\hbar} \sum_{\mathbf{q}} q |C_{\mathbf{q}}|^2 \text{cth} \left(\frac{\hbar c_l q}{k_B T} \right) \sin^2 \left(\frac{1}{2} \mathbf{a}_m \mathbf{q} \right). \quad (12.49)$$

Здесь \mathbf{m} соответствует не тройке чисел (m_1, m_2, m_3) , а обозначает один из ближайших соседей положительного иона R_0 в точке $\mathbf{R}_0 + \mathbf{a}_m$. Величины $S_{\text{opt}}(\mathbf{m})$ и $S_{\text{ac}}(\mathbf{m})$ зависят от силы связи электрона с оптическими и акустическими колебаниями соответственно, $S_{\text{ac}}(\mathbf{m})$ обращается в нуль при $T = 0^\circ\text{K}$, а $S_{\text{opt}}(\mathbf{m})$ приближенно равно

$$S_{\text{opt}}(\mathbf{m}, T = 0) = \frac{16Z^2 e^2}{3\hbar M \omega_0^3 a^3}, \quad (12.50)$$

где $\pm Z$ — заряд положительного и отрицательного ионов соответственно.

Такая простая формула для $S_{\text{opt}}(\mathbf{m}, T = 0)$ получается из (12.49), если $B_{\mathbf{q}}$, даваемое выражениями (12.25) и (12.27), вычисляется с использованием незэкранированных кулоновских потенциалов U_+ , U_- . Для KCl имеем $|Z| = 1$, $M = 2,85 \cdot 10^{-21}$ г, $a = 4,45 \cdot 10^{-8}$ см, $\omega_0 = 4 \cdot 10^{13}$ сек⁻¹.

Таким образом, $S_{\text{opt}}(\mathbf{m}, T = 0) = 38$. Это значение находится в разумном согласии со значением $S_{\text{opt}}(\mathbf{m}, T = 0) = 46$, полученным Неттелом [146] для ближайших соседей ионов Cl⁻, когда дырка локализована на одном из ионов.

Эффективная масса полярона m^{**} получается, если разложить энергию (12.44) в ряд по k^2 . Коэффициент при k^2 тогда дает

$$m^{**}(T) = - \frac{\hbar^2}{2J_{\Delta}^m Y_{0m}(T) a^2}, \quad (12.51)$$

где J_{Δ}^m определяется выражением (12.39) с $\mathbf{R}_m = \mathbf{a}_m$. Таким образом, $m^{**}(T)$ — эффективная масса полярона, движущегося в направлении \mathbf{a}_m . При $T = 0^\circ\text{K}$

$$m^{**} = m^* \exp S_{\text{opt}}(\mathbf{m}, T = 0), \quad (12.52)$$

где $m^* = -\hbar^2 / 2J_{\Delta}^m a^2$. При высоких температурах $\hbar\omega_0 \ll k_B T$ эффективная масса

$$m^{**} = m^* \exp(T/T(\mathbf{m})). \quad (12.53)$$

Если пренебречь взаимодействием электрона с акустическими колебаниями, то $T(\mathbf{m})$ равно

$$\frac{1}{k_B T(\mathbf{m})} = 2S_{\text{opt}}(\mathbf{m}, T = 0) / \hbar\omega_0 \quad (12.54)$$

(без электронной поляризации).

Наконец, Сьювелл учитывает электронную поляризацию ионов, которой до сих пор пренебрегали, используя вместо $S(\mathbf{m})$ отношение $S(\mathbf{m})/\epsilon_{\infty}^2$. Из приведенных выше формул для $S(\mathbf{m})$ (12.46) — (12.49) легко видеть, что экранирование ионных потенциалов U_+ , U_- высокочастотной диэлектрической постоянной ϵ_{∞} приводит к уменьшению $S(\mathbf{m})$ в $1/\epsilon_{\infty}^2$ раз. Для KCl получается $\epsilon_{\infty}^{-2} = 1/4,5$. Неттел нашел, что экранирующее влияние электронной поляризации для ближайших анионных соседей уменьшает $S(\mathbf{m})$ в 3,8 раза. Если учесть электронную поляризацию, то эффективная масса полярона при высоких температурах определяется выражением (12.53), в котором характерная температура равна

$$\frac{1}{k_B T(\mathbf{m})} = 2S_{\text{opt}}(\mathbf{m}, T=0)/\hbar\omega_0\epsilon_{\infty} \quad (12.55)$$

(с учетом электронной поляризации).

Характерной особенностью зонных состояний полярона малого радиуса является сильная температурная зависимость эффективной массы m^{**} . При повышении температуры m^{**} увеличивается и соответственно ширина зоны ΔE_p уменьшается. Эти температурные зависимости m^{**} и ΔE_p обусловлены зависимостью двухцентрового интеграла перекрытия $Y(n, \delta)$ от двух параметров: квантового числа n и смещения δ

$$Y(n, \delta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_n^*(\mathbf{x}) \chi_n(\mathbf{x} - \delta) d\mathbf{x}. \quad (12.56)$$

Для заданного смещения δ интеграл перекрытия убывает линейно с n (см. примечание на стр. 110). Предполагается, что $\delta \ll x_0$, где x_0 — амплитуда нулевых колебаний осциллятора. С повышением температуры распределение осцилляторов сдвигается к большим квантовым числам, так что тепловое среднее от осцилляторных интегралов $Y(T)$ уменьшается. Наконец, в классическом пределе высоких температур $k_B T \gg \hbar\omega_0$ $Y(T)$ уменьшается экспоненциально как $\exp(-T/T_m)$, и ширина зоны ΔE_p становится настолько малой, что картина зонного полярона нарушается*).

Приведенные выше соображения о температурной зависимости ΔE_p и $m^{**} \sim \Delta E_p^{-1}$ показывают правильность утверждения Сьювелла, согласно которому увеличение эффективной массы полярона с температурой есть следствие случайного теплового движения гармонических осцилляторов, которое мешает изменению их средних положений.

*) Зонное приближение теряет смысл при таких температурах, когда $\Delta E_p \leq \hbar/\tau$ (см. прим. на стр. 95). (Прим. ред.)

§ 13. Нарушение зонной модели для полярона малого радиуса. Локализованные поляроны малого радиуса

В предыдущей части было показано, что из-за осцилляторного интеграла перекрытия ширина зоны полярона малого радиуса может стать настолько узкой, что физически более осмысленно рассматривать полярон как локализованный, так же как, например, внутренние электроны в кристалле. Это видно, например, из результата Неттела [146], согласно которому при $T = 0$ ширина самой высокой валентной зоны в KCl, $3p\text{Cl}^-$ порядка 10^{-6} эв. Поляронная зона настолько узка, что дырка в валентной зоне 10^6 раз прокрутится вокруг аниона, прежде чем она перейдет к соседнему аниону. Тем не менее в идеальной периодической кристаллической решетке собственные состояния полярона малого радиуса еще имеют блоховский характер независимо от температуры. Однако при высоких температурах блоховский характер полярона малого радиуса становится физически несущественным, как, например, в случае дырок в валентной зоне KCl. Вследствие электрон-решеточного взаимодействия, т. е. благодаря тепловым флуктуациям потенциала решетки, более вероятно, что электрон или (дырка) прыгнет на ближайшего соседа, чем протуннелирует через потенциальный барьер решетки, как это имеет место при обычном зонном движении.

Существуют такие вещества, для которых при низких температурах собственные состояния электрона могут описываться моделью поляронной зоны, но при высоких температурах из-за сильной температурной зависимости осцилляторного интеграла перекрытия ширина зоны в них становится настолько узкой, что обычный механизм туннелирования уже не определяет больше движение полярона, а вместо этого становятся существенными активированные фононами прыжки. Холстейн [6], используя простую модель, провел детальное изучение этих двух механизмов и установил критерии, различающие их. Ямашита и Куросава [5а] тщательно проанализировали прыжковый механизм в реальных кристаллах типа окислов переходных металлов. Они с самого начала использовали локализованные гайтлер-лондонского типа состояния полярона малого радиуса. Сравнение результатов ЯК [5а] и Холстейна для прыжковой вероятности полярона приведено в конце этой части.

Советские физики также изучали [153—160] энергетический спектр поляронов малого радиуса и их движение в решетке. Для трехмерной решетки и без специальных модельных предположений Клиндер [155] и Догонадзе и Чизматжиев [160] продемонстрировали двойственную природу локализованного и зонного представлений для полярона малого радиуса. Была установлена формальная связь между различными представлениями и между соответствующими матричными элементами [155]. Однако большинство работ упомянутых авторов касалось проблемы

подвижности и эти работы будут обсуждаться в следующем параграфе. Здесь же мы ограничимся проблемой собственных состояний полярона малого радиуса, включая время жизни состояний локализованного полярона, которое получается в прыжковой теории возмущений. Дальнейшее обсуждение физической природы прыжковых переходов, активированных фононами, т. е. вопросы об адиабатических и неадиабатических переходах и об относительной роли зонного и прыжкового механизмов, вынесены в следующий параграф.

Работа Холстейна будет служить нам основой для обсуждения локализованных состояний полярона малого радиуса и переходов между ними. Эта работа позднее была обобщена Фридманом и Холстейном [161, 161a] и Шнакенбергом [162] при вычислении холловской подвижности. Эта же задача была независимо изучена (для трехмерной решетки) Фирсовым [163] и Клинггером [164, 164a].

Необходимо подчеркнуть, что работы Холстейна и ЯК о дрейфовой подвижности полярона малого радиуса в значительной степени перекрываются. Однако первая работа прояснила различие между двумя различными способами движения полярона в форме двух основных классов переходов, соответствующих зонному движению блоховского типа и активированных фононами прыжков соответственно. Исследование Холстейна основано на простой модели одномерного полярного кристалла, которую он называет моделью кристалла — молекулы. Система состоит из избыточного электрона и линейной цепочки, составленной из N двухатомных молекул, каждая из которых имеет одну и ту же полярную структуру, описываемую «молекулярным» потенциалом $U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$, где $\mathbf{R}_n = n\mathbf{a}$ — вектор решетки n -го молекулярного узла. Колебания решетки представляют собой колебания межатомных расстояний внутри каждой молекулы x_n . Эти колебания в общем связаны, так как их частоты имеют дисперсию. Очевидно, что модель такого молекулярного кристалла по своему физическому смыслу есть линейная цепочка чередующихся положительных и отрицательных ионов. Однако эта модель имеет то математическое преимущество, что в ней используется всего один тип потенциала, а не два, как в случае положительных и отрицательных ионов.

Исходным пунктом является поляронный гамильтониан (1.1)

$$\mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{int} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + \sum_{n=1}^N U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n, x_n), \quad (13.1)$$

$$\mathcal{H}_{lat} = \sum_{n=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} + \frac{1}{2} M \omega_0^2 x_n^2 + \frac{1}{2} M \omega_1^2 x_n x_{n+1} \right), \quad (13.2)$$

в котором член $\omega_1^2 x_n x_{n+1}$ приводит к появлению дисперсии частот решетки. Волновая функция Ψ гамильтониана $\mathcal{H} =$

$= \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{int} + \mathcal{H}_{lat}$ ищется в виде суперпозиции

$$\Psi = \sum_n a_n(x_1, \dots, x_n) \varphi_n(\mathbf{r}, x_n), \quad (13.3)$$

где φ_n — локализованная волновая функция «молекулы», которая является решением уравнения

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n, x_n) \right] \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n, x_n) = E(x_n) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n, x_n). \quad (13.4)$$

Собственные значения $E(x_n)$ зависят от расстояния между ядрами

$$E(x_n) = -Ax_n + \text{const}. \quad (13.5)$$

Амплитуды a_n представляют собой функции координат смещений x_1, \dots, x_n и электронного квантового числа n , которое здесь просто определяет номер узла, так как учитывается только одно орбитальное состояние электрона, т. е. одно решение уравнения (13.4). Уравнения движения для волновых функций a_n , получающиеся из (13.1) — (13.3), имеют вид

$$i\hbar \frac{\partial a_n(x_1, \dots, x_N)}{\partial t} = [\mathcal{H}_{lat} - Ax_n] a_n + \sum_{\pm} J(x_n, x_{n\pm 1}) a_{n\pm 1}. \quad (13.6)$$

Здесь J — двухцентровый интеграл перекрытия

$$J(x_n, x_m) = \int \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n, x_n) U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n, x_n) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m, x_m) d\mathbf{r}. \quad (13.7)$$

При выводе уравнений (13.6) сделаны следующие предположения:

а) Используются такие же предположения, как и в случае сильной связи. Пренебрегается произведениями интегралов перекрытия, которые содержат волновые функции электронов, локализованных на разных узлах, а также трехцентровыми интегралами, которые содержат произведение двух волновых функций, локализованных на различных узлах, и потенциала. Так же как и в адиабатическом приближении, опускаются члены, содержащие производные от электронных волновых функций по координатам ядер. Такие члены соответствуют малому изменению кинетической энергии ядер, и, как показано Неттелом [73], они дают аддитивную постоянную добавку к полной энергии решетки, не зависящую от электрон-решеточного взаимодействия.

б) Пренебрегается поправками к энергии $E(x_n)$, которые возникают от потенциалов молекул на узлах $m \neq n$. Вследствие этого энергия электрона, локализованного на n -узле, может считаться зависящей только от x_n .

в) Зависимость $E(x_n)$ от x выбирается линейной (см. уравнение (13.5)). Для удобства постоянная выбирается равной нулю. Так как энергия $E(x_n)$ играет роль электрон-решеточного взаимодействия в модели молекулярного кристалла, то уравнение

(13.5) приводит к линейной зависимости этого взаимодействия от координат смещений x_n . Это характерная черта всех известных теорий собственных состояний полярона.

г) Двухцентровые интегралы $J(x_n, x_m)$ предполагаются отличными от нуля только для ближайших соседей, и можно пренебречь всеми $J(x_n, x_m)$ с $m \neq n \pm 1$. Поэтому J_{Δ}^m равняется резонансному интегралу для ближайших соседей R_m и $R_0 (= 0)$. Зависимостью J от x пренебрегаем *); $J_{n, n \pm 1} = -J = \text{const}$ **). Ниже, на основе модели молекулярного кристалла, характерные черты которой отражены в уравнении (13.6), мы обсудим: а) собственные состояния полярона в адиабатическом приближении и б) движение полярона на основе так называемой прыжковой теории возмущений, в которой член с J в (13.6) рассматривается как малое возмущение. В разделе В этого параграфа результат для времени жизни локализованных состояний, полученный в этом приближении, сравнивается с результатами ЯК [5а] и других авторов.

А. *Собственные состояния в адиабатическом приближении для модели молекулярного кристалла.* В адиабатическом приближении предполагается, что кинетическая энергия ионов может рассматриваться как малое возмущение, а собственные значения энергии, связанные с $a_n(x_1, \dots, x_N)$, вычисляются из (13.6). В нулевом порядке пренебрегается кинетической энергией. Тогда, если пренебречь членом взаимодействия, ответственным за дисперсию, уравнение (13.6) может быть переписано в виде

$$\left(\frac{1}{2} \sum_m M \omega_0^2 x_m^2 - A x_n \right) a_n - J(a_{n+1} + a_{n-1}) = E(x_1, \dots, x_N) a_n. \quad (13.8)$$

Взяв скалярное произведение этого уравнения с a_n и суммируя по n , найдем энергию $E(x_1, \dots, x_N)$ как параметрическую функ-

*) Ланг и Фирсов [157] показали, что учет линейных по x поправок к J приводит, например, к замене $J \rightarrow J_{\text{ef}} = J + \Delta J$, причем $\Delta J/J \sim E_b/\mathcal{E}_{\text{at}}$, где \mathcal{E}_{at} — энергия порядка атомной, получающаяся, скажем, из (13.4) при $x_n = 0$. Если $E_b/\mathcal{E}_{\text{at}} \ll 1$, то и $\Delta J/J \ll 1$. (Прим. ред.)

**) Шнакенберг [165] отказался от этого предположения и изучал собственные состояния полярона малого радиуса, учитывая зависимость резонансного интеграла $J_{n, n'}$ для $n \neq n'$ от x_n , которая появляется от $U(r - R_n, x_n)$, когда волновые функции центрированы на узлах решетки R_n . Он нашел, что такой динамический вклад в возмущение ($\sim J_{nn'}$) не приводит к какому-либо значительному изменению результатов Холстейна.

Фрелих, Мэчлап и Митра [166] указали, что для количественного сравнения с теорией наблюдаемых на эксперименте дебаевских потерь, возникающих из-за прыжковых переходов электронов в окрестности дефекта, резонансные интегралы должны вычисляться для электронов, локализованных около истинных положений ионов, а не около узлов решетки. Кроме того, резонансные интегралы для прыжкового движения в совершенном кристалле слабо зависят от x_n и x_m .

цию от координат смещений x_1, \dots, x_N . Варьируя энергию по x_n , найдем значения координат $x_1^{(0)}, \dots, x_N^{(0)}$, которые минимизируют энергию

$$x_m^{(0)} = A |a_m^{(0)}|^2 / M\omega_0^2, \quad (13.9)$$

где $a_m^{(0)}$ есть решение уравнения (13.8) при $x_n = x_n^{(0)}$ ($n = 1, \dots, N$). Это уравнение может быть записано в виде

$$\left[\frac{A}{M\omega_0^2} |a_n|^2 - \mathcal{E} \right] a_n + J(a_{n+1} + a_{n-1} - 2a_n) = 0, \quad (13.10)$$

где $a_n = a_n^{(0)}$ и энергия

$$- \mathcal{E} = E(x_1^{(0)}, \dots, x_N^{(0)}) - \frac{1}{2} \sum_m M\omega_0^2 x_m^{(0)2} + 2J. \quad (13.11)$$

Первый член в (13.11) соответствует потенциальной энергии, которая приводит к захвату электрона. Второй член описывает энергию упругой деформации, запасенную в решетке, а последний член учитывает кинетическую энергию, которая способствует делокализации электрона и расплыванию его заряда по всему кристаллу. Уравнение (13.10) — это уравнение Шредингера для «волновой функции» a_n . Потенциальная энергия \mathcal{E} содержит энергию деформации, зависящую от решения a_n . Таким образом, a_n должно быть самосогласовано с потенциальной энергией. Имеется два различных типа решений.

Первое решение — это решение зонного типа

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikn}, \quad (13.12)$$

$$\mathcal{E} = -Jk^2, \quad (13.13)$$

$$E_k(x_1^{(0)}, \dots, x_N^{(0)}) = -2J + Jk^2. \quad (13.14)$$

Членом $\frac{1}{N} \frac{A^2}{M\omega_0^2}$ можно пренебречь, так как он порядка $1/N$; $k = 2\pi k/N$, где k лежит в области $-1/2(N-1) \leq k \leq 1/2(N-1)$. Здесь N предполагается нечетным.

Второе решение — это локализованное решение, соответствующее локализованному полярону Пекара. Оно может быть найдено из (13.10), если использовать континуальное приближение модели молекулярного кристалла. Здесь это приближение состоит в том, что a_{n+1} заменяется на

$$a_{n+1} = a_n + \frac{\partial a_n}{\partial n} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 a_n}{\partial n^2}, \quad (13.15)$$

где n играет роль непрерывной координаты. Предполагается, что размер полярона много больше постоянной решетки. Континуальное приближение (13.15) приводит к следующему решению

основного уравнения (13.10):

$$a_n = \left(\frac{A^2}{8M\omega_0^2 J} \right)^{1/2} \operatorname{sch} \left[\frac{A^2}{4M\omega_0^2 J} (n - n_0) \right], \quad (13.16)$$

$$\mathcal{E} = \frac{1}{16J} \left(\frac{A^2}{M\omega_0^2} \right)^2, \quad (13.17)$$

$$E(x_1^{(0)}, \dots, x_N^{(0)}) = -2J - \frac{1}{48J} \left(\frac{A^2}{M\omega_0^2} \right)^2. \quad (13.18)$$

Здесь n_0 — постоянная интегрирования. Сравнивая наименьшую энергию решения зонного типа (13.14) с энергией (13.18), когда электрон локализован, мы видим, что энергия связанного состояния ниже энергии свободного состояния на величину

$$E_b = \frac{1}{48J} \left(\frac{A^2}{M\omega_0^2} \right)^2. \quad (13.19)$$

Это есть энергия связи локализованного полярона большого радиуса в нулевом порядке адиабатического приближения, т. е. когда пренебрегается кинетической энергией колебаний. Энергия E_b составляет одну треть от энергии \mathcal{E} (см. (13.17)), которая соответствует оптической энергии диссоциации. Разность этих двух энергий есть энергия деформации $\mathcal{E} - E_b = \frac{1}{2} \sum_m M\omega_0^2 (x_m^{(0)})^2$, тре-

буемая для того, чтобы исказить решетку. Как легко можно видеть из (13.11), (13.9) и (13.18), энергия деформации есть $2E_b$. Согласно принципу Франка — Кондона при оптической диссоциации полярона эта энергия еще сохраняется в решетке сразу после момента диссоциации, а поэтому энергия оптической диссоциации равна $3E_b$. При тепловой диссоциации полярона две трети энергии электрон-решеточного взаимодействия возвращается решетке, так что соответствующая энергия диссоциации равна E_b . Этот результат для отношения оптической и термической энергий диссоциаций связанного полярона согласуется с результатом Пекара (см. § 4). Из зависимости волновой функции χ_n (13.16) от непрерывной координаты $(n - n_0)$ следует, что линейный размер локализованного полярона большого радиуса порядка

$$L_b = a \left(\frac{4J}{A^2 / M\omega_0^2} \right), \quad (13.20)$$

где a — постоянная решетки. Таким образом, условием существования полярона большого радиуса является условие

$$2J > A^2 / 2M\omega_0^2, \quad (13.21)$$

в то время как в случае полярона малого радиуса должно выполняться условие

$$2J < A^2 / 2M\omega_0^2. \quad (13.22)$$

Ниже будет видно, что $A^2/2M\omega_0^2$ есть максимальная энергия связи полярона, которую можно получить в пределе бесконечно узких блоховских зон в жесткой решетке $J = 0$ (см. (13.48)).

Б. Прыжковый режим движения в модели молекулярного кристалла. Тот факт, что представление о поляроне малого радиуса применимо, когда ширина электронной блоховской зоны $2J$ мала по сравнению с характерной энергией $A^2/2M\omega_0^2$, привело Холстейна к теории возмущений, в которой член, пропорциональный J в основном гамильтониане (13.6), рассматривается как малый параметр. Такая теория возмущений соответствует обобщенному приближению сильной связи, использовавшемуся для нахождения зонных состояний полярона малого радиуса (что мы видели в §§ 11 и 12). Однако при высоких температурах, когда ширина зоны становится меньше неопределенности энергии зонных состояний полярона, теория Холстейна приводит к нарушению зонной картины полярона. В этом случае состояния полярона есть по существу локализованные состояния, а движение полярона есть в основном диффузионный процесс.

Исходным пунктом рассмотрения полярона малого радиуса является уравнение (13.6). Для математического удобства введем нормальные координаты, описывающие движение частиц решетки в виде стоячих волн. Эти координаты выберем в виде

$$\xi_q = \frac{2^{1/2}}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N x_n \sin\left(qn + \frac{\pi}{4}\right), \quad (13.23)$$

где $q = 2\pi k/N$, а k — целое. Используя выражение для ξ_q , уравнение (13.6) можно привести к виду

$$i\hbar \frac{\partial a_n(\xi_q)}{\partial t} = \sum_q \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \xi_q^2} + \frac{1}{2} M\omega_q^2 (\xi_q - \delta \xi_q^{(n)})^2 - \right. \\ \left. - \frac{2^{1/2}}{\sqrt{N}} A \xi_q \sin\left(qn + \frac{\pi}{4}\right) \right] a_n(\xi_q) - J(a_{n+1} + a_{n-1}). \quad (13.24)$$

Сумма в (13.24) представляет собой систему N независимых осцилляторов со смещенными положениями равновесия

$$\delta \xi_q^{(n)} = \frac{A}{M\omega_q^2} \left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \sin\left(qn + \frac{\pi}{4}\right), \quad (13.25)$$

а частоты даются дисперсионным соотношением

$$\omega_q^2 = \omega_0^2 + \omega_1^2 \cos q. \quad (13.26)$$

Волновая функция нулевого порядка находится из (13.24), когда J полагается равным нулю. Тогда собственные функции

и собственные значения равны соответственно

$$a_n(p, \{n_q\}) = \delta_{np} \chi_p(\{n_q\}) = \delta_{np} \prod_q \chi_{n_q} \left[\left(\frac{M\omega_q}{\hbar} \right)^{1/2} (\xi_q - \delta \xi_q^{(p)}) \right], \quad (13.27)$$

$$\mathcal{E}(\{n_q\}) = \sum_q \hbar \omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right) - E_b. \quad (13.28)$$

Здесь $\delta_{np} = 1$ для $n = p$ и нулю при $n \neq p$, χ_{n_q} — нормированная собственная функция гармонического осциллятора, а E_b имеет вид

$$E_b = \sum_q \frac{A^2}{2M\omega_q^2} \left(\frac{2}{N} \right) \sin^2 \left(qp + \frac{\pi}{4} \right). \quad (13.29)$$

Волновая функция $a_n(\xi_q)$, которая есть решение уравнения (13.24), может быть разложена по полному набору волновых функций нулевого порядка $a_n(p, \xi_q)$:

$$a_n(\xi_q) = \sum_{p', \{n'_q\}} C(p', \{n'_q\}) a_n(p', \{n'_q\}). \quad (13.30)$$

Величины C определяются из (13.24)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial C(p, \{n_q\})}{\partial t} &= \\ &= \sum_{p', \{n'_q\}} \langle p, \{n_q\} | V | p', \{n'_q\} \rangle C(p', \{n'_q\}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\mathcal{E}(\{n_q\}) - \mathcal{E}(\{n'_q\})] \right\}, \end{aligned} \quad (13.31)$$

где

$$\langle p, \{n_q\} | V | p', \{n'_q\} \rangle = -J \sum_{r=\pm 1} \delta_{p, p'+r} Y(p, \{n_q\}; p', \{n'_q\}), \quad (13.32)$$

с возмущением, соответствующим члену, пропорциональному J в уравнении (13.6). Здесь Y определен как интеграл перекрытия между осцилляторными функциями χ_{n_q} и $\chi_{n'_q}$, аналогично (12.1), а $\{n_q\}$ — символ, характеризующий набор фононных чисел заполнения n_{q_1}, \dots, n_{q_N} . Правая часть выражения (13.32) может быть вычислена согласно примечанию на стр. 110. В результате

$$\begin{aligned} \langle p, \{n_q\} | V | p', \{n'_q\} \rangle &= -J \sum_{r=\pm 1} \delta_{p, p'+r} \prod_q \left\{ 1 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{4}{N} \left(n'_q + \frac{1}{2} \right) \gamma_q \cos^2 \left[q \left(p' + \frac{1}{2} r \right) + \frac{\pi}{4} \right] \right\} \delta_{n_q, n'_q} - \\ &\quad - \left\{ \left(\frac{8}{N} \right)^{1/2} r \mu_q \gamma_q^{1/2} \left(\frac{n'_q + 1/2 \pm 1/2}{2} \right) \cos \left[q \left(p' + \frac{1}{2} r \right) + \frac{\pi}{4} \right] \right\} \delta_{n_q, n'_q \pm 1}, \end{aligned} \quad (13.33)$$

где

$$\gamma_q = \frac{A^2}{2M\omega_q^2 \hbar \omega_q} (1 - \cos q). \quad (13.34)$$

При вычислении были отброшены члены, соответствующие двухквантовым прыжкам $n_q \rightarrow n_q \pm 2$, так как такие процессы дают в правую часть (13.33) вклад, пропорциональный $1/N$, в то время как однофононные процессы $n_q \rightarrow n_q \pm 1$ дают вклад, пропорциональный $1/\sqrt{N}$. Множитель μ_q равняется $+1$ для положительных q и -1 для отрицательных q . Матричные элементы (13.33) могут быть подразделены на два различных типа. К первому типу относятся матричные элементы с $n'_q = n_q$, а переходы, описываемые ими, называются *диагональными* переходами. Ко второму типу относятся матричные элементы с $n'_q = n_q \pm 1$, и такие переходы называются *недиагональными*. Холстейн первый указал на различие между этими двумя типами переходов. Ниже мы обсудим физическую роль, которую играют диагональные и недиагональные переходы.

а) *Диагональные переходы*. При нулевой температуре $n_q = 0$ для всех q , и результат теории возмущений первого порядка (13.33) допускает только одноступенчатые переходы. Вероятность перехода (13.33) в этом частном случае имеет вид

$$\begin{aligned} \langle p, \{n_q = 0\} | V | p', \{n'_q = 0\} \rangle = \\ = -J \sum_{r=\pm 1} \delta_{p, p'+r} \exp\left(-\sum_q \frac{\gamma_q}{N}\right). \end{aligned} \quad (13.35)$$

Подставляя это выражение в (13.31) для $C(p) = C(p, \{n_q = 0\})$ и предполагая, что зависимость $C(p)$ от времени имеет вид $\exp(-i\mathcal{E}t/\hbar)$, получим

$$\mathcal{E}(p) = -J[C(p+1) + C(p-1)] \exp\left(-\frac{1}{N} \sum_q \gamma_q\right). \quad (13.36)$$

Это уравнение удовлетворяется функцией

$$C_k(p) = e^{ipk}, \quad (13.37)$$

$$\mathcal{E}_k = -2J \cos ke^{-S_0}, \quad (13.38)$$

где

$$S_0 = \frac{1}{N} \sum_q \gamma_q = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \gamma_q dq. \quad (13.39)$$

Используя выражение (13.30) и (13.37), получим, что волновая функция a_n есть произведение плоской волны e^{ink} на волновую

функцию решетки, описывающую систему смещенных гармонических осцилляторов, каждый из которых находится в наименьшем состоянии с $n_q = 0$

$$a_n(k, \{n_q = 0\}, \xi_q) = e^{ikn} \prod_q \chi_0 \left[\left(\frac{M\omega_0}{\hbar} \right)^{1/2} (\xi_q - \delta \xi_q^{(n)}) \right]. \quad (13.40)$$

Зонная энергия полярона в основном состоянии есть

$$E(k, \{n_q = 0\}) = \mathcal{E}(\{n_q = 0\}) - 2J \cos ke^{-S_0}, \quad (13.41)$$

а полуширина этой поляронной зоны есть

$$\Delta E_p(k, \{n_q = 0\}) = 2Je^{-S_0}. \quad (13.42)$$

Такой закон уменьшения ширины электронной зоны аналогичен результатам других авторов (см. § 11). Физический смысл S_0 очень простой: она описывает отношение поляронной энергии связи $E_b \sim A^2/4M\omega_0^2$ (см. (13.29)) к энергии оптического фотона.

При конечных температурах некоторые из n_q отличны от нуля. Тогда, пренебрегая сначала недиагональными переходами, для вероятности перехода (13.33) получим

$$\begin{aligned} & \langle p, \{n_q\} | V | p', \{n_q\} \rangle = \\ & = -J \sum_{r=\pm 1} \delta_{p, p'+r} \exp \left\{ -\frac{2}{N} \sum_q (1 + 2n_q) \gamma_q \cos^2 \left[q \left(p + \frac{1}{2} r \right) + \frac{\pi}{4} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (13.43)$$

Подставляя это выражение в (13.31) для $C(p, \{n_q\})$ и предполагая $n_q = n_{-q}$, получим решение в следующем виде:

$$C_k(p, \{n_q\}) = e^{ipk} \exp \left\{ \frac{it}{\hbar} 2J \cos ke^{-S(\{n_q\})} \right\}, \quad (13.44)$$

$$\mathcal{E}_k(\{n_q\}) = -2J \cos k \exp[-S(\{n_q\})], \quad (13.45)$$

где

$$S(\{n_q\}) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi (1 + 2n_q) \gamma_q dq. \quad (13.46)$$

При конечных температурах волновая функция a_n (13.30) и (13.37) отличается от волновой функции при $T = 0$ тем, что некоторые из смещенных осцилляторов возбуждены

$$a_n(k, \{n_q\}, \xi_q) = e^{ink} \prod_q \chi_{n_q} \left[\left(\frac{M\omega_0}{\hbar} \right)^{1/2} (\xi_q - \delta \xi_q^{(n)}) \right]. \quad (13.47)$$

Соответствующая энергия поляронной зоны

$$E(k, \{n_q\}) = \mathcal{E}(\{n_q\}) - 2J \cos k \exp[-S(\{n_q\})]. \quad (13.48)$$

Полуширина этой зоны

$$\Delta E_p(k, \{n_q\}) = 2J \exp[-S(\{n_q\})] \quad (13.49)$$

есть функция набора $\{n_q\}$ осцилляторных чисел заполнения. Мы видели, что интеграл перекрытия между волновыми функциями двух гармонических осцилляторов, равновесные положения которых несколько смещены, уменьшается с увеличением n_q . Поэтому ширина поляронной зоны уменьшается с ростом температуры.

До сих пор мы пренебрегали недиагональными переходами. Возникает вопрос: когда такое пренебрежение справедливо? Недиagonalные переходы приводят к рассеянию между зонными состояниями полярона. Энергия системы сохраняется при таких переходах. В представлении поляронной зоны вероятность переходов в единицу времени дается выражением

$$W(k, \{n_q\} \rightarrow k', \{n'_q\}) = \\ = \frac{2\pi}{\hbar} |(k, \{n_q\} | V | k', \{n'_q\})|^2 \delta[E(k, \{n_q\}) - E(k', \{n'_q\})], \quad (13.50)$$

где матричный элемент

$$(k, \{n_q\} | V | k', \{n'_q\}) = \\ = \sum_{p, p'} \exp[-i(kp - k'p')] (p, \{n_q\} | V | p', \{n'_q\}). \quad (13.51)$$

Здесь $\delta(E)$ — дельта-функция Дирака. Благодаря дисперсии фоновых частот закон сохранения энергии выполняется для большого числа различных многофононных процессов. Для сохранения энергии число поглощенных фононов должно быть сравнимым с числом испускаемых фононов. Грубо говоря, число фононов, участвующих в переходе между зонными состояниями, увеличивается с повышением температуры. При достаточно низких температурах доминируют переходы наименьшего порядка. Так как процессы с испусканием одного фонона запрещены из-за сохранения энергии, то процессом наименьшего порядка является процесс типа $k, \dots, n_{j_1}, n_{j_2} \rightarrow k', \dots, n_{j_1} - 1, n_{j_2} + 1$. Точное вычисление соответствующей вероятности перехода показывает, что она пропорциональна $n_{j_1}(1 + n_{j_2})$ и поэтому исчезает при $T \rightarrow 0$. Таким образом, при низких температурах недиагональные переходы всегда играют второстепенную роль по сравнению с диагональными, т. е. зонные состояния полярона можно рассматривать как стационарные состояния. Тогда рассеянием можно пренебречь, и это оправдывает метод вычисления зонных состояний полярона при конечных температурах, использованный Ямаши-той и Куросавой [5] и Сьювеллом [147], а именно, просто взятие теплового среднего от осцилляторного интеграла перекрытия с помощью бoльцмановского множителя (см. (12.7)). Зонные состояния полярона можно рассматривать как стационарные состояния системы в области низких температур, где среднее время жизни зонного состояния

$$\tau(k, \{n_q\}) = 1 / \sum_{k', \{n'_q\}} W(k, \{n_q\} \rightarrow k', \{n'_q\}) \quad (13.52)$$

достаточно велико, так что

$$\hbar/\tau(k, \{n_q\}) \ll \Delta E_p(k, \{n_q\}) = 2J \exp[-S(\{n_q\})]. \quad (13.53)$$

При увеличении температуры, наконец, достигается значение $T = T_t$. В дальнейшем мы будем называть T_t температурой перехода. При $T > T_t$ нарушается критерий (13.53), т. е. ширина поляронной зоны становится меньше неопределенности энергии отдельного зонного состояния. При температуре T_t роль диагональных и недиагональных переходов меняется. Ниже T_t недиагональные переходы неважны, а диагональные переходы определяют зонный характер движения полярона малого радиуса. Выше T_t движение полярона целиком определяется недиагональными переходами (диагональные переходы несущественны) между состояниями, локализованными на разных узлах. Вероятность перехода растет как t^2 (скорость перехода как t), но она еще остается малой к моменту времени $\tau(p, \{n_q\})$ — времени жизни локализованных состояний, которое определяется недиагональными переходами. Это время жизни дается *) выражением

$$\tau(p, \{n_q\}) = 1 / \sum_{p', \{n'_q\}} W(p, \{n_q\} \rightarrow p', \{n'_q\}). \quad (13.54)$$

Условие, что вероятность диагонального перехода за время $\tau(p, \{n_q\})$ мала по сравнению с единицей, соответствует критерию

$$\hbar/\tau(p, \{n_q\}) \gg 2J \exp[-S(\{n_q\})].$$

Если это условие выполняется, то недиагональные переходы определяют движение полярона малого радиуса. Переход от низкотемпературного режима зонного движения к высокотемпературному режиму прыжкового движения достаточно резкий. Он происходит в узком температурном интервале в окрестности T_t **). Причина этого в том, что при приближении к T_t время жизни зонного состояния резко уменьшается. Величина, обратная времени жизни для перехода $k, \{n_q\} \rightarrow k', \{n'_q\}$, пропорциональна произведению чисел заполнения n_q , которые изменяются из-за поглощения фононов. Тепловое среднее от всех этих n_q быстро растет с повышением температуры.

Общее определение величины T_t через тепловое среднее от ширины поляронной зоны $\Delta E_p(k, \{n_q\})$ дано ниже (см. (13.70)). Температура перехода зависит от J или зонной эффективной массы m^* . Она также зависит от полярного характера вещества

) Из работ [157—159] и работ Брыксина и Фирсова [12] следует, что, вообще говоря, $\tau^{-1} \neq W(p \rightarrow p')$. (Прим. ред.)

**) Поскольку в общем случае $\tau^{-1} \neq W(p \rightarrow p')$, то может существовать достаточно широкий температурный интервал, в котором механизм переноса уже не зонный, но и не перескоковый, а туннельный (подробнее см. гл. I и II второй части книги). (Прим. ред.)

через экспоненциальный множитель в (13.42), который содержит соответствующий параметр $S_0 = A^2/2M\hbar\omega_0^3$, равный отношению энергии связи к энергии фонона, $\hbar\omega_0$. Как можно видеть из сравнения, например, с результатом Тябликова для ширины поляронной зоны при $T = 0$, это отношение играет здесь роль Фрелиховской константы связи α в континуальном приближении.

б) *Недиагональные переходы.* При температурах $T > T_t$ для описания движения полярона существенны недиагональные переходы между локализованными состояниями. Особый интерес представляет тепловое среднее от вероятности перехода, которое определяет среднее время жизни локализованного состояния при данной температуре T . Это среднее имеет вид

$$W(p \rightarrow p', T) = \frac{1}{Z} \sum_{\{n_q\}} W(p \rightarrow p', \{n_q\}) \exp \left[- \sum_q \beta \hbar \omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (13.55)$$

где

$$Z = \sum_{\{n_q\}} \exp \left[- \beta \sum_q \hbar \omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (13.56)$$

есть фононная сумма состояний, а

$$W(p \rightarrow p', \{n_q\}) = \sum_{\{n'_q\}} W(p, \{n_q\} \rightarrow p', \{n'_q\}) \quad (13.57)$$

есть вероятность прыжкового перехода с произвольным конечным набором фоновых чисел заполнения $\{n'_q\}$. Эта вероятность есть сумма всех элементарных вероятностей переходов

$$W(p, \{n_q\} \rightarrow p', \{n'_q\}) = \frac{2}{\hbar^2} |(p, \{n_q\} | V | p', \{n'_q\})|^2 \frac{\partial}{\partial t} \Omega \left[\sum_q \hbar \omega_q (n_q - n'_q) \right], \quad (13.58)$$

где

$$\Omega(x) = \frac{1 - \cos(xt/\hbar)}{x^2/\hbar^2} \quad (13.59)$$

есть резонансная функция, появляющаяся в теории возмущений, зависящих от времени. Производная от этой функции может быть представлена в интегральной форме [167]

$$\frac{\partial}{\partial t} \Omega(x) = \frac{1}{2} \int_{-t}^{+t} \exp(ixt'/\hbar) dt'. \quad (13.60)$$

При вычислении вероятности недиагональных переходов как функции температуры Холстейн поступал следующим образом. Сначала находилась элементарная вероятность перехода (13.58) с помощью выражения (13.33) для матричных элементов. Затем, с использованием (13.60) была вычислена полная вероятность перехода (13.57) в форме временного интеграла. И наконец,

после вычисления интеграла по времени был получен следующий результат:

$$W(p \rightarrow p', T) = \frac{2tJ^2}{\hbar^2} e^{-2S_T} + \\ + \frac{J^2}{\hbar^2} e^{-2S_T} \int_{-t}^t \left\{ \exp \left[\sum_q \frac{2\gamma_q}{N} \operatorname{csch} \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_q \right) \cos \omega_q \tau \right] - 1 \right\} d\tau, \quad (13.61)$$

где S_T — тепловое среднее от $S(\{n_q\})$, определяемого с помощью (13.46),

$$S_T = \sum_q \frac{\gamma_q}{N} \operatorname{cth} \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_q \right). \quad (13.62)$$

Первый член в правой части есть диагональный вклад в скорость перехода. Он пропорционален t (вероятность перехода пропорциональна t^2), так как при этих переходах энергия точно сохраняется. Если бы интервал времени, в течение которого проявляется взаимодействие, был достаточно велик, то в конечном счете главными были бы диагональные переходы. Однако мы предполагаем, что температура T больше T_t и что вероятность недиагональных переходов много больше вероятности диагональных переходов. Раньше указывалось, что теория возмущений между зонными состояниями, дающая первый член в уравнении (13.61), становится несправедливой для времен t порядка времени жизни $\tau(p, \{n_q\})$ локализованных состояний. Это имеет место при $T > T_t$, и поэтому вкладом диагональных переходов в $W(p \rightarrow p', T)$ можно пренебречь*). Вероятность перехода тогда определяется вторым членом выражения (13.61), соответствующим недиагональным переходам. Длительность взаимодействия может быть устремлена к бесконечности; при вычислении интеграла не возникает трудностей со сходимостью интеграла. Кроме того, при высоких температурах, когда

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} 2\gamma_q \operatorname{csch} \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_q \right) dq \gg 1, \quad (13.63)$$

интеграл может быть вычислен в замкнутом виде по методу скорейшего спуска. В результате получим

$$W(p \rightarrow p \pm 1, T) = \\ = \frac{J^2}{\hbar^2} \left[2\pi^2 / \int_0^{\pi} 2\gamma_q \omega_q^2 \operatorname{csch} \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_q \right) dq \right]^{1/2} \exp \left\{ - \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} 2\gamma_q \operatorname{th} \left(\frac{1}{4} \beta \hbar \omega_q \right) dq \right\}. \quad (13.64)$$

*) По этой причине вероятность недиагональных переходов «приблизительно» дается выражением (13.55).

Эта формула существенно упрощается в пределе классического распределения фононов, когда

$$\beta \hbar \omega_q = \hbar \omega_q / k_B T \ll 1. \quad (13.65)$$

Тогда (13.64) принимает вид

$$W(p \rightarrow p \pm 1, T) = \frac{J^2}{\hbar} \left(\frac{\pi}{4k_B T E_a} \right)^{1/2} e^{-E_a/k_B T}, \quad (13.66)$$

где E_a — энергия активации прыжка:

$$E_a = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{A^2}{4M\omega_q^2} (1 - \cos q) dq. \quad (13.67)$$

Эта энергия активации по крайней мере в два раза меньше энергии, требуемой для термической диссоциации полярона

$$E_b = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{A^2}{2M\omega_q^2} dq. \quad (13.68)$$

Среднее время жизни локализованного состояния полярона есть

$$\tau^{-1}(p, T) = W(p \rightarrow p + 1, T) + W(p \rightarrow p - 1, T). \quad (13.69)$$

Температура перехода определяется через это время жизни уравнением

$$\hbar/\tau(p, T_t) = \Delta E(T_t) = 2J \exp[-S_{T_t}], \quad (13.70)$$

где S_T дается уравнением (13.62).

Это есть трансцендентное уравнение относительно T_t .

Холстейн решил его для $\gamma = S_0 = 10$ (здесь можно пренебречь дисперсией) и нашел, что для значений $\hbar\omega_0/J$, лежащих в интервале от 1 до 100, температура перехода лежит в интервале от $0,4\theta_0$ до $0,55\theta_0$, где $\theta_0 = \hbar\omega_0/k_B$ (см. также рис. 14). Для дырок в KCl Неттел [73] нашел, что значение S_0 лежит в интервале $15 < S_0 < 20$ так, что T_t составляет еще меньшую часть от θ_0 . Наконец, отметим, что условие «высоких температур» (13.63), которое, пренебрегая дисперсией, можно переписать в виде

$$2S_0 \operatorname{csch}(\hbar\omega_0/2k_B T) \gg 1, \quad (13.71)$$

справедливо для $T \gg \theta_0/4$, если S_0 порядка 10 или больше.

Среднее время жизни зонных состояний полярона определяется недиагональными переходами между зонными состояниями. Холстейн показал, что скорость перехода $W(k \rightarrow k', T)$

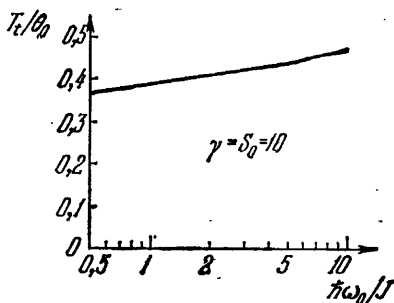


Рис. 14. Зависимость температуры T_t перехода от зонного режима к прыжковому; T_t определяется соотношением $\hbar/\tau(T_t) = 2J \exp[-S_{T_t}]$, где среднее время жизни τ полярона в зонном состоянии дается выражениями (13.72) и (13.64).

равна $\frac{2}{N} W(p \rightarrow p', T)$ и зависит только от T , а не от p, p' . Тогда среднее время жизни зонного состояния полярона равно

$$\tau^{-1}(k, T) = \sum_{k'} W(k \rightarrow k', T) = 2W(p \rightarrow p', T) = \tau^{-1}(p, T). \quad (13.72)$$

В наименьшем порядке по J времена жизни локализованных поляронных состояний и зонных состояний равны между собой. Поэтому температура T_t нарушения зонной картины полярона определяется уравнением (13.70). Если учесть диагональные переходы более высокого порядка, то результаты для температуры перехода, показанные на рис. 14, несколько изменятся (см. также § 16)*).

В. Сравнение с другими результатами для вероятности перехода между локализованными поляронными состояниями. Ямашита и Куросава [5а] вычислили прыжковую вероятность перехода между локализованными состояниями полярона, которые описываются в представлении Гайтлера — Лондона. При этом они пренебрегали дисперсией поляризационных колебаний. Выражение для вероятности перехода содержит осцилляторные интегралы перекрытия, а произведение интегралов, появляющееся при тепловом усреднении вероятности перехода, вычислялось с помощью метода Хуанга и Риса [151]. Результат для прыжковой вероятности перехода имеет вид

$$W(T) = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \exp[-2S_T(N+1)] \times \\ \times \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{2S_T[N(N+1)]^{1/2} \cos \omega_0 \tau\} d\tau. \quad (13.73)$$

Здесь M — электронный интеграл перекрытия ($=J$). Если учесть, что

$$2N+1 = \text{cth} \frac{\beta\hbar\omega_0}{2}, \quad [N(N+1)]^{1/2} = \frac{1}{2} \text{csch} \frac{\beta\hbar\omega_0}{2},$$

то вышеприведенная формула имеет почти такой же вид, как второй член в выражении, полученном Холстейном (13.61). Однако существует два отличия. По сравнению с (13.61) в (13.73) не хватает члена с -1 под знаком интеграла по τ , так как ЯК пренебрегли уменьшением полной вероятности перехода за счет диагональных переходов. Во-вторых, и что более важно, колебательный параметр перекрытия S_0 у ЯК (выражение (12.5)) в два раза больше параметра перекрытия, использованного Холстейном и определяемого выражением (13.39). Колебательный

*) Связь между T_t , температурой минимума подвижности T_{\min} и температурой T_s , при которой сравниваются два вклада в подвижность, обусловленные диагональными и недиагональными переходами, подробно обсуждаются в §§ 1, 7 гл. II второй части книги. (Прим. ред.)

интеграл перекрытия входит линейно в выражение для энергии поляронной зоны и квадратично в вероятность перехода. Следовательно, показатель экспоненты в (13.61) вдвое превышает показатель экспоненты в тепловом среднем от выражения (13.48). ЯК получили одну и ту же экспоненту, как для энергии зонных состояний, так и в вероятности перехода. При обращении к математическим деталям процедуры усреднения по Хуангу и Рису становится ясно, что результат ЯК для экспоненты в вероятности перехода правильный, а значение экспоненты в выражении для энергии зоны должно быть поделено на два.

Ряд других авторов [156—159, 165, 168, 169] вычислили дрейфовую подвижность полярона, используя метод матрицы плотности. В наинизшем порядке по J^2 результаты Холстейна и ЯК были подтверждены *).

) Рейк в низшем порядке по J получил для μ_h результат, который содержал формальную бесконечность, поскольку в формуле вида (13.61) им не была применена вычитательная процедура Холстейна. В последующей работе [13] он устранил эту бесконечность и пришел для μ_h и μ_h к результату Холстейна. Результаты работ [153—156, 164] М. И. Клингера находились в противоречии с результатами Холстейна. (Прим. ред.)

ПОДВИЖНОСТЬ ПОЛЯРОНОВ МАЛОГО РАДИУСА

§ 14. Различные теории явлений переноса
поляронами малого радиуса

Построение теории явлений переноса поляронами малого радиуса как при зонном, так и при перескоковом механизмах движения является одной из наиболее увлекательных и принципиальных задач в теории твердого тела и открывает новые возможности для применения самых разнообразных методов статистической физики.

Полуклассический метод Больцмана основан на фундаментальном кинетическом уравнении для функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{m^{**}} \mathbf{E} \nabla_{\mathbf{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c, \quad (14.1)$$

где \mathbf{E} — приложенное электрическое поле. В стационарном состоянии $\partial f / \partial t$ должна обращаться в нуль. Левая часть учитывает влияние электрического поля. Правая часть связана со столкновениями квазичастиц с решеткой и дается выражением

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = \sum_{n'} [W(n' \rightarrow n) f(n') - W(n \rightarrow n') f(n)], \quad (14.2)$$

где n означает невозмущенное собственное состояние квазичастицы, а $W(n, n')$ есть вероятность перехода в единицу времени. Частным случаем этого уравнения является уравнение (8.2) для внутризонного рассеяния поляронов фононами. Если в какой-то момент времени электрическое поле включается, то уравнение (14.2) описывает необратимый процесс приближения функции распределения f к равновесному распределению f_0 . В стационарном состоянии решение для f позволяет непосредственно вычислить электрический ток.

Ограничения, наложенные на больцмановскую теорию, следующие:

а) Взаимодействия, вызывающие переходы, должны быть очень слабы или сильно локализованы [83]. Тогда время жизни частицы в состоянии n велико по сравнению со временем взаимодействия ($\sim \hbar/k_B T$) [170]. После каждого перехода частица

«забывает», что с ней было до перехода. Это важно для марковского характера [171] уравнения Больцмана, иначе невозможно говорить о вероятностях перехода в единицу времени, вычисленных в первом порядке теории возмущений.

б) Предположение «случайности фаз» требует, чтобы матрица плотности системы была диагональной для всех времен. Это предположение удовлетворяется благодаря случайности рассеивающего потенциала.

При этих ограничениях уравнение (14.1) может описывать приближение к равновесию систем, начальное распределение которых сильно отличается от равновесного. Что касается стационарного уравнения Больцмана, то оно справедливо только для малых электрических полей. Для больших полей появляются перекрестные члены между полем и электрон-решеточным взаимодействием [171а]*). Таким образом, обычное уравнение Больцмана нельзя использовать для количественного описания полевой зависимости подвижности горячих поляронов в зонном режиме**).

Другой метод теории электрических явлений переноса основан на методе матрицы плотности. Пусть \mathcal{H} есть гамильтониан полярона в отсутствие внешнего поля; соответствующими собственными состояниями полного гамильтониана полярона являются функции $\psi_p(\mathbf{r})$

$$\mathcal{H}_T = \mathcal{H} + \mathcal{H}_E. \quad (14.3)$$

Собственные функции \mathcal{H}_T даются выражениями

$$\psi^i(\mathbf{r}, t) = \sum_p c_p^i(t) \psi_p(\mathbf{r}). \quad (14.4)$$

Эрмитова матрица

$$(\rho_T)_{pq} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n c_p^i(t) c_q^{i*}(t) \quad (14.5)$$

есть матрица плотности; n — число подвижных поляронов. Ожидаемое значение эрмитова оператора A есть

$$\langle A(t) \rangle = \text{Sp} \{ \rho_T(t) A \}. \quad (14.6)$$

Уравнение движения для матрицы плотности имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \rho_T}{\partial t} = [\mathcal{H}_T, \rho_T], \quad (14.7)$$

где ρ_T состоит из равновесной части $\rho \sim \exp(-\beta\mathcal{H})$ и возмущенной $\rho_E \sim E$. Уравнение (14.7) и его решение в случае блоховского электрона, взаимодействующего с примесями, обсуждалось

*) Бардин и Шокли [171а] показали, что выражения для вероятностей переходов при рассеянии на примесях или фононах не зависят от приложенного электрического поля.

**) Вопрос о выходе за рамки кинетического уравнения при сильных электрических полях обсуждается во II части книги в гл. IV. (Прим. ред.)

детально Коном и Латтинджером [83]. Было показано, что в случае, когда условия а) и б) выполнены, из уравнения (14.7) следует уравнение Больцмана. Фридман [169] применил метод матрицы плотности к задаче о поляроне малого радиуса, описываемого гамильтонианом Холстейна и получил важный результат: зонная и прыжковая подвижности аддитивны *).

Третий метод — это метод функции отклика Кубо [103]. В этом методе электропроводность вычисляется без точного решения уравнения Больцмана для функции распределения или уравнения для матрицы плотности. Вместо этого электропроводность получается из фурье-преобразования функции линейного отклика $\phi_{ij}(t - t')$, которая определяет электрический ток $\Delta j_i(t)$, возникающий в направлении x_i в момент времени t при приложении импульсов слабого электрического поля $E_j(t') dt'$ в направлении x_j в моменты времени t' , лежащие в интервале от $-\infty$ до t . Функция отклика определяется как

$$\Delta j_i(t) = \int_{-\infty}^t \phi_{ij}(t - t') E_j(t') dt'. \quad (14.8)$$

Если электрическое поле зависит от времени как $\exp(i\omega t)$, то электропроводность есть

$$\sigma_{ij}(\omega) = \int_{-\infty}^0 \phi_{ij}(t') e^{i\omega t'} dt'. \quad (14.9)$$

Показано, что вычисление функции линейного отклика сводится к вычислению комплексной корреляционной функции токов

$$\phi_{ij}(t) = \int_0^{\beta} \langle j_i(-i\hbar\lambda) j_j(t) \rangle d\lambda, \quad (14.10)$$

где $\langle A \rangle$ означает ожидаемое значение оператора A и дается выражением (14.6), в котором ρ заменено оператором матрицы плотности по Гиббсу

$$\rho = e^{-\beta \mathcal{H}} / \text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}}). \quad (14.11)$$

Без конкретного вычисления ожидаемого значения корреляционной функции токов можно доказать ряд важных общих соотношений, таких, как флуктуационно-диссипационная теорема, соотношение Крамерса — Кронига между вещественной и мнимой частями $\sigma_{ij}(\omega)$ [103]. Однако при реальном вычислении электропроводности для системы поляронов малого радиуса, соглас-

) Впервые этот факт был установлен И. Г. Ланг и Ю. А. Фирсовым [157], которые доказали, что устранение расходящихся в разложении формулы Кубо (по степеням $1/s$) приводит к появлению двух вкладов, которые назывались: один холстейновским $\sigma_H = \rho \langle j_i j_j \rangle$, а другой болцмановским $\sigma_B = \rho \langle j_i j_j \rangle$. Этот факт отмечался и в [14]. (Прим. ред.)

но (14.9), делаются предположения, соответствующие предположениям теории Больцмана. Так, ряд авторов [153—159, 165, 168] при вычислении прыжковой проводимости из формулы Кубо (14.9) рассматривали член в гамильтониане, содержащий резонансный интеграл J , как малое возмущение. Это предположение соответствует условию а). Тем не менее систематическое исследование по теории возмущений корреляционной функции токов дает критерий справедливости формулы для проводимости в случае прыжкового движения, полученной на основе теории явлений переноса Больцмана. Кроме того, Кудинов и Фирсов [159], исходя из формулы Кубо, получили уравнение для условной вероятности $P(n', n; t)$ нахождения полярона на узле R_n в момент времени t , если он в момент времени $t = 0$ находится на узле R_n . Это уравнение сводится к уравнению вида (14.2), если процесс случайных блужданий полярона имеет марковский характер, т. е. если время между прыжками много больше времени релаксации ионов решетки $1/\omega_0^*$.

§ 15. Дрейфовая подвижность на основе обычной теории явлений переноса

А. Метод уравнения Больцмана. В отсутствие внешних полей уравнение Больцмана имеет вид (14.2). Это уравнение справедливо для обычных полупроводников, в которых ширина зоны $\Delta E \sim 1$ эв, если

$$\hbar/\tau \ll k_B T. \quad (15.1)$$

Подвижность $\mu = e\tau/m^{**}$, и тогда соотношение (15.1) принимает вид

$$\mu \gg 134 \frac{m_0}{m^{**}} \frac{100}{T} \text{ (см}^2/\text{в} \cdot \text{сек)}. \quad (15.2)$$

Когда ширина зоны полярона малого радиуса $\Delta E(T)$ становится меньше $k_B T$, а время жизни полярона в зонном состоянии удовлетворяет условию (13.53), или, что то же самое,

$$\hbar/\tau \ll \Delta E(T). \quad (15.3)$$

*) В [159] на основе метода матрицы плотности построена теория немарковских случайных блужданий носителей тока по узлам решетки при произвольной силе их взаимодействия с рассеивателями. При этом ширина зоны квазичастиц предполагалась узкой. В частном случае поляронов малого радиуса при не слишком малых значениях $\Delta\omega/\omega_0$ блуждание по узлам носит марковский характер, а условие узости зон принимает вид

$$2J/k_B T e^{-S_T} \ll 1$$

и накладывает самое слабое ограничение на величину J .

Впоследствии [15*] Кудинов и Фирсов обобщили результаты работы [159] на случай произвольных ширин зон для квазичастиц и предложили стохастическую интерпретацию явлений переноса в самом общем случае (см. гл. I второй части книги.) (Прим. ред.)

Время жизни и подвижность связаны следующим соотношением *)

$$\mu = \frac{1}{2} \frac{e\tau}{k_B T} \left[\frac{a^2 \Delta E^2(T)}{\hbar^2} \right]^{**}). \quad (15.4)$$

В модели молекулярного кристалла время жизни зонного состояния в пределе малых J дается выражением (13.72). Вышеприведенное выражение для μ совместно с (15.3) приводит к следующему условию:

$$\mu \gg \frac{ea^2}{2\hbar} \frac{\Delta E(T)}{k_B T} \simeq \frac{1}{2} \frac{\Delta E(T)}{k_B T} \quad (см^2/в \cdot сек), \quad (15.5)$$

где $a = 3 \cdot 10^{-8}$ см соответствует приблизительно расстоянию между катионами в щелочно-галогидных кристаллах.

Прыжковая проводимость малых поляронов также может быть описана с помощью уравнения Больцмана (14.2) при условии, что взаимодействие между двумя состояниями, центрированными около соседних ионов, мало, так что член, пропорциональный J в (13.24) может рассматриваться как возмущение. Тогда время жизни в локализованном состоянии удовлетворяет условию [159]

$$\frac{\hbar}{\tau} \ll (E_a k_B T)^{1/2}, \quad (15.6)$$

где E_a — энергия активации прыжка. Существует хорошо определенная вероятность $W(n \rightarrow n')$, которая в модели молекулярного кристалла не зависит от n, n' . Поэтому среднее время жизни легко найти как $\tau = (2W)^{-1}$, а коэффициент диффузии $D = a^2 W^{***}$). Для невырожденной системы поляронов малого радиуса подвижность и коэффициент диффузии связаны соотношением Эйнштейна

$$\mu = eD/k_B T. \quad (15.7)$$

*) Фрелих и Сьювелл [172] также получили это уравнение. Они исходили из общего выражения для изотропной проводимости

$$\sigma = - e^2/\hbar^2 \int (\partial E/\partial k_x)^2 \tau(k) \partial f_0/\partial E dk,$$

где f_0 — функция распределения Максвелла — Больцмана. В случае узкой зоны предположим, что $\tau(k)$ есть константа, равная τ . Кроме того, заметим скорость $v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_x}$ на ее максимальное значение $v_{\max} = a \Delta E/\hbar$. Тогда $\sigma \sim (e\tau/k_B T) (\Delta E^2 a^2/\hbar^2)$.

**) В трехмерном случае в (15.4) появится дополнительный малый множитель $\sim 10^{-1} \div 10^{-2}$. Например, для простого кубического кристалла вместо $(\Delta E)^2$ в (15.4) следует подставить $(\Delta E/z)^2$, где z — число ближайших соседей ($z = 6$). Подробнее см. § 6 гл. II во второй части книги. (Прим. ред.)

***) Для трехмерной решетки $D = ga^2 W$, где g — численный множитель порядка 1, который зависит от структуры кристалла [173].

Условие (15.6) тогда принимает вид

$$\mu \ll \frac{ea^2}{2\hbar} \left(\frac{E_a}{k_B T} \right)^{1/2}. \quad (15.8)$$

При температурах $T > T_t$ прыжковая подвижность поляронов малого радиуса имеет вид

$$\begin{aligned} \mu_h &= \frac{ea^2 W}{k_B T} = \\ &= \frac{ea^2}{k_B T} \frac{J^2}{\hbar^2 \omega_0} \left[\frac{\pi}{\gamma \operatorname{csch} 1/4 \beta \hbar \omega_0} \right]^{1/2} \exp[-2\gamma \operatorname{th} 1/4 \beta \hbar \omega_0]. \end{aligned} \quad (15.9)$$

Этот результат следует из уравнения (15.7) и (13.64) при $\omega_q = \omega_0$, т. е. в пренебрежении дисперсией оптических фононов.

При температурах $T < T_t$ подвижность в случае зонной проводимости поляронов малого радиуса также может быть выражена через коэффициент диффузии с помощью соотношения (15.7); D имеет вид

$$D = \langle v^2(k, T) \tau(k, T) \rangle_{Av}, \quad (15.10)$$

где

$$v(k, T) = \frac{a}{\hbar} \frac{\partial E(k, T)}{\partial k} = \frac{2J}{\hbar} \sin ke^{-ST}. \quad (15.11)$$

Ожидаемое значение скорости $v(k, T)$ определяется как производная по k от поляронной энергии $E(k, \{n_q\})$, определяемой уравнением (13.48). Усреднение в (15.10) проводится по тепловому распределению в k -пространстве

$$\langle \dots \rangle_{Av} = \int_0^\pi \dots f(k) dk / \pi \int_0^\pi f(k) dk,$$

где $f(k)$ — функция распределения скоростей Максвелла — Больцмана для одной трансляционной степени свободы. Так как ширина поляронной зоны очень мала (см. уравнение (13.42) для $T = 0$), то можно предположить, что зонные состояния заняты с одинаковой вероятностью $f(k) = \text{const}$. Тогда для подвижности, используя (13.70) и (15.11), получим

$$\begin{aligned} \mu_b &= \frac{e}{k_B T} \frac{2J^2 a^2 e^{-2ST}}{\hbar^2} \tau(k, T) = \\ &= \frac{ea^2 \omega_0}{k_B T} \left[\frac{\gamma \operatorname{csch} 1/4 \beta \hbar \omega_0}{\pi} \right]^{1/2} \exp\left(-2\gamma \operatorname{csch} \frac{\beta \hbar \omega_0}{2}\right). \end{aligned} \quad (15.12)$$

Вследствие (13.63) этот результат справедлив при температурах $T \leq \theta_0/4$. Так как τ , и e^{-2ST} уменьшаются с увеличением температуры, то μ_b значительно слабее зависит от температуры,

чем μ_h . Однако их температурные зависимости работают в противоположные стороны. Температурные зависимости прыжковой подвижности и зонной подвижности построены на рис. 15 для случая $\gamma = S_0 = 10, J = \hbar\omega_0$.

Б. Метод матрицы плотности. Фридман [169] на основе уравнения движения матрицы плотности (14.7) для одного избыточного электрона, взаимодействующего с колебаниями решетки, вычислил подвижность полярона малого радиуса в модели Холстейна. Гамильтониан \mathcal{H} в (14.7) имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V, \quad (15.13)$$

где \mathcal{H}_0 получается из (13.24), если положить $J = 0$. Собственные функции $a_n(p, \{n_q\})$ и собственные значения $\mathcal{E}(\{n_q\})$ в узельном представлении даются уравнениями (13.27) и (13.28) соответственно. Матричные элементы возмущения $V \sim J$ между этими состояниями определяются уравнением (13.23). Для малых полей E нас интересует линейный отклик системы; тогда матрицу плотности можно представить в виде

$$\rho_T = \rho + \rho_E, \quad (15.14)$$

где ρ — равновесная матрица плотности (14.11) с $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$, ρ_E — неравновесная добавка, линейная по электрическому полю.

Используя (15.14), получим уравнение движения для ρ_T

$$i\hbar \frac{\partial \rho(p', \{n'_q\}; p, \{n_q\})}{\partial t} = [\mathcal{E}(\{n'_q\}) - \mathcal{E}(\{n_q\})] \rho(p', \{n'_q\}; p, \{n_q\}) + \\ + \sum_{p'', \{n''_q\}} [(p', \{n'_q\} | V | p'', \{n''_q\}) \rho(p', \{n'_q\}; p'', \{n''_q\}) - \\ - \rho(p', \{n'_q\}; p'', \{n''_q\}) (p'', \{n''_q\} | V | p, \{n_q\})] \quad (15.15)$$

и

$$i\hbar \frac{\partial \rho_E(p', \{n'_q\}; p, \{n_q\})}{\partial t} = eE(p' - p) \rho(p', \{n'_q\}; p, \{n_q\}) + \\ + [\mathcal{E}(\{n'_q\}) - \mathcal{E}(\{n_q\})] \rho_E(p', \{n'_q\}; p, \{n_q\}) + \\ + \sum_{p'', \{n''_q\}} [(p', \{n'_q\} | V | p'', \{n''_q\}) \rho_E(p'', \{n''_q\}; p, \{n_q\}) - \\ - \rho_E(p', \{n'_q\}; p'', \{n''_q\}) (p'', \{n''_q\} | V | p, \{n_q\})]. \quad (15.16)$$

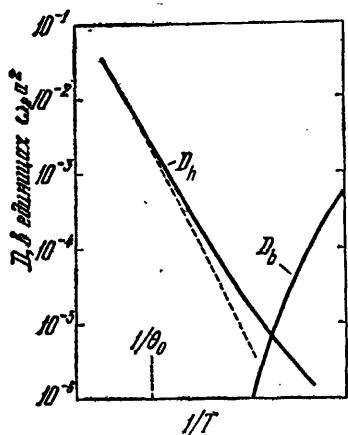


Рис. 15. Зависимость постоянной диффузии полярона $D/\omega_0 a^2$ от температуры. Сплошные кривые, обозначенные через D_b и D_h , соответствуют вкладу от зонного движения полярона и от случайных прыжков соответственно. Штриховая кривая соответствует классическому приближению в D_h [6].

Нахождение решений этих двух уравнений представляет собой центральную математическую проблему метода матрицы плотности. Решение для матричных элементов ρ_E зависит от решения для матричных элементов ρ первого уравнения. В наинизшем порядке по J с помощью обычной методики можно получить уравнение Больцмана из (15.15) и (15.16) [83]. Сначала представим (15.16) в виде двух связанных уравнений для диагональных и недиагональных матричных элементов $\rho_E(p, \{n_q\}; p, \{n_q\})$ и $\rho_E(p, \{n_q\}; p' \{n'_q\})$ соответственно. Недиagonalные элементы разложим по степеням J , а затем исключим из уравнения для диагональных элементов. Это уравнение становится уравнением Больцмана наинизшего порядка для величины

$$\rho_E(p, \{n_q\}; p, \{n_q\}).$$

Его решение определяет диагональную часть ожидаемого значения скорости

$$v_d = \sum_{p, p', \{n_q\}} (p, \{n_q\} | v_{op} | p', \{n'_q\}) \rho_E(p, \{n_q\}; p', \{n'_q\}), \quad (15.17)$$

где

$$v_{op} = \frac{dn}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_T, n]. \quad (15.18)$$

Диагональный член v_d с точностью до множителя E равняется зонному вкладу в подвижность μ_b . Конечный результат Фридмана для μ_b , полученный с помощью уравнения Больцмана наинизшего порядка для диагональных элементов ρ_E , согласуется с результатом Холстейна (15.12). Ожидаемое значение от недиагонального члена в операторе скорости v_{nd} определяет прыжковый вклад в подвижность μ_h . В наинизшем порядке по J^* недиагональные элементы ρ_E выражаются из уравнения (15.15) через диагональные матричные элементы $\rho_E(p, \{n_q\}; p \{n_q\})$. Результат для μ_h совпадает с выражением (15.11).

Основной результат работы Фридмана в том, что в наинизшем порядке по J подвижность полярона малого радиуса **)

$$\mu = \mu_b + \mu_h. \quad (15.19)$$

Подвижность состоит из двух аддитивных членов: зонного члена, соответствующего блоховскому механизму, когда рассеяние на

*) В работе [12a] метод Кона — Латтинжера применяется для анализа члена любого порядка по J . При этом была установлена прямая связь отдельных членов разложения (возникающих при итерациях) с графиками по технике Е. К. Кудинова и Ю. А. Фирсова [159] и продемонстрировано совпадение с результатами И. Г. Ланг и Ю. А. Фирсова [157]. (Прим. ред.)

**) В [157—159] показано, что такое разбиение справедливо не только при малых J . См. также прим. ред. на стр. 136. (Прим. ред.)

фонах определяет время жизни зонных состояний, и прыжкового члена, когда фононы играют роль активирующей системы, аналогичную роли, играемой ими в явлениях электронного захвата.

В. Адиабатические или неадиабатические прыжковые переходы. Формула (15.19) для прыжковой проводимости поляронов малого радиуса была получена при двух главных предположениях:

а) Основное предположение, лежащее в основе теории поляронов малого радиуса, $2J < E_b$, где $E_b \sim A^2/2M\omega_0^2 = S_0\hbar\omega_0$ — энергия связи полярона.

б) Дополнительное предположение, что резонансный интеграл J должен быть настолько мал, чтобы прыжковую проводимость можно было найти в низшем порядке по J теории возмущений (как будет видно ниже, для этого J должен быть меньше $[\hbar\omega_0(E_a k_B T)^{1/2}]^{1/2}$).

Метод теории возмущений по J имеет смысл использовать лишь при $2J < E_b$ (условие малости радиуса полярона). Для того чтобы найти верхний предел по J , ниже которого можно ограничиться низшими порядками теории возмущений, Холстейн и ЯК рассмотрели прыжковую проводимость в области классических температур $k_B T \gg \hbar\omega_0$. Задача решается, исходя из выражений для потенциальных энергий $E^{(p)}(x_1, \dots, x_N)$, которые являются собственными значениями адиабатического уравнения (13.6), в которое включены дисперсионные члены потенциальной энергии решетки. Во втором порядке теории возмущений (по J) собственные значения этого адиабатического уравнения есть

$$E^{(p)}(x_1, \dots, x_N) = V_{\text{lat}}(x_1, \dots, x_N) - Ax_p - \frac{J^2}{A} [(x_p - x_{p+1})^{-1} + (x_p - x_{p-1})^{-1}], \quad (15.20)$$

где V_{lat} — потенциальная энергия решетки. В общем $|x_p - x_{p+1}| \sim \sim A/M\omega_0^2$, ибо из адиабатического уравнения (13.6) легко видеть, что собственные значения энергии минимизируются равновесными смещениями $x_p = A/M\omega_0^2$ и $x_{n \neq p} = 0$. Поэтому третий член в (15.20) в действительности является малым возмущением в силу условия существования полярона малого радиуса $J \ll A^2/M\omega_0^2$. В частном же случае, когда $|x_p - x_{p+1}| < J/A$, т. е. в окрестности точек пересечения кривых потенциальной энергии $E^{(p)}$ и $E^{(p+1)}$, вышеприведенное выражение для возмущения неприменимо. Для $x_p = x_{p+1}$ невозмущенные состояния a_p, a_{p+1} вырождены, так что энергию можно найти из системы двух уравнений

$$\begin{aligned} E(x_1, \dots, x_N) a_p &= (V_{\text{lat}} - Ax_p) a_p - Ja_{p+1}, \\ E(x_1, \dots, x_N) a_{p+1} &= (V_{\text{lat}} - Ax_{p+1}) a_{p+1} - Ja_p, \end{aligned} \quad (15.21)$$

собственные значения которой находятся из решения секулярного определителя второго порядка. Результаты для адиабатических энергий, обозначенных как $E_{(+)}$ и $E_{(-)}$, показаны на рис. 16. Пересечение невозмущенных энергий $E_{(p)}$ и $E_{(p+1)}$ устраняется из-за наличия зацепления по J в (15.21).

Существуют две возможности для прыжка из состояния p в $p+1$. Первая возможность, когда система остается на более низкой адиабатической кривой потенциальной энергии $E_{(-)}$ при своем движении слева направо. В этом случае движение электрона следует адиабатически за движением ионов. Волновая функция электрона зависит параметрически от координат x_i ($i = 1, \dots, N$). В точке пересечения термов имеет место резкое изменение функции Ψ , определенной согласно (13.3), за счет перехода из состояния типа ϕ_m в состояние типа ϕ_{m+1} . Если резонансный интеграл J очень мал, то электрон не может следовать за такими резкими изменениями в колебательной системе. Однако имеется другая возможность; при движении слева направо система «скачком» переходит с кривой $E_{(-)}$ на кривую $E_{(+)}$ и затем движется в «гору». В конце концов она повернет, пойдет под «гору» по кривой $E_{(+)}$ и достигнет точки пересечения справа. Около точки пересечения она может либо перепрыгнуть на более низкую кривую $E_{(-)}$ и двигаться к начальной конфигурации, либо может остаться на кривой $E_{(+)}$, пойти в «гору», повернуть и приблизиться к точке пересечения слева. Суммируя все такие возможности и используя для вероятности простого неадиабатического перехода между $E_{(+)}$ и $E_{(-)}$ формулу, полученную Зинером [174], Холстейн получил заново выражение (13.66 для вероятности прыжкового перехода при высоких температурах *). Критерием адиабатичности перехода является условие, что вероятность перехода системы из $E_{(-)}$ в $E_{(+)}$ мала. Этот критерий имеет вид **)

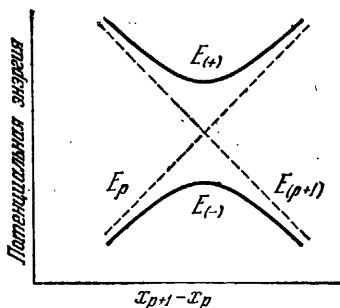


Рис. 16. Кривые потенциальной энергии для двухузельной системы [6]

$$J > E_a^{1/4} (2k_B T / \pi)^{1/4} (\hbar \omega_0 / \pi)^{1/2}. \quad (15.22)$$

) При рассмотрении этого вопроса Холстейн [6] предполагает наличие всего лишь одной колебательной степени свободы. Строгое вычисление вероятности перескока для реального случая с бесконечно большим числом колебательных степеней свободы проведено в работах [16, 17*] И. Г. Ланг и Ю. А. Фирсова (см. также приложение 7 второй части). (Прим. ред.)

**) Если поделить обе части неравенства (15.22) на $(k_B T E_a \hbar \omega_0)^{1/2}$, получим

$$\eta_2^{1/2} = \left[\frac{J^2}{(E_a k_B T)^{1/2} \hbar \omega_0} \right]^{1/2} > \left(\frac{2}{\pi^3} \right)^{1/4}.$$

Это и есть условие применимости адиабатического приближения. Критерий

Так как энергия активации прыжка $E_a > \hbar\omega_0$, то условие

$$\pi J > \hbar\omega_0 \quad (15.23)$$

также выполняется *). Это есть условие того, что время перестройки колебательной системы $\sim 1/\omega_0$ должно быть велико по сравнению со временем, необходимым для того, чтобы волновая функция успела принять свое стационарное значение, соответствующее новым положениям ионов, \hbar/J .

При высоких температурах вероятность прыжкового перехода имеет вид

$$W(p \rightarrow p+1) = W_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right), \quad (15.24)$$

где

$$W_0 = \begin{cases} \left(\frac{\pi}{4k_B T E_a}\right)^{1/2} \frac{J^2}{\hbar} & \text{для неадиабатических переходов,} \\ \frac{\omega_0}{2\pi} & \text{для адиабатических переходов.} \end{cases} \quad (15.25)$$

Таким образом, можно ожидать изотопического эффекта для надбарьерных адиабатических переходов, когда подвижность $\mu \sim M^{-1/2}$ [175].

Г. *Влияние магнитного упорядочения на прыжковую подвижность.* В некоторых веществах, к которым могла бы быть применима концепция локализованного полярона малого радиуса (т. е. в них $2J < E_b$), существует магнитоупорядоченное состояние. Характерным примером этого является антиферромагнитный NiO с температурой Нееля 520°K. Взаимодействие между спином избыточного электрона или дыркой и спинами ионов влияет на собственные состояния электронов и переходы между ними. В случае стехиометрического Fe₃O₄ Хаубенрайссер [176, 177] провел количественное обсуждение прыжковых переходов между ионами Fe²⁺ и Fe³⁺, предположив, что перенос спина электроном, активированным фононами, самосогласован с магнитным взаимодействием между ионами. Например, переход элек-

применимости теории возмущений по J при $k_B T > \hbar\omega_0/2$ имеет вид $\eta_2 < 1$. Строгое рассмотрение, проделанное в [157—159, 12*, 14*—18*], подтвердило, что параметр η_2 — это один из основных безразмерных параметров в теории поляронов малого радиуса. От его численных значений сильно зависят многие наблюдаемые величины. Другим важным безразмерным параметром теории при $k_B T > \hbar\omega_0/2$ является $\eta_3 = J^2/E_a k_B T$.

При $\eta_3 > 1$ уже нельзя ограничиться перескоками только между ближайшими соседями (подробнее см. § 2 гл. II во второй части) и выражение для подвижности должно приобретать иной вид. Условие $2J < E_b$ можно записать в виде $2J/E_b \approx J/E_a = \eta_1 < 1$. Малость безразмерного параметра η_1 гарантирует малость радиуса полярона. (*Прим. ред.*)

*) Условие (15.23) приводит к ограничению на величину J снизу и, казалось бы, не позволяет исследовать описанным выше методом случай $\eta_2 \rightarrow 0$. Однако из строгой микроскопической теории следует, что это не так. (*Прим. ред.*)

трона между ионами Fe^{2+} и Fe^{3+} с параллельными спинами может рассматриваться как двойной обменный процесс, активированный фононами [178]. Вероятность зинеровского перехода для электрона имеет вид (15.25), в котором, однако, резонансный интеграл умножен на $\Omega_{nn'}$, что учитывает корреляцию между спиновыми конфигурациями ионов, когда электрон находится в состоянии n и n' соответственно.

Мы обсудим здесь на полуэмпирической основе [179, 180] влияние магнитного упорядочения на прыжковую вероятность перехода. Прыжковый переход между соседними катионами n и n' сопровождается переносом спина, а так как возмущение, вызывающее переход, не зависит от спина, то носитель не изменяет своего спина при переходе. Тогда вероятность перехода уменьшается на множитель

$$\Omega_{nn'} = \frac{1}{2} [1 + \langle \bar{v}_{nn'} \mathbf{s}_n \mathbf{s}_{n'} \rangle], \quad (15.26)$$

где $\bar{v}_{nn'}$ есть среднее значение зависящей от времени парной корреляционной функции для спинов ионов \mathbf{s}_n и $\mathbf{s}_{n'}$

$$v_{nn'}(t) = \langle \mathbf{s}_n(0) \mathbf{s}_{n'}(t) \rangle, \quad (15.27)$$

определенной согласно Ван Хову [181], для системы спинов, описываемой гейзенберговским гамильтонианом. Угловые скобки означают усреднение по каноническому распределению, а \mathcal{H} — гамильтониан спинов ионов. Если два соседних катиона n и n' имеют противоположные спины, то $\Omega_{nn'} = 0$. В общем случае спины ионов не будут антипараллельными по двум причинам: а) из-за локального искажения основного состояния спинов, связанного с дополнительным спином носителя тока на узле n , б) из-за тепловых флуктуаций относительной ориентации направлений спинов ионов. Локальное искажение спинов, обусловленное дыркой на узле n может быть вычислено с помощью теории Де Жена [182]. Найдено, что в случае NiO это искажение, так же как и его влияние на энергию связи полярона, пренебрежимо мало. Резонансный интеграл J настолько мал, что увеличение энергии связи вследствие образования искаженной структуры спинов в окрестности n -го узла плюс одновременное увеличение энергии сверхобмена минимизируется искажением углов порядка нескольких градусов. Поэтому при температурах $T > T_i$, когда состояния полярона малого радиуса локализованы на катионных узлах, Ω определяется *тепловыми флуктуациями* относительной ориентации спинов ионов \mathbf{s}_n и $\mathbf{s}_{n'}$. Соответствующая парная корреляционная функция спинов $v_{nn'}(t)$ пропорциональна $\cos \theta_{nn'}$, где $\theta_{nn'}$ — угол между $\mathbf{s}_n(0)$ и $\mathbf{s}_{n'}(t)$. Предположим, что эта флуктуация не меняется в присутствии избыточного электрона (или дырки). Первоначально электрон находится на n -м узле, где он проводит среднее время τ , которое есть среднее время

жизни. В течение этого времени ориентация спинов флуктуирует, а соответствующее среднее значение относительной ориентации спинов s_n и $s_{n'}$ может быть определено как

$$\bar{v}_{nn'} = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} v_{nn'}(t) dt. \quad (15.28)$$

Временная зависимость парной корреляционной функции спинов $v_{nn'}(t)$ неизвестна точно. Удовлетворительную оценку для $\bar{v}_{nn'}$ можно получить, учтя, что время релаксации корреляции (15.27) много меньше, чем среднее время, которое электрон проводит на катионном узле, $t_0 \ll \tau$. Для времен $t \gg t_0$ два спина ионов $s_n(0)$ и $s_{n'}(t)$ статистически независимы, т. е. корреляция имеет вид

$$v_{nn'}(t) = \langle s_n \rangle \langle s_{n'} \rangle, \quad (15.29)$$

где $\langle s_n \rangle$ — средний вектор спина на ионе при температуре T . Выше температуры Нееля T_N имеем $\langle s_n \rangle = 0$, а ниже T_N имеем $\langle s_n \rangle = I_1(T)$ — намагниченность подрешетки. Так как прыжковые переходы происходят между катионами, принадлежащими подрешеткам с противоположными спинами, то из (15.26) и (15.29) следует, что

$$\Omega = \frac{1}{2} [1 - M^2(T)/M^2(0)]. \quad (15.30)$$

Это выражение несколько отличается от выражения, полученного Хайксом [179], который впервые предположил, что Ω зависит только от $M(T)$. Результат (15.30) правилен только в том случае, если выполнено основное предположение $t_0 \ll \tau$, как это имеет место в NiO [180].

§ 16. Дрейфовая подвижность, полученная на основе формулы Кубо

В теориях, рассмотренных в предыдущих частях, подвижность поляронов малого радиуса была получена в низшем порядке по J на основе уравнения Больцмана. Возникает вопрос: какие специфические особенности появляются в более высоких порядках по J и каковы условия справедливости результатов, полученных в наименьшем порядке? В классическом пределе $k_B T \gg \hbar \omega_0$ при вычислении вероятности неадиабатических прыжковых переходов Холстейн нашел, что условие справедливости результатов теории возмущений имеет вид (15.22). Систематическое рассмотрение по теории возмущений подвижности поляронов малого радиуса, проведенное Ланг и Фирсовым [157, 158], подтвердило этот результат, а кроме того, показало, что необходимо учитывать вклад более высокого порядка по J в рассеяние между зонными состояниями полярона. В действительности этот

вклад более высокого порядка по J может быть велик по сравнению с вкладом наименьшего порядка по J , что ограничивает время жизни зонных состояний согласно выражению (13.72). Клиндер [155] исследовал задачу о подвижности полярона малого радиуса, используя метод ван Хова [183]. Он получил результаты, аналогичные как результатам Холстейна, так и Ланг и Фирсова для температурной зависимости подвижности; в частности, он получил активационную температурную зависимость прыжковой подвижности μ_h). По Клиндеру критерий справедливости результата теории возмущений для μ_h имеет вид

$$\hbar\omega_0 \gg \hbar/\tau \gg \Delta E(T),$$

где τ — время жизни локализованного полярона. Критерий Холстейна

$$\hbar\omega_0 > \pi J^2 / (2\pi^{-1} E_a k_B T)^{1/2} \approx (\hbar/\tau) \exp(E_a/k_B T)$$

более жесткий и согласуется с критерием Ланг и Фирсова.

Для вычисления проводимости поляронов малого радиуса ряд теории возмущений для корреляционной функции токов в формуле Кубо расписывается в форме двух разных классов диаграмм для диагональных и недиагональных переходов. Для того чтобы было возможно различить эти переходы в диаграммном разложении, проводится преобразование гамильтониана полярона малого радиуса **). Каноническое преобразование приводит к гамильтониану $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$, где \mathcal{H}_0 включает энергию полярона и энергию осцилляторов решетки

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_{\text{pol}} + \mathcal{H}_{\text{ph}} = \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left(b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right). \quad (16.1)$$

Энергия полярона $E(\mathbf{k})$ имеет вид (12.44) и дается следующим выражением:

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - E_b + \sum_{\mathbf{g}} J(\mathbf{g}) \exp(-S_T(\mathbf{g})) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{g}), \quad (16.2)$$

) Активационная зависимость подвижности получена в [153—156] неправильно. Формула (9) для подвижности в [153] противоречит соотношению Эйнштейна, поскольку в ней вместо квадрата расстояния между соседними узлами (т. е. квадрата длины, на которую происходит перескок) стоит квадрат радиуса Бора для волновой функции, локализованной в одном узле (анализ ошибок см. в [32]). (Прим. ред.)

**) В [157] и в работе Рейка [168] каноническое преобразование совершается унитарным оператором, действующим как на электронные, так и фоновые операторы. После преобразования гамильтониан состоит из поляронной части, решеточной части и остаточного полярон-решеточного взаимодействия. Ли, Лоу и Пайнс [45] после устранения электронных операторов, используя закон сохранения импульса, применили каноническое преобразование типа (3.15), которое действует только на фоновые операторы, но которое содержит свободный параметр $f(\mathbf{q})$. Этот параметр должен быть определен так, чтобы нулевой гамильтониан не содержал членов, линейных по операторам преобразованных фононов.

где \mathbf{g} — вектор ближайших соседей, а E_0 — энергия атомного состояния; E_b — энергия связи полярона

$$E_b = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2, \quad (16.3)$$

где

$$|\gamma_{\mathbf{q}}|^2 = \frac{4\pi e^2}{\hbar \omega_{\mathbf{q}} a^3 q^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon} \right). \quad (16.4)$$

Параметр $|\gamma_{\mathbf{q}}|^2$ имеет такой вид, если в исходном гамильтониане используется фреilihовское выражение для электрон-фононного взаимодействия \mathcal{H}_{int} *). Константа связи есть

$$S_T(\mathbf{g}) = (1/2N) \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos \mathbf{q}\mathbf{g}) \text{cth}(\beta \hbar \omega_{\mathbf{q}}/2), \quad (16.5)$$

где N — число единичных ячеек в кристалле объемом V . Собственные состояния \mathcal{H}_0 имеют вид

$$\Psi(\{n_{\mathbf{q}}\}, \mathbf{k}) = \prod_{\mathbf{q}} \left[\frac{(b_{\mathbf{q}}^+)^{n_{\mathbf{q}}}}{(n_{\mathbf{q}}!)^{1/2}} \right] \prod_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle_{\text{el}} |0\rangle_{\text{ph}}, \quad (16.6)$$

где $|0\rangle_{\text{el}}$ и $|0\rangle_{\text{ph}}$ — состояния электронного и фононного вакуума, соответственно. Член взаимодействия в преобразованном гамильтониане имеет вид

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{g}} J(\mathbf{g}) [\hat{\Phi}_{\mathbf{m}\mathbf{g}} - \langle \hat{\Phi}_{\mathbf{g}} \rangle] \times \\ \times \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{R}_{\mathbf{m}} - i\mathbf{g}\mathbf{k}'], \quad (16.7)$$

где фононный оператор есть

$$\hat{\Phi}_{\mathbf{m}\mathbf{g}} = \exp \sum_{\mathbf{q}} \{ b_{\mathbf{q}}^+ [x_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}) - x_{\mathbf{m}\mathbf{g}}(\mathbf{q})] - b_{\mathbf{q}} [x_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}) - x_{\mathbf{m}\mathbf{g}}(\mathbf{q})] \}. \quad (16.8)$$

Величина $x_{\mathbf{m}}(\mathbf{q})$ характеризует вклад в продольное смещение иона в точке $\mathbf{R}_{\mathbf{m}}$ за счет оптического фотона с волновым вектором \mathbf{q} ; $x_{\mathbf{m}\mathbf{g}} \equiv x_{\mathbf{R}_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}}$. Тепловое среднее $\langle \hat{\Phi}_{\mathbf{g}} \rangle$ определено с невозмущенной матрицей плотности (14.11), в которой \mathcal{H} заменено на \mathcal{H}_0 . Длинные вычисления приводят к следующему выражению для $\langle \hat{\Phi}_{\mathbf{g}} \rangle$ **):

$$\langle \hat{\Phi}_{\mathbf{g}} \rangle = \frac{1}{Z_0} \text{Sp} \{ \exp(-\beta \mathcal{H}_0) \hat{\Phi}_{\mathbf{m}\mathbf{g}} \} = \exp(-S_T(\mathbf{g})). \quad (16.9)$$

Это выражение не зависит от \mathbf{m} , так как оператор $\hat{\Phi}_{\mathbf{m}\mathbf{g}}$ трансляционно инвариантен. Он не меняется, если $\mathbf{R}_{\mathbf{m}}$ заменить на $\mathbf{R}_{\mathbf{m}} + \Delta$, а $b_{\mathbf{q}} \rightarrow b_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\Delta}$, где Δ — вектор решетки.

*) Выражение (16.4) справедливо при $qa \ll 1$. (Прим. ред.)

***) Это вычисление проведено в Приложении I работы Ланг и Фирсова [157].

Так же как и новый поляронный гамильтониан $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$, оператор электрического тока состоит из двух частей, а именно:

$$j_x = j_x^0 + j_x^1, \quad (16.10)$$

где

$$j_x^0 = (e/i\hbar) [x, \mathcal{H}_0] = (e/\hbar) \left(\frac{\partial}{\partial k_x}, \mathcal{H}_0 \right) = (e/\hbar) \sum_k a_k^\dagger a_k \frac{\partial}{\partial k_x} E(k) \quad (16.11)$$

и

$$\begin{aligned} j_x^1 &= (e/i\hbar) [x, \mathcal{H}_1] = \\ &= e \sum_{kk'} a_k^\dagger a_k \frac{1}{N} \sum_{mg} \langle g | v_x | 0 \rangle [\hat{\Phi}_{mg} - \langle \hat{\Phi}_g \rangle] \exp [i(k - k') R_m - ik'g]. \end{aligned} \quad (16.12)$$

Матричный элемент оператора скорости $\langle g | v_x | 0 \rangle$ берется между атомными состояниями в точках R_m и $R_m + g$. Он также трансляционно инвариантен*).

Приведенные формы гамильтониана полярона малого радиуса $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ и оператора тока $j_x^0 + j_x^1$ удобны для вычисления проводимости поляронов, так как они позволяют провести резкое различие между двумя механизмами движения малого полярона, т. е. прыжковым движением и зонным движением. Гамильтониан \mathcal{H}_0 включает перенормировку энергии, связанную с E_b , т. е. с поляронным сдвигом атомных уровней и с величиной $\langle \hat{\Phi}_g \rangle$, на которую умножается резонансный интеграл $J(g)$. Величина $\langle \hat{\Phi}_g \rangle$ учитывает перестройку осцилляторов решетки, когда электрон движется от узла R_m к $R_m + g$; таким образом, $\langle \hat{\Phi}_g \rangle$ есть тепловое среднее от фоновых интегралов перекрытия между двумя собственными состояниями решетки, когда электрон находится в точках R_m и $R_m + g$ соответственно**). Движение электрона по зоне из точки R_m в точку $R_m + g$

*) Для локализованных поляронных состояний поляронная часть гамильтониана имеет вид

$$\mathcal{H}_{\text{pol}} = \sum_m a_m^\dagger a_m (E - E_b) + \sum_{m,g} a_{m+g}^\dagger a_m J(g) \hat{\Phi}_{mg}.$$

Оператор скорости v_x получается коммутированием $x = \sum_m R_m^{(x)} a_m^\dagger a_m$ с поляронным гамильтонианом

$$v_x = \frac{1}{i\hbar} [x, \mathcal{H}_{\text{pol}}] = \sum_{m,g} a_{m+g}^\dagger a_m \langle g | v_x | 0 \rangle \hat{\Phi}_{mg},$$

где $\langle g | v_x | 0 \rangle = iJ(g) g_x/\hbar$ — матричный элемент между атомными волцовыми функциями, центрированными на ближайших соседях.

***) Точный вид этого интеграла перекрытия дается уравнением (12.7).

происходит без изменения фоновых чисел заполнения, т. е. электрон «видит» в точках \mathbf{R}_m и $\mathbf{R}_m + \mathbf{g}$ одни и те же атомные смещения и те же возбужденные колебания около этих смещений. Поэтому оператор тока j_x^0 , который зависит от среднего $\langle \hat{\Phi}_q \rangle$, играет существенную роль при вычислении проводимости по полярной зоне. С другой стороны, член возмущения в полярном гамильтониане \mathcal{H}_1 зависит от

$$\Delta \hat{\Phi}_{mg} = \hat{\Phi}_{mg} - \langle \hat{\Phi}_g \rangle \quad (16.13)$$

и ответствен за недиагональные переходы между соседними узлами, при которых числа заполнения фононов до и после перехода различны. Следовательно, второй член в операторе j_x^1 играет главную роль при описании прыжковых переходов, активированных фононами.

Основная математическая проблема состоит в вычислении ряда теории возмущений для функции линейного отклика, исходя из формулы Кубо (14.9) и гамильтониана полярона малого радиуса $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$.

Для вычисления корреляционной функции токов Ланг и Фирсов обобщили диаграммную технику Константинова и Переля [184] (построенную для однофононных взаимодействий) на случай многофононных операторов рассеяния.

Другая теория возмущений для вычисления электропроводности системы, описываемой гамильтонианом Фрелиха, была дана Холстейном [185]. Однако эта теория не применялась к задаче о подвижности полярона малого радиуса. Константинов и Перель переписали выражение (14.9) в слегка измененной форме, удобной для применения теории возмущений. Выражение, полученное в их работе, имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} = & \frac{\beta}{VZ} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} \exp(-s\tau) \times \\ & \times \operatorname{Sp} \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}_0) T_C \left[\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_C \mathcal{H}_1(z) dz \right] j_x(\tau) j_x(0) \right] \right\} d\tau, \end{aligned} \quad (16.14)$$

где $\mathcal{H}_1(z)$ и $j_x(\tau)$ — соответственно операторы возмущения и тока в представлении взаимодействия*); $\mathcal{H}_0' = \mathcal{H}_0 - e_F \hat{N}$, где \hat{N} — оператор полного числа поляронов, а

$$Z = \operatorname{Sp} \exp[-\beta(\mathcal{H} - e_F \hat{N})].$$

*) Например, $j_x(\tau) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 \tau\right) j_x \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 \tau\right)$.

Символ T_C означает упорядочение вдоль контура, показанного на рис. 17. Вещественная ось соответствует временной переменной τ , а мнимая ось — температурной переменной β .

Разложение по теории возмущений шпура приводит к бесконечному числу членов, каждый из которых соответствует диаграмме, которая построена на основном контуре, показанном на рис. 17.

Мы просто перечислим здесь правила для вычисления вклада каждой диаграммы. Эти правила сформулированы Ланг и Фирсовым [157, 158]:

А. Клеммы. Контур тянется от 0 до τ вдоль вещественной оси. Концевые точки называются клеммами. Клемме с одной входящей электронной линией k и одной выходящей линией k' соответствует сумма двух выражений. Первое происходит от j_x^0 и имеет вид

$$-\frac{ie}{\hbar} \sum_g J(g) g_x \times \exp[-ikg - S_T(g)] \delta_{kk'}, \quad (16.15)$$

второй член возникает от j_x^1 и имеет вид

$$-i \frac{e}{\hbar N} \sum_{mg} J(g) g_x \exp[i(k - k') R_m - k'g] [\hat{\Phi}_{mg}(z) - \langle \hat{\Phi}_g \rangle], \quad (16.16)$$

где z — аргумент клеммы, определяющий ее положение на контуре. Так, первой клемме (0) отвечает $z = 0$, а второй — $z = \tau$.

Б. Точки на контуре. В дополнении к клеммам на контуре может находиться произвольное число точек. Каждая точка на контуре z_i соответствует оператору возмущения $\mathcal{H}_1(z_i)$, ей соответствует многофононный оператор

$$-\frac{i}{\hbar N} \sum_{mg} J(g) \exp[i(k - k') R_m - k'g] [\hat{\Phi}_{mg}(z_i) - \langle \hat{\Phi}_g \rangle], \quad (16.17)$$

зависящий от двух индексов k и k' , которым сопоставляются электронные линии («связки»), причем линия k входит в точку z_i , а линия k' выходит из точки z_i .

В. Правильные и неправильные линии. Из любой точки на контуре или из клеммы одна электронная линия выходит, а другая входит. Линия, идущая из z_2 в z_1 вдоль контура, т. е. когда z_2 — более ранний момент времени, чем z_1 , называется правильной линией и ей соответствует множитель

$$(1 - n_k) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} [E(k) - \epsilon_F](z_2 - z_1) \right\}, \quad (16.18)$$

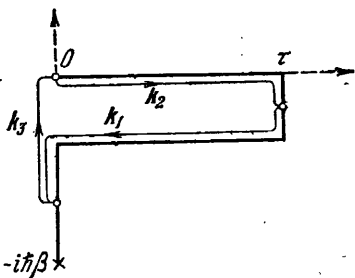


Рис. 17. Контур интегрирования в комплексной плоскости. Диаграмма дает вклад первого порядка в σ_H , если клеммы 0 и τ связаны с операторами тока J_x^1 .

где

$$n_k = \exp \{ \beta [\varepsilon_F - E(k)] \}, \quad (16.19)$$

$$(N/V) e^{\beta \varepsilon_F} = n. \quad (16.20)$$

Здесь n — концентрация поляронов, N/V — число единичных ячеек в 1 см^3 . Линия, идущая из z_2 в z_1 , когда z_1 — более ранний момент времени, чем z_2 (z_1 ближе к началу), называется неправильной линией и ей соответствует множитель

$$n_k \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [E(k) - \varepsilon_F] (z_2 - z_1) \right\}. \quad (16.21)$$

На рис. 17 линии k_1 и k_2 — правильные линии, а линия k_3 — неправильная. Множители (16.18) и (16.21), соответствующие электронным линиям, возникают при вычислении шпура в уравнении (16.14) по электронным переменным [157—158]*). С помощью этих правил легко вычислить электропроводность.

Г. Электропроводность. Вклад от диаграммы с n точками на контуре z_1, \dots, z_n в электропроводность можно найти, располагая многофононные операторы $\mathcal{H}_1(z_1), \dots, \mathcal{H}_1(z_n)$ вдоль контура, а затем записывая в соответствующей последовательности множители, связанные с клеммами, точками на контуре и электронными линиями. Здесь должны быть проведены две достаточно длинные математические выкладки. Сначала вычисляется шпур от произведения фононных операторов $\hat{\Phi}$. Примеры для случая одного, двух и трех операторов $\hat{\Phi}$ рассмотрены Ланг и Фирсовым [157]. Затем проводится интегрирование по z (от нуля до $-i\hbar\beta$) и τ (от нуля до $+\infty$). Результат суммируется по всем индексам k электронных линий и умножается на β/V .

Здесь необходимо различать два разных важных класса диаграмм, связанных соответственно с прыжковой подвижностью и зонной подвижностью. Первый класс диаграмм, возникающий из разложения по теории возмущений корреляционной функции токов по \mathcal{H}' , состоит из быстро сходящихся рядов. Диаграммы, которые связаны с прыжковым движением, характеризуются тем,

$$\begin{aligned} &*) \text{Sp} \left\{ \exp [-\beta (\mathcal{H}_0 - \varepsilon_F N) T_C a_k(z_1) a_k^\dagger(z_2)] Z_0^{-1} = \right. \\ &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [E(k) - \varepsilon_F] (z_2 - z_1) \right\} \left\{ \begin{array}{l} 1 - n_k, \text{ если } z_2 - \text{ более ранний момент} \\ \text{времени, чем } z_1, \\ - n_k, \text{ если } z_2 - \text{ более поздний момент} \\ \text{времени, чем } z_1. \end{array} \right. \end{aligned}$$

Вместо Z возникает статистическая сумма $Z_0 = \text{Sp} \{ \exp [-\beta (\mathcal{H}_0 - \varepsilon_F N)] \}$ по той причине, что несвязанные графики, которые появляются в диаграммном разложении в числителе шпура от корреляционной функции токов, сокращаются с графиками, возникающими от разложения Z . Поэтому Z в знаменателе (16.13) заменяется на $Z_0 = Z_{el} Z_{ph}$, где $Z_{ph} = \prod_q Z_q$, Z_q — статистическая сумма осциллятора q . Об определении несвязанных диаграмм см. Абрикосов и др. [75], стр. 100.

что они не имеют свободных сечений [157]*). Так называемые свободные сечения показаны на рис. 18, а. Так как z_1 ближе к τ , чем z_2 , то оператор тока $j_x(\tau)$ может быть соединен с фоновым оператором (16.17) в точке z_1 , а $j_x(0)$ — с фоновым оператором в точке z_2 . Все диаграммы с оператором тока зонного типа j_x^0 в клемме имеют по крайней мере одно свободное сечение.

Кроме того, диаграммы с операторами тока j_x^1 в каждой клемме имеют свободные сечения во втором и более высоких порядках по \mathcal{H}' . Диаграммы со свободными сечениями представляют собой расходящийся ряд по степеням $1/s$. Ряд начинается с члена первого порядка, простейший вклад в который состоит из диаграммы с операторами тока j_x^0 в обеих клеммах. Расходящийся характер ряда теории возмущений для проводимости на постоянном токе хорошо известен [185]**). Это приводит к написанию интегрального уравнения, примером которого может служить уравнение типа кинетического уравнения Больцмана, полученное Холстейном [185] для модели электрон-фононного газа***). Обсудим последовательно: а) диаграммы прыжкового типа и соответствующие выражения для σ_h , б) диаграммы со свободными сечениями; суммирование этих диаграмм приводит к интегральному уравнению. Решение этого уравнения определяет σ_h ****).

1. Прыжковая проводимость. В наимизшем порядке прыжковые диаграммы не имеют точек на контуре, а в обеих клеммах стоят операторы тока j_x^1 . Согласно правилам А — В электропро-

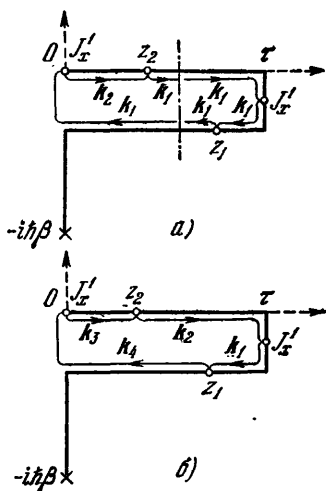


Рис. 18. а) Диаграмма второго порядка со свободным сечением, дающая вклад в σ_h . б) Диаграмма без свободного сечения, дающая вклад в $\sigma_h^{(2)}$.

*) Диаграммы со «свободными сечениями» отличаются от несвязанных диаграмм. Последние представляют собой замкнутые части диаграмм, содержащие точки на контуре, связанные с фоновыми операторами. Первые же состоят из диаграммных частей, содержащих операторы тока, связанные с клеммами.

***) Особенно ясный пример — это лестничные диаграммы, полученные Холстейном при вычислении корреляционной функции токов (см. Холстейн [185]).

****) Тот факт, что разложение операторов тока $j(t)$, фигурирующих в формуле Кубо, в ряд по \mathcal{H}_{int} приводит к накоплению степеней $1/s$, был отмечен еще в [184]. (Прим. ред.)

*****) Из приведенных выше рассуждений видно, что вклады σ_h и σ_h независимы и аддитивны, т. е. должна иметь место формула (15.19) в любом порядке по J . Хотя формула вида (15.19) в [157] не приведена, вывод об аддитивности двух вкладов в [157] содержится. (Прим. ред.)

ВОДНОСТЬ МОЖНО ЗАПИСАТЬ В ВИДЕ

$$\begin{aligned} \sigma_h^{(0)} = & \frac{e^2 \beta \hbar}{N} \operatorname{Re} \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{m_1, m_2} \sum_{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2} \langle \mathbf{g}_1 | v_x | 0 \rangle \times \\ & \times \langle \mathbf{g}_2 | v_x | 0 \rangle \exp \{ i [(\mathbf{k} - \mathbf{q}) (\mathbf{R}_{m_2} - \mathbf{R}_{m_1}) - \mathbf{k} \mathbf{g}_1 - \mathbf{q} \mathbf{g}_2] \} \times \\ & \times \exp [-\beta E(\mathbf{k})] \int_0^\infty \exp \left\{ -s\tau + \frac{i}{\hbar} [E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{q})] \tau \right\} \times \\ & \times [\langle \hat{\Phi}_{m_1, \mathbf{g}_1}(\tau) \hat{\Phi}_{m_2, \mathbf{g}_2}(0) \rangle - \langle \hat{\Phi}_{\mathbf{g}_1} \rangle \langle \hat{\Phi}_{\mathbf{g}_2} \rangle] d\tau. \quad (16.22) \end{aligned}$$

Вычисление термодинамических средних от одного фононного оператора $\hat{\Phi}_{m, \mathbf{g}_1}$ и от произведения двух и трех операторов было проведено Ланг и Фирсовым [157] *). В результате квадратная скобка, содержащая фононные операторы, имеет вид **)

$$\begin{aligned} & \exp [-S_T(\mathbf{g}_1) - S_T(\mathbf{g}_2)] \times \\ & \times \left\{ \exp \left[\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} | \gamma_{\mathbf{q}} |^2 \frac{\cos [\omega_{\mathbf{q}} (\tau + i\hbar\beta/2)]}{\operatorname{sh}(\hbar\omega_{\mathbf{q}}\beta/2)} a_{12}(\mathbf{G}, \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2) \right] - 1 \right\}, \quad (16.23) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} a_{12} = & \frac{1}{2} [\cos(\mathbf{q}(\mathbf{G} - \mathbf{g}_1)) + \cos(\mathbf{q}(\mathbf{G} - \mathbf{g}_2)) - \\ & - \cos(\mathbf{q}\mathbf{G}) - \cos(\mathbf{q}(\mathbf{G} - \mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_2))] \quad (16.24) \end{aligned}$$

и

$$\mathbf{G} = \mathbf{R}_{m_2} - \mathbf{R}_{m_1}. \quad (16.25)$$

Интегрирование по τ проводится в предположении, что дисперсия продольных оптических фононов имеет вид

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = \omega_0^2 + \omega_1^2 \cos(\mathbf{q}\mathbf{g}). \quad (16.26)$$

Тогда сумма в (16.23) осциллирует и затухает с τ ***).

При интегрировании используется метод седловой точки [186]. Существен вклад только от первой седловой точки, если

$$\frac{1}{t_0} = \left[\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} | \gamma_{\mathbf{q}} |^2 \frac{\omega_{\mathbf{q}}^2}{\operatorname{sh}(\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}}/2)} (1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{g})) \right]^{1/2} \gg \omega_0. \quad (16.27)$$

*) Общие правила для вычисления средних по фононам от произведения любого числа фононных операторов $\hat{\Phi}_{m, \mathbf{g}_i}(z_i)$ описаны в [157, 159] (см. также приложение 2 в части II). (Прим. ред.)

***) Вычитание единицы соответствует вычитанию в наимизшем порядке диагональных переходов (что соответствует вычитательной процедуре Холстейна), связанных с простейшей диаграммой, содержащей одно свободное сечение. Эта диаграмма не имеет точек на контуре, а содержит операторы тока i_x^0 на клеммах.

****) Важно лишь чтобы сумма в показателе экспоненты (16.23) затухала с τ , что не связано с конкретным видом (16.26) для закона дисперсии фононов. (Прим. ред.)

Это эквивалентно условию (13.63), полученному Холстейном, когда он использовал метод скорейшего спуска для вычисления скорости перехода при прыжковых процессах. За время t_0 подынтегральное выражение убывает настолько быстро, что t_0 действительно характеризует время, в течение которого совершается перескок. Это время должно быть много больше времени релаксации ионов решетки $1/\Delta\omega_0$. Так как благодаря (16.27) существен вклад только от первой седловой точки, то членом с $E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{q})$ можно пренебречь, если кроме условия (16.27) выполнены следующие условия:

$$(1/\hbar)[E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{q})]t_0 \ll 1 \quad (16.28)$$

и

$$[E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{q})]\beta \ll 1 \quad \text{или} \quad J \exp[-S_T]/k_B T \ll 1. \quad (16.29)$$

Второе условие получается после преобразования интегрирования по τ к новой переменной $t = \tau + i\hbar\beta/2$, что позволяет удобно провести интегрирование с помощью метода седловой точки. S_T означает среднее значение осцилляторных интегралов перекрытия $S_T(\mathbf{g})$ между ближайшими соседями. Оба условия (16.28) и (16.29) автоматически удовлетворяются, если вклады более высокого порядка в прыжковую проводимость малы по сравнению с $\sigma_h^{(0)}$. Последнее имеет место при $\eta_2 \ll 1$, где η_2 дается выражением (16.34). Используя (16.27) — (16.29), получим, что вклад от первой седловой точки в интеграле по τ в электропроводность равен

$$\sigma_h^{(0)} = \frac{1}{2} \frac{n e^2}{k_B T} \sum_{\mathbf{g}} \frac{V \pi J^2 \exp(-E_a/k_B T) g_x^2}{\hbar^2 \left[\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \frac{1}{2} \omega_{\mathbf{q}}^2 (1 - \cos \mathbf{q}\mathbf{g}) \operatorname{csch} \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2k_B T} \right]^{1/2}} \quad (16.30)$$

где

$$E_a = \frac{1}{N\beta} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{g})) \operatorname{th}(\beta \hbar \omega_{\mathbf{q}}/4). \quad (16.31)$$

За исключением численного множителя, соответствующего числу ближайших соседей, результат для $\sigma_h^{(0)}$ совпадает с результатом Холстейна (15.9). Существенный параметр — энергия активации прыжка. Она совпадает с энергией активации, полученной Холстейном в (13.64), если учесть, что константы электрон-фононной связи в §§ 13 и 16 обозначены через $\gamma_{\mathbf{q}}$ и $|\gamma_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{g}))$ соответственно.

Прыжковая проводимость, полученная Холстейном в низшем порядке теории возмущений (по J) из соотношения Эйнштейна, согласуется с членом нулевого порядка формулы Кубо при условии, что корреляционная функция токов вычисляется с операторами j_x^1 , соответствующими возмущению \mathcal{H}_1 в гамильтониане

Ланг и Фирсова. \mathcal{H}_1 определяет остаточное полярон-решеточное взаимодействие.

Вычисления по теории возмущений можно провести в более высоких порядках по \mathcal{H}_1 , вычисляя вклады от диаграмм с одной и большим числом точек на контуре. Так же как и в нулевом порядке, в обеих клеммах стоят операторы тока j_x^1 . Имеется три диаграммы для $\sigma_h^{(1)}$, в которых точка на контуре находится на верхней и нижней временных осях и на мнимой температурной оси. Пример такой диаграммы показан на рис. 17. В результате вычисления этих диаграмм имеем ($k_B T > \hbar\omega_0/2$)

$$\sigma_h^{(1)}/\sigma_h^{(0)} \begin{cases} = \eta_1 = J/E_a \ll 1, & g_1 + g_2 + g_3 = 0, \\ \sim e^{-s}, & g_1 + g_2 + g_3 \neq 0. \end{cases} \quad (16.32)$$

Первый случай имеет место в тригональных и гексагональных кристаллах, а второй — в кубических кристаллах. Условие $\eta_1 \ll 1$ есть условие справедливости концепции полярона малого радиуса. Осцилляторный интеграл перекрытия $e^{-s} \ll 1$, так как S порядка 10.

Вклад второго порядка в прыжковую проводимость соответствует семи диаграммам, каждая из которых имеет две точки на контуре. В этом порядке имеется одно свободное сечение. На рис. 18, а и 18, б точка z_1 на нижней части временного контура лежит ближе к клемме τ , чем точка z_2 на верхней части временного контура. В графиках такого типа неявно содержится свободное сечение, поэтому среднее от фононных операторов в скобках под знаком тройного интеграла по τ, z_1, z_2 необходимо представить в виде (вычитательная процедура)*)

$$\langle \Delta \hat{\Phi}_{m,g_1}(z_1) \Delta \hat{\Phi}_{m,g}(\tau) \Delta \hat{\Phi}_{m,g_2}(z_2) \Delta \hat{\Phi}_{m',g'}(0) \rangle - \\ - \langle \Delta \hat{\Phi}_{m,g_1}(z_1) \Delta \hat{\Phi}_{m,g}(\tau) \rangle \langle \Delta \hat{\Phi}_{m,g_2}(z_2) \Delta \hat{\Phi}_{m',g'}(0) \rangle. \quad (16.33)$$

Первому члену соответствует диаграмма, представленная на рис. 18, б, а второй член соответствует диаграмме на рис. 18, а. На рис. 18, а показана единственная диаграмма второго порядка с операторами тока j_x^1 на клеммах, которая имеет свободное сечение. Она расходится как $1/s$. Мы насильственно вычли ее из 18, б, чтобы устранить расходимость типа $1/s$, а чтобы общий результат не изменился, мы должны прибавить такую диаграмму к другим диаграммам порядка $1/s$, которые появляются, когда оператор тока j_x^0 соединяется с одной или обеими клеммами. Диаграммы со свободными сечениями дают вклад в зонную проводимость. Диаграммы без свободных сечений дают следующий

*) С ростом разности $z_1 - z_2$ первый член в (16.33) перестает зависеть от $z_1 - z_2$, что и приводит при интегрировании по z_1, z_2, τ к расходимости вида $1/s$. Вычитаемый в (16.33) вклад имеет ту же особенность. Поэтому комбинация (16.33) особенности типа $1/s$ не содержит. (Прим. ред.)

вклад в прыжковую проводимость ($k_B T > \hbar \omega_0 / 2$):

$$\sigma_h^{(2)} / \sigma_h^{(0)} \approx \eta_2 = J^2 / (E_a k_B T)^{1/2} \hbar \omega_0. \quad (16.34)$$

Условие $\eta_2 < 1$ соответствует условию Холстейна (15.22) для неадиабатических подбарьерных туннельных переходов. Ланг и Фирсов указали, что в общем случае $\sigma_h^{(n+1)} / \sigma_h^{(n-1)} = \eta_2$ ($n = 1, 2, 3, \dots$). Первый член нечетного ряда меньше в η_1 раз первого члена четного ряда *).

2. Зонная проводимость. Разложение электропроводности в ряд по \mathcal{H}' неизбежно приводит еще и ко второму классу диа-

грамм, а именно, к диаграммам, содержащим одно и более свободных сечений. Каждому свободному сечению соответствует множитель $1/s = -1/i\omega$ [157, 158]. Поэтому при вычислении вклада в проводимость на постоянном токе за счет зонного движения полярона возникает расходящийся ряд. Только в случае высокочастотной проводимости $\omega^2 \tau^2 \gg \gg 1$ (τ — время релаксации) этот ряд теории возмущений сходится. Для того чтобы найти низкочастотную проводимость, бесконечный ряд по $1/s$ суммируется с помощью интегрального уравнения. В § 6, где вычислялась одночастичная функция Грина в присутствии электрон-фононного взаимодействия, показано, что суммирование бесконечного ряда диаграмм, изображенных на второй схеме, приводит к нелинейному интегральному уравнению для собственной энергии электрона.

Суммирование диаграмм, содержащих свободные сечения и возникающих при разложении в ряд теории возмущений корреляционной функции токов, приводит к интегральному уравнению типа уравнения Больцмана. Для получения этого уравнения используется следующий прием.

Рассмотрим диаграмму с одним свободным сечением; пример такой диаграммы показан на рис. 19, а. Диаграмма представляет собой произведение двух «вершин», левой вершины r_{1k}^x и правой вершины r_{2k}^x . Каждая вершина состоит из трехточечного блока, не содержащего свободных сечений. Затем существуют диаграммы с более чем одним свободным сечением. Они состоят из

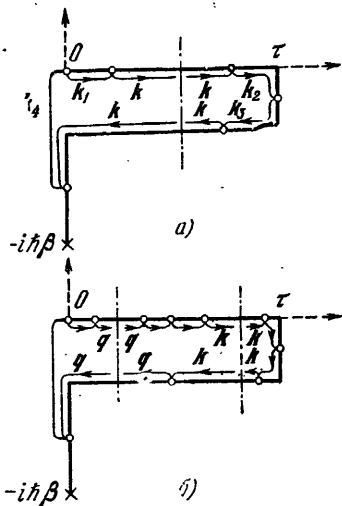


Рис. 19. а) Диаграмма с одним свободным сечением. Каждая вершина содержит трехточечный блок. б) Диаграмма со свободными сечениями, содержащими горизонтальную неприводимую часть второго порядка.

*) Общие свойства рядов по степеням η_2 обсуждаются в § 2 гл. II и в приложении 7 части II. (Прим. ред.)

двух вершин и так называемой «горизонтальной неприводимой части». Горизонтальная неприводимая часть ограничена двумя вертикальными линиями, которые не пересекаются с фоновыми линиями (связанными с фоновым оператором $\mathcal{H}_1(z_i)$), входящими или выходящими из точки z_i на контуре. Пример показан на рис. 19, б. Сумма всех горизонтальных неприводимых частей

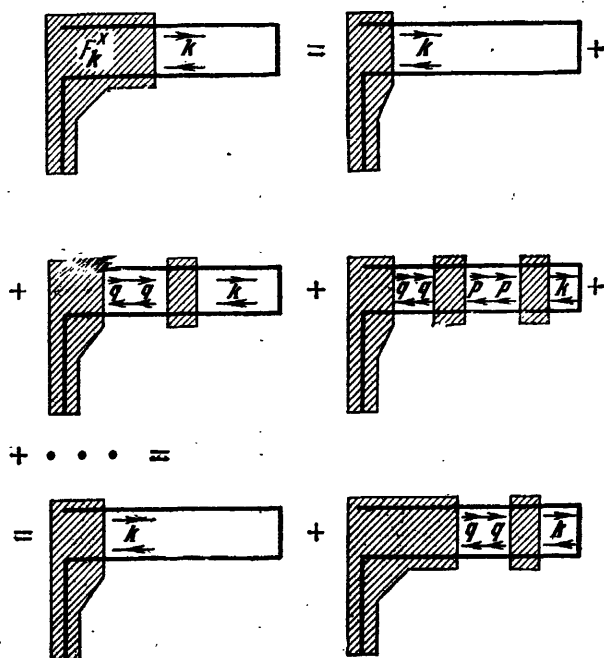


Рис. 20. Схема получения интегрального уравнения для левой части F_k^x (16.35).

есть вероятность W_{qk} . Каждая из топологически возможных диаграмм, содержащих одно или более свободных сечений, может быть разделена на вершину слева r_{ik}^x и оставшуюся справа часть F_k^x , которая содержит остальные свободные сечения. Для F_k^x Ланг и Фирсов получили интегральное уравнение

$$F_k^x = \frac{1}{s} r_{ik}^x + \frac{1}{s} \sum_q F_q^x W_{qk}. \quad (16.35)$$

Это уравнение следует из разложения левой части по горизонтальным неприводимым частям, как показано на рис. 20. Если уравнение (16.35) умножить на s и s устремить к нулю, то получим уравнение типа кинетического

$$r_{ik}^x + \sum_q F_q^x W_{qk} = 0. \quad (16.36)$$

Электропроводность σ_b , согласно правилу Γ , тогда имеет вид *)

$$\sigma_b = \frac{\beta}{V} \exp(\beta e_F) \sum_{\mathbf{k}} \operatorname{Re} \{ F_{\mathbf{k}}^x r_{2\mathbf{k}}^x \}. \quad (16.37)$$

Множитель $\exp(\beta e_F)$ появляется из-за того, что диаграммы для $F_{\mathbf{k}}^x$ и $r_{1\mathbf{k}}^x$ содержат одну неправильную линию. Проводимость σ_b можно получить из уравнения (16.37), вычисляя диаграммы для левой части и для правой вершины согласно правилам А — Г. Можно показать, что вершины нулевого порядка, соответствующие оператору тока j_x^0 на клемме, и вероятности $W_{\mathbf{qk}}$ второго порядка, соответствующие неприводимой горизонтальной части типа, показанной на рис. 19, б, наибольшие, если выполнены следующие условия:

$$\frac{J}{E_a} \ll 1, \quad \left(\frac{J}{\hbar \omega_0} \right)^2 \frac{1}{S} \ln S < 1 \quad (16.38)$$

и

$$T_1 < T < T_0, \quad (16.39)$$

где T_1 и T_0 определяются уравнениями **)

$$\Delta E(T_1) = k_B T_1, \quad \frac{\hbar \omega_0}{2 \ln S(T_0)} = k_B T_0. \quad (16.40)$$

Вследствие условия (16.38) вершины первого и второго порядков малы по сравнению с вершиной нулевого порядка. Условие, налагаемое на T , возникает, когда выражения для вершин и вероятностей $W_{\mathbf{qk}}$ интегрируются по временной переменной $t = \tau + i\hbar\beta/2$. Температура T_0 порядка $\theta/4$. При $T \geq \theta/4$, чтобы провести интегрирование, можно использовать метод седловой точки. С помощью этого метода Холстейн получил выражение (15.12) для зонной подвижности. При $T_1 < T < T_0$ Ланг и Фирсов использовали другой метод интегрирования [158]. Они нашли, что в этой температурной области зонная проводимость может быть записана в виде

$$\sigma_b \approx \frac{ne^2}{k_B T} \frac{J^2 a^2 e^{-2S}}{\hbar^2} \tau^{(2)}, \quad (16.41)$$

*) Вывод формулы (16.37) фактически не ограничен условием $\hbar/\tau < \Delta E$ (особенно отчетливо это видно из вывода, приведенного во II-й части книги), т. е. она имеет смысл и при $\hbar/\tau > \Delta E$, когда понятие о полярной зоне уже утратило смысл. Поэтому разумно назвать этот вклад так, чтобы название лучше соответствовало физике процесса переноса. Во II-й части книги этот вклад назван «туннельным» и обозначается как σ_t . (Прим. ред.)

**) Температура T_0 определяет температурную границу, выше которой можно применять метод перевала, т. е. T_0 не имеет непосредственного физического смысла, и ее ни в коем случае не следует отождествлять, как это иногда делают (см., например, стр. 13 в [12] в списке литературы к части II, с температурой перехода от зонного механизма переноса к прыжковому. (Прим. ред.)

где $\tau^{(2)}$ — время релаксации, которое определяется приближенным значением для $W_{qk}^{(2)}$,

$$W^{(2)} = \frac{1}{\tau^{(2)}} = \left(\frac{J}{E_a}\right)^4 \frac{\omega_0^2}{\Delta\omega \operatorname{sh}^2(\hbar\omega_0/2k_B T)}, \quad (16.42)$$

где $\Delta\omega$ — ширина спектра оптических фононов (см. (16.26)). По сравнению с выражением для $W(k \rightarrow k')$, полученным Холстейном (13.72), выражение для $W^{(2)}$ имеет дополнительный множитель J^2 , но не содержит множителя активационного типа $e^{-E_a/k_B T}$, так как промежуточное состояние в вероятности второго порядка виртуальное.

Вероятность $W^{(2)}$ соответствует следующим типам переходов:

а) $m \rightarrow m + g \rightarrow m$, при котором электрон в конечном счете остается в узле m , но меняется колебательное состояние.

б) $m \rightarrow m + g_1 \rightarrow m + g_2$, при котором рассеяние между зонными состояниями связано с туннельным переходом на другой узел через промежуточное состояние; здесь также изменяется колебательное состояние. Для сравнения σ_b , даваемой уравнением (16.41), и вклада в зонную проводимость, найденного в наинизшем порядке по J^2 , Ланг и Фирсов вычислили этот член при температурах $T_1 < T < T_0$. Результат имеет вид

$$\frac{\sigma_b^{(0)}}{\sigma_b} \approx \frac{J^4 \exp(-2\theta_0/T)}{S_T^2 (\hbar\omega_0)^4}. \quad (16.43)$$

Отношение мало даже при $T = T_0$.

Интересным следствием соотношения (16.43) является сдвиг температуры перехода T_t к меньшим значениям, чем те, которые получаются из уравнения (13.70). T_t определяется теперь из уравнения

$$1/\tau^{(2)}(T_t) = 2J \exp[-S_{T_t}]. \quad (16.44)$$

Для типичных значений параметров полярона малого радиуса T_t построена на рис. 21. Так как $\tau^{(2)}$ меньше $\tau(k, T)$ (13.72), которое

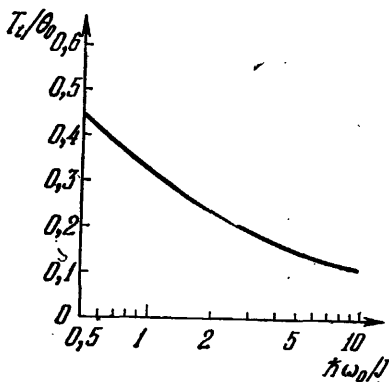


Рис. 21. Зависимость от $\hbar\omega_0/J$ для температуры перехода T_t от зонного режима к прыжковому; T_t определяется уравнением $\hbar/\tau(T_t) = 2J \exp[-S_{T_t}]$, где среднее время жизни зонного состояния полярона определяется выражением (16.42).

димость, найденного в наинизшем порядке по J^2 , Ланг и Фирсов вычислили этот член при температурах $T_1 < T < T_0$. Результат имеет вид

в наименьшем порядке определяет время жизни зонных состояний полярона, то температура перехода T_t , даваемая уравнением (16.44), меньше температуры, представленной на рис. 14*).

§ 17. Холловская подвижность

Согласно (7.5) в общем случае отношение холловской и дрейфовой подвижностей определяется постоянной Холла R . Это отношение можно также выразить через холловский угол θ , который характеризует поворот вектора электрического поля E магнитным полем H ; θ определяется соотношением [187]

$$\operatorname{tg} \theta = E_y/E_x = \sigma_y/\sigma_x = R\sigma_x H, \quad (17.1)$$

где σ_x и σ_y — компоненты тензора проводимости, когда внешнее электрическое поле направлено вдоль оси x . Ток в направлении y равен нулю. Уравнение (17.1) справедливо при произвольных значениях H .

В случае слабого магнитного поля, когда $(\omega_c \tau)^2 \ll 1$, зависимостью σ_x и R от H можно пренебречь; тогда холловская подвижность равна

$$\mu_H = \frac{c}{H} \operatorname{tg} \theta. \quad (17.2)$$

В широкозонных полупроводниках отношение холловской и дрейфовой подвижностей $\mu_H/\mu_D = -cneR$ есть число, которое определяется энергетической зависимостью времени релаксации и электронной зонной структурой, т. е. формой изоэнергетических поверхностей.

В сильных полях $(\omega_c \tau)^2 \gg 1$ постоянная Холла стремится к $R_\infty = -1/nec$. Для сферических изоэнергетических поверхностей R/R_∞ меняется от $8/3\pi$ для акустического рассеяния и до $315\pi/512$ для примесного рассеяния [188]. Таким образом, для широкозонных полупроводников отношение μ_H/μ_D не сильно отличается от 1. Однако из-за сильного отличия природы движения поляронов малого радиуса в области прыжковой проводимости от зонного движения при $T > T_t$ возникает значительное различие между μ_D и μ_H . Дрейфовая подвижность определяется последовательными случайными прыжками, каждый из которых соответствует переходу первого порядка между двумя узлами. При включении магнитного поля необходимо рассматривать

*) В отличие от T_t , определяемой из условия (13.70), температура, определяемая условием (16.44), и соответствующая верхней границе зонного описания, во II-й части книги обозначается как T_2 . При $S_T^2 e^{-ST} < \eta_1$, $T_2 < T_t$. При $S_T^2 e^{-ST} > \eta_2$, $T_2 \equiv T_t$. При $T > T_2$ недиагональные переходы действительно начинают играть важную роль, однако классические перескоки определяют картину переноса лишь при $T > T_3 \gg T_2$. Температура T_3 определена в § 1 гл. II соотношением (11.5) и приближенно описывается формулой (11.51). В интервале $T_2 < T < T_3$ перенос осуществляется посредством многофононного процесса туннельного просачивания. (Прим. ред.)

процессы более высокого порядка, учитывающие по крайней мере три узла при прыжковом движении поляронов перпендикулярно электрическому и магнитному полям. Рассмотрим элементарную трехузельную конфигурацию, показанную на рис. 22, когда магнитное поле лежит в плоскости рисунка. Первоначально полярон может быть локализован, например, на узле g_1 . Спустя время $\Delta t > \tau$ полярон с большей вероятностью можно обнаружить на узле g_3 , чем на узле g_2 (этого следует ожидать, если учесть направление действия классической силы Лоренца [ЕН]). Причина

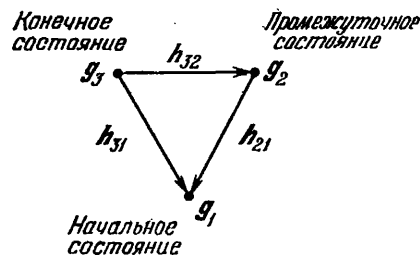


Рис. 22. Простейшая трехузельная конфигурация [161].

заклучается в том, что переход с g_1 на g_3 имеет немного большую вероятность, чем переход с g_1 на g_2 . Разность скоростей переходов пропорциональна H . Фридман и Холстейн [161] вычислили эту разность и получили μ_H . Они обобщили на двумерный случай модель молекулярного кристалла, описанную в § 13. Их расчет включает классическое и квантовомеханическое вычисление

вероятностей переходов второго порядка при наличии магнитного поля. Конечный результат для холловской подвижности μ_H имеет тот же вид, что и для μ_D (15.9); однако энергия в μ_H при $\hbar\omega_0 \gg k_B T$ есть $(E_a/3)$, а поэтому $\mu_H > \mu_D$. Рядом других авторов [163, 164, 165] холловская подвижность в области прыжковой проводимости вычислялась с помощью формулы Кубо (14.9) для антисимметричного тензора проводимости. Вычисления проводились с помощью разложения в ряд по J корреляционной функции токов при $H \neq 0$.

Шнакенберг [165] нашел, что μ_H и μ_D имеют одну и ту же энергию активации E_a , определяемую соотношением (13.67). Предэкспоненциальный множитель, полученный им, совпадает с множителем, найденным Фридманом и Холстейном для треугольной решетки. С другой стороны, Фирсов [163] и Клиндер [164] получили, что холловская подвижность обратно пропорциональна дрейфовой подвижности, т. е. что она существенно уменьшается с ростом температуры, как $\exp\{E_a/k_B T\}$. Эти результаты не поддаются физической интерпретации*). Мы будем здесь об-

) Вычисления эффекта Холла в области высоких температур (в прыжковом режиме), выполненные в работах [163, 164, 165], с помощью формулы Кубо неверны. Вопрос о корректном вычислении холловской подвижности с помощью формулы Кубо обсуждается в [19]. Другой способ вычисления μ_H (свободный от тех трудностей, которые присущи подходу с помощью формулы Кубо) предложен в [20*], где получены принципиально новые результаты для области промежуточных температур (см. также гл. V во II части) и обоснована формула (17.39), постулированная Холстейном для определения прыжкового вклада в холловскую подвижность. (Прим. ред.)

суждать холловскую подвижность на основе работы Фридман^а и Холстейна, так как она основана на простой модели, содержит прозрачные и детальные вычисления вероятности перехода второго порядка и приводит к физически разумному результату [161a].

Основное уравнение Шредингера получается обобщением уравнения (13,6) в три этапа:

а) Обобщение на случай двумерного пространства проводится непосредственно; скалярный номер узла n заменяется на вектор $\mathbf{g} = \sum_i g_i \mathbf{a}_i$, где \mathbf{a}_i — набор базисных векторов, а g_i — целые числа. Локальная волновая функция электрона теперь имеет вид $\varphi_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}, x_{\mathbf{g}})$, где $x_{\mathbf{g}}$ — межъядерная координата в точке \mathbf{g} . Волновая функция полной системы «электрон плюс решетка» с помощью функций $\varphi_{\mathbf{g}}$ может быть представлена в виде

$$\Psi = \sum_{\mathbf{g}} a_{\mathbf{g}}(\{x_{\mathbf{g}}\}) \varphi_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}, x_{\mathbf{g}}), \quad (17.3)$$

где $\{x_{\mathbf{g}}\}$ означает набор $x_{\mathbf{g}}$, когда электрон находится на узле \mathbf{g} .

б) Наличие пространственно однородного электрического поля \mathbf{E} учитывается в уравнениях движения для $a_{\mathbf{g}}$, так как ожидаемое значение скорости полярона здесь вычисляется прямо, без использования уравнения Больцмана. Слабое увеличение вероятности перескока в направлении электрического поля учитывается членом $(\partial f / \partial t)_f$ в кинетическом уравнении. Поправка к гамильтониану за счет электрического поля есть

$$\mathcal{H}_{\mathbf{E}} = e\mathbf{E}\mathbf{r} \quad (17.4)$$

и приводит к изменению члена $-Ax_{\mathbf{g}}$, энергии узла, на котором сидит электрон, на величину $e\mathbf{E}\mathbf{g}$. Другой частью полевого члена $e\mathbf{E}(\mathbf{r} - \mathbf{g})$ и влиянием поля на локализованные функции $\varphi_{\mathbf{g}}$ и собственные значения энергии можно пренебречь.

в) Влияние магнитного поля учитывается при вычислении локализованных функций $\varphi_{\mathbf{g}}$ с помощью уравнения

$$\left\{ \frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r} - \mathbf{g}, x_{\mathbf{g}}) \right\} \varphi_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}, x_{\mathbf{g}}) = E(x_{\mathbf{g}}) \varphi_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}, x_{\mathbf{g}}), \quad (17.5)$$

где $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, а вектор-потенциал \mathbf{A} равен

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathbf{H}\mathbf{r}]. \quad (17.6)$$

Используя волновые функции, зависящие от поля $\varphi_{\mathbf{g}}$, и предположения а) — г) из § 13, Фридман и Холстейн получили основное уравнение для коэффициентов $a_{\mathbf{g}}(\{x_{\mathbf{g}}\})$

$$i\hbar \frac{\partial a_{\mathbf{g}}}{\partial t} = [\mathcal{H}_{\text{lat}} - Ax_{\mathbf{g}} - eE\mathbf{g}] a_{\mathbf{g}} + \sum_{\mathbf{h}} a_{\mathbf{g}+\mathbf{h}} J_{\mathbf{g}, \mathbf{g}+\mathbf{h}}. \quad (17.7)$$

Это уравнение заменяет уравнение (13.6) в присутствии электрического и магнитного полей. Новый резонансный интеграл имеет вид

$$J_{g, g+h} = \int \varphi_g^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r} - \mathbf{g}) \varphi_{g+h}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (17.8)$$

где $\varphi_g(\mathbf{r})$ есть решение уравнения (17.5), зависящее от магнитного поля при $x_g = 0$ (в согласии с предположением в) в § 13).

Для того чтобы найти удобную форму резонансного интеграла $J_{g, g+h}$, применим калибровочное преобразование к локализованным функциям

$$\varphi_g(\mathbf{r}) = \chi_g(\mathbf{r}) \exp(-ie[\mathbf{H}\mathbf{g}]\mathbf{r}/2\hbar c). \quad (17.9)$$

Тогда при $x_g = 0$ уравнение (17.5) принимает вид

$$\left\{ \frac{1}{2m_0} [\mathbf{p} + (e/2c)[\mathbf{H}(\mathbf{r} - \mathbf{g})]]^2 + U(\mathbf{r} - \mathbf{g}) \right\} \chi_g(\mathbf{r}) = E\chi_g(\mathbf{r}). \quad (17.10)$$

Решения этого уравнения трансляционно инвариантны

$$\chi_g(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r} - \mathbf{g}). \quad (17.11)$$

Член с магнитным полем в (17.10) имеет вид ($H = H_z$)

$$(e/2m_0c)[\mathbf{H}\mathbf{r}]\mathbf{p} + O(H^2) = (eH/2m_0c)l_z + O(H^2). \quad (17.12)$$

Если

$$l_z\chi(\mathbf{r} - \mathbf{g}) = 0, \quad (17.13)$$

то $\chi(\mathbf{r} - \mathbf{g})$ отличается от локализованных функций $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{g})$ в нулевом поле только членами второго и более высокого порядка по \mathbf{H} . Такие члены несущественны для линейного эффекта Холла. Угловой момент собственного состояния $\chi(\mathbf{r} - \mathbf{g})$ равен нулю, т. е. $l_z = 0$, если считать, что χ — невырожденное состояние в потенциале $U(\mathbf{r} - \mathbf{g})$, обладающем цилиндрической симметрией вокруг оси z , параллельной \mathbf{H} (и перпендикулярной плоскости двумерной решетки). Вследствие условия (17.13) волновая функция $\varphi_g(\mathbf{r})$ дается с точностью до членов, линейных по \mathbf{H} ,

$$\varphi_g(\mathbf{r}) = \exp\{-ie[\mathbf{H}\mathbf{g}]\mathbf{r}/2\hbar c\} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{g}). \quad (17.14)$$

В правой части (17.4) стоит локализованная функция в нулевом поле, умноженная на фазовый множитель Пайерлса [189]. Подставляя это выражение для $\varphi_g(\mathbf{r})$ в выражение для резонансного интеграла (17.8) и переходя к интегрированию от \mathbf{r} к $\rho = \mathbf{r} - \mathbf{g} - \mathbf{h}/2$, получим

$$J_{g, g+h} = -J \exp(i\alpha_{g, g+h}), \quad (17.15)$$

где J — резонансный интеграл между ближайшими соседями в нулевом поле, а

$$\alpha_{g, g+h} = -\frac{e}{2\hbar c} \mathbf{H}[\mathbf{g}\mathbf{h}] = -\frac{e}{\hbar c} \mathbf{H}\mathbf{A}_{g, g+h} \quad (17.16)$$

при

$$\mathbf{A}_{g, g+h} = 1/2[\mathbf{g}\mathbf{h}]. \quad (17.17)$$

Магнитные фазовые множители резонансного интеграла (17.15) определены не единственным образом, так как начало координат произвольно. Однако их сумма по трем узлам замкнутого контура есть

$$\alpha_{g_3, g_1} + \alpha_{g_3, g_2} + \alpha_{g_1, g_2} = -\frac{e}{\hbar c} \mathbf{H} \mathbf{A}_{321}, \quad (17.18)$$

где

$$\mathbf{A}_{321} = \frac{1}{2} \{ [g_1 g_2] + [g_2 g_3] + [g_3 g_1] \} \quad (17.19)$$

есть вектор, который равен площади треугольника, образованного тремя узлами g_1, g_2, g_3 ; вектор направлен перпендикулярно треугольнику в том смысле, что $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$. Уравнения (17.15) и (17.18) калибровочно инвариантны. Выражение (17.15) для зависимости резонансного интеграла от магнитного поля \mathbf{H} подставляется в основное уравнение (17.7). Это уравнение является исходным при вычислении элементарных вероятностей переходов для трехузельной конфигурации, показанной на рис. 22. Мы будем пренебрегать членом, содержащим электрическое поле. Соответствующее изменение вероятности перехода при $E \neq 0$ легко учесть позднее. Собственные состояния уравнения (17.7) в нулевом порядке ($E = 0$) имеют вид:

$$a_{g_1}(\mathbf{g}, \{n_q^{(1)}\}) = \delta_{\mathbf{g}, g_1} \prod_q \chi_{n_q}^{(1)}(\xi_q - \delta \xi_q^{(1)}), \quad (17.20)$$

$$\mathcal{E}(\{n_q^{(1)}\}) = \sum_q \hbar \omega_q \left(n_q^{(1)} + \frac{1}{2} \right) + E_b, \quad (17.21)$$

где

$$E_b = -\frac{2}{N} \sum_q \frac{A^2}{2M\omega_q^2} \sin^2 \left(\mathbf{q} \mathbf{g}_1 + \frac{\pi}{4} \right), \quad (17.22)$$

$$\delta \xi_q^{(1)} = \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \frac{A}{M\omega_q^2} \sin \left(\mathbf{q} \mathbf{g}_1 + \frac{\pi}{4} \right), \quad (17.23)$$

и

$$\omega_q^2 = \omega_3^2 + \omega_1^2 \sum_{\parallel} \cos(\mathbf{q} \mathbf{h}). \quad (17.24)$$

Эти уравнения являются двумерными аналогами уравнений (13.27)–(13.29), (13.25) и (13.26) соответственно. Здесь N — полное число узлов в двумерной решетке с единичной ячейкой, показанной на рис. 21, а \mathbf{h} — вектор между ближайшими соседями. Собственные функции (17.20) соответствуют состояниям гамильтониана (17.7) в нулевом приближении по J : электрон локализован на узле g_1 , а колебательное состояние решетки описывается набором $\{n_q^{(1)}\}$.

По аналогии с уравнением (13.30) полная волновая функция системы раскладывается по нулевым собственным функциям

(17.20). Матричные элементы возмущения V , соответствующие членам, пропорциональным J в (13.7), имеют вид

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{g}, \{n_q\} | V | \mathbf{g}_1, \{n_q^{(1)}\} \rangle = & - \sum_{\mathbf{h}} \delta_{\mathbf{g}, \mathbf{g}_1 + \mathbf{h}} J \exp(i\alpha_{\mathbf{g}, \mathbf{g}_1}) \times \\
 & \times \prod_q \left(\left\{ 1 - \frac{4}{N} \left(n_q^{(1)} + \frac{1}{2} \right) \gamma_{q\mathbf{h}} \cos^2 \left[\mathbf{q} \left(\mathbf{g}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{h} \right) + \frac{\pi}{4} \right] \right\} \delta_{n_q, n_q^{(1)}} \mp \right. \\
 & \mp \left. \left\{ \left(\frac{8}{N} \right)^{1/2} \varepsilon_{q\mathbf{h}} \gamma_{q\mathbf{h}}^{1/2} \cos \left[\mathbf{q} \left(\mathbf{g}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{h} \right) + \frac{\pi}{4} \right] \times \right. \right. \\
 & \left. \left. \times \frac{1}{2} \left(n_q^{(1)} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)^{1/2} \right\} \delta_{n_q, n_q^{(1)} \pm 1} \right), \quad (17.25)
 \end{aligned}$$

где

$$\gamma_{q\mathbf{h}} = \frac{A^2}{2M\omega_q^2 \hbar \omega_q} [1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{h})]. \quad (17.26)$$

Множитель $\varepsilon_{q\mathbf{h}}$ равен 1 при $\mathbf{k}\mathbf{h} > 0$ и равен -1 при $\mathbf{k}\mathbf{h} < 0$. Матричные элементы (17.25) приводят к прыжковым переходам $\mathbf{g} \rightarrow \mathbf{g} + \mathbf{h}$ между ближайшими соседями. С помощью этих матричных элементов, используя теорию возмущений, зависящую от времени, можно найти ту часть скорости перехода между узлами \mathbf{g}_1 и \mathbf{g}_3 , которая зависит от магнитного поля.

Переход между узлами \mathbf{g}_1 , \mathbf{g}_3 может быть обусловлен прямым переходом первого порядка или непрямым переходом второго порядка через промежуточное состояние \mathbf{g}_2 . Однако существует интерференция между процессами первого и второго порядков, которая приводит к члену, линейному по магнитному полю, и поэтому представляет интерес для эффекта Холла. Вычисление этого члена детально проведено Фридманом и Холстейном. Сейчас мы приступим к получению общего выражения для линейной по \mathbf{H} скорости перехода, используя уравнения (17.25) и (17.18). Затем будет выписан конечный результат без какого-либо обобщения математических деталей.

Электрон может быть первоначально (при $t_i = -\infty$) локализован на узле \mathbf{g}_1 . В более поздний момент времени амплитуды первого и второго порядков, определяющие вероятность нахождения электрона на узле \mathbf{g}_3 , имеют вид

$$a_3^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_{31}^{(H)} \exp(i\omega_{31}t'), \quad (17.27)$$

$$a_3^{(2)} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t dt' V_{32}^{(H)} \exp(i\omega_{32}t') \int_{-\infty}^{t'} dt'' V_{21}^{(H)} \exp(i\omega_{21}t''), \quad (17.28)$$

где

$$\omega_{ij} = \sum_q \omega_q (n_q^{(i)} - n_q^{(j)}), \quad (17.29)$$

а

$$V_{ij}^{(H)} = \exp(i\alpha_{ij}) V_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (17.30)$$

— матричный элемент (17.25), зависящий от магнитного поля. Интерференция между двумя амплитудами приводит к скорости перехода

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (|a_3^{(1)} + a_3^{(2)}|^2 - |a_3^{(1)}|^2 - |a_3^{(2)}|^2) = \\ = \sum_3 \left(\frac{\partial a_3^{(1)*}}{\partial t} a_3^{(2)} + a_3^{(1)*} \frac{\partial a_3^{(2)}}{\partial t} \right) + \text{к. с.} \quad (17.31) \end{aligned}$$

Сумма берется по всем возможным состояниям на узле g_3 , каждое из которых характеризуется набором $\{n_q^{(3)}\}$. Если возмущение включается адиабатически, т. е. $V_{ij} \sim e^{st}$ при $-\infty < t < 0$, то интегралы по времени в (17.27) и (17.28) легко берутся. В результате для линейного по H члена в (17.31) имеем

$$\begin{aligned} W_3^{(H)} = \frac{\alpha_{13} + \alpha_{32} + \alpha_{21}}{\hbar^3} \sum_{2,3} V_{13} V_{32} V_{21} \frac{1}{\omega_{21} - is} \times \\ \times \left(\frac{1}{\omega_{31} + is} - \frac{1}{\omega_{31} - 2is} \right) + \text{к. с.} \quad (17.32) \end{aligned}$$

Это выражение получается при разложении $\exp(i\alpha_{ij})$ в степенной ряд по α_{ij} в пренебрежении всеми членами, кроме линейного. Используя тождество

$$\lim_{s \rightarrow 0+} (1/(\omega \mp is)) = P(1/\omega) \pm i\pi\delta(\omega)$$

и интегральное представление для δ -функции Дирака $\delta(\omega)$, выражение (17.32) можно преобразовать к виду

$$W_3^{(H)} = - \frac{\alpha_{13} + \alpha_{32} + \alpha_{21}}{\hbar^3} \sum_{2,3} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 V_{13} V_{32} V_{21} e^{i\omega_{31}t_1} e^{i\omega_{21}t_2}. \quad (17.33)$$

Эта формула соответствует «виртуальным» переходам, сохраняющим энергию в промежуточном состоянии; другие члены в $W_3^{(H)}$ сокращаются.

При вычислении $W_3^{(H)}$ вычитаются вклады от «частично» диагональных переходов, которые характеризуются $\{n_q^{(1)}\} = \{n_q^{(1)}\} \neq \{n_q^{(3)}\}$, и от «полностью» диагональных переходов, для которых $\{n_q^{(1)}\} = \{n_q^{(2)}\} = \{n_q^{(3)}\}$. Из-за точного сохранения энергии эти вклады пропорциональны t и t^2 соответственно. Однако при $T > T_t$ вероятность того, что диагональный переход произойдет за время жизни локализованного состояния, которое определяется недиагональными переходами, мала по сравнению с единицей. Интегрирование по t_1 и t_2 для недиагональных вкладов

проводится с помощью метода скорейшего спуска. Этот метод применим при условии

$$\frac{1}{N} \sum_q \gamma_{qh} \operatorname{csch}(\beta \hbar \omega_q / 2) \gg 1. \quad (17.34)$$

В результате интегрирования в области классически высоких температур $\hbar \omega_q \ll k_B T$ получим

$$W_3^{(H)} = e (N A_{321}) \frac{1}{\hbar c} W_0^{(0)}, \quad (17.35)$$

где член $W_0^{(0)}$, не зависящий от электрического и магнитного полей, равен

$$W_0^{(0)} = \frac{J^3}{\hbar} \frac{2\pi}{3\sqrt{3} k_B T E_3} \exp\left(-\frac{E_3}{k_B T}\right). \quad (17.36)$$

Здесь E_3 — трехузельная энергия активации

$$E_3 = \frac{1}{N} \sum_q \frac{A^2}{3M\omega_q^2} (1 - \cos(qh)). \quad (17.37)$$

Если сравнить эту энергию с энергией активации двухузельного прыжка E_a (13.67), то видно, что

$$E_3 = \frac{4}{3} E_a. \quad (17.38)$$

Таким образом, энергия активации для трехузельного процесса перескока E_3 меньше энергии, которая определяет вероятность двух некоррелированных прыжков. Эта последняя вероятность пропорциональна $\exp(-2E_a/k_B T)$. Энергию E_3 можно интерпретировать как минимальное превышение энергии связи E_b , возникающее в том случае, когда имеет место энергетический резонанс между тремя соседними узлами одновременно (т.е. $-Ax_{m_1} = -Ax_{m_2} = -Ax_{m_3}$). Тогда каждый из этих трех узлов окружен одной и той же деформацией. Фридман и Холстейн показали, что соотношение (17.38) справедливо для произвольной геометрии решетки при условии, что можно пренебречь дисперсией колебаний решетки $\omega_1 = 0$. Если $\omega_1 \neq 0$ и структура решетки не треугольная, то вышеприведенное соотношение между E_3 и E_a , по-видимому, не имеет места *).

С помощью зависящей от магнитного поля скорости перехода $W_3^{(H)} = W^{(H)} (i \rightarrow j \rightarrow k)$ и скорости перехода низшего порядка $W_2^{(0)} = W^{(0)} (i \rightarrow k)$ можно вычислить коэффициент Холла. Эффект Холла определяется результирующей дрейфовой скоростью, возникающей от всех возможных скоростей прыжков, зависящих от магнитного поля и связывающих данный узел со всеми его ближайшими соседями. Для треугольной решетки, единичная

*) Это утверждение совершенно справедливо (см. гл. V части II). Поэтому в общем случае μ_H не пропорциональна $\exp(-E_a/3k_B T)$. (Прим. ред.)

ячейка которой показана на рис. 22, ближайшие соседи образуют шестиугольник (рис. 23). Электрическое поле E направлено вдоль оси x в плоскости кристалла; магнитное поле направлено вдоль оси z . Асимметрия, связанная с магнитным полем H , приводит к конечному эффекту Холла. Например, зависящая от магнитного поля скорость прыжка $W^{(H)}$ ($1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$) не равна $W^{(H)}$ ($1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$).

Полная дрейфовая скорость электрона, находившегося первоначально на узле i (см. рис. 23, $i = 1$), дается выражением

$$\mathbf{v} = \sum_k \mathbf{h}_{ik} W(i \rightarrow k), \quad (17.39)$$

где \mathbf{h}_{ik} — вектор, связывающий ближайшие соседние узлы \mathbf{g}_i и \mathbf{g}_k , а $W(i \rightarrow k)$ — полная скорость прыжка в первом порядке по H . Дрейфовую скорость удобно представить в виде

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^{(0)} + \mathbf{v}^{(H)}, \quad (17.40)$$

где

$$\mathbf{v}^{(0)} = \sum_k \mathbf{h}_{ik} W_E^{(0)}(i \rightarrow k), \quad (17.41)$$

$$W_E^{(0)}(i \rightarrow k) = \exp\{eE\mathbf{h}_{ki}/2k_B T\} W^{(0)}(i \rightarrow k), \quad (17.42)$$

а $W^{(0)}(i \rightarrow k)$ определяется уравнением (13.64) и где скорость

$$\mathbf{v}^{(H)} = \sum_k \mathbf{h}_{ik} W_E^{(H)}(i \rightarrow j \rightarrow k), \quad (17.43)$$

$$\begin{aligned} W_E^{(H)}(i \rightarrow j \rightarrow k) &= \exp\left[\frac{eE(\mathbf{h}_{jl} + \mathbf{h}_{kl})}{3k_B T}\right] W_0^{(H)}(i \rightarrow j \rightarrow k) = \\ &= \exp\left[\frac{eE(\mathbf{h}_{jl} + \mathbf{h}_{kl})}{3k_B T}\right] (e\mathbf{H}\mathbf{A}_{kjl}/\hbar c) W_0^{(0)}. \end{aligned} \quad (17.44)$$

(Величина $W_0^{(0)}$ определена формулой (17.36).) Больцмановский множитель, зависящий от электрического поля, возникает из-за малой разности энергий электрона, локализованного на разных узлах. При наличии электрического поля эта разность энергий электрона, локализованного на соседних узлах \mathbf{g}_i и \mathbf{g}_j , есть $\hbar\omega_{ij} + eE\mathbf{h}_{ij}$, а ω_{ij} дается выражением (17.29). Точное вычисление суммы в (17.41) и (17.42) приводит к следующему выражению для холловского угла:

$$\operatorname{tg} \theta = v_y^{(H)} / v_x^{(0)} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{W_0^{(H)}}{W_0^{(0)}}. \quad (17.45)$$

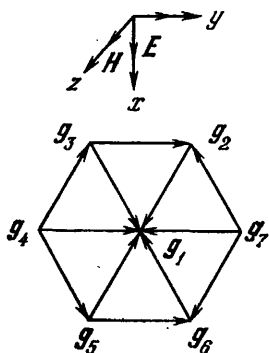


Рис. 23. Структура треугольной решетки [161]. Элементарные трансляции в плоскости, перпендикулярной гексагональной оси.

Здесь $v_y^{(H)}$ — компонента дрейфовой скорости в y -направлении, зависящая от H и связанная с тем, что холловское поле направлено вдоль оси y . Используя (17.2) и (17.45) для холловской подвижности, получим

$$\mu_H^{(\text{треуг})} = \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{e}{\hbar} \frac{\sqrt{3}}{4} a^2 \right) J \left(\frac{\pi}{4k_B T E_a} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{E_a - E_a}{3k_B T} \right). \quad (17.46)$$

Дрейфовая подвижность

$$\mu_D = \frac{ea^2}{k_B T} \frac{J^2}{\hbar} \left(\frac{\pi}{4k_B T E_a} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{E_a}{k_B T} \right). \quad (17.47)$$

Холловская подвижность больше дрейфовой, если $k_B T > J$. Однако это условие выполнено, так как $k_B T \gg \hbar \omega_0$ и $J \leq \hbar \omega_0$. Для кубических кристаллов более подходящей моделью является квадратная решетка. Соответствующая холловская подвижность приближенно имеет вид *)

$$\mu_H^{(\text{квадр})} \approx \frac{J}{E_a} \mu_H^{(\text{треуг})}. \quad (17.48)$$

Легко найти коэффициент Холла из соотношения

$$R = - \frac{1}{nec} \frac{\mu_H}{\mu_D}. \quad (17.49)$$

Значение R больше нормального — $1/nec$ как для треугольной, так и для квадратной решеток. На рис. 24 построена холловская подвижность для случая треугольной решетки и $J = \hbar \omega_0 =$

$= 0,04 \text{ эв}$, $\gamma = 10$, $E_a = 0,2 \text{ эв}$, $a = 4 \text{ \AA}$. В общем случае постоянной Холла и холловская подвижность в области прыжковой проводимости зависят от структуры, так как существует интерференция между переходом первого порядка, связывающим ближайших соседей прямо, и переходом n -го порядка, связывающего их через $n - 1$ промежуточное состояние.

Наименьшее возможное число промежуточных состояний зависит от структуры решетки. Для треугольной решетки $n - 1 = 1$; для квадратной решетки $n - 1 = 2$, так что появляется дополнительный множитель J в соотношении (17.48).

*) Это соотношение не выполняется для кубических кристаллов даже приближенно, поскольку в общем случае $E_4 \neq E_3$, $E_3 \neq \frac{4}{3} E_a$ (см. гл. V части II). (Прим. ред.)

В режиме зонного движения полярона вычисление эффекта Холла было проведено Фридманом [190]*), формально аналогично расчету в приближении обычной сильной связи. Однако поскольку ширина поляронной зоны $\Delta E(T) \ll k_B T$, то в отличие от случая широкозонных полупроводников достаточно вычислить электропроводность σ_y в (17.1) в первом порядке по H и наименьшем не исчезающем порядке по $\Delta E/k_B T$. В результате эффект Холла зависит от структуры, так же как и в режиме прыжковой проводимости. Результаты имеют вид **)

$$R = -\frac{1}{\text{пес}} \quad (\text{квадратная решетка}), \quad (17.50)$$

$$R = -\frac{1}{\text{пес}} \frac{1}{6} \frac{k_B T}{\Delta E(T)} \quad (\text{треугольная решетка}). \quad (17.51)$$

В заключение упомянем следующий интересный формальный результат. Влияние магнитного фазового множителя $\alpha_{g, g+h}$ в зависящем от поля резонансном интеграле (17.15) учитывается в уравнении Больцмана обычным членом с силой Лоренца

$$-\frac{e}{m^{**}c} [\mathbf{vH}] \nabla_v f \quad \text{в} \quad (\partial/\partial t)_t.$$

§ 18. Высокочастотная подвижность

Для поляронов большого радиуса и $\alpha < 1$ частотная и температурная зависимость высокочастотной подвижности и оптических постоянных (коэффициента преломления n и коэффициента экстинкции k) определяется взаимодействием свободных электронов или дырок с оптическими фононами. Коэффициент поглощения $K = 2\omega kc$ меняется как $\omega^{-1/2}$ при $\omega^2 \langle \tau^2 \rangle \gg 1$ и не зависит от температуры [141а, 141б]. Этот результат не сильно отличается от результата, полученного в случае акустического рассеяния свободных электронов, когда коэффициент поглощения дается формулой Друде — Зинера и меняется с частотой как ω^{-2} при $\omega^2 \langle \tau^2 \rangle \gg 1$ [30]. Здесь время релаксации τ не зависит от энергии. С другой стороны, в случае сильной связи $\alpha \geq 5$ высокочастотная производимость полярона имеет резонансы при частотах $\omega > \omega_0$. Эти резонансы отражают внутреннюю структуру полярона большого радиуса, когда связь сильная. Однако такая резонансная структура еще не наблюдалась экспериментально***). Возможно, что причина этого в том, что в случае сильного электрон-решеточного взаимодействия гамильтониан Фрелиха

*) Эта же задача была независимо решена с помощью формулы Кубо в «зонном» режиме в [163], где были получены похожие результаты. (Прим. ред.)

***) Результат (17.50) практически не имеет области применимости. В (17.51) вместо $1/6$ должен стоять множитель $1/2$. Подробнее см. § 8 гл. V во II-й части книги (Прим. ред.)

****) См. примечание о работе Фейнмана и др. [4] в конце § 9.

мало пригоден для описания истинной физической природы полярного состояния. Мы имеем в виду следующее. Представление о поляроне как о квазичастице, описываемой плоской волновой функцией, ошибочно даже в том случае, когда удается правильно учесть внутреннюю структуру полярона большого радиуса, как это, например, сделано в теориях сильной связи Пекара и Фейнмана. Вместо этого, мы думаем, что собственные состояния полярона в кристаллической решетке более адекватно описываются в виде линейной суперпозиции атомных орбиталей, посредством чего внутренний характер полярона учитывается соответствующим фазовым множителем в собственной функции типа (13.3). Такое представление согласуется с представлением о том, что электрон долго вращается около иона перед тем, как перейти на соседний ион. Мы видели в § 13, что электрон блуждает от одного иона к другому либо с помощью обычного туннельного просачивания через потенциальный барьер (диагональные переходы), либо с помощью прыжков, активированных фононами (недиагональные переходы). Особенно интересно влияние недиагональных переходов на частотную и температурную зависимости подвижности. Если для недиагональных переходов частотная и температурная зависимости высокочастотной подвижности сильно отличаются от соответствующих зависимостей для диагональных переходов, то измерение $\mu(\omega)$ может быть использовано для выяснения относительной важности недиагональных переходов. Имеется ряд различных экспериментальных ситуаций, в которых высокочастотная подвижность определяется переходами, связанными с фононами. Здесь мы обсудим высокочастотную подвижность в следующих случаях: 1) недиагональные прыжковые переходы полярона малого радиуса в периодической решетке; 2) недиагональные прыжковые переходы полярона малого радиуса, связанного на дефектах решетки, таких, как вакансии и примесные атомы и 3) переходы между двумя зонами полярона малого радиуса и широкой валентной зоны.

В первом случае частотная и температурная зависимости проводимости изучались Рейком и Хизе [191, 192], Клингером [164, 193] и Генкиным [194]*). Генкин исходил из уравнения (16.22) низшего порядка для проводимости полярона малого радиуса $s = \epsilon + i\omega$. Однако интегрирование по времени было проведено недостаточно корректно, а поэтому его результат отличается от результата Клингера и Рейка. Эти два автора, используя формулу Кубо (14.9) и модель полярона малого радиуса, обсужденную в § 13, вычислили высокочастотную проводимость в наинишем порядке по J и получили одинаковые результаты, хотя их

) См. также работы [21—23*, 4*] и гл. III части II. Задача о поглощении света поляронами малого радиуса за счет активированных светом перескоков с узла на узел («внутризонное» поглощение) была впервые рассмотрена в [22*]. (Прим. ред.)

методы отличались *). Рейк использовал прямое интегрирование, что позволило правильно воспользоваться методом седловой точки, когда $\omega \neq 0$. Проводимость записывается в виде (14.9)

$$\sigma(\omega, t) = \int_{-\infty}^0 dt e^{i(\omega - i\varepsilon)t} \int_0^{\beta} j(t - i\hbar\lambda) j(0) d\lambda, \quad (18.1)$$

где $e^{\varepsilon t}$ описывает адиабатическое включение высокочастотного электрического поля. Для математического удобства контур интегрирования для временной переменной t деформируется как показано на рис. 25. Параметр ψ позднее определяется как функция ω , когда проводится интегрирование по t . Согласно рис. 25 проводимость состоит из трех частей

$$\sigma(\omega, T) = \sigma_1(\omega, T) + \sigma_2(\omega, T) + \sigma_3(\omega, T). \quad (18.2)$$

Ясно, что σ_1 обращается в нуль, а два других члена легко найти, и они имеют вид

$$\sigma_2(\omega, t) = \beta \frac{\sin(\beta\hbar\omega/2)}{\beta\hbar\omega/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\hbar\omega\beta\psi\right) \times \int_{-\infty}^0 dt \exp(i(\omega - \varepsilon)t) \langle j\left(t - \frac{1}{2}i\hbar\beta[1 - \psi]\right) j(0) \rangle \quad (18.3)$$

и

$$\sigma_3(\omega, T) = -i\hbar \int_0^{\beta} d\lambda e^{-\hbar\omega\lambda} \int_{\frac{1}{2}\beta(1-\psi)}^{\lambda} d\xi e^{\hbar\omega\xi} \langle j(-i\hbar\xi) j(0) \rangle. \quad (18.4)$$

В модели Холстейна полярона для недиагональных переходов корреляционная функция токов дается в наинизшем неисчезающем порядке по резонансному интегралу J выражением (см., например, [205])

$$\langle j(z) j(0) \rangle = \frac{2J^2 e^{2n}}{\hbar^2} e^{-2S_T} P(z, \beta), \quad (18.5)$$

где S_T дается уравнением (13.62), а

$$P(z, \beta) = \exp\left\{ \frac{2}{N} \sum_q \gamma_q \frac{\cos[\omega_q(z + 1/2) i\hbar\beta]}{\text{sh}(\beta\hbar\omega_q/2)} \right\} - 1. \quad (18.6)$$

* Результаты, полученные в [164, 191, 193] для области низких температур ($k_B T \ll \hbar\omega_0/2$), ошибочны. Так, например, в [193] содержится неверное утверждение о том, что при $k_B T < \hbar\omega_0/2$ резонансный пик поглощения должен исчезать. (Прим. ред.)

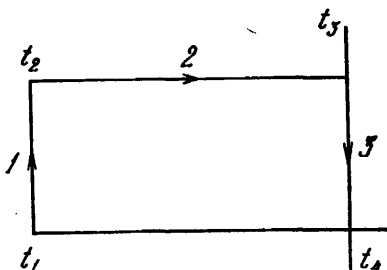


Рис. 25. Контур интегрирования в комплексной плоскости t для данного значения λ , использованный Рейком и Хизе [192] $t_1 = -\infty$, $t_2 = -\infty + i\hbar\left[\lambda - \frac{1}{2}\beta(1-\psi)\right]$, $t_3 = i\hbar\left[\lambda - \frac{1}{2}\beta(1-\psi)\right]$, $t_4 = 0$.

Вышеприведенное выражение для корреляционной функции токов содержится в этой форме в выражении (16.22) для проводимости на постоянном токе в низшем порядке по J . Рейк заметил, что для достаточно сильного электрон-решеточного взаимодействия для достаточно высоких температур и значений z , близких к седловой точке, $P(z, \beta)$ может быть аппроксимировано простой функцией, а именно, гауссовой функцией. Условия справедливости такой замены состоят из условия (13.63) и

$$|\omega_q| (z + 1/2 i \hbar \beta) \leq 1 \quad \text{для всех } q. \quad (18.7)$$

Тогда $P(z, \beta)$ можно аппроксимировать гауссовой функцией

$$P(z, \beta) = \exp \left[\frac{2}{N} \sum_q \gamma_q \operatorname{csch} \frac{\beta \hbar \omega_q}{2} \right] \exp \left[- \frac{(z + 1/2 i \hbar \beta)^2}{4 \tau_0^2} \right], \quad (18.8)$$

где

$$\tau_0 = t_0/4. \quad (18.9)$$

Время t_0 , определяемое выражением (16.27), не есть время релаксации, оно соответствует длительности прыжка и по порядку величины равно $\hbar / (E_a k_B T)^{1/2}$. Время жизни локализованного состояния τ много больше t_0 согласно (15.6). Из (18.8) видно, что высота и острота седловой точки растут с увеличением температуры. Вид корреляционной функции токов (18.5) и (18.8) допускает интегрирование в явном виде, что позволяет найти вещественную и мнимую части высокочастотной проводимости. Для этой цели параметр ψ определяется таким образом, чтобы подынтегральное выражение

$$\exp(i\omega t) \langle j(t - 1/2 i \hbar \beta) [1 - \psi] j(0) \rangle$$

имело седловую точку при $t = 0$. С помощью этого трюка результат интегрирования имеет вид

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega, T) = \sigma_2(\omega, T) = \sigma(0, T) \frac{\operatorname{sh}(2\Gamma\omega\tau_0)}{2\Gamma\omega\tau_0} \exp(-\omega^2\tau_0^2), \quad (18.10)$$

$$\operatorname{Im} \sigma(\omega, T) = -i\sigma_3(\omega, T) = -i\sigma(0, T) \pi^{-1/2} \frac{1}{\omega\tau_0} \exp(\Gamma^2) \times$$

$$\times \left\{ - \int_0^1 d\xi \exp[-\Gamma^2(2\xi - \xi^2)] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\omega\tau_0}{\Gamma}\right) \int_0^1 d\xi \exp[(\omega\tau_0 - \Gamma^2)(\xi^2 - 2\xi)] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\omega\tau_0}{\Gamma}\right) \int_0^1 d\xi \exp[(\omega\tau_0 + \Gamma^2)(\xi^2 - 2\xi)] \right\}. \quad (18.11)$$

$$\Gamma = \hbar\beta/4\tau_0. \quad (18.12)$$

Частотные зависимости $\text{Re } \sigma(\omega, T)$ и $\text{Im } \sigma(\omega, T)$ представлены на рис. 26, а и 26, б соответственно для разных значений параметра Γ . Эти функции используются в § 20 при сравнении с экспериментальными данными.

Обсудим теперь перескоки электронов или дырок около решеточного дефекта в полярном кристалле. В случае NiO такой дефект может состоять из двух дырок, связанных с катионной вакансией. Так же как в совершенном кристалле, между ионами

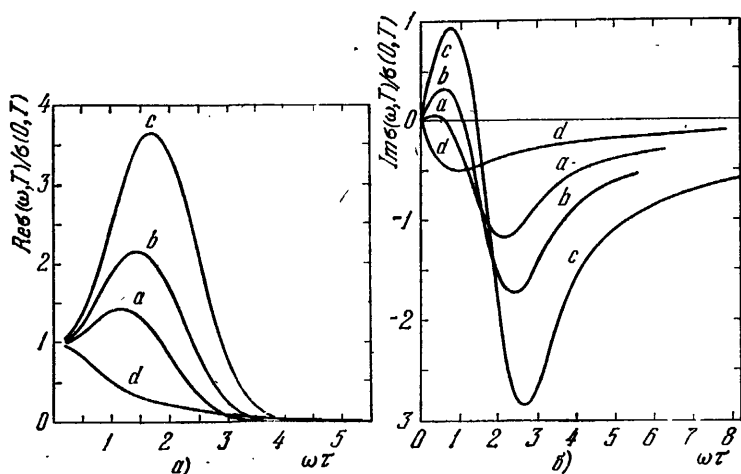


Рис. 26. Зависимости вещественной (а) и мнимой (б) частей проводимости от нормированной частоты $\omega \tau$ для различных значений параметра Γ [192]. а — $\Gamma=1,6$; б — $\Gamma=1,8$; с — $\Gamma=2,0$; д — по формуле Друде.

могут происходить как обычные туннельные переходы, так и прыжковые переходы, активированные фононами. Существенный параметр, определяющий вклад данного типа переходов, — резонансный интеграл J или частота фонона ω_0 в частном случае адиабатических надбарьерных переходов — будет несколько отличаться от соответствующего параметра для идеального кристалла, так как дефектный узел окружен деформацией решетки. Это возмущение решетки обсуждалось Брауэром [195, 196], в частности для случая примесных ионов в щелочно-галогидных кристаллах. Движение носителя вокруг дефекта приводит к потерям. Если прыжковые переходы доминируют над туннельными процессами, система обладает частотной зависимостью потерь, которая характерна для дебаевского диэлектрика [197, 198]. Потери имеют максимум около частоты $(2\pi\tau)^{-1}$, где τ — время жизни локализованного поляронного состояния. С другой стороны, если доминируют диагональные переходы, то система сильно поглощает энергию на частоте порядка частоты туннелирования J/\hbar . В дебаевском случае частота максимума растет с повышением температуры как $\tau^{-1}(T)$, в то время как в случае

туннелирования частота максимума постоянна. Нас интересует здесь дебаевский случай, т.е. случай, когда потери связаны с прыжковыми переходами. Соответствующую частотную зависимость высокочастотной проводимости можно получить из теории Сьюелла [198] диэлектрических свойств двухузельной модели. Носитель может занимать только два эквивалентных локализованных состояния. Он может двигаться либо туннелируя, либо совершая прыжок, активированный фононами. Электрический дипольный момент, индуцируемый периодическим полем $E(\omega) e^{i\omega t}$ в момент времени t , имеет вид

$$d(t) = \int_{-\infty}^t \phi(t-t') E(t') dt', \quad (18.13)$$

где функция линейного отклика определяется динамическими свойствами системы. Периодическое поле

$$E(t) = E(\omega) \exp(i\omega t) \quad (18.14)$$

индуцирует дипольный момент

$$d(t) = \phi(\omega) E(\omega) \exp(i\omega t), \quad (18.15)$$

где

$$\phi(\omega) = \int_0^{\infty} \phi(t) \exp(-i\omega t) dt. \quad (18.16)$$

В двухузельной модели функция отклика имеет вид

$$\phi(t) = -\frac{e^2 a^2}{k_B T} \frac{d}{dt} \left[e^{-t/\tau} \cos \frac{Jt}{\hbar} \right]. \quad (18.17)$$

Первый множитель в скобках учитывает прыжковые переходы, второй — туннельные переходы, a — расстояние между двумя узлами. Мы предполагаем, что при $t \leq \tau$ аргумент косинуса Jt/\hbar много меньше 1, так что косинус можно заменить на 1. В этом случае, когда прыжковые переходы доминируют над туннельными, фурье-преобразование функции отклика имеет вид

$$\phi(\omega) = \frac{e^2 a^2}{k_B T} (1 - i\omega\tau) \frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2}. \quad (18.18)$$

Если имеется n связанных носителей в 1 см^3 , то полный дипольный момент есть $n\phi(\omega)$, а диэлектрическая проницаемость

$$\epsilon(\omega) = 4\pi n \phi(\omega). \quad (18.19)$$

Комплексная электропроводность дается выражением [149]

$$\sigma(\omega) = \text{Re } \sigma(\omega) + i \text{Im } \sigma(\omega), \quad (18.20)$$

где

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) = \frac{ne^2a^2}{k_B T} \frac{\omega^2\tau^2}{\tau(1 + \omega^2\tau^2)} \quad (18.21)$$

и

$$\operatorname{Im} \sigma(\omega) = \frac{ne^2a^2}{k_B T} \frac{\omega\tau}{\tau(1 + \omega^2\tau^2)}. \quad (18.22)$$

Выражения для проводимости такого вида были впервые получены Поллаком и Джеболлом [199] при интерпретации экспериментальных результатов по низкочастотной проводимости в кремнии, обусловленной прыжками электрона вокруг акцептора или донора. При низких частотах вещественная часть проводимости мала и растет как ω^2 , в то время как мнимая часть пропорциональна ω . Пока поляризация может следить за приложенным полем, то производная по времени от поляризации, т. е. проводимость, будет сдвинута почти на 90° по фазе и будет иметь малую вещественную часть. Когда ω превышает $1/\tau$, поляризация не может не отставать от приложенного поля, и ее величина уменьшается. Наконец, когда $\omega \gg 1/\tau$, величина поляризации уменьшается как $1/\omega$, а вещественная часть проводимости становится не зависящей от ω . При таких высоких частотах равновесное распределение, соответствующее нулевому полю, практически не успевает перераспределиться под действием высокочастотного поля. Поляризация будет мала, в то время как проводимость имеет большую (и постоянную) часть, совпадающую по фазе с полем (или вещественную часть).

Игльс [200] изучил оптическое поглощение, возникающее при переходах между зонами полярона малого радиуса и между полярной зоной и широкой валентной зоной. В широкой валентной зоне пренебрегается взаимодействием электронов и фононов, в то время как в зонах полярона малого радиуса учитывается взаимодействие с продольными оптическими фононами. Поглощение вычисляется в первом порядке по взаимодействию света. Предсказан интересный результат для поглощения, связанного с переходами между полярными зонами. При энергиях $E_g + p\hbar\omega_0$ появляется ряд линий поглощения (E_g — ширина запрещенной зоны, p — целое число). Интегральное поглощение от всех линий, взятых с весом, равным произведению энергии фотона на коэффициент преломления, пропорционально $S_0^p/p!$, где S_0 определяется формулой (13.39). Этот результат справедлив, если в процессе поглощения электрон переходит с начального иона на соседний ион. Если имеет место переход на том же узле, то S_0 должно быть заменено несколько другой величиной, которая также зависит от силы электрон-решеточного взаимодействия *).

) Вопрос о междузонном поглощении света поляронами малого радиуса подробно исследовался в [23, 24*]. (Прим. ред.)

§ 19. Термо-э. д. с.

Термо-э. д. с. для поляронов малого радиуса в области прыжковой проводимости представляет значительный интерес. Сравнение теории с экспериментом позволяет прямо определить число поляронов малого радиуса, которые могут двигаться и принимать участие в электропроводности. Это число можно найти также и из измерений эффекта Холла. Однако холловская подвижность в области прыжковой проводимости мала, $\mu_n \ll \ll 1 \text{ см}^2 \cdot \text{в}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$, так что точные измерения затруднены.

Абсолютная термо-э. д. с. определяется как напряжение на один градус Кельвина, возникающее на концах разомкнутой цепи, когда вдоль цепи имеется градиент температуры. Цепь может быть и однородным образцом. Полный ток, протекающий через любое поперечное сечение этого образца, равен нулю, так что число «горячих носителей», движущихся к холодному концу, равно числу «холодных носителей», движущихся в противоположном направлении под влиянием термоэлектрического поля. Термоэлектрические эффекты определяются следующими уравнениями для электрического тока \mathbf{j} и плотности потока тепла \mathbf{W} :

$$\mathbf{j} = L_{11} [\mathbf{E} + (T/e) \nabla (\varepsilon_F/T)] + L_{12} (\nabla T/T), \quad (19.1)$$

$$\mathbf{W} = -L_{21} \left[\mathbf{E} + \frac{T}{e} \nabla (\varepsilon_F/T) \right] - L_{22} (\nabla T/T), \quad (19.2)$$

где L_{ik} — кинетические коэффициенты в изотропном веществе; вследствие соотношения Онсагера $L_{12} = L_{21}$ [201]. Заряд электрона равен $-e$. Через эти кинетические коэффициенты выражаются электропроводность $\sigma = L_{11}$, теплопроводность $\kappa = \frac{1}{T} (L_{22} - L_{21}^2/L_{11})$ и абсолютная термо-э. д. с.

$$- \mathcal{E}/e = \frac{1}{T} [\varepsilon_F/e - L_{12}/L_{11}]. \quad (19.3)$$

Общие выражения для L_{ik} были даны Кубо с сотрудниками [202]. Коэффициент L_{11} определяется корреляционной функцией токов (14.10). Соответственно L_{22} определяется корреляционной функцией операторов потока энергии. Наконец, коэффициент L_{12} , который возникает от перекрестного действия электрического тока и теплового потока, определяется корреляционной функцией «электрический ток — тепловой поток» *).

В низкотемпературной области зонной проводимости полярона коэффициент L_{ik} может быть вычислен обычным образом с помощью времени релаксации для полярон-решеточного взаимодействия [203]. Уравнение (14.10) является примером такого

) Неоднозначность в определении потока при учете энергии электрон-фононного взаимодействия внушает серьезные сомнения относительно обоснованности формулы Кубо при наличии тепловых возмущений, см., например, [25]. (Прим. ред.)

рода. Оно определяет L_{11} , электропроводность. Абсолютная термо-э. д. с. дается формулой Писаренко

$$-\mathcal{E}/e = (k_B/e)(\epsilon_F/k_B T - A). \quad (19.4)$$

Здесь A — постоянная, возникающая из-за того, что заряженный носитель переносит кинетическую энергию. В случае сферических изоэнергетических поверхностей A зависит от функции распределения и энергетической зависимости существенного механизма рассеяния. Для случая распределения Максвелла — Больцмана и времени релаксации, не зависящего от энергии, $A = 5/2$. В этом случае второй член в (19.4) есть 215 мкВ/град . Первый член обычно более важен, чем кинетический член. В невырожденном полупроводнике он имеет вид

$$\epsilon_F/k_B T = \ln(n/N_c), \quad (19.5)$$

где n — концентрация поляронов, а N_c — число состояний в поляронной зоне на расстоянии $k_B T$ от дна зоны. Число состояний, актуальных в задаче об электропроводности, есть

$$N_c = 2(2\pi m^{**} k_B T / \hbar^2)^{3/2}. \quad (19.6)$$

Таким образом, термо-э. д. с. зависит от эффективной массы полярона через химический потенциал. Мы видели в §§ 12 и 13, что масса m^{**} и ширина зоны ΔE полярона малого радиуса зависят от температуры. Масса m^{**} может быть записана, согласно (12.51), в виде $m^{**} = m^*/Y(T)$, где $Y(T) = e^{-S_T}$ — осцилляторный интеграл перекрытия (12.7). Тогда термо-э. д. с. в области зонной проводимости [204] есть

$$-\frac{\mathcal{E}}{e} = \frac{k_B}{e} \left\{ \ln \left[\frac{2(2\pi m^{**} k_B T)^{3/2}}{\hbar^3 n} \right] + \frac{3}{2} \ln Y(T) - A \right\}. \quad (19.7)$$

Из-за сильной температурной зависимости осцилляторного интеграла перекрытия термо-э. д. с. для поляронов малого радиуса имеет более сильную температурную зависимость, чем для электронов в широкозонных полупроводниках *).

В высокотемпературной области, где имеет место прыжковая проводимость, локализованные поляронные состояния имеют одну и ту же энергию $E_0 - E_b$, где E_0 — энергия атомного состояния, а E_b — энергия связи полярона, которая в адиабатическом приближении равна половине энергии деформации решетки. Мы выберем $E_0 = 0$, так же как в § 13. Так как интервал энергий $k_B T$ включает все энергетические уровни полярона, то

*) Это высказывание справедливо лишь в том случае, если при $k_B T > \hbar\omega_0/2$ (когда S_T уже начинает зависеть от температуры) все еще имеет место «зонный» режим (т. е. туннельный или прыжковый механизмы еще не стали определяющими в переносе) и зона все еще широка, т. е. $2Je^{-S_T} > k_B T$.

(Прим. ред.)

можно предположить, что в области прыжковой проводимости в первом члене в (19.4) следует заменить N_c на N — число тех атомов в единице объема, по которым происходят перескоки. Эта процедура в действительности правильная. Шотте [205] на основе гамильтониана Холстейна ($E_0 = 0$) вычислил три корреляционные функции, появляющиеся в кинетических коэффициентах L_{11} , L_{12} , L_{22} в наинизшем неисчезающем порядке по J . Его результат имеет вид

$$\mathcal{G} = -\frac{1}{T} (\epsilon_F + E_b - L_{12}/L_{11})_0, \quad (19.8)$$

где индекс нуль означает, что L_{11} , L_{12} вычислены в наинизшем неисчезающем порядке по J , причем отношение L_{12}/L_{11} не зависит от J , а ϵ_F определяется матрицей плотности нулевого порядка

$$\rho_0 = \frac{\text{Sp} \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}'_0) \frac{1}{N} \sum_p a_p^+ a_p \right\}}{\text{Sp} \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}'_0) \right\}}. \quad (19.9)$$

Здесь \mathcal{H}'_0 — гамильтониан нулевого порядка в узельном представлении

$$\mathcal{H}'_0 = \sum_p (\epsilon_F + E_b) a_p^+ a_p + \sum_q \hbar \omega_q \left(b_q^+ b_q + \frac{1}{2} \right). \quad (19.10)$$

Вычисление шпура приводит к следующему уравнению для ρ_0 ($\ll 1$):

$$\epsilon_F + E_b = k_B T \ln \rho_0. \quad (19.11)$$

Отношение L_{12}/L_{11} равно $-E_b$ в наинизшем неисчезающем порядке по возмущению $\mathcal{H}_1 \sim J$. Поэтому термо-э. д. с. есть *)

$$-\frac{\mathcal{G}}{e} = -\frac{1}{T} \frac{\epsilon_F}{e} \approx -\frac{k_B}{e} \ln \frac{n}{N}. \quad (19.12)$$

Знак приближенного равенства используется потому, что ρ , которое получается в правой части (19.9), когда \mathcal{H}'_0 заменяется на \mathcal{H}' , отличается от ρ_0 членами второго и более высокого порядка по $(J/k_B T)^2$ при условии, что этот параметр мал. Химический потенциал измеряется относительно $E_0 - E_b$, как показано на рис. 27.

Из (19.12) можно извлечь интересный физический факт: отсутствие кинетического члена. Другими словами, не существует

) М. И. Клингер [164, 164а] также использовал формулу Кубо для вычисления термо-э. д. с. Конечные формулы термо-э. д. с. в [164] и [164а] отличаются друг от друга. Результат, полученный в [164], совпадает с (19.12), однако при выводе допущена ошибка. Результат более поздней работы [164а] существенно отличается от (19.12). Критика работ [164, 164а] содержится в работе [25] А. Л. Эфроса, который находил термо-э. д. с. без использования формулы Кубо и тоже пришел к (19.12). Его расчеты выполнены в предположении малой дисперсии ($\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$) и короткодействия и справедливы при произвольных η_2 , но $\eta_2 \ll 1$. (Прим. ред.)

вклада, соответствующего переносу кинетической энергии, как в случае зонных поляронов. Различные авторы высказывали мысль, что перенос энергии поляризации порядка E_b сопутствует перескокам полярона под действием градиента температуры [206, 207]; однако не имеется никакого существенного переноса энергии поляризации, связанного с прыжковым движением. Перенос тепла, т. е. eL_{12}/L_{11} по крайней мере порядка $k_B T$, а не E_b . Разумный физический аргумент в пользу малости переноса тепла основан на том, что прыжок происходит лишь в том

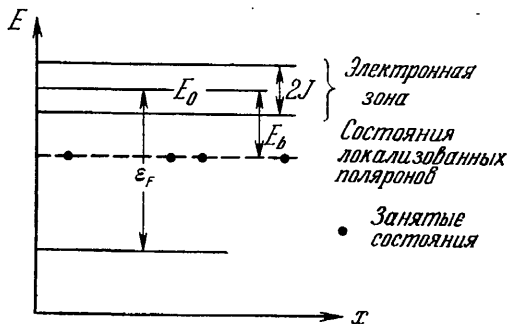


Рис. 27. Схема энергетических уровней для локализованного полярона малого радиуса J — резонансный интеграл, E_0 — энергия атомного состояния, E_b — энергия связи полярона; ϵ_F — химический потенциал.

случае, когда конфигурация смещений на начальном узле эквивалентна конфигурации смещений на конечном узле. Но в этом случае и не должна переноситься никакая энергия поляризации. Другими словами, сумма энергий всех испущенных фононов равна сумме энергий всех поглощенных фононов. В общем случае прыжки происходят, когда занятое начальное и незанятое конечное состояния совпадают по энергиям, но при этом деформация решетки в конечном состоянии не обязательно такая же, как в начальном состоянии. В таком единичном акте имеет место перенос энергии поляризации. Поэтому в единичном акте энергия фононов либо отдается, либо забирается от решетки. Однако если провести усреднение по многим прыжкам, то в среднем никакая энергия решетке не передается, и энергия поляризации при движении полярона не переносится.

§ 20. Эксперимент

Имеются ли экспериментальные доказательства существования локализованных поляронов малого радиуса и прыжкового механизма движения, активированного фононами? Ответ на обе части этого вопроса — да.

Кастнер и Кенциг [7], используя магнитный резонанс, открыли автолокализованные дырочные состояния в щелочно-галогидных

кристаллах. Позднее Делбек и др. [208] наблюдали оптическое поглощение на этих дырках. Кроме того, при измерениях температурной зависимости термолюминесценции [209] в некоторых щелочно-галонидных кристаллах было показано, что элементарными актами диффузии через кристалл являются прыжки, активированные фононами. Снауден и Солтсберг [210] ясно показали, что из измерений частотной зависимости вещественной части высокочастотной проводимости, ответственной за поглощение в интервале частот $10^3 - 5 \cdot 10^{10}$ гц, следует прыжковый характер движения поляронов вокруг катионных вакансий. Хаутен и Босман [211] провели исследование температурной зависимости диэлектрических потерь при низких частотах ($\sim 10^6$ гц) в керамических образцах NiO, содержащих малые концентрации Li. В обоих случаях форма пика потерь была похожа на дебаевскую кривую, характеризующуюся одним временем релаксации. Обратное время релаксации соответствует времени жизни на узле заряженных носителей, локализованных около ионов Li^+ и совершающих прыжки вокруг этих примесных ионов. Важность недиагональных прыжковых переходов для высокочастотной проводимости в $BaTiO_3$, $SrTiO_3$ и $LaCoO_3$ была установлена при исследовании отражения и поглощения света в близкой инфракрасной области спектра [212—216]*). Частотная зависимость отражения или поглощения не может быть понята на основе теории Друде для зонных электронов. Однако экспериментальные результаты находятся в достаточно хорошем согласии с теоретическими значениями, полученными из (18.10) и (18.11) для вещественной и мнимой частей прыжковой проводимости.

Механизм проводимости на постоянном токе в NiO и других окислах переходных металлов недостаточно понят, чтобы указать относительную важность прыжкового и зонного движений. Первые работы Морина [217] и Хейкса и Джонстона [218] по температурной зависимости проводимости и коэффициента Зеебека в NiO, легированном Li, дали активационную температурную зависимость подвижности $\mu \sim \exp(-E_a/k_B T)$. Эти наблюдения привели к заключению об автолокализации дырок в d -зоне в NiO. Было предположено, что электропроводность обусловлена прыжками носителей тока между локализованными состояниями [238]. Однако измерения эффекта Холла не подтвердили более ранние результаты о величине и температурной зависимости подвижности. Это расхождение обусловлено влиянием границ зерен.

В настоящее время не существует такого четкого экспериментального доказательства прыжкового характера движения в случае проводимости на постоянном токе, как экспоненциальная температурная зависимость подвижности $\exp(-E_a/k_B T)$. Од-

) Оптические [1, 21*], электрические [26*] и тепловые [26*] измерения, проведенные на рутиле (TiO_2), свидетельствуют в пользу прыжкового механизма переноса в TiO_2 . (Прим. ред.)

нако необходимо отметить, что такая температурная зависимость, согласно (15.9), может ожидаться только при достаточно высоких температурах $k_B T \gg \hbar \omega_0$ и при достаточно сильном электрон-фононном взаимодействии, когда параметр связи $S_0 \gg 1$. С другой стороны, экспериментальное подтверждение прыжков с помощью частотной зависимости проводимости на переменном токе не требует высоких температур. При температурах $T \sim \theta_0/2$ недиагональные переходы определяют частотную зависимость высокочастотной проводимости, которая определяется из диэлектрических потерь на частотах $10^3 \div 10^{11}$ гц [210].

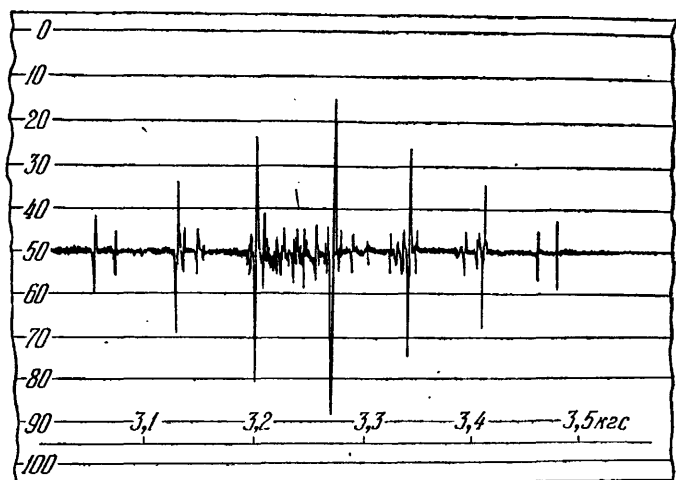


Рис. 28. Парамагнитный резонанс в KCl в статическом магнитном поле, параллельном оси [100] (из [7]).

Что касается высокочастотной проводимости в LaCoO_3 , то даже при гелиевых температурах она существенно определяется недиагональными переходами [212]. Необходимо отметить, что даже если диагональные переходы важны в проводимости на постоянном токе при $T \leq \theta_0/2$, они играют второстепенную роль в высокочастотной проводимости при низких температурах, если достаточно сильно электрон-решеточное взаимодействие, т. е. $S_0 \gg 1$.

А. Щелочно-галогидные кристаллы: электронный спиновый резонанс и термолюминесценция. В 1957 г. Кастнер и Кенциг сообщили об открытии нового типа спектра электронного спинового резонанса в щелочно-галогидных кристаллах LiF , NaCl , KCl , KBr , облученных рентгеновским излучением при низких температурах. Пример такого резонансного спектра показан на рис. 28. В результате количественного анализа было установлено, что резонансные линии связаны с дыркой, локализованной на двух ионах галогенида. Локализация дырки приводит к образованию сильно

связанного молекулярного иона Cl_2^- , ориентированного в направлении $[110]$ кристалла и имеющего межатомное расстояние порядка половины расстояния между двумя ионами Cl^- в совершенном кристалле (рис. 29).

Наиболее характерная черта спектра спинового резонанса, показанного на рис. 28, проявляется в том, что он состоит из семи равностоящих друг от друга линий с отношением интенсивности $1 : 2 : 3 : 4 : 3 : 2 : 1$. Это объясняется тем, что электрон или дырка взаимодействует одинаково с двумя эквивалентными ядрами со спином $3/2$. Оба изотопа хлора: Cl^{35} и Cl^{37} имеют спин $I = 3/2$. Если статическое магнитное поле H_0 ориентировано

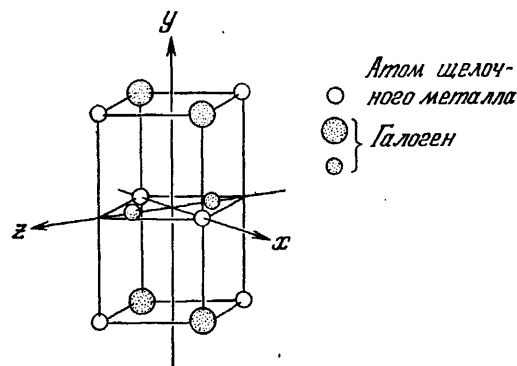


Рис. 29. Ориентация и главные оси молекулярного иона галоген $_2^-$ в кристалле [7].

вдоль оси молекулярного иона Cl_2^- , скажем, вдоль оси z , то условие резонанса имеет вид

$$\omega_r = \hbar^{-1} [g_{zz}\beta H_0 + a_z(m_1 + m_2)], \quad (20.1)$$

где g_{zz} — g -фактор, β — магнетон Бора $e\hbar/2m_0c$, a_z — константа сверхтонкого взаимодействия, возникающая от члена $I_2 S_z$ в спиновом гамильтониане для электронного спина $S [7]$.

Частота резонанса зависит от суммы $m_1 + m_2$ квантовых чисел спинов двух ядер. Наибольшее значение $m_1 + m_2$ есть $3/2 + 3/2 = 3$. Далее, $m_1 + m_2 = 3/2 + 1/2 = 2$. Это же значение можно получить, если $m_1 + m_2 = 1/2 + 3/2$, а поэтому линия с $m_1 + m_2 = 2$ будет иметь удвоенную интенсивность по сравнению с линией $m_1 + m_2 = 3$. В общем случае эти рассуждения приводят к соотношению интенсивностей, приведенному выше. Таким образом, семь основных линий и отношение их интенсивностей могут быть объяснены на основе модели Cl_2^- . Количественная интерпретация резонансного спектра основана на модели молекулярных орбиталей для p -дырки на молекулярном ионе Cl_2^- . Более тонкие черты резонансного спектра, такие, как расстояние между семью главными линиями и наличие более слабых линий могут быть объяснены, если учесть: а) различные магнитные моменты различных изотопов Cl , б) анизотропию g -фактора и сверхтонкого расщепления, в) влияние спинорбитальной связи.

Детальное обсуждение этих трех вопросов было дано Сликтером [219]. Несомненность интерпретации экспериментов Каствнера и Кенцига дает прямое экспериментальное доказательство суще-

ствования локализованных дырок в щелочно-галогидных кристаллах. Вскоре после этого открытия Делбек и другие [208] наблюдали оптическое поглощение молекулярными ионами Cl_2^- . Были обнаружены две полосы поглощения, которые можно объяснить на основе той же модели молекулярных орбит, которая использовалась при анализе спектра парамагнитного резонанса.

Молекулярный ион Cl_2^- можно рассматривать как полярон малого радиуса, локализованный на двух ионах Cl^- . Можно возразить, что молекулярный ион существует и в свободном состоянии и что его образование есть скорее следствие благоприятной химической связи, чем поляризации смещения решетки. Однако на примере NiO [180] было видно, что в общем случае локализованными волновыми функциями полярона малого радиуса являются молекулярные орбитали, которые более или менее «деформированы» искажением решетки около поляронного узла, поэтому невозможно разделить поляронный эффект и химическую связь.

Локализованный полярон малого радиуса характеризуется конечным временем жизни, которое определяется прыжковыми переходами. Кенциг [7] наблюдал активированную фононами диффузию дырок в LiF при измерении термолюминесценции. При достаточно высоких температурах подвижность дырок становится настолько большой, что большинство диффундирующих дырок рекомбинирует с захваченными электронами, что приводит к термолюминесценции. Вычисление энергии перескока из пика температурной зависимости интенсивности термолюминесценции дает для E_a значение $E_a = 0,32 \text{ эв}$ [208, 220, 221]. Был оценен предэкспоненциальный множитель в коэффициенте диффузии $D = D_0 \exp(-E_a/k_B T)$, он оказался порядка $0,1 \text{ см}^2/\text{сек}$. При $110^\circ K$ дырка в LiF совершает один прыжок в минуту и подвижность $\mu = 1,7 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2/\text{в} \cdot \text{сек}$. Таким образом, измерения термолюминесценции привели к открытию ценного метода исследования диффузии захваченных носителей тока, когда подвижность слишком мала, чтобы можно было ее измерить с помощью эффекта Холла ($\mu \leq 10^{-2} \text{ см}^2/\text{в} \cdot \text{сек}$).

В § 12 отмечалось, что не существует количественной теории для описания поляронных дырок, локализованных на двух соседних ионах Cl^- . Неттел [146] попытался вычислить энергию связи полярона, используя в своих пробных функциях Ψ (11.39) молекулярные орбитали вместо атомных орбиталей. В результате было получено, что энергия связи таких состояний на $0,7 \text{ эв}$ больше соответствующей энергии связи состояний, локализованных на одном узле $E(\mathbf{k} = 0, \beta, \Gamma)$ (см. уравнение (11.52)) [222]. Грубо говоря, это есть следствие того, что энергия классического взаимодействия $-\int \mathbf{P} \mathbf{D} \mathbf{d}r$ (см. (1.2)) будет всегда давать более высокую энергию для простого точечного заряда, чем для

размазанного заряда. Поэтому рассмотрение поляронных дырок должно быть основано на пробных функциях, в которых как смещение ионов, так и молекулярные орбитали определяются с помощью вариационного метода. Однако такие вычисления еще не проводились.

Б. Окислы переходных металлов: электрические свойства на низких частотах. Электронная структура окислов переходных металлов более сложна, чем в щелочно-галогидных кристаллах. Имеется большое разнообразие физических и химических свойств этих веществ. Для данного вещества эти свойства зависят от химического состава. С точки зрения физических свойств многие из стехиометрических окислов переходных металлов являются антиферромагнетиками и изоляторами [223, 224]. Одновременное появление изолирующего состояния и антиферромагнитного упорядочения есть следствие сильных корреляций между валентными электронами, в частности между d -электронами ионов металла [225—230]. Имеется два конкурирующих механизма:

а) d -электроны имеют тенденцию делокализоваться, что приводит к образованию зоны и тем самым увеличению кинетической энергии;

б) сильное кулоновское отталкивание, когда электроны оказываются слишком близко друг к другу, стремится локализовать d -электроны.

Всякий раз, когда отталкивание доминирует, это мешает образованию блоховских зон и возникновению металлической проводимости в таких веществах, как NiO, который, согласно зонной теории [240], должен быть металлом. Противоположная тенденция электронов делокализоваться приводит к антиферромагнитному взаимодействию, которое Андерсон [229, 230] назвал механизмом сверхобмена. Дело в том, что для d -электронов с антипараллельными спинами уширение неортогональных перекрывающихся орбиталей может приводить к некоторому выигрышу в энергии, что невозможно для электронов с параллельными спинами. Величина энергии сверхобмена зависит от перекрытия молекулярных орбиталей, центрированных на соседних катионах, расположенных напротив лигандных ионов. Каждая молекулярная орбиталь состоит из d -функций и определенной примеси волновых функций соседних лигандных ионов. Эта примесь функций определяет величину интегралов «переноса» b , соответствующих резонансным интегралам между молекулярными орбиталями, а не между атомными орбиталями.

То, что антиферромагнитное и изолирующее состояния имеют одну и ту же причину, а именно, корреляцию между электронами, следует хотя бы из того, что окислы переходных металлов испытывают переход металл — изолятор около точки Нееля. Морин [231] наблюдал очень резкие изменения в электропроводности при T_N в VO и V_2O_3 : σ изменяется на пять порядков. Количественная теория этого перехода была представлена Адлером

и Фейнлейбом [232] *). Их соображения просты, и о них необходимо упомянуть. В антиферромагнетике обменные потенциалы для электронов с данным спином различны для двух подрешеток с противоположным вектором намагниченности. Поэтому возникает запрещенная зона. Когда электрон возбуждается через запрещенную зону (между узкими зонами), величина намагниченности одной из подрешеток уменьшается и таким образом уменьшается с увеличением числа возбужденных носителей n_i запрещенная зона $E_g(T)$. В случае антиферромагнетизма в узких зонах $E_g(T)$ дается выражением

$$E_g(T) = E_g(0) - \beta n_i. \quad (20.2)$$

Найдено, что это уравнение остается справедливым, даже когда n_i становится большим. В этом случае постоянная $\beta = 4E_g(0)/N$, где N — концентрация электронов в d -зоне. Используя это выражение для β из (20.2), можно получить правильное экспериментальное значение для температуры перехода, при которой исчезает запрещенная зона; для V_2O_3 эта температура приблизительно равна температуре Нееля.

Предположим, что избыточный подвижный электрон или дырка вводится в изолятор. Будет ли избыточный носитель локализован или он займет зонное состояние, это зависит от: а) величины резонансного интеграла J по сравнению с интегралом переноса b , соответствующего сверхобмену; б) выигрыша в энергии от поляризации решетки, создаваемой избыточным зарядом, и в) выигрыша в энергии от искажения спинов в основном состоянии, обусловленного спином избыточного заряда **). В случае в) де Женн [182] рассмотрел изменение энергии вследствие искажения спинов в окрестности автолокализованного избыточного носителя. Энергия носителя понижается на величину

$$\delta E = bz^{1/2} \cos(\theta/2), \quad (20.3)$$

где z — число эквивалентных соседних спинов, а θ — угол между соседними спинами противоположных лигандных ионов; $\theta = \pi$ для идеальной решетки. В большинстве случаев отклонение

) В работе Адлера и Брукса [27] для объяснения скачка электропроводности в V_2O_3 , VO_2 и других предложена феноменологическая модель фазового перехода, в которой учитывалось взаимодействие электронов с решеткой. При этом рассматривались только токовые возбуждения. В [28*] была исследована возможность фазового перехода первого рода в электронной системе при наличии сильного электрон-фононного взаимодействия в случае предельно узких зон. При этом учитывалось, что бестоковые состояния — экситоны Френкеля — также могут приводить к термодинамической неустойчивости системы. Теория может объяснить экспоненциально большой скачок, наблюдаемый в этих соединениях. (Прим. ред.)

**) Эта спиновая поляризация может привести к образованию нового типа автолокализованных состояний в магнетиках. Ссылки на работы по магнитным поляронам и квазиосцилляторным состояниям см. в списке дополнительной литературы. (Прим. ред.)

спина $(\theta - \pi) \ll \pi$, так что $\delta E < J$ [180]. С другой стороны, энергия полярона должна быть много больше $2J$ для того, чтобы можно было говорить о поляроне малого радиуса. Таким образом, для локализованного полярона спиновая поправка к энергии обычно мала по сравнению с собственной энергией полярона. Однако спиновая корреляция играет важную роль в прыжковой подвижности (см. § 15). Влияние теплового разупорядочения спинов на зонную подвижность в антиферромагнитных окислах детально не рассматривалось; оно также будет зависеть от температурной зависимости намагничивания (см. (14.30)). При температуре Нееля окислы переходных металлов испытывают малые

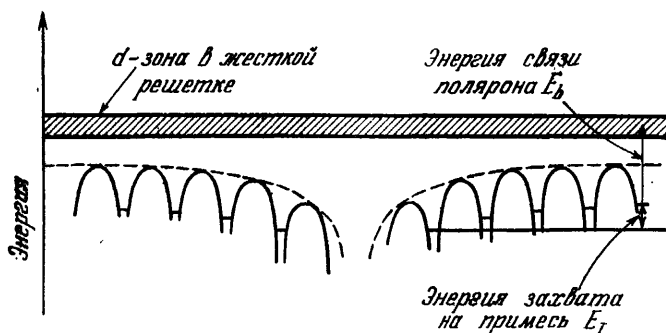


Рис. 30. Энергетические уровни локализованного полярона малого радиуса около примесного центра (схема).

деформации кристаллической решетки, которые более или менее заметно влияют на электропроводность.

Из-за сложной электронной структуры окислов переходных металлов, которая ответственна за их магнитные и электрические свойства, затруднено сравнение теории и эксперимента, необходимое для выяснения роли поляронных эффектов. Например, антиферромагнитное упорядочение мешает наблюдению спектра парамагнитного резонанса на автолокализованных электронах или дырках, так как различные носители не будут чувствовать одно и то же внутреннее магнитное поле. В то же время эффект Холла как в области прыжковой, так и зонной проводимости будет иным чем в немагнитных полупроводниках.

Химические свойства окислов переходных металлов также представляют значительный интерес, так как стехиометрические кристаллы в большинстве случаев являются изоляторами и так как энергия активации для возбуждения электрон-дырочной пары обычно порядка нескольких электрон-вольт. Поэтому, для того чтобы получить подвижные носители, вводятся доноры или акцепторы. Де Бур и Вервей [223] нашли, что концентрация подвижных носителей может быть обусловлена изменением валентности, возникающей, когда инородные ионы с другой валентностью заменяют металлические ионы решетки. Инородные ионы

действуют как доноры, если заменяющий ион имеет большую валентность, и в результате получается полупроводник *n*-типа. Если же инородные ионы имеют меньшую валентность, то они действуют как акцепторы. Подвижные носители связаны на примесном ионе; при этом энергия ионизации примеси — E_I , как показано схематически на рис. 30 для локализованного полярона малого радиуса. Некоторые примеры полупроводников с контролируемой валентностью представлены в табл. IV [233]. Концентрация носителей может быть также обусловлена отклонением от стехиометрии. Катионные вакансии действуют как акцепторы, и поэтому концентрация дырок зависит от давления кислорода вокруг кристалла. Хауфф [234], Рудольф [235] и многие другие изучили влияния давления кислорода и водорода на электропроводность. Термодинамическое рассмотрение равновесия между дефектами решетки и инородными ионами было проведено Крюгером и Винком [236, 237] и Шоттки [238].

Таблица IV

Примеры полупроводников с контролируемой валентностью [233]

I	II	III	IV	Кристаллическая структура
NiO CoO	Li ₂ O Li ₂ O	Ni ^{III} Co ^{II}	Ni ^{III} Co ^{III} }	Структура MgO
CaTiO ₃ SrTiO ₃ BaTiO ₃ CaMn ^{IV} O ₃ LaMn ^{III} O ₃ LaMn ^{III} O ₃ LaFe ^{III} O ₃	La ₂ O ₃ La ₂ O ₃ La ₂ O ₃ La ₂ O ₃ CaO SrO SrO	Ti ^{IV} Ti ^{IV} Ti ^{IV} Mn ^{IV} Mn ^{III} Mn ^{III} Fe ^{III}	Ti ^{III} Ti ^{III} Ti ^{III} Mn ^{III} Mn ^{IV} Mn ^{IV} Fe ^{IV} }	
ZnFe ₂ O ₄ MgFe ₂ O ₄ NiFe ₂ O ₄ CoFe ₂ O ₄	TiO ₂ TiO ₂ TiO ₂ TiO ₂	Fe ^{III} Fe ^{III} Fe ^{III} Fe ^{III}	Fe ^{II} Fe ^{II} Fe ^{II} Fe ^{II} }	Шпинель
Fe ₂ O ₃ Fe ₂ O ₃ Fe ₂ O ₃	TiO ₂ SnO ₂ WO ₃	Fe ^{III} Fe ^{III} Fe ^{III}	Fe ^{II} Fe ^{II} Fe ^{II} }	
SnO ₂ TiO ₂	Sb ₂ O ₅ Ta ₂ O ₅	Sn ^{IV} Ti ^{IV}	Sn ^{III} Ti ^{III} }	Рутил
MgWO ₄	Cr ₂ O ₃	W ^{IV}	W ^V }	

Наконец, остановимся на вопросе о приготовлении образцов окислов переходных металлов. При сравнении теории и эксперимента важно знать, насколько совершенен исследуемый образец. Здесь в действительности и лежит главное препятствие для применения теории полярона малого радиуса к измерениям явлений переноса в области низких частот. Имеется мало данных по измерениям проводимости и эффекта Холла на монокристаллах.

Эти результаты будут обсуждаться ниже детально. Интерпретация экспериментальных данных, полученных на керамических образцах с плотностью, составляющей от 75 до 95% теоретического значения, затруднена из-за влияния дефектов решетки и, в частности, границ зерен. Керамические образцы, например, NiO получают обжигом NiCO₃ при 1000 °С, так что вследствие термического разложения появляются NiO и CO₂. Порошок NiO размельчается, прессуется в бруски или диски и заново обжигается. В таких шлаковых образцах трудно контролировать содержание кислорода. Кроме того, материал сильно поликристаллический. Границы зерен создают потенциальные барьеры для движения электрона, так что высокоомные граничные слои окружают зерно. Определяют или нет высокоомные границы зерен проводимость на постоянном токе, можно увидеть из измерений частотной зависимости сопротивления. Можно представить зерно как сопротивление с включенной параллельно шунтирующей емкостью. Поэтому наблюдается дисперсия в частотной зависимости сопротивления [239—242] на частоте $\omega \sim 10^4 - 10^5$ гц, что значительно меньше частоты перескока локализованного полярона малого радиуса.

Монокристаллы окислов переходных металлов приготавливались двумя различными методами. Кеч и Аллесандрини описали способ приготовления FeO, NiO и CoO, основанный на разложении соответствующих халькогенидов на кристаллической поверхности MgO [243]. Полученные таким образом монокристаллы NiO были зеленого цвета и прозрачные. Другим методом приготовления монокристаллов является метод Вернейля или метод плавления в пламени [244]. Кристаллы получают черными, так как они содержат большое количество избыточного кислорода.

Обсудим теперь низкочастотные электрические свойства различных окислов переходных металлов. После описания некоторых экспериментальных вопросов мы ограничимся обсуждением только тех экспериментов, которые могут пояснить природу полярона малого радиуса.

1. NiO. Низкочастотная проводимость *). Было проведено много экспериментов на кристаллах NiO, в большинстве случаев на поликристаллических керамических образцах и в некоторых случаях на монокристаллах. Монокристаллы приготавливались одним из двух описанных выше способов. Вначале мы обсудим экспериментальные данные, полученные на кристаллах, выращенных эпитаксиально.

Снауер и Солтсберг [210] измерили частотную зависимость проводимости двух монокристаллов NiO, приготовленных в разных лабораториях разными людьми, хотя одним и тем же методом. Измерения проводились при комнатной температуре в ин-

) Наиболее полные сведения о NiO содержатся в обзоре Остина и Мотта [2]. (Прим. ред.)

тервале частот от 10^3 до $3,5 \cdot 10^{10}$ гц. Наблюдавшаяся дисперсия проводимости дает прямое доказательство прыжков носителей тока вокруг дефектов решетки. Найдено, что дисперсия в обоих образцах описывается одним простым временем перескока $1/\tau = 3 \cdot 10^9 \text{ сек}^{-1}$. Так как $1/\tau$ одинаково для двух разных образцов, то можно предположить, что дефектом, вокруг которого совершаются перескоки, является вакансия Ni, а не некоторая случайная примесь. Оценки концентрации дырок, связанных на катионных вакансиях и совершающих прыжки вокруг них, данные ниже, согласуются с этим предположением. Частотная зависимость вещественной части проводимости $\text{Re } \sigma(\omega)$ дается выражением (18.21). На рис. 31 показана найденная экспериментально частотная зависимость $\text{Re } \sigma(\omega)$ при комнатной температуре для двух образцов NiO-1 и NiO-2. Проводимость на постоянном токе при комнатной температуре образца NiO-1 есть $6,7 \cdot 10^{-11} \text{ ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$, а для образца NiO-2 она есть $1,6 \cdot 10^{-8} \text{ ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$. Сплошные кривые на рис. 31 построены с использованием одного и того же значения τ . Таким образом, ясно, что прыжки, ответственные за дисперсию, совершаются вокруг одного и того же типа центра, а именно, катионной вакансии. В обоих образцах имеются низкочастотные всплески, которые указывают, что существует еще другой механизм высокочастотной проводимости. Нет никаких данных о природе этого процесса, но, возможно, он обусловлен движением ионов.

Необходимо отметить, что наблюдавшаяся дисперсия $\text{Re } \sigma(\omega)$ не может быть обусловлена резонансным поглощением, связанным со смещениями упруго связанных ионов. Диэлектрическая постоянная решетки имеет вид

$$\epsilon_{\text{lat}}(\omega) = \frac{4\pi\sigma_{\text{lat}}(\omega)}{\omega} = \epsilon_{\infty} + \left[\frac{(\epsilon - \epsilon_{\infty}) \omega_t^2}{(\omega_t^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)} \right], \quad (20.4)$$

где γ — постоянная затухания, которая много меньше частоты поперечного оптического фонона ω_t . В NiO значение $\omega_t = 6,7 \cdot 10^{13} \text{ сек}^{-1}$ [245], что много больше значения резонансной частоты, необходимой для описания экспериментальных данных. Выражение (20.4) для поперечной диэлектрической постоянной совпадает с выражением для продольной диэлектрической постоянной, построенной в частном случае на рис. 1. В изотропных

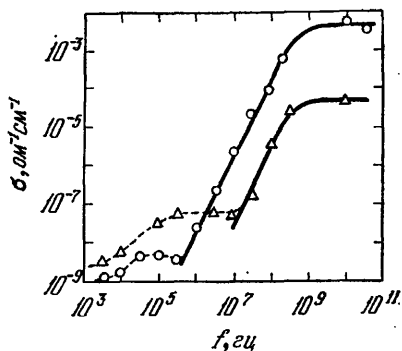


Рис. 31. Частотная зависимость проводимости образца NiO-1 (o) и NiO-2 (Δ). Сплошные кривые построены на основе уравнения (18.21) [210]. Параметры подобраны из условия совпадения теоретических и экспериментальных кривых.

кристаллах и в пределе длинных волн обе диэлектрические постоянные равны между собой [16]. Число дырок, участвующих в перескоках вокруг катионных вакансий, можно оценить в пределе высоких частот из выражения (18.21)

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \operatorname{Re} \sigma(\omega) = \frac{ne^2 a^2}{k_B T \tau} \quad (20.5)$$

Здесь a — шаг прыжка, который выбирается равным постоянной решетки. Найдено, что n порядка 10^{20} см^{-3} для образца NiO-1 и порядка 10^{18} см^{-3} для образца NiO-2.

Энергию активации прыжка дырки вокруг катионной вакансии можно оценить из экспериментального значения частоты прыжков $1/\tau$, если сделать разумное предположение, что переходы являются адиабатическими, т. е. что дырка следует за благоприятной флуктуацией потенциала решетки и совершает надбарьерный переход на соседний узел. Это предположение, по-видимому, подтверждается детальным обсуждением конфигурации основного состояния комплекса $\text{Ni}^{3+} (3d^7)$ и резонансного интеграла между такими состояниями [180]. Для адиабатических переходов, предэкспоненциальный множитель в выражении (15.24) порядка $\omega_0/2\pi \sim 10^{13} \text{ сек}^{-1}$. Тогда энергия активации $E_a \sim 0,21 \text{ эв}$. По-видимому, предположение об адиабатичности прыжковых переходов разумно не только для NiO, но и для большинства других окислов переходных металлов. Ширина электронной d -зоны в неискаженной решетке по крайней мере в несколько раз больше энергии фонона. В антиферромагнитных окислах переходных металлов ширину d -зоны можно оценить из энергии сверхобмена, так как она зависит от интеграла переноса b для виртуальных спиновых переходов, который порядка J . В этих окислах интеграл переноса достигает по крайней мере нескольких десятых электрон-вольта [175].

Рао и Смакула [246] измерили частотную зависимость вещественной и мнимой частей диэлектрической постоянной на монокристаллах NiO, CoO и их смешанных кристаллах, выращенных по методу Вернейля. Частота менялась от 10^2 до 10^{10} гц , а температура — от -193 до 400°C . При высоких температурах $T > 40^\circ \text{C}$ диэлектрические потери, связанные с термически активированными осцилляторами, могут быть описаны на основе формулы Дебая для диэлектрической постоянной. Температурная зависимость кривых потерь приводит к энергии активации $0,16$ — $0,33 \text{ эв}$. На керамических образцах NiO, легированных Li, Ван Хаутен и Босман [247, 211] измерили температурную зависимость диэлектрических потерь на частоте $\omega_0 = 250 \text{ кгц}$. Результаты для диэлектрической постоянной $\operatorname{Re} \epsilon(\omega_0)$ и для тангенса угла потерь $\operatorname{tg} \delta = \operatorname{Im} \epsilon(\omega_0)/\operatorname{Re} \epsilon(\omega_0)$ показаны на рис. 32. Кривая $\operatorname{Re} \epsilon(\omega_0)$ похожа на дебаевскую кривую и может быть описана одним простым временем релаксации τ . Этот результат может рассматриваться как экспериментальное доказательство существова-

ния активированных фононами прыжков дырок вокруг ионов Li^+ . Согласно (18.18) и (18.19) диэлектрические потери имеют максимум, когда приложенная частота $\omega_0 = 1/\tau$. Предполагая, что прыжковые переходы являются адиабатическими, получим, что предэкспоненциальный множитель порядка 10^{13} сек^{-1} , а энергия активации $E_a \sim 0,01 \text{ эв}$.

Эксперименты по измерению механических потерь были впервые проведены Миллером и Хейксом [248], а позднее Ван Хаутеном [249] на керамических образцах NiO , легированных Li . Эти результаты также подтверждают прыжковую модель.

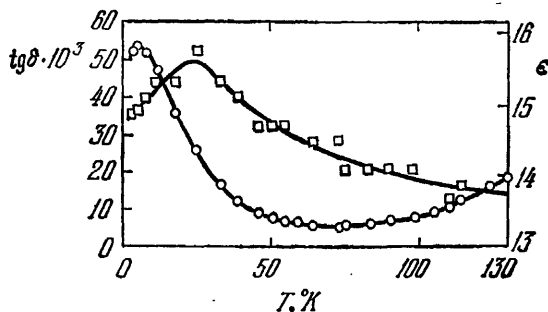


Рис. 32. Зависимость тангенса угла потерь $\text{tg } \delta$ и диэлектрической постоянной ϵ от температуры для образца NiO , содержащего 0,01 ат. % Li . Частота — 250 кГц [211]. ○ — $\text{tg } \delta$, □ — ϵ .

Суммируя результаты по исследованиям проводимости на переменном токе, можно сказать, что измерения частотной зависимости проводимости на монокристаллах NiO дают ясное экспериментальное доказательство прыжков дырок вокруг катионных вакансий. Кроме того, измерения температурной зависимости механической и диэлектрической релаксации на керамических образцах NiO , легированных литием, могут быть объяснены прыжками дырок вокруг ионов Li^+ .

2. NiO . Проводимость на постоянном токе и эффект Холла. Результаты электрических измерений на постоянном токе на NiO , сообщенные различными авторами [217, 218, 224, 250—264], не приводят к пониманию механизма проводимости. В настоящее время мы не знаем, является ли движение d -дырок при высоких температурах движением по полярной зоне или прыжками между локализованными состояниями. Экспериментальные данные на керамических образцах по температурной зависимости коэффициента Зеебека, эффекта Холла приводят к противоречивым результатам для температурной зависимости подвижности. В § 15 мы видели, что в случае зонного или прыжкового механизма проводимости подвижность увеличивается или уменьшается с повышением температуры соответственно. Различные экспериментальные данные дают как отрицательный, так и

положительный температурные коэффициенты подвижности*). Было сообщено несколько экспериментальных данных по электрическим свойствам монокристаллов, но в большинстве из этих сообщений были данные только по одному кинетическому коэффициенту. Например, Коиде [253] наблюдал температурную зависимость электропроводности на ряде эпитаксиально выращенных монокристаллов NiO, легированных Li. Однако данных об изменениях коэффициента Зеебека и эффекта Холла не сообщается.

Прежде чем обсуждать экспериментальные результаты, посмотрим, что можно ожидать с теоретической точки зрения: локализованы ли дырки или они движутся по зоне. Захватывается ли d -дырка на катионном узле или нет, зависит от энергии связи полярона E_b , определяемой выражением (13.29), и резонансного интеграла J (13.7). Если $E_b \approx S_0 \hbar \omega_0 > 2J$, то можно ожидать образования локализованных состояний. E_b определяет выигрыш в энергии, когда дырка помещается на катионный узел и решетка может релаксировать; S_0 лежит в пределах от 5 до 10 в NiO. Ширина электронной зоны $2J$ ответственна за тенденцию электрона делокализоваться**). Для локализации дырки требуется по крайней мере энергия $2J$, так как именно такая энергия необходима для образования локализованного волнового пакета из всех холловских состояний $3d$ -зоны. Ямашита и Курогава [5a] и Ван Хаутен [251] оценили E_b , используя метод Мотта и Литтлтона [54] и вычислили изменение энергии кристалла, когда положительный точечный заряд помещается на катионный узел. Они нашли, что E_b порядка 2 эв. Подобные вычисления до некоторой степени завышают значения E_b , так как истинная волновая функция дырки размыта по единичной ячейке, а размытый заряд всегда дает меньшее значение E_b , чем точечный заряд. Из величины сверхобменной энергии в NiO следует, что J порядка 0,4 эв. Такое же значение для J было найдено Ямашитой***) при первоначальных вычислениях электронной зонной структуры немагнитного NiO. Зонная структура изображена на рис. 33. Узкая d -зона находится в середине широкой p -зоны. Свитендик [265] использовал метод присоединенных плоских волн [266], учитывающий $p-d$ -взаимодействие, и получил результаты, похожие на результаты Ямашиты. Однако ширина d -зоны оказывается

) В работах [20] показано (см. также § 8 гл. V по II-й части книги), что при некоторых соотношениях между безразмерными параметрами в теории ПМР дрейфовая подвижность в некотором температурном интервале может расти с ростом T , а холловская будет все время убывать. (Прим. ред.)

***) В трехмерном случае связь между шириной неперенормированной электронной зоны и резонансным интегралом иная. Например, для простой кубической решетки она равна $12J$. (Прим. ред.)

***) Ямашита рассмотрел трудный вопрос, почему положительная дырка занимает состояние у вершины d -зоны, а не у вершины p -зоны? Он предположил, что вокруг d -дырки создается большая поляризация, т. е. что поляронный эффект для d -состояния много больше поляронного эффекта для p -дырки, и поэтому d -уровни выталкиваются вверх, выше вершины p -зоны [264].

больше, а именно, порядка 1 эв. Суммируя все сказанное, можно утверждать, что в NiO поляронная энергия связи d -дырки, по-видимому, по порядку величины сравнима с шириной электронной d -зоны. Ни E_b , ни J не известны с точностью, достаточной для того, чтобы предсказать, локализована или нет d -дырка. Если в действительности стационарные состояния локализованы, то переходы между ними будут адиабатическими надбарьерными переходами, так как J много больше $\hbar\omega_0$.

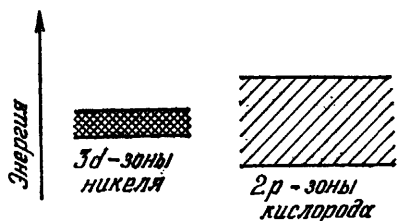


Рис. 33. Энергетические зоны для немагнитного NiO (схема) [264, 265].

При интерпретации экспериментальных данных по проводимости и эффекту Зеебека на керамических образцах Морин [217]

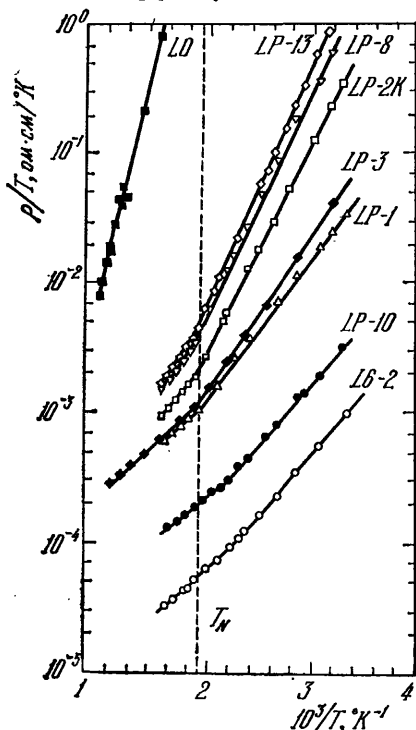


Рис. 34. Температурная зависимость сопротивления различных образцов $\text{Li}_x\text{Ni}_{(1-x)}\text{O}$. Содержание лития x дано в круглых скобках: LO (0), LP-13 (0,9), LP-8 (0,9), LP-2K (1,1), LP-3 (1,3), LP-1 (1,5), LP-10 (2,6), L6-2 (6,5). (Из [253].)

таксиально монокристаллах $\text{Li}_2\text{Ni}_{(1-x)}\text{O}$; результаты показаны на рис. 34. При температуре перехода T^* появляется излом в тем-

пришел к заключению, что при $k_B T \geq \hbar\omega_0$ подвижность описывается экспоненциальной температурной зависимостью (15.9). При анализе учитывалось, что как $2p$ -, так и $3d$ -дырки дают вклад в проводимость. Хейкс и Джонстон [218] пришли к заключению, что термически активированный процесс диффузии $3d$ -дырок является причиной наблюдавшейся температурной зависимости подвижности. В последние годы ряд других авторов пришли к подобным заключениям [250, 251, 254, 256]. Однако интерпретация экспериментальных результатов по подвижности в терминах прыжкового механизма оспаривалась на основе измерений эффекта Холла. Указывалось также, что интерпретация данных по проводимости и эффекту Зеебека как объемной подвижности может быть ошибочной из-за влияния границ зерен, как обсуждалось выше.

Коиде [253] измерил проводимость на выращенных эпитаксиально монокристаллах $\text{Li}_2\text{Ni}_{(1-x)}\text{O}$; результаты показаны на рис. 34. При температуре перехода T^* появляется излом в тем-

пературной зависимости проводимости; T^* близко к температуре Нееля $T_N = 520^\circ \text{K}$. Обе энергии активации $\varepsilon_1 (T > T^*)$ и $\varepsilon_2 (T < T^*)$ зависят от концентрации лития, как показано на рис. 35. При увеличении x свыше 0,015 энергия ε_1 становится постоянной. Для концентрации Li порядка нескольких процентов многие ионы Ni имеют своими соседями Li, так что дырки могут

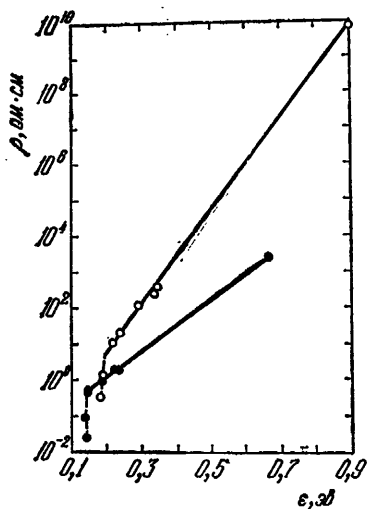


Рис. 35. Связь сопротивления и энергии активации [253].

двигаться по решетке, не покидая ионы Li. Тогда температурная зависимость проводимости должна быть температурной зависимостью подвижности. Эти соображения и тот экспериментальный факт, что для концентрации Li, больших 2%, электропроводность прямо пропорциональна числу ионов Li, говорят в пользу прыжковой модели. Правильно ли это для больших концентраций Li или нет, можно было бы решить на основе измерений эффекта Холла на эпитаксиально выращенных монокристаллах при $T > T_N$. При малых концентрациях Li эффект Холла измерялся на образцах, выращенных по методу Вернейля, и керамических образцах. Результаты показаны на рис. 36. Видно, что холловская подвижность не увеличивается с температурой, как это предсказано для прыжкового механизма при $T > \theta_0/2 = 440^\circ \text{K}$ согласно § 17*). Кроме того, она меньше значения, полученного из данных по эффекту Зеебека. Трудность в интерпретации эффекта Холла возникает еще из-за того, что неизвестно внутреннее магнитное поле. Изменение знака коэффициента Холла около точки Нееля [260, 263] подтверждает тот факт, что магнитное упорядочение играет важную роль. Кроме того, знак эффекта Холла в парамагнитной области во всех случаях отрицателен, в то время как знак эффекта Зеебека положителен. Это расхождение может быть обусловлено участием носителей разного знака в электрических кинетических явлениях. В этом случае малое число «высокоподвижных» зонных электронов может определять напряжение Холла, в то время как большое число малоподвижных дырок определяют проводимость и коэффициент Зеебека. Однако более вероятно, что различие в знаках ниже T_N обусловлено влиянием внутреннего магнитного поля на коэффициент Холла. Эта возможность подтверждается измерениями эффекта Холла на керамических

*) Сравни с рис. 7 и 10 во II части книги.

образцах Начманом и другими [255]. Эти авторы наблюдали сильную зависимость от магнитного поля коэффициента Холла. Выше T_N коэффициент Холла от поля не зависел. Кроме того, при температурах $T > T_N = 520^\circ\text{K}$, которые представляют главный интерес для выяснения механизма проводимости d -дырок, экспериментальная температурная зависимость холловской подвижности имеет экспоненциальный характер $\exp(-E_a/k_B T)$, где $E_a = 0,63 \text{ эв}$. Однако этот результат не согласуется с данными Босмана и Крвенкура [261, 262], показанными на рис. 36. Для того чтобы решить вопрос о том, каков механизм проводимости при высоких температурах, желательно:

- 1) измерить коэффициент Холла как функцию температуры и магнитного поля на эпитаксиально выращенных монокристаллах;
- 2) изучить теоретически для антиферромагнитных полупроводников влияние внутреннего поля на эффект Холла.

Резюме. Нет однозначных экспериментальных доказательств прыжкового характера движения полярона малого радиуса в кристаллах NiO. Однако такие доказательства существуют для движения поляронной дырки вокруг дефектов решетке.

3. Другие окислы переходных металлов. Измерения электрических явлений переноса были проведены на многих других окислах переходных металлов: MnO [218], Fe₂O₃ [217], Fe₃O₄ [265—267], CoO [218, 233, 246, 268], CoFe₂O₄ [269], LaFeO₃ [270], LaMnO₃ [271, 272], LaCoO [273], SrTiO₃ [134, 274], BaTiO₃ [216] и на аналогичных им соединениях. Однозначно ни в одном из этих материалов прыжковый характер движения на постоянном токе не наблюдался*). Хаубенрейзер [176] рассмотрел более детально высокотемпературную проводимость в Fe₃O₄. Выше точки перехода из орторомбической фазы в кубическую $T_{tr} = 119^\circ\text{K}$ оба типа ионов железа Fe²⁺ и Fe³⁺ случайно распределены по катионным узлам. Можно ожидать, что проводимость σ пропор-

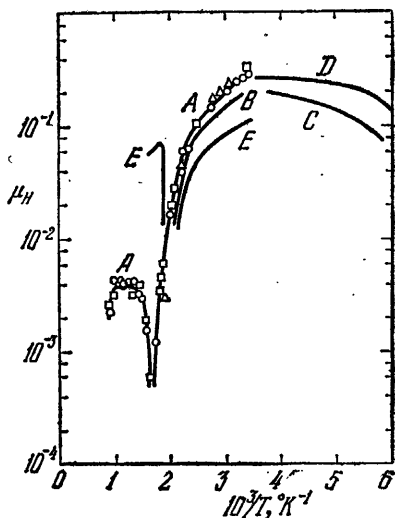


Рис. 36. Зависимость холловской подвижности μ_H ($\text{см}^2/\text{в}\cdot\text{сек}$) от обратной температуры. Кривая A получена на керамическом образце NiO, содержащем $8,8 \cdot 10^{-2}$ (Δ), $1,1 \cdot 10^{-2}$ (\square) и $5 \cdot 10^{-3}$ ат. % Li [261]. Кривые: B — из [257], C и D — из [259], E — из [263] — получены на монокристаллах, выращенных по методу Вернейля.

*) Выше уже отмечалось (см. примечание на стр. 182), что имеются веские основания считать, что прыжковый механизм переноса реализуется в рутиле (TiO₂). (Прим. ред.)

циональна числу ионов Fe^{2+} . Поэтому из экспериментального значения $\sigma = 250 \text{ ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ при комнатной температуре следует, что подвижность должна быть порядка $0,1 \text{ см}^2 \cdot \text{в}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$. Верхний предел для подвижности из измерений эффекта Холла есть $0,45 \text{ см}^2 \cdot \text{в}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$. Так же как в NiO , это значение подвижности является значением, разделяющим прыжковую проводимость и зонную проводимость. Хаубенрейзер вычислил подвижность для недиагональных переходов, учитывая, что перенос спина электрона должен быть согласован с ферромагнитной конфигурацией взаимодействующих спинов.

Прыжковый переход рассматривается как термически активированный обменный процесс Зинера. При вычислении вероятности перехода Хаубенрейзер предположил, что конфигурация спинов ионов Fe такая же, как и при $T=0^\circ\text{K}$. Это предположение справедливо, только

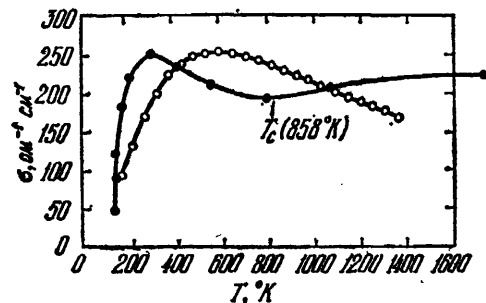


Рис. 37. Измеренная и рассчитанная температурные зависимости электропроводности для Fe_3O_4 . T_c — точка Кюри [176]. ● — эксперимент; ○ — теория.

если время релаксации, которое характеризует короткодействующие спиновые корреляции, велико по сравнению со временем жизни локализованного состояния полярона малого радиуса. Эти два времени для Fe_3O_4 неизвестны.

На рис. 37 теоретический результат сравнивается с экспериментальной кривой. Различие в положении максимума проводимости связано с предположением, что конфигурация спинов ионов при $T \neq 0$ совпадает с конфигурацией при $T = 0$. Остин и другие [263] измерили температурную зависимость холловской подвижности от 250°K до 400°K на монокристаллах CoO , легированных до одного атомного процента литием и выращенных по методу Вернейля. При комнатной температуре подвижность $\mu_H \sim 2 \times 10^2 \text{ см}^2 \cdot \text{в}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$, при увеличении температуры μ_H слабо увеличивается.

Полупроводниковые свойства ряда смешанных кристаллов $\text{Co}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_4$ в области $1,9 < x < 2,1$ были изучены Джонкером [269]. Кристалл CoFe_2O_4 имеет структуру обратной шпинели. Половина ионов Fe^{3+} находится в тетрагональных узлах, в то время как другая половина ионы Co^{2+} расположены в октаэдрических узлах. При $x > 2$ избыточные ионы двухвалентны, при $x < 2$ ионы избыточного кобальта трехвалентны. Интересным моментом работы Джонкера является тот факт, что валентность катионов не связана с вводимыми примесями. Если предположить, что число электронов, дающих вклад в проводимость, равно числу ионов Fe^{2+} , а число дырок равно числу ионов Co^{3+} , то из

данных по проводимости следует, что $\mu_e \sim 10^{-4} \text{ см}^2 \cdot \text{в} \cdot \text{сек}^{-1}$, а $\mu_h \sim 10^{-8} \text{ см}^2 \cdot \text{в}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$ при 300°К . Найденная с помощью измерений эффекта Зеебека температурная зависимость μ_e и μ_h имеет вид $\exp(-E_a/k_B T)$, где $E_a \sim 0,2$ и $0,5 \text{ эв}$ для электронов и дырок соответственно. Неизвестно, в какой мере границы зерен влияют на эти результаты.

На ряде керамических образцов и поликристаллических образцах LaCoO_3 , легированных Sr или Th, Гертсен и Хердт [273] измерили электропроводность, эффект Холла и коэффициент Зеебека. Холловская подвижность электронов в образцах, легированных Th, есть $2,8 \cdot 10^{-1} \text{ см}^2 \cdot \text{в}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$ при 300°К и слабо уменьшается с повышением температуры. Дрейфовая подвижность дырок равна $2,1 \cdot 10^{-2} \text{ см}^2 \cdot \text{в}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$ при 300°К и с увеличением температуры меняется по закону $\exp(-0,06 \text{ эв}/k_B T)$.

На восстановленных керамических образцах BaTiO_3 . Гертсен и другие [216] измерили холловскую подвижность электронов и нашли, что $\mu_e \sim 0,5 \text{ см}^2 \cdot \text{в}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$ в интервале температур от 300 до 450°К .

В. Окислы переходных металлов. Оптические свойства. Из-за недиагональных переходов оптические свойства поляронов малого радиуса существенно отличаются от свойств зонных электронов (см. § 18). Результаты для высокочастотной проводимости (см. выражения (18.10) и (18.11)) приводят к тому, что главная область дисперсии лежит в близкой инфракрасной области, т. е. при частотах ниже основного края поглощения и выше частоты остаточных лучей. В этой области частот диэлектрическая постоянная решетки $\epsilon_{\text{lat}}(\omega, T)$ хорошо известна. Согласно (20.4) диэлектрическая постоянная — вещественная и непрерывно растущая функция частоты ω вплоть до частоты ω_t , когда появляется дисперсия. Поэтому измерения оптических постоянных в близкой инфракрасной области в первую очередь отражают свойства поляронов малого радиуса.

Оптические постоянные, коэффициент преломления n и коэффициент экстинкции k могут быть выражены через диэлектрическую постоянную

$$\epsilon(\omega, T) = \epsilon_{\text{lat}}(\omega, T) + \left[\frac{4\pi\sigma(\omega, T)}{i\omega} \right], \quad (20.6)$$

где $\sigma(\omega, T)$ дается выражениями (18.10) и (18.11). Оптические постоянные можно найти из уравнений [149]

$$nk\omega = \text{Re } \sigma(\omega, T) \text{ и } n^2 - k^2 = \text{Re } \epsilon(\omega, T)$$

Эти формулы справедливы, если можно пренебречь мнимой частью ϵ_{lat} ; иначе в $\text{Re } \sigma(\omega, T)$ входит вклад решетки $-\left(\frac{\omega}{4\pi}\right) \text{Im } \epsilon_{\text{lat}}(\omega, T)$. Коэффициент поглощения определяется формулой

$$K(\omega) = K_e(\omega) + K_{\text{lat}}(\omega), \quad (20.7)$$

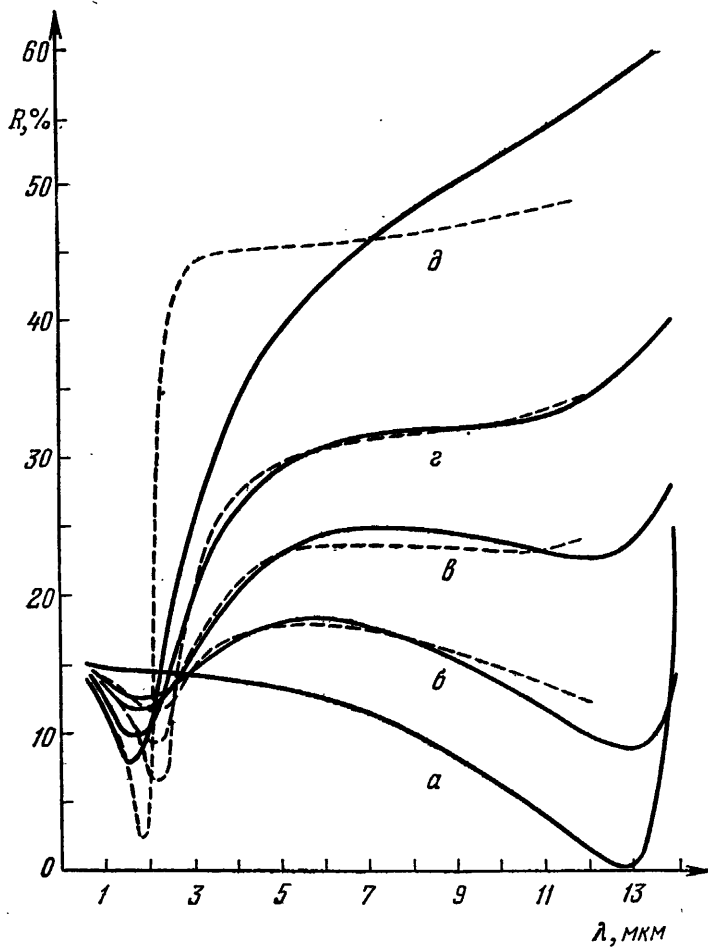


Рис. 38. Сравнение результатов измерений оптического отражения на BaTiO_3 с теорией. Сплошные кривые представляют собой экспериментальные результаты, а штриховые кривые — теоретические результаты.

	<i>a</i>	<i>б</i>	<i>в</i>	<i>г</i>	<i>д</i>
$\sigma, \text{см}^{-1}, \text{см}^{-1}$	0	19,5	46,9	90	200
$\lambda\beta/4\tau_c$	—	2,1	2,0	1,9	1,9

где

$$K_e(\omega) = \text{Re } \sigma(\omega) / c\epsilon_0 n \quad (20.8)$$

и

$$K_{\text{lat}}(\omega) = -\omega \text{Im } \epsilon_{\text{lat}}(\omega) / 4\pi c\epsilon_0 n. \quad (20.9)$$

Здесь ϵ_0 — диэлектрическая постоянная вакуума. Экспериментально оптические свойства при комнатной температуре изучались на BaTiO_3 и LaCoO_3 Гертсенем и другими [214, 215]*). На рис. 38 представлены результаты по отражению на BaTiO_3 . Имеется удовлетворительное согласие теории с экспериментом для всех образцов, за исключением сильно легированного образца δ . На LaCoO_3 p -типа Рейк и Мюльстро [212, 213] измерили и проанализировали коэффициент поглощения при $T = 293^\circ$ и $4,2^\circ\text{K}$. Частотная зависимость K при комнатной температуре (рис. 39) хорошо согласуется с теорией. Экспериментальные кривые не имеют заметной фононной структуры, так как при высоких температурах в недиагональных прыжковых переходах принимают участие много фононов. Многофононные процессы приводят к непрерывности конечных состояний при всех частотах света. Появляются также и фононные процессы низкого порядка; однако их относительный вклад в K мал. Поэтому с хорошей точностью частотная зависимость высокочастотной прыжковой проводимости может быть описана одним параметром, а именно средней длительностью τ недиагональных переходов. Это приближение приводит к завышению роли многофононных переходов и поэтому несправедливо при низких температурах.

Низкотемпературные результаты для коэффициента поглощения показаны на рис. 40. Величина поглощения меньше, чем при высоких температурах, так как многофононные процессы исчезают с понижением температуры. В то же время становится заметной фононная структура, так как в недиагональные переходы дают вклад процессы с малыми числами фононов. Из рис. 40 видно, что фононная структура сохраняется при увеличении легирования, а соответственно полная величина поглощения растет. Для грубого теоретического анализа Рейк и Мюльстро предположили, что распределение фононов состоит из четырех полос, центрированных при частотах ω_i ($i = 1, 2, 3, 4$), соответствующих длинам $\lambda_1 = 17,2$ мкм, $\lambda_2 = 19,9$ мкм, $\lambda_3 = 29,4$ мкм, $\lambda_4 = 34,5$ мкм. На рис. 40 указаны пики поглощения, связанные с двухфононными процессами. Была сделана попытка количественно сравнить теорию и эксперимент, исходя из этой модели и используя низкотемпературное выражение для корреляционной функции токов (18.5). При $\hbar\omega_i/k_B T \gg 1$ это выражение получается при разложении экспонент в (18.6) в ряд Тейлора. В результате высокочастотная проводимость не зависит от параметра τ .

) См. также работы [1, 21*], посвященные исследованию инфракрасного поглощения в TiO_2 . Из них следует вывод о поляронной природе носителей тока в TiO_2 . (Прим. ред.)

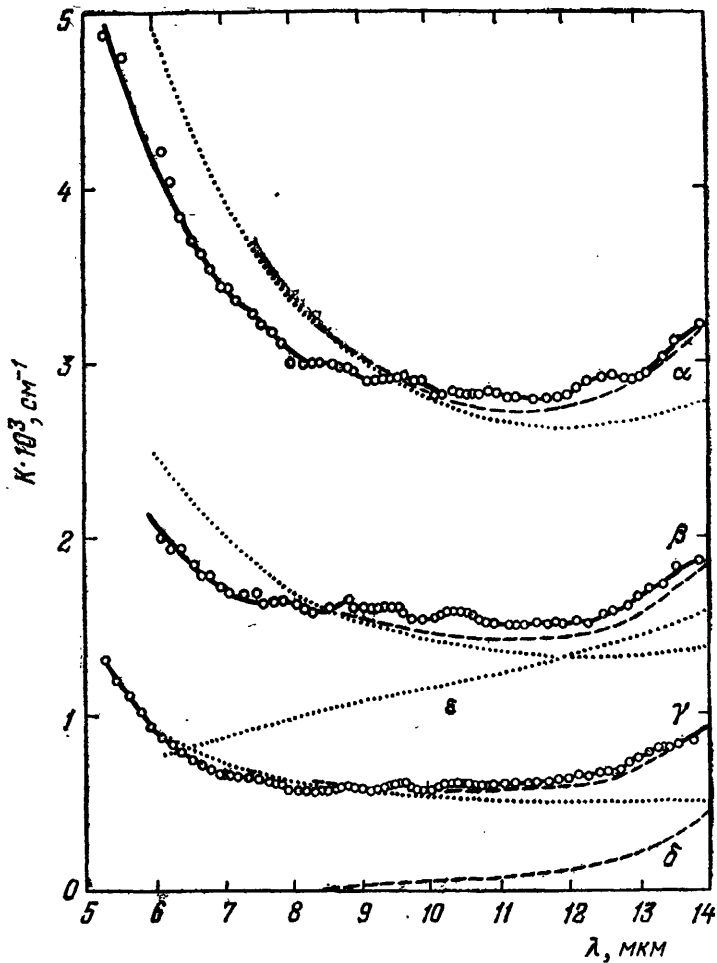


Рис. 39. Зависимость коэффициента поглощения от длины волны для р-типа LaCoO_3 , $T = 293 \text{ }^\circ\text{K}$. Сплошные кривые ($\alpha - \gamma$) экспериментальные данные, пунктирные кривые ($\alpha - \gamma$) — теоретические значения K_e определены согласно (20.8); штриховые линии ($\alpha - \gamma$) — теоретические значения $K(\nu)$ согласно (20.9). Пунктирная и штриховая линии совпадают при [212]: $\lambda < [\mu]$; $\alpha - \sigma(0) = 12 (\text{ом}\cdot\text{см})^{-1}$, 1% Sr; $\beta - \sigma(0) = 6 (\text{ом}\cdot\text{см})^{-1}$, 0,5% Sr; $\gamma - \sigma(0) = 2,2 (\text{ом}\cdot\text{см})^{-1}$, 0,2% Sr; $\delta - K_{\text{lat}}(\omega)$; $\epsilon - K_e$ Друде (ω), вычисленный при $\sigma(0) = 12 (\text{ом}\cdot\text{см})^{-1}$; $\tau_0 = 3 \cdot 10^{-15}$ (сек).

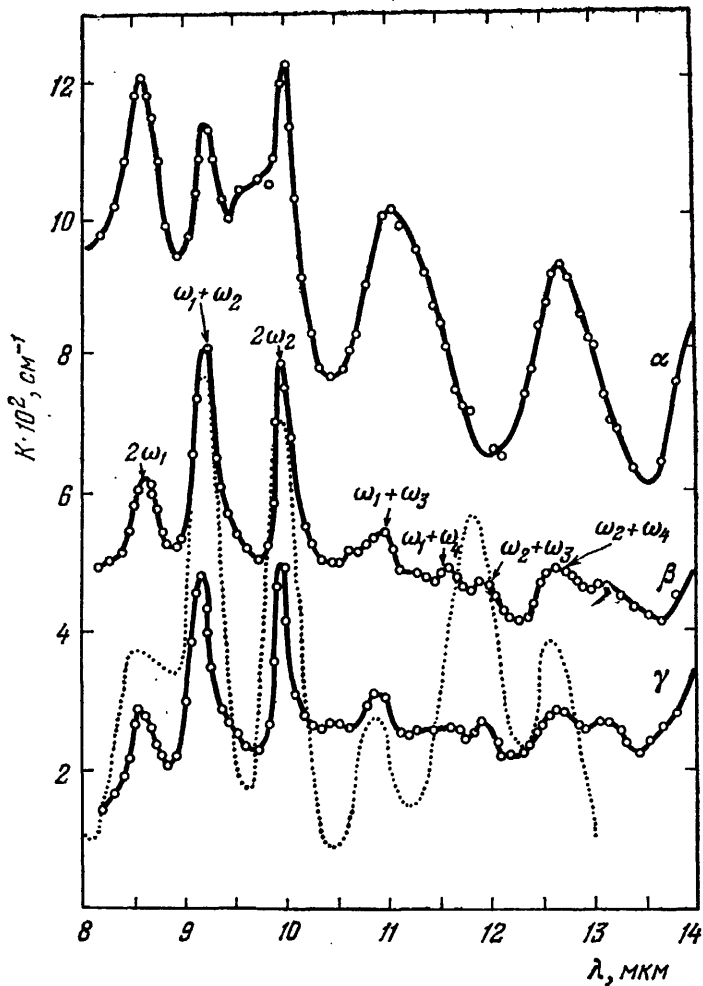


Рис. 40. Зависимость коэффициента поглощения от длины волны для р-типа LaCoO_3 , $T = 4,2 \text{ }^\circ\text{K}$; α —1% Sr; β —0,5% Sr; γ —0,2% Sr. Пунктирная кривая—теоретические значения для $K_e(\omega_e)$ [212].

Вместо этого она содержит сумму по фоновым процессам n -го порядка. Теоретический результат для $n = 2$ и в пределе $T = 0$ показан пунктирной линией. Он содержит шесть подгоночных параметров: резонансный интеграл J , четыре константы связи $S_0(i)$ и параметр, характеризующий ширину фоновых зон. Предполагается, что $J = 0,18 \text{ эв}$. Пунктирная кривая напоминает фоновую структуру экспериментальных кривых, и, по-видимому, качественная интерпретация результатов правильная. Возможно, было бы разумно исходить при количественном сравнении теории и эксперимента из теории адиабатических переходов, так как выбранное малое значение J уже в 2,5 раза больше наивысшей энергии выбранной модели фонового спектра. Возможно, однако, что теория неадиабатических переходов качественно справедлива вне пределов ее строгой применимости, $\hbar\omega_0 > J$.

ЧАСТЬ II
ПОЛЯРОНЫ МАЛОГО РАДИУСА.
ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА

Ю. А. Фирсов

ВВЕДЕНИЕ

В 1933 г. Л. Д. Ландау высказал идею о возможности самолокализации электрона на узле идеальной решетки [1]. Такие объекты были названы впоследствии поляронами.

В зависимости от соотношения между радиусом полярона и постоянной решетки a , поляроны принято делить на три большие группы:

- а) поляроны большого радиуса (при $r_p \gg a$),
- б) поляроны промежуточного радиуса (при $r_p \approx a$),
- в) поляроны малого радиуса (при $r_p < a$).

Теория поляронов большого и промежуточного радиуса развита в фундаментальных работах [2, 3] (подробный список литературы по этому вопросу см. в I части книги).

В этой части книги будет изложена последовательная теория кинетических явлений в полупроводниках, носителями тока в которых являются поляроны малого радиуса [4—6].

К числу таких полупроводников относятся некоторые щелочно-галогидные кристаллы, возможно KCl, LiF [7] (см. также § 20 А в I части книги), органические полупроводники, а также те соединения переходных металлов (сульфиды, халькогениды, галогениды, оксиды), у которых d -зоны узкие и пустые, например, в TiO_2 [8, 9]. В последнее время появились работы, в которых приводятся некоторые аргументы в пользу наличия поляронов малого радиуса в $LaCoO_3$ [10], $SrTiO_3$ [11], MnO [12] и т. д.

Однако в большинстве сложных соединений переходных металлов узкие d -зоны оказываются частично заполненными (например, в NiO , MnO , V_2O_5 , Fe_3O_4 , CoO и т. д.), а не пустыми. В этом случае следует учитывать кулоновскую корреляцию между носителями тока, что позволяет как удовлетворительно описать магнитные свойства [13, 14] таких веществ, так и объяснить фазовые переходы типа металл — изолятор [15, 16, 17], происходящие в них. В этих веществах взаимодействия носителей тока с оптическими фононами тоже, как правило, сильно, т. е. поляронные эффекты в них нужно учитывать. Однако явления переноса осложнены в этом случае наличием магнитного порядка и сильной межэлектронной корреляцией (более подробно эти вопросы обсуждаются в [17]).

Излагаемая ниже теория недостаточна для описания всех свойств таких веществ. Неприменима она и к сильно легированным

поляронным полупроводникам, у которых до легирования зоны были пустыми. Это связано с тем, что все рассмотрение существенно одноэлектронное и имеет смысл лишь при малой концентрации носителей тока. Однако даже построение такой упрощенной теории необычайно важно для понимания всей проблемы малой подвижности в целом. Кроме того, имеются веские основания утверждать, что в той формулировке, которая будет дана ниже, теория допускает обобщение и на вышеупомянутые случаи.

Исторические аспекты проблемы поляронов малого радиуса и состояние вопроса на 1965 г. подробно обсуждались в I части книги. Наша основная цель заключается в том, чтобы дать некоторое представление о событиях, происшедших после 1965 г. Поэтому мы затронем здесь вопрос об истории развития теории ПМР до 1965 г. лишь в той мере, в какой это будет необходимо для формулировки основных задач, стоявших в 1965 г. перед строгой теорией явлений переноса, претендующей на описание веществ с малой подвижностью носителей тока.

Еще в 1956 г. А. Ф. Иоффе [18] обратил внимание на то, что в тех случаях, когда подвижность носителей тока μ в полупроводниках мала ($\mu \ll 1 \text{ см}^2/\text{в} \cdot \text{сек}$) использование обычного выражения для подвижности $\mu \approx e\tau/m^*$ приводит к малым значениям длин свободного пробега электрона ($l \leq a$, где a — постоянная решетки). Пытаясь найти выход из этого положения, А. Ф. Иоффе высказал предположение, что в этом случае перенос заряда может осуществляться путем перескоков электрона с узла на узел. Эта идея имеет много общего с представлениями о проводимости по де Буру и Вервею (путем перемены валентности ионов решетки). Однако такой механизм невозможно было обосновать в рамках обычной зонной теории и слабой электрон-фононной связи, ибо в этом случае длина волны носителя тока (по де Бройлю) оказывается гораздо больше постоянной решетки, и электрон не удастся локализовать в пределах одной элементарной ячейки.

По аналогии с явлением ионного переноса (диффузия ионов по междоузлиям) Хайкс и Джонстон [19] предположили, что положение электрона в координатном пространстве все же может быть зафиксировано с требуемой точностью (механизма локализации они не указали), т. е. в силу какой-то причины электрон ведет себя подобно классической частице — иону и может прыгать из ячейки в ячейку. Эти авторы написали для «коэффициента диффузии электронов» формулу

$$D = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{g}} g_x^2 W(\mathbf{g}), \quad (\text{B. 1})$$

где \mathbf{g} — вектор элементарных трансляций ($|\mathbf{g}| = a$, где a — постоянная решетки), $W(\mathbf{g})$ — активационная вероятность пере-

скока на соседний узел

$$W(g) = \frac{\bar{\omega}^1}{2\pi} \exp(-E_a(g)/kT), \quad (B.2)$$

где $\bar{\omega}$ — некоторая характерная частота колебаний решетки, $E_a(g)$ — энергия активации. Используя соотношение Эйнштейна, получаем *)

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{e}{kT} D = \frac{ea^2}{\hbar} \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar\bar{\omega}}{kT} \exp(-E_a/kT) = \\ &= u_0 \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar\bar{\omega}}{kT} \exp(-E_a/kT). \end{aligned} \quad (B.3)$$

Итак, из (B.3) следует, что подвижность активационным образом растет с ростом температуры. Величина $u_0 = ea^2/\hbar$ имеет размерность подвижности и по порядку величины равна $1 \text{ см}^2/\text{в} \cdot \text{сек}^{**}$). По формуле (B.3) подвижность μ может быть гораздо меньше u_0 , т. е. при перескоках подвижность действительно может быть меньше, чем в обычном зонном случае.

Предложенная Хайксом и Джонсоном картина переноса внушила серьезные сомнения, поскольку на первый взгляд она противоречила теореме Блоха, согласно которой электрон должен быть «размазан» по всему кристаллу, т. е. состояние, отвечающее электрону, локализованному в пределах одной ячейки, должно быть нестационарным, и такой волновой пакет быстро расплывается.

Напомним, что время туннельного расплывания волнового пакета τ_{tun} на следующую координационную сферу близко к $z(\hbar/\Delta E)$, где ΔE — ширина разрешенной зоны, z — координационное число. При $\Delta E \leq 1 \text{ эв}$, что характерно для веществ с малой подвижностью носителей тока, $\tau_{\text{tun}} \leq 10^{-14} \text{ сек}$. Какой же смысл говорить о локализации носителя тока на узле в этом случае?

Для обоснования указанной выше картины в рамках общей теории явлений переноса следовало:

1) обосновать (или отвергнуть) интуитивную картину процесса переноса, предложенную в [18, 19]. Для этого требовалось:

1а) указать физическую причину локализации электрона на узлах решетки, т. е. объяснить, почему квантовый объект может иметь малые размеры и не размазываться по всей решетке; понять, каковы эти размеры;

1б) доказать, что движение носителя тока в этом случае действительно является последовательностью актов перескока

*) В дальнейшем постоянная Больцмана k_B будет всюду обозначаться через k , за исключением тех случаев, где она встречается одновременно с модулем волнового вектора k .

***) Из формулы (B.9) (см. также (15.4) в 1 части) видно, что u_0 — это наименьшее значение подвижности, которое может быть достигнуто в рамках обычного уравнения Больцмана.

с узла на узел (т. е. случайным блужданием по узлам решетки) и написать соответствующее стохастическое уравнение;

В) показать, что отдельные акты перескока не коррелированы, т. е. процесс — марковский, и задача действительно сводится только к нахождению вероятности перескока. В противном случае несправедлива формула (В. 1) и выражение для D имеет совершенно иной вид (см., например, [67]);

Г) установить область температур, для которой перескоки являются основным механизмом переноса;

2) выяснить механизм переноса в той области температур, где классические перескоки не реализуются.

В 1958 г. Ямашита и Куросава [20] впервые дали достаточно удовлетворительный ответ на вопрос 1а), заметив, что локализованное описание вполне разумно использовать в том случае, когда время распыливания волнового пакета τ_{tun} гораздо больше, чем время τ_{hop} между двумя последовательными актами перескоков, которые могут быть вызваны сильным взаимодействием носителей тока с колебаниями решетки ($\tau_{\text{hop}} \approx W^{-1}$, где W — вероятность перескока с узла на узел). Ямашита и Куросава показали, что условие $\tau_{\text{hop}} < \tau_{\text{tun}}$ может быть выполнено в случае сильного взаимодействия электронов с фононами и достаточно узких исходных (т. е. неперенормированных) зон, т. е. для поляронов малого радиуса (ПМР)*). Оказывается, что поляронный эффект приводит к резкому сужению зоны [4—6]:

$$\Delta E_p \approx \Delta E \exp \left\{ -\gamma \operatorname{cth} (\hbar\omega_0/2kT) \right\}. \quad (\text{В. 4})$$

Здесь ΔE_p — ширина перенормированной зоны для ПМР; γ — безразмерная константа связи электронов с фононами ($\gamma \gg 1$). В теории ПМР она определяется из условия $\gamma \approx E_b/\hbar\omega_0$, где ω_0 — средняя частота поляризационных фононов, E_b — поляронный сдвиг**), т. е. выигрыш в энергии электрона за счет поляризации решетки и образования самосогласованного локализованного состояния в этой поляризационной яме.

Поскольку $\gamma \gg 1$, то $\Delta E_p \ll \Delta E$ и время распыливания поляронного пакета $\tau_{\text{tun}, p}$, равное

$$\tau_{\text{tun}, p} \approx \frac{\hbar}{\Delta E_p} z \approx \frac{\hbar}{\Delta E} z \exp \left\{ \gamma \operatorname{cth} (\hbar\omega_0/2kT) \right\}, \quad (\text{В. 5})$$

будет гораздо большим, чем время туннельного просачивания для свободного электрона. Поэтому можно надеяться, что при математическом описании явлений переноса будет удобнее ис-

*) Напомним, что Ландау [1] (1933 г.) первым высказал идею о возможности автолокализации электрона на узле решетки за счет сильного взаимодействия с фононами. Однако он не обсуждал вопроса о кинетике с участием таких объектов. Математическая формулировка модели ПМР была дана в 1951 г. Тябляковым [4].

**) В работах [31—33, 42—59, 65, 110—114] эта величина обозначалась как E_p .

пользовать локализованные состояния, а не зонные, и процесс переноса сведется к некоторому типу случайного блуждания по узлам решетки. Однако Ямашита и Куросава такого уравнения переноса не получили. Они лишь вычислили (их метод расчета критиковался в [21]) вероятность перескока на соседний узел в предположении, что всякая корреляция между последовательными актами перескоков отсутствует (т. е. они постулировали пп. 1б) и 1в). При этом оказалось, что в области достаточно высоких температур условие $\tau_{\text{hop}} < \tau_{\text{tun}}$ может выполняться, т. е. локализованное описание пригодно, и вся схема рассмотрения оказывается самосогласованной. Вопросы 1г) и 2) в [20] вообще не обсуждались.

Для того чтобы придать строгость теории, требовалось: дать ответы на вопросы 1б), 1в), 1г) и 2) и, кроме того:

3) найти основные безразмерные параметры теории ПМР во всем температурном диапазоне и установить границы применимости результатов, относящихся к различным предельным случаям;

4) расширить пределы применимости теории ПМР, т. е. связать вероятности переходов с узла на узел и все наблюдаемые величины с исходными характеристиками задачи: T , ΔE , γ , ω_0 , $\Delta\omega$ (здесь $\Delta\omega$ характеризует частотную дисперсию поляризационных фононов) при наименьшем числе ограничений на величины безразмерных параметров теории.

В 1959 г. Холстейн [21] существенно улучшил процедуру вычисления вероятности перескока $W(g)$ между ближайшими узлами, предложив правильный способ устранения формальных математических бесконечностей (см. § 13, гл. IV в первой части книги), принципиально отличный от того, который использовался в [20]. Полученное им выражение для $W(g)$ (в рамках упрощенной двухузельной модели с короткодействием) можно приближенно в пределе малых $\Delta\omega/\omega_0$ представить в виде

$$W(g) = \frac{\omega_0}{2\pi} f(\eta_1, \eta_2, \eta_3, J/kT) \exp\{-2\gamma \text{th}(\hbar\omega_0/4kT)\}. \quad (\text{B. 6})$$

Здесь $J = \Delta E/2z$, f — некоторая безразмерная функция от безразмерных параметров

$$\eta_1 = \frac{J}{E_a}, \quad \eta_2 = \frac{J^2}{\hbar\omega_0 (E_a kT)^{1/2}}, \quad \eta_3 = \frac{J^2}{E_a kT}, \quad \frac{J}{kT},$$

равная

$$f = \begin{cases} \pi^{1/2} \eta_2 & \text{при } \eta_1 \ll 1, \quad \eta_2 \ll 1, \quad \eta_3 \ll 1, \quad 2J/kT \ll 1, \\ 1 & \text{при } \eta_1 \ll 1, \quad \eta_2 > 1, \quad \eta_3 < 1, \quad 2J/kT < 1. \end{cases} \quad (\text{B. 7})$$

Теперь условие $\tau_{\text{hop}, p} < \tau_{\text{tun}, p}$ можно записать следующим образом:

$$\frac{\hbar\omega_0}{2J} \frac{1}{2\pi} f > \exp\left\{\gamma \left[\text{th}\left(\frac{\hbar\omega_0}{4kT}\right) - \frac{1}{\text{sh}(\hbar\omega_0/2kT)} \right]\right\}. \quad (\text{B. 8})$$

Приравнивая левую и правую части (В.8), получим выражение для температуры T_h , выше которой казалось бы имеет смысл говорить о перескоках *).

Итак, Холстейн привел сильные аргументы в пользу разумности использования локализованного описания в области высоких температур, с помощью некоторой упрощенной модели вычислил $W(g)$ и подвижность μ (по формуле (В.3)) в области высоких температур при произвольных η_2 , но $\eta_1 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$, $J/kT \ll 1$ и при не слишком малых $\Delta\omega/\omega_0$, когда перескоки некоррелированы. Принципиальные вопросы 1а) и 1в) в работе [21] не обсуждались. Конструктивного способа расширения пределов применимости теории ПМР (пункт 4)) в [21] предложено не было.

Холстейн считал, что при $T < T_t^{**}$ реализуется другой механизм переноса, который он отождествил с обычным зонным. Использование для σ формулы (15.10) из I части книги фактически эквивалентно гипотезе о применимости кинетического уравнения Больцмана. Окончательная формула Холстейна (15.12) из I части для «зонного» вклада в подвижность μ_b (μ_{band}) (в обозначениях Холстейна) может быть представлена в виде

$$\mu_b = \frac{e}{kT} \langle v_p^2(k) \tau(k) \rangle \equiv \mu_0 \frac{1}{2} \frac{\Delta E_p}{zkT} \frac{\Delta E_p}{z\hbar\tau}, \quad (\text{В.9})$$

где τ — некоторое время релаксации, выражение для которого Холстейн получил в пределе $J \rightarrow 0$ (точнее при $\gamma^2 e^{-\gamma} > J/E_a = \eta_1$). При $T > T_t$ Холстейн предложил использовать для μ выражение $\mu_b = e/kTD$, в котором D определяется формулами (В.1) и (В.6). В принятом им приближении ($J \rightarrow 0$) одно выражение плавно переходит в другое при $T = T_t$. Впоследствии оказалось [31, 32], что некоторые из этих утверждений не совсем верны и, что особенно важно, в области промежуточных температур может реализоваться третий механизм переноса — туннельный, который поддается адекватному описанию только в рамках узельного представления (подробнее см. ниже).

Итак, после пионерских работ Ямашиты, Куросавы [20] и Холстейна [21] необходимо было выполнить еще очень обширную

*) Фактически оказывается, что при не слишком малых J классические перескоки не проявляются вплоть до $T \approx T_3$ (причем $T_3 > T_h$), а зонное описание имеет смысл лишь при $T < T_2$ (причем $T_2 < T_h$). В широком интервале температур $T_2 < T < T_3$ реализуются квантовые многофононные процессы туннельного просачивания [31, 44]. Определение температур T_2 и T_3 дано в § 1 гл. II.

***) Вообще говоря, T_t определяется из условия $\frac{1}{z} \Delta E_p \approx \frac{\hbar}{\tau}$, т. е. совпадает с T_2 , определенной согласно (II.3). Однако Холстейн использует для $1/\tau$ выражение, получающееся лишь в пределе $J \rightarrow 0$, а в этом случае $\hbar/\tau \approx W_h$ и $T_t \sim T_h$. При $\eta_1 > \gamma^2 e^{-\gamma}$ имеем $T_t \equiv T_2 < T_h$, где T_2 описывается приближенной формулой (II.47).

программу исследований. Требовалось внести большую ясность в пункты 1г), 2), 3) и 4) и дать ответ на принципиальные вопросы 1б) и 1в). Кроме того, следовало:

5) вычислить другие кинетические коэффициенты в рамках теории ПМР;

6) построить единый математический формализм для описания любых процессов переноса в конфигурационном пространстве, такой формализм мог бы послужить базой для интуитивного понимания процессов переноса, не описываемых уравнением Больцмана, и позволил бы проследить все предельные переходы (случай слабой связи, случай сильной связи, случай узких зон и т. д.). Общие принципы построения такой теории не должны быть ограничены рамками теории ПМР, поскольку в настоящее время известно уже несколько других механизмов локализации носителя тока на узле [17];

7) основываясь на правильном понимании процессов переноса, предложить постановку таких контрольных экспериментов, из которых с несомненностью следовало бы подтверждение самого механизма переноса (например, туннельного или перескокового).

Таким было положение дел к 1961 г. Для того чтобы построить достаточно полную теорию, способную дать удовлетворительные ответы по всем этим пунктам, необходимо было исходить не из полуинтуитивных соображений (как это было в ранних работах), а из первых принципов. Представлялось заманчивым использовать формализм матрицы плотности или точное выражение для электропроводности — формулу Кубо [22]. Для этого требовалось разработать конструктивный математический аппарат, пригодный в случае сильной связи с фононами. В случае слабой связи такой аппарат был создан в 1960 г. Константиновым и Перелем [23] (метод КП), которые предложили удобный способ расшифровки формулы Кубо с помощью особой графической техники *) (см. также [24—27]).

В 1961 г. автор совместно с И.Г. Ланг начал построение общей теории кинетических явлений в рамках модели ПМР (достаточно узкие неперенормированные зоны и сильная связь электронов с фононами). Подробная работа на эту тему появилась

*) Еще ранее Ван Хов [28] получил для матрицы плотности всей системы «управляющее» уравнение (master equation), которое в принципе позволяет изучать процесс прихода системы к равновесию и в том случае, когда взаимодействие сильно, а время столкновений становится сравнимым со временем релаксации [29, 30] (немарковский процесс). Однако это уравнение несет в себе много лишней информации, ненужной при расшифровке формулы Кубо. Поэтому в тех случаях, когда не возникает необходимости перенормировок внутренних линий в «блоках» (связанных графиках), метод КП более удобен. Так, например, в [25] с помощью метода КП удалось построить последовательную теорию кинетических явлений в квантующем магнитном поле. Проблема перенормировок внутренних линий в методе КП была частично решена в работах [24, 27], посвященных теории переноса в плазме и в работе [26], где была учтена экранировка электрон-фононного взаимодействия.

в 1962 г. *). Авторы исходили из формулы Кубо, а для ее расшифровки был разработан новый метод (см. § 16 гл. V из I части), в основу которого были положены каноническое преобразование, «одевающее» электрон в «поляронную шубу», и особый рецепт выделения «свободных сечений типа $1/s$ », который является обобщением метода КП на случай сильной связи электронов с фононами.

Работы [31, 32] были направлены в основном на выяснение пп. 1), 2), 3), 4). Перечислим некоторые из наиболее важных результатов, полученных в [31, 32]:

А) Найдены все безразмерные параметры теории ПМР во всем температурном диапазоне (п. 3)).

Б) Установлено, при каких ограничениях на эти параметры справедливы результаты Холстейна (т. е. уточнены пределы применимости теории Холстейна).

В) Получены следующие новые результаты:

а) Во всем температурном диапазоне подвижность μ может быть представлена в виде

$$\mu = \mu_h + \mu_t, \quad (\text{B. 10})$$

где μ_h — перескоковый вклад в подвижность, а μ_t — туннельный **).

б) В пределе $J \rightarrow 0$ выражение для μ_h совпало с холстейновским, а при произвольных J представлялось в виде бесконечного ряда по степеням безразмерных параметров η_1, η_2, η_3 и т. д. Провести хотя бы частичное суммирование этого ряда в [31, 32] не удалось.

в) Общее выражение для μ_t , полученное в [31, 32] (см. (16.37) в I части книги), в пределе $\eta_3 \ll 1$ переходит в выражение (16.41), которое можно привести к виду (B. 9). Однако выражение для τ , полученное в [31, 32], совпало с холстейновским лишь в пределе $J \rightarrow 0$, точнее при $\gamma^2 e^{-\gamma} > \eta_1$. При $\eta_1 > \gamma^2 e^{-\gamma}$, но $J^2/\hbar\omega_0 E_a \ll 1$ и $\eta_1 \ll 1$, оно описывается формулой (16.42)***).

г) При $\Delta E_p/z > \hbar/\tau$ выражение для μ_t совпадает с μ_b , которое можно найти с помощью кинетического уравнения. Однако

* В 1961—1962 гг. в печати появились и другие работы по теории ПМР (ссылки на них см. в § 13 гл. V в I части). Ни в одной из них наиболее принципиальные вопросы 1б), 1в) и 6) не обсуждались. Новых (по сравнению с Холстейном [21]) результатов, относящихся к пп. 1а), 2), 4), в них не содержится; по поводу результатов, относящихся к п. 5, см. примечания редактора в I части.

** На том основании, что в области достаточно низких температур μ_t всегда совпадает с μ_{band} , этот вклад был назван в [31] бальмановским, и обозначался как μ_b , однако авторы [31] особо подчеркивали, что полученное ими выражение для μ_b справедливо и в том случае, когда кинетическое уравнение Больцмана неприменимо, т. е. при $\Delta E_p/z < \hbar/\tau$. Впоследствии [57] было предложено назвать этот вклад «туннельным», что лучше соответствует физике явления (подробнее см. §§ 6—8 в гл. I и §§ 5, 7 в гл. II).

*** Формулы для τ , справедливые при произвольных η_3 и $J^2/E_a \hbar\omega_0$, были позднее получены в [48].

оказывается, что формула вида (В. 9) справедлива и при $\Delta E_p/z < \hbar/\tau$ (при условии, что $\eta_3 \ll 1$), когда говорить о «зонном» механизме уже не имеет смысла. Это был первый нетривиальный результат, который нельзя было получить на основании чисто интуитивных соображений. Наглядное описание процесса переноса в этом случае было получено позднее [44].

д) Соотношение (В. 10) не согласуется с утверждением Холстейна о том, что $\mu \equiv \mu_h$ при $T > T_t$, $\mu \equiv \mu_b$ при $T < T_t$, а при $T = T_t$ значение μ_h плавно переходит в μ_t . Утверждение об аддитивности обоих вкладов в подвижность (см. (В. 9)), впервые доказанное в [31] и повторенное в [64, 65], приводит к далеко идущим последствиям при сравнении теории с экспериментом (подробнее см. гл. II и V этой части).

После работ [31, 32] в теории ПМР все еще оставалось много невыясненных вопросов. Чтобы иметь возможность применять теорию ПМР к более широкому классу веществ, требовалось расширить пределы ее применимости (п. 4), т. е. устранить ограничения на величины безразмерных параметров теории. Поскольку выражения для μ_h и μ_t были представлены в [31, 32] в виде бесконечных рядов по степеням этих параметров, требовалось предложить конструктивный способ суммирования этих рядов, когда хотя бы один (или несколько) параметр не мал. Однако эта задача в [31, 32] решена не была. Окончательного ответа на вопросы 1б) и 1в), как и в предыдущих работах [20, 21], получено не было*).

Поэтому для уточнения физической картины переноса представлялось необходимым построить теорию явлений переноса в такой форме, которая допускала бы наглядное описание движения полярона (п. 6) и позволяла бы однозначно интерпретировать экспериментальные данные (пп. 5, 7).

В 1963—1964 гг. появились работы, посвященные инфракрасному поглощению [37—43] и эффекту Холла [33—35] в рамках теории ПМР (в пределе $J \rightarrow 0$, т. е. когда малы все безразмерные параметры теории). Они внесли положительный вклад в п. 5) общей программы, но не продвинули решение остальных принципиальных вопросов. Таким было положение дел к 1965 г.

В работах [42—45] Е. К. Кудинова и Ю. А. Фирсова, опубликованных в 1964—1966 гг. впервые удалось дать достаточно полный ответ на вопросы пп. 1а), 1б), 1в), 1г), 2), 3), 6). Методика расчета, предложенная в [31, 32], была в [42—44] существенно упрощена. Была сформулирована специальная графическая

*) Действительно, самый факт совпадения выражения для высокотемпературной подвижности, полученного в [31], при $J \rightarrow 0$ и $\Delta\omega \approx \omega_0$ с результатом Холстейна, использовавшего в своих расчетах предположение об отсутствии корреляций между последовательными актами перескоков, сам по себе еще не может служить окончательным доказательством марковости процессов при любых значениях безразмерных параметров или привести к формулировке критерия марковости.

техника. Это позволило впоследствии корректно вычислить целый ряд кинетических коэффициентов в рамках теории ПМР (п. 5)): оптическое поглощение [42, 43, 50—52] (см. гл. III), проводимость в сильном электрическом поле [53—56] (см. гл. IV), эффект Холла [57—59] (см. гл. V). Удалось заметно расширить пределы применимости теории ПМР (п. 4) как в области высоких температур [46, 47], так и в области низких температур [48] (см. гл. III).

Наиболее важным достижением работ [44, 45] является формулировка основных принципов построения теории явлений переноса в конфигурационном пространстве (микроскопическая теория случайных блужданий квантового объекта) и описание в смешанном ($k - R$)-представлении (обобщенная теория броуновского движения квантового объекта). Именно это позволило пролить новый свет на принципиальные проблемы, сформулированные в пп. 1б), 1в), 2), 6). Подробному изложению этих результатов посвящена гл. I, однако самые основные утверждения мы приведем уже здесь, тем более, что это естественным образом вписывается в логическую схему введения.

Во всех тех случаях, когда волновой вектор k уже не является «хорошим» квантовым числом (подвижность мала), разумно попытаться выбрать в качестве такового узельный индекс, связанный с положением носителя тока в пространстве узлов решетки. Руководствуясь некоторой аналогией с процессом случайного блуждания по узлам решетки, рассмотрение которого до сих пор удавалось проводить лишь в *классическом пределе*, можно ожидать, что и в упомянутом выше квантовом случае описание разумно проводить с помощью некоторой функции условной вероятности в конфигурационном пространстве (а не с помощью функции распределения $f(k)!$). Функция условной вероятности $P(m, m'; t)$ определяет вероятность такого события: будучи посажен при $t = 0$ на узел m , носитель тока к моменту времени t окажется на узле m' . Коэффициент диффузии в этом случае определяется следующей формулой:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle X^2(t) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_m X_m^2 P(0, m; t), \quad (\text{B. 11})$$

а выражение для подвижности μ получается из соотношения Эйнштейна.

Итак, основная задача сводится теперь к установлению критерия применимости формулы (B. 11) и к отысканию уравнения для функции $P(0, m; t)$. В гл. I будет показано, что это выражение для D справедливо во всех тех случаях, когда неперенормированные зоны для квазичастиц оказываются достаточно узкими, и, в частности, оно пригодно и для ПМР в области достаточно высоких температур. Заметим, однако, что формула (B. 1) получается из (B. 11) лишь при выполнении следующих условий:

А) Если можно пренебречь всеми квантовыми эффектами, например процессом туннелирования носителя тока с узла на узел с учетом рассеяния на колебаниях решетки.

Б) Если перескоки не коррелированы, т. е. в тот момент, когда происходит новый прыжок, уже полностью утрачена «память» о предыдущем прыжке носителя тока.

В) Если можно пренебречь вкладом от перескоков на более далекие узлы.

В тех случаях, когда выполняются условия А) и Б), задача существенно упрощается, ибо удается заранее представить себе вид уравнения для $P(0, m; t)$ (руководствуясь аналогией с классической теорией случайных блужданий). Если условие Б) не выполнено, то угадать вид уравнения для $P(0, m; t)$ без соответствующего микроскопического рассмотрения гораздо сложнее. В тех случаях, когда не выполняется условие А), необходимо начинать построение теории с самого начала с тем, чтобы учесть все квантовые эффекты. Оказывается (см. §§ 4—6 гл. I), что для корректного учета квантовых эффектов, помимо диагональных компонент функции условной вероятности $P(m, m'; t) \equiv P_{mm'}^{mm'}(t)$, требуется рассматривать и «недиагональные по узельным индексам» компоненты функции условной вероятности $P_{mm_2}^{mm_1}$, которые и будут описывать квантовый процесс расплывания волнового пакета (подробнее см. § 6 гл. I). Связанная система уравнений для этих величин приведена в § 6 гл. I (см. формулы (1.58), (1.59)). В каждом конкретном случае и, в частности, для модели ПМР основная задача микроскопического подхода сводится к тому, чтобы найти следующие величины:

$W_{mm_1}^{mm_1} \equiv W(m - m_1)$ — вероятность перескока центра волнового пакета с узла m на узел m_1 ;

$W_{mm_2}^{mm_1}$ — вероятность недиагональных переходов, описывающая процесс расплывания волнового пакета с учетом взаимодействия с колебаниями решетки;

$|W_{m_2, m_2}^{m_1, m_1}| \equiv \tau^{-1}(m_1 - m_2)$ — вероятность некоторого «трения», возникающего в процессе туннелирования (подробнее см. в § 4 гл. II).

Для вычисления этих величин в рамках модели ПМР в [43, 44] была разработана специальная графическая техника, описанная в Приложении 2. При ее построении использованы идеи, высказанные в ранних работах автора и И. Г. Ланг. Оказывается, что условие А) реализуется для ПМР в области достаточно высоких температур (подробнее см. гл. II), условие Б) имеет место при не слишком малой ширине дисперсии оптических фононов [67]

$$\Delta\omega/\omega_0 > 6(2E_a/kT)^{1/2} W/\omega_0 = (3/\pi)(2E_a/kT)^{1/2} f(\eta_1, \eta_2, \eta_3)e^{-E_a/kT},$$

а условие В) выполняется в области достаточно высоких температур в пределе узких исходных зон, когда мал безразмерный

параметр $\eta_3 = J^2/kTE_a$. Если условие В) не выполнено, то выражение для μ_h следует записать в виде

$$\mu_h = \frac{e}{kT} \frac{1}{2} \sum_m X_m^2 W(m), \quad (\text{В.12})$$

где суммирование проводится по всем узлам, а не только по ближайшим соседям, как в (В. 1).

Итак, ранние результаты Холстейна для «перескокового» вклада в подвижность μ_h (см. формулу (15.9) в I части)) имеют весьма ограниченную область применимости. Это было показано еще в ранних работах И. Г. Ланг и автора [31, 32]. Конкретные результаты для μ_h , относящиеся к тому случаю, когда условия Б) и В) не выполняются, были получены гораздо позднее [44, 67] (см. § 3 гл. II).

Квантовый вклад в подвижность μ_t , который играет доминирующую роль в том случае, если условие А) не выполняется, был впервые определен в [31, 32] в рамках модели ПМР в пределе малых J путем формального распутывания формулы Кубо и суммирования рядов «по степеням $1/s$ » (см. § 16 в I части). При этом понятие о функции условной вероятности не использовалось. Совместная система уравнений для $P_{mm_2}^{mm_1}(t)$ и $P(m, m'; t)$ была найдена и решена позднее в [44]. Это позволило получить выражение для μ_t , справедливое при гораздо меньших ограничениях на величину J (при $\bar{W}_{0m_2}^{0m_1} \ll W_{m_2m_2}^{m_1m_1}$, см. (I.64)) в следующем виде:

$$\mu_t = \frac{e}{kT} \frac{1}{2} \sum_{\substack{m \\ m_1 \neq m_2}} X_m^2 W_{0m_2}^{0m_1} W_{m_2m_2}^{m_1m_1} \tau(m_1 - m_2). \quad (\text{В.13})$$

Итак, именно на примере ПМР в [44] удалось впервые построить микроскопическое описание квантового процесса случайных блужданий по узлам решетки. Однако следует уметь ответить на вопрос о пределах применимости такого способа описания. Оказывается (см. § 10 гл. I), что приведенные выше выражения, да и весь подход в целом, справедливы только в тех случаях, когда истинная функция распределения квазичастиц (в данном случае ПМР) по импульсам $n(\mathbf{k})$, с хорошей степенью точности оказывается постоянной: $n(\mathbf{k}) \approx \text{const}$. В случае ПМР при достаточно низких температурах (или при не слишком малых J) это условие уже не выполняется. В этом случае оказывается более удобным пользоваться смешанным $(\mathbf{k} - \mathbf{R})$ -представлением. Формулу для D , справедливую при произвольной силе связи с фононами (а не только для ПМР), удастся представить в виде (см. § 10 гл. I) [45]

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_m X_m^2 \sum_k n(\mathbf{k}) F(\mathbf{k}, \mathbf{R}_m; t). \quad (\text{В.14})$$

Здесь $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$ — функция, сопряженная к вигнеровской матрице плотности. Она обладает тем свойством, что $\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}, \mathbf{R}_m, t) \equiv \equiv P(0, m; t)$. Поэтому в пределе $n \approx \text{const}$ (В. 14) переходит в (В. 11). Уравнение для $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$ было впервые получено в [45]. Оно приведено в § 10 гл. I (см. (I. 116)). Вытекающие из (В. 14) общие формулы для подвижности приведены в § 9 (см. (I. 114) и (I. 117)). В гл. I показано, что описание с помощью функции $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$ фактически отвечает построению обобщенной теории броуновского движения квантового объекта (в данном случае носителя тока). Поэтому многие из полученных в рамках такого описания формул будут иметь более широкие пределы применимости, чем теория ПМР.

Выше были кратко описаны основные результаты, полученные в гл. I, которая занимает центральное место во II части и основана на работах [44, 45] Е. К. Кудинова и Ю. А. Фирсова. Ее существенно дополняют математические приложения 1—6; в них изложена графическая техника в узельном (\mathbf{R})- и смешанном ($\mathbf{k} - \mathbf{R}$)-представлениях и дается беглое описание наиболее важных этапов расчета.

Гл. II посвящена теории статической электропроводности. При ее написании использовались работы И. Г. Ланг и Ю. А. Фирсова [32, 46, 47], Е. К. Кудинова и Ю. А. Фирсова [43, 44], В. В. Брыксина и Ю. А. Фирсова [48, 49].

В гл. III обсуждаются инфракрасное и оптическое поглощение в поляронных полупроводниках. Она основана на работах Е. К. Кудинова и Ю. А. Фирсова [42, 43, 50—52], и на работах некоторых зарубежных авторов (Иггс [37, 38], Рейк [39] и др.).

В гл. IV излагается теория электропроводности ПМР в сильном электрическом поле, построенная на работах В. В. Брыксина и Ю. А. Фирсова [53—56].

В гл. V описывается современное состояние вопроса об эффекте Холла для поляронных полупроводников. При написании этой главы в основном использовались работы Ю. А. Фирсова [53, 57], В. В. Брыксина и Ю. А. Фирсова [58, 59, 110—114], Т. Холстейна и Д. Эмина [60, 61].

В заключение сформулированы основные вопросы, стоящие перед теорией ПМР в настоящее время.

**МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ ДЛЯ ОПИСАНИЯ
ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В УЗЕЛЬНОМ (R)-
И В СМЕШАННОМ (K — R)-ПРЕДСТАВЛЕНИЯХ.
ОБЩИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ
И ИХ СТОХАСТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ**

§ 1. Вводные замечания

В настоящей главе мы изложим общие принципы построения теории кинетических явлений в слабых электрических полях в отсутствие магнитного поля в пределе малых концентраций носителей тока, но при произвольной силе связи носителей тока с фононами и при произвольной ширине энергетических зон для квазичастиц (т. е. зон, перенормированных за счет взаимодействия с колебаниями решетки).

Некоторые из полученных здесь результатов не ограничены рамками теории ПМР, в которой предполагается, что связь с фононами сильная, а «исходные» (неперенормированные) зоны узкие. Общая теория кинетических явлений в сильных электрических полях изложена в гл. IV, а вопрос об эффекте Холла в рамках теории ПМР разобран в гл. V.

Напомним, что случай слабой связи носителей тока с фононами обычно рассматривают в k -представлении и используют при этом уравнение Больцмана. Однако кинетическое уравнение имеет свои пределы применимости. Оно непригодно для описания движения носителей тока, обладающих слишком малой подвижностью (см. Введение). Поэтому мы будем исходить из формулы Кубо для электропроводности σ [22]

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{V} \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^{\infty} e^{-st} dt \langle j_x(-i\hbar\lambda) j_x(t) \rangle |_{s=0}. \quad (I. 1)$$

Здесь $j(t)$ — оператор тока системы в гейзенберговском представлении, $\langle \dots \rangle$ — усреднение по Гиббсу, V — объем системы, $\beta = 1/kT$.

Во Введении отмечалась необходимость разработки такого математического формализма, который позволял бы описывать процесс переноса в узельном (R)- и в смешанном (k — R)-представлениях. Однако обычная форма записи формулы Кубо (см. (I. 1)) неудобна для работы в узельном представлении (представлении Ваннье), ибо она содержит операторы тока, основная

часть которых диагональна в k -представлении, но *недиагональна* в представлении Ванье. Поэтому мы прежде всего представим выражение для σ через коррелятор дипольных моментов d , так как основная часть оператора d *диагональна в представлении Ванье*. Впоследствии мы увидим, что такая форма записи удобна и при работе в смешанном ($k - R$)-представлении.

§ 2. Представление формулы Кубо для электропроводности через коррелятор дипольных моментов

Будем исходить из формулы Кубо для электропроводности в виде [22]

$$\sigma_{xx} = \frac{i}{\hbar V} \int_0^{\infty} e^{-st} \langle [j_x(t), d_x(0)] \rangle dt. \quad (I. 2)$$

Здесь $[A, B] \equiv AB - BA$, j — оператор полного тока электронов, d — оператор дипольного момента электронов, причем между ними существует связь

$$j(t) = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, d(t)] = \frac{d}{dt} d(t), \quad (I. 3)$$

где \mathcal{H} — гамильтониан системы, $j(t)$, $d(t)$ — соответствующие операторы в гейзенберговском представлении. Угловые скобки означают усреднение с гиббсовой матрицей плотности

$$\langle A \rangle = \text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}} A) / \text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}}). \quad (I. 4)$$

В этих формулах $\beta \equiv 1/kT$ — обратная температура, V — объем кристалла, s — адиабатический параметр включения: $s > 0$, $s \rightarrow 0$. Преобразуем (I. 2) так, чтобы избавиться от коммутатора. Будем сразу вычислять вещественную часть от σ . Выражая среднее в (I. 2) через матричные элементы операторов на полной системе собственных функций гамильтониана \mathcal{H} , имеем

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \text{Re} \frac{i}{\hbar V} \int_0^{\infty} e^{-st} dt \sum_{a, b} e^{-\beta E_a} \left\{ j_{ab}^{(x)} d_{ba}^{(x)} e^{i \frac{t}{\hbar} (E_a - E_b)} - \right. \\ &\quad \left. - d_{ab}^{(x)} j_{ba}^{(x)} e^{-i \frac{t}{\hbar} (E_a - E_b)} \right\} = \\ &= \text{Re} \frac{i}{\hbar V} \sum_{a, b} e^{-\beta E_a} j_{ab}^{(x)} d_{ba}^{(x)} \frac{1 - e^{-\beta (E_a - E_b)}}{s - \frac{i}{\hbar} (E_a - E_b)} = \\ &= \frac{\beta}{V} \sum_{a, b} e^{-\beta E_a} |j_{ab}^{(x)}|^2 \pi \delta \left(\frac{E_a - E_b}{\hbar} \right). \quad (I. 5) \end{aligned}$$

При переходе к последнему звену цепочки равенств использовались связь (I. 3) между d_{ab} и j_{ab} и тот факт, что

$$\text{Re} \left[s - \frac{i}{\hbar} (E_a - E_b) \right]^{-1} = \pi \delta \left(\frac{E_a - E_b}{\hbar} \right).$$

Итак, из (I.5) для σ получим

$$\sigma_{xx} = \frac{\beta}{V} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} e^{-st} \langle j_x(t) j_x(0) \rangle dt \Big|_{s \rightarrow 0}. \quad (\text{I.6})$$

Используя (I.3) в гейзенберговском представлении, а также соотношение

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{d}(t) \mathbf{j}(0) \rangle &= \langle \mathbf{d}(0) \mathbf{j}(-t) \rangle = -\frac{d}{dt} \langle \mathbf{d}(0) \mathbf{d}(-t) \rangle = \\ &= -\frac{d}{dt} \langle \mathbf{d}(t) \mathbf{d}(0) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{I.7})$$

и интегрируя (I.6) дважды по частям по t , получим

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -\frac{\beta}{V} \operatorname{Re} \langle d_x(0) j_x(0) \rangle + \frac{s\beta}{V} \operatorname{Re} \langle d_x^2(0) \rangle - \\ &\quad - \frac{\beta}{V} \operatorname{Re} s^2 \int_0^{\infty} e^{-st} \langle d_x(t) d_x(0) \rangle dt. \end{aligned} \quad (\text{I.8})$$

Поскольку

$$\langle d_x(0) j_x(0) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle d_x [\mathcal{H} d_x] \rangle = \frac{i}{\hbar} (\langle d_x \mathcal{H} d_x \rangle - \langle d_x^2 \mathcal{H} \rangle) \quad (\text{I.9})$$

и оба члена в круглых скобках вещественны, видно что $\operatorname{Re} \langle d_x(0) j_x(0) \rangle = 0$. Поэтому в пределе $s \rightarrow 0$ (I.8) дает

$$\sigma_{xx} = -\frac{e^2}{V k T} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \int_0^{\infty} e^{-st} \langle (X(t) - X(0)) X(0) \rangle dt. \quad (\text{I.10})$$

Здесь X есть оператор координаты в гейзенберговском представлении. В Приложении 1 показано, что для широкого класса кристаллов в формуле Кубо достаточно оставить лишь диагональную (по узлам) часть дипольного момента

$$d_x = e \sum_m X_m a_m^+ a_m \quad (\text{I.11})$$

(здесь $X_m = (\mathbf{R}_m)_x$). Подставляя (I.11) в (I.10), получаем

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -\frac{e^2 \beta}{2V} \lim_{s \rightarrow 0} s \sum_{m, m'} (X_m - X_{m'})^2 \langle a_m^+ a_m a_{m'}^+ a_{m'} \rangle + \\ &\quad + \frac{e^2 \beta}{2V} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \int_0^{\infty} e^{-st} \sum_{m, m'} (X_m - X_{m'})^2 \langle (a_m^+ a_m)_t a_{m'}^+ a_{m'} \rangle dt. \end{aligned} \quad (\text{I.12})$$

Мы ограничиваемся низшим (первым) порядком по концентрации электронов n , поэтому первый член в (I.12) должен быть

отброшен*), так как он является по крайней мере квадратичным по операторам числа электронов на узле $a_m^+ a_m$ (поскольку члены с $m = m'$, которые могли бы дать величину первого порядка по n , выпадают из-за присутствия множителя $(X_n - X_{m'})^2$).

С учетом вышесказанного выражение для σ_{xx} принимает вид

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \beta}{2V} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \operatorname{Re} \int_0^{\infty} e^{-st} \sum_{m, m'} (X_m - X_{m'})^2 \langle (a_m^+ a_m)_t (a_{m'}^+ a_{m'}) \rangle dt, \quad (I. 13)$$

где коррелятор вычисляется в низшем по n приближении. Заметим, что (I. 13) можно переписать и так:

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \beta}{2V} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_{m, m'} (X_m - X_{m'})^2 \langle (a_m^+ a_m)_t (a_{m'}^+ a_{m'}) \rangle, \quad (I. 14)$$

если предел правой части существует. Полагая теперь V равным объему, приходящемуся на один электрон, т. е. $V = 1/n$, перепишем (I. 14) в виде

$$\sigma_{xx} = \frac{ne^2}{kT} D_{xx}, \quad (I. 15)$$

где

$$D_{xx} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \sum_{m, m'} (X_m - X_{m'})^2 \langle (a_m^+ a_m)_t (a_{m'}^+ a_{m'}) \rangle. \quad (I. 16)$$

Шпур в (I. 16) вычисляется с учетом условия $\sum_m a_m^+ a_m = 1$, т. е. все расчеты проводятся для одного носителя тока.

Величина D имеет смысл коэффициента диффузии, а (I. 15) есть соотношение Эйнштейна, связывающее σ и D . В дальнейшем будет показано, что в случае узких зон соотношение (I. 16) допускает весьма простое и наглядное истолкование.

В работе Кубо [22] для системы из невзаимодействующих заряженных частиц приведено выражение

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \langle (X(t) - X(0))^2 \rangle, \quad (I. 16a)$$

которое переходит в (I. 16), если операторы X , фигурирующие в (I. 16a), записать в представлении Ванье. Однако, насколько нам известно, вплоть до появления работ [44, 45], никто не применял формулы (I. 13) в какой-либо конкретной задаче. Ниже будет видно, что для этого надо разработать специальную расчетную технику.

*) Заметим, что при $N \rightarrow \infty$ и $N/V = \text{const}$ (N — число узлов решетки) этот член $\sim n^2 N$, однако такое же выражение содержится во втором члене (I. 12) с противоположным знаком, поэтому они сокращаются. В рамках техники Константинова и Переля [23] учет первого члена в (I. 12) означает исключение из рассмотрения графиков нулевого порядка по взаимодействию с замыканием электронных линий на «клеммах».

§ 3. Исходный гамильтониан при произвольной силе связи электронов с фононами

Разложим квантованную электронную $\hat{\Psi}$ -функцию в ряд по ортонормированной системе функций φ_m , отвечающих электронной плотности, сконцентрированной вблизи m -го узла, т. е.

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_m a_m \varphi_m(\mathbf{r}), \quad (\text{I. 17})$$

где $a_m(a_m^\dagger)$ — операторы уничтожения (рождения) электронов на m -м узле. Никаких детальных сведений об этих функциях кроме свойства

$$\varphi_m(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m),$$

где \mathbf{R}_m — радиус-вектор, характеризующий положение узла, нам в дальнейшем знать не понадобится. Например, это могут быть функции Ванье [62, 63].

В дальнейшем мы не будем включать состояния, отвечающие верхним зонам (возбужденным уровням). Из Приложения 1 следует, что для нашей задачи это ограничение несущественно.

У веществ с малой подвижностью, как правило, имеется несколько атомов в элементарной ячейке и степень их ионности велика (т. е. оптические ветви колебаний — поляризационные). Тогда перескоки происходят по ионам того сорта, у которого сродство к заряду данного знака наибольшее, а поэтому вектор \mathbf{R}_m однозначно характеризует нужный ион в m -й элементарной ячейке. В приближении самосогласованного поля электронный гамильтониан \mathcal{H}_e запишем в виде

$$\mathcal{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \sum_{n=1}^n U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n, x_n). \quad (\text{I. 18})$$

Здесь $U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n, x_n)$ — потенциальная энергия в поле n -й ячейки, x_n — координаты относительного смещения атомов внутри элементарной ячейки. В представлении вторичного квантования полный гамильтониан системы имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_m \epsilon a_m^\dagger a_m + \sum_{m, g} J(\mathbf{g}) a_{m+g}^\dagger a_m + \sum_{q, j} \hbar \omega_{qj} (b_{qj}^\dagger b_{qj} + 1/2) - \\ & - \sum_m a_m^\dagger a_m \sum_{q, j} \hbar \omega_{qj} [u_{mj}^* b_{qj} + u_{mj} b_{qj}^\dagger] - \\ & - \sum_{m, g} a_{m+g}^\dagger a_m \sum_{q, j} \hbar \omega_{qj} [I_j^*(\mathbf{q}, \mathbf{g}) u_{mj}^*(\mathbf{q}) b_{qj} + \\ & + I_j(\mathbf{q}, \mathbf{g}) u_{mj}(\mathbf{q}) b_{qj}^\dagger], \quad (\text{I. 19}) \end{aligned}$$

где $b_{qj}^\dagger (b_{qj})$ — операторы рождения (уничтожения) фононов, j — номер колебательной ветви; $u_{mj}(\mathbf{q}) = -\gamma_{qj}^* \left(\frac{1}{2N}\right)^{1/2} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_m}$ — безразмерные величины, характеризующие смещения, возникшие

вследствие поляризации среды — электроном, сидящим на m -м узле (здесь N — число элементарных ячеек в кристалле); γ_{qj} — коэффициенты, определяющие взаимодействие электронов с фононами j -й ветви. Для случая взаимодействия с продольными оптическими колебаниями с предельной частотой ω_0 имеем (сравни с (2.2) в I части книги):

$$|\gamma_q|^2 = \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega \hbar \omega_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) f(\mathbf{qg}) = 8\pi\alpha \frac{l}{q^2 \Omega} f(\mathbf{qg}). \quad (I. 19a)$$

Здесь α — фреilihовская константа связи электронов с поляризационными фононами, $l = 1/u = (\hbar/2m^*\omega_0)^{1/2}$ — характерная длина, m^* — неперенормированная эффективная масса (в приближении достаточно узких исходных зон равная $\hbar^2/2Ja^2$), Ω — объем элементарной ячейки, ϵ_0 и ϵ_∞ — диэлектрические проницаемости кристалла соответственно с учетом и без учета ионной инерционной части. Согласно [31] $f(\mathbf{qg}) \sim 1$ при $\mathbf{qg} \ll 1$, т. е. (I. 19a) переходит в формулу (16.4) из I части книги.

Далее $I_j(\mathbf{q}, \mathbf{g})$ — безразмерная величина, характеризующая отношение недиагонального по узлам матричного элемента от оператора электрон-фононного взаимодействия к диагональному. Величины ϵ и $J(\mathbf{g})$, имеющие размерность энергии, равны

$$\epsilon = \int \varphi_m^*(\mathbf{r}) \mathcal{H}_e \varphi_m(\mathbf{r}) d^3r, \quad J(\mathbf{g}) = \int \varphi_{m+\mathbf{g}}^*(\mathbf{r}) \mathcal{H}_e \varphi_m(\mathbf{r}) d^3r,$$

ϵ — энергия связи, отсчитанная от уровня ионизации соответствующего иона, $J(\mathbf{g})$ — резонансный интеграл перекрытия.

Тот факт, что ϵ и $J(\mathbf{g})$ не зависят от индекса m , отражает трансляционную инвариантность задачи. Поэтому в дальнейшем мы положим $\epsilon = 0$ (такова система отсчета энергии). Оставим для простоты в (I. 19a) лишь те продольные поляризационные фононы, взаимодействие с которыми наиболее сильно, т. е. константа связи для которых самая большая

$$\tilde{\gamma} = \sum_q |u_m(\mathbf{q})|^2 = \frac{1}{2N} \sum_q |\gamma_q|^2 \gg 1.$$

Задача может быть решена и без этого упрощения, но учет дополнительного взаимодействия, например с акустическими фононами или с другими ветвями оптических колебаний (связь с которыми слабая), сделал бы окончательные выражения более громоздкими.

Легко установить полное соответствие (1.19) с гамильтонианом Холстейна (13.6) в I части. Действительно, 3-й член в (I. 19) есть \mathcal{H}_{lat} , 4-й совпадает с $E(x_n)$, если последний представить в виде (13.5); 2-й и 5-й члены отвечают разложению $J(x, x_{n\pm 1})$ в ряд по смещениям x_n с точностью до членов 1-го порядка. Кстати, для того чтобы в (I. 19a) можно было ограничиться только линейными членами по смещениям (т. е. по b_q и b_q^\dagger), необходимо, чтобы 4-й член был меньше, чем 1-й, 5-й член меньше,

чем 2-й. Это означает, что постоянные смещения, возникающие при поляризации электроном окружающей среды, должны быть малы по сравнению с межатомными расстояниями. Легко показать, что это требование не противоречит условию $\tilde{\gamma} \gg 1$, т. е. ситуация здесь такая же, как и для поляронов большого радиуса. В дальнейшем мы покажем (см. § 7 гл. II), что учет малых членов более высокого порядка по смещениям все же может привести иногда к качественно новым эффектам: возникают локальные колебания, центрированные около временного местоположения полярона, и это может изменить выражение для энергии активации и т. д.

Обозначим через A_q^2 произведение $\hbar\omega_q M\omega_q^2 |\gamma_q|^2$. Случай короткодействия соответствует предположению $A_q \equiv A$, где A не зависит от q и совпадает с (13.5) в I части книги. Очевидно, что в этом случае $|\gamma_q|^2$ иначе зависит от q , чем (I. 19a).

Предположим далее, что $I(q, g) \ll 1$. Во всяком случае, при слабом перекрытии функций $\varphi_m(\mathbf{r})$ и $\varphi_{m+g}(\mathbf{r})$ (и соответственно при малых J) эта величина мала как $J(g)/\epsilon$. Поэтому последний член в (I. 19) будет самым маленьким, и мы опустим его. Согласно [31] учет этого члена в теории ПМР привел бы, например, к замене *)

$$J \rightarrow \tilde{J} = J - \frac{1}{N} \sum_q \hbar\omega_q |\gamma_q|^2 \operatorname{Re} I(q, g).$$

Если согласиться с приведенной выше оценкой $I \approx J/\epsilon$, то отношение поправки к основному члену по порядку величины равно E_p/ϵ , которое для веществ рассматриваемого типа обычно много меньше единицы.

Итак, упрощенный гамильтониан, который будет использоваться в дальнейшем, имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_q \hbar\omega_q (b_q^+ b_q + 1/2) + \sum_{m, g} J(g) a_{m+g}^+ a_m - \\ & - \sum_m a_m^+ a_m \sum_q \hbar\omega_q [u_m^*(q) b_q + u_m(q) b_q^+]. \end{aligned} \quad (\text{I. 20})$$

Отметим, что при переходе в k -представление путем подстановки

$$a_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k e^{ikR_m},$$

мы приходим к гамильтониану Фрелиха

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_q \hbar\omega_q (b_q^+ b_q + 1/2) + \sum_k \epsilon(k) a_k^+ a_k + \\ & + \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{k, q} \hbar\omega_q (\gamma_q b_q^+ a_k^+ a_{k+q} + \gamma_q^* b_q a_k^+ a_{k-q}), \end{aligned} \quad (\text{I. 20a})$$

*) Не исключено, что учет этого члена в гамильтониане может дать заметный вклад в «затухание» поляронных состояний.

где $\varepsilon(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{g}} J(\mathbf{g}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{g}}$ — неперенормированная энергия электрона, имеющая стандартный вид, отвечающий известному приближению сильной связи в теории энергетических спектров. Отметим, что учет последнего члена в (I.19) привел бы к замене $\gamma_{\mathbf{q}} \rightarrow \gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k})$ и означал бы выход за рамки обычного приближения Фрелиха, на котором основана вся теория ПМР и ПБР. Поэтому в дальнейшем мы будем исходить из гамильтониана (I.20), в котором оставлены лишь те члены электрон-фононного взаимодействия, которые возникают за счет деформации исходного атомного N -кратно вырожденного энергетического уровня за счет колебаний решетки.

§ 4. Каноническое преобразование в теории ПМР [31]

Диагональная по узлам часть гамильтониана (I.20) диагонализуется по фононным переменным с помощью канонического преобразования, которое производится следующим унитарным оператором:

$$U = e^{-S}, \quad \text{где } S = \sum_{\mathbf{m}} \hat{S}_{\mathbf{m}} a_{\mathbf{m}}^{\dagger} a_{\mathbf{m}}, \quad (\text{I.21})$$

а

$$\hat{S}_{\mathbf{m}} = \sum_{\mathbf{q}} [b_{\mathbf{q}}^{\dagger} u_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}) - b_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{m}}^*(\mathbf{q})]. \quad (\text{I.22})$$

В результате имеем для $\tilde{\mathcal{H}} = e^{-S} \mathcal{H} e^S$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} = & - \sum_{\mathbf{m}} a_{\mathbf{m}}^{\dagger} a_{\mathbf{m}} E_{\mathbf{b}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + 1/2) + \\ & + \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{g}} J(\mathbf{g}) a_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}^{\dagger} a_{\mathbf{m}} \hat{\Phi}_{\mathbf{m}, \mathbf{g}} + \Delta \mathcal{H}, \quad (\text{I.23}) \end{aligned}$$

где $E_{\mathbf{b}} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2$ — поляронный сдвиг (ср. с (16.3) в I части книги),

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_{\mathbf{m}, \mathbf{g}} = & \exp(\hat{S}_{\mathbf{m}+\mathbf{g}} - \hat{S}_{\mathbf{m}}) = \\ = & \exp \left\{ \sum_{\mathbf{q}} [b_{\mathbf{q}}^{\dagger} \Delta_{\mathbf{q}}(\mathbf{m}, \mathbf{m} + \mathbf{g}) - b_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^*(\mathbf{m}, \mathbf{m} + \mathbf{g})] \right\}, \quad (\text{I.24}) \end{aligned}$$

$$\Delta_{\mathbf{q}}(\mathbf{m}, \mathbf{m} + \mathbf{g}) = u_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}) - u_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}(\mathbf{q}). \quad (\text{I.24a})$$

При выводе (I.23) и (I.24) учитывалось тождество $|\gamma_{\mathbf{q}}|^2 = |\gamma_{-\mathbf{q}}|^2$, вследствие которого

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \sin[\mathbf{q}(\mathbf{R}_{\mathbf{m}_1} - \mathbf{R}_{\mathbf{m}_2})] = 0. \quad (\text{A})$$

Отметим, что оператор $\hat{\Phi}_{\mathbf{m}, \mathbf{g}}$ трансляционно инвариантен, т. е. не меняется при замене $\mathbf{R}_{\mathbf{m}} \rightarrow \mathbf{R}_{\mathbf{m}} + \mathbf{G}$, $b_{\mathbf{q}} \rightarrow b_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{G}}$, где \mathbf{G} — произвольный вектор решетки. Член $\Delta \mathcal{H}$, учитывающий корреляцию

за счет обмена фононами, имеет вид

$$\Delta \mathcal{H} = - \sum_{m_1 \neq m_2} a_{m_1}^+ a_{m_1} a_{m_2}^+ a_{m_2} \sum_q \hbar \omega_q \operatorname{Re} \{ u_{m_1}^*(\mathbf{q}) u_{m_2}(\mathbf{q}) \}. \quad (\text{I. 25})$$

В дальнейшем он будет опущен, так как в исходном гамильтониане уже опущены все члены 4-го порядка по электронным операторам, описывающие парные корреляции (см. начало Введения).

При выводе (I. 23) были использованы следующие правила преобразования электронных и фононных операторов:

$$\tilde{a}_m = a_m \exp(-\hat{S}_m), \quad \tilde{a}_m^+ = a_m^+ \exp(\hat{S}_m), \quad (\text{I. 26})$$

$$\tilde{b}_q = b_q - \sum_m a_m^+ a_m u_m(\mathbf{q}), \quad \tilde{b}_q^+ = b_q^+ - \sum_m a_m^+ a_m u_m^*(\mathbf{q}). \quad (\text{I. 26a})$$

Относительно волновой функции указанное преобразование является переходом от Ψ к $\tilde{\Psi}$, где

$$\tilde{\Psi} = U\Psi = \exp(-S)\Psi. \quad (\text{I. 27})$$

Обсудим физический смысл канонического преобразования (I. 21). Оно диагонализует по фононным переменным диагональную по узлам часть гамильтониана (I. 20), которую мы обозначим \mathcal{H}_0 :

$$\mathcal{H}_0 = \sum_q \hbar \omega_q (b_q^+ b_q + 1/2) - \sum_m a_m^+ a_m \sum_q \hbar \omega_q [u_m^*(\mathbf{q}) b_q + u_m(\mathbf{q}) b_q^+]. \quad (\text{I. 28})$$

После преобразования \mathcal{H}_0 переходит в $\tilde{\mathcal{H}}_0 = \tilde{\mathcal{H}}_{0,e} + \tilde{\mathcal{H}}_{0,ph}$, где

$$\tilde{\mathcal{H}}_{0,ph} = \sum_q \hbar \omega_q (b_q^+ b_q + 1/2), \quad \tilde{\mathcal{H}}_{0,e} = -E_b \sum_m a_m^+ a_m. \quad (\text{I. 29})$$

Гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}_0$ описывает систему электронов, сидящих на узлах решетки (номер узла является точным квантовым числом, поскольку в $\tilde{\mathcal{H}}_0$ нет членов, связывающих состояния электрона на разных узлах). Предположим сначала, что в кристалле отсутствуют электроны. Пусть решетка находится в одном из стационарных состояний Φ_M (M — совокупность осцилляторных квантовых чисел), являющихся собственными функциями гамильтониана \mathcal{H}_{ph} , отвечающего несмещенным центрам тяжести осцилляторов. Допустим, что в такую решетку помещен один электрон на узел m в момент времени t . Волновая функция системы в этот момент есть

$$\Phi_M a_m^+ |0\rangle. \quad (\text{I. 30})$$

Ввиду наличия взаимодействия электронов с фононами, она, конечно, не будет собственной функцией гамильтониана \mathcal{H}_0 , но физически ясно, что присутствие электрона приведет лишь к из-

менению равновесных положений ядер, причем вблизи этих новых положений ядра будут по-прежнему совершать малые колебания. Заметим, что собственные функции преобразованного гамильтониана $\tilde{\mathcal{H}}_0$ для состояний с одним электроном имеют вид

$$\tilde{\Psi}_{mM}(\xi) = \Phi_M(\xi) a_m^+ |0\rangle \quad (\text{I. 30a})$$

(ξ — совокупность координат решетки). Здесь $\Phi_M(\xi)$ — волновая функция системы N осцилляторов, соответствующих N нормальным колебаниям

$$\Phi_M(\xi) = \prod_q \Psi(N_q, \xi_q), \quad (\text{I. 31})$$

N_q — квантовое число q -го осциллятора.

С другой стороны, мы видим, что точные одноэлектронные собственные функции $\tilde{\mathcal{H}}_0$ (см. (I. 28)), равны

$$a_m^+ |0\rangle \prod_q \Psi(N_q, \xi_q - \xi_q^{(0)}(\mathbf{m})), \quad (\text{I. 32})$$

где $\xi_q^{(0)}(\mathbf{m})$ — упомянутые равновесные смещения центра осцилляторов, возникающие вследствие наличия электрона на узле \mathbf{m} . Произведя преобразование, обратное (I. 21), получаем, что состоянию (I. 31) в исходном представлении (до канонического преобразования) соответствует волновая функция

$$\Psi = \exp(S) \tilde{\Psi} = \exp(S) a_m^+ |0\rangle \Phi_M(\xi) = a_m^+ |0\rangle \exp(\hat{S}_m) \Phi_M(\xi). \quad (\text{I. 33})$$

Поскольку результатом взаимодействия является перестройка равновесных положений вида (I. 32), то действие оператора $\exp(\hat{S}_m)$ на осцилляторную функцию $\Phi_M(\xi)$ заключается в смещении положений равновесия таким образом, чтобы при помещении электрона на узел \mathbf{m} получилось стационарное состояние. Отметим, что в представлении непреобразованного гамильтониана оператор

$$A_m^+ = \exp(\hat{S}_m) a_m^+ \quad (\text{I. 34})$$

можно рассматривать как оператор рождения электрона на узле \mathbf{m} вместе с соответствующей равновесной деформацией; т. е. в соответствии с общепринятой терминологией A_m^+ есть оператор рождения полярона (в случае поляризационных фононов) или конденсона (акустические фононы), соответственно $A_m^- = a_m \exp(-\hat{S}_m)$ — оператор уничтожения полярона или конденсона. Относительно преобразованного гамильтониана $\tilde{\mathcal{H}}_0$ операторы a_m^+ , a_m^- являются операторами рождения или уничтожения полярона (конденсона), а операторы $a_m^+ \exp(-\hat{S}_m)$, $a_m \exp(\hat{S}_m)$ описывают рождение или уничтожение «голого» электрона.

Если прибавить и вычесть в (I. 23) член $\sum_{m, g} J(g) a_{m+g}^+ a_m \langle \hat{\Phi}_g \rangle$ (см. Приложение 2), где

$$\langle \hat{\Phi}_g \rangle = \exp(-S_T(g)), \quad S_T(g) = \frac{1}{2N} \sum_q |v_q|^2 (1 - \cos qg) \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \omega_q}{2kT} \right) \quad (\text{I. 35})$$

и перейти в k -представление, то получим

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, \quad (\text{I. 36})$$

где

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_k a_k^+ a_k \varepsilon_p(k) + \sum_q \hbar \omega_q \left(b_q^+ b_q + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{I. 37})$$

$$\varepsilon_p(k) = -E_b + \sum_g J(g) e^{ikg} e^{-S_T(g)}, \quad (\text{I. 37a})$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \sum_{k, k'} a_k^+ a_{k'} \frac{1}{N} \sum_{m, g} J(g) [\hat{\Phi}_{m, g} - \langle \hat{\Phi}_g \rangle] e^{i(k-k')R_m - ik'g}, \quad (\text{I. 38})$$

$\varepsilon_0(k)$ — есть энергия зонного полярона. Поляронная зона действительно гораздо уже исходной электронной зоны. Оператор $\hat{\Phi}_{m, g}$ описывает процессы, приводящие по мере движения электрона к перестройке колебаний решетки относительно новых положений равновесия. Если фононные числа заполнения не меняются (а такие переходы описываются членами, пропорциональными $\langle \hat{\Phi}_g \rangle$), то за время движения частицы перестройка происходит полностью, и частица как бы тащит за собой весь «груз атомных смещений». Это и есть поляронный эффект, приводящий к перенормировке массы. Члены, пропорциональные

$$\Delta \hat{\Phi}_{m, g} = \hat{\Phi}_{m, g} - \langle \hat{\Phi}_g \rangle, \quad (\text{I. 39})$$

описывают переходы с изменением чисел заполнения, т. е. процессы излучения и поглощения большого числа фононов, происходящие из-за того, что перестройка колебаний решетки относительно новых положений равновесия не успевает происходить полностью.

В тех случаях, когда использование k -представления не целесообразно, мы будем пользоваться m -представлением, в котором преобразованный гамильтониан имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + U, \quad (\text{I. 40})$$

где

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_{\text{ph}} = \sum_q \hbar \omega_q \left(b_q^+ b_q + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{I. 41})$$

$$U = \sum_{m, g} J(g) a_{m+g}^+ a_m \hat{\Phi}_{m, g} = \sum_{m, g} a_{m+g}^+ a_m J(g) \exp(\hat{S}_{m+g} - \hat{S}_m). \quad (\text{I. 42})$$

Все энергии в (I. 40) отсчитаны от поляронного уровня.

В узельном представлении процедура выделения «диагональных» матричных элементов более сложна и будет подробно разобрана ниже. Заметим сразу же, что каноническое преобразование оказывается удобным лишь при $\eta_1 \approx J/E_p \ll 1$, т. е. в случае поляронов малого радиуса.

§ 5. Описание движения носителя тока по узлам решетки с помощью функции условной вероятности [44]

Пусть электронная зона — узкая ($\Delta\varepsilon < zkT$, где z — число ближайших соседей), а взаимодействие электрон — решетка слабо. При $t < 0$ электронов в решетке нет, в момент $t = 0$ электрон посажен на узел m . Какова вероятность найти его при $t > 0$ на узле m' ? Гамильтониан имеет стандартный вид (см. (I. 20))

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ph} + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{int}, \quad (\text{I. 43})$$

где \mathcal{H}_{ph} , \mathcal{H}_e и \mathcal{H}_{int} — соответственно 1-й, 2-й и 3-й члены в (I. 20). \mathcal{H}_{int} описывает электрон-фононное взаимодействие. Переходы электрона с узла на узел и «размазывание волнового пакета» описывает \mathcal{H}_e . Межэлектронные корреляции в (I. 43) не учтены.

Пусть при $t < 0$ решетка находилась в одном из стационарных состояний $\Phi_M(\xi)$ гамильтониана \mathcal{H}_{ph} (M — номер стационарного состояния, ξ — совокупность нормальных координат решетки). При $t = 0$ система описывается волновой функцией

$$\Psi_{Mm}(\xi, t)|_{t=0} = a_m^+ |0\rangle \Phi_M(\xi),$$

$|0\rangle$ — состояние электронного вакуума. При $t > 0$ развитие системы во времени описывается волновой функцией

$$\Psi_{Mm}(\xi, t) = \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}\right) \Phi_M(\xi) a_m^+ |0\rangle. \quad (\text{I. 44})$$

Представим $\Psi_{Mm}(\xi, t)$ в виде

$$\Psi_{Mm}(\xi, t) = \sum_{m'} A_{Mm}(\xi; m', t) a_{m'}^+ |0\rangle.$$

Очевидно, что $A_{Mm}(\xi; m', t)$ есть амплитуда вероятности нахождения электрона в момент t на узле m' при заданных ξ . Имеем

$$A_{Mm}(\xi; m', t) = a_{m'} \Psi_{Mm}(\xi, t) = a_{m'} \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}\right) a_m^+ |0\rangle \Phi_M(\xi). \quad (\text{I. 45})$$

Вероятность найти электрон на узле m' в момент времени t , если при $t = 0$ он был посажен на m , а фононы находились в состоянии M , есть

$$\int d\xi \langle 0 | a_m \Phi_M^*(\xi) (a_m^+, a_{m'})_t a_m^+ \Phi_M(\xi) | 0 \rangle.$$

Усредняя это выражение по распределению Гиббса, получим

$$P(\mathbf{m}, \mathbf{m}'; t) = \frac{1}{\sum_M \exp(-\beta E_M)} \sum_M \exp(-\beta E_M) \langle 0M | a_{\mathbf{m}} (a_{\mathbf{m}'}^+, a_{\mathbf{m}})_t a_{\mathbf{m}}^+ | M0 \rangle. \quad (I. 46)$$

Функция $P(\mathbf{m}, \mathbf{m}'; t)$ есть (условная) вероятность найти электрон на узле \mathbf{m}' в момент t , если при $t=0$ он был посажен на узел \mathbf{m} , а решетка находилась при температуре T . $P(\mathbf{m}, \mathbf{m}'; t)$ вещественна и удовлетворяет условию нормировки

$$\sum_{\mathbf{m}} P(\mathbf{m}, \mathbf{m}'; t) = 1. \quad (I. 47)$$

Найдем $P(\mathbf{m}, \mathbf{m}'; t)$ в пренебрежении взаимодействием. Согласно (I. 46)

$$P_0(\mathbf{m}, \mathbf{m}'; t) \equiv P_0(\mathbf{m}' - \mathbf{m}; t) = \langle 0 | a_{\mathbf{m}} \exp\left(i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}_e\right) a_{\mathbf{m}'}^+ a_{\mathbf{m}} \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}_e\right) a_{\mathbf{m}}^+ | 0 \rangle. \quad (I. 48)$$

Переходя в \mathbf{k} -представление с помощью (I. 21), найдем, что

$$\mathcal{H}_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}, \quad \text{где} \quad \varepsilon_0(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{g}} J(\mathbf{g}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{g}), \quad (I. 49)$$

и после несложных вычислений получим

$$P_0(\mathbf{m}, t) = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{x}} \exp(-i\mathbf{x}\mathbf{R}_m) \exp\left\{i \frac{t}{\hbar} \left[\varepsilon_0\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{x}}{2}\right) - \varepsilon_0\left(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{x}}{2}\right)\right]\right\}. \quad (I. 50)$$

Поскольку для простой кубической решетки

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = 2J \cos ak_x + 2J \cos ak_y + 2J \cos ak_z,$$

после интегрирования по \mathbf{k} и \mathbf{x} находим, что

$$P_0(\mathbf{m}, t) = J_{m_x}^2(\tau) J_{m_y}^2(\tau) J_{m_z}^2(\tau), \quad (I. 51)$$

где $J_{m_i}(\tau)$ — функция Бесселя, $\tau = 2Jt/\hbar$.

Среднеквадратичное смещение электрона $\langle X^2(t) \rangle$ за время t равно

$$\begin{aligned} \langle X_m^2 P_0(\mathbf{m}, t) \rangle &= \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{x}} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_x^2} \sum_{\mathbf{m}} \exp(-i\mathbf{x}\mathbf{R}_m) \right] \exp\left\{i \frac{t}{\hbar} \left[\varepsilon_0\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{x}}{2}\right) - \varepsilon_0\left(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{x}}{2}\right)\right]\right\}. \end{aligned} \quad (I. 52)$$

После перехода от суммирования к интегрированию и двукратного интегрирования по частям по \mathbf{x} получим $\langle X^2(t) \rangle = t^2 \langle v_x^2 \rangle$, где $\langle v_x^2 \rangle$ — среднеквадратичное значение x -й компоненты скорости

электрона. Для закона дисперсии (I. 49) имеем

$$\langle v_x^2 \rangle = \frac{1}{2} (Ja/\hbar)^2, \quad \langle X^2(t) \rangle = \frac{1}{2} (Jt/\hbar)^2 a^2 = t^2 \langle v_x^2 \rangle. \quad (\text{I. 52a})$$

Итак, движение электрона в идеальной решетке есть процесс расплывания волнового пакета, а не случайное блуждание по узлам; в последнем случае мы имели бы $\langle X^2(t) \rangle \sim t$. Однако при учете взаимодействия оказывается, что полученный выше закон $\langle X^2(t) \rangle \sim t^2$ справедлив только для малых времен (см. (I. 80) в § 7), для больших же времен рассеяние столь существенно влияет на характер временной зависимости $\langle X^2(t) \rangle$, что приводит к линейному возрастанию $\langle X^2(t) \rangle$ со временем; при этом для электропроводности и коэффициента диффузии получаются конечные значения.

В случае полярона малого радиуса гамильтониан имеет вид (I. 40). Пусть в момент $t = 0$ в недеформированную решетку, находящуюся в состоянии $\Phi_M(\xi)$, помещен электрон. Тогда электрон быстро «выкопает себе поляронную яму» и опустится в нее. Удобней не рассматривать этой начальной стадии процесса и посадить электрон с самого начала в поляронную яму. Тогда при $t = 0$ волновая функция системы имеет вид

$$\Psi|_{t=0} = \exp(-\hat{S}_m) \Phi_M(\xi) a_m^+ |0\rangle. \quad (\text{I. 53})$$

Здесь $\exp(-\hat{S}_m)$ — оператор образования поляронной ямы на узле m , \hat{S}_m — оператор канонического преобразования (I, 22).

Рассуждая как раньше, получим, что вероятность найти полярон на узле m' в момент времени t , если достоверно известно, что при $t = 0$ он находился на узле m , есть

$$P(m, m', t) =$$

$$= (\text{Sp } e^{-\beta \mathcal{H}_0})^{-1} \langle 0 | \text{Sp } e^{-\beta \mathcal{H}} a_m e^{i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}} a_m^+ a_{m'} e^{-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}} a_{m'}^+ |0\rangle. \quad (\text{I. 54})$$

Sp в (I. 54) берется только по фоновым операторам, \mathcal{H} определен согласно (I. 40). Далее будет показано, что знания функции $P(m, m', t)$ достаточно для вычисления и среднеквадратичного смещения и статической проводимости. Кроме того, она дает наглядное описание (в терминах теории стохастических процессов) движения носителя тока по узлам. Это является частичным ответом на вопросы пп. 1), 2) и 5), поставленные во Введении. Величину $P(m, m', t)$ найдем из некоторой системы уравнений (см. (I. 58), (I. 59)), полученной в Приложении 2.

§ 6. Результаты графической техники в узельном представлении [42, 44]

Электропроводность поляронов малого радиуса вычисляется с помощью формул (I. 13) или (I. 14). Поскольку каноническое преобразование (I. 21) не меняет вида этих формул, будем

считать, что развитие операторов во времени и статистическое усреднение в (I.13) производится с помощью гамильтониана (I.40). Достаточно вычислить величину

$$M_{mm'}^{mm'}(t) = \langle (a_m^+ a_{m'})_t a_m^+ a_{m'} \rangle,$$

входящую в (I.13), (I.14) и (I.16) или ее лапласову преобразованную $M_{mm'}^{mm'}(s)$, равную

$$M_{mm'}^{mm'}(s) = \int_0^\infty e^{-st} dt \frac{\text{Sp} \left\{ e^{-\beta \tilde{\mathcal{H}}} e^{\frac{t}{b} \tilde{\mathcal{H}}} a_m^+ a_{m'} e^{-t \frac{t}{k} \tilde{\mathcal{H}}} a_{m_1}^+ a_{m'} \right\}}{\text{Sp} (e^{-\beta \tilde{\mathcal{H}}})}. \quad (\text{I.55})$$

В Приложении 2 изложена графическая техника, позволяющая представить (I.55) в виде

$$M_{mm'}^{mm'}(s) = \sum_{m_1, m_2} \Gamma_{mm_2}^{mm_1}(s) P_{m_1 m'}^{m_2 m'}(s). \quad (\text{I.56})$$

Функция $P_{m_1 m'}^{m_2 m'}(s)$ определяется выражением

$$\int_0^\infty e^{-st} P_{m_1 m'}^{m_2 m'}(t) dt = \int_0^\infty e^{-st} dt \frac{\text{Sp} \{ e^{-\beta \tilde{\mathcal{H}}_0} \langle 0 | a_{m_2} (a_m^+ a_{m'})_t a_{m_1}^+ | 0 \rangle \}}{\text{Sp} (e^{-\beta \tilde{\mathcal{H}}_0})}. \quad (\text{I.57})$$

и подчиняется следующей системе уравнений:

$$sP_{mm'}^{mm'}(s) = \delta_{mm'} + W_{mm'}^{mm'} P_{mm'}^{mm'}(s) + \sum_{m_1 \neq m} W_{mm_1}^{mm_1} P_{m_1 m'}^{m m'}(s) + \sum_{m_1 \neq m_2} W_{mm_2}^{mm_2} P_{m_2 m'}^{m m'}(s), \quad (\text{I.58})$$

$$sP_{m_2 m'}^{m_1 m'}(s) = W_{m_2 m_2}^{m_1 m_2} P_{m_2 m'}^{m_1 m'} + \sum_{m_3} W_{m_2 m_3}^{m_1 m_3} P_{m_3 m'}^{m_1 m'} + \sum_{m_3 m_4} W_{m_2 m_4}^{m_1 m_4} P_{m_3 m'}^{m_1 m'}. \quad (\text{I.59})$$

Штрих у знака суммы в (I.59) означает: $m_3 \neq m_4$ и одновременно $m_1 \neq m_3$ или $m_2 \neq m_4$.

В (I.56)–(I.59) величина $\Gamma_{mm_2}^{mm_1}$ есть «вершина» (аналог «левого члена» в кинетическом уравнении), а $W_{m_2 m_4}^{m_1 m_4}$ — вероятности некоторых процессов, протекающих в пространстве узлов решетки. Очевидно, что общий вид уравнений (I.58), (I.59) не связан с моделью ПМР.

Вывод системы уравнений (I.58), (I.59) для величин P , определенных согласно (I.57), и нахождение Γ и W можно осуществить многими способами, например, методом Кона — Латтинжера (см. работу [65] В. В. Брыксина и Ю. А. Фирсова), методом функций Грина в узельном представлении, методом Ван-Хове*) и др. Для вычисления этих величин в модели ПМР мы

*) В обзоре [66], вышедшем в 1968 г., частично используется стохастический подход, развитый в 1965 г. в работе [44] Е. К. Кудинова и Ю. А. Фирсова.

воспользуемся графической техникой [42, 44], описанной в Приложении 2. Ниже формулируются основные результаты, полученные в Приложениях 2—5, и кратко поясняется физический смысл различных вероятностей (такая трактовка основана на результатах §§ 4, 7).

Функции Γ и W представляются в виде рядов по степеням J , а фактически по степеням некоторых безразмерных параметров, пропорциональных J (подробнее см. в гл. II). Величины Γ и W имеют следующие свойства:

а) трансляционная симметрия:

$$\Gamma_{m+m'}^{m+m'} = \Gamma_{m_2}^{m_1}, \quad W_{m_2+m'}^{m_1+m'} = W_{m_2, m_4}^{m_1, m_3}, \quad (I. 60)$$

б) равенство «ухода» и «прихода» (обычное кинетическое уравнение обладает аналогичным свойством, но только в k -представлении):

$$-W_{m_1}^{m_1} = \sum_{m_1 \neq m_2} W_{m_1, m_2}^{m_1, m_1}, \quad \sum_{m_2} W_{m_2, m_1}^{m_1, m_2} = 0 \quad \text{при } m_1 \neq m_2. \quad (I. 61)$$

Свойство а) очевидно, свойство б) можно получить, суммируя обе части (I. 58) и (I. 59) по m' с учетом доказанного в Приложении 2 условия нормировки

$$\sum_{m'} P_{m_2, m'}^{m_1, m'}(s) = \frac{1}{s} \delta_{m_1, m_2}. \quad (I. 62)$$

Диагональные по узельным индексам вероятности перехода ($m_1 = m_2, m_3 = m_4$), которые мы будем иногда называть вероятностями перескока W_h , исследуются в Приложениях 3 и 7 (см. также § 1 гл. II). При достаточно высоких температурах они описывают активационные надбарьерные перескоки.

Вероятности $W_{m_2, m_2}^{m_1, m_1}$ и соответствующие им «времена релаксации»

$$\tau(m_1 - m_2) = (-W_{m_2, m_2}^{m_1, m_1})^{-1} \quad (I. 63)$$

входят в уравнение для $P_{m_2, m_2}^{m_1, m_1}$ (см. § 7 настоящей главы), которое описывает некоторый процесс прихода к равновесию в узельном пространстве. В общем случае τ характеризует некоторое трение, обусловленное замедленной реакцией колебательной системы (перестройка центров тяжести осцилляторов решетки) на процесс перемещения носителя тока. Когда эффективное рассеяние становится слабым (при низких температурах) τ описывает рассеяние (двухфононное) поляронных волн в k -пространстве (см. гл. II).

Вероятности недиагональных переходов $W_{m_2, m_2}^{m_1, m_1}$ и $W_{m_2, m_2}^{m_1, m_1}$ характеризуют скорость туннельного просачивания, в процессе которого происходит расплывание волнового пакета ($m_1 \neq m_2$), первоначально посаженного на узел m , и одновременное смещение его центра тяжести. В том же порядке по J вклады в $W_{m_2, m_2}^{m_1, m_1}$

(при $m_1 - m_2 \neq m_3 - m_4$) всегда меньше, чем в $\tau^{-1}(m_1 - m_2)$. (см. Приложение 4). Однако для «пустых» точек», которым, согласно приложению 2, отвечают множители $\pm \frac{i}{\hbar} J(\mathbf{g}) \exp(-S_T)$ и которые можно условно отождествить с наименьшими по J вкладами в $W_{m, m}^{m, m+g}$ или $W_{m, m+g}^{m, m}$, нет аналога среди графиков для $\tau^{-1}(m_1 - m_2)$ (первый член в ряду для τ^{-1} пропорционален J^2). Поэтому соотношение между τ^{-1} и $W_{m_2, m_1}^{m_1, m_2}$ может быть любым. Если же вклад от «пустой точки» (и некоторых других блоков) отнести к собственной энергии полярона \mathcal{E}_p и не включать его в определение недиагональных вероятностей $W_{m_2, m_1}^{m_1, m_2}$, то из Приложений 2—5 следует, что для поляронов малого радиуса при не слишком больших J (случаи $\eta_3 = J^2/E_a kT > 1$ при $kT > \hbar\omega_0/2$ и $J^2/E_a \hbar\omega_0 > 1$ при $kT < \hbar\omega_0/2$ пока исследовать не удалось) имеет место цепочка неравенств

$$\tau^{-1}(m_1 - m_2) = |W_{m_2, m_1}^{m_1, m_2}| > W_{m_1, m_2}^{m_1, m_2} = W_h(m_1 - m_2) \gg \overline{W}_{m_2, m_1}^{m_1, m_2}, \quad (I.64)$$

где черточка над $W_{m_2, m_1}^{m_1, m_2}$ означает, что из этого блока исключен вклад в собственную энергию полярона. Поэтому недиагональные части P релаксируют быстрее диагональных. Для какой-либо иной физической модели, описываемой другим гамильтонианом, свойство (I.64) может отсутствовать.

Определим некоторую температуру T_2 из условия $(1/2)\Delta\mathcal{E} = \hbar\tau^{-1}$. При $T > T_2$ описание в k -пространстве теряет свой смысл, ибо неопределенность в энергии за счет рассеяния, равная \hbar/τ , становится больше ширины зоны $\Delta\mathcal{E}$ для квазичастиц. Заметим, что (I.64) может иметь место и при $T < T_2$.

Поскольку величины $\tau^{-1}(m_1 - m_2)$ и $W_h(m - m_2)$ имеют разный физический смысл и никак не связаны между собой (для поляронов малого радиуса $\tau^{-1}(\mathbf{g}) = W_h(\mathbf{g})$ только в наименьшем порядке по J , см. § 3 гл. II), то при $T > T_2$ может существовать некоторый интервал температур, при котором уравнение Больцмана уже «не работает», а активационные перескоки все еще не стали основным механизмом переноса. Как мы увидим ниже, для поляронов малого радиуса реализуется именно такой случай.

§ 7. Приближенные методы решения системы уравнений для функций $P_{mm'}^{mm'}$

А. Простейший вариант расщепления (высокие температуры). Сначала решим (I.58) и (I.59) в низшем приближении, пренебрегая зацеплением уравнений для диагональных $P_{mm'}^{mm'}$ и недиагональных $P_{m, m'}^{m, m'}$ компонент. Зацепление осуществляется посредством недиагональных вероятностей переходов $W_{m_2, m_1}^{m_1, m_2}$, которые, согласно (I.64), малы, и собственно-энергетических частей, учет которых, во всяком случае, не существен при $T \geq T_2$.

Пренебрегая зацеплением, имеем замкнутую систему уравнений только для диагональных компонент $P_{mm'}^{mm'} = P(m - m'; s)$, которую в силу трансляционной симметрии можно записать в виде

$$sP(m; s) = \delta_{m,0} + \sum_{G \neq 0} W(G; s)[P(m - G; s) - P(m; s)]. \quad (I. 65)$$

Здесь принято обозначение $W_{m, m+G}^m = W(G; s)$ и использовано свойство (I. 61). Обращая преобразование Лапласа в (I. 65), получим уравнение

$$\frac{\partial P(m, t)}{\partial t} = - \sum_{G \neq 0} \int_0^t W(G; \tau)[P(m; t - \tau) - P(m - G; t - \tau)] d\tau \quad (I. 66)$$

с начальным условием $P(m; t)|_{t=0} = \delta_{m,0}$.

Напомним, что величины $W(G; \tau)$ вещественны и положительны. Из (I. 66) видно, что $P(m; t)$ удовлетворяет, вообще говоря, уравнению, интегродифференциальному по времени. Поэтому движение полярона, описываемое функцией P , удовлетворяющей этому уравнению, в общем случае является немарковским процессом блуждания по узлам. Наличие в (I. 65) интеграла по τ означает, что $\partial P/\partial t$ в момент времени t определяется значениями $P(t')$ во все предшествующие моменты, начиная с $t' = 0$, т. е. процесс блуждания обладает «памятью».

Нетрудно получить формальное решение уравнений (I. 65) и (I. 66). Перейдем в (I. 65) к фурье-представлению

$$\begin{aligned} P(m; s) &= \sum_{\kappa} \exp(i\kappa R_m) P(\kappa); \\ P(\kappa; s) &= \frac{1}{N} \sum_m \exp(-i\kappa R_m) P(m). \end{aligned} \quad (I. 67)$$

Получим

$$P(\kappa; s) = N^{-1} [s + W(\kappa; s)]^{-1}, \quad (I. 68)$$

где

$$W(\kappa; s) = \sum_m (1 - \exp(-i\kappa R_m)) W(m; s). \quad (I. 69)$$

Обращая преобразование Лапласа, получим решение (I. 66) в виде контурного интеграла

$$P(m; t) = \frac{1}{N} \sum_{\kappa} \exp(-i\kappa R_m) \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{e^{st} dt}{s + W(\kappa; s)}. \quad (I. 70)$$

При достаточно большой дисперсии оптических фононов ($\Delta\omega \approx \omega_0$) для ПМР главный член диагонального блока $W(G; s)$ существенно отличен от нуля в интервале времен $t < t_0$, где $t_0 \approx \hbar(E_a kT)^{-1/2} \ll \omega_0^{-1}$ (см. (52) в [44] и (16.27) в I части книги).

Тогда, если $P(m; t)$ слабо меняется на временных интервалах $\sim t_0$, уравнение (I. 66) при $t > t_0$ можно упростить

$$\frac{\partial P(m; t)}{\partial t} = - \sum_{G \neq 0} W(G) [P(m; t) - P(m - G; t)]. \quad (I. 71)$$

Здесь

$$W(G) = \int_0^{\infty} W(G, \tau) d\tau \equiv \lim_{s \rightarrow 0} W(G; s). \quad (I. 72)$$

Уравнение (I. 71) является уравнением типа Колмогорова — Феллера и описывает стохастический процесс марковского типа [68]. Если сведение (I. 66) к (I. 71) допустимо, то движение полярона можно интерпретировать как марковский процесс блуждания по узлам решетки, причем $W(G)$ имеет смысл вероятности (в единицу времени) перескока на расстояние G . Первый член правой части в (I. 71) описывает «уход» электрона с узла m на другие узлы, а второй — «приход» на узел m с других узлов. Решение (I. 71) имеет вид

$$P(m; t) = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{N} \sum_x \exp \{i\kappa R_m - tW(\kappa; s)\}, \quad (I. 73)$$

где $W(\kappa; s)$ определено согласно (I. 69). Учитывая тот факт, что для кубических решеток $W(G)$ не зависит от направления вектора $G = a(in_x + jn_y + kn_z)$, из (I. 69) получим

$$W(\kappa, s) = 2 \sum_{n_x, n_y, n_z} \{1 - \cos[a(\kappa_x n_x + \kappa_y n_y + \kappa_z n_z)]\} W_h(n), \quad (I. 74)$$

где $n = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{1/2}$.

Конкретные выражения для $W_h(n)$ приведены в § 1, 2 гл. II (см. также Приложения 3 и 8). Оказывается, что при произвольных η_2 , но $\eta_3 \ll 1$, основную роль играют перескоки на соседние узлы ($n_x = 1, n_y = n_z = 0$; $n_y = 1, n_x = n_z = 0$; $n_z = 1, n_x = n_y = 0$), и в этом случае

$$W(\kappa; s) = 2W \{3 - \cos a\kappa_x - \cos a\kappa_y - \cos a\kappa_z\}. \quad (I. 74a)$$

Подставляя (I. 74a) в (I. 73) и выполняя интегрирование по κ , получим

$$P(m; t) = P(m_x; t) P(m_y; t) P(m_z; t), \quad (I. 75)$$

где $P(m_i; t) = \exp(-2tW) I_{m_i}(2tW)$, $I_m(z)$ — функция Бесселя от мнимого аргумента. Условием справедливости уравнения (I. 71) является, как указывалось, требование чтобы на интервалах существенного изменения $W(G; \tau)$ величина $P(m; t - \tau)$

менялась слабо. В нашем случае это так, если выполняется условие марковости

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} > 6 \left(\frac{2E_a}{kT} \right)^{1/2} \frac{W}{\omega_0} = \begin{cases} \eta_2 3\pi^{1/2} \left(\frac{2E_a}{kT} \right)^{1/2} e^{-E_a/kT} & \text{при } \eta_2 < 1, \\ \frac{3}{\pi} \left(\frac{2E_a}{kT} \right)^{1/2} e^{-E_a/kT} & \text{при } \eta_2 > 1. \end{cases}$$

В области, определяемой значениями параметров $\eta_2 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$, и при не слишком узкой фононной зоне это условие, во всяком случае, выполняется. Таков ответ на вопрос 1в), поставленный во Введении. Случай малой дисперсии ($\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$), когда критерий марковости нарушен, разобран в [67].

Отметим, что (I. 75) отличается от обычного выражения для условной вероятности $\Psi(\Delta R, t)$ (см. формулу (108) в [69]), получаемого в феноменологической теории случайных блужданий

$$\Psi(\Delta R, t) = (4\pi Dt)^{-1/2} \exp[-(\Delta R)^2/4Dt]. \quad (\text{I. 75a})$$

Воспользовавшись асимптотическим представлением (см. стр. 99 в [70]) вида

$$I_p(z) = \frac{\exp\{\sqrt{p^2 + z^2} - p \operatorname{arcsch}(p/z)\}}{(2\pi)^{1/2} (p^2 + z^2)^{1/4}} \approx \frac{\exp(+z - p^2/2z)}{(2\pi z)^{1/2}}$$

и полагая в (I. 75) $z = 2tW$; $p = m_x, m_y, m_z$ при $2tW > m_i$, приходим к (I. 75a).

Итак, функция условной вероятности, описывающая случайные блуждания по узлам решетки, имеет практически такой же вид, как и в феноменологической теории (в континуальном приближении) и отличается от нее на заданном узле \mathbf{m} лишь при $t \leq W^{-1}(\mathbf{m})$, т. е. когда диффузионный фронт еще очень далек от этого узла и амплитуда $P(\mathbf{m}, t)$ очень мала.

В заключение этого параграфа рассмотрим временное поведение среднеквадратичного смещения. Такая проблема часто решается в задачах о броуновском движении и в теории случайных блужданий. Кстати, это поможет понять, как протекают начальные стадии некоторых физических процессов. Обычно эти малые интервалы времен не актуальны при вычислении электропроводности или коэффициента диффузии, определяемых асимптотически большими временами. Используя (I. 67) — (I. 69), можно получить

$$\langle X^2(s) \rangle \equiv \int_0^\infty e^{-st} \langle X^2(t) \rangle dt = -N \left[\frac{\partial^2}{\partial \kappa_x^2} P(\kappa; s) \right] \text{ при } \kappa = 0. \quad (\text{I. 76})$$

Переходя в узельное представление, получаем

$$\langle X^2(s) \rangle = \frac{1}{s^2} \sum_{\mathbf{m}} X_{\mathbf{m}}^2 W_{\mathbf{h}}(\mathbf{m}; s), \quad (\text{I. 77})$$

откуда

$$\langle X^2(t) \rangle = \sum_m X_m^2 \int_0^t (t - \tau) W(m; \tau) d\tau, \quad (I. 78)$$

где

$$W(m; \tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{s\tau} W(m; s) ds. \quad (I. 79)$$

В наинизшем по J порядке и в пренебрежении экспоненциально малыми (как $\exp(-S_T)$) поправками в [44] было получено, что при $\Delta\omega \approx \omega_0$

$$\langle X^2(t) \rangle = a^2 \left(\frac{Jt_1}{\hbar} \right)^2 \left(1 - \cos \frac{t}{t_1} \right) = \begin{cases} \frac{a^2}{2} \left(\frac{Jt}{\hbar} \right)^2 & \text{при } t \ll t_1, \\ a^2 Wt & \text{при } t \gg t_1, \end{cases} \quad (I. 80)$$

где $t_1 = \hbar/E_a$.

Соотношения (I. 80) допускают наглядную интерпретацию. Сначала при $t \ll t_1$ электрон, посаженный в яму, не «чувствует», поляризацию и ведет себя как «голый» электрон; при этом $\langle X^2(t) \rangle \sim t^2$ (ср. с результатами § 5 для свободного электрона). При $t_1 \leq t < t_0$ электрон совершает «колебательное» движение около узла с частотой и амплитудой $r_p \sim Jat_1/\hbar \approx \eta_1 a$, r_p имеет смысл боровского радиуса полярона [44]*). При $t \gg t_0$ имеет место зависимость $\langle X^2(t) \rangle \sim t$, характерная для случайных блужданий [69]. Случай малых $\Delta\omega/\omega_0$ разобран в [67].

Б. Улучшенное решение системы уравнений (I. 58) — (I. 59). Расщепление системы (I. 58) — (I. 59), приводящее к (I. 65), дает (см. (I. 87)) основную при высоких температурах перескоковую часть электропроводности σ_h (в [31] она называлась «холстейновской» частью).

В работах [31, 32, 44, 45] было показано, что в выражении для σ наряду с σ_h имеется еще один член σ_t — «туннельный» вклад (в [31] этот вклад был назван «больцмановским»), который мал при высоких температурах, но играет основную роль при средних и низких температурах. Этот вклад может быть получен в настоящей формулировке теории, если улучшить процедуру расщепления. Именно, отбросим в (I. 59)

*) Условие $\eta_1 \ll 1$ гарантирует, что боровский радиус полярона, т. е. электрона в поляризационной яме, не превышает постоянной решетки a , поэтому мы имеем дело с объектом, локализованным на узле решетки. Итак, $r_p < a$, несмотря на то, что размеры поляризационной ямы вследствие дальнегодействующего характера кулоновских сил всегда значительно больше постоянной решетки. Дело в том, что уровень находится глубоко в яме, т. е. в той ее области, где основную роль играет потенциал ионного остова. Поэтому размер электронного облака мал.

последний член, который является самым малым *). Тогда недиагональная часть $P_{m_2 m_2}^{n_1 m_1'}$ следующим образом выражается через диагональную:

$$P_{m_2 m_2}^{n_1 m_1'}(s) = (s - W_{m_2 m_2}^{m_1 m_1})^{-1} \sum_{m_3} W_{m_2 m_3}^{m_1 m_3} P_{m_3 m_3}^{n_1 m_1'}(s). \quad (I. 81)$$

Подставляя (I. 81) в (I. 58), опять получим уравнение типа (I. 65), но с видоизмененными вероятностями. Его решение определяется соотношениями вида (I. 67) — (I. 69), но с заменой $W(\kappa; s) \rightarrow \tilde{W}(\kappa; s)$, где

$$\tilde{W}(\kappa; s) = \sum_m (1 - \exp(-i\kappa R_m)) \tilde{W}(R_m; s), \quad (I. 82)$$

$$\tilde{W}(R_m; s) = W_h(R_m; s) + \sum_{m_1 \neq m_2} W_{m m_2}^{m m_1} W_{m_2 0}^{m_1 0} [s - W_{m_2 m_2}^{m_1 m_1}]^{-1}. \quad (I. 83)$$

В следующем параграфе мы покажем, что с помощью (I. 82), (I. 83) получается и «больцмановский», и «туннельный» вклады в электропроводность. Временную зависимость величин $P_{m_2 m_2}^{n_1 m_1}$ можно определить из (I. 81). Обозначив через $\tau(m_1 - m_2)$ величину $-(W_{m_2 m_2}^{m_1 m_1})^{-1}$ (получаемая в рамках графической техники величина $W_{m_2 m_2}^{m_1 m_1}$ отрицательна), будем иметь

$$P_{m_2 m_2}^{n_1 m_1'}(t) = e^{-t\tau^{-1}(m_1 - m_2)} \sum_{m_3} W_{m_2 m_3}^{m_1 m_3} \int_0^t e^{-\frac{t'}{\tau(m_1 - m_2)}} P(m_3 - m'; t') dt'. \quad (I. 81a)$$

* Если начальное условие было $P_{m m}^{n m} = \delta_{m 0} \delta_{m m}$ (т. е. при $t = 0$ электрон был посажен на узел 0), то за время $t \ll W_h^{-1}$ величины $P_{g 0}^{g 0}$, $P_{0 0}^{0 0}$ не успевают существенно измениться: $P_{0 0}^{0 0} \approx 1$, $P_{g 0}^{g 0} \ll 1$. Следовательно, прежде всего вырастут компоненты $P_{m_2 0}^{m_1 0}$. Подставив в (I. 81a) начальные значения для $P_{m_3 m_3}^{n_1 m_1'}$, получим

$$P_{m_2 0}^{n_1 0} \approx W_{m_2 0}^{m_1 0} \tau(m_1 - m_2) [1 - \exp(-t/\tau(m_1 - m_2))], \quad (I. 81б)$$

т. е. за время $t \approx \tau(m_1 - m_2) \ll W_h^{-1}$ недиагональные компоненты примут равновесное значение. По мере того как вероятность $P_{g 0}^{g 0}$ найти электрон на соседнем узле возрастает, появятся и другие компоненты недиагональных условных вероятностей, т. е. величины $P_{m_2 g}^{n_1 g}$, и т. д.

*) Он равен произведению экспоненциально малого недиагонального блока на малую недиагональную часть $P_{m_2 m_2}^{n_1 m_1}$, в то время как первый — порядка произведения, не содержащего экспоненциальной малости блока $W_{m_2 m_2}^{m_1 m_1}$, на недиагональную часть, а второй — порядка произведения недиагонального блока на не малую величину $P_{m_3 m_3}^{m_3 m_3}$.

Итак, недиагональные по узельным индексам компоненты условной вероятности быстро (за время $\tau(m_1 - m_2)$), «подстраиваются» под временной ход диагональных компонент. Приближенную временную зависимость можно найти, подставив в (I.81a) выражение (I.75) для $P(m, t)$: Чтобы найти точную временную эволюцию величин $P_{m, m'}^{n, m'}(t)$, надо решить совместную систему (I.58) — (I.59). Впрочем, общая тенденция и так ясна. В области, где $P(m_3 - m'; \tau)$ почти постоянна (рис. 1), используя свойство $\sum_{m_3} W_{m, m'}^{m, m_3} = 0$, получим,

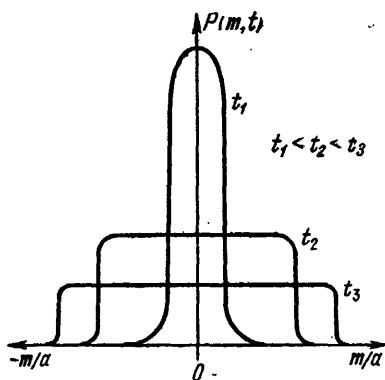


Рис. 1. Временная эволюция функции условной вероятности (одномерный случай). Непосредственный физический смысл придается значениям $P(m, t)$, соответствующим целочисленным значениям аргумента m/a , где a — постоянная решетки.

ловной вероятности. В результате возникает дополнительный вклад в среднеквадратичное смещение:

$$\sum_{m_2, m_1 \neq m_2} X_m^2 W_{m m_2}^{m m_1} W_{m_2 0}^{m_1 0} \tau(m_1 - m_2) \times \{t - \tau(m_1 - m_2)[1 - \exp(-t/\tau(m_1 - m_2))]\}. \quad (\text{I.84})$$

§ 8. Основная формула для дрейфовой подвижности ПМР

Складывая (I.78) и (I.84) при $t \gg t_0$, $t \gg \tau$, получим

$$\langle X^2(t) \rangle = t \sum_m X_m^2 \tilde{W}(m), \quad (\text{I.85})$$

где $\tilde{W}(m)$ получается из (I.83) при $s \rightarrow 0$. Используя обычное определение для коэффициента диффузии и соотношение Эйнштейна, имеем

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \langle X^2(t) \rangle = \frac{1}{2} \sum_m X_m^2 \tilde{W}(m), \quad (\text{I.86})$$

$$\mu = \mu_h + \mu_t =$$

$$= \frac{e^2}{2kT} \sum_m X_m^2 W(m) + \frac{e^2}{2kT} \sum_{m_1 \neq m_2} X_m^2 W_{m m_2}^{m m_1} W_{m_2 0}^{m_1 0} \tau(m_1 - m_2). \quad (\text{I.87})$$

Конечно, в низшем порядке по электрическому полю соотношение Эйнштейна справедливо всегда, однако выражение (I.83)

для $\mathcal{W}(\mathbf{R}_m; s)$, а следовательно, и формулы (I. 86) и (I. 87) для D и для μ приближенные.

Напомним, что ответ на вопрос 1в), поставленный во Введении, был дан в §§ 5—7. Ответ на вопросы 1б), 1г) и 2) можно получить, изучая выражение (I. 87). Конкретные результаты для дрейфовой подвижности ПМР, полученные с помощью (I. 87), описаны в гл. II.

Выражение (I. 87) содержит два члена*). Первый член отвечает вкладу за счет активационных надбарьерных перескоков. Обозначим его μ_h (h —hopping). В [31, 44] он назывался холстейновским и обозначался μ_H . Второй член в (I. 87) назовем туннельным вкладом μ_t (t —tunneling). Холстейн [21] (см. § 15 в I части книги) назвал этот вклад зонным μ_{band} . Такой термин представляется нам неудачным, поскольку существует широкий диапазон температур от T_2 до T_{min} (T_{min} —температура минимума для подвижности), в котором вклад μ_t превышает μ_h , т. е. перескоки еще не являются основным механизмом при $T > T_2$ подвижности, а понятие о поляронной зоне уже утратило свой смысл (ибо $\Delta E_p/z < \hbar\tau^{-1}$). Математическое выражение для μ_t также показывает, что механизм «трения» в этом случае не описывается рассеянием поляронных волн в k -пространстве. В работе [31] автора и И. Г. Ланг вклад μ_t назывался Больцмановским и обозначался μ_B . При этом имелось в виду, что при $T < T_2$ (когда рассеяние слабо) аналогичное выражение для μ_t можно получить и с помощью кинетического уравнения Больцмана в предположении о двухфононном механизме рассеяния (однофононный процесс не удовлетворяет закону сохранения энергии при $\hbar\omega_0 \gg \Delta E_p$). Однако в [37] специально оговаривалось, что и метод расчета, и выражение для соответствующего вклада в подвижность, полученное в [31] (см. ниже), справедливы и при $T > T_2$, когда $\hbar/\tau > \Delta E_p$, и использовать уравнение Больцмана нельзя. Выражение для μ_t (т. е. для μ_B), полученное в [31], внешне отличалось от (I. 87) (ср. с (16.37))

$$\mu_t = \frac{e}{kT} \sum_p \text{Re} [F_x(p) r_x^{(2)}(p)]. \quad (\text{I. 88})$$

Здесь $F_x(p)$ —функция распределения, подчиняющаяся интегральному уравнению вида

$$r_x^{(1)}(p) = F_x(p) \mathcal{W}(p) - \sum_{p_1} F_x(p_1) \mathcal{W}(p_1, p). \quad (\text{I. 89})$$

*) Подобное разбиение σ на две части было впоследствии проведено Фридманом [64], который использовал метод Латтинжера—Кона (ЛК). Однако конкретные выражения для μ_t , т. е. μ_{band} и τ^{-1} , у него получились другими. В работе [65] автора и В. В. Брыксина доказано, что метод ЛК полностью эквивалентен обобщенному методу КП (описанному в Приложении 2) и дает те же результаты. Упомянутые выше расхождения обсуждаются и в § 3 гл. II настоящего обзора.

Величины $r_x^{(1)}(\mathbf{p})$, $r_x^{(2)}(\mathbf{p})$ — это левая и правая вершины, для которых в [31] был сформулирован графический рецепт вычисления. Можно показать [31, 32], что в пренебрежении множителями вида $\exp\left\{\frac{i\hbar}{\hbar}[\varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p}_1)]\right\}$ под знаком многократных интегралов по t (см. Приложение 2) вероятности $W(\mathbf{p}_1, \mathbf{p})$ зависят лишь от $(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p})$

$$W(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{G}} \exp(i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}) \mathbf{G}) W(\mathbf{G}), \quad (\text{I. 90})$$

а $(W(0) - W(\mathbf{G}))$ из [31, 32] совпадают с нашими величинами $\tau^{-1}(\mathbf{G})$. При низких температурах в наинизшем порядке по J имеем $r_x^{(1)}(\mathbf{p}) = r_x^{(2)}(\mathbf{p}) = v_x(\mathbf{p})$, где $v_x(\mathbf{p})$ — скорость полярона. Тогда окончательно выражение для μ_t принимает вид

$$\mu_t = \frac{e}{kT} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{g}} \left[\frac{J}{\hbar} g_x \exp(-S_T(\mathbf{g})) \right]^2 \tau(\mathbf{g}). \quad (\text{I. 91})$$

Такое же выражение для μ_t получится из (I. 87), если ограничиться ближайшими соседями и вычислить $W_{m_1 m_2}^{m_1 m_2}$ в наинизшем порядке по J , т. е. взять «пустую точку» $W_{00}^{g0} = \frac{i}{\hbar} J(\mathbf{g}) \exp(-S_T(\mathbf{g}))$. Выражение для μ_t , следующее из (I. 87), более удобно для практических применений, чем (I. 88), поскольку рецепт вычисления величин $W_{m_1 m_2}^{m_1 m_2}$ более прост, чем рецепт вычисления «вершин», и, кроме того, они имеют более ясный физический смысл. Может возникнуть опасение, что в том случае, когда второй член в (I. 87) гораздо больше первого (достаточно низкие температуры), следует учитывать и другие члены, возникающие за счет более точного расщепления в уравнениях (I. 58) и (I. 59). Однако истинным параметром малости, используемым при расщеплении, является не отношение второго члена в (I. 87) к первому, а параметр

$$\bar{W}_{m_2 m_1}^{m_1 m_2} \tau(m_1 - m_2). \quad (\text{I. 92})$$

Для поляронов малого радиуса при $\eta_3 \leq 1$ параметр (I. 92) мал в силу (I. 64). Поскольку недиагональные компоненты $P_{m_1 m_2}^{m_1 m_2}$ в (I. 59) зацепляются между собой и по параметру $\Delta E_p \tau / \hbar$, который совсем не мал при $T < T_2$, то может создаться неверное впечатление, что формула (I. 87) применима лишь при $T > T_2$. Однако из самых общих выражений для σ , которые будут приведены в § 9, видно, что на самом деле (I. 87) справедлива до тех пор, пока поляронные зоны можно считать узкими, т. е. при $n(\mathbf{k}) \approx \text{const} = N_e/N$. Как правило, критерий узости зон нарушается при более низких температурах, чем T_2 .

В заключение отметим, что выражение для μ_h , следующее из (I. 87), более общее, чем у Холстейна, поскольку в нем учтены

перескоки между сколь угодно разделенными узлами, однако эффекты памяти в нем не учтены.

Выражение для μ , следующее из (I.87), справедливо при гораздо меньших ограничениях на безразмерные параметры теории, чем μ_{band} у Холстейна [21] или у Фридмана [64], и применимо при $T > T_2$, когда режим переноса не зонный, а туннельный. В (I.87) учтены процессы туннельного просачивания между сколь угодно разделенными узлами.

Итак, формула (I.87) является в настоящее время основной расчетной формулой в теории ПМР (см. гл. II). Чтобы установить пределы ее применимости, следует выйти за рамки приближения (I.64), которое использовалось при ее выводе.

§ 9. Различные способы вычисления подвижности в узельном представлении и степень их точности

Казалось бы, что наиболее общее выражение для подвижности, которое можно получить из соотношения Эйнштейна, должно иметь вид

$$\mu = \frac{e}{2kT} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle X^2(t) \rangle = \frac{e}{kT} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_m X_m^2 P(m, t), \quad (\text{I.93})$$

или, что то же самое,

$$\mu = \frac{e}{2kT} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \sum_m X_m^2 P(m; s), \quad (\text{I.94})$$

и лишь при специальном расцеплении системы (I.58) — (I.59), описанном в § 7, (I.94) переходит в (I.87).

Заметим, однако, что формула вида (I.93) *доказана лишь для случайных блужданий классических объектов*. Но ведь в точной формуле Кубо, которую в соответствии с (I.15), (I.55) и (I.56) можно привести к виду

$$\sigma = \frac{e^2}{2kT} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \frac{1}{V} \sum_{\substack{m, m' \\ m_1, m_2}} (X_m - X_{m'})^2 \Gamma_{m'm_1, m_2}^{m', m_1, m_2}, \quad (\text{I.95})$$

фигурируют не только диагональные, но и недиагональные компоненты функции условной вероятности. Правда, при $T < T_2$ последние дают обычную информацию о квазиклассическом движении объекта в k -пространстве, однако, при $T > T_2$ они уже описывают некоторую дополнительную временную эволюцию в R -пространстве (подробнее см. §§ 6, 7), неклассическую по самой своей природе. Поэтому необходимо еще *доказать*, что и при учете квантовых эффектов (например, туннельного просачивания) и для немарковских процессов (например, коррелированных перескоков) по-прежнему можно пользоваться формулами типа (I.93) и (I.94) с единственной оговоркой, чтобы $P(s)$ определялась из системы уравнений (I.58) — (I.59), в которой

учтены и квантовые явления, и эффекты памяти. Из дальнейшего будет видно, что это можно делать при произвольной силе взаимодействия с рассеивателями, но только в случае узких зон. При этом механизм переноса может не иметь ничего общего с классическими случайными блужданиями в \mathbf{R} -пространстве.

В Приложении 4 показано, что наибольший член в ряду для $\Gamma_{m'm_1}^{m'm_1}$ (по степеням η_1) равен

$$\Gamma^{(0)} = \delta_{n_1, m_1} \delta_{m', m_1} N_e / N.$$

Подставляя $\Gamma^{(0)}$ в (I.95), получим

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2kT} n \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \sum_m X_m^2 P(m; s) = \frac{e^2}{2kT} n \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_m X_m^2 P(m, t), \quad (\text{I.96})$$

что дает для μ формулы (I.93) и (I.94). Может создаться неверное впечатление, что они справедливы для поляронов малого радиуса только с точностью до следующих поправок по параметру η_1 (поскольку Γ бралось лишь в низшем порядке по η_1) и что только с такой точностью и можно говорить о том, что полярон совершает случайное блуждание по узлам. На самом же деле члены, отброшенные при выводе (I.93), (I.94), малы, как $\exp(-S_T) \ll 1$. Действительно, отбросим в (I.95) члены, содержащие недиагональные вершины $\Gamma_{mm_1}^{mm_1}$, малые как $\exp(-S_T)$ (см. Приложение 4), но сохраним «диагональные вершины», которые представляются в виде ряда по степеням η_1 и не содержат экспоненциальной малости типа $\exp(-S_T)$. Тогда мы получим

$$\sigma = \frac{e^2}{2kT} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \frac{1}{V} \sum_{m, m_1} (X_m - X_{m'})^2 \Gamma_{m'm_1}^{m'm_1} P_{m, m_1}^{m, m_1}(s). \quad (\text{I.95a})$$

Перейдем в (I.95a) к фурье-представлению по \mathbf{R} для диагональных Γ и P (см. (I.67)) и представим сумму по m в виде

$$\frac{1}{N} \sum_m X_m^2 \exp(i\mathbf{x} \mathbf{R}_m) = - \frac{d^2}{d\mathbf{x}_x^2} \frac{1}{N} \sum_m \exp(i\mathbf{x} \mathbf{R}_m) = - \frac{d^2}{d\mathbf{x}_x^2} \delta_{\mathbf{x}, 0}.$$

Подставляя все это в (I.95a), получим

$$\sigma = - \frac{e^2}{2kT} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \left\{ \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{N}{V} \left[\frac{d^2}{d\mathbf{x}_x^2} (P(\mathbf{x}) \Gamma(\mathbf{x})) \right] \Big|_{\mathbf{x}=0} \right\}. \quad (\text{I.97})$$

При выводе (I.97) мы перешли от суммирования по \mathbf{x} к интегрированию по первой зоне Бриллюэна, затем устремили объем к ∞ и, используя соотношение

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{V}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{x}, 0} = \delta(\mathbf{x}),$$

дважды проинтегрировали по \mathbf{x} по частям (внеинтегральные члены исчезают на границах зоны Бриллюэна).

Поскольку $\Gamma(\kappa)$, по самому своему определению, свободных сечений не содержит, то и ее производная по κ не содержит степеней $1/s$. Поэтому из (I.97) имеем

$$\sigma = -\frac{e^2}{2kT} \frac{N}{V} \Gamma(0) \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \left[\frac{d^2}{d\kappa_x^2} P(\kappa) \right] \Big|_{\kappa=0}. \quad (\text{I.98})$$

Теперь мы покажем, что с точностью до членов $\sim \exp(-S_T \delta)$ (где $\delta \approx 1$)

$$\frac{N}{V} \Gamma(0) \approx n. \quad (\text{I.99})$$

Действительно, из определения для $M(m, m'; s)$ (с точностью до $O(n^2)$) вытекает соотношение

$$\begin{aligned} \sum_m M(m', m; s) &= \int_0^\infty e^{-st} \left\langle (a_m^+, a_m^-)_t \sum_m a_m^+ a_m^- \right\rangle dt = \\ &= \frac{1}{s} \sum_m \langle a_m^+, a_m^-, a_m^+ a_m^- \rangle = \frac{1}{s} \frac{N_e}{N}. \end{aligned} \quad (\text{I.100})$$

Здесь N_e — число электронов в объеме V . При выводе (I.100) использовалось то свойство, что $\sum_m a_m^+ a_m^-$ есть c -число, т. е. зависимость от t в $\langle (a_m^+, a_m^-)_t \rangle$ выпадает. Суммируя обе части приближенного (с точностью до $\exp(-S_T)$) равенства

$$M_{m'm}^{m'm} \approx \sum_{m_1} \Gamma_{m'm_1}^{m'm_1} P_{m_1 m}^{m_1 m}$$

по m и используя свойство (I.100) и условие нормировки (I.62) для P , получим

$$\sum_{m_1} \Gamma_{m'm_1}^{m'm_1} = \Gamma(\kappa) \Big|_{\kappa=0} \approx \frac{N_e}{N}, \quad (\text{I.101})$$

откуда следует формула (I.99). Используя (I.99) и тот факт, что

$$\left[\frac{d^2}{d\kappa_x^2} P(\kappa) \right] \Big|_{\kappa=0} = \sum_m X_m^2 P(m; s), \quad (\text{I.102})$$

видим, что уравнение (I.98) эквивалентно (I.96).

Итак, формулы (I.93) и (I.94) применимы к ПМР с точностью до поправок $\exp(-\gamma S_T)$, где $\gamma \approx 1$. Дальше будет показано, что они справедливы вообще для любых квазичастиц, у которых разрешенные зоны достаточно узкие.

Получим теперь наиболее общее выражение для σ , следующее из (I.95) в пределе малых концентраций $n\Omega = N_e/N \ll 1$.

Система уравнений (I.59) является системой линейных неоднородных уравнений для недиагональных величин $P_{m_2, m_1}^{n_1, m'}$. Неоднородным членом является $\sum_{m_3} W_{m_2, m_3}^{m_1, m_2} P_{m_3, m_1}^{n_3, m'}$. Разрешая эту систему относительно недиагональных $P_{m_2, m_1}^{n_1, m'}$, получим

$$P_{m_2, m_1}^{n_1, m'} = \sum_{m_3} L_{m_2, m_3}^{m_1, m_2} P_{m_3, m_1}^{n_3, m'},$$

где $L_{m_2, m_3}^{m_1, m_2}$ — некоторые матрицы. Подставляя это выражение в (I.66), получим систему линейных уравнений для диагональных величин

$$s P_{m m'}^{n m'}(s) = \delta_{m m'} + \bar{W}_{m m}^{m m} P_{m m'}^{n m'} + \sum_{m_1 \neq m} \bar{W}_{m m_1}^{m m_1} P_{m_1 m'}^{n m'}, \quad (\text{I. 103})$$

где

$$\bar{W}_{m m_1}^{m m_1} = W_{m m_1}^{m m_1} + \sum_{m_2 \neq m_1} W_{m m_2}^{m m_2} L_{m_2 m_1}^{m_2 m_1}. \quad (\text{I. 104})$$

Точно так же, как и ранее, можно убедиться в том, что величины $\bar{W}_{m m_1}^{m m_1}$ удовлетворяют соотношениям (I.60), (I.61). Формальное решение уравнения (I.103) представляется в таком же виде, как и раньше, и выражается формулами (I.67) — (I.69), где вместо W надо подставить \bar{W} , т.е. имеем

$$P(m; s) = \frac{1}{N} \sum_x \frac{\exp(i x R_m)}{s + \bar{W}(x; s)}. \quad (\text{I. 105})$$

Используя (I.97), формулу (I.56) для $M(m', m; s)$ можно записать в виде

$$M(m', m; s) = \sum_{m_1} \bar{\Gamma}_{m m_1}^{m m_1} P_{m_1 m'}^{n_1, m'}, \quad (\text{I. 106})$$

где

$$\bar{\Gamma}_{m m_1}^{m m_1} = \Gamma_{m m_1}^{m m_1} + \sum_{m_2 \neq m_1} \Gamma_{m m_2}^{m m_2} L_{m_2 m_1}^{m_2 m_1}. \quad (\text{I. 107})$$

Поскольку формула (I.106) позволяет привести выражение для σ к виду (I.95а), то все дальнейшие выкладки полностью аналогичны, за исключением того важного факта, что теперь равенство

$$\bar{\Gamma}(0) = N_e / N \quad (\text{I. 108})$$

есть точное тождество (в отличие от приближенного равенства (I.99), в котором были опущены члены, малые для полярновского малого радиуса, как $\exp(-S_T)$).

В результате имеем точную формулу

$$\sigma_{xx} = - \frac{e^2}{2kT} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x_x^2} \left[\frac{N}{V} \bar{\Gamma}(x) \frac{1}{s - \bar{W}(x; s)} \right] \right\} \Big|_{x=0}. \quad (\text{I. 109})$$

Если предположить, что $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial x_x^2} \bar{\Gamma}(x)$ и $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial x_x} \bar{\Gamma}(x)$, так же как и $\Gamma'(0)$, и $\Gamma''(0)$, не содержат особенностей типа $1/s$, то (I. 109) переходит в (I. 98), и в принятом приближении (I. 96) может быть представлена в виде

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 n}{kT} \frac{1}{2} \sum_m X_m^2 \bar{W}(R_m). \quad (\text{I. 110})$$

Казалось бы, что формула (I. 110) не ограничена условиями (I. 64), и формула (I. 87) вытекает из нее как частный случай. Действительно, в низшем для L приближении, т. е. полагая

$$L_{m_3 m_1}^{m_2 m_1} \approx L^{(1)}_{m_3 m_1} = W_{m_3 m_1}^{m_2 m_1} [s + \tau^{-1} (m_2 - m_3)]^{-1},$$

получим $\bar{W}^{(1)}(R_m, s) = \tilde{W}(R_m, s)$ (см. (I. 83)), и (I. 110) перейдет в (I. 87). Напомним, однако, что $\bar{\Gamma}(x)$ не есть истинная вершина $\bar{\Gamma}(x)$. Поэтому, кроме конечных вкладов, в $\bar{\Gamma}''(0)$ могут иметься вклады, содержащие особенности вида $1/s^2$ (см. формулу (П.6.14) в Приложении 6).

Даже в том случае, когда коэффициенты при таких «опасных» членах окажутся гораздо меньше, чем при нормальных, их нельзя отбросить, если их малость такая же, как и для следующих членов разложения в L и \bar{W} . Поэтому желательно найти такое выражение для σ , в котором бы не фигурировала вершина $\bar{\Gamma}(x)$. Эта задача решена в Приложении 6, а окончательные формулы, свободные от упомянутых выше недостатков, приведены в следующем параграфе. Из них следует, что истинным параметром разложения всегда является $\Delta E / zkT$, где ΔE — ширина разрешенной зоны для квазичастиц, т. е. перенормированной зоны. Условие $\Delta E / zkT \ll 1$ есть условие узости перенормированных зон.

§ 10. Общие выражения для подвижности в $(k - R)$ -представлении

Какие зоны должны быть узкими, перенормированные или затравочные, для того чтобы можно было воспользоваться формулой (I. 96)?

Чтобы ответить на этот вопрос, желательно перейти к такому описанию, при котором было бы возможно использовать понятие об энергетической зоне для носителей тока (для этого набор используемых квантовых чисел должен включать квази-волновой вектор k) и одновременно можно было бы рассматривать их пространственно-неоднородные распределения. Таким

свойством обладает одночастичная вигнеровская матрица плотности $P_W(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$, которую, следуя Мойэлу [71], для рассматриваемого случая можно представить в виде

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} P_W(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t) = \\ & = \frac{1}{\text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{E}_0})} \sum_{\Delta} e^{-2i\mathbf{k}\Delta} \text{Sp} \{ e^{-\beta \mathcal{E}_0} \langle 0 | a_0 (a_{\mathbf{R}+\Delta}^+ a_{\mathbf{R}-\Delta})_t a_0^+ | 0 \rangle \}. \quad (\text{I. 111}) \end{aligned}$$

Однако из Приложения 6 следует, что для наших целей практически удобнее использовать величину $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t) = \sum_{\Delta} e^{-2i\mathbf{k}\Delta} P_{\mathbf{R}+\Delta, 0}^{\mathbf{R}-\Delta, 0}(t) = \\ & = \sum_{\Delta} e^{-2i\mathbf{k}\Delta} \frac{1}{\text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{E}_0})} \text{Sp} \{ e^{-\beta \mathcal{E}_0} \langle 0 | a_{\mathbf{R}+\Delta} (a_0^+ a_0)_t a_{\mathbf{R}-\Delta}^+ | 0 \rangle \}. \quad (\text{I. 112}) \end{aligned}$$

Это позволяет представить формулу для σ в виде

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{kT} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \sum_{\mathbf{R}} R_x^2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) \frac{F(\mathbf{n}, \mathbf{R}; t)}{N} \quad (\text{I. 113})$$

или, что то же самое, в виде

$$\sigma_{xx} = - \frac{e^2}{2kT} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) \left(\frac{\partial^2 F(\mathbf{k}, \mathbf{x}; s)}{\partial^2 x_x} \right) \Big|_{\mathbf{x}=0}, \quad (\text{I. 114})$$

где $n(\mathbf{k})$ — точная одночастичная функция распределения квазичастиц по импульсам, $F(\mathbf{k}, \mathbf{x}; s)$ — фурье-компонента по координате \mathbf{R} и лапласова преобразованная по t от функции $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$. В линейном по N_e/N приближении формула (I. 114) есть самое общее выражение для σ , справедливое при любой ширине исходной (неперенормированной) зоны и при произвольной силе связи с фононами. Формулы (I. 87), (I. 96) и (I. 110) вытекают из нее после дополнительных предположений.

Функция $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$ следующим образом связана с компонентами функции условной вероятности:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t) = P(\mathbf{R}, t). \quad (\text{I. 115})$$

Предельный случай узких зон $\varepsilon(\mathbf{k})/2kT \ll 1$ получается из (I. 113), если положить $n(\mathbf{k}) \approx \text{const} = N_e/N$ и учесть свойство (I. 115). При этом мы приходим к (I. 96).

Из Приложения 5 следует, что узость зон для поляронов малого радиуса означает малость параметра

$$\frac{2J}{kT} \exp(-S_T) f(\eta_1),$$

где $f_1(\eta_1) \approx 1$ при $\eta_1 \ll 1$. Это может быть более жестким условием, чем малость $\exp(-S_T)$.

Уравнение для $F(\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}; s)$, полученное в Приложении 6, весьма типично для метода КП:

$$\left\{ s + \frac{i}{\hbar} \left[\varepsilon \left(\mathbf{k} + \frac{\boldsymbol{\kappa}}{2} \right) - \varepsilon \left(\mathbf{k} - \frac{\boldsymbol{\kappa}}{2} \right) \right] \right\} F(\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}; s) = \\ = 1 + \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\kappa}) F(\mathbf{k}', \boldsymbol{\kappa}; s). \quad (\text{I. 116})$$

Здесь $\mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\kappa})$ — вероятности рассеяния квазичастиц из состояния \mathbf{k} в \mathbf{k}' при наличии пространственной дисперсии ($\boldsymbol{\kappa} \neq 0$). Они определены в Приложении 6, из которого также следует, что σ можно представить и в таком виде:

$$\sigma = \frac{e^2}{2kT} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} n(\mathbf{k}_1) \mathcal{W}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + \\ + \frac{e^2}{kT} \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}_1}} n(\mathbf{k}_1) [v_x(\mathbf{k}_1) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2} - i\mathcal{W}_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)] \times \\ \times P(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3; s) [v_x(\mathbf{k}_3) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_4} - i\mathcal{W}_1(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4)]. \quad (\text{I. 117})$$

Здесь

$$\mathcal{W}_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left[\frac{\partial \mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\kappa})}{\partial \boldsymbol{\kappa}_x} \right]_{\boldsymbol{\kappa}=0}, \quad \mathcal{W}_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left[\frac{\partial^2 \mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\kappa})}{\partial \boldsymbol{\kappa}_x^2} \right]_{\boldsymbol{\kappa}=0}, \quad (\text{I. 118})$$

$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x}$, где $\varepsilon(\mathbf{k})$ — точная (перенормированная) энергия квазичастицы $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \lim_{s \rightarrow 0} P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; s)$. Функция $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; s)$ есть лапласова преобразованная от функции $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t)$ (см. (П.6.12)), которая является условной вероятностью найти носитель тока в момент времени $t > 0$ в состоянии \mathbf{k}' , если при $t = 0$ он был помещен в состояние \mathbf{k} , а решетка находилась в термодинамическом равновесии.

Уравнение для $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; s)$ имеет вид

$$sP(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; s) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}_1} \mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) [P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'; s) - P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; s)], \quad (\text{I. 119})$$

где $\mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = [\mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \boldsymbol{\kappa})]_{\boldsymbol{\kappa}=0}$, имеет смысл вероятности рассеяния квазичастиц из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}_1 . В случае статистики Больцмана формулы (I. 114) и (I. 117) пригодны всегда.

В работе [45] автора и Е. К. Кудинова продемонстрирован непосредственный переход от (I. 114) к обычному предельному случаю: широкие зоны, рассеяние слабое. В обратном предельном случае зоны узкие, рассеяние сильное — решены уравнения (I. 116) для $F(\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}; s)$ (итерационная процедура типа той, которая использовалась при решении системы (I. 58) — (I. 59)), и для поляронов малого радиуса повторены результаты, описанные в §§ 6, 8.

Ниже мы покажем, как можно получить оба предельных случая непосредственно из формул (I. 114) и (I. 117), т. е. не решая уравнения для $F(\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}; s)$.

Переход к случаю сильной связи и узких зон в формуле (I. 117) почти очевиден. Первый член в (I. 117) как бы соответствует перескоковому вкладу, а второй — туннельному (или больцмановскому). Действительно, в случае узких зон $\mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \boldsymbol{\kappa})$ является просто фурье-компонентой для $\mathcal{W}_{m_2 m_4}^{m_1 m_3}$,

$$\mathcal{W}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_3, m_4}} \mathcal{W}_{m_2 m_4}^{m_1 m_3} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{m}_3 - \mathbf{m}_4)} e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_3 - \mathbf{m}_4)}. \quad (\text{I. 120})$$

Полагая $n(\mathbf{R}_i) = \text{const} = N_c/N$ и суммируя в (I. 120) по \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 , получим, что $\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathcal{W}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \boldsymbol{\kappa})$ равно вероятности $\mathcal{W}(\boldsymbol{\kappa})$, которая определена согласно (I. 69). Поэтому

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathcal{W}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \left. \frac{\partial^2 \mathcal{W}(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \boldsymbol{\kappa}_x^2} \right|_{\boldsymbol{\kappa}=0} = \sum_{\mathbf{m}} X_{\mathbf{m}}^2 \mathcal{W}(\mathbf{m}, s), \quad (\text{I. 121})$$

т. е. первый член в (I. 117) соответствует первому члену в (I. 87).

Во втором члене в (I. 117) фигурирует величина $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}', s)$, удовлетворяющая уравнению (I. 119). Из формулы (I. 120), если положить в ней $\boldsymbol{\kappa} = 0$, следует, что $\mathcal{W}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ можно представить в виде

$$\mathcal{W}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \omega(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + \Delta \mathcal{W}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \quad (\text{I. 120a})$$

где

$$\omega(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{m}} \frac{1}{\tau(\mathbf{m})} e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{m}},$$

$$\Delta \mathcal{W}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{N^2} \sum'_{\substack{m_1, m_2 \\ m_3, m_4}} \bar{\mathcal{W}}_{m_2 m_4}^{m_1 m_3} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{m}_3 - \mathbf{m}_4)}.$$

Штрих над суммой означает, что из нее исключен член $m_1 = m_3, m_2 = m_4$, а черта над $\bar{\mathcal{W}}$ означает, что из $\bar{\mathcal{W}}$ исключены все вклады, имеющие смысл перенормированной энергии полярона (например, в $\bar{\mathcal{W}}$ нет «пустых точек»). Из неравенства (I. 64) следует, что $\Delta \mathcal{W}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \ll \omega(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$. Подставляя в (I. 119) величины $\omega(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$, получим, что в принятом приближении

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}', s) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{m}} \frac{1}{\tau(\mathbf{m})} e^{i\mathbf{m} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')}. \quad (\text{I. 122})$$

Подставляя (I. 122) во второй член в (I. 117) и полагая $n(\mathbf{k}) \rightarrow N_c/N$ (условие узости зон), приходим ко 2-му члену в (I. 87). Итак, для применимости (I. 87), как и утверждалось в

§ 9, необходима узость перенормированных зон и малость параметра $\mathcal{W}\tau$, при этом параметр $\Delta e_p \tau / \hbar$ может принимать произвольные значения. Итак, второй член в (I. 117) отражает эволюцию недиагональных по узлам компонент условной вероятности, а первый целиком обусловлен эволюцией диагональных компонент. Переход в (I. 117) к случаю слабой связи излагается в § 11.

Обсудим теперь связь между узельным представлением, использованным при выводе формул (I. 87), (I. 96), (I. 110), и вигнеровским ($\mathbf{k} - \mathbf{R}$)-представлением, использовавшимся при выводе формул (I. 113), (I. 114) и (I. 117).

Введем величину $f(\mathbf{R}, t)$, равную (ср. с формулой (I. 115) для $P(\mathbf{R}, t)$)

$$f(\mathbf{R}, t) = \frac{1}{nV} \sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t). \quad (\text{I. 123})$$

Тогда (I. 113) можно переписать в виде

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 n}{2kT} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_{\mathbf{R}} R_x^2 f(\mathbf{R}, t), \quad (\text{I. 124})$$

очень похожем на (I. 96).

В общем случае из (I. 123) и (I. 112) получим

$$f(\mathbf{R}, t) = \sum_{\Delta} \chi(\Delta/\Delta_0) P_{\mathbf{R}+\Delta, 0}^{\mathbf{R}-\Delta, 0}(t), \quad (\text{I. 125})$$

где

$$\chi(\Delta/\Delta_0) = \frac{1}{nV} \sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) \exp(2i\mathbf{k}\Delta). \quad (\text{I. 126})$$

Величина $\chi(\Delta/\Delta_0)$ характеризует степень участия недиагональных компонент условной вероятности в процессе движения носителя тока. Например, для широких зон, когда $\Delta E/zkT \gg 1$, получаем $\chi = e^{-(\Delta/\Delta_0)^2}$, где $\Delta = \hbar(mkT)^{-1/2}$ — порядка тепловой длины волны де-Бройля электрона. Для узких зон, когда $\Delta E/zkT \ll 1$ и $n(\mathbf{k}) \approx \text{const}$, имеем $\chi = \delta_{\Delta, 0} + O(\Delta E/kT)$, т. е. недиагональные компоненты в этом случае вклада в $f(\mathbf{R}, t)$ практически не вносят, поэтому $f(\mathbf{R}, t)$ совпадает с $P(\mathbf{R}, t)$, и мы получаем предельный переход к (I. 96).

Заметим, что при любом начальном условии все компоненты функции условной вероятности $P_{\mathbf{R}+\Delta, 0}^{\mathbf{R}-\Delta, 0}$ с ростом t становятся отличными от нуля, но в $f(\mathbf{R}, t)$ будут вносить вклад лишь те компоненты, у которых \mathbf{R} — любые, а Δ — во всяком случае ограничены (из-за наличия функции $\chi(\Delta/\Delta_0)$).

Итак, можно сказать, что функция $P_{\mathbf{R}+\Delta, 0}^{\mathbf{R}-\Delta, 0}$ описывает как формирование пространственно ограниченного пакета из недиагональных компонент матрицы плотности, так и перемещение его центра тяжести \mathbf{R} . Величина же $f(\mathbf{R}, t)$ для достаточно больших времен описывает лишь перемещение центра тяжести

волнового пакета. В случае слабой связи, когда первоначальное состояние характеризуется неравновесным распределением по углам в k -пространстве и равновесным распределением по энергиям, $f(\mathbf{R}, t)$, согласно [45], является функцией от безразмерной комбинации $R^2/4tD_T$, где $D_T = D(k_T)$, $k_T = (2mkT/\hbar^2)^{1/2}$. Лишь в том случае, когда D не зависит от k , функция $f(\mathbf{R}, t)$ удовлетворяет уравнению диффузии, что соответствует случаю классической броуновской частицы.

Заметим, что в квантовом случае имеет смысл рассматривать именно те условные вероятности, которые входят в наблюдаемые величины. Так, в случае широких зон «броуновское» движение описывается функцией $f(\mathbf{R}, t) = N_e^{-1} \sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$,

а не $P(\mathbf{R}, t) = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$.

В случае же узких зон такой характеристикой является $F(\mathbf{R}, t)$, поскольку для них k не есть «хорошее» квантовое число, и описание в k -пространстве не является адекватным. Из соображений дополнительности следует ожидать, что в этом случае наглядное описание будет достигаться в конфигурационном пространстве (пространстве узлов решетки). При этом начальное состояние, выделяющее какой-то узел решетки в процессе временной эволюции, должно приближаться к равномерному распределению по узлам, а сама эволюция будет представлять стохастическое блуждание носителя тока по решетке. В предельном случае, когда рассеяние отсутствует (см. § 5), такая картина вырождается в процесс расплывания волнового пакета в конфигурационном пространстве и теряет стохастический характер. Рассеяние приводит к тому, что такой процесс описывается стохастическим уравнением типа Колмогорова — Феллера (см. § 7).

§ 11. Связь с методом КП

Хотя формулы (I. 113), (I. 114) и (I. 117) внешне отличаются от обычного выражения для электропроводности, они допускают непосредственный переход к обычному предельному случаю: широкие зоны, рассеяние слабое.

Теория сформулирована так, что окончательное выражение для σ записано не через антисимметричную по k часть от функции распределения (как обычно), а через *симметричную по k часть функции распределения при наличии слабой пространственной дисперсии* ($\kappa \rightarrow 0$). Несомненным достижением, на наш взгляд, является устранение «угловой части» Γ из формулы для σ . Обычное выражение для σ по методу КП (в случае статистики Больцмана) имеет вид

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{kT} \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}, s) v_x(\mathbf{k}), \quad (\text{I. 127})$$

где $f(\mathbf{k}; s)$ подчиняется уравнению

$$sf(\mathbf{k}, s) = \sum_{\mathbf{k}_1} v_x(\mathbf{k}_1) \Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}; s) + \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; s) [f(\mathbf{k}', s) - f(\mathbf{k}, s)]. \quad (\text{I. 128})$$

В методе КП первый член справа в (I. 128) называется вершиной. Обозначим его через $r_1(\mathbf{k})$, т. е. $r_x(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\mathbf{k}_1} v_x(\mathbf{k}_1) \Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}; s)$.

При слабой связи $\Gamma^{(0)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}; s) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} n^{(0)}(\mathbf{k})$, где $n^{(0)}(\mathbf{k})$ — неперенормированная функция распределения, т. е. вершина $r_x(\mathbf{k}, s)$, переходит в $v_x(\mathbf{k}) n^{(0)}(\mathbf{k})$. Если помножить уравнение (I. 128) на $\frac{e}{kT} E_x$, оно приобретает вид обычного кинетического уравнения.

Заметим, что уравнение для условной вероятности $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; s)$ получается из (I. 128), если представить $f(\mathbf{k}, s)$ в виде

$$f(\mathbf{k}, s) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} v_x(\mathbf{k}_1) \Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) P(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}; s) \quad (\text{I. 129})$$

и подставить (I. 129) в (I. 128), в результате чего приходим к (I. 119). Величины $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; s)$ и $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; s)$ имеют простой физический смысл (см. § 11 и Приложение 6).

Обычно считалось, что угловые части $r_x(\mathbf{k}, s)$ и $\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}; s)$, вообще говоря, как-то характеризуют начальную стадию включения внешнего поля (или отключения термостата) для малых времен $t \leq t_0 \ll \tau$ (t_0 — «время столкновения», τ — время релаксации). Недавно было строго доказано, что на самом деле $r(\mathbf{k})$ имеют иную природу. Они возникают при линейаризации по E точного уравнения переноса за счет линейных по E поправок к вероятностям перехода. Замкнутое выражение для $r(\mathbf{k})$, приведенное в [72] (см. (37) в [72]), имеет вид

$$r_x(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k})}{\partial k_x} n(\mathbf{k}) - i \sum_{\mathbf{k}'} n(\mathbf{k}') W_1(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (\text{I. 130})$$

Дальнейших сведений о функции $r_x(\mathbf{k})$ мы здесь не приводим, ибо в Приложении 6 показано, что угловую часть можно устранить, и для σ получена формула (I. 117), в которую входит лишь точная функция распределения $n(\mathbf{k})$ и производные по \mathbf{k} от точных вероятностей, вычисленных в условиях слабой пространственной неоднородности ($\mathbf{x} \rightarrow 0$).

Предельный переход в (I. 117) к случаю поляронов малого радиуса обсуждался в § 10 (см. также [45]).

В случае слабого рассеяния, когда константа связи с рассеивателями мала, т. е. $\lambda \ll 1$, первый член в (I. 117) пропорционален λ^2 , а последний (если пренебречь вкладом от $W_1 \sim \sim \lambda^2 v_x \ll v_x$) пропорционален λ^{-2} ; при этом выражение для σ

через P имеет вид

$$\sigma_{xx} = e^{2\beta} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} n^{(0)}(\mathbf{k}_1) v_x^{(0)}(\mathbf{k}_1) P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s) v_x^{(0)}(\mathbf{k}_2). \quad (\text{I. 131})$$

Обозначим величину $e\beta \sum_{\mathbf{k}_1} n^{(0)}(\mathbf{k}_1) v_x^{(0)}(\mathbf{k}_1) P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k})$ через $f(\mathbf{k})$. Умножим (I. 119) на $e\beta n^{(0)}(\mathbf{k}) v_x^{(0)}(\mathbf{k}) E_x$ слева и, суммируя по \mathbf{k} , получим для $f(\mathbf{k})$ обычное кинетическое уравнение

$$sf(\mathbf{k}, s) = \frac{1}{kT} n^{(0)}(\mathbf{k}) eE_x v_x^{(0)} + \sum_{\mathbf{k}_1} [f(\mathbf{k}_1) - f(\mathbf{k})] W(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}). \quad (\text{I. 132})$$

Таким образом, результат (I. 131), следующий из (I. 117), в случае слабой связи совпадает с тем, что следует из кинетического уравнения.

Отметим, что второй член в (I. 117) совпадает по форме с (I. 131). Различие лишь в том, что вместо $n^{(0)}(\mathbf{k})$ в (I. 117) стоит точная функция распределения $n(\mathbf{k})$, а скорости

$$v_x^{(0)} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon^0(\mathbf{k})}{\partial k_x}$$

заменены на «эффективные» скорости, матричные элементы от которых, вычисленные в представлении нулевого гамильтониана \mathcal{H}_0 (с собственными значениями энергии $\varepsilon^0(\mathbf{k})$), недиагональны:

$$\langle \mathbf{k} | v_x | \mathbf{k}' \rangle = v_x(\mathbf{k}\mathbf{k}') = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon^0(\mathbf{k})}{\partial k_x} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - i \left[\frac{\partial}{\partial x_x} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{x}) \right]_{\mathbf{x}=\mathbf{0}}.$$

Соответствующая интерпретация приведена в [45].

§ 12. Стохастическая интерпретация функций $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t)$ и $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$

Основным достоинством формул (I. 114) и (I. 117) является отсутствие в них трудно интерпретируемых «вершин», присущих методу КП. Все наблюдаемые величины удалось выразить через функции $n(\mathbf{k})$, $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, $W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, $W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ и $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t)$, имеющие простой физический смысл. В соответствии с определением величины $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t)$ как функции условной вероятности имеем

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t) = [\text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}_0}]^{-1} \text{Sp} \{ e^{-\beta \mathcal{H}_0} \langle 0 | a_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}})_t a_{\mathbf{k}}^+ | 0 \rangle \}, \quad (\text{I. 133})$$

где \mathcal{H}_0 есть гамильтониан рассеивателей, скажем, фононов.

Функция $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t)$ удовлетворяет следующим соотношениям:

$$\sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t) = 1, \quad (\text{I. 134})$$

$$\sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t) = n(\mathbf{k}'). \quad (\text{I. 135})$$

Первое условие следует из (I. 133), а второе отражает инвариантность $n(\mathbf{k})$ относительно рассеяния: электрон, распределенный по $n(\mathbf{k})$, с течением времени своего распределения не меняет, ибо его начальное распределение является равновесным. Отметим также очевидное свойство

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t) = n(\mathbf{k}'). \quad (\text{I. 136})$$

Оно аналогично известному свойству макроскопической броуновской частицы: обладая направленной скоростью \mathbf{v} с начальным распределением $P(\mathbf{v}, \mathbf{v}_0, 0) \sim \delta_{\mathbf{v}, \mathbf{v}_0}$, по истечении достаточно большого времени она будет подчиняться больцмановскому распределению.

Известно, что

$$P(\mathbf{v}, \mathbf{v}_0; t) = \left[\frac{m}{2\pi kT (1 - e^{-2t/\tau})} \right]^{1/2} \exp \left\{ - \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0 e^{-t/\tau})^2}{2kT (1 - e^{-2t/\tau})} \right\}. \quad (\text{I. 137})$$

Формула (I. 137) взята из [69] (гл. II, § 2, стр. 46, формула (161)). Здесь τ — время релаксации (за счет трения). При $t \gg \tau$ функция $P(\mathbf{v}, \mathbf{v}_0; t)$ в соответствии с (I. 136) переходит в больцмановское распределение. Функция (I. 137) обладает также и свойством (I. 135).

Конечно, конкретный вид $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t)$ для квантового объекта иной и должен быть найден из решения соответствующего интегрального уравнения, т. е. из (I. 119). Функция $P(\mathbf{v}, \mathbf{v}_0; t)$ является решением дифференциального уравнения Фоккера — Планка, которое может быть получено из уравнения (I. 119) только в некоторых специальных случаях.

Классическим аналогом величины $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$ является функция

$$W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0; t) = \left[4\pi \frac{kT}{m} t \tau f(t/\tau) \right]^{-3/2} \exp \left\{ - \frac{m[\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 - \tau \mathbf{v}_0 (1 - e^{-t/\tau})]^2}{4kT \tau t f(t/\tau)} \right\}. \quad (\text{I. 138})$$

где $f(t/\tau) = 1 - \frac{1}{2} \frac{\tau}{t} (3 + e^{-2t/\tau} - 4e^{-t/\tau})$ (см. формулу (171) гл. II в [69]). W есть функция, встречающаяся в теории броуновского движения и имеющая смысл условной вероятности того, что частица окажется в точке \mathbf{r} в момент времени t , если при $t = 0$ она находилась в точке \mathbf{r}_0 и обладала скоростью \mathbf{v}_0 (здесь $\mathbf{k} = m\mathbf{v}_0/\hbar$, $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0$).

Действительно, при $t \gg \tau$ (I. 138) приводится к виду

$$W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0; t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp(-(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 - \mathbf{v}_0 \tau)^2 / 4Dt), \quad (\text{I. 138a})$$

где $D = kT\tau/m$. Таким образом, при подстановке (I. 138) в (I. 113) и (I. 124) мы пришли бы к обычному выражению для σ (только с постоянным τ) и к обычным выражениям для среднеквадратичного смещения.

Уместно задать вопрос: какой смысл проследивать аналогию с броуновским движением, ведь носитель тока есть квантовомеханический объект, а не макроскопическая частица? Так, например, величина $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, v_0; t)$ всегда положительна, а $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$, вообще говоря, комплексна*), так же как и вигнеровская матрица плотности $P_W(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$ (см. (I. 111)). Это свойство функции $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$ связано с тем, что в квантовой механике координата и импульс не могут быть определены одновременно. Однако величина $f(\mathbf{R}, t)$ всегда положительна. Она имеет смысл условной вероятности, но не для объекта малых размеров, а для большого (пространственно ограниченного) волнового пакета, и описывает в терминах теории стохастических процессов перемещение центра тяжести этого пакета. Средний квадрат смещения $\langle R_x^2(t) \rangle$ и формула для σ выражаются именно через $f(\mathbf{R}, t)$.

Итак, все же имеет некоторый смысл говорить об обобщенном броуновском движении (в широком смысле) носителя тока, помещенного в тепловой резервуар. Но что же в данном случае играет роль термостата и как отделить случайные силы от трения?

Очевидно, что именно взаимодействие носителей тока с рассеивателями ответственно и за случайные силы и за систематическое трение, так же как это имеет место для классической броуновской частицы, взаимодействующей с молекулами жидкости. Швингер, Тода и др. [73—76] строили теорию броуновского движения для одного линейного осциллятора, слабо связанного с другими (такими же) линейными осцилляторами, причем задача решалась как в квантовом, так и в классическом случаях. В рассматриваемом в [73—75] случае объект не является макроскопическим по отношению к молекулам среды, т. е., по сути дела, в качестве термостата в [73—75] рассматриваются все другие осцилляторы, с которыми связан выделенный осциллятор. Выделение носителя тока в [45] в качестве объекта рассмотрения кажется нам даже более удачным, поскольку роль термостата выполняют совсем другие объекты — рассеиватели. Для выделенного осциллятора авторы [74, 75] пытаются написать уравнение Ланжевена, которое обязательно подразумевает разделение гамильтониана на быструю часть — случайные силы и медленную часть — трение.

* Впрочем в случае слабой связи $F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t)$ вещественна и равна (см. [45])

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{R}; t) = [4\pi D(\mathbf{k}) t]^{-3/2} \exp \left[-\frac{R^2}{4t D(\mathbf{k})} \right].$$

Внешне эта формула похожа на (I. 138a), однако, $D(\mathbf{k})$ играет здесь роль «парциального» коэффициента диффузии, т. е. он связан с D соотношением

$$D = N_e^{-1} \sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) D(\mathbf{k}).$$

: По сути дела, в квантовом случае так и не удалось сформулировать однозначный принцип разбиения сил на случайные и силы трения и строго получить квантовый аналог уравнения Ланжевена. Если исходить из уравнения Ланжевена, то надо еще задать автокорреляционную функцию $\langle F(t)F(t') \rangle$ (здесь F — случайная сила), которую обычно полагают пропорциональной $\delta(t - t')$. Реально эта функция размазана на интервале t_0 порядка времени столкновения. Сила же трения проявляется на временах порядка времени релаксации.

Ясно, что указанное разбиение имеет смысл лишь в частном случае $t_0 \ll \tau$, когда уравнение для $P(\mathbf{v}, \mathbf{v}_0; t)$ становится марковским. На самом же деле уравнение Ланжевена и постулаты об автокорреляционной функции используются (см. [69]) лишь для вывода функций условных вероятностей типа $P(\mathbf{v}, \mathbf{v}_0; t)$ и $\mathcal{W}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0; t)$ и т. д. Фактически удобнее миновать этот начальный этап и сразу же писать уравнение для функций условных вероятностей*). Поскольку при выводе этих уравнений обязательно производится усреднение по рассеивателям, с которыми связано подавляющее число степеней свободы системы, то движение, описываемое такими уравнениями, неизбежно будет представлять собой некоторый стохастический процесс (броуновское движение в широком смысле). Как следует из проведенного выше рассмотрения, эта задача не более сложна, чем вывод уравнения переноса из уравнения для матрицы плотности.

§ 13. Обсуждение полученных результатов

К числу наиболее важных физических результатов, полученных в этой главе, нужно отнести доказательство того факта, что случайные блуждания полярона по узлам решетки отнюдь не противоречат теореме Блоха, а вытекают из микроскопической теории явлений переноса, в рамках которой процесс прихода к статистическому равновесию интерпретируется как случайный процесс (броуновское движение в широком смысле) в $(\mathbf{k} - \mathbf{R})$ -пространстве. Все это позволяет не только понять, в каком предельном случае можно говорить о случайном блуждании по узлам, но и создать достаточно наглядное представление о процессе переноса в самом общем случае, т. е. ответить на наиболее принципиальные вопросы 1), 2), 5), сформулированные во Введении. В ранних работах по теории поляронов малого радиуса (см., например, §§ 14—16 в I части книги) эти вопросы даже не ставились, а основной упор делался на вычисление кинетических коэффициентов, хотя сами по себе кинетические

*) Квантовомеханическая процедура, не использующая «квантовомеханического уравнения Ланжевена» для получения уравнения Фоккера — Планка из уравнения для матрицы плотности, описана, например, в работе Мак Кена и Фриша [76], появившейся после [45].

коэффициенты непосредственной информации о ходе процесса во времени не дают.

Ответы на вопросы 3) и 4) содержатся в графическом рецепте вычисления вероятностей.

Система уравнений (I. 58) — (I. 59) + графический рецепт вычисления фигурирующих в них вероятностей W в принципе позволяют полностью решить задачу, т. е. найти конкретные выражения для статических кинетических коэффициентов и дать математическое описание движения носителей тока в пространстве узлов решетки.

Однако такое описание удобно лишь в случае почти пустых и узких перенормированных зон, удовлетворяющих условию $n(\mathbf{k}) \approx \text{const}$, что эквивалентно условию

$$\frac{\Delta \tilde{E}}{kT} f(z) \ll 1, \quad (\text{A})$$

где $\Delta \tilde{E}$ — ширина перенормированной зоны. При этом ширина исходной зоны ΔE может быть достаточно большой. (Для простых кубических кристаллов $f(z) = 1/z$.) Если условие (A) не выполняется, то разумно перейти в смешанное ($\mathbf{k} - \mathbf{R}$)-представление, что и сделано в § 10 и в Приложении 6.

В этой главе было получено несколько формул для электропроводности: (I. 87), (I. 96), (I. 110), (I. 114), (I. 117), (I. 124), обладающих разной степенью точности. Формулы (I. 96) и (I. 110) могут показаться тривиальными, однако не следует забывать, что для их вывода требовалось обосновать, а не постулировать, как это сделали Ямашита, Куросава [20] и Холстейн [21], концепцию о случайных блужданиях поляронов по узлам решетки (см. п. 16) во Введении). Возможность описания в узельном представлении в этой главе строго доказана. Формула (I. 110) может быть конструктивно использована лишь для *марковских процессов* (напомним, что для поляронов малого радиуса марковость имеет место только при не слишком малой дисперсии оптических фононов). Чтобы сформулировать критерий марковости, т. е. ответить на п. 16), требуется иметь информацию о характерных временах протекания процессов (например, о длительности акта перескока), а для этого нужно уметь вычислять функции $W_{m_1, m_2}^{m_1, m_2}$ — вероятности различных процессов в узельном пространстве, и хорошо понимать их физический смысл. Эти вероятности фигурируют в интегродифференциальных уравнениях, описывающих в терминах функций условных вероятностей некоторый (вообще говоря, немарковский) стохастический процесс, представляющий собой сложную комбинацию немарковских актов перескока и туннельного просачивания. Некоторые из величин $W_{m_1, m_2}^{m_1, m_2}$, например, полностью недиагональные по узельным индексам блоки ($m_1 \neq m_2 \neq m_3 \neq m_4$), существенным образом входящие в формулу (I. 97) для электропроводности, вообще не имеют классического аналога. Они

ответственны за некоторый процесс туннельного просачивания. И только в случае достаточно узких исходных зон может существовать высокотемпературная область, в которой основную роль играют классические надбарьерные перескоки, т. е. в этой области можно в формуле (I.87) пренебречь вторым членом, и она принимает стандартный для теории случайных блужданий вид. Напомним, что в перескоковой области Холстейн учитывал только перескоки между ближайшими соседями. Исследования, проведенные в [44] (см. гл. II, § 1.2), показали, что это допустимо лишь при $\eta_3 \ll 1$. При $\eta_3 \geq 1$ (но $\eta_1 < 1$) в (I.87) следует учитывать вклад от перескоков на более удаленные узлы.

При низких температурах в (I.87), наоборот, можно ограничиться вторым членом. Механизм переноса в этой области температур, вообще говоря, неклассический (см. гл. II). Выражение (I.87) ограничено снизу лишь условием (A).

Формула (I.96) для подвижности в случае узких перенормированных зон получена при наименьшем числе ограничений на величины безразмерных параметров задачи. Формула (I.87) следует из (I.96) только при выполнении условия (I.64), применимость которого для поляронов малого радиуса пока доказана лишь в случае $\eta_3 < 1$, в то время как узость поляронных зон доказана в Приложении 5 при более мягком условии. Если удастся решить уравнения (I.58) и (I.59) при любых η_3 (а для этого надо прежде всего научиться вычислять вероятности W при любых η_3), то с помощью (I.96) можно будет вычислить подвижность поляронов малого радиуса ($\eta_1 \ll 1$) при любых η_2 и η_3 или даже решить задачу в промежуточном случае $\eta_1 \approx 1$, когда радиус полярона сравним с постоянной решетки.

Самые общие выражения для подвижности, пригодные при произвольной силе взаимодействия носителей тока с рассеивателями (фононами, примесями и т. д.) и для любых значений ширин зон (перенормированных), даются формулами (I.113), (I.114), (I.117). Впервые они были получены в [45]. В случае узких зон и произвольной силы взаимодействия они переходят в (I.96) и (I.87) соответственно. В случае зон произвольной ширины, но при слабом взаимодействии (I.117) переходит в обычное выражение для подвижности (I.127), следующее из уравнения Больцмана. В принципе формулы (I.113), (I.114) и (I.117) могут быть использованы и для поляронов большого и промежуточного радиусов.

В дальнейшем мы ограничимся исследованием лишь поляронов малого радиуса. Поскольку принципиальные вопросы 1а), 1б), 1в), 2), 5), сформулированные во Введении, были решены в этой главе, а ответы на вопросы 3) и 4) содержатся в Приложении 2, где изложен графический рецепт нахождения вероятностей, и в Приложениях 3—6, в которых описаны конкретные вычисления, то в последующих главах нам остается лишь обсудить пп. 5) и 7).

ГЛАВА II

СТАТИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ

§ 1. Вводные замечания

В настоящей главе будут обсуждены основные результаты работ [31, 32, 43, 44, 46—49, 65], посвященных исследованию подвижности поляронов малого радиуса в постоянном (слабом) электрическом поле.

Для облегчения последующего изложения представляется целесообразным ввести следующие шесть характерных температур: $T_1, T_2, T_0, T_3, T_{\min}, T_{\max}$.

T_1 — это температура, ниже которой нарушается условие узости поляронных зон:

$$kT_1 = \Delta E_p / f(z) \quad (\text{II. 1})$$

(здесь $f(z)$ — некоторая функция от числа ближайших соседей z , для кубического кристалла $f(z) = z$). Напомним, что ширина поляронной зоны ΔE_p связана с шириной исходной (неперенормированной) зоны ΔE соотношением

$$\Delta E_p = \Delta E \exp(-S_T), \quad (\text{II. 2})$$

где $S_T \approx \gamma \operatorname{cth}(\hbar\omega_0/2kT)$; $\gamma \approx (2E_a/\hbar\omega_0)$. Для простого кубического кристалла $\Delta E = 2zJ = 12J$.

При $T < T_1$ формулы (I.87) и (I.96) неприменимы, и необходимо пользоваться более общими выражениями (I.117) или (I.113), (I.114).

T_2 — температура, при которой неопределенность энергии полярона за счет рассеяния становится сравнимой с шириной поляронной зоны (ср. с T_t из I части книги)

$$\Delta E_p = \frac{\hbar}{\tau(T_2)} f(z). \quad (\text{II. 3})$$

Здесь τ есть некоторое «время релаксации» (конкретные выражения для τ будут приведены в § 4 этой главы), которое описывает «трение», обусловленное замедленной реакцией фононной подсистемы, на процесс туннелирования электрона, одетого в «поляронную шубу». При $T < T_2$ применимо стандартное кинетическое уравнение, а τ имеет обычный смысл и описывает рассеяние (двухфононное) поляронных волн в k -пространстве (хотя в области $T_1 < T < T_2$ поляронные зоны еще «узкие»).

T_0 — температура, выше которой выражение для вероятностей перескока уже может быть получено по методу перевала *)

$$kT_0 \approx \frac{\hbar\omega_0}{2 \ln(2S_T)} \approx \frac{\hbar\omega_0}{2 \ln(4E_a/\hbar\omega_0)} < \frac{\hbar\omega_0}{2}. \quad (\text{II. 4})$$

T_3 — это температура, при которой перескоковый (μ_h) и туннельный (μ_t) вклады в подвижность сравниваются по величине

$$\mu_t(T_3) = \mu_h(T_3). \quad (\text{II. 5})$$

T_{\min} — это температура, при которой суммарная подвижность $\mu = \mu_h + \mu_t$ имеет минимум, т. е. T_{\min} определяется из условия

$$\frac{\partial}{\partial T} [\mu_h(T) + \mu_t(T)] = 0. \quad (\text{II. 6})$$

Экспериментально определяется именно T_{\min} , а не T_t .

T_{\max} — это температура, при которой $\mu_h(T)$ имеет максимум (предполагается, что $\mu_h(T_{\max}) \gg \mu_t(T_{\max})$).

Обычно имеют место следующие неравенства:

$$T_1 < T_2 < T_0 < T_3, \quad T_{\min}, \quad \hbar\omega_0/2k < T_{\max}. \quad (\text{II. 7})$$

Общее соотношение между величинами T_3 , T_{\min} и $\hbar\omega_0/2k$ пока еще не найдено.

Весь температурный интервал можно условно разделить на три области:

I. $T < T_0$ — область низких температур,

II. $T_0 < T < \hbar\omega_0/2k$ — область средних температур,

III. $\hbar\omega_0/2k < T$ — область высоких температур.

Общий температурный ход подвижности изображен на рис. 2.

В теории встречаются пять величин размерности энергии: kT , J , E_a , $\hbar\omega_0$, $\hbar\Delta\omega$ (здесь $\Delta\omega$ — ширина дисперсии оптических фононов), из которых чисто умозрительно можно было бы построить большое количество безразмерных комбинаций, особенно если включать в них эти величины в дробных степенях (см., например, η_2). Поэтому задача отыскания основных безразмерных параметров теории отнюдь не тривиальна. Она основана на анализе рядов для вероятностей и требует для своего решения использования графической техники (см. Приложение 2, 3, 4).

*) Температура T_0 не имеет непосредственного физического смысла, и ее не следует отождествлять, как это иногда ошибочно делают (см., например, [12], стр. 13), с T_{\min} или с T_3 .

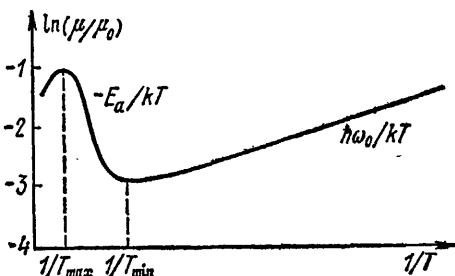


Рис. 2. Температурная зависимость подвижности поляронов малого радиуса.

В области низких температур основными безразмерными параметрами теории являются [32]

$$\eta_1 = \frac{J}{E_a} \ll 1, \quad \gamma = \frac{2E_a}{\hbar\omega_0}, \quad \eta_2'' = \frac{J^2}{2E_a\hbar\omega_0}, \quad \xi = \frac{J^2}{\hbar\Delta\omega E_a}. \quad (\text{II. 8})$$

а в области высоких температур [21, 31, 43, 46, 47]

$$\eta_1 = \frac{J}{E_a} \ll 1, \quad \eta_2 = \frac{J^2}{\hbar\omega_0(E_a kT)^{1/2}}, \quad \eta_3 = \frac{J^2}{E_a kT}, \quad \frac{J}{kT}, \quad \gamma. \quad (\text{II. 9})$$

Все результаты, подлежащие сравнению с опытом, существенным образом зависят от величины этих параметров. Поскольку общие формулы для подвижности поляронов малого радиуса (I. 87) и (I. 96) содержат вероятности различных процессов, разумно предварительно обсудить свойства этих вероятностей в области различных температур и при разных значениях безразмерных параметров, а потом уже приводить результаты для подвижности в разных температурных областях.

§ 2. Вероятности перескоков при высоких температурах

В Приложении 1 работы [46] доказано, что $W(\mathbf{G})$ — вероятность перескока между любыми двумя узлами одного сорта, связанными с помощью вектора решетки \mathbf{G} , — содержит активационную экспоненту:

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{\tilde{E}_a(\mathbf{G}, T)}{kT}\right) &= \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos \mathbf{q}\mathbf{G}) \operatorname{th} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{4kT}\right\}. \end{aligned} \quad (\text{II. 10})$$

В дальнейшем мы ограничимся областью высоких температур ($kT > \hbar\omega_0/4$). Производя разложение в ряд по степеням $\hbar\omega_0/2kT$, получим [46]

$$W(\mathbf{G}) = \frac{\tilde{\omega}}{2\pi} \exp\left[-\frac{E_a(\mathbf{G})}{kT} + \frac{t_0^4}{12}\right] F_{\mathbf{G}}(\eta_1, \eta_2, \eta_3, t_0), \quad (\text{II. 11})$$

где

$$E_a(\mathbf{G}) = \langle E_a(\mathbf{q}, \mathbf{G}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{4} (1 - \cos \mathbf{q}\mathbf{G}), \quad (\text{II. 12})$$

$$\begin{aligned} t_0^4 &= \left\langle \frac{E_a(\mathbf{q}, \mathbf{G})}{kT} \left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2kT}\right)^2 \right\rangle = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{4kT} (1 - \cos \mathbf{q}\mathbf{G}) \left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2kT}\right)^2, \end{aligned} \quad (\text{II. 13})$$

$$\tilde{\omega} = \frac{\langle \omega_{\mathbf{q}}^2 E_a(\mathbf{q}, \mathbf{G}) \rangle^{1/2}}{(E_a(\mathbf{G}))^{1/2}},$$

$$\eta_2(\mathbf{G}) = \frac{J^2}{(kT)^{1/2} \langle E_a(\mathbf{q}, \mathbf{G}) (\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2 \rangle^{1/2}} \approx \frac{J^2}{\hbar\omega_0 (E_a kT)^{1/2}}. \quad (\text{II. 14})$$

Безразмерная функция F_0 представляется в виде бесконечного ряда по степеням J (в соответствии с числом точек в графике), причем в каждом члене ряда можно выделить степени параметров η_1, η_2, η_3 , а коэффициенты при них зависят от t_0^*). Члены, содержащие любые степени множителя $\exp(-S_T)$, отбрасываются.

Наибольшим из трех параметров η_1, η_2, η_3 является η_2 . Мы ограничимся суммированием лишь трех членов ряда, которые в каждом порядке по J содержат наибольшие степени параметра η_2 , т. е. в любом графике с $2n$ точками мы будем пренебрегать вкладами $\eta_2^{n-m-p} \eta_3^m \eta_1^{2p}$ по сравнению с η_2^n . Такая совокупность графиков отвечает «двухузельному» приближению, определенному следующим образом. Если линии, входящей в точку i (нумерация точек производится вдоль контура), приписать индекс m_i , а выходящей — индекс $m_i + g_i$, то комбинация из g_i задается условием (подробнее см. [46, 47])

$$g_0 = -g_1 = g_2 = -g_3 = \dots = -g_{m+n-2}. \quad (\text{II. 15})$$

Фактически это означает (см. § 3), что в μ_n (см. (II. 22)) мы одновременно пренебрегаем вкладом от перескоков на более удаленные узлы и оставляем только сумму по ближайшим соседям.

Условия $\eta_2 > 1, \eta_3 < 1$ не противоречивы. Это видно хотя бы из того, что отношение η_3 к η_2 может быть меньше единицы:

$$\frac{\eta_3}{\eta_2} = a \frac{\hbar \omega_0}{\sqrt{E_a k T}} = a \left(\frac{\hbar \omega_0}{2kT} \right)^{1/2} \gamma^{-1/2} < 1; \quad (\text{II. 16})$$

здесь a — число порядка единицы. На практике отношение (II. 16) может быть не очень малым, но различать параметры η_2 и η_3 все равно нужно, так как величины $W(\mathbf{G})$ зависят от них совершенно по-разному. Кроме того, из дальнейшего будет видно, что η_2 и η_3 имеют различный физический смысл.

Припишем всем членам ряда для вероятности перескока $W(\mathbf{g})$ между ближайшими соседями ($\mathbf{G} = \mathbf{g}$) индекс $2n$ ($n \geq 1$) в соответствии с числом точек на графиках, дающих вклад в $W^{(2n)}(\mathbf{g})$

$$W^{(2n)}(\mathbf{g}) = \frac{\bar{\omega}}{2\pi} \exp\left(-\frac{E_a(\mathbf{g})}{kT}\right) F_{\mathbf{g}}^{(n)}(\eta_2, t_0). \quad (\text{II. 17})$$

В работе [46] показано, что

$$F_{\mathbf{g}}^{(n)}(\eta_2, t_0) = \eta_2^n f_n(t_0), \quad (\text{II. 18})$$

причем при $t_0^2 < 1$ оказалось, что

$$f_1(t_0) = \pi^{1/2}, \quad f_2(t_0) = \frac{\pi^2}{2} \ln\left(\frac{8}{t_0^2}\right), \quad f_3(t_0) \sim t_0^{-2/3}, \quad f_4(t_0) \sim t_0^{-4/3}. \quad (\text{II. 19})$$

* Хотя вся сумма в целом (т. е. функция $F_{\mathbf{G}}$) от t_0 практически не зависит (см. ниже).

Создается впечатление, что величина $F_g(\eta_2, t_0)$, описываемая рядом

$$F_g(\eta_2, t_0) = \sum_{n=1}^{\infty} \eta_2^n f_n(t_0), \quad (\text{II. 20})$$

столь сильно зависит от t_0 , что разложение фактически осуществляется по степеням параметра $\eta_2 t_0^{-1/2}$, а не по η_2 . Однако такой вывод не обоснован. Описанная выше ситуация отражает лишь неконструктивность разложения (II. 20). Каждый член ряда в (II. 20) соответствует некоторой совокупности графиков (см. Приложение 2) и отвечает вполне определенному члену квантовомеханической теории возмущений (по степеням J) для квадрата амплитуды перехода, усредненного по фоновым числам заполнения. Если бы удалось просуммировать ряд квантовомеханической теории возмущений по степеням J еще до статистического усреднения по фоновым числам заполнения и уж затем усреднить замкнутое (т. е. просуммированное по степеням J) выражение, то зависимость от t_0 при малых t_0 могла бы оказаться весьма слабой.

Такую программу удается выполнить лишь в случае высоких температур ($kT > \hbar\omega_0/2$), когда допустимо квазиклассическое рассмотрение колебаний решетки (см. Приложение 7); при этом для $F(\eta_2, t_0)$ получается следующее приближенное выражение:

$$F(\eta_2, t_0) = \int_{x_m}^{\infty} e^{-x} F(x, \eta_2, t_0) dx = \int_{x_m}^{\infty} e^{-x} dx \frac{2 \left[1 - \exp\left(-\frac{\pi}{2} \frac{\eta_2}{\sqrt{x}}\right) \right]}{2 - \exp\left(-\frac{\pi}{2} \frac{\eta_2}{\sqrt{x}}\right)}, \quad (\text{II. 21})$$

где $x_m \approx t_0^{1/2}$, $x = \frac{E - E_a}{kT}$, E — энергия некоторой «эффективной» частицы*). Интегрирование по x функции $F(x, \eta_2, t_0)$ с весом e^{-x} отвечает статистическому усреднению квадрата амплитуды перехода электрона с узла на узел.

При $\eta_2 \ll 1$, разлагая (II. 21) по η_2 , получим ряд вида (II. 20) с учетом (II. 19). При $\eta_2 \geq 1$, в соответствии с физическими рассуждениями, проведенными в Приложении 7 (см. раздел Б), получим

$$F(\eta_2, t_0) \rightarrow 1.$$

*) В Приложении 7 доказано, что статистическое усреднение по энергии эффективной частицы (описывающей колебательную систему) вместо суммирования по фоновым числам заполнения не отвечает чисто классическому подходу, ибо уравнения, описывающие движение этой эффективной частицы вблизи особых точек на квазиклассической траектории, отражают все особенности исходной квантовомеханической задачи.

В заключение обсудим причину появления в теории параметра адиабатичности η_2 (см. также раздел В в Приложении 7).

Перескок полярона из поляризационной ямы происходит только в том случае, если на соседнем узле флуктуационным образом создалась другая поляризационная яма. Она нестабильна, если на этом узле нет электрона, т. е. образование такой ямы энергетически невыгодно, а вероятность возникновения такой флуктуации пропорциональна $\exp(-E_a/kT) \ll 1$. Электрон протуннелирует из одной ямы в другую за время $t_1 \approx \hbar/2J$. Туннельный переход происходит в условиях симметричного резонанса, когда энергетические уровни электрона в обеих ямах одинаковы. Время, в течение которого сохраняются условия, благоприятные для симметричного резонанса (см. Приложение 7), есть

$$\bar{t} = \hbar/(E_a kT)^{1/4} (\hbar\omega_0)^{1/2} < \omega_0^{-1}.$$

Параметр η_2 равен квадрату отношения этих характерных времен:

$$\eta_2 = (\bar{t}/t_1)^2.$$

Время \bar{t} характеризует инерционность фононной системы, а t_1 инерционность электронной системы. В разделе В Приложения 7 показано, что условие $\eta_2 > 1$ совпадает с «условием адиабатичности», используемым в теории неадиабатических переходов. Поэтому параметр η_2 разумно назвать параметром адиабатичности. Параметр η_3 имеет иной физический смысл. Он характеризует скорость обобществления между соседними узлами активированного электрона, покинувшего свою поляронную яму.

При $\eta_3 > 1$ электрон, покинувший яму, может пройти много элементарных ячеек, прежде чем будет снова автолокализован, т. е. оказывается, что задача существенно не двухузельная, и использованные в Приложении 7 математические приемы для ее решения недостаточны. Если параметр $\eta_3 < 1$, то в процессе перехода эффективно участвуют два узла, параметр η_2 при этом может быть произвольным.

§ 3. Подвижность поляронов малого радиуса при высоких температурах

В главе I при $T > T_0$ получено следующее выражение для вклада в подвижность за счет перескоков ПМР с узла на узел:

$$\mu_h = \frac{e}{2kT} \sum_{\mathbf{G}} G_x^2 W_h(\mathbf{G}), \quad (\text{II. 22})$$

где \mathbf{G} — вектор решетки, связывающий любые два узла одного сорта.

При произвольных η_2 (но $\eta_3 \ll 1$) в (II. 22) достаточно учесть лишь вклад от перескоков на ближайшие узлы (подробнее см. ниже), тогда при $kT \geq \hbar\omega_0/2$ и $J/kT \leq 1$ выражение для

подвижности в кубическом кристалле, согласно (II. 22), (II. 11), (II. 17), (II. 21) можно представить в виде

$$\mu_h = u_0 \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar\omega}{kT} e^{-E_a/kT} \int_{x_m}^{\infty} e^{-x} \frac{2 \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{2} \eta_2 \frac{1}{\sqrt{x}}\right) \right\}}{2 - \exp\left(-\frac{\pi}{2} \eta_2 \frac{1}{\sqrt{x}}\right)} dx, \quad (\text{II. 23})$$

где $u_0 = ea^2/\hbar \leq 1 \text{ см}^2/\text{в} \cdot \text{сек}$, $x_m \approx l_0^{1/3}$.

Для двух предельных случаев $\eta_2 \geq 1$ и $\eta_2 \ll 1$ из (II. 23) имеем *)

$$\mu_h = u_0 \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar\omega}{kT} e^{-E_a/kT} \times \begin{cases} 1 & \text{при } \eta_2 > 1, \\ \pi^{1/2} \eta_2 & \text{при } \eta_2 \ll 1. \end{cases} \quad (\text{II. 23a})$$

Для μ_h можно получить выражение (II. 24) (впервые оно было приведено в [21, 31]), пригодное в более широком диапазоне температур, чем (II. 236), но только при $\eta_2 \ll 1$. А именно, при $T > T_0$ имеем

$$\mu_h = u_0 \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar\omega}{kT} \varphi \left(\frac{\hbar\omega}{2kT} \right) e^{-\tilde{E}_a(g, T)/kT} \pi^{3/2} \eta_2. \quad (\text{II. 24})$$

Здесь

$$\varphi \left(\frac{\hbar\omega}{2kT} \right) = E_a^{1/2} \left\langle \frac{\hbar\omega_q}{2kT} E_a(\mathbf{q}, \mathbf{g}) \cos h \left(\frac{\hbar\omega_q}{2kT} \right) \right\rangle^{-1/2} \approx \left(\frac{\text{sh}(\hbar\omega/2kT)}{\hbar\omega/2kT} \right)^{1/2}, \quad (\text{II. 25})$$

$$\frac{\tilde{E}_a(g, T)}{kT} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos \mathbf{q}\mathbf{g}) \text{th} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{4kT} \approx \frac{4E_a}{\hbar\omega} \text{th} \frac{\hbar\omega}{4kT}, \quad (\text{II. 26})$$

ω — некоторая средняя частота ($\omega \approx \omega_0$).

При $kT > \hbar\omega/2$ имеем $\varphi \rightarrow 1$, $\tilde{E}_a(g, T)/kT \rightarrow E_a/kT$, и выражение (II. 24) переходит в (II. 236). Из (II. 24) следует, что рост подвижности с температурой в интервале $T_0 < T \leq \hbar\omega/4k$ более слабый, чем это следует из (II. 236). Если $T_0 > \hbar\omega/4k$ (т. е. если $\ln(4E_a/\hbar\omega_0) < 2$), то $E_a(g, T)/kT$ уже практически равно E_a/kT , но $\varphi(\hbar\omega/2kT)$ все еще больше единицы и сильно зависит от температуры вплоть до $T \approx (\hbar\omega_0/2k)$.

Из (II. 23a) и (II. 236) следует, что перескоковый вклад в подвижность достигает максимума при

$$kT_{\max} = \begin{cases} E_a, & \text{если } \eta_2(T_{\max}) \approx J^2/E_a \hbar\omega_0 > 1, \\ \frac{2}{3} E_a, & \text{если } \eta_2(T_{\max}) < 1. \end{cases} \quad (\text{II. 27})$$

*) Столь сильная зависимость подвижности от η_2 лишний раз подчеркивает важность вопроса об истинных безразмерных параметрах теории. В обзоре [36] отрицается самый факт существования в теории независимого параметра η_2 и утверждается, что справедливость формулы (II. 236) ограничена лишь условиями $\eta_1 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$. Однако из (II. 23) видно, что использование (II. 236) при $\eta_2 > 1$ явно незаконно.

В [47] приведены некоторые соображения, говорящие в пользу замены E_a на $E_a(\mathbf{g}) - J(\mathbf{g})$; если $\eta_2 > 1$, $\eta_3 < 1$, но $J/kT > 1$; при этом в выражении (II. 23б) для подвижности появляется дополнительный множитель $e^{J/kT}$.

До сих пор мы пренебрегали вкладом в (II. 22) за счет перескоков на более удаленные узлы (т. е. при $|\mathbf{G}| > g$).

Заметим, что с ростом \mathbf{G} возрастает и $E_a(\mathbf{G})$. Если $|\gamma_q|^2 \hbar \omega_q$ плавно убывает с ростом q , то это возрастание монотонно. Предельное значение $E_a(\mathbf{G})$ при $|\mathbf{G}| \rightarrow \infty$ больше чем $E_a(\mathbf{g})$:

$$\lim_{\mathbf{G} \rightarrow \infty} E_a(\mathbf{G}) = \frac{1}{2N} \sum_q |\gamma_q|^2 \hbar \omega_q = \frac{E_b}{2} > E_a(\mathbf{g}). \quad (\text{II. 28})$$

Для перескока на узел, удаленный на расстояние $\mathbf{G} = i n_1 g_1 + j n_2 g_2 + k n_3 g_3$, разложение функции $F_{\mathbf{G}}$ начинается с члена $(\eta_3)^{n_1 + n_2 + n_3 - 1}$. Соответственно в любом графике с $2n$ точками, описывающем вклад в вероятность перескока на большое расстояние $|\mathbf{G}| > |\mathbf{g}|$, вместо η_3^2 будет стоять множитель (см. [46])

$$\eta_3^{n-m-p} \eta_1^m \eta_2^p \ll \eta_3^2 \quad (m \geq n_1 + n_2 + n_3 - 1).$$

Итак, при $\eta_3 \ll 1$ вероятность перескока на все более отдаленные узлы убывает за счет убывания $F_{\mathbf{G}}$ и возрастания $E_a(\mathbf{G})$. Если η_3 не очень мало, указанное убывание может быть до известной степени скомпенсировано тем, что в соответствующих парциальных вкладах в подвижность $\mu_h(\mathbf{G})$ с ростом $|\mathbf{G}|$ растет G_x^2 , и возрастает число возможных конечных состояний для перескоков. Поэтому при не слишком малых η_3 ($\eta_3 \lesssim 1$) температурная зависимость перескоковой части подвижности может быть довольно сложной.

Дополнительные осложнения возникают при не слишком малых η_3 из-за необходимости учета туннельного вклада (см. (I. 87)). Лишь при $\eta_3 \ll 1$ существует достаточно широкая температурная область, в которой $\mu_h \gg \mu_t$. Впервые этот факт был отмечен еще в [31]. Все эти сложности связаны со свойствами вероятностей недиагональных переходов $W_{mm_2}^{mm_1}$, которые характеризуют скорость туннельного просачивания.

Из Приложения 3 следует, что все члены ряда для $W_{mm_2}^{mm_1}$ при $T > T_0$ могут быть представлены в виде

$$W_{mm_2}^{mm_1} \approx \frac{J}{\hbar} \eta_3^n \exp(-\alpha_n S_T) \exp\left(-\gamma_n \frac{E_a}{kT}\right). \quad (\text{II. 29})$$

В низшем порядке ($n = 0$) имеем $\alpha_0 = 1$, $\gamma_0 = 0$. С ростом n величины γ_n растут, но не превышают некоторого числа $\tilde{\gamma}$, не очень сильно отличающегося от единицы, а α_n убывают, так что множитель $\exp(-\alpha_n S_T)$ растет. Резкое ослабление или даже исчезновение экспоненциальной малости вида $\exp(-S_T)$ в далеких членах ряда для $W_{mm_2}^{mm_1}$ при малых η_3 компенсируется (согласно

(II. 29)) нарастанием степеней малого параметра η_3 . Но с ростом η_3 наибольшими в ряду будут становиться члены со все большим индексом n . При этом могло бы оказаться, что туннельный вклад будет преобладать даже при высоких температурах (при малых T всегда $\mu_t \gg \mu_h$). При этом подвижность будет по-прежнему мала, но ее температурная зависимость может резко измениться.

Поскольку «время релаксации» $\tau(m_1 - m_2)$ от η_3 практически не зависит (см. [48] и § 4 этой главы), то задача о расширении пределов применимости теории упирается в данном случае лишь в вычисление вероятностей туннельного просачивания при $\eta_3 > 1^*$.

В заключение напомним, что параметр η_3 характеризует скорость обобществления «голового» (без поляронной шубы) электрона между узлами, находящимися в окрестности той поляронной ямы, из которой он выскочил. Действительно, η_3 есть квадрат отношения двух времен: времени перескока $t_0 \approx \hbar(E_a kT)^{-1/2}$ и времени $t_1 \approx \hbar/J$, характеризующего скорость расщепления волнового пакета, описывающего «голый» электрон. В случае $t_0 \ll t_1$, т. е. при $\eta_3 \ll 1$, в процессе эффективно участвуют лишь ближайшие узлы. Если же $t_0 > t_1$, т. е. $\eta_3 > 1$, то электронный волновой пакет успеет распространиться на большое число элементарных ячеек прежде, чем электрон будет снова «автолокализован». Этот механизм можно условно назвать «эстафетным»: электрон «выскакивает» из поляронной ямы, «пробегаёт» много элементарных ячеек, а затем попадает в другую поляризационную яму.

Для высокочастотной электропроводности (см. §§ 1, 2 гл. III) задачу удалось решить при произвольных η_3 .

§ 4. Время релаксации для поляронов малого радиуса

Величины $W_{m_2, m_1}^{m_1, m_1} = \tau^{-1}(m_1 - m_2)$ вычислялись в работах [31, 32, 48, 65]. Разложение для них начинается с членов $\sim J^2$, которые, однако, экспоненциально малы

$$\tau_2^{-1}(g) = \begin{cases} \frac{J^2}{\hbar^2 \Delta\omega} \gamma^2 e^{-2\gamma} \text{sh}^{-2}(\hbar\omega/2kT) & \text{при } T_1 < T < T_0, & \text{(II. 30a)} \\ \omega \pi^{1/2} \eta_2 \varphi(\hbar\omega/2kT) e^{-E_a(T)/kT} & \text{при } T_0 < T. & \text{(II. 30б)} \end{cases}$$

Здесь $\Delta\omega$ — ширина дисперсии оптических фононов, $\gamma \approx 2E_a/\hbar\omega$, величины φ и $E_a(T)$ определены согласно (II. 25) и (II. 26). Вблизи T_0 имеем $E_a/kT \approx 2\gamma$; $\gamma \text{sh}^{-1}(\hbar\omega/2kT) \approx 1$, $\omega \eta_2 \varphi \times (\hbar\omega/2kT) \approx J^2/\hbar^2\omega$. Если пренебречь различием между $\Delta\omega$ и

* В § 13 гл. I подчеркивалось, что формулы (I. 96) и (I. 58), (I. 59) позволяют в принципе исследовать и случай полярона промежуточного радиуса ($r_p \approx a$), т. е. $\eta_1 \approx 1$, $\eta_3 \geq 1$, $\eta_2 \geq 1$.

ω , то обе приближенные формулы (II. 30а), (II. 30б) переходят одна в другую при $T \approx T_0$.

Однако еще в [31] было показано, что, начиная с членов $\sim J^4$, в ряду для $\tau^{-1}(\mathbf{G})$ появляется бесконечная совокупность членов, не содержащих экспоненциальной малости. В четвертом порядке по J , согласно [31, 32, 44], имеем *)

$$\tau_4^{-1}(\mathbf{G}) = W_4(0) - W_4(\mathbf{G}), \quad (\text{II. 31})$$

где $\mathbf{G} = \mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2$, а величины $W_4(\mathbf{G})$ определены соотношением

$$W_4(\mathbf{G}) = \frac{2\pi}{4^4} \sum_{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2} \eta_1^2(\mathbf{g}_1) \eta_2^2(\mathbf{g}_2) \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{E_a(\mathbf{q}; \mathbf{G}, \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2)}{E_a(\mathbf{g}_1)} \times \\ \times \frac{E_a(\mathbf{q}'; \mathbf{G}, \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2)}{E_a(\mathbf{g}_2)} \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\text{sh } \alpha_{\mathbf{q}}} \frac{\omega_{\mathbf{q}'}}{\text{sh } \alpha_{\mathbf{q}'}} \delta(\omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}'}). \quad (\text{II. 32})$$

Здесь

$$E_a(\mathbf{q}; \mathbf{G}, \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2) = \frac{1}{8} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \hbar \omega_{\mathbf{q}} [\cos[\mathbf{q}(\mathbf{G} + \mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1)] + \\ + \cos(\mathbf{q}\mathbf{G}) - \cos[\mathbf{q}(\mathbf{G} - \mathbf{g}_1)] - \cos(\mathbf{q}(\mathbf{G} + \mathbf{g}_2))];$$

$\eta_i(\mathbf{g}_i) = J(\mathbf{g}_i)/E_a(\mathbf{g}_i)$, $\alpha_{\mathbf{q}} = \hbar \omega_{\mathbf{q}}/kT$, сумма по \mathbf{g}_1 и \mathbf{g}_2 распространена на ближайших соседей.

Положим $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 + \Delta \omega f(\mathbf{q})$, где $f(\mathbf{q})$ — безразмерная функция, которая меняется в интервале изменения \mathbf{q} от 0 до 1. Произведя замену $\delta(\omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}'}) \rightarrow \frac{1}{\Delta \omega} \delta(f(\mathbf{q}) - f(\mathbf{q}'))$, перепишем результат (II. 32) для кубического кристалла в виде

$$\tau_4^{-1}(\mathbf{G}) = \frac{\omega_0^2}{\Delta \omega} \eta_1^4 \frac{1}{\text{sh}^2 \alpha_0} \frac{\pi}{2} \left(\frac{3}{4}\right)^2 [\chi(0) - \chi(\mathbf{G})], \quad (\text{II. 33})$$

где безразмерная функция $\chi(\mathbf{G})$ — порядка единицы и определена формулой

$$\chi(\mathbf{G}) = \frac{1}{8^2} \sum_{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2} \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{E_a(\mathbf{q}; \mathbf{G}, \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2)}{E_a(\mathbf{g})} \times \\ \times \frac{E_a(\mathbf{q}'; \mathbf{G}, \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2)}{E_a(\mathbf{g})} \frac{\text{sh } \alpha_0}{\text{sh } \alpha_{\mathbf{q}}} \left(\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_0}\right) \frac{\text{sh } \alpha_0}{\text{sh } \alpha_{\mathbf{q}'}} \left(\frac{\omega_{\mathbf{q}'}}{\omega_0}\right) \delta(f(\mathbf{q}) - f(\mathbf{q}')). \quad (\text{II. 34})$$

Можно доказать, что $\chi(0) - \chi(\mathbf{G}) > 0$, т. е. τ_4 всегда положительно. Поскольку множитель $\left(\frac{3}{4}\right)^2 \frac{\pi}{2} [\chi(0) - \chi(\mathbf{G})]$, фигурирующий в (II. 33), порядка единицы, и при малой дисперсии слабо зависит от T , то в дальнейшем при оценках мы будем его

*) В § 4 работы [49] приведен более простой и наглядный вывод формул (II. 31) и (II. 32). Величинам $W_4(0)$ соответствуют блоки с 4 точками на одной из горизонтальных осей контура C , а величинам $W_4(\mathbf{G})$ отвечают блоки с парой точек на каждой из горизонтальных осей контура C .

опускать. Заметим, что формула (II.32) применима лишь при условии

$$a\eta_1^2 \frac{\omega_0}{\Delta\omega} \leq 1$$

(где a — численный множитель порядка единицы), которое, как мы увидим ниже, является критерием отсутствия локальных колебаний в окрестности того узла, на котором находится полярон. Поэтому в (II.30а), (II.30б) и в (II.32) нельзя проводить предельный переход $\Delta\omega \rightarrow 0$. Множитель $\text{sh}^{-2}\alpha_0$, встречающийся в формулах (II.30а), (II.30б) и (II.32), равен $4N_0(N_0 + 1)$, т. е. эти формулы описывают некоторый двухфононный процесс рассеяния, причем один фонон поглощается, а другой одновременно испускается (это же видно из аргумента δ -функции в (II.32)). Впрочем, для узких поляронных зон только такие процессы и удовлетворяют закону сохранения энергии. Отметим, что Холстейн [21], Фридман [64], Рейк [77], Шнакенберг [78] удерживали для τ^{-1} только первый член разложения по J и поэтому пришли для τ к формуле вида (II.30). Это законно лишь в том случае, если (II.30) больше, чем (II.32), т. е. если

$$\begin{aligned} \gamma^2 e^{-\gamma} &> \eta_1 \text{ при } T < T_0, \\ (\hbar \Delta\omega/kT) (E_a/kT)^{3/2} e^{-E_a/kT} &> \eta_1^2 \text{ при } kT > \hbar\omega_0/2, \end{aligned}$$

что отвечает случаю очень узких исходных зон и не слишком больших констант связи γ . В этом случае при оценке роли экспоненциально малых вкладов ($\sim e^{-\gamma}$ или $e^{-E_a/kT}$) следует проявлять гораздо большую осторожность.

Исследование, проделанное в [32, 48], показало, что в ряду для $\tau^{-1}(\mathbf{G})$ основными параметрами разложения оказываются η_1 , γ^{-1} и $\xi = J^2/E_a \hbar \Delta\omega$. Члены ряда разделяются на две группы: члены первой группы (типа τ_4^{-1}) активационного фактора не содержат, в то время как члены второй группы (типа τ_2^{-1}) экспоненциально малы. Бесконечную совокупность членов первой группы удастся собрать по параметру ξ и представить формулу для $\tau^{-1}(\mathbf{G}) = W(0) - W(\mathbf{G})$ в виде суммы вкладов, отвечающих «эффективным» однофононным, двухфононным и т. п. процессам. Так, например, однофононные процессы, запрещенные при $J \rightarrow 0$, дают в $W(0)$ большой вклад вида

$$\begin{aligned} W(0) = \frac{\pi}{4} \left(\frac{\eta_1}{2}\right)^4 \exp\left(\frac{z}{8} \eta_3\right) \sum_{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{h}} \frac{1}{\hbar} E_a(\mathbf{q}; 0, \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2) \times \\ \times \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{\text{sh } \alpha_{\mathbf{q}}} \delta\left(\omega_{\mathbf{q}} - \frac{z}{4} \frac{J^2}{\hbar E_a}\right). \end{aligned} \quad (\text{II.35})$$

Формула для «эффективного двухфононного» процесса отличается от (II.32) лишь множителем $\exp\left(\frac{z}{8} \eta_3\right)$ да заменой $\delta(\omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}'})$

на сумму двух δ -функций

$$\delta\left(\omega_q - \omega_{q'} - \frac{z}{4} \frac{J^2}{\hbar E_a}\right) + \frac{1}{2} \delta\left(\omega_q + \omega_{q'} - \frac{z}{4} \frac{J^2}{\hbar E_a}\right),$$

которые отвечают двум различным двухфононным процессам. При $J \rightarrow 0$, точнее, при $(z/8)(J^2/\hbar\omega_0 E_a) < 1$, второй процесс запрещен.

Замкнутое выражение для $W(0)$ (в виде трехкратного интеграла), просуммированное по всем процессам, приведено в [48], где показано, что при любых η_3 и $\xi = J^2/\hbar\Delta\omega E_a > 1$ величина $\tau^{-1}(\mathbf{G})$ по-прежнему пропорциональна η_1^4 , но имеет дополнительную экспоненциальную малость порядка $e^{-a\xi}$, где $a \geq 1$. Для того чтобы эта величина (совокупность членов типа τ_4^{-1}) была больше всех отброшенных членов (совокупность типа τ_2^{-1}), которые при $kT < \hbar\omega_0/2$ пропорциональны $\exp(-2E_a/\hbar\omega)$, необходимо выполнение критерия $a\xi < 2E_a/\hbar\omega$, что эквивалентно условию отсутствия локальных колебаний в фононном спектре, обусловленных взаимодействием фононов с локализованным электроном (ср. с (II.56)).

Очевидно, что при достаточно низких температурах на опыте будет преобладать рассеяние на примесях, которое может обусловить гораздо более слабую зависимость τ от температуры, чем зависимость $e^{\hbar\omega_0/kT}$, полученная при эффективно двухфононном неупругом рассеянии полярона на оптических фононах. Для решения этой задачи необходимо правильно выделить эффективный оператор рассеяния полярона (с учетом «обдирания его шубы») на примесном центре, после чего могут быть использованы методы, описанные в гл. I и Приложении 2. Нам неизвестно ни одной работы в этом направлении.

В заключение подчеркнем, что в области $T_1 < T < T_2$ все результаты могут быть получены с помощью кинетического уравнения Больцмана, которое в случае узких зон сильно упрощается [32]. Оператор, описывающий двухфононное рассеяние поляронных волн в \mathbf{k} -пространстве, получается из $\sum_{\mathbf{m}} a_{\mathbf{m}}^+ a_{\mathbf{m}} \tilde{H}(\mathbf{m})$ (см. § 4 в [49]) путем перехода к фурье-представлению для электронных операторов

$$a_{\mathbf{m}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\mathbf{m}}) a_{\mathbf{k}}.$$

Для вывода кинетического уравнения теперь можно использовать стандартную технику Константинова — Переля. Однако в случае $-\hbar/\tau\Delta\epsilon_0 > 1$, т. е. при $T > T_2$, эта техника, вообще говоря, неприменима. Поэтому при $T > T_2$ следует воспользоваться расчетной техникой в узельном представлении, описанной в гл. I и в Приложении 2.

Из §§ 5 и 6 гл. I следует, что при $T > T_2$ физический процесс, приводящий к выражению (II.32), не имеет ничего общего

с двухфононным рассеянием плоских поляронных волн. В этом случае τ^{-1} характеризует некоторое трение, обусловленное замедленной реакцией фононной подсистемы на процесс туннелирования полярона, сопровождающийся перестройкой центров тяжести колебаний решетки.

§ 5. Вероятности недиагональных переходов при низких температурах

При $T < T_0$ можно показать [32, 44], что сумма всех членов ряда для любого недиагонального блока $W_{mm_1}^{mm_1}$ представляется в виде

$$W_{m_1, m_1+g}^{m_1, m_2} = i \frac{J}{\hbar} \exp[-S_T(\mathbf{G}, m_1 - m_2)] \times \\ \times f(\eta_1, \gamma, \eta_2''; \mathbf{G}, m_1 - m_2), \quad (\text{II. 36})$$

где f — безразмерная функция от параметров $\gamma = 2E_a/\hbar\omega$, η_1 , $\eta_2'' = J^2/2E_a\hbar\omega$. При $m_1 = m_2$, $\mathbf{G} = \mathbf{g}$, $S_T(\mathbf{G}, m_1 - m_2) \rightarrow S_T \approx \gamma$.

В наинишем порядке по J

$$W_{m_1, m_2+g}^{(1) m_1, m_2} \rightarrow W_{g0}^{(1) gg} = -W_{00}^{(1) g0} = -i \frac{J(\mathbf{g})}{\hbar} \exp(-S_T(\mathbf{g})). \quad (\text{II. 37})$$

Из анализа последующих членов разложения по J видно, что основные безразмерные параметры — это

$$\eta_2'' = \frac{J^2}{2E_a\hbar\omega}, \quad \eta_2' = \eta_2'' \ln \gamma. \quad (\text{II. 38})$$

Если дисперсия фононов не очень мала ($\Delta\omega/\omega > \eta_1^2$), то условие

$$\eta_2' = \eta_2'' \ln \gamma < 1 \quad (\text{II. 39})$$

и есть самое жесткое условие, при котором в ряду для $W_{m_1, m_1+g}^{m_1, m_2}$ можно ограничиться членами наинишего порядка по J , т. е. выражением (II. 37). Из качественных соображений Холстейн [21] вместо (II. 39) получает

$$\eta_2'' (\ln \gamma)^2 < 1, \quad (\text{II. 39a})$$

что практически совпадает с (II. 39). При этом физический смысл условий (II. 39) и (II. 39a) тоже одинаков: условие (II. 39) означает, что следующими поправками по J «вершинам» можно пренебречь, т. е. можно вычислять «скорость полярона» $v_x(\mathbf{k})$ в нулевом приближении

$$v_x(\mathbf{k}) \approx v_x^{(0)}(\mathbf{k}) = \partial \varepsilon_p^{(0)}(\mathbf{k}) / \partial k_x,$$

а условие (II. 39a) означает, что поправками к энергии полярона $\varepsilon_p^{(0)}(\mathbf{k})$, вычисленной в нулевом приближении, можно пренебречь.

В рамках двухузельной модели Холстейн [21] нашел, что расщепление уровней в симметричных ямах (рис. 3) равно

$$\Delta E = \begin{cases} J \exp(-S_T), & \text{если } \eta_2'' < 1, \\ J \exp(-S_T) [\pi \eta_2'']^{-1/2} \exp\left[\frac{1}{2} \eta_2'' + \eta_2'\right], & \text{если } \eta_2'' > 1. \end{cases} \quad (\text{II. 40})$$

Итак, в двухузельной модели вместо полярной зоны получаются два уровня, разнесенные на величину порядка ширины полярной зоны. Ширина полярной зоны характеризует скорость расплывания волнового пакета, посаженного на узел. Вероятность недиагонального перехода, описывающая туннельный переход из состояния (m, m) в состояние (m_1, m_2) ($m_1 \neq m_2$), тоже характеризует свойства расплывания волнового пакета, но только полярного (см. ниже). Поэтому формулы (II. 40) показывают, что для $f(\mathbf{G})$ в (I. 36) можно ожидать очень сильную зависимость от параметров η_2' и η_2'' . Однако из анализа рядов для $f(\mathbf{G})$ следует, что в ряду для $W_{mm_2}^{mm_1}$ существен-

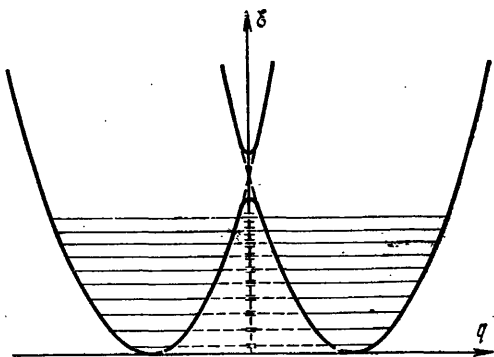


Рис. 3. Адиабатические электронно-колебательные термы (двухузельная модель). Тонкими линиями изображены невозмущенные уровни в ямах. По шкале энергии черточками отложены величины расщепления каждого из невозмущенных уровней.

на не только «двухузельная совокупность», но и «трехузельная», «четырёхузельная» и т. д. Это означает, что анализ Холстейна, выполненный в рамках двухузельной задачи, не позволяет получить надежные сведения относительно вида $W_{mm_2}^{mm_1}$ при $\eta_2' > 1$. Фактически требуется решить связанную систему уравнений более высокого порядка, чем в работе Холстейна [21] или в Приложении 7. Однако метод ВКБ для таких систем еще недостаточно разработан, и поэтому задача отыскания величин $W_{mm_2}^{mm_1}$, описывающих подбарьерное туннельное просачивание полярона (см. § 5 гл. I) при произвольных η_2' и η_2'' , гораздо сложнее, чем задача об отыскании $W(g)$ при произвольных η_2 , решенная в Приложении 7. До сих пор она никем не решена.

Каков же физический смысл величин $W_{mm_2}^{mm_1}$ и $W_{m_2 m_1}^{m_1 m_2}$? Из уравнений (I. 58), (I. 59) (см. также формулу (II. 2.29)) видно, что они описывают переход диагональных компонент условной вероятности $P_{m' m}^{m' m}(t) \equiv P(m' - m, t)$ в недиагональные $P_{mm_2}^{mm_1}(t)$ и наоборот. Из выражения для недиагональной по узлам части

гамильтониана ($\sim \sum_{m, g} a_{m+g}^+ a_m J(g)$) следует, что в случае слабой связи с фононами аналогичную роль играет величина

$$iJ/\hbar = i \Delta E / 2z\hbar,$$

которая и характеризует скорость расплывания электронного волнового пакета. В § 5 гл. I показано, что в этом случае $P(m - m', t)$ описывается формулой (I.51). В случае сильной связи с фононами вместо iJ/\hbar фигурируют величины $W_{mm_2}^{mm_1}$ и $W_{m_2m}^{m_1m}$, которые характеризуют и скорость расплывания волнового пакета полярона, и одновременное смещение его центра тяжести. Очевидно, что в случае очень низких температур, когда рассеяние полярона можно считать слабым, поляронный пакет будет расплываться без трения, и выражение для $W_{mm_2}^{mm_1}$ должно перейти в $i\Delta E_p / 2z\hbar$ (по аналогии со случаем слабой связи). Если выполняется (II.39), то ΔE_p можно брать в наинизшем по J приближении, но тогда

$$i \frac{\Delta E_p}{2z\hbar} = i \frac{J}{\hbar} \exp(-S_T),$$

что совпадает с (II.37). Очевидно, что в процессе туннелирования полярона должна происходить перестройка колебаний решетки относительно новых центров тяжести. Если такая перестройка происходит с некоторым запаздыванием, то возникает трение, за счет которого «поляронная шуба может рваться», т. е. в процессе туннелирования могут испускаться или поглощаться фононы, что отражено в свойствах величин $W_{mm_2}^{mm_1}$. В том случае, когда полярон туннелирует как целое, трение описывается путем введения времени релаксации.

§ 6. Подвижность поляронов малого радиуса при низких температурах

Из (I.87) следует, что туннельный вклад в подвижность есть

$$\mu_t = \frac{e}{kT} \frac{1}{2} \sum_m X_m^2 \sum_{m_1 \neq m_2} W_{mm_2}^{mm_1} W_{m_2 0}^{m_1 0} \tau (m_1 - m_2). \quad (\text{II. 41})$$

Вопрос о физическом смысле «времени релаксации» τ и вероятностей недиагональных переходов $W_{m_2 m}^{m_1 m}$, входящих в (II.41), обсуждался в §§ 4 и 5 этой главы и в § 6 гл. I. Здесь мы лишь напомним, что конечный вклад (II.41) в подвижность обусловлен наличием некоторого трения, которое полярон испытывает в процессе подбарьерного туннельного просачивания.

Если имеет место неравенство (II.39), то можно воспользоваться формулой (II.37) и соотношениями

$$\begin{aligned} gW_{g0}^{gg} &= \langle 0 | v_p^{(0)} | g \rangle, \\ v_p^{(0)}(\mathbf{k}) &= \sum_g e^{i\mathbf{k}g} \langle 0 | v_p^{(0)} | g \rangle = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_p^{(0)}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (\text{II.42})$$

где $\langle 0 | v_p^{(0)} | g \rangle$ и $v_p^{(0)}(\mathbf{k})$ — скорость полярона в узельном и импульсном представлениях, и получить из (II.41) формулу вида

$$\mu_t = \frac{e}{kT} \sum_g |\langle 0 | v_x^{(0)} | g \rangle|^2 \tau(g), \quad (\text{II.43})$$

которая в случае кубического кристалла переходит в

$$\mu_t = u_0 2 \frac{J \exp(-S_T)}{kT} \frac{J \exp(-S_T)}{\hbar} \tau = u_0 \frac{\Delta E_p^{(0)}}{z kT} \frac{\Delta E_p^{(0)}}{2z\hbar} \tau. \quad (\text{II.43a})$$

Если

$$\xi = \frac{J^2}{\hbar E_a \Delta\omega} > 1, \quad \eta_1^2 = \frac{\omega_0}{\Delta\omega} < 1, \quad \eta_2'' = \frac{J^2}{2\hbar\omega_0 E_a} \ln \gamma < 1,$$

а эти неравенства непротиворечивы при

$$\eta_1^2 < \frac{\Delta\omega}{\omega_0} < \frac{1}{\ln \gamma},$$

то для $W_{mm_2}^{mm_1}$ можно по-прежнему воспользоваться (II.37), однако τ^{-1} уже не будет выражаться формулой (II.32) и должно вычисляться с учетом «мультифононных процессов» (см. § 4 гл. II и [48]). Если же $\xi > 1$ и $\eta_2'' \geq 1$, то надо пользоваться более общим выражением (II.41). Вид τ в этом случае известен (см. [48]), но выражения для $W_{m,m}^{m,m}$ пока не найдены.

В случае слабой связи всегда применимо кинетическое уравнение Больцмана. Если можно ввести время релаксации, то из кинетического уравнения для статистики Больцмана получим

$$\mu_B = \frac{e}{kT} \langle v_x^2(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \rangle = \frac{e}{kT} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f_0(\mathbf{k}) v_x^2(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}). \quad (\text{II.44})$$

Если $\tau = \text{const}$, а зоны узкие (см. (II.1)), имеем $\langle v_x^2(\mathbf{k}) \rangle = \langle (| \langle 0 | v_x | g \rangle |^2)_{\text{cp}}$ и из (II.44) для поляронов получим (II.43a).

Однако уравнение Больцмана справедливо лишь при $\frac{J}{\hbar} \tau \exp(-S_T) < 1$ (т. е. при $T < T_2$), а выражение (II.43a)

справедливо и при $\frac{\tau}{\hbar} J \exp(-S_T) > 1$ (т. е. и при $T > T_2$), когда физический процесс не имеет ничего общего с рассеянием (двухфононным) поляронных волн в \mathbf{k} -пространстве. Итак, пределы применимости уравнений (II.43a), (II.43), (II.42) гораздо шире, чем пределы применимости уравнения Больцмана. Поэтому предпочтительнее называть этот вклад в подвижность

туннельным, что, кстати, больше соответствует и физике процесса переноса. Дополнительную аргументацию можно найти в §§ 5, 7 гл. I (см. также рассуждения в § 8 гл. I, следующие за формулой (I.87)) и в § 4 настоящей главы.

Оценим теперь отношение туннельного вклада к перескоковому при $T < T_0$. При $T < T_0$ вклад в подвижность μ_h по-прежнему выражается формулой (II.22), а выражение $W(g)$ при малых J совпадает с (II.30б), поэтому имеем

$$\frac{\mu_t}{\mu_h} \approx \eta_1^{-4} \left(\frac{\Delta\omega}{\omega_0} \right)^2 \left[\frac{\text{sh } \alpha}{2\gamma} \right]^2 \text{sh}^2 \alpha, \quad (\text{II.45})$$

где $\alpha = \hbar\omega/2kT \approx \hbar\omega_0/2kT$. При $T \approx T_0$ отношение $2\gamma/\text{sh } \alpha \approx 1$, а отношение μ_t/μ_h порядка $\gamma^2 (\Delta\omega/\omega) \eta_1^{-4} \gg 1$. При $T < T_0$ это неравенство лишь усиливается.

Итак, при $T \leq T_0$ и достаточно малых J , т. е. при $\eta_2'' < 1$ и $\xi \approx J^2/\hbar\Delta\omega E_a < 1$, туннельный вклад в подвижность является основным.

Впрочем, если при $T \leq T_0$ основную роль играет рассеяние поляронов на примесях, то отношение μ_t/μ_h может уменьшиться.

При $T < T_1$ подвижность поляронов должна описываться обычным выражением вида (II.44), но, вообще говоря, τ следовало бы вычислять с учетом рассеяния поляронов на акустических фононах и на примесях.

Оценим T_1 и T_2 для кубических кристаллов при условиях $\eta_2'' < 1$, $\xi < 1$. Подставляя $\Delta E_p = 12J \exp(-S_T)$ в (II.1) и в (II.3) и используя для τ выражение (II.33), получим

$$kT_1 = 2Je^{-\gamma}, \quad (\text{II.46})$$

$$kT_2 \approx \frac{\hbar\omega_2}{\gamma + \ln(\gamma (\Delta\omega/\omega_0) \eta_1^{-3} \delta_1)} < kT_0, \quad (\text{II.47})$$

где δ_1 — численный множитель ($\delta_1 \geq 1$). Поскольку $\Delta\omega/\omega_0 > \eta_1^2$ (условие отсутствия локальных колебаний), то множитель под знаком логарифма, во всяком случае, больше чем $\gamma\eta_1^{-1} \gg 1$, и поэтому при всех разумных значениях γ и η_1 имеем $T_2 < T_0$.

§ 7. Подвижность поляронов малого радиуса в области промежуточных температур

При $T_0 < T < \hbar\omega_0/2k$ оба вклада в подвижность μ_h и μ_t могут быть сравнимыми по величине. Эта область температур исследована очень плохо. Однако при достаточно малых J , когда малы все безразмерные параметры теории, для $W_{m,m}^{m,m}$ можно использовать формулу (II.37)*, для μ_h — формулу (II.24), а

*) Подробнее о свойствах величин $W_{m,m}^{m,m}$ при промежуточных и высоких температурах см. в Приложении 3.

для τ^{-1} — (II. 30) или (II. 33). Тогда в сумме по m в (II. 22) и в (II. 41) можно ограничиться ближайшими соседями и представить μ в виде

$$\mu = \mu_0 \frac{\hbar}{kT} \left[2 \left(\frac{J \exp(-S_T)}{\hbar} \right)^2 \tau + W_h \right]. \quad (\text{II. 48})$$

В случае $\eta_1 < \bar{\eta}_1 \equiv \gamma^2 e^{-\gamma}$ имеем $\tau^{-1} = \tau_2^{-1} = W_h^{(2)}$ (именно этот случай и рассмотрен у Холстейна [21]). Поэтому температуры T_2 и T_3 в этом случае совпадают и, например, при $\bar{\eta}_1 \gamma^{5/2} < \eta_1 < \bar{\eta}_1$ приближенно равны

$$\frac{\hbar \omega_0}{2k} \geq T_2 = T_3 \approx \frac{\hbar \omega_0}{2k \operatorname{arcsch} \left\{ 2 \left[1 - \frac{1}{2\gamma} \ln \left(\frac{\eta_1 \gamma^{5/2}}{\bar{\eta}_1} \right) \right]^{-1} \right\}} > T_0. \quad (\text{II. 49})$$

В обратном случае, когда $1 \gg \eta_1 > \gamma^2 e^{-\gamma}$ (по $\xi \ll 1$), τ^{-1} определяется формулой (II. 33). С точностью до численных множителей порядка единицы перепишем (II. 48) в виде

$$\mu \approx \mu_0 \left(\frac{J}{\hbar \omega} \right)^2 \alpha \exp(-2\gamma \operatorname{cth} \alpha) \left[\eta_1^{-4} \frac{\Delta \omega}{\omega} \operatorname{sh}^2 \alpha + \gamma^{-1/2} \operatorname{sh}^{1/2} \alpha \exp \left(\frac{2\gamma}{\operatorname{sh} \alpha} \right) \right], \quad (\text{II. 50})$$

где $\alpha = \hbar \omega / 2kT$, ω — некоторая «средняя частота» *).

Приравнивая оба члена в квадратной скобке, приближенно получим

$$kT_3 \approx \frac{\hbar \omega_0}{2 \ln \left\{ 2\gamma \cdot 2 \left\{ \ln \left[\gamma^2 \eta_1^{-4} \frac{\Delta \omega}{\omega_0} \delta_2 \right] \right\}^{-1} \right\}}, \quad (\text{II. 51})$$

где $\delta_2 \geq 1$. В силу условия $\Delta \omega / \omega > \eta_1^2$ аргумент логарифма меньше чем $2\gamma / \ln(\gamma \eta_1^{-1})$, а поскольку $\gamma = 2E_a / \hbar \omega_0 > 2$ и $1 \gg \eta_1 > \gamma^2 e^{-\gamma}$, то этот аргумент явно меньше 2γ . Поэтому $T_3 > T_0$. Заметим, что при достаточно больших γ температура T_3 может быть близка к $\hbar \omega_0 / 2k$. Если учесть, что $(\Delta \omega / \omega_0) \eta_1^{-2} > 1$ и $\eta_1 > \gamma^2 e^{-\gamma}$, то легко показать, что $T_3 > T_2$ при любых разумных значениях γ ($\gamma > 2$), и существует довольно широкий интервал температур, в котором перескоки еще не играют основной роли, но механизм переноса уже не является зонным (нарушено условие $\Delta E_p / z < \hbar \tau^{-1}$).

*) Запись упрощенных формул для μ_i и μ_h с помощью некоторой средней частоты ни в коем случае не означает пренебрежения дисперсией оптических фононов. На самом деле оба вклада сильно зависят от $\Delta \omega$. В выражении (II. 33) для τ основная зависимость от $\Delta \omega$ выделена явно, но множители, слабо зависящие от $(\Delta \omega / \omega)$ при $\Delta \omega / \omega_0 \ll 1$, записаны через среднюю частоту. Формула (II. 11) для W_h тоже применима лишь в приближении достаточно больших $\Delta \omega$ (метод перевала), хотя $\Delta \omega / \omega_0$ при этом может быть мало (соответствующий критерий подробно обсуждается в [21, 31]). Однако, после того как вычисления по методу перевала уже проделаны, все величины, усредненные по q , можно приближенно записать через среднюю частоту ω .

Чтобы найти T_{\min} , в соответствии с (II.6) необходимо приравнять нулю первую производную от (II.50). Мы ограничимся лишь оценкой знака $d\mu/dT$ при $T=T_3$. Если $d\mu/dT|_{T=T_3} > 0$, то $T_{\min} < T_3$, и наоборот. Опуская все положительные множители, имеем

$$\frac{d\mu}{dT} \Big|_{T=T_3} \sim \left[\frac{2\gamma\alpha_3}{\text{sh}^2 \alpha_3} (\text{ch} \alpha_3 - 2) - 2 - \frac{5}{2} \alpha_3 \text{cth} \alpha_3 \right], \quad (\text{II.52})$$

где $\alpha_3 = \hbar\omega_0/2kT_3$. Используя (II.51), можно выразить все величины в (II.52) через γ и $z = \eta_1^{-4} (\Delta\omega/\omega) \gamma^2 > \gamma^2 \eta_1^{-2}$ и убедиться в том, что в зависимости от значений γ и z могут реализоваться оба случая: и $T_3 > T_{\min}$ и $T_3 < T_{\min}$.

При $T_{\min} > T_3$ туннельный вклад убывает быстрее, чем нарастает μ_h , а в точке $T = T_{\min}$ имеем $\mu_t < \mu_h$. При $T_{\min} < T_3$ рост μ_h сильнее, чем убывание μ_t , несмотря на то, что $\mu_h < \mu_t$.

Итак даже в самом простом случае, когда все безразмерные параметры теории малы, при разных значениях γ и η_1 могут быть разные варианты соотношений между T_2 , T_3 , T_{\min} и $\hbar\omega_0/2k$.

Когда η_3 не очень мало (но все же $\eta_3 < 1$), а T_3 и T_{\min} близки к $\hbar\omega_0/2k$, в ряду для $W_{m,m}^{\text{min}}$ нельзя ограничиться низшими членами по J (см. §§ 3, 5 настоящей главы), и выражение для μ_t в этой области температур может сильно изменяться, в связи с чем изменятся и выражения для T_3 и T_{\min} .

Естественно, что при больших значениях параметров ξ , η_2'' , η_3 ситуация будет еще более сложной. Дополнительные осложнения возникают, если полярон столь сильно влияет на уравнения движения окружающих его ионов, что это приводит к выпадению локальных уровней из колебательного спектра.

§ 8. Локальные колебания, обусловленные локализацией электрона на узле

Влияние носителей тока на спектр фононов может проявляться в самых различных физических ситуациях. Хорошо известно [81—83], что при больших концентрациях n свободных носителей тока может проявляться динамическая экранировка, и при $\omega_p > \omega_0$, где $\omega_p = (4\pi n e^2 / m^* \epsilon_\infty)^{1/2}$ — плазменная частота, может иметь место радикальная перестройка колебательного спектра [82]. Если же n мало и $\omega_p < \omega_0$, то обратным взаимодействием электронов на фононный спектр обычно пренебрегают. Однако в случае поляронов малого радиуса это обратное влияние весьма сильно и может приводить к наблюдаемым эффектам еще до того, как динамическая экранировка начнет играть роль. Дело в том, что при образовании поляронной ямы (если электрон долго сидит в ней) меняются не только положения равновесия колеблющихся атомов, но и силы связи между последними, что и приводит к возникновению локальных колебаний.

Возможность появления таких локальных колебаний обсуждалась в [84, 49], где было указано несколько источников для их возникновения*). Один из таких источников — кубический ангармонизм. Он не специфичен именно для поляронов малого радиуса и может проявляться в других физических ситуациях. Например, он может привести к выпадению локальных колебаний в задаче об F-центре. Другой источник возникновения локальных колебаний специфичен именно для поляронов малого радиуса и был условно назван в [49] динамическим. Ниже описаны результаты, получающиеся для обоих случаев.

А. Динамический источник. В [49] для определения спектра локальных колебаний в соответствии с числом узлов, участвующих в этих колебаниях (узел, на котором сидит полярон + шесть ближайших соседей), получена система из семи зацепляющихся уравнений

$$y_n = \frac{1}{32} \eta_1^2 \sum_{\mathbf{g}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq_x}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq_y}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq_z}{2\pi} \frac{E_a(\mathbf{q}, \mathbf{g})}{E_a} \times \\ \times \frac{\omega_q^2}{\omega_q^2 - \omega^2} (y_n - y_{n+\mathbf{g}}), \quad (\text{II. 53})$$

где $E_a(\mathbf{q}, \mathbf{g}) = |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \hbar \omega_{\mathbf{q}} (1 - \cos \mathbf{q}\mathbf{g})$ (напомним, что $\langle E_a(\mathbf{q}, \mathbf{g}) \rangle = E_a(\mathbf{g})$), а функция y_n определена так:

$$y_n = (2/N)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{3/2} |\gamma_{\mathbf{q}}| y_{\mathbf{q}} \sin(\mathbf{q}\mathbf{n} + \pi/4). \quad (\text{II. 54})$$

В (II. 53) и (II. 54) введены безразмерные \mathbf{q} , \mathbf{n} и \mathbf{g} .

В приближении короткодействия $\omega_{\mathbf{q}}^3 |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 = \text{const}$ (см. гл. I), и задача решается до конца. Предполагая, что

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = \omega_0^2 + (\delta\omega)^2 \cos \mathbf{q} \quad \text{и} \quad (\delta\omega)^2 / (\omega_0^2 - \omega^2) \ll 1,$$

получим [49] три локальные частоты:

$$\frac{\omega_1^2}{\omega_0^2} = 1 - \frac{1}{8} \eta_1^2, \quad \frac{\omega_2^2}{\omega_0^2} = 1 - \frac{3}{8} \eta_1^2, \quad \frac{\omega_3^2}{\omega_0^2} = 1 - \frac{7}{8} \eta_1^2. \quad (\text{II. 55})$$

В [49] доказано, что критерий существования локальных колебаний имеет вид

$$(\delta\omega/\omega_0)^2 \beta_1 < \eta_1^2, \quad (\text{II. 56a})$$

где $\beta_1 \sim 1$. При вычислении τ^{-1} закон дисперсии фононов принимался в виде $\omega(\mathbf{q}) = \omega_0 + \Delta\omega f(\mathbf{q})$, где $0 < f(\mathbf{q}) < 1$. В случае

*) В теории экситонов также рассматривался вопрос о возникновении локальных колебаний за счет экситон-фононного взаимодействия, см., например, [85], где можно найти ссылки на все предшествующие работы по этому вопросу.

$\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$ имеет место соответствие $(\delta\omega)^2/2\omega_0 \approx \Delta\omega$. Поэтому условие (II. 56a) эквивалентно условию

$$\Delta\omega/\omega_0 < \eta_1^2. \quad (\text{II. 56})$$

Неравенство, обратное (II. 56), отвечает случаю отсутствия локальных колебаний.

Заметим, что учет дальнего действия, т. е. использование для $|\gamma_q|^2$ формулы вида (I. 19a), не приводит к радикальному изменению результатов для локальных колебаний этого типа и влияет только на численные множители в (II. 55).

Б. Решеточный ангармонизм как источник возникновения локальных колебаний. Ангармонический вклад, например, в случае парных и центральных сил имеет вид (в обозначениях М. Борна [86])

$$U_{\text{анг}} = \frac{1}{6!} \sum_{l_1, l_2} \sum_{k_1, k_2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \Theta_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} \begin{pmatrix} l_1 & -l_2 \\ k_1 & k_2 \end{pmatrix} \times \\ \times \left[u_{\alpha} \begin{pmatrix} l_1 \\ k_1 \end{pmatrix} - u_{\alpha} \begin{pmatrix} l_2 \\ k_2 \end{pmatrix} \right] \left[u_{\beta} \begin{pmatrix} l_1 \\ k_1 \end{pmatrix} - u_{\beta} \begin{pmatrix} l_2 \\ k_2 \end{pmatrix} \right] \left[u_{\gamma} \begin{pmatrix} l_1 \\ k_1 \end{pmatrix} - u_{\gamma} \begin{pmatrix} l_2 \\ k_2 \end{pmatrix} \right]. \quad (\text{II. 57})$$

Здесь l_1, l_2 — номера элементарных ячеек; k_1, k_2 — номера ионов в ячейке, $u \begin{pmatrix} l_1 \\ k_1 \end{pmatrix}$ — смещение k -го иона в l -й ячейке, каждый из индексов α, β, γ принимает значения x, y, z .

Локализация электрона на узле l_0, k_0 приводит в (II. 57) к замене

$$u_{\alpha} \begin{pmatrix} l_1 \\ k_1 \end{pmatrix} \rightarrow u_{\alpha} \begin{pmatrix} l_1 \\ k_1 \end{pmatrix} - u_{\alpha}^0 \begin{pmatrix} l_1 \\ k_1 \end{pmatrix},$$

что дает дополнительный вклад в \mathcal{H}_0 за счет членов, квадратичных по смещениям, причем стоящие перед ними коэффициенты вида

$$\sum_{\gamma} \Theta_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} \begin{pmatrix} l_1 & -l_2 \\ k_1 & k_2 \end{pmatrix} u_{\gamma}^{(0)} \begin{pmatrix} l_2 \\ k_2 \end{pmatrix}$$

вовне могут сравниться по величине с гармоническими константами $\Theta_{\alpha\beta}^{(2)} \begin{pmatrix} l_1 & -l_2 \\ k_1 & k_2 \end{pmatrix}$ и обусловить выпадение локальных частот.

Иглс [84] ограничился учетом в (II. 61) только ближайших соседей. Однако в случае ионных кристаллов все силы — дальнедействующие, поэтому в (II. 61) будут существенны большие $l_1 - l_2$, а в уравнении движения будут связаны не только ближайшие соседи (как в (II. 57)), но и очень сильно удаленные узлы. Поэтому резко возрастает порядок системы уравнений и

стандартная процедура выделения локальных колебаний [87, 88] становится неконструктивной. В связи с этим в работах Брыксина и Фирсова [89, 90] был совершен переход в континуальное приближение, а задача о спектре локальных колебаний была сформулирована в духе метода эффективной массы, применяемого в теории полупроводников для вычисления мелких уровней примесного центра, потенциал которого медленно (на протяжении многих элементарных ячеек) изменяется в пространстве.

Однако порядок полученных в [89, 90] дифференциальных уравнений (собственные значения которых и определяет спектр локальных уровней) оказывается более высоким, чем в методе эффективной массы, поскольку уравнения движения ионов в решетке зацепляются с дополнительным уравнением, которое определяет дальнедействующее электрическое поле, возникающее в ионной решетке при колебаниях ионов. Полученные в [89, 90] уравнения решены в квазиклассическом приближении; при этом показано, что на каждый лишний электрон может выпадать много локальных уровней, т. е. значительное количество ионов, окружающих полярон, колеблются с другими частотами.

Представляется несомненным, что локальные колебания, обусловленные локализацией лишнего заряда на узле, должны отчетливо проявлять себя в целом ряде физических ситуаций (см., например, [84]), однако последовательная теория кинетических явлений для этого случая пока не создана.

ГЛАВА III

ВЫСОКОЧАСТОТНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ

§ 1. Вводные замечания

Чтобы вычислить безразмерный коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$ или коэффициент $K(\omega)$, имеющий размерность обратной длины, достаточно найти комплексную проводимость $\sigma(\omega)$. Соответствующую добавку к диэлектрической проницаемости найдем по формуле

$$\Delta \varepsilon = 4\pi i \sigma(\omega) / \omega. \quad (\text{III. 1})$$

Полную диэлектрическую проницаемость среды представим в виде

$$\varepsilon(\omega) = \bar{\varepsilon}(\omega) + \Delta \varepsilon(\omega); \quad (\text{III. 2})$$

$\Delta \varepsilon$ отвечает основному механизму поглощения в рассматриваемом диапазоне частот, а $\bar{\varepsilon}(\omega)$ включает все прочие механизмы. В то время как $\Delta \varepsilon$ испытывает резкие изменения, $\bar{\varepsilon}(\omega)$ меняется плавно. Разбивая $\varepsilon(\omega)$ на вещественную ε' и мнимую ε'' части, получим

$$\varepsilon'(\omega) = \bar{\varepsilon}'(\omega) + \Delta \varepsilon'(\omega), \quad \varepsilon''(\omega) = \bar{\varepsilon}''(\omega) + \Delta \varepsilon''(\omega), \quad (\text{III. 3})$$

причем $\bar{\varepsilon}'' \approx 0$. В случае слабого поглощения, когда $\varepsilon''/\varepsilon' \ll 1$, имеем

$$K(\omega) = \frac{\omega}{c} \alpha(\omega), \quad \alpha(\omega) \approx \Delta \varepsilon'' / 2 \sqrt{\varepsilon'}. \quad (\text{III. 4})$$

Если $\Delta \varepsilon' / \bar{\varepsilon}' \ll 1$, то показатель преломления $n = \sqrt{\varepsilon'}$ равен

$$n = \bar{n} + \Delta n, \quad \bar{n} = \sqrt{\bar{\varepsilon}'}, \quad \Delta n = \Delta \varepsilon' / 2\bar{n}. \quad (\text{III. 5})$$

Итак, зная $\sigma(\omega)$, можно найти величины $K(\omega)$ и $\Delta n(\omega)$, которые могут быть непосредственно измерены на опыте.

Формулу Кубо для $\sigma_{xx}(\omega)$ удобно переписать в виде [42]

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(\omega) = & -\frac{1}{V\hbar\omega} \int_0^{\infty} e^{-i\omega t - st} \{ \langle j_x(t) j_x(0) \rangle - \langle j_x(0) j_x(t) \rangle \} dt + \\ & + \frac{i}{V\omega} \int_0^{\beta} \langle j_x(-i\hbar\lambda) j_x(0) \rangle d\lambda. \quad (\text{III. 6}) \end{aligned}$$

Вклад в $\text{Re } \sigma'_{xx} = \sigma'(\omega)$ будет давать лишь I член в (III. 6).

§ 2. «Внутризонное» поглощение

Под «внутризонным» поглощением мы будем понимать неактивационный переход полярона с узла на узел под действием света. В § 18 в I части книги приведены вычисления $\sigma'(\omega)$ в пределе малых J , а точнее ([50, 51]), малых $\eta_3 = J^2/E_a kT^*$. Формулу (18.10) для $\sigma'(\omega)$ удобно переписать в виде

$$\sigma'(\omega) = ne\mu_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{J^2}{\sqrt{E_a kT}} \frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}{\hbar\omega} \exp\left[-\frac{(\hbar\omega - 4E_a)^2}{16E_a kT}\right]. \quad (\text{III. 7})$$

Ниже мы покажем, что в пределе малых η_3 задача полностью аналогична [50] задаче о фотопереходах в F-центре [91, 92]. Поэтому мы не будем здесь дублировать соответствующие выкладки. Отметим лишь, что формула (III. 7) неточна. Используя подход, развитый в [92] для вычисления формы спектров поглощения света в F-центре, можно получить для σ' более точную формулу с учетом слабой частотной асимметрии [52] (ср. с (18.10)):

$$\sigma'(\omega) = \sigma(0) f(\omega), \quad (\text{III. 8})$$

где

$$f(\omega) = \frac{\text{sh} \frac{\hbar\omega\beta}{2}}{\frac{\hbar\omega\beta}{2}} \left[1 + \left(\frac{\omega}{\omega_0\Gamma}\right)^2\right]^{-1/4} \exp\left\{-\frac{\omega}{\omega_0} \text{Arcsh} \frac{\omega}{\omega_0\Gamma} + \right. \\ \left. + \Gamma \left[\left(1 + \left(\frac{\omega}{\omega_0\Gamma}\right)^2\right)^{1/2} - 1\right]\right\}.$$

Здесь $\Gamma = 8E_a kT/(\hbar\omega_0)^2 \gg 1$. Разлагая в ряд по $\omega/\omega_0\Gamma \ll 1$, получим (18.10) и соответственно (III. 7).

Заметим кстати, что асимметрия кривой поглощения, следующая из (III. 8), довольно слаба. Дополнительная асимметрия может быть связана с возможностью перескоков на более отдаленные узлы [52], но это означает учет поправок по η_3 (см. § 2 гл. II). Как и в случае перескоков на ближайшие узлы, вероятность перескока $W(|\mathbf{R}|, \omega)$ на удаленный узел ($|\mathbf{R}| > a$) в высокочастотном поле будет иметь максимум при $\hbar\omega = 4E_a(\mathbf{R})$.

В § 2 гл. II отмечалось, что предельное значение $E_a(\mathbf{R})$ при $|\mathbf{R}| \gg a$ равно $E_b/2$, что превышает $E_a(g)$. Поэтому суммарная кривая $\sigma(\omega)$ будет представлять собой набор гауссовых кривых, убывающих по амплитуде (при $\eta_3 \ll 1$) с максимумами в интервале энергии от $E_a(g)$ до $E_b/2$.

При $\eta_3 \geq 1$ форма кривой поглощения изменится еще сильнее [51] (см. ниже). Чтобы лучше понять все предельные

*) Соответственно и результаты Игlsa [37, 38], Рейка [39] и Клингера [40] справедливы лишь при $\eta_3 \ll 1$ и при $T > T_0$. Случай $T < T_0$ обсуждался: а) при малой дисперсии $\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$ в [192, 213] (см. литературу к I части), б) при $\Delta\omega/\omega_0 \approx 1$ в [50].

переходы, проследим аналогию с задачей о поглощении света в F-центре. Подставляя $j_x = -ie \sum_{m, g} \frac{J(g)}{\hbar} g_x a_{m+g}^+ a_m$ в (III.6), в низшем порядке по электронной плотности и во втором порядке по J получим

$$\sigma' = ne u_0 \frac{J^2}{2\hbar^2 \omega} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} dt \times \\ \times \left\{ \left\langle \exp \left[i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}(m+g) \right] \exp \left[-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}(m) \right] \right\rangle_{m+g} - \right. \\ \left. - \left\langle \exp \left[i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}(m) \right] \exp \left[-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}(m+g) \right] \right\rangle_m \right\}. \quad (\text{III.9})$$

Здесь $\mathcal{H}(m) = \sum_q \hbar \omega_q \left(b_q^+ b_q + \frac{1}{2} + u_{qm} b_q^+ + u_{qm}^* b_q \right)$, а $\langle \dots \rangle_m$

означает, что статистическое усреднение по фоновым производится с гамильтонианом $\mathcal{H}(m)$. Первый член в фигурных скобках в (III.9) описывает переход с адиабатического электронного термина $m+g$ на терм m , причем в начальный момент электрон находился в состоянии $m+g$. Второй член в фигурных скобках в (III.9) описывает индуцированное испускание, и его интенсивность по отношению к процессу поглощения меньше за счет статистического фактора $e^{-\hbar\beta\omega}$.

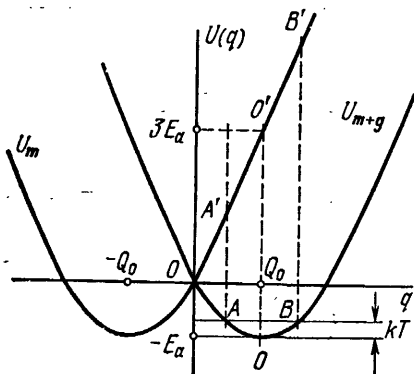


Рис. 4. Конфигурационные кривые для двух-узельной модели.

Поскольку в квадратичном по J приближении в процессе участвуют лишь два узла, всю задачу можно решать в рамках двухузельной модели, разобранный в Приложении 7. На рис. 4 изображены соответствующие конфигурационные кривые, которые представляются следующими выражениями:

$$U_m = \frac{M\omega_0^2}{4} (q + Q_0)^2 - E_a, \quad U_{m+g} = \frac{M\omega_0^2}{4} (q - Q_0)^2 - E_a, \quad (\text{III.10})$$

где $Q_0 = \frac{A}{M\omega_0^2}$, $E_a = \frac{A^2}{4M\omega_0^2}$.

Согласно принципу Франка — Кондона радиационный переход происходит без изменения ядерной конфигурации, т. е. на рис. 4 ему отвечает переход по вертикали. Энергия исходного состояния соответствует минимуму параболы, а длина отрезка

$00'$ как раз равна $4E_a$. Поэтому максимум на кривой $\sigma(\omega)$, согласно (III. 6), находится вблизи $4E_a/\hbar$.

Помимо частоты $4E_a/\hbar$, в спектре поглощения будут представлены все частоты, соответствующие вертикальным переходам из всех возможных начальных конфигураций, энергия которых превышает энергию конфигурации O на величину $\leq kT$. На рис. 4 область таких переходов условно ограничена вертикалями AA' и BB' . Частоты, соответствующие переходам, лежащим левее AA' и правее BB' , в силу малой вероятности начальной конфигурации будут представлены тем слабее, чем дальше они отстоят влево от AA' и вправо от BB' . Поэтому спектр поглощения будет в основном группироваться возле частоты $4E_a/\hbar$, а ширина его определяется разностью энергий переходов BB' и AA' . Из рис. 4 нетрудно убедиться, что указанная разность энергий равна $8\sqrt{E_a kT}$. Поэтому ширина кривой поглощения, согласно (III. 6), пропорциональна $\sqrt{E_a kT}$. Отметим, что в случае низких температур $kT \ll \hbar\omega_0$ начальные конфигурации системы будут определяться энергией нулевых колебаний $\hbar\omega_0/2$ (вместо kT), и аналогичные соображения дают для ширины полосы поглощения $8\sqrt{E_a \hbar\omega_0/2}$.

Изложим качественные соображения относительно формы кривой поглощения при произвольных η_3 . Рассматривая гамильтониан общего вида (см. [51]), можно убедиться, что в полярной яме, локализованной на данном узле, имеется низший адиабатический уровень, подобный уровню O на рис. 4, и над ним, на высоте $4E_a \leq 2E_b$, находится непрерывный спектр уровней в энергетическом интервале $\sim 2zJ$ (здесь z — число ближайших соседей)*. При этом вертикальный переход с уровня O может происходить в любую точку континуума, что приводит к уширению каждого вертикального перехода, лежащего в интервале AB (см. рис. 4), на величину порядка J («вертикальное» уширение). Уширение линии, связанное с разбросом начальных состояний («горизонтальное» уширение); как указывалось, порядка $4\sqrt{E_a kT}$ (при $kT < \hbar\omega_0/2$ оно порядка $4\sqrt{E_a \hbar\omega_0/2}$).

Горизонтальное уширение имеет статистическую природу, отражая разброс начальных состояний, а вертикальное уширение связано с природой энергетического спектра. Поэтому в случае преобладания вертикального механизма, т. е. при $\eta_3 \gg 1$, ширина кривой поглощения не должна зависеть от температуры

*) Квазичастица, принадлежащая возбужденному непрерывному спектру, не адекватна «голому» электрону в затравочной зоне, порог возбуждения которого есть $E_b \geq 2E_a$. В рассматриваемом случае энергия возбуждения есть $4E_a$, что обусловлено дополнительным присутствием «пустой» поляризационной ямы. Поскольку оптический переход происходит с соблюдением принципа Франка — Кондона, яма не успевает ликвидироваться, и за время ее жизни квазичастица, обладающая непрерывным спектром, успевает пройти много узлов решетки, если $\eta_3 > 1$.

(за исключением хвостов). Условие $\eta_1 < 1$, независимо от величины параметра η_3 , обеспечивает резкий спад длинноволнового хвоста, т. е. интенсивное поглощение начинается на значительном расстоянии от $\omega = 0$, так как это условие гарантирует зазор $4E_a$ между основным состоянием и континуумом. В случае полярона большого радиуса ($\eta_1 > 1$) кривая внутризонного поглощения выглядит иначе (см. § 18, часть I).

Интерполяционная формула для $\sigma'(\omega)$, пригодная при произвольных η_3 , была получена в [5]. Она имеет весьма наглядный вид:

$$\sigma'(\omega) = ne^2 \frac{1 - e^{-\hbar\beta\omega}}{\hbar\omega} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} v_x^2(\mathbf{p}) \times \\ \times \operatorname{Re} \int_0^\infty \exp \left\{ -\frac{t^2}{t_0^2} - i \frac{t}{\hbar} \varepsilon(\mathbf{p}) + i \left(\omega - \frac{4E_a}{\hbar} \right) t \right\} dt. \quad (\text{III. 11})$$

Здесь $t_0^2 = 4E_a kT / \hbar^2$, $\varepsilon(\mathbf{p})$ — энергия в затравочной (неперенормированной) зоне, $v_x(\mathbf{p}) \sim \partial\varepsilon/\partial p_x$ — скорость в затравочной зоне. Интегрирование по безразмерному волновому вектору \mathbf{p} производится в пределах первой зоны Бриллюэна. Например, для кубического кристалла $-\pi < p_i < \pi$ ($i = x, y, z$). Больцмановский фактор $\exp(-\varepsilon(\mathbf{p})/kT)$ отсутствует в (III. 11) по вполне понятным причинам: возбуждение в зону производится за счет внешнего источника, а не за счет энергии теплового резервуара.

В (III. 11) содержатся факторы, описывающие оба механизма уширения: горизонтальное (фактор $\exp(-t^2/t_0^2)$) и «вертикальное» (фактор $\exp(-i(t/\hbar)\varepsilon(\mathbf{p}))$). Они действуют независимо, что обусловлено пренебрежением дисперсией фононов. При выводе (III. 11) не учитывалась анизотропия фононного спектра, поэтому вся анизотропия частотной зависимости в (III. 11) обусловлена лишь анизотропией электронного спектра в исходной зоне.

Поскольку $\varepsilon(\mathbf{p}) \sim J$, то при $\frac{t_0}{\hbar} J \approx \eta_3^{1/2} \ll 1$ второй фактор в (III. 11) можно опустить, и мы приходим к (III. 7). В случае $\eta_3 \gg 1$ получаем слегка размазанную δ -функцию с аргументом $\hbar\omega - 4E_a - \varepsilon(\mathbf{p})$, что отвечает закону сохранения энергии. В отличие от внутризонного поглощения свободными носителями с энергией $\varepsilon(\mathbf{p})$, правил отбора по импульсам в рассматриваемом случае не существует.

Фактор $\exp(-i(t/\hbar)\varepsilon(\mathbf{p}))$ в (III. 11) описывает процесс расплывания волнового пакета, отвечающего электрону, возбужденному в зону. При $\eta_3 \gg 1$ этот процесс захватывает область, включающую большое число элементарных ячеек. Поэтому электрон, выбитый из ямы посредством туннельного эффекта, проходит большое расстояние прежде, чем окажется снова автолокализованным. Такой механизм можно условно назвать эста-

фетным, но активация в токоносящее состояние здесь происходит не с примесных уровней, а из поляронной ямы. В [51] предполагалось, что процесс туннелирования происходит при практически неизменных ядерных смещениях, что справедливо лишь в том случае, если электрон захватится в новую яму прежде, чем начнет сказываться рассеяние. В [51] приведены некоторые аргументы, свидетельствующие в пользу справедливости такого приближения.

Если провести в (III.11) интегрирование по t , она приобретает вид

$$\sigma'(\omega) = ne^2 \frac{1 - e^{-\beta \hbar \omega}}{\hbar \omega} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} v_x^2(\mathbf{p}) \left(\frac{\pi \hbar^2}{16kT E_a} \right)^{1/2} \exp \left[- \frac{(\hbar \omega - 4E_a - \varepsilon(\mathbf{p}))^2}{16kT E_a} \right], \quad (\text{III.12})$$

т. е., в отличие от (III.7), формула (III.12) содержит непрерывный набор гауссовых кривых со сдвинутым аргументом, которые интегрируются с весом v_x^2 . При $\eta_3 \gg 1$ нормированное гауссово распределение эквивалентно слегка размытой δ -функции от $[\hbar \omega - 4E_a - \varepsilon(\mathbf{p})]$, т. е. форма кривой поглощения в центральной части определяется структурой исходной зоны и практически не зависит от температуры; с температурой «дышат» лишь далекие крылья кривой поглощений. При $\eta_3 \ll 1$, согласно (III.7), вся полуширина меняется пропорционально $T^{1/2}$ (при $kT > \hbar \omega_0/2$).

В заключение заметим, что в области малых частот $\omega < \omega_0$ можно условно считать, что перескоковый вклад слабо зависит от частоты, а для туннельного вклада имеет место формула типа Друде — Лоренца:

$$\sigma_t(\omega) \approx \sigma_t(0) / [1 + \omega^2 \tau^2(\omega)]. \quad (\text{III.13})$$

При $\omega_0 < \omega \ll 4E_a/\hbar$ частотная зависимость суммарной σ довольно сложна. Это вызвано не только тем, что τ начинает при $\omega > \omega_0$ сильно зависеть от ω , но и тем, что в этом интервале частот вообще невозможно представить $\sigma(\omega)$ в виде суммы вкладов $\sigma_h(\omega)$ и $\sigma_t(\omega)$, определенных согласно (III.7) (или (III.12)) и (III.13).

Итак, экспериментальное исследование формы кривых поглощения может быть положено в основу метода, позволяющего различать на опыте два различных механизма движения полярона малого радиуса: перескокового (при $\eta_3 < 1$) и эстафетного (при $\eta_3 > 1$).

§ 3. Междузонные оптические переходы

Этому вопросу посвящены работы [37, 38, 42, 43, 51]. Игльс [37, 38] исследовал оптические переходы между двумя разными поляронными зонами (в приближении $\eta_3 \ll 1$) и переход из широкой валентной зоны в узкую поляронную. Е. К. Кудинов и

Ю. А. Фирсов рассматривали переходы с глубокого атомного уровня (узкой электронной зоны), на котором связь электронов с фононами слаба, в узкую поляронную зону при $\eta_3 \ll 1$ (см. [42]) или на два расщепленных уровня сложного дефекта, занимающего две элементарные ячейки (двухузельная задача в [43]). Ю. А. Фирсов [51] исследовал переход с глубокого уровня в поляронную зону при $\eta_3 > 1$ и переход из узкой валентной поляронной зоны в широкую зону проводимости, в которой связь электронов с фононами является слабой.

А. Переход из глубокого атомного уровня в узкую поляронную зону ($\eta_3 < 1$). Когда такой прямой переход разрешен, а связь с фононами на нижнем уровне слаба, из (III. 6) следует, что [42]

$$\sigma(\omega) = \Delta\sigma(\omega) + \frac{ie^2 n_0}{2m} f_{01} \frac{2\Omega + \omega}{\Omega(\Omega + \omega)}, \quad (\text{III. 14})$$

где $f_{01} = 2m|j_{01}|^2/e^2\hbar\Omega$ — безразмерная сила осциллятора, m — масса свободного электрона, $\hbar\Omega_0$ — расстояние между глубоким уровнем 0 и центром неперенормированной верхней зоны 1, $\hbar\Omega = \hbar\Omega_0 - E_b$ — расстояние между глубоким уровнем и центром поляронной зоны, образовавшейся из зоны 1; n_0 — концентрация электронов на нижнем уровне 0.

Второй член в (III. 14) плавно зависит от частоты, а все особенности содержатся в первом члене:

$$\Delta\sigma(\omega) = \frac{e^2 n_0}{2m} f_{01} \frac{\Omega_0}{\omega} \int_0^{\infty} \exp \left\{ -S_T^{(0)} + F_0^* \left(t + i \frac{\hbar\beta}{2} \right) \right\} e^{-i(\omega - \Omega)t} e^{-t/\tau} dt, \quad (\text{III. 15})$$

где

$$S_T^{(0)} = \frac{1}{2N} \sum_q |Y_q|^2 \text{cth } \alpha_q, \\ F_0^* \left(t + \frac{i\hbar\beta}{2} \right) = \frac{1}{2N} \sum_q \frac{|Y_q|^2}{\text{sh } \alpha_q} \cos \left[\omega_q \left(t - \frac{i\hbar\beta}{2} \right) \right], \quad (\text{III. 16})$$

τ^{-1} есть некоторое характерное затухание. По сравнению с $S_T(g)$ и $F(t + i\hbar\beta/2)$ в S_0 и $F_0(t + i\hbar\beta/2)$ отсутствует $\cos qg$.

При $t \rightarrow \infty$ ввиду наличия дисперсии фононов функция $F_0(t)$ стремится к 0, и убывание происходит не медленнее, чем $O(t^{-3/2})$. Поэтому $\exp(F) \rightarrow 1$ при $t\omega_0 \gg 1$, и, если $\tau^{-1} = 0$, выражение $K(\omega)$ имеет при $\omega = \Omega$ сингулярность вида $1/(\omega - \Omega)$. Такая сингулярность характерна для переходов между уровнями в адиабатическом приближении и отвечает бесфононному пику [42]. Появление ее можно интерпретировать следующим образом. Согласно принципу Франка — Кондона при переходе с глубокого уровня в узкую зону, в которой электрон сильно взаимо-

действует с фононами, частота перехода определяется расстоянием $\sim \hbar\Omega_0$ между уровнями без учета поляронного эффекта, ибо за время перехода фононы не успевают изменить свои положения. Однако при сильном электрон-фононном взаимодействии такой переход будет сильно размыт, так как фононная система не успевает перестроиться, и образовавшееся в результате поглощения кванта света состояние является нестационарным. Тем не менее имеется конечная вероятность того, что к моменту перехода фононная система флуктуационным образом сместится в новое положение равновесия (соответствующее нахождению электрона на верхнем уровне), т. е. образуется поляронная яма, соответствующая верхнему уровню. Но в адиабатическом приближении поляронное состояние является стационарным, и линия будет иметь бесконечную высоту. Такой переход и отвечает бесфононному пику на частоте $\Omega = \Omega_0 - E_b/\hbar$, что ниже исходного зазора $\hbar\Omega_0$ на величину поляронного сдвига, как и следовало ожидать. Интегральная интенсивность этого пика порядка $\exp(-S_T^{(0)})$, т. е. она уменьшается с ростом силы связи, так как большая сила связи соответствует большим равновесным смещениям.

Приведенные выше рассуждения позволяют говорить об аналогии между бесфононным пиком (чисто электронным переходом) и линией Мёссбауэра в ядерных переходах. Величина $\exp(-S_T^{(0)})$ аналогична фактору Дебая — Уоллера и определяет интенсивность пика.

Кроме описанного выше бесфононного пика, в случае взаимодействия с поляризационными фононами имеются еще две сингулярности на частотах $\Omega \pm \omega_0$, возникающие вследствие сингулярности $|\gamma_q|^2 \sim 1/q^2$. Если разложить $\exp F_0(t)$ в ряд по $F_0(t)$, то эти сингулярности проявятся в линейном по F_0 члене, а следующие члены разложения уже не будут содержать сингулярностей (учет дисперсии оптических фононов их «замыкает»). Кстати, если в существенной области изменения q закон дисперсии фононов линеен по q (это бывает в случае вырождения), то исчезают пики и при $\omega = \Omega \pm \omega_0$.

В соответствии с вышесказанным разобьем интеграл по t , фигурирующий в (III. 15), на две части J_1 и J_2 :

$$J_1 = \exp(-S_T^{(0)}) \int_0^{\infty} e^{-t(\omega-\Omega)t} \left[1 + F_0^*(t + \frac{i\hbar\beta}{2}) \right] \exp(-t/\tau) dt,$$

$$J_2 = \exp(-S_T^{(0)}) \int_0^{\infty} e^{-t(\omega-\Omega)t} \left\{ \exp \left[F_0^*(t + i\frac{\hbar\beta}{2}) \right] - 1 - F_0^*(t + i\frac{\hbar\beta}{2}) \right\} dt.$$

Интеграл J_2 сингулярностей не содержит, а поэтому фактор $\exp(-t/\tau)$ в нем можно опустить. Используя для $F_0(t + i\hbar\beta/2)$

выражение (III. 16), получим для $\Delta\sigma_1 \sim J_1$

$$\Delta\sigma_1 \sim \frac{\exp(-S_T^{(0)})}{\tau^{-1} + i(\omega - \Omega)} + \exp(-S_T^{(0)}) \frac{1}{N} \sum_q |\gamma_q|^2 \left\{ \frac{N_q + 1}{\tau^{-1} + i(\omega - \Omega - \omega_q)} + \frac{N_q}{\tau^{-1} + i(\omega - \Omega + \omega_q)} \right\}. \quad (\text{III. 17})$$

Вклад $\Delta\sigma_2 \sim J_2$ приведет к появлению колоколообразной кривой справа от бесфононного пика. В случае $\eta_3 = J^2/E_a kT \ll 1$ ее форма такая же, как и у F-центра, т. е. это гауссова линия с полушириной $\sim \sqrt{E_a kT}$ при $kT > \hbar\omega_0/2$ или с полушириной порядка $\sqrt{E_a \hbar\omega_0}$ при $kT < \hbar\omega_0/2$. Случай $\eta_3 > 1$ будет обсужден ниже.

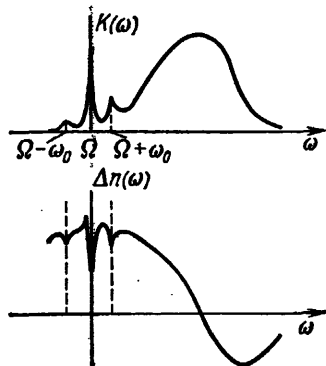


Рис. 5. Кривые для поглощения и коэффициента преломления (изображены без соблюдения масштаба). Структурная часть в области $(\Omega - \omega_0, \Omega + \omega_0)$ должна быть экспоненциально малой (как $\exp(-S_T)$) по сравнению с областью колокола (см. (III. 18), (III. 19)).

Примерный ход зависимостей $\text{Re } \Delta\sigma(\omega)$ и $\text{Im } \Delta\sigma(\omega)$ изображен на рис. 5.

Из [42] следует, что отношение высоты бесфононного пика к фону коэффициента поглощения $\alpha(\Omega)$ на хвосте колокола ($\omega \approx \Omega$) по порядку величины есть

$$\frac{\alpha_{\text{max}}(\Omega_0)}{\alpha(\Omega)} \omega_0 \tau (S_T^{(0)})^{1/2} \exp(-S_T^{(0)}), \quad (\text{III. 18})$$

где $\alpha_{\text{max}}(\Omega_0)$ — коэффициент поглощения в максимуме колокола. При $\omega = \Omega \pm \omega_0$ всплески в $\alpha(\omega)$ и в показателе преломления $n(\omega)$ по модулю равны.

Отношение высоты всплеска при $\omega = \Omega + \omega_0$ к фону $\alpha(\Omega + \omega_0)$ имеет вид

$$\frac{\alpha_{\text{max}}(\Omega_0)}{\alpha(\Omega + \omega_0)} \left(\frac{\omega_0}{\Delta\omega} \right)^{1/2} (S_T^{(0)})^{1/2} \exp(-S_T^{(0)}). \quad (\text{III. 19})$$

При низких T всплеск при $\omega = \Omega - \omega_0$ содержит дополнительный малый фактор $\exp(-\hbar\beta\omega)$.

С первого взгляда могло бы показаться, что при $T > T_0$ конечная ширина бесфононной линии обусловлена возможностью перескоков с узла на узел, т. е. равна вероятности перескока $W(g)$, и активационно зависит от температуры (при $T > T_0$). Однако вычисления, выполненные в [42], показывают, что уширение пика определяется иной величиной, а именно:

$$\tau^{-1} \approx \eta_1^4 (\omega_0^2 / \Delta\omega) \text{sh}^{-2}(\hbar\omega_0 / 2kT)$$

(см. (II. 31), (II. 32)), которая, вообще говоря, больше $W(g)$ и не обнаруживает активационной зависимости. Напомним, что

величина $W_h(\mathbf{g})$ характеризует нестационарность системы относительно перескоков электрона с узла на узел. Величина $W(0)$ характеризует нестационарность фононной подсистемы, возникающую сразу же после того, как электрон попал на свободный поляронный уровень $-E_b$, принадлежащий пустой поляронной яме, которая возникла на том самом узле, где произошел чисто электронный переход. Напомним, что флуктуационная вероятность образования пустой поляронной ямы пропорциональна $\exp(-S_T)$.

Оба механизма, о которых речь шла выше, возникают лишь вследствие «остаточного» электрон-фононного взаимодействия, которое пропорционально J . Другой причиной уширения может являться ангармоническое взаимодействие оптических фононов с акустическими, приводящее к конечному времени жизни оптического фонона. Такой механизм может привести к дополнительному уширению пиков при $\omega = \Omega \pm \omega_0$. Действительно, в данном случае в переходе участвует один фонон, который может распасться на два акустических, что дает конечное время жизни даже при $T = 0$, в то время как рассмотренный нами механизм дает резкое убывание полуширины τ^{-1} при низких температурах (по крайней мере как $\exp(-\hbar\omega_0/kT)$). Поэтому при низких температурах ангармонизм может доминировать. Что же касается бесфононного пика при $\omega = \Omega$, то наличие ангармонизма не скажется на его ширине, поскольку он обусловлен переходами между состояниями, не содержащими реальных фононов (чисто электронный переход). Размытие бесфононного пика при $T > T_2$ появляется лишь вследствие «остаточного» взаимодействия*), а в пределе низких температур $T < T_2$ также и вследствие туннельного эффекта. При $T < T_2$ ширина пика порядка $\Delta E_p \approx \approx 2Jz \exp(-S_T)$, а высота пика пропорциональна $(\Delta E_p)^{-1}$. Форма пика — не лоренцева.

Учет неадиабатических членов в гамильтониане также может привести к уширению бесфононного пика вследствие, например, безызлучательных переходов (возникающих от членов вида $b^+ a_0^+ a_1$ и т. д.), однако их вклад будет пропорционален фактору $[(\omega_0/\Omega) \gamma]^{Q_0/\omega_0}$ (где $\gamma = E_b/\hbar\omega_0$), малому в рассматриваемом случае, когда $E_b/\hbar\omega_0 \ll 1$.

Заметим, что рассмотренная выше задача математически весьма похожа на задачу об оптическом переходе между двумя поляронными зонами [37, 38], поскольку нижнюю поляронную зону можно рассматривать как уровень. Основное различие состоит в том, что в окончательных результатах вместо $|\gamma_q^{(1)}|^2$ надо

*) Это дает независимый способ определения τ из оптических экспериментов. Речь, конечно, идет о порядковой оценке, поскольку транспортное время τ состоит из двух членов $W(0)$ и $W(\mathbf{G})$ (см. (II.31)). Однако из (II.33), (II.34) следует, что их температурная зависимость одинакова, а их численные значения сравнимы по величине (если только \mathbf{G} не слишком велико).

писать $|\gamma_q^{(1)} - \gamma_q^{(0)}|^2$. Все описанные выше качественные закономерности должны сохраниться, однако вопрос о виде τ в этом случае требует особого рассмотрения.

Следует также иметь в виду, что в случае сильной экситон-фононной связи для экситонных переходов должны наблюдаться кривые, весьма напоминающие те, которые изображены на рис. 5.

Исследуя экситонный спектр в MnO , Я. М. Ксендзов [42а] обнаружил на кривых поглощения бесфононные пики и основные колоколообразные полосы. Из полученных данных он мог оценить эффективную константу экситон-фононного взаимодействия, которая оказалась больше двух.

Б. Переход с атомного уровня в поляронную зону при $\eta_3 \geq 1$. Случай $\eta_3 \geq 1$ удалось рассмотреть точно (с учетом дисперсии оптических фононов) только в рамках двухузельной модели. Такая задача отвечает оптическому переходу в сложном F-центре, распространенном на две элементарные ячейки. В этом случае поглощение описывается двугорбой кривой, причем расстояние между горбами составляет $2J$, их ширина определяется величиной $\sqrt{E_a(g)kT}$, отношение коэффициентов поглощения в максимуме и в минимуме $\exp(\eta_3) \gg 1$. Особенности вблизи нижнего края кривой поглощения таким методом (точное вычисление корреляторов при $\omega_0 t \ll 1$) исследованы быть не могли, поскольку в [43] не удалось определить поведение корреляторов на больших временах ($\omega_0 t \gg 1$).

Естественно, что при учете большого числа узлов вмятина между горбами будет «замыта», поскольку в задаче будут актуальны не два уровня, а энергетический континуум в интервале $\Delta E \approx 2zJ$ порядка ширины неперенормированной зоны. Действительно, переход в поляронную зону из глубокого уровня, в том случае, если находящийся на нем электрон взаимодействует с фононами слабо, происходит, в соответствии с принципом Франка — Кондона, в полосу ΔE , центр которой расположен над поляронным уровнем (зоной) на расстоянии E_b .

В этом случае в области основного колокола для $\Delta\sigma(\omega)$ в [51] получено следующее приближенное выражение (все $E_a(G)$ полагаются одинаковыми, что отвечает короткодействию):

$$\begin{aligned} \text{Re } \Delta\sigma(\omega) = & \frac{e^2 n_0}{2m} f_{01} \frac{\Omega}{\omega} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \times \\ & \times \text{Re} \int_0^\infty e^{-\frac{kTE_b}{\hbar^2} t^2} e^{i t \frac{\epsilon(p)}{\hbar}} e^{-i(\omega - \Omega_0) t} dt. \quad (\text{III. 20}) \end{aligned}$$

Из сравнения (III. 20) и (III. 15) очевидно, что появление фактора $\exp\left(-\frac{t}{\tau} \frac{\epsilon(p)}{\hbar}\right)$, так же как и в случае «внутризонного» поглощения, приведет при $\eta_3 > 1$ к появлению дополнительного

уширения. Интегрируя в (III. 20) по t , получим

$$\operatorname{Re} \Delta \sigma(\omega) = \frac{e^2 n_0}{2m} f_{01} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left(\frac{\pi \hbar^2}{4kT E_b} \right)^{1/2} \exp \left[- \frac{(\hbar\omega - \hbar\Omega_0 - \varepsilon(p))^2}{4kT E_b} \right]. \quad (\text{III. 21})$$

Из (III. 21) видно, что при $\eta_3 > 1$ ширина кривой поглощения в основном определяется шириной неперенормированной зоны $\Delta\varepsilon$ и только крылья этой кривой (ширина их $\sim \sqrt{E_b kT}$) «дышат» с температурой.

В [51] приведены некоторые соображения, говорящие в пользу существования бесфононного пика и при $\eta_3 > 1$, хотя его форма в этом случае возможно будет иной, чем при $\eta_3 < 1$.

В. Переход из валентной узкой поляронной зоны в широкую зону проводимости. Предположим, что электрон-фононное взаимодействие в широкой зоне проводимости слабое, поляронный эффект имеет место лишь для дырок, причем будем считать, что $\eta_3 = J_0^2 / E_a kT \ll 1$, где J_0 — резонансный интеграл, определяющий ширину неперенормированной валентной зоны. Если прямой переход разрешен, то для $\operatorname{Re} \Delta \sigma(\omega)$ в этом случае получается выражение, весьма похожее на (III. 21):

$$\operatorname{Re} \Delta \sigma(\omega) = \frac{e^2 n_0}{2m} f_{01} \frac{\hbar\Omega_0 + 2E_b - \Delta E/2}{\hbar\omega} \times \\ \times \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left(\frac{\pi \hbar^2}{4E_b kT} \right)^{1/2} \exp \left[- \frac{(\hbar\omega - \hbar\Omega_0 - 2E_b - \varepsilon(p))^2}{4E_b kT} \right]. \quad (\text{III. 22})$$

Здесь n_0 — число состояний в валентной зоне, $\varepsilon(p)$ — энергия свободных электронов в зоне проводимости, ΔE — ширина зоны проводимости ($\Delta E \approx 2zJ$), $\hbar\Omega_0$ — расстояние между центрами верхней широкой и нижней узкой (неперенормированной) зон. Здесь разумно определить f_{01} как

$$2m |j_{01}|^2 / e^2 (\hbar\Omega_0 + 2E_b - \Delta E/2).$$

Появление в (III. 22) величины $2E_b$ вместо E_b вызвано тем, что при переходе носителя в верхнюю зону остается «пустая» поляронная яма (по этой же причине порог при «внутризонном» поглощении равнялся $4E_a$).

Из [51] следует, что в этом случае бесфононный пик при $\omega = \Omega_0 + E_b/\hbar$ отсутствует.

Представляется разумным рассмотреть поглощение вблизи края полосы. Для этого разложим в (III. 22) энергию $\varepsilon(p)$ в ряд у нижнего края зоны: $\varepsilon(p) = -\Delta E/2 + Jp^2$ (напомним, что p здесь безразмерно). Порог возбуждения расположен при $\hbar\bar{\omega} = \hbar\Omega_0 - \Delta E/2 + 2E_b$. Введем безразмерную частоту

$$\Delta = \hbar(\omega - \bar{\omega})/2 \sqrt{E_b kT}$$

и обозначим $\eta_3 = J^2/E_b kT$, где J — резонансный интеграл, определяющий ширину зоны проводимости ($\eta_3 \gg 1$), тогда для

$\omega - \bar{\omega} < \Delta E/2\hbar$ из (III. 22) получим [51]

$$\operatorname{Re} \Delta\sigma(\omega) \approx \frac{n_v e^2}{2m} \frac{\hbar}{(E_b kT)^{1/2}} f_{01} \eta_3^{-1/4} \int_{-\Delta}^{\infty} e^{-y^2} (y + \Delta)^{1/2} dy. \quad (\text{III. 23})$$

Из (III. 23) следует, что при $\omega < \bar{\omega}$, когда $\Delta < 0$, интеграл в (III. 23) убывает почти по закону Гаусса, т. е. частотная зависимость на краю поглощения не степенная, а экспоненциальная, и край полосы поглощения при $kT > \hbar\omega_0/2$ сильно смещается при изменении температуры.

Исследуя переход из широкой валентной зоны в узкую поляронную зону проводимости, Иглс [37, 38] получил похожие результаты.

В заключение отметим, что исследование оптических спектров позволяет делать довольно убедительные выводы о силе взаимодействия носителей тока (или экситонов) с фононами и извлекать такие характерные параметры теории, как E_a , J , γ .

Если доказано, что инфракрасное поглощение действительно обусловлено свободными носителями тока (а не, скажем, F-центрами), то выводы о полярном механизме поглощения света становятся весьма достоверными, поскольку оно обладает специфическими особенностями, резко отличающими его от обычного поглощения свободными носителями.

Междузонное оптическое поглощение тоже обладает целым рядом специфических особенностей: а) резкий температурный сдвиг края поглощения и его необычная частотная зависимость, б) бесфононный пик и т. д. Поэтому экспериментальные исследования в этой области частот тоже могут послужить удобным орудием исследования свойств поляронов малого радиуса.

Интересные экспериментальные возможности открывают недавние теоретические исследования оптического поглощения ПМР в магнитном поле [128] и в сильном электрическом поле [129].

ГЛАВА IV

ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ [53—56]

§ 1. Вводные замечания

Расчет электропроводности σ в сильном электрическом поле вплоть до самого последнего времени основывался на решении кинетического уравнения Больцмана по методу, предложенному Давыдовым еще в 1937 г. [93]. Однако мы знаем, что для поляронов малого радиуса, за исключением области очень низких температур, кинетическое уравнение неприменимо даже в случае слабых электрических полей. И тем не менее в случае слабого электрического поля в гл. I удалось построить удобный математический аппарат для расчета кинетических коэффициентов. При этом мы исходили из формулы Кубо, которая получается из уравнения для матрицы плотности в линейном по E приближении. Теперь перед нами стоит задача о построении общей теории явлений переноса на основе метода матрицы плотности в произвольных по силе электрических полях и при произвольной силе связи электронов с фононами.

Естественно, что в столь общей постановке задача представляет очень большие трудности. Поэтому мы ограничимся лишь случаем столь малой концентрации носителей тока n , когда можно пренебречь корреляционными эффектами и считать, что вырождение отсутствует (статистика Больцмана). Это позволяет производить все расчеты в низшем порядке по n . Кроме того, мы учтем конечность ширины разрешенной зоны ΔE , что очень облегчает все расчеты и позволяет легко переходить к случаю поляронов малого радиуса. Мы предполагаем, что сила электрического поля ограничена сверху условием (IV.7), которое позволяет пренебречь межзонным туннельным пробоем и проводить все рассуждения в однозонном приближении.

В работе Л. В. Келдыша [94] предложен другой подход, основанный на методе двухчастичных функций Грина. Описанный в [94] метод пригоден при произвольной статистике носителей тока и произвольной силе связи. Однако межэлектронные корреляции в [94] тоже не учтены, и рассмотрение фактически ведется в однозонном приближении, но в пределе $\Delta E \rightarrow \infty$. В этом случае неравновесную функцию распределения $f(\mathbf{k})$ приходится определять из уравнения Дайсона, которое в случае статистики

Ферми оказывается нелинейным. При этом полностью утрачивается привычная аналогия*) с транспортным уравнением за исключением, конечно, такого случая, когда поле можно считать квазиклассическим, а рассеяние слабым.

Развитый здесь подход позволяет получить линейное относительно $f(\mathbf{k})$ обобщенное уравнение переноса, в котором вероятности перехода зависят от электрического поля, что отражает влияние поля на рассеяние. Кроме того, ниже будут получены замкнутые формулы для электропроводности, пригодные при произвольных значениях электрического поля и обладающие такой же степенью общности, как и формулы (I.87) и (I.114), (I.117) в гл. I. В случае очень сильных полей удалось получить для $j(E)$ весьма конструктивное разложение в ряд по степеням W_E/Ω_E , где W_E — вероятность перехода в сильном электрическом поле, а $\hbar\Omega_E = eEa$ есть расстояние между штарковскими подзонами. Соответствующая формула имеет простую физическую интерпретацию и по виду весьма напоминает формулу Цицейки, описывающую перескоки в сильном магнитном поле.

В настоящей главе мы дадим некоторое представление о способе вывода упомянутых выше формул для $\sigma(E)$ в сильном электрическом поле. Развитые в §§ 2, 3 общие методы будут применены в §§ 4—6 для изучения вопроса о поведении поляронов малого радиуса в сильном электрическом поле.

В [54, 55] такой же подход был использован при рассмотрении некоторых других нетривиальных случаев, которые не описываются уравнением Больцмана в сильном электрическом поле даже при слабой связи носителей тока с фононами, например:

1. Сверхсильные квантовые электрические поля в обычных полупроводниках. При $\Omega_E \tau \equiv eEa/\hbar\tau \gg 1$ (где a — постоянная решетки, τ — время релаксации) имеет место квантование продольного движения, и энергетический спектр принимает вид «штарковской лестницы» [96], описание в \mathbf{k} -пространстве становится неадекватным, и кинетическое уравнение перестает быть применимым. В этом случае при эксперименте могут проявиться квантовые осцилляции [97] сопротивления (электрофононный резонанс), независимо предсказанные в [53].

2. Сильные электрические поля (не обязательно квантовые) в полупроводниках с узкими разрешенными зонами. Например, если $\Delta E < \hbar\omega_0$ (ω_0 — частота оптических фононов), то

*) В работе И. Б. Левинсона [95] эта аналогия формально восстанавливается, но только в низшем порядке по взаимодействию с фононами, и в пределе $\Delta E \rightarrow \infty$. Влияние электрического поля на рассеяние в вероятностях перехода, рассчитанных в низшем борновском приближении, в [95] формально не учтено, но не указан критерий силы электрического поля, когда это влияние становится существенным, и в каких конкретных явлениях оно могло бы проявиться.

однофоновые процессы запрещены при $E \rightarrow 0$. С ростом E они могут вступить в игру, обусловив туннелирование через классический барьер в сильном электрическом поле. Это приводит к неаналитическим по E поправкам к току.

§ 2. Выражение для тока в сильном электрическом поле

Предположим, что при $t < 0$ система находилась в равновесии. Гамильтониан системы запишем в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ph} + \mathcal{H}_e^{(0)} + \mathcal{H}_{int}, \quad (IV. 1)$$

где $\mathcal{H}_e^{(0)} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}$, а $a_{\mathbf{k}}^+(a_{\mathbf{k}})$ — оператор рождения (уничтожения) носителя тока с волновым числом \mathbf{k} в блоховском представлении (индекс номера электронной зоны мы опускаем, так как пользуемся однозонным приближением), $\varepsilon(\mathbf{k})$ — энергия носителя тока в \mathbf{k} -представлении, \mathcal{H}_{ph} — гамильтониан фононного поля

$$\mathcal{H}_{ph} = \sum_{q,j} \hbar \omega_{qj} (b_{qj}^+ b_{qj} + 1/2), \quad (IV. 1a)$$

где ω_{qj} — частота фонона j -й ветви колебаний, $b_{qj}^+(b_{qj})$ — оператор рождения (уничтожения) фонона с импульсом q в j -й ветви.

Такая форма записи справедлива как в случае слабой связи с фононами, так и в случае сильной связи (модель полярона малого радиуса). Однако при сильной связи под \mathcal{H}_{int} можно понимать не обычное электрон-фононное взаимодействие, а ту часть гамильтониана, которая ответственна за миграцию полярона с узла на узел (см., например, (I. 38)). Пусть при $t = 0$ было скачком включено электрическое поле. Тогда при $t > 0$ оператор тока $\hat{j}(t)$ в наинишем приближении по концентрации носителей тока есть

$$\hat{j}(t) = n \frac{d\hat{D}(t)}{dt}, \quad (IV. 2)$$

где

$$\hat{D}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} \hat{D} e^{-\frac{i}{\hbar} H t}, \quad H = \mathcal{H} - \hat{D} E, \quad (IV. 3)$$

\hat{D} — оператор дипольного момента, n — концентрация носителей тока. Поскольку мы находим ток в наинишем приближении по концентрации, то задача формулируется как одноэлектронная, а результирующий ток может быть найден умножением вклада в ток от одного электрона на полное число электронов в кристалле, что и было использовано при написании (IV. 2). В рассматриваемой одноэлектронной задаче для произвольного представления β (будь то \mathbf{k} -, m - или α -представление, см. ниже) имеет место нормировка

$$\sum_{\beta} a_{\beta}^+ a_{\beta} = 1. \quad (IV. 4)$$

Усредняя (IV.2) по начальному распределению и переходя к представлению Хэвисайда, получаем выражением для тока *)

$$j(s) = s \int_0^{\infty} e^{-st} j(t) dt = \\ = -ns^2 \int_0^{\infty} dt e^{-st} \frac{1}{Z_0} \text{Sp} \{ e^{-\beta \mathcal{H}} [\hat{D}(t) - \hat{D}(0)] \}, \quad (\text{IV.5})$$

где

$$\beta = 1/kT, \quad Z_0 = \text{Sp} \{ \exp(-\beta \mathcal{H}_{\text{ph}}) \}.$$

Нам необходимо определить установившийся ток, т. е. ток при $t \rightarrow \infty$, или, что то же самое, $\lim_{s \rightarrow +0} j(s)$. Кроме того, как обычно, надо в (IV.5) произвести предельный переход $V \rightarrow \infty$. Порядок предельного перехода $V \rightarrow \infty$, $s \rightarrow 0$ определяется из следующих соображений. Пусть в начальный момент времени электрон был локализован в некоторой области кристалла вдали от его границ. При приложении электрического поля он начинает перемещаться по кристаллу в сторону одной из границ. Смещение его пропорционально времени, и, следовательно, электрон только в том случае не почувствует границы кристалла, если сначала произвести переход $V \rightarrow \infty$, и лишь затем устремить $t \rightarrow \infty$ ($s \rightarrow +0$). При обратном порядке предельного перехода электрон рано или поздно достигнет границы, и его движение вдоль поля прекратится. Такая ситуация в конечном счете отвечает эффекту поля и приводит при $t \rightarrow \infty$ к бестоковому состоянию при неоднородном распределении электронов в пространстве.

Найдем теперь явный вид оператора дипольного момента \hat{D} . В представлении Ванье имеем

$$\hat{D} = e \sum_{m, m'} a_m^+ a_{m'} \int_{(V)} \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \mathbf{r} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{m'}) d^3r, \quad (\text{IV.6})$$

где V — объем системы, e — заряд носителя, \mathbf{R}_m — радиус-вектор, проведенный в узел m , $\varphi(\mathbf{r})$ — функция Ванье, a_m^+ (a_m) —

*) Формула (IV.5) является наиболее общим выражением для тока в произвольном электрическом поле. Если в (IV.5) произвести разложение по полю, ограничившись линейным приближением по E , то получится выражение для электропроводности, совпадающее с формулой Кубо в представлении дипольных моментов (см. (I.10) в гл. I), если в последней перейти к пределу малых n . Формула (IV.5) отличается от замкнутых выражений, полученных в [98, 99]. Результаты [98] имеют смысл лишь в скрещенных электрическом и магнитном полях. Формула (8) работы [99] получена в предположении об адиабатическом включении электрического поля при $t = -\infty$. При ее выводе малость концентрации носителей не предполагалась. Для ее распутывания более удобна графическая техника, предложенная Келдышем [94], при этом окончательные результаты будут такими же, как в [94]. Для того чтобы воспроизвести полученные ниже результаты, понадобитсяinearизовать уравнение Дайсона по n .

оператор рождения (уничтожения) носителя на узле m . Члены, вызывающие туннельные межзонные переходы [100, 101], здесь опущены. Это можно делать, если вероятность межзонного пробоя еще мала, т. е. если

$$\exp[-\gamma E_g^{3/2}/eEa(\Delta E)^{1/2}] \ll 1, \quad (IV.7)$$

численный множитель γ в (IV.7) близок к единице, E_g — ширина запрещенной зоны, ΔE — ширина разрешенной зоны. Таким образом, в том случае, когда $\Delta E \leq E_g$, однозонное приближение справедливо вплоть до очень сильных полей $eEa \approx \approx E_g(E_g/\Delta E)^{1/2}$.

Смещая r в подынтегральном выражении (IV.6) на расстояние R_m , получаем

$$D = d + d', \quad (IV.8)$$

$$d = e \sum_m R_m a_m^+ a_m, \quad d' = e \sum_{m, m'} L(m - m') a_m^+ a_{m'}, \quad (IV.9)$$

где

$$L(m) = \int_{(V)} \varphi^*(r) r \varphi(r + R_m) d^3r. \quad (IV.10)$$

Отметим, что функция $L(m)$ быстро убывает с увеличением m . Переходя в выражении (IV.9) для d' в k -представление по формуле

$$a_m = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_k a_k \exp(ikR_m), \quad (IV.11)$$

где N — число атомов решетки в объеме V , имеем

$$d' = e \sum_k L(k) a_k^+ a_k, \quad L(k) = \sum_m L(m) \exp(-ikR_m). \quad (IV.12)$$

Теперь запишем выражение для тока (IV.5) в более симметричном виде, используя нормировку (IV.4) и явный вид оператора \hat{D} (см. (IV.8), (IV.9), (IV.12)),

$$j(s) = en \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \left\{ \sum_{m, m'} (R_{m'} - R_m) M_{mm'}^{mm'} + \sum_{k, k'} [L(k') - L(k)] M_{kk'}^{kk'} \right\}, \quad (IV.13)$$

где

$$M_{\beta\beta'}^{\beta\beta'} = \frac{1}{Z_0} \int_0^\infty dt e^{-st} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}} e^{i \frac{t}{\hbar} H} a_{\beta'}^+ a_{\beta} e^{-i \frac{t}{\hbar} H} a_{\beta}^+ a_{\beta'} \right\}. \quad (IV.14)$$

Заметим, что $M_{\beta\beta'}^{\beta\beta'}$ подчиняется правилу сумм

$$\sum_{\beta, \beta'} M_{\beta\beta'}^{\beta\beta'} = \frac{1}{s}. \quad (IV.15)$$

Для построения теории в произвольном электрическом поле иногда удобно воспользоваться набором собственных функций гамильтониана \mathcal{H}_E^e :

$$\mathcal{H}_E^e = \mathcal{H}_e^{(0)} - \hat{D}E \equiv \mathcal{H}_e^{(0)} + \mathcal{H}_E + \mathcal{H}_E'; \quad (\text{IV. 16})$$

$\mathcal{H}_E + \mathcal{H}_E'$ описывает реакцию системы на внешнее электрическое поле:

$$\mathcal{H}_E = -dE, \quad \mathcal{H}_E' = -d'E. \quad (\text{IV. 17})$$

Используя (IV. 12), перепишем сумму $\mathcal{H}_e^{(0)} + \mathcal{H}_E' \equiv \mathcal{H}_e$ в виде

$$\mathcal{H}_e = \sum_k \varepsilon(k) a_k^\dagger a_k, \quad \varepsilon(k) = \varepsilon^{(0)}(k) - eEL(k). \quad (\text{IV. 18})$$

Представление, в котором оператор $\mathcal{H}_E^e \equiv \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_E$ диагоналізується, назовем представлением «штарковской лестницы» или α -представлением*).

Если направление E выбрано вдоль одной из осей симметрии кристалла, связь между α - и k -представлениями описывается линейными соотношениями

$$a_\alpha = \frac{1}{N_x^{1/2}} \sum_{k_x} a_k \exp(ik_x X_m + i\chi(k)), \quad (\text{IV. 19})$$

$$a_k = \frac{1}{N_x^{1/2}} \sum_{X_m} a_\alpha \exp(-ik_x X_m - i\chi(k)).$$

Набор квантовых чисел α содержит $k_\perp = \{k_y, k_z\}$ и $X_m = (R_m)_x$. N_x есть нормировочное число при суммировании по k_x : например, если поле направлено вдоль оси четвертого порядка простой кубической решетки, то N_x есть число атомов решетки вдоль оси x . Функция $\chi(k)$ периодична по k с периодом обратной решетки и определяется равенством

$$\chi(k) = i \sum_{m, X_m \neq 0} \frac{\varepsilon(m)}{eER_m} \exp(-ikR_m), \quad (\text{IV. 20})$$

где $\varepsilon(m) = \frac{1}{N} \sum_k \varepsilon(k) \exp(ikR_m)$, $\varepsilon(k)$ — энергия носителя тока в k -представлении (для поляронов малого радиуса это перенор-

*) Набор соответствующих ψ -функций легко найти в случае периодического во времени движения электрона в зоне Бриллюэна под действием электрического поля. Например, для простого кубического кристалла периодичность получается, когда поле направлено вдоль осей второго, третьего и четвертого порядков. При произвольном же направлении поля необходимо пользоваться хаустоновским представлением [103]. Мы будем решать задачу с помощью диагонализации гамильтониана $\mathcal{H}_e + \mathcal{H}_E$, т. е. ограничимся случаем периодического движения электрона. Однако окончательный результат будет сформулирован в такой форме, которая применима при произвольном направлении поля в решетке.

мированная энергия). Отметим, что определенная таким образом $\chi(\mathbf{k})$ действительно удовлетворяет условию периодичности. Дифференцируя выражение для $\chi(\mathbf{k})$ по k_x , находим, что $\chi(\mathbf{k})$ удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению:

$$eE \frac{\partial \chi}{\partial k_x} = \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(k_{\perp}), \quad \varepsilon(k_{\perp}) = \frac{1}{N_x} \sum_{k_x} \varepsilon(\mathbf{k}). \quad (\text{IV. 20a})$$

Выражение под знаком экспоненты в формуле (IV. 19) с учетом (IV. 20a) можно записать в виде

$$ik_x X_m + i\chi(\mathbf{k}) = -\frac{i}{eE} \int_0^{k_x} [\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon(k')] dk', \quad (\text{IV. 21})$$

где ε_{α} — уровни штарковской лестницы, определенные равенством

$$\varepsilon_{\alpha} = -eE X_m + \varepsilon(k_{\perp}). \quad (\text{IV. 22})$$

Выражение (IV. 21) для $\chi(\mathbf{k})$ более привычно, чем (IV. 20).

Гамильтониан носителя тока в сильном электрическом поле E без учета \mathcal{H}_{int} (описывающего явный вид взаимодействия носителя тока с фононами) в α -представлении оказывается диагональным. Действительно, переходя в $\mathcal{H}_{\mathbf{E}}^{\alpha}$ в α -представление, получим

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mathbf{E}}^{\alpha} = & \frac{1}{N_x} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{X_m, X_m'} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \exp [ik_x (X_m - X_m')] \times \\ & \times \left\{ \varepsilon(\mathbf{k}) - eE \left(X_m' + \frac{\partial \chi(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right) \right\}. \quad (\text{IV. 23}) \end{aligned}$$

Подставляя $\partial \chi / \partial k_x$ из (IV. 20a) в $\mathcal{H}_{\mathbf{E}}^{\alpha}$, находим, что $\mathcal{H}_{\mathbf{E}}^{\alpha} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$. В последнее время имела место оживленная дискуссия [104, 105] о том, в какой мере точны такие решения. Решения (IV. 19), (IV. 21), (IV. 22), конечно, не являются строго стационарными, но если вероятность межзонного пробоя еще мала, т. е. если выполняется условие (IV. 7), то можно с хорошей степенью точности считать их стационарными и, отбросив межзонные члены в $\hat{D}\mathbf{E}$, записать гамильтониан системы в виде

$$H = \mathcal{H}_{\text{ph}} + \mathcal{H}_{\mathbf{E}}^{\alpha} + \mathcal{H}_{\text{int}}. \quad (\text{IV. 24})$$

В выражении (IV. 13) положим $E \| x, j(s) \| x$ и в первом слагаемом перейдем от m -представления к α -представлению, используя (IV. 19) и (IV. 11). Та часть вклада, которая недиагональна

в α -представлении приводится к диагональному виду в k -представлении. Простые вычисления дают

$$j_x = \frac{n}{E} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \left\{ \sum_{\alpha, \alpha'} (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_{\alpha'}) M_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'} + \sum_{k, k'} [\varepsilon(k) - \varepsilon(k') - eEL_x(k) + eEL_x(k')] M_{kk'}^{kk'} \right\}. \quad (IV. 25)$$

Это выражение можно сильно упростить при переходе к пределу $s \rightarrow 0$, если учесть правило сумм (IV. 15). Так как ε_β — ограниченная функция во всем интервале изменения квантовых чисел β , то при $s \rightarrow 0$ имеем

$$s^2 \sum_{\beta\beta'} \varepsilon_\beta M_{\beta\beta'}^{\beta\beta'} \sim s \rightarrow 0, \quad s^2 \sum_{\beta, \beta'} \varepsilon_\beta M_{\beta\beta'}^{\beta\beta'} \sim s \rightarrow 0.$$

Учитывая, что $\varepsilon(k)$ и $L(k)$ — ограниченные функции во всей зоне (ширина зоны конечна!), и используя выражение (IV. 22) для ε_α , имеем

$$j_x = en \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \sum_{\alpha, \alpha'} (X_{m'} - X_m) M_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'}. \quad (IV. 26)$$

Это выражение не стремится к нулю, так как при $V \rightarrow \infty$ спектр непрерывен. При обратном порядке предельного перехода (сначала $s \rightarrow 0$, а затем $V \rightarrow \infty$) выражение для тока обращается в нуль, что отвечает эффекту поля.

На основании аналогичных соображений можем представить формулу (IV. 13) в виде

$$j_x = en \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \sum_{m, m'} (X_{m'} - X_m) M_{mm'}^{mm'}. \quad (IV. 27)$$

Итак, задача о вычислении тока сведена теперь к «распутыванию» величин $M_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'}$ или $M_{mm'}^{mm'}$. Эта процедура будет кратко описана в следующем параграфе.

§ 3. Представление электропроводности в виде ряда по степеням W_E/Ω_E

Полученное в предыдущем параграфе выражение для тока (IV. 26) фактически не является замкнутым. При попытке рассчитать ток с помощью разложения M по степеням \mathcal{H}_{int} возникают вклады, пропорциональные s^{-n} ($n > 0$), которые стремятся к ∞ при $s \rightarrow 0$. Распутывание формулы Кубо путем разложения по \mathcal{H}_{int} тоже приводит к необходимости суммирования рядов по степеням $1/s$. Такая программа была выполнена для случая слабой связи в [23], а для сильной связи — в [31, 32, 44, 45] (см. гл. I и Приложение 2). Во всех этих работах суммирование по степеням $1/s$ приводило к некоторому уравнению переноса, которое иногда принимало вид кинетического. В случае

сильного поля также следует производить суммирование рядов по степеням $1/s$, после чего выражение для тока удастся представить в виде бесконечного ряда по степеням W_E/Ω_E , где W_E — вероятность перехода в сильном электрическом поле (см. ниже), а $\hbar\Omega_E = eEa$ есть расстояние между штарковскими подзонами. Оказывается, что этот ряд представляет собой итерации по степеням W_E/Ω_E некоторого уравнения переноса в сильном электрическом поле. В стандартном случае слабой связи и «неквантуемого» электрического поля, т. е. $W_E/\Omega_E \gg 1$ (при этом электрическое поле может еще быть сильным в обычном смысле), это уравнение переходит в кинетическое уравнение с вероятностями перехода, не зависящими от электрического поля.

Для распутывания (IV.26) применим обобщенный метод КП. С помощью этого метода $M_{\alpha\alpha'}^{aa'}$ можно представить в виде интеграла в плоскости комплексного переменного (рис. 6) по

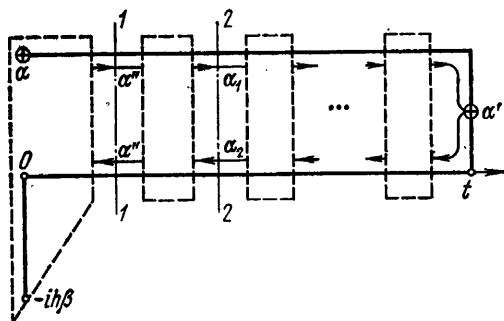


Рис. 6. Графическое изображение разложения $M_{\alpha\alpha'}^{aa'}$ на контуре C в плоскости комплексного времени. Клеммы контура обозначены через \oplus . 1—1 есть крайнее левое свободное сечение. При $\alpha_1 \neq \alpha_2$ сечение 2—2 есть квазисвободное. Часть графика, расположенная левее сечения 1—1, есть вершина $\Gamma_{\alpha\alpha'}^{aa'}$, а правее этого сечения (включая вклад от самого сечения 1—1) — функция условной вероятности $P_{\alpha''\alpha'}^{\alpha''\alpha'}$.

контур C . Каждой степени \mathcal{H}_{int} соответствует точка на этом контуре, причем операторы $\exp\left(\frac{i}{\hbar} H t\right)$ и $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right)$ разлагаются в ряд по \mathcal{H}_{int} на нижней и верхней действительных осях соответственно, а $\exp(-\beta \mathcal{H})$ — на мнимой оси контура. В наинишем приближении по концентрации все точки последовательно по контуру соединяются электронными линиями. Все эти правила сохраняются и при наличии электрического поля, с той лишь разницей, что теперь электронная линия несет индекс α , а не k , как в случае отсутствия поля.

Конкретные выражения для M , конечно, зависят от вида \mathcal{H}_{int} . Однако при любом \mathcal{H}_{int} графики для M имеют общее фундаментальное свойство, отмеченное в [23, 31, 44]. Оно заключается в

том, что каждый график содержит некоторое число «свободных сечений». Свободным называют такое вертикальное сечение; которое пересекает только две электронные линии и ничего более (т. е. не пересекает фононные или иные линии, связанные со взаимодействием). Вклад от свободного сечения есть $\left[s + \frac{i}{\hbar}(\epsilon_{\alpha_1} - \epsilon_{\alpha_2})\right]^{-1}$, где ϵ_{α_1} (ϵ_{α_2}) — энергия верхней (нижней) из пересекаемых линий (см., например, сечение 2 на рис. 6). В случае отсутствия внешнего поля электронные индексы k верхней и нижней линий в свободном сечении совпадают в силу закона сохранения импульса, так что вклад от свободного сечения есть $1/s$. При наличии сильного электрического поля ситуация несколько меняется. В свободных сечениях теперь совпадают лишь значения k_{\perp} на верхней и нижней осях (закон сохранения импульса в перпендикулярном полю направлению имеет место и здесь), в то время как значения X_m на верхней и нижней осях, вообще говоря, разные. Это связано с наличием пространственной дисперсии в задаче с электрическим полем. Поэтому вклад от свободного сечения в данном случае есть

$$\left[s - \frac{i}{\hbar} eE(X_{m_1} - X_{m_2})\right]^{-1}.$$

Так как это выражение при несовпадающих X_m не расходится при $s \rightarrow 0$, то в дальнейшем при $E \neq 0$ мы будем называть свободными сечениями лишь те, которые пересекают электронные линии с одинаковым индексом X_m , т. е. с одинаковым α (см. сечение 1—1 на рис. 6). Вклад от таких свободных сечений равен $1/s$. Часть графика, заключенную между такими свободными сечениями и не содержащую свободных сечений, назовем вероятностью и обозначим через $\tilde{W}_{\alpha\alpha'}$ (α — индекс левых, а α' — правых электронных линий). Часть графика, расположенную левее крайнего левого свободного сечения, назовем вершиной $\tilde{\Gamma}_{\alpha\alpha'}$ (α — индекс левой «клеммы», α' — индекс правых электронных линий). Согласно определению вероятность и вершина не содержат свободных сечений, а поэтому конечны при $s \rightarrow 0$. Однако при этом необходимо иметь в виду следующее. Согласно введенной нами классификации и вероятности, и вершина содержат сечения, имеющие пересечения с двумя электронными линиями, только в том случае, если эти линии несут различные индексы X_m . Такие сечения мы в дальнейшем будем называть «квазисвободными». Вклад от квазисвободных сечений есть

$$\left[s - \frac{i}{\hbar} eE(X_{m_1} - X_{m_2})\right]^{-1}$$

(см., например, сечение 2—2 на рис. 6).

Поэтому введенные здесь вероятности \tilde{W} и вершина $\tilde{\Gamma}$ расходятся при $E \rightarrow 0$. По смыслу выделения квазисвободных сечений вероятность \tilde{W} представляется в виде ряда (см. ниже

(IV. 41)), в котором фигурируют любые степени W , где W — блоки, заключенные между ближайшими квазисвободными сечениями и не содержащие таковых внутри себя.

Теперь можно перейти к суммированию по свободным сечениям. Для этого запишем M , используя правило свободных сечений (так же, как это делалось в гл. I), в виде

$$M_{\alpha\alpha'}^{aa'} = \sum_{\alpha''} \tilde{\Gamma}_{\alpha\alpha''}^{aa''} P_{\alpha''\alpha'}^{a''a'}, \quad (\text{IV. 28})$$

где

$$P_{\alpha\alpha'}^{aa'} = \frac{1}{s} \delta_{\alpha, \alpha'} + \frac{1}{s} \tilde{W}_{\alpha\alpha'}^{aa'} \frac{1}{s} + \sum_{\alpha''} \frac{1}{s} \tilde{W}_{\alpha\alpha''}^{aa''} \frac{1}{s} \tilde{W}_{\alpha''\alpha'}^{a''a'} \frac{1}{s} + \dots \quad (\text{IV. 29})$$

Легко видеть, что $P_{\alpha\alpha'}^{aa'}$, определенная в (IV. 29), удовлетворяет уравнению (ср. с (1.58), (1.59))

$$sP_{\alpha\alpha'}^{aa'} = \delta_{\alpha\alpha'} + \sum_{\alpha''} \tilde{W}_{\alpha\alpha''}^{aa''} P_{\alpha''\alpha'}^{a''a'} = \delta_{\alpha\alpha'} + \sum P_{\alpha\alpha''}^{aa''} \tilde{W}_{\alpha''\alpha'}^{a''a'}. \quad (\text{IV. 30})$$

Определенные посредством (IV. 24) и (IV. 30) величины $P_{\alpha\alpha'}^{aa'}$ назовем функциями условной вероятности. Они представляют собой лапласов образ от вероятности найти электрон в момент времени t в состоянии α' , если при $t = 0$ он был помещен в состояние α , а температура решетки равнялась T . Так же, как и в случае $E = 0$, для $P_{\alpha\alpha'}^{aa'}$ можно указать замкнутое выражение

$$P_{\alpha\alpha'}^{aa'} = \frac{1}{Z_0} \int_0^{\infty} dt e^{-st} \sum_K e^{-\beta E_K} \langle 0K | a_{\alpha} e^{i \frac{t}{\hbar} H} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\alpha} e^{-i \frac{t}{\hbar} H} a_{\alpha} | 0K \rangle, \quad (\text{IV. 31})$$

где K — номер стационарного состояния решетки, E_K — энергия решетки в состоянии K . Среднее в (IV. 31) берется по электронному вакууму. Из определения (IV. 31) следует, что

$$\sum_{\alpha'} P_{\alpha\alpha'}^{aa'} = \frac{1}{s}. \quad (\text{IV. 32})$$

Правило сумм (IV. 32) отражает тот факт, что сумма вероятностей найти электрон во всех состояниях α в любой момент времени равна единице. Из уравнения (IV. 30) с помощью (IV. 32) находим соотношение для W

$$\sum_{\alpha'} \tilde{W}_{\alpha\alpha'}^{aa'} = 0. \quad (\text{IV. 33})$$

Отметим, что (IV. 33) указывает на равенство нулю детерминанта матрицы $\tilde{W}_{\alpha\alpha'}^{aa'}$.

Другим следствием (IV. 32) является правило сумм для вершины. Используя (IV. 28) и правило сумм для M (IV. 15), получаем

$$\sum_{\alpha, \alpha'} \tilde{\Gamma}_{\alpha\alpha'}^{aa'} = 1. \quad (\text{IV. 34})$$

Для вероятности недиагональных переходов $\tilde{W}_{\alpha_1\alpha_2}^{\alpha_1\alpha_2}$ ($\alpha_1 \neq \alpha_2$) также имеет место правило сумм

$$\sum_{\alpha} \tilde{W}_{\alpha,\alpha}^{\alpha,\alpha} = 0. \quad (\text{IV. 33a})$$

Равенство (IV. 33a) легко доказать, если ввести недиагональную условную вероятность $P_{\alpha,\alpha}^{\alpha,\alpha}$ по аналогии с (IV. 31) и сформулировать для нее уравнение, подобное (IV. 30). Из такого определения следует, что

$$\sum_{\alpha} P_{\alpha,\alpha}^{\alpha,\alpha} = \frac{1}{s} \delta_{\alpha_1, \alpha_2},$$

а из уравнения для $P_{\alpha,\alpha}^{\alpha,\alpha}$ получаем правило сумм (IV. 33a).

Теперь подставим полученное выше выражение (IV. 28) для M в (IV. 26), используя при этом правило сумм (IV. 32),

$$j_x = en \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \tilde{\Gamma}_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'} F_{\alpha'}^{\alpha'} + en \lim_{s \rightarrow 0} s \sum_{\alpha, \alpha'} \tilde{\Gamma}_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'} (X_{m'} - X_m), \quad (\text{IV. 35})$$

где введено обозначение

$$F_{\alpha'}^{\alpha'} = \sum_{\alpha} (X_{m'} - X_m) P_{\alpha'}^{\alpha\alpha}. \quad (\text{IV. 36})$$

По определению $\tilde{\Gamma}_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'}$ конечна при $s \rightarrow 0$. С другой стороны, при наличии электрического поля в системе носитель тока локализован в конечной области пространства, радиус которой порядка $\Delta E/eE$ (ΔE — ширина электронной зоны). Отсюда следует, что вторая сумма в (IV. 35) сходится при $V \rightarrow \infty$, поэтому ее можно опустить при $s \rightarrow 0$.

Уравнение для F_{α}^{α} можно получить из (IV. 30), используя определение (IV. 36):

$$sF_{\alpha}^{\alpha'} = \frac{1}{s} \sum_{\alpha''} (X_{m''} - X_{m'}) \tilde{W}_{\alpha'\alpha''}^{\alpha'\alpha''} + \sum_{\alpha''} \tilde{W}_{\alpha'\alpha''}^{\alpha'\alpha''} F_{\alpha''}^{\alpha''}. \quad (\text{IV. 37})$$

В силу того, что в однородном электрическом поле пространство остается однородным, хотя и перестает быть изотропным, величины $\tilde{W}_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'}$ зависят лишь от разности $X_m - X_{m'}$, а поэтому $F_{\alpha}^{\alpha'}$ не зависит от X_m и есть функция лишь k_{\perp} . Теперь построим формальное решение для F_{α}^{α} , исходя из (IV. 37). В соответствии с (IV. 30), матрица

$$(P_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'})^{-1} = s\delta_{\alpha\alpha'} - \tilde{W}_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'} \quad (\text{IV. 38})$$

есть обратная по отношению к $P_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'}$. Учитывая это обстоятельство, умножим уравнение (IV. 37) на $P_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'}$ и просуммируем по α'

$$F_{\alpha}^{\alpha} = \frac{1}{s} \sum_{\alpha', \alpha''} P_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'} (X_{m''} - X_{m'}) \tilde{W}_{\alpha'\alpha''}^{\alpha'\alpha''}. \quad (\text{IV. 39})$$

Подставляя (IV. 39) в (IV. 35), с учетом (IV. 15) и (IV. 28), получаем искомое выражение для тока

$$j_x = en \sum_{k_{\perp}} n(k'_{\perp}) \sum_{X_m, k_{\perp}} X_m \tilde{W}_{0, X_m}^{0, X_m}(k'_{\perp}, k_{\perp}); \quad (\text{IV. 40})$$

здесь

$$\tilde{W}_{0, X_m}^{0, X_m}(k'_{\perp}, k_{\perp}) \equiv \tilde{W}_{0, k'_{\perp}; X_m, k_{\perp}}^{0, k'_{\perp}; X_m, k_{\perp}}$$

— эффективная вероятность перехода из состояния $\alpha' = \{0, k'_{\perp}\}$ в состояние $\alpha = \{X_m, k_{\perp}\}$, которая записывается в виде ряда по «степеням $1/E$ »

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{X_m, X_m'}^{X_m, X_m'}(k_{\perp}, k'_{\perp}) &= W_{X_m, X_m'}^{X_m, X_m'}(k_{\perp}, k'_{\perp}) + \\ &+ \sum_{k'_{\perp}} \sum_{\substack{X_{m_1}, X_{m_2} \\ (X_{m_1} \neq X_{m_2})}} W_{X_m, X_{m_1}}^{X_m, X_{m_1}}(k_{\perp}, k'_{\perp}) \frac{\hbar}{ieE(X_{m_2} - X_{m_1})} \times \\ &\times W_{X_{m_2}, X_m'}^{X_{m_2}, X_m'}(k'_{\perp}, k'_{\perp}) + \dots, \end{aligned} \quad (\text{IV. 41})$$

где $W_{X_m, X_m'}^{X_m, X_m'}(k_{\perp}, k'_{\perp})$ — непорнормированная (т. е. не содержащая «квасисвободных» сечений) вероятность перехода из состояния α в α' . $W_{X_{m_2}, X_{m_1}}^{X_{m_2}, X_{m_1}}(k_{\perp}, k'_{\perp})$ — вероятность недиагональных переходов, определение которой следует из графической техники.

Величина $n(k_{\perp})$ в (IV. 40) определена пока согласно равенству

$$n(k_{\perp}) = s \sum_{k'_{\perp}} \Gamma(k'_{\perp}) P(k'_{\perp}, k_{\perp}), \quad (\text{IV. 42})$$

где

$$\Gamma(k_{\perp}) = \sum_{\alpha', X_m} \tilde{\Gamma}_{\alpha' \alpha}^{\alpha' \alpha}, \quad P(k'_{\perp}, k_{\perp}) = \sum_{X_m} P_{\alpha' \alpha}^{\alpha' \alpha}. \quad (\text{IV. 43})$$

При распутывании полученного выражения (IV. 42) для $n(k_{\perp})$ опять потребуется суммировать ряды по степеням $1/s$. Это суммирование легко произвести, умножая обе части равенства (IV. 42) на матрицу

$$P^{-1}(k_{\perp}, k'_{\perp}) = s \delta_{k_{\perp}, k'_{\perp}} - \tilde{W}(k_{\perp}, k'_{\perp}), \quad (\text{IV. 44})$$

где

$$\tilde{W}(k'_{\perp}, k_{\perp}) = \sum_{X_m} \tilde{W}_{0, X_m}^{0, X_m}(k'_{\perp}, k_{\perp}), \quad (\text{IV. 45})$$

и просуммировав по k_{\perp} . Учитывая, что, согласно (IV. 38) и (IV. 44), $P^{-1}(k_{\perp}, k'_{\perp})$ есть матрица обратная по отношению к $P(k_{\perp}, k'_{\perp})$, получим

$$sn(k_{\perp}) = s\Gamma(k_{\perp}) + \sum_{k'_{\perp}} n(k'_{\perp}) \tilde{W}(k'_{\perp}, k_{\perp}). \quad (\text{IV. 46})$$

Это уравнение можно упростить, переходя к пределу при $s \rightarrow 0$. В силу того, что детерминант матрицы $W(k_{\perp}, k_{\perp})$ равен нулю (см. (IV. 33)), $n(k_{\perp})$ конечна при $s \rightarrow 0$. Тогда можно положить $s = 0$ в (IV. 46), в результате чего получаем уравнение для определения $n(k_{\perp})$

$$\sum_{k_{\perp}} n(k'_{\perp}) \tilde{W}(k'_{\perp}, k_{\perp}) = 0. \quad (\text{IV. 47})$$

Условие нормировки для $n(k_{\perp})$ имеет вид

$$\sum_{k_{\perp}} n(k_{\perp}) = 1. \quad (\text{IV. 48})$$

Оно получается при суммировании (IV. 46) по k_{\perp} , если использовать правила сумм (IV. 33), (IV. 34). Соотношения (IV. 40), (IV. 41), (IV. 45), (IV. 47) и (IV. 48) позволяют представить выражения для тока в виде бесконечной суммы по степеням W_E/Ω_E .

Формула (IV. 40) имеет много общего с формулой Цицейки для сильного магнитного поля. Действительно, в случае $\Omega_E \tau_E > 1$ (где $1/\tau_E \equiv W_E$) ряд (IV. 41) можно оборвать. Тогда, согласно (IV. 40), ток будет равен средней скорости (XW) смещения центра штарковского осциллятора за счет перехода, индуцированного фононами, с одного штарковского уровня на другой в пренебрежении зинеровским пробоем (подробнее см. в [54, 55]). В случае $\Omega_E \tau_E \leq 1$ надо суммировать весь ряд (IV. 41), что приведет к выводу некоторого квантового уравнения переноса [55]*). Эта процедура будет выполнена в следующем параграфе на примере поляронов малого радиуса.

§ 4. Общие формулы для электропроводности ПМР в произвольном электрическом поле [56]

Чтобы воспользоваться формулой (IV. 40) для тока, следует найти $n(k_{\perp})$ из уравнения (IV. 47). В случае слабой электрон-фононной связи эта задача была решена в [55]. В случае поляронов малого радиуса из-за узости поляронной зоны ($\Delta E_p \approx \Delta E \exp(-S_T)$) можно ожидать, что $n(k_{\perp}) \approx 1/N_{\perp}$. Напомним, что при $E = 0$ имеет место соотношение

$$n(k) \approx \frac{1}{N} [1 + O(\exp(-S_T))]$$

* Мы не приводим здесь процедуры вывода общего уравнения переноса, не ограниченного рамками теории ПМР (детали см. [55]), поскольку в гл. V будет предложена схема вывода такого уравнения при произвольных E и H , т. е. искомое уравнение получается из (V. 45), если положить в нем $H = 0$.

(см. Приложение 5). В Приложении 8 показано, что $n(\mathbf{k}_\perp) = \frac{1}{N_\perp} (1 + f(\mathbf{k}_\perp))$, где

$$f(\mathbf{k}_\perp) = -\frac{1}{N_\perp} \sum_{\mathbf{g}_\perp \neq 0} e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{g}_\perp} \frac{\sum_{m_x, m_\perp} \tilde{W}_{0,0; m_x, m_\perp + \mathbf{g}_\perp}^{0,0; m_x, m_\perp}}{\tilde{W}_{0,0;0,0}^{0,0;0,0}} \approx \exp(-S_T). \quad (\text{IV. 49})$$

Здесь для каждой из четырех пар индексов, стоящих при \tilde{W} , первый индекс относится к проекции радиуса-вектора m -го узла на направление электрического поля E , а второй векторный индекс определяет проекцию, перпендикулярную к E . Полагая $n(\mathbf{k}_\perp) = 1$ в (IV. 40), получим

$$j_x = en \sum_{X_m} \frac{1}{N_\perp} \sum_{\mathbf{k}_\perp, \mathbf{k}'_\perp} X_m \tilde{W}_{0, X_m}^{0, X_m}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp). \quad (\text{IV. 50})$$

Существует следующее соотношение между вероятностями перехода в узельном (Ваннье) и в штарковском представлениях для модели ПМР (узкие перенормированные зоны):

$$\begin{aligned} & \tilde{W}_{X_{m_2}, X_{m_4}}^{X_{m_1}, X_{m_3}}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{k}'_\perp) = \\ & = \frac{1}{N_\perp^2} \sum_{\substack{m_{1\perp}, m_{2\perp} \\ m_{3\perp}, m_{4\perp}}} \tilde{W}_{m_2, m_4}^{m_1, m_3} \exp\{-ik'_\perp(m_{3\perp} - m_{4\perp}) + ik_\perp(m_{1\perp} - m_{2\perp})\}. \end{aligned} \quad (\text{IV. 51})$$

Полагая в нем $X_{m_1} = X_{m_2} = 0$, $X_{m_3} = X_{m_4} = X_m$ и суммируя обе части равенства по \mathbf{k}_\perp и \mathbf{k}'_\perp , получим

$$\sum_{\mathbf{k}_\perp, \mathbf{k}'_\perp} \tilde{W}_{0, X_m}^{0, X_m}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{k}'_\perp) = \sum_{m_\perp} \tilde{W}_{0, m}^{0, m},$$

что позволяет переписать формулу (IV. 50) в виде

$$j_x = en \sum_m X_m \tilde{W}_{0, m}^{0, m}. \quad (\text{IV. 52})$$

Графическая техника для вычисления величин $\tilde{W}_{0, m}^{0, m}$ похожа на ту, которая описана в Приложении 2 (для случая $E = 0$), с одним лишь дополнением: каждой точке l на временной оси следует приписать дополнительный множитель

$$\exp\left[-i \frac{t_l}{\hbar} eEg_{l, x}\right]. \quad (\text{A})$$

Смещая все аргументы t_j , отвечающие нижней оси контура, на $i\hbar\beta/2$ (т. е. $t_j = t'_j + i\hbar\beta/2$), величину $\tilde{W}_{0, m}^{0, m}$ можно представить

в следующем виде:

$$\tilde{W}_{0,m}^{0,m} = \exp\left(\frac{eEX_m}{2kT}\right) \tilde{W}_{0,m}^{0,m}, \quad (\text{IV. 53})$$

где величина $\tilde{W}_{0,m}^{0,m}$ симметрична по отношению к замене $m \rightarrow -m$ (см. [53, 72]). Подставляя (IV. 53) в (IV. 52), получим

$$j_x = en \sum_m X_m \operatorname{sh}\left(\frac{eEX_m}{2kT}\right) \tilde{W}_{0,m}^{0,m}. \quad (\text{IV. 54})$$

Величина $\tilde{W}_{0,m}^{0,m}$ представляется в виде бесконечного ряда по степеням $1/E$ вида (ср. с (IV. 41))

$$\tilde{W}_{0,m}^{0,m} = W_{0,m}^{0,m} + \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ (X_{m_1} \neq X_{m_2})}} W_{0,m_2}^{0,m_1} \frac{\hbar}{ieE(X_{m_1} - X_{m_2})} W_{m_2,m}^{m_1,m} + \dots \quad (\text{IV. 55})$$

Напомним, что графический рецепт вычисления всех блоков в ряду (IV. 55) отличается от случая $E = 0$ наличием дополнительного множителя (A) и тем, что во всех временных аргументах, отвечающих фоновым связкам, соединяющим верхнюю и нижнюю части временного контура C, отсутствует множитель $i\hbar\beta/2$. Выражение (IV. 55) может быть представлено в замкнутом виде:

$$\tilde{W}_{0,m}^{0,m} = W_{0,m}^{0,m} + \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ (m_1 \neq m_2)}} W_{0,m_2}^{0,m_1} F_{m_2,m}^{m_1,m}, \quad (\text{IV. 56})$$

где безразмерная функция $F_{m_2,m}^{m_1,m}$ удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \frac{ieE}{\hbar} (X_{m_1} - X_{m_2}) F_{m_2,m}^{m_1,m} = & W_{m_2,m}^{m_1,m} + W_{m_2,m_2}^{m_1,m_1} F_{m_2,m}^{m_1,m} + \\ & + \sum_{\substack{m_4 \\ (m_4 \neq m_2)}} W_{m_2,m_4}^{m_1,m_1} F_{m_4,m}^{m_1,m} + \sum_{\substack{m_3 \\ (m_3 \neq m_1)}} W_{m_2,m_2}^{m_1,m_2} F_{m_3,m}^{m_2,m} + \\ & + \sum_{\substack{m_3, m_4 \\ (m_3 \neq m_1, m_4 \neq m_2)}} W_{m_2,m_4}^{m_1,m_2} F_{m_4,m}^{m_3,m}. \end{aligned} \quad (\text{IV. 57})$$

Подставляя (IV. 56) в (IV. 54), разобьем ток и соответственно электропроводность $\sigma(E) = j(E)/E$ на две части: перескоковую $\sigma_h(E)$ и туннельную $\sigma_t(E)$:

$$\sigma(E) = \sigma_h(E) + \sigma_t(E), \quad (\text{IV. 58})$$

$$\sigma_h(E) = \frac{e^2 n}{2kT} \sum_m X_m^2 \frac{\operatorname{sh}(eEX_m/2kT)}{eEX_m/2kT} W_{0,m}^{0,m}, \quad (\text{IV. 59})$$

$$\sigma_t(E) = \frac{e^2 n}{2kT} \sum_m X_m^2 \frac{\operatorname{sh}(eEX_m/2kT)}{eEX_m/2kT} \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ (m_1 \neq m_2)}} W_{0,m_2}^{0,m_1} F_{m_2,m}^{m_1,m}. \quad (\text{IV. 60})$$

Поскольку условие $W_{m_2, m_1}^{m_1, m_1} \gg W_{m_2, m_2}^{m_1, m_1}$, имевшее место при $E=0$ в широком температурном диапазоне, сохраняется и при $E \neq 0$, приближенное решение уравнения (IV. 57) может быть представлено в виде

$$F_{m_2, m}^{m_1, m} \approx \frac{W_{m_2, m}^{m_1, m}}{\frac{i}{\hbar} eE (X_{m_1} - X_{m_2}) - W_{m_2, m_2}^{m_1, m_1}}. \quad (\text{IV. 61})$$

И тогда в принятом приближении туннельный вклад в электропроводность будет описываться формулой

$$\sigma_t(E) = \frac{e^2 n}{2kT} \sum_m X_m^2 \frac{\text{sh}(eEX_m/2kT)}{eEX_m/2kT} \times \\ \times \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ (m_1 \neq m_2)}} \frac{W_{0, m_2}^{0, m_1} W_{m_2, m}^{m_1, m}}{\frac{i}{\hbar} eE (X_{m_1} - X_{m_2}) - W_{m_2, m_2}^{m_1, m_1}}. \quad (\text{IV. 62})$$

При $E \rightarrow 0$ выражения для $\mu_n = \sigma_n/en$ и $\mu_t = \sigma_t/en$, следующие из (IV. 59) и (IV. 62), переходят в (II. 22) и (II. 41) соответственно.

§ 5. Случай узких исходных зон (малые J) и не очень сильных электрических полей [53, 56]

Рассмотрим сначала случай не слишком больших E и малых η_1 и η_2 таких, чтобы в ряду (IV. 59) можно было ограничиться лишь первым членом. Тогда перескоковый вклад может быть записан в виде [53]

$$\sigma_n(E) = en(E) \mu_n(0) \frac{\text{sh}(eEa/2kT)}{eEa/2kT} \exp\left[-\left(\frac{eEa}{\hbar\Omega}\right)^2\right], \quad (\text{IV. 63})$$

где $\mu_n(0)$ — перескоковая подвижность при $E=0$ (вычисленная при произвольных η_2), $\Omega = \omega_0(Ea/kT)^{1/2} [\text{sh}(\hbar\omega_0/4kT)]^{-1}$.

В принципе концентрация поляронов $n(E)$ тоже может зависеть от электрического поля (скажем, за счет эффекта Френкеля — Пула). При $\hbar\omega_0/4kT < 1$ и $n(E) = \text{const}$ этот результат совпадает с результатом Эфроса [106]. Согласно (IV. 63) зависимость от $\Omega_E \equiv eEa/\hbar$ для $\sigma_n(E)$ при $n(E) = \text{const}$ получается такой же, как и зависимость $\sigma_n(\omega)$ от ω (см. гл. III) при внутризонном поглощении. Однако ниже будет показано, что учет в (IV. 59) перескоков на более далекие узлы существенно изменяет вид вольтамперной характеристики даже для электрических полей гораздо меньших, чем $E_{\text{max}} \approx 4E_a/ea$, при котором, согласно (IV. 63), $\sigma(E)$ имеет максимум.

Перейдем теперь к рассмотрению туннельного вклада, опять ограничившись только таким случаем, когда в ряду по m можно

удержать только первый член [53]:

$$\sigma_t(E) \approx en(E) \mu_t(0) \frac{\text{sh}(\hbar\Omega_E/2kT)}{\hbar\Omega_E/2kT} \frac{W_t(0) \text{Re} W_t(E)}{[\Omega_E - \text{Im} W_t(E)]^2 + [\text{Re} W_t(E)]^2}. \quad (\text{IV. 64})$$

Здесь $W_t(E)$ — вероятность туннельного просачивания в присутствии электрического поля. При $E \rightarrow 0$ имеем $\text{Im} W_t(E) \sim E \rightarrow 0$, $\text{Re} W_t(E) \rightarrow W_t(0) = \tau^{-1}$. При не слишком больших J и не слишком малых E отношение $\frac{\text{Im} W_t(E)}{\Omega_E} \ll 1$. Обозначим $\text{Re} W_t(E) \rightarrow \tau^{-1}(E)$ и перепишем (IV. 64) в виде

$$\frac{\sigma_t(E)}{\sigma_t(0)} = \frac{n(E)}{n(0)} \frac{\text{sh}(\hbar\Omega_E/2kT)}{\hbar\Omega_E/2kT} \frac{\tau(E)}{\tau(0)} \frac{1}{1 + (\tau(E)\Omega_E)^2}. \quad (\text{IV. 65})$$

Интересно отметить, что в случае не очень сильных полей, когда

$$n(E)/n(0) \approx 1, \quad \tau(E)/\tau(0) \approx 1, \quad \frac{\hbar\Omega_E}{2kT} \ll 1,$$

зависимость σ от электрического поля в (IV. 65) описывается только последним множителем и напоминает зависимость от магнитного поля поперечной электропроводности в сильных, но не квантовых магнитных полях для стандартных полупроводников (широкие разрешенные зоны и слабая связь электронов с фононами). В более сильных электрических полях начинает проявляться зависимость $\tau(E)$ от E . Напомним, что W_t представляется в виде суммы вкладов, отвечающих однофононным, двухфононным и т. д. процессам (см. гл. II, § 4). При $E \neq 0$ к аргументу каждой из δ -функций добавляется Ω_E (если переход осуществляется между ближайшими штарковскими уровнями). В общем случае к аргументу δ -функции следует добавить $M\Omega_E$, где M — целое число. Если при $E = 0$ основной вклад в W_t вносили двухфононные процессы, что отвечает наличию $\delta(\omega_{q_2} - \omega_{q_1})$ в выражении для τ^{-1} (см. § 3 гл. II), то с ростом E в игру вступают однофононные ($\delta(\omega_q - \Omega_E)$), трехфононные

$$(\delta(\omega_{q_1} + \omega_{q_2} - \omega_{q_3} - \Omega_E), \quad \delta(\omega_{q_1} + \omega_{q_2} + \omega_{q_3} - \Omega_E))$$

и другие мультифононные процессы, которым отвечают δ -функции вида

$$\delta\left(\sum_{l=1}^{N+m} \omega_{q_l} - \sum_{l=N+m+1}^{N+2m} \omega_{q_l} - M\Omega_E\right)$$

и которые раньше были запрещены законом сохранения энергии. Это приводит к тому, что $\tau(E)$, а следовательно, и $\sigma_t(E)$ будут немонотонно зависеть от электрического поля E . При малой дисперсии оптических фононов ($\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$) эти немонотонности

имеют вид осцилляций, период которых определяется резонансным условием

$$MeEa = N\hbar\omega_0 \quad (M, N = 1, 2, 3, \dots).$$

Здесь M указывает число штарковских уровней, укладываемых между начальным и конечным состояниями электрона, а N — число фононов, испускаемых при переходе. Амплитуда осцилляций убывает с ростом N .

Этот эффект, названный впоследствии электрофононным резонансом, был предсказан теоретически в 1970 г. [53] в рамках модели ПМР (исходные зоны достаточно узкие, связь электронов с фононами сильная). Общая теория этого эффекта в случае слабой связи с фононами ($\alpha \ll 1$) построена в [107]. Вообще говоря, электрофононный резонанс может иметь место при произвольной силе связи электронов с фононами. Впервые он был обнаружен экспериментально Маекавой [97] на ZnS , в котором имеет место промежуточная связь электронов с фононами ($\alpha \approx 1 \div 2$).

§ 6. Случай не слишком узких зон и достаточно сильных электрических полей [56]

Согласно формуле (IV.59) вероятности $\tilde{W}_{0,m}^{0,m}$ должны достаточно быстро убывать с увеличением X_m , так, чтобы компенсировать увеличение множителя $X_m \operatorname{sh}(eEX_m/2kT)$. Как мы увидим ниже, $\tilde{W}_{0,m}^{0,m}$ ведет себя как

$$\eta_1^2 (X_m/a) \exp[-(eEX_m)^2/16E_a kT],$$

т. е., вообще говоря, члены ряда в (IV.59) сначала возрастают, а затем начинают убывать. Такое поведение характерно при $\eta_1^2 \exp(\hbar\Omega_E/2kT) \gg 1$, но $\hbar\Omega_E \ll 4E_a$, т. е. в области полей, где уже наблюдается отклонение от закона Ома, однако еще не наступило быстрое убывание тока с полем, описываемое формулой (IV.63). Очевидно, что в этой области полей наибольший вклад в ток дают процессы, отвечающие максимальной дальности перескока, т. е. максимальному значению X_m при заданной степени J (параметры η_1 , η_2 и η_3 считаем малыми). Иными словами, для расчета тока необходимо просуммировать все графики для $\tilde{W}_{0,m}^{0,m}$, имеющие одинаковое количество точек на верхней и нижней осях контура, причем $g_1 = g_2 = \dots = g_n = g$, $g'_1 = g'_2 = \dots = g'_n = -g$, а вектор g совпадает по направлению с E (см. § 2 в работе [56]).

В [56] использовалась модель близкодействующего электрон-фононного взаимодействия ($|\gamma_q| = \gamma = \text{const}$), а дисперсия фононов учитывалась только при отбрасывании вклада от следующих перевальных точек при интегрировании по времени.

Оказалось, что ток складывается из набора гауссовых кривых, максимум которых лежит при $\hbar\Omega_E = 4E_a/n$, где n — целое число *);

$$j = en \frac{aI}{\hbar} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \eta_3^{1/2} \left\{ \exp\left[-\frac{(\hbar\Omega_E - 4E_a)^2}{16E_a kT}\right] - \exp\left[-\frac{(\hbar\Omega_E + 4E_a)^2}{16E_a kT}\right] + \right. \\ \left. + \sum_{n=1}^{\infty} (n+1) \left(\frac{1}{2} \eta_3\right)^n \left\{ \exp\left[-\frac{(\hbar\Omega_E (n+1) - 4E_a)^2}{16E_a kT}\right] - \right. \right. \\ \left. \left. - \exp\left[-\frac{(\hbar\Omega_E (n+1) + 4E_a)^2}{16E_a kT}\right] \right\} f\left(\frac{4E_a + (n-1)\hbar\Omega_E}{4\sqrt{2kTE_a}}\right) \times \right. \\ \left. \times f\left(\frac{4E_a + (n-3)\hbar\Omega_E}{4\sqrt{2kTE_a}}\right) \dots f\left(\frac{4E_a - (n-1)\hbar\Omega_E}{4\sqrt{2kTE_a}}\right) \right\}, \quad (\text{IV. 66})$$

где $f(x) = e^{-x^2} x \int_0^x e^{y^2} dy - \frac{1}{2}$.

Таким образом, отношение значений в максимуме по мере увеличения n при не слишком больших n падает как η_1^2 , а при больших n — как η_3 . Например, если амплитуду пика с $n = 1$ принять за единицу, то амплитуда пика с $n = 2$ есть η_1^2 . Однако если $\eta_1^2 \exp(\hbar\Omega_E/2kT) > 1$, то в некоторых областях E вклад в ток от кривых с $n \neq 1$ может оказаться большим, чем вклад от первого пика. Например, при $\hbar\Omega_E = 2E_a$ отношение вклада кривой с $n = 1$ к вкладу с $n = 2$ есть $\eta_1^{-2} \exp(-E_a/kT)$.

Итак, при больших полях зависимость $j(E)$ может иметь немонотонный характер, причем особенности лежат в районе полей, определяемых равенством $\hbar\Omega_E = 4E_a/n$. Наличие этих особенностей связано с резонансным переходом полярона в сильном электрическом поле на узлы, более удаленные, чем ближайшие соседи (подробнее см. в [56]).

§ 7. Обсуждение полученных результатов

В настоящей главе был сформулирован метод для расчета $\sigma(E)$ в сильном электрическом поле, пригодный и в тех случаях, когда кинетическое уравнение неприменимо.

При выводе делалось 4 следующих предположения:

1. Можно ограничиться низшим приближением по концентрации носителей тока n и игнорировать кулоновские корреляции между носителями тока.

* В работе [56] приведено соответствующее выражение для $\sigma(E)$ (см. формулу (38) в [56]), в котором более легко можно проследить предельный переход $E \rightarrow 0$.

2. Поля не столь велики, чтобы вызвать междузонный туннельный пробой (однозонное приближение), см. условие (IV. 7).

3. \mathcal{H}_{int} до канонического преобразования от электрического поля не зависит, что в случае ПМР отвечает условию

$$eEa/kT < (M\omega_0^2 a^2/E_a)^{1/2}. \quad (\text{A})$$

4. Зависимость $n(E)$ такова, что хотя полное число носителей тока в зоне изменяется с полем, но это не отражается на их распределении по энергиям и по k_{\perp} (например, это может иметь место в случае эффекта Френкеля — Пула).

Наиболее существенным является первое предположение. Оно не позволяет применять теорию к сильно легированным полупроводникам и изучать индуцированный электрическим полем фазовый переход изолятор — металл в диэлектриках Мотта, например в рамках модели Хаббарда. Чтобы выйти из рамки первого предположения, можно попытаться обобщить технику Л. В. Келдыша [94].

От предположений 2, 3 и 4 можно избавиться, оставаясь в рамках изложенного здесь метода. Отказ от предположений 2, 3 позволил бы, например, изучить индуцированный электрическим полем переход изолятор — металл в рамках модели Адлера — Брукса. Попытка рассмотреть для ПМР случай, обратный случаю (A), была сделана в работе [108], однако, на наш взгляд, этот вопрос нуждается в дальнейшем выяснении.

Предположение 4 не позволяет изучать лавинный пробой, туннельный пробой и другие эффекты, обусловленные влиянием изменения n в зависимости от E на распределение носителей тока по энергиям (или по k_{\perp}). Однако в случае ПМР эти эффекты вряд ли будут играть существенную роль. Впрочем, их можно легко учесть, включив в рассмотрение рекомбинационно-генерационный член в сильном электрическом поле.

На первый взгляд рецепт вычисления тока по формулам (IV. 40), (IV. 45) и (IV. 47) весьма далек от привычной схемы рассмотрения с помощью уравнения переноса. Однако это не так. В работе [55] показано, что при произвольной ширине разрешенной зоны и произвольной силе связи с фононами, но в рамках предположений 1—4, изложенная выше схема эквивалентна следующему рецепту вычисления тока:

$$j_x = en \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) v_x^{\text{эфф}}(\mathbf{k}), \quad (\text{IV. 67})$$

где $f(\mathbf{k})$ имеет смысл функции распределения, нормированной на единицу, и удовлетворяет квантовому уравнению переноса

$$\frac{eE}{\hbar} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial k_x} = \sum_{\mathbf{k}'} \{W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{k}') - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k})\}, \quad (\text{IV. 68})$$

в котором вероятности перехода $W(k', k)$ определены следующим образом:

$$W(k', k) = \lim_{\kappa \rightarrow 0} W(k', k; \kappa), \quad (IV. 69)$$

$$W(k', k; \kappa) =$$

$$= \frac{1}{N_x^2} \sum_{\substack{X_{m_1}, X_{m_2}, \\ X_{m_3}, X_{m_4}}} W_{X_{m_1}, X_{m_2}, X_{m_3}, X_{m_4}}^{X_{m_1}, X_{m_2}}(k'_\perp, k_\perp) \exp \{ ik'_x (X_{m_1} - X_{m_2}) - ik_x (X_{m_3} - X_{m_4}) \} \times \\ \times \exp \left\{ -i \frac{\kappa x}{2} (X_{m_1} + X_{m_2} - X_{m_3} - X_{m_4}) - \right. \\ \left. - i\chi \left(k' + \frac{\kappa}{2} \right) + i\chi \left(k' - \frac{\kappa}{2} \right) + i\chi \left(k + \frac{\kappa}{2} \right) - i\chi \left(k - \frac{\kappa}{2} \right) \right\}. \quad (IV. 70)$$

Рецепт вычисления вероятностей $W_{X_{m_1}, X_{m_2}, X_{m_3}, X_{m_4}}^{X_{m_1}, X_{m_2}}(k'_\perp, k_\perp)$ был сформулирован в § 2. Величина $v_x^{\text{эфф}}(k)$ имеет размерность скорости и равна

$$v_x^{\text{эфф}}(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k_x} - i \lim_{\kappa \rightarrow 0} \sum_{k'} \frac{\partial}{\partial \kappa_x} W(k, k'; \kappa), \quad (IV. 71)$$

где $\varepsilon(k)$ — энергия квазичастицы (электрона, полярона и т. п.).

Уравнение (IV. 68) внешне похоже на кинетическое уравнение Больцмана, но не совпадает с ним, поскольку вероятности $W(k', k)$ *) учитывают влияние электрического поля на акт соударения. При суммировании ряда (IV. 70) и подстановке его в (IV. 68) возникает *интегральное по времени* уравнение переноса, которое в случае слабой связи совпадает с уравнением, приведенным в [95]. Только при не слишком сильном электрическом поле и в первом борновском приближении по рассеянию уравнение (IV. 68) переходит в кинетическое уравнение.

В [56] показано, что первый член в $v_x^{\text{эфф}}$ ответствен за туннельный вклад в ток, а второй — за перескоковый. В случае слабой связи с фононами второй член дает нулевой вклад.

*) Можно показать [55], что вычисление $W(k', k)$ по формуле (IV. 70) эквивалентно использованию графической техники КП, только каждой электронной линии, выходящей (входящей) из точки на контуре, надо сопоставлять не $\exp \left\{ \pm \frac{i}{\hbar} \varepsilon(k) t \right\}$, а множитель $\exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \varepsilon \left(k + \frac{eE}{\hbar} \tau \right) \right]$,

причем для разных точек, не связанных фононной линией и разнесенных вдоль контура на время t , закон сохранения по электронным импульсам приобретает вид $\delta_{k', k + \frac{eE}{\hbar} t}$ (точка k' расположена правее по контуру, чем k). Фактически это означает, что в сильном электрическом поле вероятности рассеяния $W(k', k)$ следует рассчитывать не на блоховских функциях, а на функциях Хаустона [103] (ср. с [101], где функции Хаустона использовались для вычисления вероятности межзонных переходов).

Перечислим теперь вкратце основные результаты, полученные применительно к случаю поляронов малого радиуса.

I. В сильном электрическом поле, так же как и в слабом, электропроводность в области промежуточных и высоких температур состоит из двух вкладов: перескокового (IV.59) и туннельного (IV.62).

II. Вначале перескоковый вклад растет с ростом E , но при $E > E_{\max}$ он начинает убывать, что приводит к отрицательной дифференциальной проводимости $\partial j / \partial E = 0$. Значение E_{\max} зависит от E_a и ширины исходной зоны (см. рис. 4 в [56]) и должно удовлетворять условиям (A) и (IV.7).

III. Туннельный вклад в подвижность при $\Omega_E \tau > 1$ убывает, что также приводит к отрицательным $\partial j / \partial E$. Зависимость j от E не монотонна. Немонотонности наблюдаются при выполнении резонансного условия $M\Omega_E = N\omega_0$, где $M, N = 1, 2 \dots$. При $\Omega_E > \omega_0 > 1/\tau$ в резонансе наблюдается максимум $\sigma_t(E)$. С понижением температуры отношение величины осцилляций к фону должно убывать.

IV. Если измерение σ в слабых электрических полях проводилось в той области температур, где туннельный вклад превалировал над перескоковым ($\sigma_h < \sigma_t$), то с ростом E соотношение между $\sigma_h(E)$ и $\sigma_t(E)$ может измениться на обратное. Итак, измерения в сильных электрических полях могут помочь выявить перескоковый механизм подвижности.

V. В области низких температур, где реализуется перенос по узкой поляронной зоне ($\Delta E_p < \hbar\omega_0$), должна иметь место неаналитическая зависимость тока от поля вида [55, 79]

$$j \sim E^{1/2} e^{-E_0/E},$$

$$\text{где } E_0 \approx \frac{\hbar\omega_0 - \Delta E_p}{ea} \left(\frac{\hbar\omega_0 - \Delta E_p}{\Delta \tilde{E}} \right)^{1/2}, \quad \Delta \tilde{E} \approx \Delta E_p.$$

В [79] обсуждаются условия, при которых для ПМР может реализоваться N -образная вольтамперная характеристика.

ГЛАВА V

ЭФФЕКТ ХОЛЛА

§ 1. Вводные замечания

Теория эффекта Холла — это один из наиболее сложных вопросов в теории поляронов малого радиуса. Большой интерес, который он вызывает, обусловлен двумя причинами. Во-первых, экспериментальные данные по температурной зависимости холловской подвижности μ_H зачастую использовались для подтверждения или опровержения гипотезы о том, что носителями тока в данном веществе являются ПМР. Во-вторых, расчет μ_H в модели ПМР является принципиально важной теоретической задачей. В процессе ее решения удается расширить наши представления о влиянии магнитного поля на различные механизмы переноса и заложить основу для интуитивного понимания физических причин, обуславливающих возникновение эффекта Холла в других нестандартных ситуациях.

В общем случае связь между постоянной Холла R , холловской подвижностью μ_H , недиагональными компонентами антисимметричного тензора подвижности $\mu_{ij}^{(a)}$ ($i, j = x, y, z$) и дрейфовой подвижностью $\mu \equiv \mu_D$ для кубического кристалла при $\mathbf{H} \parallel z$ описывается соотношениями

$$\mu_H = cR\sigma = \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy}}{\mu}, \quad R = \frac{1}{H} \frac{\mu_{xy}}{\mu\sigma} = \frac{1}{enc} \frac{\mu_H}{\mu_D}. \quad (V. 1)$$

Для тетрагональных и гексагональных кристаллов существуют две холловские константы R_{\parallel} и R_{\perp} и две холловские подвижности $\mu_{H,\parallel}$ и $\mu_{H,\perp}$. Индекс \perp означает, что $\mathbf{j} \perp \mathbf{c}$, $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$ (где \mathbf{c} — ось четвертого или третьего порядков), а индекс \parallel соответствует случаю $\mathbf{j} \parallel \mathbf{c}$, $\mathbf{H} \perp \mathbf{c}$.

Привычные соотношения

$$R \approx \frac{1}{enc}, \quad \mu_H \approx \mu_D \quad (V. 2)$$

являются следствием лоренцевой корреляции между x - и y -компонентами скорости электрона, движущегося в широкой разрешенной зоне. В этом случае из кинетического уравнения получим

$$\mu_{xy} \approx \mu\Omega\tau \approx \mu \frac{\mu H}{c}, \quad (V. 2a)$$

где τ — время релаксации, Ω — ларморова частота. Подставляя (V. 2a) в (V. 1), приходим к (V. 2).

Однако кинетическое уравнение применимо лишь при $\hbar/\tau kT < 1$, если $\Delta\epsilon > kT$ или при $\hbar/\tau\Delta\epsilon < 1$, если $\Delta\epsilon < kT$ (здесь $\Delta\epsilon$ — ширина разрешенной зоны для квазичастиц). Для ПМР эти неравенства выполняются только при очень низких температурах. В гл. I этой части было показано, что при $H = 0$ в области промежуточных и высоких температур транспортное уравнение для поляронов малого радиуса не имеет ничего общего с кинетическим уравнением Больцмана, и поэтому здесь можно ожидать новых необычных результатов для эффекта Холла.

Начиная с 1963 г., т. е. после появления первых работ [33, 34, 35] по теории эффекта Холла для ПМР, независимо возникли и стали параллельно развиваться два различных подхода к решению задачи. Первый подход, основы которого были заложены в [34, 35], более нагляден, но не строг. Второй подход, которого мы придерживаемся в настоящей главе, более формальный, но зато строгий. Возможности первого подхода ограничены интуицией исследователя, поскольку фактически требуется заранее угадать результат. Это удалось сделать в двух предельных случаях: высоких и низких температур*). Однако обширная область промежуточных температур, в которой реализуется механизм туннельного просачивания, вообще не была замечена в рамках такого полунтуитивного подхода. Все существующие в настоящее время результаты для этой области температур получены с помощью второго более строгого подхода, основанного на методе матрицы плотности.

Если подвести итоги более чем десятилетнего периода исследований вопроса об эффекте Холла, то можно сказать, что оба подхода, и формальный, и полунтуитивный, оказались плодотворными и взаимно друг друга дополняющими.

В области достаточно низких температур (режим узких зон) формулы для $\mu_{xy}^{(a)}$, независимо полученные в [33] и [34], совпадают с точностью до численных множителей**):

$$\mu_{xy} \approx \mu \frac{\mu_H}{c} \frac{kT}{\Delta\epsilon_p}, \quad \frac{\mu_H}{\mu_D} \approx \frac{kT}{\Delta\epsilon_p}. \quad (\text{V. 3})$$

*) В случае высоких температур авторы [35] исходили из гипотезы о том, что перенос должен осуществляться посредством марковских случайных блужданий, и дополняли эту, по сути дела, классическую картину квантовомеханическими соображениями о влиянии магнитного поля на прыжки через посредство зависящих от H фазовых множителей в электронной части волновой функции (см. § 17 в I части книги). В случае же низких температур предполагалось [34], что должен иметь место перенос по узкой (поляронной) зоне, который можно описать с помощью уравнения Больцмана, а действие магнитного поля связать только с силой Лоренца.

**) В обеих работах приведены неверные численные множители. Правильный численный множитель впервые получен в [114] (см. формулу (V. 103) настоящей главы). При сравнении формулы (С. 6) (с учетом (4.3)) из [34]

Первые по-настоящему нетривиальные результаты были получены в области высоких температур (режим перескоков). Для гексагональных кристаллов (при $\mathbf{H} \parallel c_3$) в пределе малых J Фридман и Холстейн [35] нашли

$$\begin{aligned} \mu_{xy} &\sim \frac{J^3}{T^2} \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{E_a}{kT}\right), & \mu_H &\sim \frac{J}{T^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{3} \frac{E_a}{kT}\right), \\ \frac{\mu_H}{\mu_D} &\approx \frac{kT}{J} \exp\left(\frac{2}{3} \frac{E_a}{kT}\right) \gg 1. \end{aligned} \quad (\text{V. 4})$$

Эти же результаты были впоследствии [57] получены с помощью формулы Кубо *).

Первые результаты для кубических кристаллов, справедливые в области не слишком высоких температур $kT < E_a(2 - \delta)(1 - \delta^{-1})^{**}$ и в пределах малых J , были получены не методом Холстейна, а с помощью формулы Кубо [58]

$$\begin{aligned} \mu_{xy} &\sim \frac{J^1}{T^2} \exp\left(-\delta \frac{E_a}{kT}\right), & \mu_H &\sim \frac{J^2}{T^{1/2}} \exp\left(-(\delta - 1) \frac{E_a}{kT}\right), \\ \frac{\mu_H}{\mu_D} &\sim \frac{kT}{E_a} \exp\left((2 - \delta) \frac{E_a}{kT}\right). \end{aligned} \quad (\text{V. 5})$$

Здесь $\delta = (1 - E'_a/4E_a)^{-1}$, E_a и E'_a — энергии активации для прыжков вдоль ребра и вдоль диагонали грани кубической ячейки соответственно. Можно показать [58, 110], что $2 > \delta > 4/3$. Впоследствии результаты (V.5) были повторены Эминым [61], использовавшим наглядный подход Холстейна — Фридмана.

Напомним, что в методе Холстейна — Фридмана в основу всех вычислений j_h — вклада в холловский ток за счет перескоков — положена формула (17.39) из I части книги. Вычислять j_h по формуле (17.39) гораздо удобнее и намного короче, чем путем распутывания формулы Кубо. Например, с помощью (17.39) впервые удалось вычислить $\mu_H^{(h)}$ для гексагональных кристаллов для $\mathbf{H} \parallel c_3$ при произвольных η_2 [60]. Повторить этот результат с помощью формулы Кубо пока не удалось.

с формулой (32) из [33] следует иметь в виду, что в [33] принято обозначение $u_3 = \frac{ea^2}{\hbar} \frac{\Delta \epsilon_p}{kT}$, в то время как в настоящем обзоре положено $u_3 = ea^2/\hbar$.

*) В более ранних работах, основанных на формуле Кубо для $\sigma_{xy}^{(a)}(\mathbf{H})$ ссылки на которые приведены в I части книги и в [57], разными авторами были получены результаты, не совпадающие с (V.4) и к тому же резко отличающиеся между собой. Как показано в [57], эти расхождения не носят принципиального характера и связаны с недостаточной точностью тех приближений, которые были использованы при вычислении многократных интегралов, возникающих при распутывании формулы Кубо.

***) Результаты для μ_{xy} и μ_H , справедливые в более широком интервале высоких температур, были впоследствии независимо получены в [59 и 61] (см. §§ 7, 8 настоящей главы).

Однако из-за того, что Фридман и Холстейн не дали строгого вывода формулы (17.39), они не смогли сформулировать пределы применимости такого подхода. Совпадение результатов вычисления μ_{xy} с помощью (17.39) и с помощью формулы Кубо в пределе малых J (о чем говорилось выше), конечно, не может служить доказательством справедливости (17.39) в общем случае. Интересно было бы выяснить, при каких минимальных ограничениях на величины J и γ можно вывести (17.39) из формулы Кубо. Однако все попытки выполнить эту программу окончились неудачей из-за больших методических трудностей. Все дело в том, что переход в представление дипольных моментов (подобно тому, как это было сделано в гл. I для диагональных компонент тензора проводимости) в выражении для $\sigma_{xy}^{(a)}$ не столь конструктивен, как для σ_{xx} , и построить столь же общее описание, как в случае $H = 0$, на таком пути не удалось.

Существенный сдвиг в вопросе об эффекте Холла в теории ПМР произошел лишь после появления общей теории гальваномагнитных эффектов, развитой в [111, 112]. Формула вида (17.39) была получена в [113] из общих принципов, и были установлены пределы ее применимости.

Хотя упоминания о неизбежности существования туннельного вклада $\mu_{xy}^{(t)}$ в той или иной форме встречались еще в [33, 57], замкнутое выражение для $\mu_{xy}^{(t)}$ было впервые получено в [113, 114]. При этом выяснилось, что $\mu_{xy}^{(t)}$ можно представить в виде суммы двух вкладов: нелоренцевского $\mu_{xy, \text{нл}}^{(t)}$ и квазилоренцевского $\mu_{xy, \text{кл}}^{(t)}$. Квазилоренцевский вклад $\mu_{xy, \text{кл}}^{(t)}$ пропорционален τ^2 . Обычно такой результат получается в том случае, когда действие магнитного поля описывается силой Лоренца (ср. с (V. 2a)), однако в $\mu_{xy, \text{кл}}^{(t)}$ дополнительно учтены зависящие от H поправки к скорости полярона, возникающие при перенормировке за счет полярон-фононного взаимодействия. Нелоренцевский вклад $\mu_{xy, \text{нл}}^{(t)}$ оказался пропорциональным первой степени τ , он целиком обусловлен воздействием магнитного поля на вероятности туннельного просачивания.

Для удобства последующего изложения и в соответствии с [57] разобьем весь температурный диапазон изменения μ_{xy} и μ_H на четыре области.

Область I ($0 < T < T'_1$): поляронно-зонный режим, кинетика поляронов описывается уравнением Больцмана, действие магнитного поля определяется силой Лоренца.

Область II ($T'_1 < T < T'_2$): режим узких зон, рассеяние слабое, применимо кинетическое уравнение, действие магнитного поля описывается только силой Лоренца, но $\mu_H \neq \mu_r$.

Область III ($T'_2 < T < T'_3$): понятие о поляронной зоне утратило свой смысл. По аналогии со случаем $H = 0$, разобранным в гл. I, основной механизм переноса в области III назовем

туннельным просачиванием, а соответствующие вклады в μ_{xy} и μ_H обозначим $\mu_{xy}^{(t)}$, $\mu_H^{(t)}$ *). Область III может быть довольно широка.

Область IV ($T > T'_3$): роль основного механизма переноса здесь играют перескоки. Влияние магнитного поля не описывается классической силой Лоренца и имеет чисто квантовомеханическую природу (см. ниже и § 17 в I части книги). Соответствующие вклады обозначим $\mu_H^{(h)}$, $\mu_{xy}^{(h)}$.

Температура T'_3 определяется из условия (ср. с определением (II.5) для T_3)

$$\mu_{xy}^{(t)}(T'_3) = \mu_{xy}^{(h)}(T'_3).$$

Вообще говоря $T'_3 \neq T_3$ и $T'_2 \neq T_2$. В общем случае в областях III и IV следует писать

$$\mu_{xy} = \mu_{xy}^{(t)} + \mu_{xy}^{(h)},$$

ибо на границе областей III и IV существенны оба вклада. По мере удаления от границы в глубь области IV роль первого члена ослабевает. При удалении от границы в сторону меньших T ослабевает роль второго члена.

Обычно при перескоковом режиме для $\mu_H^{(h)}$ используют формулу

$$\mu_H^{(h)} = \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy}^{(h)}}{\mu_h} \quad (V.6)$$

и соответственно для туннельного режима

$$\mu_H^{(t)} = \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy}^{(t)}}{\mu_t}. \quad (V.7)$$

Однако выражение для μ_H нельзя представить в виде простой суммы $\mu_H^{(t)} + \mu_H^{(h)}$, ибо

$$\mu_H = \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy}^{(t)} + \mu_{xy}^{(h)}}{\mu_t + \mu_h}. \quad (V.8)$$

Формулы (V.5) и (V.6) справедливы соответственно при $T > T'_3$, $T > T_3$ и $T < T'_3$, $T < T_3$. Если $T_3 \neq T'_3$, то минимумы числителя и знаменателя в (V.7) не совпадают, и величина μ_H может описываться двумя разными кривыми, изображенными на рис. 7. При $T'_3 < T_3$ имеет место случай, изображенный на рис. 7, а, т. е. существует область, где μ_H растет с ростом температуры. При $T'_3 \approx T'_{\max}$ (T'_{\max} — температура, при которой $\mu_{xy}^{(h)}$

*) Индекс В (Boltzman) будем использовать лишь при $T < T'_2$, когда для поляронов малого радиуса действительно применимо кинетическое уравнение Больцмана.

имеет максимум). области роста для μ_H вообще не будет (см. рис. 7, б), так как в этом случае рост $\mu_{xy}^{(h)}$ в интервале от T_0 до T'_3 полностью заэкранирован убыванием $\mu_{xy}^{(t)}$, а выше T'_{\max} убывает и сам вклад $\mu_{xy}^{(h)}$. В соответствии с принятым делением на области можно следующим образом условно классифицировать работы, посвященные теории эффекта Холла для ПМР:

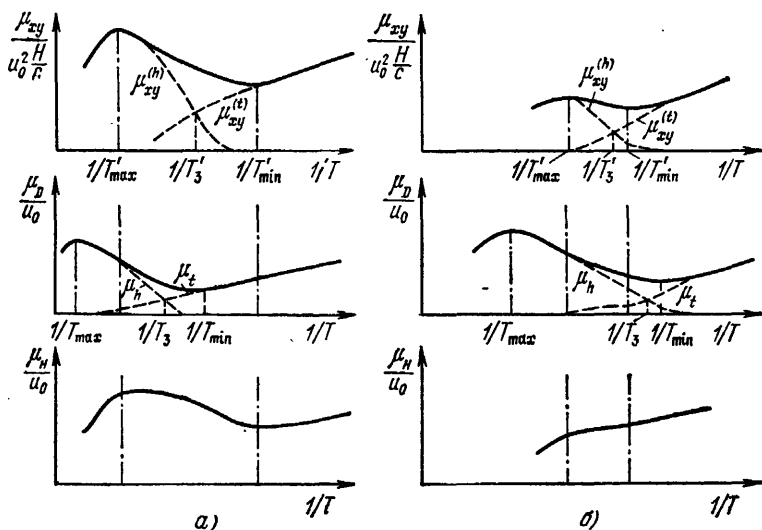


Рис. 7. Температурные зависимости холловской и дрейфовой подвижностей с учетом туннельного и перескокового вкладов.

в [33] была предпринята попытка исследовать весь температурный диапазон, в [34] изучалась область II; работа [35] и основная масса последующих теоретических работ, в том числе и [36, 57—61, 109, 110], посвящены исследованию области IV; хотя начало исследованию области III было положено еще в [33], все основные результаты, относящиеся к области III, получены в [113, 114].

В заключение этого параграфа кратко опишем план построения гл. V. В §§ 2—6 настоящей главы разработан математический аппарат, который в принципе позволяет решить задачу об эффекте Холла для любой ширины разрешенной зоны и при любой силе электрон-фононного взаимодействия. Выведено общее уравнение переноса в произвольных электрическом и магнитном полях. Описана процедура линеаризации этого уравнения по E и H , которая позволяет в обход формулы Кубо для $\sigma_{xy}^{(a)}$ получить замкнутые выражения для $\mu_{xy}^{(t)}$ и $\mu_{xy}^{(h)}$. Конкретные результаты для μ_{xy} и μ_H в теории ПМР описаны в §§ 7 и 8 соответственно.

§ 2. Постановка задачи о вычислении холловской подвижности

Можно показать [33, 35], что в присутствии магнитного поля резонансный интеграл $J(\mathbf{m} + \mathbf{g}, \mathbf{m}) \equiv J(\mathbf{g})$ приобретает дополнительный фазовый множитель (подробнее см. § 17 в I части)

$$J(\mathbf{m} + \mathbf{g}, \mathbf{m}) = J(\mathbf{g}) \exp[i\alpha(\mathbf{m} + \mathbf{g}, \mathbf{m})],$$

$\alpha(\mathbf{m} + \mathbf{g}, \mathbf{m}) = \frac{e}{2\hbar c} \mathbf{H} \cdot [\mathbf{m} \times \mathbf{g}] = A(\mathbf{m})\mathbf{g}$, а эффективный гамильтониан взаимодействия для ПМР (ср. с (1.42)) принимает вид

$$\mathcal{H}'_{\text{int}} = U' = \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{g}} J(\mathbf{g}) a_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}^+ a_{\mathbf{m}} \exp[\hat{S}(\mathbf{m} + \mathbf{g}) - \hat{S}(\mathbf{m})] \times \\ \times \exp[i\alpha(\mathbf{m} + \mathbf{g}, \mathbf{m})]. \quad (\text{V. 9})$$

Казалось бы, что дальше следует воспользоваться формулой Кубо для σ_{xy} и проводить все вычисления так же, как это делалось в гл. I для случая $\mathbf{H} = 0$, но только с заменой $U \rightarrow U'$. Однако, стремясь избежать тех вычислительных трудностей, о которых упоминалось в начале этой главы, мы воспользуемся другим методом [111—114], который в пределе слабых электрических полей фактически эквивалентен методу Кубо, но линеаризация по \mathbf{E} и \mathbf{H} производится в нем на самой последней стадии расчета. Это позволяет легко отделять линейные по \mathbf{H} поправки к вероятностям перехода от вкладов, обусловленных действием силы Лоренца, позволяет провести параллель с рассмотрением Фридмана и Холстейна [35] (см. § 17 в I части) и допускает более наглядное описание, хотя и не столь детальное, как в случае $\mathbf{H} = 0$.

Пренебрегая эффектами Штарка и Зеемана для всех атомов, образующих кристалл, запишем гамильтониан системы при наличии магнитного \mathbf{H} и электрического \mathbf{E} полей в виде (ср. с (IV. 3), (IV. 1))

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}' + \mathcal{H}_{\mathbf{E}}, \quad \mathcal{H}_{\mathbf{E}} = -e \sum_{\mathbf{m}} \mathbf{E} \mathbf{R}_{\mathbf{m}} a_{\mathbf{m}}^+ a_{\mathbf{m}}, \quad \mathcal{H}' = \mathcal{H}_{\text{ph}} + \mathcal{H}'_{\mathbf{e}} + \mathcal{H}'_{\text{int}}, \quad (\text{V. 10})$$

где $\mathcal{H}'_{\mathbf{e}}$ — исходный электронный гамильтониан при $\mathbf{H} \neq 0$ (см., например, (V. 18)), $\mathcal{H}'_{\text{int}}$ — гамильтониан взаимодействия при $\mathbf{H} \neq 0$ (см. (V. 9)). В случае ПМР в узельном представлении имеем

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}_0 + U', \quad (\text{V. 10a})$$

где \mathcal{H}_0 и U' описываются формулами (I. 41) и (V. 9) соответственно. Вычислим стационарную плотность тока $j_y = \frac{e}{V} \langle v_y(t) \rangle$ при $t \rightarrow \infty$, или, что то же самое,

$$j_y = \frac{e}{V} \lim_{s \rightarrow 0} s v_y(s) \simeq \lim_{s \rightarrow 0} (s) \frac{e}{V} \int_0^{\infty} e^{-st} \langle \rho(t) v_y(t) \rangle dt \quad (\text{V. 11})$$

(малые значения s отвечают большим временам).

Развитие матрицы плотности $\rho(t)$ во времени определим из уравнения Лиувилля, предполагая, что при $t < 0$ распределение было гиббсовским, а электрическое поле было включено при $t = 0$. Пренебрегая всяческими переходными процессами*), получим

$$\rho(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} t \mathcal{H}\right) \exp(-\beta \mathcal{H}') \exp\left(i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}\right).$$

Подставляя это выражение для $\rho(t)$ в (V. 11), имеем

$$j_y = \lim_{s \rightarrow 0} s \frac{e}{V} \int_0^{\infty} \exp(-st) \left\langle \exp(-\beta \mathcal{H}') \exp\left[\frac{i}{\hbar} t (\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)\right] v_y \times \right. \\ \left. \times \exp\left[-\frac{i}{\hbar} t (\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)\right] \right\rangle dt. \quad (\text{V. 12})$$

Если линейризовать подынтегральное выражение в (V. 12) по E, использовать соотношение [22]

$$[Y, \exp(-\beta \mathcal{H}')] = \frac{\hbar}{i} \exp(-\beta \mathcal{H}') \int_0^{\beta} v_y(-i\hbar\lambda) d\lambda$$

и проинтегрировать линейный по E член один раз по частям по t , то придем к формуле Кубо.

Однако мы отложим линейризацию по E до более позднего этапа вычислений и по аналогии с (IV. 26) представим (V. 12) в виде [111]:

$$j_y(s) = en \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \sum_{m, m'} (Y_{m'} - Y_m) M_{mm'}^{mm'}(s), \quad (\text{V. 13})$$

где $M_{mm'}^{mm'}$ — диагональная по узельным индексам ($m_1 = m_2 = m$, $m_3 = m_4 = m'$) часть блока**)

$$M_{m_2, m_4}^{m_1, m_3}(s) = \frac{1}{Z_0 N_e} \int_0^{\infty} dt \exp(-st) \left\langle \exp(-\beta \mathcal{H}') \exp\left[\frac{i}{\hbar} t (\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)\right] \times \right. \\ \left. \times a_{m_4}^+ a_{m_2} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} t (\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)\right] a_{m_1}^+ a_{m_3} \right\rangle, \quad (\text{V. 14})$$

который следующим образом преобразуется при трансляции:

$$M_{m_2, m_4}^{m_1, m_3} = M_{m_2, m_4}^{m_1, m_3} \exp\{-iA(m)(m_1 - m_2 + m_4 - m_3)\}. \quad (\text{V. 15})$$

*) В гл. IV отмечалось, что можно использовать различные процедуры включения поля. Однако по прошествии достаточно большого отрезка времени после включения развитие системы во времени не должно зависеть от начальной стадии включения. В линейном по E приближении можно строго доказать, что все способы включения приводят к одинаковым результатам.

**) В отличие от функции $M_{mm'}^{mm'}$, использовавшейся в гл. I (см. (I. 55)), функция $M_{m_2, m_4}^{m_1, m_3}$, определенная согласно (V. 14), нормирована на один электрон.

Это свойство вытекает из инвариантности полного гамильтониана \mathcal{H} (с точностью до константы) по отношению к оператору трансляции $T(\mathbf{m})$

$$T^+(\mathbf{m})\mathcal{H}T(\mathbf{m}) = \mathcal{H} - e\mathbf{E}\mathbf{m}, \quad (\text{V. 16})$$

где

$$\begin{aligned} T(\mathbf{m}) &= T_{\text{ph}}(\mathbf{m})T_e(\mathbf{m})T_{\text{H}}(\mathbf{m}); \\ T_{\text{H}}(\mathbf{m}) &= \exp\left[im\sum_{(\mathbf{m}')} \mathbf{A}(\mathbf{m}')a_{\mathbf{m}'}^+a_{\mathbf{m}'}\right], \\ T_e(\mathbf{m}) &= \exp\left[im\sum_{\mathbf{k}} ka_{\mathbf{k}}^+a_{\mathbf{k}}\right]; \quad T_{\text{ph}}(\mathbf{m}) = \exp\left[im\sum_{\mathbf{q}} qb_{\mathbf{q}}^+b_{\mathbf{q}}\right]. \end{aligned} \quad (\text{V. 17})$$

Исходный гамильтониан Фрелиха в магнитном поле можно по-прежнему записать в виде (I. 20) или (I. 20а), следует лишь заменить второй член в них на

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_e &= \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'} a_{\mathbf{m}}^+a_{\mathbf{m}'}J(\mathbf{m}-\mathbf{m}')\exp(i\mathbf{A}(\mathbf{m}')\mathbf{m}) \equiv \\ &\equiv \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{m}} a_{\mathbf{k}}^+a_{\mathbf{k}+\mathbf{A}(\mathbf{m})}\exp(-ik\mathbf{m})J(\mathbf{m}). \end{aligned} \quad (\text{V. 18})$$

Он обладает свойством (V. 16). Условию трансляционной инвариантности удовлетворяет и поляронный гамильтониан, как в узельном представлении (т. е. в виде (I. 42) с учетом замены $U \rightarrow U'$), так и в \mathbf{k} -представлении (т. е. в виде (I. 36) — (I. 38), но с учетом замены $\mathcal{H}_e \rightarrow \mathcal{H}'_e$, согласно (V. 18), в (I. 37а) и замены $J(\mathbf{g}) \rightarrow J(\mathbf{g})\exp\{i\alpha(\mathbf{m}+\mathbf{g}, \mathbf{m})\}$ в (I. 38)).

После перехода к импульсному представлению целесообразно привести (V. 13) к виду

$$j_y = -ien \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{\partial}{\partial \kappa_y} M(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \kappa, \eta; s) \Big|_{\kappa=0, \eta=0}, \quad (\text{V. 19})$$

где

$$\begin{aligned} M(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \kappa, \eta; s) &\equiv M_{\mathbf{k}+\frac{\kappa+\eta}{2}, \mathbf{k}'-\frac{\kappa}{2}}^{\mathbf{k}-\frac{\kappa+\eta}{2}, \mathbf{k}'-\frac{\kappa}{2}}(s) = \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{\{\mathbf{m}\}} M_{\mathbf{m}_2, \mathbf{m}_4}^{\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_3} \exp\left[ik(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2) - ik'(\mathbf{m}_3 - \mathbf{m}_4) - \right. \\ &\quad \left. - i\frac{\kappa}{2}(\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_3 - \mathbf{m}_4) - i\frac{\eta}{2}(\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2)\right]. \end{aligned} \quad (\text{V. 20})$$

Оказывается, что такой выбор четырех независимых \mathbf{k} обладает важными преимуществами (см. ниже и в [111]). Теперь можно строить графическую технику в \mathbf{k} -представлении для вычисления и перескокового и туннельного вкладов в холловскую подвижность. Однако мы предварительно очень нестрогим методом получим формулу для $j_y^{(h)}$ в узельном представлении.

§ 3. Приближенный способ нахождения перескокового вклада в μ_{xy} для ПМР

Описанный ниже прием позволяет получить μ_{xy} только с точностью до членов порядка $\exp(-S_T)$, однако он намного проще, чем более строгий метод, основанный на анализе формулы (V. 19). Включим \mathcal{H}_E в нулевой гамильтониан, т. е. заменим \mathcal{H}_0 на

$$\mathcal{H}'_0 = \sum_q \hbar \omega_q \left(b_q^+ b_q + \frac{1}{2} \right) - e \sum_m \mathbf{E} R_m a_m^+ a_m$$

и обобщим графическую технику, развитую в гл. I (см. Приложение 2) и в гл. IV на случай $H \neq 0$. При этом получаются такие же графические правила, за тем лишь исключением, что каждой паре точек $(\mathbf{m}_l + \mathbf{g}_l, \mathbf{m}_l)$, расположенной на временных отрезках контура C нужно приписать дополнительный множитель

$$\exp[ia(\mathbf{m}_l + \mathbf{g}_l, \mathbf{m}_l)] \exp\left[-i \frac{t}{\hbar} e \mathbf{E} \mathbf{g}_l\right], \quad (\text{A})$$

а паре точек $(\mathbf{m}_p + \mathbf{g}_p, \mathbf{m}_p)$ на мнимом отрезке контура C дополнительный множитель

$$\exp[ia(\mathbf{m}_p + \mathbf{g}_p, \mathbf{m}_p)]. \quad (\text{A}')$$

Правила написания фононных сверток не меняются. По аналогии с (I. 95a) приближенно представим $M_{mm'}^{mm'}$ (s) в виде

$$M_{mm'}^{mm'}(s) \approx \sum_{m_1} \Gamma_{mm_1}^{mm_1} P_{m_1 m'}^{m_1 m'}(s). \quad (\text{V. 21})$$

Блоки $\Gamma_{mm_1}^{mm_1}$ определены так, что соответствующие им графики не содержат внутри себя ни свободных сечений типа $1/s$, ни «квазисвободных» сечений (см. гл. IV).

Компоненты $P_{m_1 m'}^{m_1 m'}$ функции условной вероятности во внешних полях по аналогии с (I. 57) определяются соотношениями вида

$$P_{m_1 m'}^{m_1 m'}(s) = \frac{1}{\text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}_{ph}})} \int_0^\infty e^{-st} dt \langle 0 | a_{m_1}, \text{Sp} \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}_{ph}) \times \right. \\ \left. \times \exp\left[i \frac{t}{\hbar} (\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)\right] a_m^+ a_m \exp\left[-i \frac{t}{\hbar} (\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)\right] \right\} a_{m_1}^+ | 0 \rangle. \quad (\text{V. 22})$$

Шпур здесь берется только по фононным переменным. При $E \rightarrow 0$ (V. 22) переходит в (I. 57), в которой положено $m_1 = m_2$.

Для диагональных компонент P в присутствии электрического и магнитного полей получается упрощенная система уравнений, весьма напоминающая (I. 65):

$$s P_{mm'}^{mm'}(s) = \delta_{m, m'} + \sum_{m_1} W_{mm_1}^{mm_1} P_{m_1 m'}^{m_1 m'}(s). \quad (\text{V. 23})$$

Однако W здесь зависят от электрического и магнитного полей. С точностью до экспоненциально малых членов $\approx \exp(-S_T)$ (именно таков порядок малости недиагональных Γ и W) имеем

$$j_y \approx en \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \sum_{m, m'} (Y_{m'} - Y_m) \sum_{m''} \Gamma_{mm''}^{mm''} P_{m''m'}^{m''m'}(s). \quad (V. 24)$$

Поскольку все поправки к величинам $\Gamma_{mm''}^{mm''}$ и $W_{mm''}^{mm''}$ первого порядка по H , но нулевого порядка по E равны нулю, мы будем интересоваться лишь поправками, которые одновременно линейны и по E и по H , припишем им надстрочный индекс (1) и пред-

ставим сумму по m'' в (V. 24) в виде суммы двух членов: ΓP и ΓP . Используя тот факт, что $P_{m''m'}^{m''m'}(s)$ зависит лишь от разности $m' - m'' = G$, перейдем в члене ΓP от суммирования по m, m' и m'' к суммированию по m, G и m'' и представим его в виде

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \sum_{m, m'} \sum_G (G_y + Y_{m'} - Y_m) \Gamma_{mm''}^{mm''(0)} P(G) = \\ = \lim_{s \rightarrow 0} s \sum_{m, m''} \Gamma_{mm''}^{mm''(1)} (Y_{m'} - Y_m). \quad (B) \end{aligned}$$

При выводе использовался тот факт, что $\sum_G G P(G) = 0$ и $\sum_G P(G) = 1/s$. Поскольку $\Gamma_{mm''}^{mm''(1)}$ по определению не содержит расходимостей вида $1/s$, а сумма в (B) конечна, то в пределе $s \rightarrow 0$ вклад типа ΓP равен нулю.

Перейдем теперь к вычислению вклада ΓP . Используя для $M_{mm''}^{mm''}(s)$ выражения (V. 14) и (V. 21), а для $P_{m''m'}^{m''m'}$ соотношение (V. 22) и суммируя по m' с точностью до членов порядка $\exp(-S_T)$, получим, по аналогии с (I. 100)

$$\sum_{m'} M_{mm''}^{mm''}(s) \approx \sum_{m', m_1} \Gamma_{mm_1}^{mm_1} P_{m''m'}^{m''m'} \approx \frac{1}{sN}.$$

Из (V. 24) следует, что $\sum_{m'} P_{m''m'}^{m''m'} = \frac{1}{s}$, поэтому по аналогии с (I. 101) имеем

$$\sum_{m_1} \Gamma_{mm_1}^{mm_1} \approx \frac{1}{N}. \quad (V. 25)$$

В отсутствие внешнего электрического поля $\Gamma_{mm_1}^{mm_1(0)}$ зависит лишь от $m - m_1$. Поэтому из (V. 25) следует, что $\Gamma_{mm_1}^{mm_1(0)} \approx \frac{1}{N^2}$, и (V. 24) принимает вид

$$j_y^{(h)} = en \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \frac{1}{N} \sum_{m, m'} (Y_{m'} - Y_m) P_{m, m'}^{m, m'}(s). \quad (V. 26)$$

Функция $P_{mm'}^{(1)mm'}$ (s) может быть найдена с нужной нам степенью точности из системы (V. 23), если заменить $W_{mm'}^{mm'}$ на $W_{mm'}^{(1)mm'}$. Соответствующее уравнение будет описывать случайные блуждания полярона малого радиуса в решетке за счет классических перескоков в скрещенных магнитном и электрическом полях *).

Можно показать, что $W_{mm'}^{(1)mm'}$ зависит от разности $(m - m_1)$, поэтому способ решения уравнения (V. 23) для P такой же, как в § 5 гл. I. Поэтому (V. 26) приводится к виду

$$j_{\nu}^{(h)} = en \frac{1}{N} \sum_{m, m'} (Y_{m'} - Y_m) W_{mm'}^{(1)mm'}. \quad (V. 27)$$

На первый взгляд (V. 27) совпадает с (17.39) из I части книги. Следует, однако, иметь в виду, что при $H \neq 0$ рецепт вычисления $W_{mm'}^{(1)mm'}$ фактически остается таким же, как и в Приложении 2, поскольку дополнительные правила (A) и (A') не отражаются на топологии графиков. Поэтому в $W_{mm'}^{(1)mm'}$ дают вклад не только «скелетные диаграммы», в которых фононным связкам сопоставляются функции $Z_{ik} = Z_{ik} - 1$, но и «приводимые диаграммы», содержащие внутри себя «пустые точки», и встроенные диаграммы, не связанные фононными связками со скелетным остовом. В (17.39) содержатся только вклады, соответствующие «скелетным диаграммам». Поэтому формулы (17.39) и (V. 27) отличаются. В области высоких T это отличие не очень существенно, но в области промежуточных температур его учитывать следует, ибо вклад, обусловленный этим отличием, может оказаться сравнимым с туннельным. В конце § 6 показано, как ликвидируется это различие при более строгой постановке задачи, при которой удается одновременно определить и прыжковый, и туннельный вклады.

Несмотря на то, что нам удалось с известными оговорками (см. выше) найти j_h , рассчитать по той же схеме (т. е. подобно тому, как это делалось при $H = 0$ в §§ 6, 8 гл. I) туннельный вклад j_t при $H \neq 0$ не удастся, ибо вероятности недиагональных переходов в узельном представлении не обладают свойством трансляционной инвариантности (см. (V. 15)). Поэтому мы должны стремиться найти такое представление, которое не страдает отмеченным выше недостатком. Сделать это удобнее всего, если исходить из формулы (V. 19) для тока в k -представлении. Займемся теперь анализом величины $M_{k_1 k_2}^{k_1 k_2}$, входящей в (V. 19).

*) Напомним, что зависимость W от H имеет неклассическую природу. Тем не менее мы называем надбарьерные перескоки в скрещенных полях классическими для того, чтобы подчеркнуть их отличие от квантовомеханических процессов туннельного просачивания.

§ 4. Вывод обобщенного кинетического уравнения переноса в произвольных магнитном и электрическом полях [111]

По аналогии со случаем $E=0, H=0$ (см. Приложение 6) можно ожидать, что $M_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}$ представится в виде

$$M_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(s) = \sum_{k, k'} \Gamma_{k_2 k}^{k_1 k'} P_{k' k_4}^{k k_3}(s), \quad (V. 28)$$

где $\Gamma_{k_2 k}^{k_1 k'}$ — «вершина», а $P_{k' k_4}^{k k_3}(s)$ удовлетворяет уравнению типа Дайсона

$$P_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(s) = \mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(s) + \sum_{k_5 k_6 k_7 k_8} P_{k_2 k_6}^{k_1 k_5}(s) W_{k_6 k_5}^{k_8 k_7} \mathcal{P}_{k_8 k_4}^{k_3 k_7}(s). \quad (V. 29)$$

Вероятность W определяется в соответствии с графическим рецептом, описанным в Приложении 9. Функция $\mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(s)$ соответствует свободному сечению при $E \neq 0, H \neq 0$ и определяется уравнением вида (П.9.5). Желательно придать задаче такой же вид, как и в случае $H=0$. Для этого необходимо перейти от описания, при котором каждая «двухчастичная» функция зависит от четырех индексов k_1, k_2, k_3, k_4 к вигнеровскому представлению (kk', κ) , которое формально восстанавливает трансляционную симметрию. Для этого используем следующий рецепт [111]. Положим

$$M(kk', \kappa, s) = \frac{1}{N} \sum_{\kappa', \eta, m'} \exp[i(\kappa - \kappa')m'] M(k, k' + A(m'); \kappa', \eta; s). \quad (V. 30)$$

Аналогичные соотношения имеют место для $P(k, k', \kappa, s)$, $\Gamma(k, k', \kappa)$ и $W(k, k', \kappa)$.

Тогда в вигнеровском представлении выражение (V. 19) перепишется в виде

$$j_y = -ien \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \frac{\partial}{\partial \kappa_y} \sum_{k, k'} M(k, k', \kappa, s) \Big|_{\kappa=0}. \quad (V. 31)$$

При этом соотношение (V. 28) примет вид *)

$$M(k, k', \kappa, s) = \sum_{k_1} \Gamma(k, k_1, \kappa) P(k_1, k', \kappa, s), \quad (V. 28a)$$

*) Важным свойством вигнеровского представления (V. 30) является то, что оно «диагонализует» матричное произведение типа

$$A_{k_2 k_4}^{k_1 k_3} = \sum_{k, k'} B_{k_2 k}^{k_1 k'} C_{k' k_4}^{k k_3}, \quad (A)$$

т. е. переводит его в

$$A(k, k', \kappa) = \sum_{k_1} B(k, k_1, \kappa) C(k_1, k', \kappa). \quad (A')$$

Здесь B, C (а следовательно, и A) — произвольные матрицы, удовлетворяющие условиям типа $B(k, k', \kappa, \eta) = B(k + A(m), k' + A(m), \kappa, \eta) e^{i\eta m}$ и т. д., которые соответствуют свойству (V. 15), записанному в k -представлении. Воз-

а для $P(k, k', \kappa, s)$ получится уравнение

$$P(k, k', \kappa, s) = \mathcal{P}(k, k', \kappa, s) + \sum_{k_1, k_2} P(k, k_1, \kappa, s) \mathcal{W}(k_1, k_2, \kappa) \mathcal{P}(k_2, k', \kappa, s), \quad (\text{V. 32})$$

или, что то же самое,

$$P(k, k', \kappa, s) = \mathcal{P}(k, k', \kappa, s) + \sum_{k_1, k_2} \mathcal{P}(k, k_1, \kappa, s) \mathcal{W}(k_1, k_2, \kappa) P(k_2, k', \kappa, s). \quad (\text{V. 32a})$$

Соответствующая «свободному сечению» функция $\mathcal{P}(k, k', \kappa, s)$ будет определяться (см. Приложение 9) из уравнений вида

$$\{s + \hat{I}(k_2, \kappa; \mathbf{H})\} \mathcal{P}(k_1, k_2, \kappa, s) = \delta_{k_1, k_2}, \quad (\text{V. 33})$$

или

$$\{s + \hat{I}(k_1, \kappa; \mathbf{H})\} \mathcal{P}(k_1, k_2, \kappa, s) = \delta_{k_1, k_2}, \quad (\text{V. 33a})$$

где

$$\hat{I}(k, \kappa; \mathbf{H}) = \frac{eE}{\hbar} \frac{d}{dk} - \frac{i}{\hbar} \left\{ \varepsilon \left(k + \frac{\kappa}{2} + \mathbf{A}(i\nabla_k) \right) - \varepsilon \left(k - \frac{\kappa}{2} - \mathbf{A}(i\nabla_k) \right) \right\}, \quad (\text{V. 33б})$$

$$\mathbf{A}(i\nabla_k) = i \frac{e}{2\hbar c} [\mathbf{H} \times \nabla_k], \quad \varepsilon(k) = \sum_m J(m) e^{-imk}.$$

Применяя операторы $s + \hat{I}(k', \kappa; \mathbf{H})$ к (V. 32) и $s + \hat{I}(k, \kappa; \mathbf{H})$ к (V. 32a), получим

$$[s + \hat{I}(k', \kappa; \mathbf{H})] P(k, k', \kappa, s) = \delta_{kk'} + \sum_{k_1} P(k, k_1, \kappa, s) \mathcal{W}(k_1, k', \kappa), \quad (\text{V. 34})$$

$$[s + \hat{I}(k, \kappa; \mathbf{H})] P(k, k', \kappa, s) = \delta_{kk'} + \sum_{k_1} \mathcal{W}(k, k_1, \kappa) P(k_1, k', \kappa, s). \quad (\text{V. 34a})$$

Используя для $P(k, k', \kappa)$ соотношения вида (V. 30) и явный

$$\text{вид для функции } P(k, k', \kappa, \eta, s) \equiv P_{\frac{k - \frac{\kappa + \eta}{2}, k' - \frac{\kappa}{2}}{k + \frac{\kappa + \eta}{2}, k' + \frac{\kappa}{2}}}, \text{ т. е. формулу}$$

возможность перехода от (A) к (A') и позволяет получить (V. 28a) и (V. 32). Следует иметь в виду, что представление (V. 30) не тождественно обычному вигнеровскому представлению, «диагонализующему» «одночастичные» функции (одночастичную матрицу плотности, одночастичную функцию Грина и т. д.), поскольку (V. 30) «диагонализует» «двухчастичные» функции (вероятности переходов, двухчастичные функции Грина и т. д.). Кроме того, рецепт (V. 30) обеспечивает переход от уравнения (П. 9.5) к уравнению (V. 33) (как это доказано в Приложении 9) и важен при выводе (V. 34), в которых дифференцирование затрагивает только *один* из импульсов. Последнее свойство очень важно для осуществления перехода от (V. 28a) к (V. 44).

типа (П.6.6), получим так же, как и в случае $\mathbf{E} = 0$, $\mathbf{H} = 0$, что для $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv P(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \varkappa) \Big|_{\varkappa=0}$ имеет место правило сумм:

$$\sum_{\mathbf{k}'} P(\mathbf{k}, \mathbf{k}', s) = 1/s. \quad (\text{V. 35})$$

Полагая $\varkappa = 0$ и суммируя (V.34a) по заднему индексу \mathbf{k}' , с учетом (V.35), получим условие баланса «прихода» и «ухода»

$$\sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 0. \quad (\text{V. 36})$$

Раскроем теперь выражение (V.28a), устранив в нем все свободные сечения. Для этого продифференцируем $M(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varkappa, s)$ по \varkappa . Первую производную по \varkappa от любой функции $F(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varkappa, s)$ обозначим $F_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varkappa, s)$, соответственно положим $F_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varkappa; s) \Big|_{\varkappa=0} \equiv F_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}', s)$. Имеем

$$\begin{aligned} s^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} M_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}', s) = \\ = s^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1} \Gamma_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}', s) + s^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) P_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}', s). \end{aligned} \quad (\text{V. 37})$$

В силу правила сумм (V.35) первый член справа в (V.37) равен $s \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, т. е. при $s \rightarrow 0$ его можно опустить (напомним, что Γ не содержит особенностей типа $1/s$). Уравнение для $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}', s)$ получим, дифференцируя обе части (V.34) по \varkappa :

$$\begin{aligned} [s + \hat{I}(\mathbf{k}', \mathbf{H})] P_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}', s) - \sum_{\mathbf{k}_1} P_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, s) W(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}') = \\ = \frac{i}{2} [v(\mathbf{k}' + \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}'})) + v(\mathbf{k}' - \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}'}))] P(\mathbf{k}, \mathbf{k}', s) + \\ + \sum_{\mathbf{k}_1} P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, s) W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (\text{V. 38})$$

Здесь $\hat{I}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) \equiv \hat{I}(\mathbf{k}, \varkappa, \mathbf{H}) \Big|_{\varkappa=0}$; $v(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial e}{\partial \mathbf{k}}$. Из (V.34) следует, что $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}', s)$ есть функция Грина для этого уравнения, поэтому $P_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ можно представить в виде

$$P_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) P(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2), \quad (\text{V. 39})$$

где

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}, s) = \frac{i}{2} [v(\mathbf{k} + \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}})) + v(\mathbf{k} - \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}}))] P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}, s) + \\ + \sum_{\mathbf{k}_2} P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s) W_1(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (\text{V. 39a})$$

Подставляя (V. 39) в (V. 37) и используя (V. 35), получим

$$j = -iens^2 \sum_{k, k', k_1, k_2} \Gamma(k', k_1) F(k_1, k_2, s) P(k_2, k, s) = \\ = -iens \sum_{k, k', k_1} \Gamma(k', k_1) F(k_1, k, s). \quad (V. 40)$$

Подставляя для $F(k_1, k, s)$ выражение (V. 39a) и используя определение

$$f(k) \equiv \sum_{k', k_1} \Gamma(k', k_1) P(k_1, k, s) = s \sum_{k'} M(k', k, s), \quad (V. 41)$$

перепишем (V. 40) в виде

$$j = en \sum_k \left\{ \frac{1}{2} [v(k + A(i\nabla_k)) + v(k - A(i\nabla_k))] f(k) - \right. \\ \left. - i \sum_{k_2} W_1(k_2, k) f(k_2) \right\}. \quad (V. 42)$$

Представляя оператор $v(k \pm A(i\nabla_k))$ в виде

$$- \frac{i}{\hbar} \sum_m J(m) m e^{-ikm} \exp \left\{ \pm \frac{e}{2\hbar c} [m \times H] \frac{\partial}{\partial k} \right\}$$

и действуя им на $f(k)$, для первых двух членов в (V. 42) получим, что они равны

$$\frac{1}{2} \sum_k \left\{ - \frac{i}{\hbar} \sum_m J(m) m e^{-ikm} [f(k + A(m)) + f(k - A(m))] \right\} = \\ = \sum_k v(k) f(k). \quad (V. 43)$$

При выводе формулы (V. 43) производилось смещение по k на $\pm A(m)$ с учетом тождества $mA(m) = 0$ и использовалось условие периодичности по k для $f(k)$. Это позволяет записать j в окончательном виде:

$$j = en \sum_k v^{\text{эфф}}(k) f(k), \quad (V. 44)$$

где

$$v^{\text{эфф}}(k) = v(k) - i \sum_{k'} W_1(k, k'). \quad (V. 44a)$$

Имея в виду определение (V. 41) для $f(k)$, помножим $\sum_{k'} \Gamma(k', k)$ на (V. 34), взятое при $\varkappa = 0$, просуммируем обе части равенства по k и устремим $s \rightarrow 0$ с учетом того, что f и Γ не сингулярны в точке $s = 0$.

В результате получим общее уравнение переноса для определения $f(k)$ при произвольных E и H

$$\frac{eE}{\hbar} \frac{\partial f(k)}{\partial k} - \frac{i}{\hbar} [\varepsilon(k + A(i\nabla_k)) - \varepsilon(k - A(i\nabla_k))] f(k) = \\ = \sum_{k'} f(k') W(k', k), \quad (V. 45)$$

где, как и раньше, f нормирована на единицу, т. е. $\sum f(k) = 1$.

Если линеаризовать по \mathbf{H} оператор в левой части уравнения (V. 45), то получим обычное выражение $\frac{1}{\hbar} (e\mathbf{E} + \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}]) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}$, в котором действие магнитного поля описывается силой Лоренца. Однако в правой части (V. 45) учтено и непосредственное влияние внешних полей на вероятность перехода, и это особенно существенно скажется в задаче об эффекте Холла для ПМР.

Формулы (V. 44) и (V. 45) позволяют исследовать самые различные физические ситуации (см. например, [111—114]). В дальнейшем мы ограничимся только выводом общего выражения для холловской подвижности в слабых полях \mathbf{E} и \mathbf{H} , справедливого при любой силе взаимодействия электронов с фонами и при произвольной ширине разрешенной зоны для квазичастиц.

§ 5. Процедура линеаризации по внешнему электрическому полю [112]

Условимся теперь обозначать индексами (0) и (1) сверху соответственно нулевое и линейное приближение по электрическому полю \mathbf{E} . Тогда получим

$$j_y^{(1)} = en \sum_{\mathbf{k}} v_y^{\text{эфф}}^{(1)}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) + en \sum_{\mathbf{k}} v_y^{\text{эфф}}^{(0)}(\mathbf{k}) f^{(1)}(\mathbf{k}). \quad (\text{V. 46})$$

Используя определение (V. 41) для $f(\mathbf{k})$ и замкнутые выражения (V. 14), (V. 20) для M , получим [111, 112]

$$f(\mathbf{k}) = s \sum_{\eta} \int_0^{\infty} e^{-st} dt \text{Sp} \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}') \exp\left(i \frac{t}{\hbar} (\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)\right) \times \right. \\ \left. \times a_{\mathbf{k}+\eta/2}^+ a_{\mathbf{k}-\eta/2} \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} (\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)\right) \right\}. \quad (\text{V. 47})$$

Представляя \mathcal{H}_E в виде $-ieE \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}-\frac{x}{2}}^+ a_{\mathbf{k}+\frac{x}{2}} \right) \Big|_{\mathbf{x}=0}$ и разлагая выражение (V. 47) в ряд по \mathcal{H}_E (напомним, что, согласно (V. 10), $\mathcal{H} = \mathcal{H}' + \mathcal{H}_E$), найдем $f^{(0)}(\mathbf{k})$ и $f^{(1)}(\mathbf{k})$:

$$f^{(0)}(\mathbf{k}) = \sum_{\eta} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}'} a_{\mathbf{k}+\eta/2}^+ a_{\mathbf{k}-\eta/2} \right\}, \quad (\text{V. 48})$$

$$f^{(1)}(\mathbf{k}) = \frac{eE}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \sum_{\mathbf{x}', \eta} \int_0^{\infty} e^{-st} dt \left[\text{Sp} \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}') a_{\mathbf{k}'-\mathbf{x}/2}^+ a_{\mathbf{k}'+\mathbf{x}/2} \times \right. \right. \\ \left. \times \exp\left(i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}'\right) a_{\mathbf{k}+\eta/2}^+ a_{\mathbf{k}-\eta/2} \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}'\right) \right\} - \\ \left. - \text{Sp} \left\{ \exp(-\beta \mathcal{H}') \exp\left(i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}'\right) a_{\mathbf{k}+\eta/2}^+ a_{\mathbf{k}-\eta/2} \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}'\right) a_{\mathbf{k}'-\mathbf{x}/2}^+ a_{\mathbf{k}'+\mathbf{x}/2} \right\} \right]_{\mathbf{x}=0}. \quad (\text{V. 49})$$

Положим в первом члене в (V. 49) $t = t' + i\hbar\beta$; для t' заменим пределы интегрирования $(0, \infty)$ на $(-i\hbar\beta, \infty)$ и переставим оператор $e^{-\beta\mathcal{H}'} a_{k', -\kappa/2}^+ a_{k', +\kappa/2}$ под знаком шпура с первого места на последнее. Тогда вклады от обоих членов в квадратной скобке в (V. 49), отвечающие интегрированию в пределах от 0 до ∞ , объединяются и дают

$$\begin{aligned} & \frac{eE}{\hbar} (e^{-i\hbar\beta} - 1) \frac{\partial}{\partial \kappa} \sum_{k', \eta} \int_0^{\infty} e^{-st} dt \text{Sp} \left\{ \exp(-\beta\mathcal{H}') \exp\left(i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}'\right) \times \right. \\ & \times a_{k'+\eta/2}^+ a_{k-\eta/2} \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}'\right) a_{k', -\kappa/2}^+ a_{k', +\kappa/2} \left. \right\}_{\kappa=0} = \\ & = -ies\beta E \frac{\partial}{\partial \kappa} \left(\sum_{k'/\eta} M_{k'+\kappa/2, k+\eta/2}^{(0)k'-\kappa/2, k-\eta/2} \right) = -ie\beta E f_1^{(0)}(k). \quad (\text{V. 50}) \end{aligned}$$

При написании последнего звена в цепочке равенств (V. 50) использовалось соотношение (V. 41). Индекс 1 внизу соответствует однократному дифференцированию по κ . Кроме вклада (V. 50), функция $f^{(1)}(k)$ содержит еще один вклад $\chi^{(1)}(k)$, возникающий при замене пределов $(0, \infty)$ на $(-i\hbar\beta, \infty)$ в первом члене в (V. 49) и соответствующий интегралу в пределах $(-i\hbar\beta, 0)$

$$\chi^{(1)}(k) = -\frac{eE}{\hbar} \frac{d}{d\kappa} \left(\sum_{k', \eta} \int_0^{-i\hbar\beta} dt M_{k'+\kappa/2, k+\eta/2}^{(0)k'-\kappa/2, k-\eta/2}(t) \right)_{\kappa=0}. \quad (\text{V. 51})$$

Итак, на основании (V. 49) — (V. 51) имеем

$$f^{(1)}(k) = -ie\beta E f_1^{(0)}(k, \mathbf{H}) + \chi^{(1)}(k, \mathbf{H}). \quad (\text{V. 52})$$

Функцию $\chi^{(1)}(k, \mathbf{H})$ можно переписать в несколько ином виде. Для этого введем некоторую функцию $F(k, \mathbf{H})$ и ее фурье-образ $F(m, \mathbf{H})$:

$$F(k, \mathbf{H}) = \sum_{\eta} \text{Sp} \left\{ \exp(\beta\mathcal{H}_E) \exp(-\beta(\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)) a_{k'+\eta/2}^+ a_{k-\eta/2} \right\}, \quad (\text{V. 53})$$

$$F(m, \mathbf{H}) = \text{Sp} \left\{ \exp(\beta\mathcal{H}_E) \exp(-\beta(\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)) a_m^+ a_0 \right\}. \quad (\text{V. 53a})$$

Наличие множителя $\exp(\beta\mathcal{H}_E)$ под знаком шпуров в (V. 53) и (V. 53a) обеспечивает трансляционную инвариантность функций $F(k, \mathbf{H})$ и $F(m, \mathbf{H})$. Вообще говоря, оператор $\exp(\beta\mathcal{H}_E)$ в формуле (V. 53a) можно опустить, так как в одноэлектронном приближении $a_0 \exp(\beta\mathcal{H}_E) = a_0$.

Проводя разложение $F(k, \mathbf{H})$ в ряд по E , можно убедиться в том, что

$$F^{(0)}(k) = f^{(0)}(k), \quad \text{Re } F^{(1)}(k, \mathbf{H}) = \chi^{(1)}(k, \mathbf{H}).$$

Поэтому формулу (V. 52) можно переписать в виде

$$\overset{(1)}{f}(\mathbf{k}) = -ie\beta E f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H}) + \text{Re } F(\mathbf{k}, \mathbf{H}). \quad (\text{V. 52a})$$

Функция $\overset{(0)}{f}_1(\mathbf{k}, \mathbf{H})$ определена выражением (V. 50), однако для проведения прямых расчетов оно неудобно. Поэтому мы используем определение (V. 50) лишь для того, чтобы получить уравнение для функции $\overset{(0)}{f}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{H})$ и найти условие нормировки для нее. Для этого сначала требуется получить уравнение для $\overset{(0)}{f}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{H})$, затем продифференцировать его по $\boldsymbol{\kappa}$ и после этого положить $\boldsymbol{\kappa} = 0$. Уравнение для $\overset{(0)}{f}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{H})$ получается путем умножения (V. 34) на $s\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{H})$ и суммирования правой и левой частей по \mathbf{k}_1 и \mathbf{k} при условии $E = 0$. Соответствующая процедура проделана в [112]. Оказалось, что с учетом требования нормировки функцию $-\overset{(0)}{ie\beta E} f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H})$ можно представить в виде

$$-\overset{(0)}{ie\beta E} f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H}) = f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H}) - \overset{(0)}{ie\beta} \overset{(0)}{f}(\mathbf{k})(E\mathbf{C}), \quad (\text{V. 54})$$

где \mathbf{C} — константа, равная $\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \overset{(0)}{\Gamma}_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, а функция $f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H})$ нормирована на нуль ($\sum_{\mathbf{k}} f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H}) = 0$) и удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar} [\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}})) - \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}}))] f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H}) + \sum_{\mathbf{k}'} f_1(\mathbf{k}', \mathbf{H}) \times \\ & \times \overset{(0)}{W}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{H}) = -e\beta E \left\{ \frac{1}{2} [\mathbf{v}(\mathbf{k} + \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}})) + \mathbf{v}(\mathbf{k} - \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}}))] \overset{(0)}{f}(\mathbf{k}) - \right. \\ & \left. - i \sum_{\mathbf{k}'} \overset{(0)}{f}(\mathbf{k}') \overset{(0)}{W}_1(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{H}) \right\}. \quad (\text{V. 55}) \end{aligned}$$

Поскольку второй член в (V. 54) не вносит вклада в ток (ибо $\sum_{\mathbf{k}} \overset{(0)}{v}_{\mathbf{k}} \overset{(0)}{f}(\mathbf{k}) = 0$), то с учетом (V. 46), (V. 53), (V. 53a) и (V. 54) в линейном по E приближении и при произвольных \mathbf{H} получаем, что ток j_y может быть разбит на три вклада:

$$j_y = j_{y, I} + j_{y, II} + j_{y, III}, \quad (\text{V. 56})$$

$$j_{y, I} = en \sum_{\mathbf{k}} f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H}) \left\{ v_y(\mathbf{k}) - i \sum_{\mathbf{k}'} \overset{(0)}{W}_{1y}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{H}) \right\}, \quad (\text{V. 57})$$

$$j_{y, II} = -ien \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \overset{(0)}{f}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) \overset{(1)}{W}_{1y}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{H}), \quad (\text{V. 58})$$

$$j_{y, III} = en \sum_{\mathbf{k}} \text{Re } F(\mathbf{k}, \mathbf{H}) \left\{ v_y(\mathbf{k}) - i \sum_{\mathbf{k}'} \overset{(0)}{W}_{1y}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{H}) \right\}. \quad (\text{V. 59})$$

Для нахождения членов $j_{y,II}$ и $j_{y,III}$ не требуется решать уравнения переноса (V. 55). Вклад $j_{y,II}$ родственен первому члену в (I. 117). Вклад $j_{y,III}$ не имеет аналога в случае $\mathbf{H} = 0$. Вклад типа $j_{y,III}$ получался и раньше [33] при распутывании формулы Кубо для $\sigma_{xy}^{(a)}(\mathbf{H})$ в рамках модели ПМР, для которых $[\mathcal{H}_{int}, \mathcal{X}] \neq 0$. Он существует и для широкого класса операторов \mathcal{H}_{int} , коммутирующих с \mathcal{X} , к которым относится и обычный гамильтониан Фрелиха. В этом случае $\sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{W}_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 0$ (т. е. $v^{\text{эфф}}(\mathbf{k}) \rightarrow v(\mathbf{k})$) и перескокового вклада не возникает, однако член $j_{y,III}$ в нуль не обращается. Применительно к этому случаю, хотя и в несколько ином виде, он был получен С. Накаджимой (см. его лекцию в [127], стр. 303—304), который утверждал, что из-за этого вклада может нарушаться соотношение Эйнштейна между антисимметричными компонентами тензоров подвижности $\mu_{xy}^{(a)}(\mathbf{H})$ и коэффициента диффузии $D_{xy}^{(a)}(\mathbf{H})$. Наглядная интерпретация вклада $j_{y,III}$ пока отсутствует. В случае слабой связи с фононами ($\gamma \ll 1$) этот вклад меньше основного вклада $j_{y,I}$ в γ^4 раз и его можно отбросить. Ниже будет показано, что в теории ПМР именно комбинация членов $j_{y,II}$ и $j_{y,III}$ дает перескоковый вклад.

Для нахождения вклада $j_{y,I}$ необходимо решить транспортное уравнение (V. 55). В случае слабой связи действие магнитного поля описывается только первым членом в левой части (V. 55), который в линейном по \mathbf{H} приближении соответствует действию силы Лоренца, поэтому в случае больцмановской статистики для $\mu_{xy}^{(a)}$ получается обычное выражение, которое в приближении времени релаксации имеет вид

$$\mu_{xy}^{(a)} = \frac{e}{k_B T} \langle n(\mathbf{k}) v_y(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \frac{eH}{c\hbar} \left[\mathbf{v} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right]_z v_x(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \rangle \quad (\text{V. 60})$$

и в случае достаточно широкой разрешенной зоны приводит к соотношению

$$\mu_{xy}^{(a)} = a\mu \frac{\mu H}{c},$$

где a — безразмерная константа, близкая к единице.

Условимся называть вклад вида (V. 60) лоренцевским. В теории ПМР член $j_{y,I}$ описывает туннельный вклад в $\mu_{xy}^{(a)}$, который, помимо вклада, обусловленного действием силы Лоренца, учитывает еще и влияние магнитного (и электрического) поля на вероятность туннельных переходов, что приводит к возникновению дополнительных вкладов в $\mu_{xy}^{(a)}$, называемых ниже квазилоренцевскими и нелоренцевскими, причем именно эти последние вклады и определяют необычный температурный ход $\mu_{xy}^{(a)}$ и μ_H для ПМР в области промежуточных температур.

§ 6. Общие выражения для $\mu_{xy}^{(a)}$ в теории ПМР [112, 113]

А. Происхождение квазилоренцевских и нелоренцевских вкладов в $\mu_{xy}^{(a)}$. Представим все функции, фигурирующие в (V.55), в виде двух частей, одна из которых от \mathbf{H} не зависит, а другая является линейной поправкой по \mathbf{H} , например,

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H}) &= f_1(\mathbf{k}) + \delta f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H}), \\ \mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{H}) &= \mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \delta \mathcal{W}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{H}) \end{aligned} \quad (\text{V. 61})$$

и т. д. Тогда уравнение для $f_1(\mathbf{k})$ и линеаризованное уравнение для $\delta f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H})$ примут вид

$$-e\beta n(\mathbf{k}) E \mathbf{v}(\mathbf{k}) + ie\beta E \sum_{\mathbf{k}'} n(\mathbf{k}') \mathcal{W}_1(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} f_1(\mathbf{k}') \mathcal{W}(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad (\text{V. 62})$$

$$-\frac{e}{c\hbar} \mathbf{H} \left[\mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right] f_1(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}'} f_1(\mathbf{k}') \delta \mathcal{W}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{H}) -$$

$$-ie\beta E \sum_{\mathbf{k}'} n(\mathbf{k}') \delta \mathcal{W}_1(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{H}) = \sum_{\mathbf{k}'} \delta f_1(\mathbf{k}', \mathbf{H}) \mathcal{W}(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (\text{V. 63})$$

Второй член слева в (V.62) и второй и третий члены слева в (V.63) не могут быть получены в результате линеаризации кинетического уравнения по \mathbf{H} и E , поэтому все отличия от лоренцевского вклада проистекают именно из-за них. В приближении времени релаксации (это приближение не влияет на общность получаемых выводов, и мы используем его лишь в целях сокращения выкладок) имеем

$$f_1(\mathbf{k}) = -e\beta n(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) E \mathbf{v}(\mathbf{k}) + ie\beta \tau(\mathbf{k}) E \sum_{\mathbf{k}'} n(\mathbf{k}') \mathcal{W}_1(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad (\text{V. 62a})$$

$$\delta f_1(\mathbf{k}, \mathbf{H}) =$$

$$\begin{aligned} &= -\tau(\mathbf{k}) \frac{e}{c\hbar} \mathbf{H} \left[\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right] f_1(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}'} f_1(\mathbf{k}') \delta \mathcal{W}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{H}) \tau(\mathbf{k}) - \\ &\quad - ie\beta E \sum_{\mathbf{k}'} n(\mathbf{k}') \delta \mathcal{W}_1(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{H}) \tau(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (\text{V. 63a})$$

При подстановке первого члена из (V.62a) в первый член в (V.63a) получим обычную поправку к функции распределения, обусловленную действием силы Лоренца

$$-e\beta n(\mathbf{k}) E_x \tau(\mathbf{k}) \frac{e\mathbf{H}}{c\hbar} \left[\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right] v_x(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}),$$

которая при подстановке в (V.57) с учетом только первого члена в фигурной скобке дает лоренцевский вклад (V.60).

Для придания более компактного вида конечным формулам, помимо скорости $v^{\text{эфф}}(\mathbf{k})$ (см. формулу (V.44a)), введем еще

две векторные величины $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ и $\Delta\mathbf{v}(\mathbf{k})$, имеющие размерность скорости. Они определены соотношениями *)

$$n(\mathbf{k}) \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) = n(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) - i \sum_{\mathbf{k}'} n(\mathbf{k}') \mathbf{W}_1(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{H}), \quad (\text{V. 44б})$$

$$\frac{e}{\hbar c} \Delta\mathbf{v}(\mathbf{k}) \left[\mathbf{H} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right] f_1(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} f_1(\mathbf{k}') \delta\mathcal{W}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{H}). \quad (\text{V. 44в})$$

В принятых обозначениях можно переписать (V. 62а) и (V. 63а) в следующем виде:

$$f_1(\mathbf{k}) = -e\beta n(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \mathbf{E} \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{k}), \quad (\text{V. 62б})$$

$$\delta f(\mathbf{k}, \mathbf{H}) = \delta f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) + \delta f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{H}), \quad (\text{V. 63б})$$

где

$$\delta f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) = -e\beta E_x n(\mathbf{k}) \delta \tilde{v}_x(\mathbf{k}, \mathbf{H}) \tau(\mathbf{k}),$$

$$\delta f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) =$$

$$= -e\beta E_x \tau(\mathbf{k}) \frac{eH_z}{c\hbar} \left[(\mathbf{v}(\mathbf{k}) + \Delta\mathbf{v}(\mathbf{k})) \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right]_z n(\mathbf{k}) \tilde{v}_x(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}).$$

Индексы (1) и (2) показывают, что эти вклады в δf_1 пропорциональны соответственно τ и τ^2 . Вклад $\delta f_1^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{H})$ внешне похож на линейную по \mathbf{H} поправку, обусловленную действием силы Лоренца (см. выше). При подстановке $\delta f_1^{(2)}$ в (V. 57) приходим к вкладу в μ_{xy} , который мы назовем квазилоренцевским (ср. с (V. 60)):

$$\mu_{xy, \text{кл}} =$$

$$= e\beta \langle v_x^{\text{вф}}(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \frac{eH}{\hbar c} \left[(\mathbf{v}(\mathbf{k}) + \Delta\mathbf{v}(\mathbf{k})) \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right]_z n(\mathbf{k}) \tilde{v}_y(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \rangle. \quad (\text{V. 60а})$$

От лоренцевского вклада (V. 60) он отличается тем, что все три скорости, фигурирующие в (V. 60а), разные, и это различие связано с поправками по H к вероятности перехода. Кроме вклада $\sim \tau^2$ возникает и линейный по τ вклад в μ_{xy} , который мы будем называть нелоренцевским. Он получается из комбинации членов

$$v^{\text{вф}}(\mathbf{k}) \delta f_1^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) + \delta v^{\text{вф}}(\mathbf{k}) f_1(\mathbf{k})$$

*) Фактически соотношение (V. 44в) отражает тот факт, что стоящая справа в (V. 44в), линейно зависящая от \mathbf{H} скалярная функция может быть представлена в виде скалярного произведения $\mathbf{H}\mathbf{a}(\mathbf{k})$, где $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ — некоторый аксиальный вектор. Произвольный аксиальный вектор, зависящий от \mathbf{k} , всегда можно представить в виде $[\mathbf{p}(\mathbf{k}) \times \nabla_{\mathbf{k}}\phi(\mathbf{k})]$, где $\mathbf{p}(\mathbf{k})$ — некоторый полярный вектор, $\phi(\mathbf{k})$ — некоторая скалярная функция. Если в качестве скалярной функции $\phi(\mathbf{k})$ выбрать известную безразмерную функцию $f_1(\mathbf{k})$, то неопределенным остается лишь вектор $\mathbf{p}(\mathbf{k})$, который мы обозначили как $\Delta\mathbf{v}(\mathbf{k})$ и придали ему размерность скорости. Вектор $\Delta\mathbf{v}(\mathbf{k})$ должен быть определен из соотношения (V. 44в).

в (V. 57) и имеет вид

$$\mu_{xy, \text{вл}} = \frac{e^2}{2} \langle n(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) [v^{\alpha\Phi\Phi}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) \times \tilde{v}(\mathbf{k}, \mathbf{H})]_z^{(1)} \rangle. \quad (\text{V. 64})$$

Верхний индекс у квадратной скобки означает, что надо взять ее часть, линейную по \mathbf{H} , равную $[\delta v^{\alpha\Phi\Phi}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) \times \tilde{v}(\mathbf{k})] + [v^{\alpha\Phi\Phi}(\mathbf{k}) \times \delta \tilde{v}(\mathbf{k}, \mathbf{H})]$. Заметим, что вклад $\mu_{xy, \text{вл}} = 0$, если не учитывать линейных по \mathbf{H} поправок к вероятности рассеяния, и поэтому он не может быть получен в рамках обычного кинетического уравнения.

Приведенные выше рассуждения имеют достаточно общий характер (введение времени релаксации не приводит к *качественным* отличиям) и не ограничены рамками ПМР.

Б. *Схема расчета компонент $\mu_{xy}^{(a)}$ для ПМР* [112, 113].

В теории ПМР расчеты удобнее вести в представлении Ванье. В этом случае туннельный вклад $j_{y,1}$ может быть переписан в виде

$$j_y^{(1)} \equiv j_{y,1} = en \operatorname{Re} \sum_{mm'} f_1(m, \mathbf{H}) \overset{(0)}{W}_{mm'}^{jm'}(\mathbf{H}) m_y'. \quad (\text{V. 57a})$$

(Ниже считается, что «пустые точки» включены в определение «блоков»).

Для вероятностей имеет место правило сумм (V. 36), кроме того, они удовлетворяют условию

$$\sum_{m_1, m_2} n(m_1) \overset{(0)}{W}_{m_1, m_2}^{0, m_2} = 0, \quad (\text{V. 65})$$

которое означает, что при $\mathbf{E} = 0$ ток равен нулю.

Совершая в (V. 55) преобразования Фурье и внося в определение блоков «пустые точки», соответствующие членам $\mathbf{v}(\mathbf{k} \pm \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}}))$, перепишем уравнение для $f_1(m, \mathbf{H})$ в виде (ср. с уравнением (12) в [113])

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(m)} f_1(m, \mathbf{H}) + \sum_{\substack{m_1 \neq m \\ m_2}} f_1(m_1, \mathbf{H}) \overset{(0)}{W}_{m_1, m_2+m}^{0, m_2} e^{i\mathbf{A}(m_2) \cdot \mathbf{m}} = \\ = e\beta\mathbf{E} \sum_{m_1, m_2} m_2 n(m_1) \overset{(0)}{W}_{m_2+m_1, m}^{m_2, 0} e^{i\mathbf{A}(m_1) \cdot m_2}, \quad (\text{V. 66}) \end{aligned}$$

где принято обозначение $\tau^{-1}(m) = \overset{(0)}{W}_{mm}^{00} + \sum_{m_1 \neq m} \overset{(0)}{W}_{m, m+m_1}^{0, m_1} \approx \overset{(0)}{W}_{mm}^{00}$.

Производя разбиения, аналогичные (V. 61), можно было бы переписать (V. 66) в виде системы уравнений типа (V. 62), (V. 63), но только в узельном представлении. Однако практически удобнее прямо итерировать уравнение (V. 66) по степеням $\tau W_{\text{вд}} \ll 1$, где $W_{\text{вд}}$ — любой недиагональный блок, содержащий две точки или более. При этом отношение $\frac{\Delta e_p^{(0)}}{\hbar} \tau \sim W_{\text{вд}}^{(1)} \tau$ может быть про-

извольным, т. е. решение будет справедливо и в области II и в области III. С точностью до τ^2 будем иметь [113]

$$f_1(m, H) = f_1(m) + \delta f_1^{(1)}(m, H) + \delta f_1^{(2)}(m, H), \quad (V. 67)$$

$$\delta f_1^{(1)}(m, H) = e\beta E \sum_{m_1, m_2} n(m_1) m_2 \overset{(0)}{W}_{m_1+m_2, m}^{m_2, 0} \tau(m) e^{iA(m_1)m_2}, \quad (V. 68)$$

$$\delta f_1^{(2)}(m, H) = -e\beta E \sum_{\substack{m_1, m_2, m_3 \\ m' \neq 0}} n(m_1) m_2 \overset{(0)}{W}_{m_1+m_2, m'}^{m_2, 0} e^{iA(m_1)m_2} \tau(m') \times \\ \times \overset{(0)}{W}_{m', m_3+m}^{0, m_3} \tau(m) e^{iA(m_3)m}. \quad (V. 69)$$

Поправка $\delta f_1^{(2)}(m, H)$ пропорциональна τ^2 (ср. с (V. 61)) и содержит в себе как лоренцевский вклад (V. 62) (он получится, если заменить обе $W_{нд}$ в (V. 69) на «пустые» точки, т. е. если вместо $W_{нд}$ подставить $W_{нд} = \pm \frac{i}{\hbar} J \exp(-S_T)$), так и квази-лоренцевский вклад. В дальнейшем верхний индекс при $\mu_{xy}^{(a)}$ опускаем, имея в виду, что всегда будет вычисляться только антисимметричная часть тензора μ_{xy} .

Подставляя (V. 68) и (V. 69) в (V. 65), получим

$$\mu_{xy}^{(t)} = \mu_{xy, кл}^{(t)} + \mu_{xy, нд}^{(t)}, \quad (V. 70)$$

$$\mu_{xy, нд}^{(t)} = \frac{e}{2kT} \sum_{m, m'} [m \times m']_t \operatorname{Re} \sum_{m_1, m_2} n(m_1) e^{iA(m_1)m} \times \\ \times \overset{(0)}{W}_{m_1+m, m_2}^{m, 0} \tau(m_2) \overset{(0)}{W}_{m_2, m'}^{0, m'}. \quad (V. 71)$$

$$\mu_{xy, кл}^{(t)} = -\frac{e}{2kT} \sum_{m, m'} [m \times m']_z \operatorname{Re} \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_3, m_4}} n(m_1) e^{iA(m_1)m} \times \\ \times \overset{(0)}{W}_{m_1+m, m_2}^{m, 0} \tau(m_2) \overset{(0)}{W}_{m_2, m_3+m_4}^{0, m_3} e^{iA(m_3)m_4} \tau(m_4) \overset{(0)}{W}_{m_4, m'}^{0, m'}. \quad (V. 72)$$

В этих выражениях требуется провести линеаризацию по H с учетом зависимости $W_{нд}$ от H при $E=0$. Величина $W_{нд}$ представляется в виде ряда по степеням J , т. е. $W_{нд} = \sum_{n=1}^{\infty} \overset{(n)}{W}_{нд}$, где $\overset{(n)}{W}_{нд} \sim J^n$. Член $\mu_{xy, нд}$ содержит в себе лоренцевский вклад, который получается, когда все $W_{нд}$ берутся в низшем порядке по J

$$W_{нд} \rightarrow \overset{(1)}{W}_{нд} = \pm \frac{i}{\hbar} J \exp(-S_T),$$

и, кроме того, учитывает поправки по H к вероятностям перехода. Как и (V. 62), он пропорционален τ^2 , поэтому мы условно назовем его «квазилоренцевским». Вклад $\mu_{xy}^{(t)}$, пропорциональный τ , обращается в нуль, если заменить в (V. 71) обе $W_{нд}$ на

«пустые» точки $W_{\text{на}}^{(1)} \sim \frac{i}{h} J \exp(-S_T)$, и отличен от нуля в следующем (третьем) порядке по J , т. е. пропорционален τJ^3 .

Займемся теперь преобразованием формул (V.56) и (V.57). В узельном представлении $j_{y, \text{III}}$ имеет вид

$$j_{y, \text{III}} = \sum_{\mathbf{m}}^{(1)} F(\mathbf{m}, \mathbf{H}) \sum_{\mathbf{m}'}^{(0)} W_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}'} m'_y. \quad (\text{V.73})$$

Используя тот факт, что $\mathcal{H}(\mathbf{H}) \rightarrow \mathcal{H}(-\mathbf{H}) = \mathcal{H}^*(\mathbf{H})$ при замене $\mathbf{H} \rightarrow -\mathbf{H}$ и что функции Ванье в кристалле с центром инверсии вещественны, из определения (V.52a) для $F(\mathbf{m})$ получим, что

$$F(\mathbf{m}, -\mathbf{H}) = F^*(\mathbf{m}, \mathbf{H}), \quad \text{т. е.}$$

$$\text{Im } F(\mathbf{m}, -\mathbf{H}) = -\text{Im } F^*(\mathbf{m}, \mathbf{H}), \quad \text{Im } F(0, \mathbf{H}) = 0.$$

Докажем теперь, что $\sum_{\mathbf{m}'}^{(0)} W_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}'} m'$ — чисто мнимая величина. Для «пустой точки» это очевидно. Из графического определения следует, что $(W_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}'})^* = W_{0\mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}\mathbf{m}'}$, а из свойств (V.15) относительно операции трансляции, что $W_{0\mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}\mathbf{m}'} = W_{-\mathbf{m}, \mathbf{m}'-\mathbf{m}}^{0, \mathbf{m}'-\mathbf{m}}$, потому имеем цепочку равенств

$$\begin{aligned} \left(\sum_{\mathbf{m}'}^{(0)} W_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}'} m' \right)^* &= \sum_{\mathbf{m}'}^{(0)} W_{-\mathbf{m}, \mathbf{m}'-\mathbf{m}}^{0, \mathbf{m}'-\mathbf{m}} m' = \sum_{\mathbf{m}'}^{(0)} W_{-\mathbf{m}, \mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}'} (m' + \mathbf{m}) = \\ &= - \sum_{\mathbf{m}'}^{(0)} W_{-\mathbf{m}, -\mathbf{m}'}^{0, -\mathbf{m}'} m' = - \sum_{\mathbf{m}'}^{(0)} W_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'}^{0, \mathbf{m}'} m'. \end{aligned}$$

Это позволяет записать линейный по H вклад в антисимметричную часть (V.73) в виде

$$\begin{aligned} j_{y, \text{III}}^{(a)} &= - \sum_{\mathbf{m}} \text{Im } F^{(1)}(\mathbf{m}, \mathbf{H}) \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m}'} \text{Im} [W_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}'}(\mathbf{H}) + W_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}'}(-\mathbf{H})] m'_y = \\ &= - \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'} m'_y \text{Im } F^{(1)}(\mathbf{m}, \mathbf{H}) \text{Im } W_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}'}(0). \quad (\text{V.74}) \end{aligned}$$

Из (V.74) видно, что из-за того, что сумма членов в квадратных скобках пропорциональна H^2 , все линейные поправки по H к $j_{y, \text{III}}^{(a)}$ проистекают только от $\text{Im } F^{(1)}(\mathbf{m}, \mathbf{H})$. Приведем выражение для вклада $j_{y, \text{II}}$ в узельном представлении, которое следует из (V.58)

$$j_{y, \text{II}} = en \text{Re} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'} n(\mathbf{m}) W_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{0\mathbf{m}'}(\mathbf{H}) m'_y. \quad (\text{V.75})$$

Выделим в сумме по \mathbf{m} в (V.75) член, отвечающий $\mathbf{m} = 0$, и совершим в нем следующие преобразования: прибавим и вычтем

из $\tilde{W}_{0m'}^{(1)}$ вклад $\tilde{W}_{0m'}^{(1)}$ (см. ниже), обозначив разность $\tilde{W}_{0m'}^{(1)} - \tilde{W}_{0m'}^{(1)}$ через $\Delta\tilde{W}_{0m'}^{(1)}$. Это позволяет представить выделенный член в виде $j_y^{(h)} + \Delta j_y^{(h)}$, где

$$j_y^{(h)} = en \sum_m m'_y \tilde{W}_{0m'}^{(1)}(\mathbf{H}), \quad (\text{V. 76})$$

$$\Delta j_y^{(h)} = en \sum_m m'_y \Delta\tilde{W}_{0m'}^{(1)}(\mathbf{H}). \quad (\text{V. 77})$$

Формула (V. 76) внешне похожа на (V. 25), однако фигурирующие в ней вероятности \tilde{W} по определению включают в себя только «скелетные» диаграммы, в которых фононным связкам сопоставляются функции $Z_{ik} = Z_{ik} - 1$ (см. Приложение 2). Вероятности \tilde{W} в точности совпадают с теми, которые используются в работе [35]. В соответствии с вычитательной процедурой, описанной в Приложении 2, вероятности \tilde{W} по сравнению с вероятностями \tilde{W} дополнительно включают в себя вклады от диаграмм, которые содержат внутри «скелетного остова» «пустые точки», и «встроенные диаграммы», не связанные фононными линиями со скелетным остовом. Разность $\tilde{W} - \tilde{W}$ обозначена через $\Delta\tilde{W}$. Итак, $j_{y, II}$ может быть представлена в виде

$$j_{y, II} = j_y^{(h)} + \Delta j_y^{(h)} + en \sum_{m \neq 0} n(m) \text{Re} \sum_m m'_y \tilde{W}_{mm'}^{(1)}(\mathbf{H}). \quad (\text{V. 78})$$

Для суммы $j_{y, II} + j_{y, III}$ получим

$$j_{y, II} + j_{y, III} = j_y^{(h)} + \Delta j, \quad (\text{V. 79})$$

где

$$\Delta j = \Delta j_y^{(h)} + j_{y, III} + en \sum_{m \neq 0} n(m) \text{Re} \sum_m m'_y \tilde{W}_{mm'}^{(1)}(\mathbf{H}). \quad (\text{V. 80})$$

Соответственно полный ток запишем в виде

$$j_y = j_{y, I} + j_{y, II} + j_{y, III} = j_y^{(t)} + j_y^{(h)} + \Delta j. \quad (\text{V. 81})$$

В Приложении III работы [113] показано, что при малых J в области промежуточных температур каждый из членов в (V. 80) имеет тот же порядок по J , что и $j_y^{(t)}$, но и сумма Δj в соответствующем порядке по J точно равна нулю. Поэтому можно считать, что

$$j_y = j_y^{(t)} + j_y^{(h)}. \quad (\text{V. 82})$$

Формула (V. 76) для $j_y^{(h)}$ уже использовалась в [35, 58, 59] для нахождения $\mu_H^{(h)}$. При вычислении $\tilde{W}_{0m'}^{(1)}$ следует воспользоваться графической техникой, описанной в Приложении 2 с учетом дополнительных правил (A) и (A'), сформулированных

в § 2. В выражениях (V.71), (V.72) для $\mu_{xy}^{(t)}$ фигурируют вероятности W , вычисленные в нулевом порядке по E , но в первом порядке по H . Итак, аналогично тому, как это было сделано в гл. I (случай $H = 0$), задача сведена к вычислению блоков W .

§ 7. Результаты вычислений $\mu_{xy}^{(t)}$ для ПМР [113, 114, 33—35, 57, 61, 109, 110]

Исследование влияния магнитного поля на туннельный механизм переноса было начато еще в [33], однако конкретные результаты для $\mu_{xy}^{(t)}$ были получены недавно [113, 114], да и то лишь в предположении о малости всех безразмерных параметров, содержащих J , т. е. при $\eta_2 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$, $J/kT \ll 1$ и т. д. Мы опустим все детали вычислений линейных по J поправок к блокам вида $W_{m, m+m_1}^{j, m_1}$, при малых J и приведем лишь окончательные результаты для $\mu_{xy}^{(t)}$ (детали вычислений «блоков» см. в [113]).

А. Вклад $\mu_{xy}^{(t)}$, обусловленный действием силы Лоренца. Переходя в (V.60) к представлению Фурье, получим

$$\mu_{xy, \lambda}^{(t)} = \frac{e}{kT} \frac{eH}{\hbar c} \sum_{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3} n(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_3) [\mathbf{v}(\mathbf{g}_1) \times \mathbf{g}_3]_z \times \\ \times [\mathbf{v}(\mathbf{g}_3) \times \mathbf{v}(\mathbf{g}_2)] \tau(\mathbf{g}_3) \tau(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2). \quad (\text{V. 60б})$$

Это же выражение получается из (V.60), если заменить в (V.60) все недиагональные блоки W_{nd} на «пустые точки»

$$W_{nd}^{(1)} = \pm i \frac{J}{\hbar} \exp(-S_T). \quad (\text{a})$$

В низшем порядке по J для гексагональных кристаллов, полагая $\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_3 = 0$, имеем

$$n(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_3) \rightarrow 1, \quad \tau(\mathbf{g}) \rightarrow \tau, \quad J(\mathbf{g}) \rightarrow J, \\ \mathbf{v}(\mathbf{g}) \rightarrow i\mathbf{g} \frac{J}{\hbar} \exp(-S_T). \quad (\text{a}')$$

С учетом (a) и (a') из (V.60б) получим

$$\mu_{xy, \lambda}^{(t)} = u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{9}{2} \frac{J^3}{kT (\hbar/\tau)^2} \exp(-3S_T). \quad (\text{V. 83})$$

Для кубических кристаллов в (V.60б) вкладов порядка $J^3 \exp(-3S_T)$ не содержится, ибо для них всегда $\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_3 = \mathbf{G} \neq 0$, т. е. $n(\mathbf{G}) \approx \frac{J(\mathbf{G})}{kT} \exp(-S_T(\mathbf{G}))$. Поэтому из (V.60a) для кубических кристаллов получим

$$\mu_{xy, \lambda}^{(t)} = 4u_0 \frac{u_0 H}{c} \left(\frac{J}{kT}\right)^2 \left(\frac{J}{\hbar}\right)^2 \tau \tau' \exp(-4S_T), \quad (\text{V. 84})$$

где $\tau = \tau(\mathbf{g}_1)$, $\tau' = \tau(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2)$, причем $\mathbf{g}_1 \perp \mathbf{g}_2$, т. е. вектор $\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2$ отвечает диагонали грани куба, образованного элементарной ячейкой.

Б. Квазилоренцевский вклад в $\mu_{xy}^{(t)}$. Квазилоренцевский вклад возникает лишь в том случае, когда хотя бы одна из трех функций $W_{\text{нл}}$, фигурирующих в (V. 72), берется не в наименьшем порядке по J , например, $W_{\text{нл}}^{(2)} W_{\text{нл}}^{(1)} W_{\text{нл}}^{(1)} \sim J^4$. Поэтому при малых J квазилоренцевский вклад разумно учитывать только для кубических кристаллов. Полагая $m_1 = 0$ в (V. 72), т. е. заменяя $n(\mathbf{m}_1)$ на 1, получим

$$\mu_{xy, \text{кл}}^{(t)} = u_0 \frac{u_0 H}{c} \left(1 + 2 \frac{\tau'}{\tau}\right) \frac{J^4}{kT (2E_a - E'_a) (\hbar/\tau)^2} \exp(-2S_T - S'_T), \quad (\text{V. 85})$$

где

$$S_T = S_T(\mathbf{g}_1), \quad S'_T = S_T(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2), \quad E_a = E_a(\mathbf{g}_1), \quad E'_a = E_a(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2),$$

причем $\mathbf{g}_1 \perp \mathbf{g}_2$. Сравнивая (V. 83) и (V. 85), видим, что хотя квазилоренцевский вклад более высокого порядка по J , чем лоренцевский, он более низкого порядка по $\exp(-S_T)$. Отношение квазилоренцевского вклада к лоренцевскому для кубических кристаллов становится больше единицы при

$$kT > kT' = \frac{2E_a - E'_a}{(2 + \tau/\tau')} \exp(-2S_T + S'_T). \quad (\text{V. 86})$$

В: Нелоренцевский вклад в $\mu_{xy}^{(t)}$. Гексагональные кристаллы ($\mathbf{H} \parallel \mathbf{C}_3$). Вклад, пропорциональный τJ^3 , возникает, если в (V. 71) взять комбинацию блоков типа $W_{\text{нл}}^{(2)} W_{\text{нл}}^{(1)}$ и положить $m_1 = 0$, т. е. $n(\mathbf{m}_1) \rightarrow 1$. При $T > T_0$ он равен (в пределе $\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$)

$$\mu_{xy, \text{нл}}^{(t)} \approx u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{9}{2} \sqrt{\pi} \frac{J^3}{(E_a \hbar \omega_0)^{1/2} kT \hbar/\tau} \text{sh}^{1/2} \left(\frac{\hbar \omega_0}{2kT} \right) \times \exp \left(-2S_T - \frac{E_a}{2kT} \right), \quad (\text{V. 87})$$

а при $T < T_0$ имеем

$$\mu_{xy, \text{нл}}^{(t)} \approx u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{9}{8} \pi \frac{J^3}{kT \hbar/\tau \hbar \Delta\omega} \gamma^2 \text{sh}^{-2} \left(\frac{\hbar \omega_0}{2kT} \right) \exp(-3S_T) \quad (\text{V. 88})$$

(здесь $\gamma = 2E_a/\hbar\omega_0$).

Отношение нелоренцевского вклада к лоренцевскому при $T > T_0$ (т. е. при $\text{sh}(\hbar\omega_0/2kT) < \gamma$) равно

$$\xi \sqrt{2\pi} \frac{\omega_0}{\Delta\omega} \gamma^{-1/2} \eta_1^4 \text{sh}^{-3/2} \left(\frac{\hbar \omega_0}{2kT} \right) \exp \left\{ \frac{\gamma}{\text{sh} \left(\frac{\hbar \omega_0}{2kT} \right)} \right\}, \quad (\text{V. 89})$$

а при $T < T_0$, т. е. при $\text{sh}(\hbar\omega_0/2kT) > \gamma$, равно

$$\xi \left(\frac{\omega_0}{\Delta\omega} \right)^2 \eta_1^4 \text{sh}^{-2} \left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right) \left[\frac{\gamma}{\text{sh} \left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right)} \right]^2 \ll 1 \quad (\text{V. 89a})$$

(здесь ξ — численный множитель ~ 1 , фигурирующий в формуле (II. 33) для τ).

Г. *Нелоренцевский вклад в $\mu_{xy}^{(l)}$. Кубические кристаллы.* Оставляя в выражении (V. 71) для $\mu_{xy, \text{нл}}^{(l)}$ только первый член суммы по m_1 ($m_1 = 0$), т. е. полагая $n(m_1) \rightarrow 1$ и суммируя вклады вида $\overset{(3)}{W}_{\text{нл}} \overset{(1)}{W}_{\text{нл}}$ и $\overset{(2)}{W}_{\text{нл}} \overset{(2)}{W}_{\text{нл}}$, в пределе $\frac{\Delta\omega}{\omega_0} \ll 1$ получим

$$\begin{aligned} \mu_{xy, \text{нл}}^{(l)} = & u_0 \frac{u_0 H}{c} 8 \sqrt{\pi} \frac{J^4}{kT \sqrt{E_a' \hbar\omega_0} (2E_a - E_a') \hbar/\tau} \text{sh}^{1/2} \left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right) \times \\ & \times \left\{ \exp \left[-2S_T - \frac{E_a'}{2kT} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{1}{4} \frac{\tau'}{\tau} \left(2 \frac{E_a}{E_a'} - 1 \right)^{-1/2} \exp \left[-2S_T' - \frac{(2E_a - E_a')}{2kT} \right] \right\}. \quad (\text{V. 90}) \end{aligned}$$

Д. *Перескоковый вклад $\mu_{xy}^{(h)}$. Гексагональные кристаллы ($\mathbf{H} \parallel \mathbf{C}_3$).* В низшем порядке по J из (V. 76) в пределе $\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$ имеем

$$\begin{aligned} \mu_{xy}^{(h)} = & u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{\pi \sqrt{3}}{4} \frac{J^3}{kT E_a \hbar\omega_0} \frac{\text{sh} \alpha}{\text{ch}(\alpha/3)} \times \\ & \times \exp \left[-12 \frac{E_a}{\hbar\omega_0} \frac{\text{sh}(\alpha/3) \text{sh}(2\alpha/3)}{\text{sh} \alpha} \right], \quad (\text{V. 91}) \end{aligned}$$

при $kT > \frac{\hbar\omega_0}{2} (E_0/18\hbar\omega_0)^{1/2}$ из (V. 91) получаем

$$\mu_{xy}^{(h)} = u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{\pi \sqrt{3}}{8} \frac{J^3}{E_a (kT)^2} \exp \left(-\frac{4}{3} \frac{E_a}{kT} \right). \quad (\text{V. 92})$$

Впервые эти результаты были получены Холстейном и Фридманом [35], которые, используя наглядные представления о влиянии магнитного поля на акт надбарьерного перескока, постулировали формулу вида (V. 76). Эти же результаты были получены в [57, 109] с помощью формулы Кубо для $\sigma_{xy}^{(a)}$.

При $\eta_1 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$, но $\eta_2 \geq 1$ и произвольных J/kT из (V. 76) следует [60], что

$$\mu_{xy}^{(h)} = u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{4}{3(2\pi)^2} f_1 \left(\frac{J}{kT} \right) \exp \left[-\frac{\left(\frac{4}{3} E_a - 2J \right)}{kT} \right]. \quad (\text{V. 93})$$

Здесь $f_1(J/kT)$ — некоторая безразмерная функция от J/kT :

$$f_1(J/kT) \approx \begin{cases} kT/J & \text{при } J/kT \ll 1, \\ 1 & \text{при } J/kT \gg 1, \end{cases} \quad (\text{V. 93a})$$

Е. Перескоков $\mu_{xy}^{(h)}$. Кубические кристаллы [58, 59, 61, 110]. Для кубических и тетрагональных кристаллов результаты для $\mu_{xy}^{(h)}$ должны существенно отличаться от случая гексагональных кристаллов, описанного выше. До сих пор удалось изучить только случай $\eta_1 \ll 1$, $\eta_2 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$, $J/kT \ll 1$. В интервале температур $\hbar\omega_0/2 < kT \leq E_a$ имеем [58, 59]

$$\mu_{xy}^{(h)} = u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{\pi}{8} \frac{\delta^{3/2}}{(\delta - 1)(2 - \delta)^{1/2}} \cdot \frac{J^4}{E_a^{3/2} (kT)^{5/2}} \times \\ \times \exp\left(-\left(3 - \frac{2}{\delta}\right) \frac{E_a}{kT}\right) f_2\left(\frac{(\delta - 1)(2 - \delta)}{\delta} \frac{E_a}{kT}\right), \quad (\text{V. 94})$$

где

$$f_2(y) = \int_0^{\sqrt{y}} e^{x^2} dx, \quad (\text{V. 94a})$$

$\delta = (1 - E'_a/4E_a)^{-1}$, $E_a = E_a(g) -$ энергия активации для перескока вдоль ребра куба, $E'_a = E_a(g_1 + g_2) -$ энергия активации для перескока вдоль диагонали куба. Можно показать, что в общем случае $4/3 < \delta < 2$ [110].

§ 8. Холловская подвижность в теории ПМР

А. Определение температурных границ между областями I, II, III, IV. Гексагональные кристаллы. В § 1 настоящей главы было дано общее определение четырех температурных областей, в которых механизм холловской подвижности и ее температурная зависимость принципиально различаются. Используя результаты, приведенные в § 7, можно в пределе малых J получить уравнения для определения граничных температур T'_1 , T'_2 и T'_3 и написать конкретные выражения для μ_n . Поскольку в знаменателе общей формулы (V. 7), определяющей холловскую подвижность, стоит сумма $\mu_h + \mu_t$, то прежде всего желательно найти температуру T_3 , при которой $\mu_h = \mu_t$. Согласно (II. 24) и (II. 43a) отношение μ_t/μ_h при малых J равно

$$\mu_t/\mu_h = 2\nu\theta^{-3/2}e^{-2\theta}, \quad (\text{V. 95})$$

где

$$\theta = \gamma \operatorname{sh}^{-1} \alpha, \quad \alpha = \hbar\omega_0/2kT, \quad \nu = \frac{1}{\xi} \pi^{-1/2} \frac{\Delta\omega}{\omega_0} \eta_1^{-4} \gamma^2, \quad (\text{V. 95a})$$

ξ — число порядка единицы, фигурирующее в формуле (II. 33) для τ^{-1} . Безразмерный параметр ν можно представить и в таком виде: $\nu = \omega_0\tau(T_0)/\sqrt{\pi}$, где $\tau(T_0)$ — время релаксации, взятое при $T = T_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2k \operatorname{arcsch} \gamma}$.*

*) Напомним, что температура T_0 не имеет непосредственного физического смысла, и ее не следует путать с T_3 или с $T_{\text{мин}}$. Величина T_0 есть минимальная температура, при которой для вычисления «блоков» можно применять метод перевала.

Приравнивая отношение (V. 95) единице и логарифмируя полученное равенство, приходим к следующему уравнению для определения T_3 при малых J :

$$2\theta_3 = -\frac{3}{2} \ln \theta_3 + \ln 2\nu, \quad \theta_3 = \gamma \operatorname{sh}^{-1}(\hbar\omega_0/2kT_3). \quad (\text{V. 96})$$

Температура T'_2 , которая является границей между областями II и III, определяется из условия равенства лоренцевского $\mu_{xy, л}^{(l)}$ и нелоренцевского $\mu_{xy, нл}^{(h)}$ вкладов. Отношение этих вкладов при $T > T_0$ определяется (V. 89); приравнивая его единице и логарифмируя полученное равенство, получим уравнение для определения T'_2 при малых J

$$\theta'_2 = -\frac{3}{2} \ln \theta'_2 + \ln \frac{\nu}{\sqrt{2}}, \quad \theta'_2 = \gamma \operatorname{sh}^{-1}(\hbar\omega_0/2kT'_2). \quad (\text{V. 97})$$

Верхняя температурная граница T'_3 области III определяется из условия $\mu_{xy, нл}^{(l)} = \mu_{xy}^{(h)}$. Отношение $\mu_{xy, нл}^{(l)} \mu_{xy}^{(h)}$, согласно (V. 87) и (V. 91), равно

$$\frac{\mu_{xy, нл}^{(l)}}{\mu_{xy}^{(h)}} = 3\sqrt{6} \nu \theta^{-3/2} \operatorname{ch}\left(\frac{\alpha}{3}\right) \exp\left[-\theta\left(3\operatorname{ch}\left(\frac{\alpha}{3}\right) - 1\right)\right]. \quad (\text{V. 98})$$

Приравнивая (V. 98) единице и логарифмируя полученное равенство, найдем уравнение для определения T'_3 при малых J

$$\theta'_3 \left(3\operatorname{ch}\frac{\alpha'_3}{3} - 1\right) = -\frac{3}{2} \ln \theta'_3 + \ln(3\sqrt{6}\nu) + \ln \operatorname{ch}\frac{\alpha'_3}{3}. \quad (\text{V. 99})$$

Поскольку температура T'_3 обычно велика, то $\operatorname{ch}(\alpha'_3/3) \approx 1$ (при $kT'_3 > \hbar\omega_0/6\sqrt{2}$), и уравнение (V. 99) упрощается

$$2\theta'_3 = -\frac{3}{2} \ln \theta'_3 + \ln(\nu 3\sqrt{6}). \quad (\text{V. 99a})$$

Исследование уравнений (V. 96), (V. 97) и (V. 99a) показывает [114], что:

а) $T'_2 < T_3 < T'_3$, если $\nu < 4\left(\frac{3}{2} \ln 2\right)^{3/2} \approx 4,25$,

б) $T_3 < T'_2 < T'_3$, если $4,25 < \nu < \nu_0 = 6\sqrt{6}(\ln 6\sqrt{3})^{3/2} \approx 52,4$.

Итак, при $\nu < \nu_0$ область III существует. При $\nu > \nu_0$ имеем $T'_2 > T'_3$, т. е. область III отсутствует и переход из области II осуществляется сразу же в область IV. Соответствующая граничная температура T'_{24} получается путем приравнивания лоренцевского (V. 80) и перескокового (V. 94) вкладов и при $kT'_{24} > \hbar\omega_0/6\sqrt{2}$ определяется из уравнения

$$\frac{3}{2} \theta'_{24} = -\frac{3}{2} \ln \theta'_{24} + \ln[\nu 3^{3/4}], \quad \theta'_{24} = \gamma \operatorname{sh}^{-1}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT'_{24}}\right). \quad (\text{V. 100})$$

При $\nu > \nu_0$, когда область III отсутствует, выполняется соотношение

в) $T'_1 < T_3 < T'_{24}$.

Графики зависимости θ'_2 , θ'_3 , θ'_{24} и θ_3 от ν приведены на рис. 8. Они были получены в [114].

Б. *Выражения для μ_H в разных температурных областях. Гексагональные кристаллы.* Приступим теперь к описанию конкретных результатов, полученных для гексагональных кристаллов.

В области I ($0 < T < T'_1$) имеют место соотношения $kT > \hbar/\tau$, $\Delta\epsilon_p > kT$ (здесь $\Delta\epsilon_p$ — ширина поляронной зоны), т. е. для ПМР применимо обычное зонное описание, кинетические коэффициенты могут быть получены с помощью уравнения Больцмана, действие магнитного поля описывается силой Лоренца. Поэтому для μ_H имеет место стандартное соотношение

$$\mu_H = a\mu D, \quad (V. 101)$$

где a — число порядка единицы.

В области II ($T'_1 < T < T'_2$) действие магнитного поля все еще описывается силой Лоренца, однако для ПМР уже реализуется условие узости зон $\Delta\epsilon_p \leq kT$, и поэтому могут наступать отклонения от (V. 101). Естественно, что результаты должны зависеть от реального соотношения между T_3 и T'_2 . Поскольку неравенству $T_3 > T'_2$ (случай а)) удовлетворить трудно (обычно $\nu \gg 1$), то ниже мы рассматриваем только случаи б) и в).

В случае б), когда $T_3 < T'_2$, разобьем область II на два интервала $T'_1 < T < T_3$ и $T_3 < T < T'_2$.

В первом интервале ($T'_1 < T < T_3$), согласно (II. 43) и (V. 83), имеем

$$\mu_t = u_0^3 \frac{J_1^2}{kT\hbar/\tau} e^{-2S_T}, \quad (V. 102a)$$

$$\mu_H = \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy,л}^{(t)}}{\mu_t} = u_0 \frac{3}{2} \frac{J_1 \tau}{\hbar} \exp(-S_T) \approx$$

$$\approx u_0 \frac{3}{4\frac{1}{2}} \frac{\Delta\omega}{\omega_0} \eta_1^{-3} \gamma \operatorname{sh}^2\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) \exp\left[-\gamma \operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right)\right]. \quad (V. 102)$$

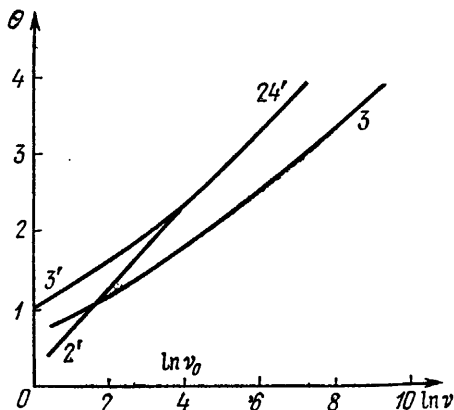


Рис. 8. Графическое изображение численных решений уравнений: (V. 96) для T_3 (кривая 3, $\theta \rightarrow \theta_3 = \gamma/\operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT_3}\right)$); (V. 97) для T'_2 (кривая 2', $\theta \rightarrow \theta'_2 = \gamma/\operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT'_2}\right)$); (V. 99a) для T'_1 (кривая 3', $\theta \rightarrow \theta'_3 = \gamma/\operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT'_3}\right)$) и (V. 100) для T'_{24} (кривая 24', $\theta = \theta'_{24} = \gamma/\operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT'_{24}}\right)$).

При $\nu > \nu_0$ область III не существует. Поэтому при $\nu > \nu_0$ кривые 2' и 3' не изображены, а при $\nu < \nu_0$ не изображена кривая 24'. Параметр ν определен согласно (V. 95a).

Здесь J_{\perp} — резонансный интеграл между ближайшими соседями в плоскости, перпендикулярной к главной оси C_3 .

Итак, несмотря на то, что в первом интервале еще применимо уравнение Больцмана ($\mu_t \approx \mu_B$), а действие магнитного поля описывается силой Лоренца, температурная зависимость μ_H и μ_D в силу условия узости зон оказывается разной

$$\mu_H = \mu_D \frac{kT}{2J_{\perp} \exp(-S_T)}. \quad (V. 103)$$

Нижнюю температурную границу T'_1 области II можно приближенно определить из условия сшивания формул (V.101) и (V.103), т. е.

$$kT'_1 = a2J_{\perp} \exp(-S_T). \quad (V. 104)$$

Во втором температурном интервале ($T_3 < T < T'_2$) области II дрейфовая подвижность в основном определяется перескоками полярона с узла на узел, но главный вклад в $\mu_{xy}^{(t)}$ все еще обусловлен действием силы Лоренца, хотя все описание уже ведется в узельном представлении

$$\begin{aligned} \mu_H &= \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy, \pi}^{(t)}}{\mu_h} = \\ &= u_0 \frac{3}{\sqrt{\pi}} \frac{J\tau}{\hbar} \tau \left\langle \frac{\omega_q^2 |\gamma_q|^2 (1 - \cos qg)}{2 \operatorname{sh}(\hbar\omega_q/2kT)} \right\rangle^{1/2} \exp\left(-3S_T + \frac{E_a(T)}{kT}\right) \approx \\ &\approx u_0 \frac{3}{2\sqrt{\pi\xi^2}} \left(\frac{\Delta\omega}{\omega_0}\right)^2 \eta_1^{-7} \gamma^{3/2} \operatorname{sh}^{1/2}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) \times \\ &\times \exp\left\{-\gamma \left[\operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) + 2 \operatorname{sh}^{-1}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right)\right]\right\}. \quad (V. 105) \end{aligned}$$

Итак, в случае б), когда $\nu < 52,4$, температурные зависимости μ_H и μ_D в области II сильно отличаются: холловская подвижность все время падает с увеличением температуры, а дрейфовая подвижность в интервале $T_3 < T < T'_2$ уже начинает расти. Такая возможность была впервые отмечена еще в [33].

В случае в), когда $\nu > 52,4$, тоже следует произвести разбиение области II на два интервала $T'_1 < T < T_3$ и $T_3 < T < T'_2$, в которых будут справедливы формулы (V.102) и (V.105) соответственно, однако теперь переход из области II будет происходить сразу в область IV.

В области III ($T'_2 < T < T'_3$), которая существует при $\nu < 52,4$, движение вдоль электрического поля E осуществляется за счет перескоков с узла на узел, а движение в направлении, перпендикулярном E и H , осуществляется за счет туннельного просачивания, причем действие магнитного поля уже не описывается силой Лоренца, а целиком определяется влиянием магнитного

поля на вероятность туннельного просачивания

$$\mu_{\text{H}} = \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy, \text{нл}}^{(t)}}{\mu_{\text{h}}} = u_0 3 \sqrt{2} \frac{J\tau}{\hbar} \exp \left[-2S_T + \frac{E_a(T)}{2kT} \right] \approx$$

$$\approx u_0 \frac{3}{\sqrt{2\xi}} \frac{\Delta\omega}{\omega_0} \eta_1^{-3} \gamma \operatorname{sh}^2 \left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right) \exp \left\{ -\gamma \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega_0}{4kT} \right) \right\}. \quad (\text{V. 106})$$

Итак, при переходе из области II в область III скорость уменьшения μ_{H} с ростом T несколько замедляется, однако отличие в температурном поведении μ_{D} и μ_{H} остается столь же разительным.

В области IV движение вдоль электрического поля \mathbf{E} и движение в направлении, перпендикулярном \mathbf{E} и \mathbf{H} , осуществляется за счет надбарьерных прыжков с узла на узел. Зависимость вероятностей перехода от магнитного поля имеет квантовомеханическое происхождение. Она возникает из-за того, что матричные элементы оператора перехода от m -го к $(m+g)$ -у узлу содержат фазовые множители $\alpha(m+g, m)$, зависящие от \mathbf{H} (см. § 2). Полная амплитуда перехода от узла m к узлу m' является суммой *парциальных амплитуд*, каждая из которых отвечает вполне определенному пути по решетке от m к m' и содержит в показателе вполне определенную комбинацию фазовых множителей

$$\alpha^{(i)}(m \rightarrow m') = \alpha(m, m + g_1^{(i)}) +$$

$$+ \alpha(m + g_1^{(i)}, m + g_1^{(i)} + g_2^{(i)}) + \dots + \alpha(m' - g_n^{(i)}, m'),$$

в которой набор промежуточных индексов отвечает пройденному пути, т. е. у каждого i -го пути имеется свой набор индексов $g_1^{(i)}, g_2^{(i)}, \dots, g_n^{(i)}$, а число отрезков пути n соответствует порядку по J для данной парциальной амплитуды. Поскольку при вычислении вероятности перехода берется квадрат *полной амплитуды* перехода, то в произведении возникают интерференционные члены, содержащие разности фазовых множителей $\alpha^{(i)}(m \rightarrow m') - \alpha^{(j)}(m \rightarrow m')$. Таким образом, зависимость вероятности перескока от \mathbf{H} есть следствие квантовой интерференции и никак не связана с силой Лоренца.

При $\eta_1 \ll 1$, $\eta_2 < 1$, $\eta_3 < 1$, $J/kT < 1$ и $T > T_0$, согласно [35], имеем

$$\mu_{\text{H}}^{(h)} = \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy}^{(h)}}{\mu_{\text{h}}} \approx u_0 \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{3} \right)^{1/2} \eta_1 \gamma^{1/2} \operatorname{sh}^{1/2} \alpha \exp \left[-\frac{2}{3} \gamma \operatorname{th} \frac{\alpha}{2} \right] \exp \left[\frac{\gamma}{2 \operatorname{sh} \alpha} \Phi(\alpha) \right].$$

$$(\text{V. 107})$$

Здесь $\Phi(\alpha) = 2 \left[3 \operatorname{ch} \frac{\alpha}{3} - \frac{1}{3} \operatorname{ch} \alpha - \frac{8}{3} \right]$. При $kT \approx \hbar\omega_0/5$ функция $\Phi(\alpha)$ достигает значений порядка единицы, а затем сильно убывает с ростом T . Поэтому при

$$kT > kT_0 = \hbar\omega_0/2 \operatorname{arcsch} \gamma \text{ и } kT > \hbar\omega_0/5$$

показатель правой экспоненты в (V. 107) меньше единицы, и ее можно опустить. При $kT > \frac{\hbar\omega_0}{2} \left(\frac{E_a}{18\hbar\omega_0}\right)^{1/2}$ из (V. 107) следует известная формула [35, 57]

$$\mu_H^{(h)} = u_0 \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{3}\right)^{1/2} \eta_1 \left(\frac{E_a}{kT}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_a}{3kT}\right). \quad (\text{V. 108})$$

Совершенно очевидно, что абсолютная величина μ_H и ее температурное поведение должны очень сильно зависеть от численных значений основных безразмерных параметров теории.

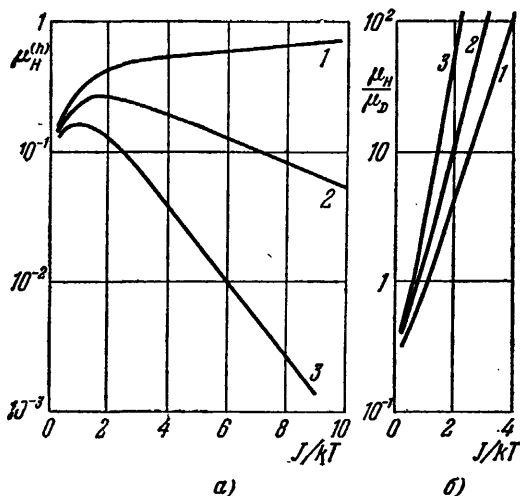


Рис. 9. а) Температурная зависимость перескокового вклада в холловскую подвижность $\mu_H^{(h)}$ (в единицах $u_0 \frac{\hbar\omega_0}{J} \frac{1}{4\pi}$) в адиабатическом случае ($\eta_2 \geq 1$) для гексагональных кристаллов (при $H \parallel C_3$) при трех различных значениях параметров E_a/J : $E_a/J=3$ (кривая 1); $E_a/J=3,75$ (кривая 2); $E_a/J=5$ (кривая 3). б) Отношение μ_H/μ_D в адиабатическом случае ($\eta_2 > 1$) для гексагональных кристаллов ($H \parallel C_3$) при трех разных значениях параметров E_a/J : $E_a/J=3$ (кривая 1); $E_a/J=3,75$ (кривая 2); $E_a/J=5$ (кривая 3).

Так, при $\eta_2 \geq 1$ и произвольных J/kT (но $\eta_1 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$), согласно [60], имеем

$$\mu_H^{(h)} = u_0 \frac{\hbar\omega_0}{kT} \frac{1}{4\pi} f_1\left(\frac{J}{kT}\right) \exp\left\{-\frac{\left(\frac{1}{3}E_a - J\right)}{kT}\right\}, \quad (\text{V. 109})$$

где $f_1 \approx kT/J$ при $J/kT \ll 1$, $f_1 \approx 1$ при $J/kT > 1$. Формула (V. 109) справедлива при $\frac{1}{3}E_a - J > 0$. Интересно отметить, что при $\frac{1}{3}E_a - J \approx \hbar\omega_0/2$ (но $E_a \gg \hbar\omega_0/2$, $J/kT \approx 1$) перескоковый вклад в холловскую подвижность может даже слабо убывать с ростом T (рис. 9, а), в то время как дрейфовая подвижность будет активационным образом расти с температурой

$$\mu_D^{(h)} = u_0 \frac{3}{4\pi} \frac{\hbar\omega_0}{kT} \exp\left\{-\frac{E_a - J}{kT}\right\}. \quad (\text{V. 110})$$

При $J/kT \ll 1$, $\eta_2 > 1$ отношение μ_H/μ_D меньше, чем при $J/kT \ll 1$, $\eta_2 < 1$, но все же не может стать $\ll 1$ (рис. 9, б).

Хотелось бы еще раз подчеркнуть, что произведенное выше аналитическое описание $\mu_H(T)$, в процессе которого мы разбивали весь температурный интервал на четыре области, носит несколько условный характер, особенно при не слишком большой константе связи электрон-фононного взаимодействия γ . Дело в том, что в этом случае переходная область вблизи каждой из границ между областями заметно расширяется (т. е. границы сильно размыты). Поэтому в промежуточной области III, где вместо полной $\mu_{xy}^{(t)}$ мы оставляли только нелоренцевский вклад $\mu_{xy, нл}^{(t)}$, могут играть заметную роль и лоренцевский вклад (в низкотемпературном интервале области III) и перескоковый вклад (в высокотемпературном интервале области III). При малых γ эти поправки могут значительно видоизменить ту температурную зависимость μ_H в области III, которая была получена без учета этого обстоятельства. Ниже приведены полные аналитические выражения для μ_D и μ_H , справедливые в приближении слабой дисперсии ($\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$, при условии $\eta_1 \ll 1$, $\eta_2 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$, $J/kT \ll 1$ и при $T > T_0$).

$$\mu_D = \mu_t + \mu_h = u_0 3 \sqrt{\pi} \frac{J^2}{\hbar\omega_0 kT} \frac{v}{\theta^2} \exp(-2\gamma \operatorname{cth} \alpha) \left(1 + \frac{\theta^{3/2}}{2v} e^{2\theta}\right), \quad (V. 111)$$

$$\begin{aligned} \mu_H &= \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy, л}^{(t)} + \mu_{xy, нл}^{(t)} + \mu_{xy}^{(h)}}{\mu_h + \mu_t} = \\ &= u_0 \frac{3 \sqrt{\pi}}{2} \frac{J}{\hbar\omega_0} \frac{v}{\theta^2} e^{-\gamma \operatorname{cth} \alpha} \frac{1 + \sqrt{2} \frac{\theta^{3/2}}{v} e^{\theta} + \frac{1}{3\sqrt{3}} \frac{\theta^3}{v^2} \frac{\exp\left(3\theta \operatorname{ch} \frac{\alpha}{3}\right)}{\operatorname{ch} \frac{\alpha}{3}}}{1 + \frac{\theta^{3/2}}{2v} e^{2\theta}}. \end{aligned} \quad (V. 112)$$

Здесь приняты обозначения $\theta = \gamma \operatorname{sh}^{-1} \alpha$, $\alpha = \frac{\hbar\omega_0}{2kT}$, $v = \frac{\omega_0 \tau (T_0)}{\sqrt{\pi}}$.

В (V. 111) и (V. 112) учтено, что на самом деле в каждой из областей одновременно действуют все вклады: $\mu_{xy, л}^{(t)}$, $\mu_{xy, нл}^{(t)}$ и $\mu_{xy}^{(h)}$. Если оставить только первые члены в числителе и знаменателе дроби, стоящей справа в (V. 112), то получим лоренцевский вклад (V. 102). Если в знаменателе оставить второй член, а в числителе первый, приходим к (V. 105) и т. д. На рис. 10 приведены зависимости $\mu_H(T)$ и $\mu_D(T)$ для гексагональных кристаллов, рассчитанные по формулам (V. 112) и (V. 111) при значениях параметров $\gamma = 3, 4$ и $v = 30, 90$, причем значению $v = 30$ соответствует случай б), когда существует область III, а значению $v = 90$ соответствует случай в), когда область III отсутствует. Как видно из рис. 10, а, при $\gamma = 3$ область роста μ_H с T

практически отсутствует, а μ_D растет с T (в области IV), хотя и слабо. При $\gamma = 4$ (см. рис. 10, б) уже видна область температур, где с ростом T растут и μ_D и μ_H , однако произведенное аналитическое исследование показывает, что μ_D растет более резко, чем μ_H . Поскольку минимум для μ_D расположен в области более низких температур, чем для μ_H , то имеется область температур, где μ_D уже растет с ростом T , а μ_H все еще убывает.

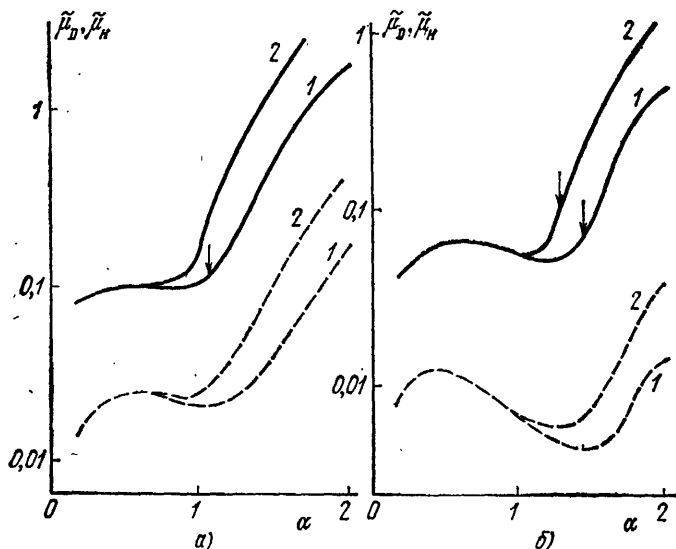


Рис. 10. Температурные зависимости холловской подвижности (сплошные кривые), дрейфовой подвижности (штриховые) в гексагональных кристаллах при различных значениях параметров γ и ν . Расчет произведен по формулам (V.111) и (V.112) для безразмерных величин: $\mu_D = \frac{1}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{\hbar\omega_0}{J} \right)^2 \frac{\mu_D}{u_0}$; $\mu_H = \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \frac{\hbar\omega_0}{J} \frac{\mu_H}{u}$. Графики 10, а рассчитаны при $\gamma=3$; графики 10, б — при $\gamma=4$. Кривым 1 соответствует $\nu=30$, кривым 2 — $\nu=90$. По оси абсцисс отложена обратная температура в единицах $\alpha = \hbar\omega_0/2kT$. Стрелки на кривых μ_D указывают положение минимума соответствующей кривой μ_D .

При меньших ограничениях на величину J эта область может заметно расшириться и даже в области IV μ_H будет продолжать убывать с ростом T (ср. со случаем $\eta_2 > 1$, $J/kT < 1$, разобранным выше). Совершенно очевидно, что дополнительный учет других механизмов рассеяния (на примесях, на акустических фононах и т. д.) может заметно изменить все описанные выше результаты, особенно в области низких температур и частично в области промежуточных температур.

В. Холловская подвижность в кубических кристаллах. И в этом случае целесообразно разбить весь температурный диапазон на четыре области. Мы не будем проводить здесь подробный анализ положения границ между областями (он выполняется аналогично тому, как это было сделано в случае гексагональных

кристаллов) и приведем лишь упрощенные выражения для μ_H в разных областях.

В области I все соображения, изложенные для гексагональных кристаллов, остаются в силе. В области II ($T'_1 < T < T'_2$), согласно (V. 84) и (V. 85), в интервале $T'_1 < T < T_3$ будем иметь

$$\mu_H = \mu_D \left\{ \frac{\tau'}{\tau} + \frac{1}{4} \frac{kT}{2E_a - E'_a} \left(1 + 2 \frac{\tau'}{\tau} \right) \exp(2S_T - S'_T) \right\}. \quad (\text{V. 113})$$

Обозначения здесь те же, что и в формуле (V. 85). При $T < T'$ (см. (V. 86)) отношение μ_H/μ_D равно числу τ'/τ , а вовсе не единице, как это утверждается в [34]. При $T > T'$ становится существенным второй член в (V. 113). Напомним, что он связан с перенормировкой полярной скорости и в данном конкретном случае проистекает от линейных по H поправок к скорости полярона, описываемых графиками второго порядка $W_{нд}^{(2)}$. Поскольку Фридман [34] предполагал, что для ПМР в этой области температур справедливо обычное кинетическое уравнение, в котором действие магнитного поля целиком описывается силой Лоренца, то он, естественно, не мог учесть квазилоренцевского вклада (V. 85), и получил только первый член в (V. 113) (в приближении $\tau' = \tau$), который соответствует учету поправок $(\Delta \epsilon_p/kT)^2$, возникающих при разложении равновесной функции распределения в режиме узких зон.

Итак, в интервале $T_3 > T > T'$ видим, что по порядку величины $\mu_H/\mu_D \approx \eta_1 \frac{kT}{J} \exp(S_T)$, что ближе соответствует случаю гексагональных кристаллов, чем результат $\mu_H/\mu_D \approx \tau'/\tau$ при $T' > T > T'_1$. Заметим, что область $T' > T > T'_1$ весьма узка.

Если имеет место соотношение $T'_1 < T_1 < T_3 < T'_2$ (в гексагональных кристаллах это соответствовало бы случаю б)), то в третьем интервале $T_3 < T < T'_2$, лежащем в той же области II,

$$\begin{aligned} \mu_H &= u_0 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1 + 2\tau'/\tau}{2 - E'_a/E_a} \left(\frac{J}{\hbar\tau} \right)^2 \frac{1}{E_a} \left\langle \frac{E_a(\mathbf{q}, \mathbf{g}) \hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2 \operatorname{sh}(\hbar\omega_{\mathbf{q}}/2kT)} \right\rangle^{1/2} \times \\ &\times \exp\left(-2S_T - S'_T + \frac{E_a}{kT}\right) \approx \\ &\approx u_0 \frac{1}{2\sqrt{\pi}\xi^2} \frac{1 + 2\tau'/\tau}{2 - \gamma'/\gamma} \gamma^{1/2} \left(\frac{\Delta\omega}{\omega_0} \right)^2 \eta_1^{-6} \operatorname{sh}^{7/2} \alpha \exp\left\{ -\frac{2\gamma}{\operatorname{sh} \alpha} - \gamma' \operatorname{cth} \alpha \right\}. \end{aligned} \quad (\text{V. 114})$$

Нижняя строчка в (V. 114) отвечает приближению слабой дисперсии $\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$. При этом

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{g})) \neq \gamma' = \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 [1 - \cos(\mathbf{q}(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2))]. \end{aligned}$$

В общем случае $2 \geq \gamma'/\gamma \geq 1$. Только в приближении короткодействия, когда $|\gamma_q|^2 \hbar \omega_0 \rightarrow \text{const}$ (см. гл. I второй части), получим $\gamma' = \gamma$. При идеальном дальнодействии значение γ' ближе к 2γ .

В области III при условии, что $T_3 < T'_2$, из (V.90) получим

$$\mu_H = \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy}^{(t)}, \text{пл}}{\mu_h} = u_0 8 \sqrt{2} \left(\frac{E_a}{E'_a} \right)^{1/2} \frac{J^2}{(2E_a - E'_a) \hbar \tau} \exp\left(-2S_T + \frac{2E_a - E'_a}{2kT}\right) \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{1}{4} \frac{\tau'}{\tau} \left(2 \frac{E_a}{E'_a} - 1 \right)^{-1/2} \exp[-2(S'_T - S_T)] \exp\left(\frac{E'_a - E_a}{kT}\right) \right\}. \quad (\text{V.115})$$

Для того чтобы зависимость μ_H от T стала более явной, упростим (V.115), перейдя к приближению слабой дисперсии ($\Delta\omega \ll \omega_0$). В результате получим

$$\mu_H \sim \text{sh}^2\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) \exp\left(-\gamma \text{eth}\left(\frac{\hbar\omega_0}{4kT}\right)\right) \exp\left(-(\gamma' - \gamma) \text{th}\left(\frac{\hbar\omega_0}{4kT}\right)\right) \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{(1/4) \tau'/\tau}{(2\gamma'/\gamma' - 1)^{1/2}} \exp\left[-\frac{2(\gamma' - \gamma)}{\text{sh}(\hbar\omega_0/2kT)}\right] \right\}. \quad (\text{V.115a})$$

В приближении короткодействия $\gamma' = \gamma$ вся температурная зависимость определяется первыми двумя множителями в (V.115a). В приближении сильного дальнодействия $\gamma' - \gamma \approx \gamma$, т. е. можно пренебречь вторым членом в фигурной скобке, и температурная зависимость μ_H будет определяться первыми тремя множителями в (V.115a).

В принципе надо было бы исследовать возможность реализации случая $T'_2 < T_3 < T'_3$, но скорее всего он также маловероятен, как и случай а) для гексагональных кристаллов (требуются слишком малые значения ν).

В области IV общее выражение для μ_H , согласно (V.94) и (II.23, б), имеет вид [58, 59]

$$\mu_H^{(h)} = \frac{c}{H} \frac{\mu_{xy}^{(h)}}{\mu_h} = \\ = u_0 \frac{\sqrt{\pi}}{4} \frac{\delta^{3/2}}{(\delta - 1)(2 - \delta)^{1/2}} \eta_1^2 \left(\frac{E_a}{kT} \right) \exp\left(-\frac{E'_a}{2kT}\right) f\left(\frac{(\delta - 1)(2 - \delta)}{\delta} \frac{E_a}{kT}\right), \quad (\text{V.116})$$

где f определена формулой (V.94a).

При $\frac{(\delta - 1)(2 - \delta)}{\delta} \frac{E_a}{kT} \gg 1$ из (V.116) получим

$$\mu_H^{(h)} \approx u_0 \frac{\sqrt{\pi}}{8} \eta_1^2 \left(\frac{E_a}{kT} \right)^{1/2} \frac{\delta^2}{(2 - \delta)(\delta - 1)^{3/2}} \exp\left(-(\delta - 1) \frac{E_a}{kT}\right). \quad (\text{V.117})$$

Из (V.117) видно, что лишь в модели короткодействия, когда $\delta = 4/3$, показатель экспоненты в (V.117) становится равным

$-E_a/3kT$, что совпадает со случаем гексагональных кристаллов. Поскольку в общем случае $2 > E'_a/E_a > 1$ (т. е. $2 \geq \delta \geq 1/3$), то температурный ход $\mu_H^{(h)}$ сильно зависит от характера электрон-фононного взаимодействия, т. е. от вида функции $|\gamma_q|^2$. Например, в пределе идеального дальнего действия, когда $E'_a \rightarrow 2E_a$,

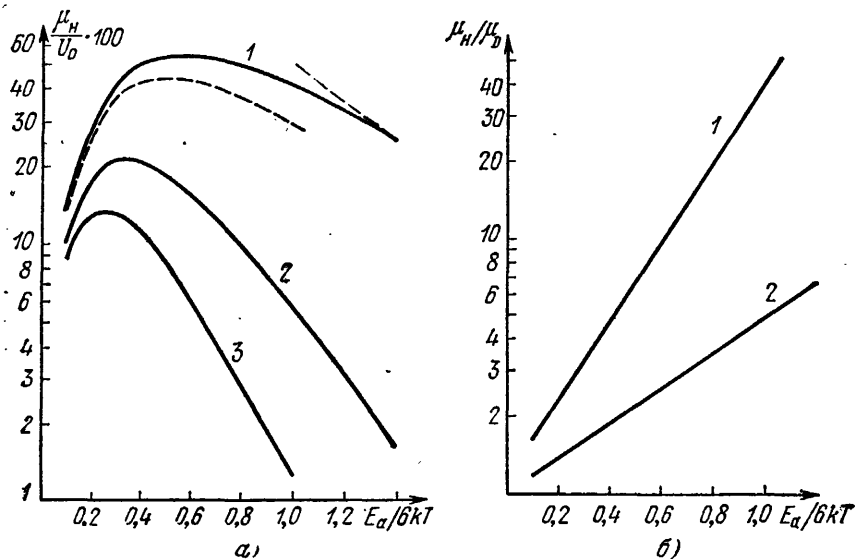


Рис. 11. а) Температурная зависимость безразмерной холловской подвижности μ_H/U_0 для кубических кристаллов при различных значениях δ . Здесь $U_0 = \frac{3}{2} \sqrt{\pi} u_0 \frac{J^2}{E_a^2}$. Кривая 1 соответствует $\delta = 1/3$, 2 — $\delta = 5/3$, 3 — $\delta = 2$. При $\delta = 2$ (кривая 3) температурная зависимость такая же, как в случае дрейфовой подвижности μ_D/U_0 . Штриховые кривые показывают температурную зависимость μ_H/U_0 согласно интерполяционным формулам Эмина [61]. б) Температурная зависимость отношения $\mu_H/\mu_D = \exp cR$ для кубических кристаллов при различных значениях δ . Кривые 1 и 2 относятся соответственно к случаям $\delta = 1/3$ и $\delta = 5/3$. При $\delta = 2$ имеем $\exp cR = 1$.

$\delta \rightarrow 2$, т. е. $\frac{(\delta - 1)(2 - \delta)}{\delta} \frac{E_a}{kT} < 1$, используя (V. 116), получим

$$\mu_{H1}^{(h)} = u_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{J^2}{E_a^{1/2} (kT)^{3/2}} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) = \mu_D^{(h)}, \quad (V. 118)$$

следовательно, температурная зависимость μ_H и μ_D вообще одинакова, а их отношение равно единице.

Графики температурной зависимости μ_H и отношения μ_H/μ_D изображены на рис. 11 (при $\eta_2 \ll 1$). Видно, что при малых J убывание μ_H с ростом температуры начинается с более низких температур, чем для гексагональных кристаллов, для которых $kT_{\max} = 2/3 E_a$. Например, в случае $\delta = 1/3$ для кубических кристаллов имеем $kT_{\max} = 2/7 E_a$. Поэтому при не слишком больших

значениях γ туннельный вклад может еще сильнее маскировать перескоковый, чем в случае гексагональных кристаллов, и область роста $\mu_{\text{п}}$ с увеличением T может либо вообще исчезать, либо стать очень узкой.

Случай произвольных η_2 и J/kT для кубических кристаллов не исследовался. Впрочем, в [60] имеется утверждение о том, что в адиабатическом пределе ($\eta_2 \gg 1$) в случае короткодействования ($\delta = 4/3$) энергии активации дрейфовой и холловской подвижностей соответственно равны

$$E_a^{(D)} = E_a - J, \quad E_a^{(H)} = \frac{E_a}{3} - (\sqrt{2} - 1)J. \quad (\text{V. 119})$$

Очевидно, что, как и в пределе малых J , выражения для $E_a^{(D)}$ и $E_a^{(H)}$ должны очень сильно зависеть от характера электрон-фононного взаимодействия (т. е. от вида функции $|\gamma_{\mathbf{q}}|^2$).

Как и в случае гексагональных кристаллов, учет взаимодействия поляронов с акустическими фононами и с примесями может сильно изменить результаты в области низких и промежуточных температур.

§ 9. Заключительные замечания

Результаты, полученные в этой главе, делятся на две категории:

I) результаты, имеющие общий характер, не ограниченные рамками модели ПМР.

II) результаты, относящиеся непосредственно к ПМР.

Перечислим сначала результаты общего характера:

1. В однозонном (другие зоны отстоят достаточно далеко) и одноэлектронном (концентрация носителей тока не настолько велика, чтобы учитывать корреляционные поправки) приближениях выведено общее уравнение переноса (V. 45), справедливое при любой ширине разрешенной зоны для квазичастиц и любых значениях константы связи с колебаниями решетки и пригодное в широком интервале значений электрического и магнитного полей. Единственное ограничение на поля сверху заключается в том, что они не должны вызывать межзонного пробы. Дан графический рецепт определения вероятностей перехода (см. Приложение 9) и перенормированной скорости $v^{\text{эфф}}(\mathbf{k})$ (см. выражение (V. 44a)), позволяющий учесть влияние внешних полей на акт перехода.

2. Напомним, что при проведении расчетов мы использовали совершенно определенную калибровку для векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \frac{e}{\hbar c} [\mathbf{H} \times \mathbf{r}]$. Однако использование такой калибровки диктуется лишь соображениями удобства расчетов и вполне понятным стремлением представить выражения для $f(\mathbf{k})$, $v^{\text{эфф}}(\mathbf{k})$ и уравнение переноса в такой форме, чтобы по-

том легче было проводить аналогию с кинетическим уравнением. В другой калибровке зависимости $v^{\text{эфф}}(\mathbf{k})$, $f(\mathbf{k})$ и даже вид уравнения переноса (V.45) могут измениться, однако наблюдаемая величина — ток — от калибровки зависеть не будет, ибо исходное выражение для тока (V.13) является калибровочно инвариантным. Действительно, переход к иной калибровке $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \nabla\varphi(\mathbf{r})$, где $\varphi(\mathbf{r})$ — произвольная скалярная функция, приведет к замене

$$a_m^+ \rightarrow a_m^+ \exp[i\varphi(\mathbf{m})], \quad a_m \rightarrow a_m \exp[-i\varphi(\mathbf{m})].$$

Проводя затем под знаком шпура в (V.14) каноническое преобразование с помощью оператора вида $\hat{T} = \exp\left\{-i \sum_m \varphi(\mathbf{m}) a_m^+ a_m\right\}$, приведем выражение (V.13) для тока к прежнему виду.

3. Выражение (V.44) для тока и квантовое уравнение переноса (V.45) внешне имеют много общего с традиционными соотношениями, но имеются и существенные отличия. Соотношения (V.44) и (V.45) записаны не в импульсном, а в обобщенном вигнеровском представлении. При этом вся специфика вигнеровского представления перенесена на определение вероятностей $W(\mathbf{k}\mathbf{k}', \kappa)$ (связь между вигнеровским и импульсным представлениями задается соотношением типа (V.30)), а квантовые числа \mathbf{k} , \mathbf{k}' , κ по-прежнему имеют смысл волновых векторов. Это позволяет корректно описать зависимость $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \kappa)$ от \mathbf{H} и в случае конечной ширины разрешенной зоны.

Несколько непривычно выглядит в (V.44) замена скорости $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ на $\mathbf{v}^{\text{эфф}}(\mathbf{k})$. Отличие $\mathbf{v}^{\text{эфф}}(\mathbf{k})$ от $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ имеет фундаментальное значение, ибо именно за счет поправки $-i \sum_{\mathbf{k}'} W_i(\mathbf{k}\mathbf{k}')$

и возникает прыжковый вклад в подвижность. Эта поправка обращается в 0, если \mathcal{H}_{int} коммутирует с оператором координаты (т. е. дипольного момента $\hat{\mathbf{d}}$). Для обычного гамильтониана Фрелиха $[\mathcal{H}_{\text{int}}, \hat{\mathbf{d}}] = 0$, но для перенормированного поляронного \mathcal{H}_{int} , описываемого формулой (I.38), это не так. Член, связанный с магнитным полем в левой части уравнения (V.45), не имеет стандартного вида силы Лоренца и при квантующих полях \mathbf{H} позволяет учесть харперовское уширение уровней Ландау за счет конечной ширины разрешенной зоны. При разложении в ряд по \mathbf{H} он принимает вид силы Лоренца.

4. Итак, изложенная выше теория явлений переноса в произвольных полях \mathbf{E} и \mathbf{H} сведена к решению уравнения переноса для функции распределения. Однако пока еще не удалось построить описания в терминах случайных блужданий носителя тока по узлам решетки, подобно тому, как это сделано в гл. I для случая слабого электрического поля при $\mathbf{H} = 0$. Впрочем, тот факт, что в теорию удалось ввести функцию условной вероятности P при произвольных \mathbf{E} и \mathbf{H} позволяет надеяться,

что в будущем удастся решить задачу и в такой постановке. Решение этой проблемы позволило бы, с одной стороны, дать более наглядную интерпретацию полученных результатов для тензора электропроводности (подобно тому, как это было сделано для μ_{xx} в гл. I), а с другой — определить вид тензора коэффициента диффузии при произвольных \mathbf{E} и \mathbf{H} . При этом особый интерес, по-видимому, представляет расчет антисимметричной части тензора коэффициента диффузии, для которого, как известно, соотношение Эйнштейна даже в слабых полях не выполняется [127].

5. В пределе $\mathbf{H} = 0$ уравнение (V.45) переходит в уравнение (IV.83), которое пригодно для описания кинетических явлений в произвольных по силе электрических полях (ограниченных сверху лишь условием отсутствия межзонного пробоя), и позволяет повторить все результаты для ПМР, описанные в предыдущей главе.

6. Проводя процедуру линеаризации по \mathbf{E} , описанную в § 5, получаем соотношения (V.46), (V.52a), (V.56)—(V.59), которые позволяют изучать гальваномагнитные явления как в обычных полупроводниках, так и в материалах, в которых критерий применимости уравнения Больцмана $\hbar/\tau < \bar{\epsilon}$ (где $\bar{\epsilon}$ — средняя энергия носителей тока) не выполняется, например в полупроводниках с узкой разрешенной зоной, в магнитных полупроводниках, в поляронных полупроводниках и т. д. Кстати, отделение квантовых поправок от классического фона в квазиклассических (слабо квантующих) магнитных полях удобно производить именно в обобщенном вигнеровском представлении, а не с помощью предельного перехода от представления уровней Ландау.

7. Вывод о неизбежности существования квазилоренцевских и нелоренцевских поправок, полученный в процессе линеаризации обобщенного уравнения переноса по \mathbf{H} , имеет общий характер и основан лишь на утверждении, что вероятности переходов должны зависеть от \mathbf{E} и \mathbf{H} . В случае слабой связи ($\gamma \ll 1$) эти зависящие от \mathbf{H} поправки малы как γ^2 или γ^4 . Вклад в холловскую подвижность за счет прыжкового механизма, описываемый формулой (V.58), тоже целиком обусловлен зависимостью вероятностей перехода от \mathbf{E} и \mathbf{H} , но он существует только в том случае, если $[\mathcal{H}_{\text{int}}, \hat{a}] \neq 0$.

8. Формулы (I.71) и (V.72) имеют смысл лишь при $\tau W_{\text{нд}} \ll 1$, однако, по-видимому, это условие может реализовываться не только для ПМР.

Теперь перейдем к обсуждению конкретных результатов для модели полярона малого радиуса.

1. Холловский ток для ПМР во всем температурном диапазоне и в широком интервале значения J описывается формулами (V.56)—(V.59). Напомним, что для ПМР $W_1(k, k'; \mathbf{H}, \mathbf{E}) \neq 0$, ибо в этом случае $[\mathcal{H}_{\text{int}}, \hat{a}] \neq 0$ [111]. В областях II, III и IV

расчет удобнее вести в узельном представлении. При этом туннельный вклад описывается формулой (V. 57a) на стр. 342. Формулы (V. 71), (V. 72) имеют замкнутый вид, но они менее точны, чем (V. 57a). Фактически они соответствуют формулам (V. 60a) и (V. 64), полученным в приближении времени релаксации. Для ПМР это приближение отвечает условию $\mathbb{W}_{\text{вдт}} \ll 1$ (см. § 8 гл. I), которое хорошо выполняется в областях II и III и не требует малости J . Поэтому формулы (V. 71) и (V. 72) можно использовать для вычисления $\mu_{xy}^{(t)}$ и в тех случаях, когда некоторые из безразмерных параметров, содержащих J , не малы.

Прыжковый вклад в холловский ток в соответствии с Фридманом и Холстейном [35] описывается формулой (V. 76). Мы показали, что она справедлива при произвольных η_2 , η_3 и J/kT . Однако, согласно (V. 79), в холловском токе содержится еще вклад Δj , описываемый формулой (V. 80). Доказано [113], что он точно обращается в нуль в пределе малых J , однако вопрос о том, можно ли отбрасывать вклад Δj при произвольных η_2 , η_3 и J/kT , пока остается открытым.

2. Почти все результаты, приведенные в §§ 7, 8, относятся к случаю предельно малых J (исключение составляет лишь область высоких температур), однако полученные там общие утверждения наверняка сохраняют смысл и при промежуточных значениях J . Несомненно, что учет туннельного вклада радикально изменяет температурное поведение μ_{H} в области промежуточных температур и даже может полностью замаскировать рост прыжкового вклада $\mu_{\text{H}}^{(\text{h})}$ с увеличением T . Температурное поведение μ_{H} очень сильно зависит от симметрии кристалла (ср., например, выражения для $\mu_{\text{H}}^{(\text{h})}$ для гексагональных и кубических кристаллов). Численное значение μ_{H} и конкретная форма ее температурной зависимости сильно зависят от величины безразмерных параметров теории γ , η_2 , η_3 , J/kT и т. д. Кроме того, как уже отмечалось выше, в области промежуточных температур и особенно низких температур существенную роль может играть рассеяние на акустических фононах и примесях, которое не учтено в приведенных выше выражениях.

3. Все полученные выше результаты относились к случаю чисто марковских процессов. При рассмотрении случая коррелированных перескоков, который реализуется при достаточно малой ширине дисперсии оптических фононов $\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$ (см. [67]), возникнет еще большее количество вариантов температурного поведения μ_{H} и μ_{D} . В частности, даже при неадиабатических перескоках ($\eta_2 \ll 1$) отношение $\mu_{\text{H}}/\mu_{\text{D}}$ может оказаться гораздо ближе к единице, чем в обычном марковском случае:

$$\frac{\mu_{\text{H}}}{\mu_{\text{D}}} \approx \begin{cases} \exp(E_a/6kT) & \text{для гексагональных кристаллов,} \\ \exp(E_a/12kT) & \text{для кубических кристаллов в модели} \\ & \text{короткодействия (при } \delta = 4/3\text{).} \end{cases}$$

Для адиабатических ($\eta_2 > 1$) коррелированных (немарковских) перескоков отношение μ_H/μ_D вообще может стать меньше единицы [9, 60]. Естественно, что учет вклада $\mu_{xy}^{(t)}$ в случае коррелированных перескоков тоже должен резко повлиять на температурную зависимость и абсолютное значение величины μ_H .

Итак, теория ПМР позволяет в принципе объяснить самые разнообразные аномалии в температурном поведении μ_H и μ_D . Величина μ_H , ее знак и конкретная форма ее температурной зависимости определяются симметрией кристалла, величиной безразмерных параметров, типом перескоков (адиабатические или неадиабатические, коррелированные или некоррелированные) и т. д.

Напомним, что многие исследователи либо отождествляли измеряемую на опыте температурную зависимость μ_H с температурной зависимостью μ_D , либо излишне абсолютизировали ранний результат Фридмана и Холстейна (см. V. 92), справедливый лишь для гексагональных кристаллов при $H \parallel C$, $\eta_2 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$, $J/kT \ll 1$ и при $T > T_3$, $T > T'_3$. По этой причине они отвергали поляронную трактовку для многих веществ с малой подвижностью носителей тока, в которых не наблюдался экспоненциальный рост $\mu_H \sim \exp\left(-\frac{1}{3} \frac{E_a}{kT}\right)$ с ростом температуры.

Исследования, проделанные в этой главе, показывают, что даже монотонное убывание μ_H во всем диапазоне температур (см. рис. 9 и 10) само по себе еще не позволяет отвергнуть гипотезу о том, что носителями тока в данном веществе являются ПМР или поляронами промежуточного радиуса. В этом случае для получения более надежных выводов необходимо привлечь большую совокупность экспериментальных данных относительно термо-э. д. с., инфракрасного поглощения, дебаевских потерь, переноса в сильном электрическом поле и т. д. Впервые такая программа была выполнена для рутила (TiO_2) в [8].

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

ПРИЛОЖЕНИЕ I ФОРМУЛА КУБО В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ОПЕРАТОРОВ ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА

Выражение для σ можно представить в виде

$$\sigma_{xx} = -\frac{1}{V k T} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} [\langle d_x(t) d_x(0) \rangle - \langle d_x^2(0) \rangle]. \quad (\text{П.1.1})$$

В общем виде оператор d_x имеет вид:

$$d_x = e \sum_{n, n'} \mathcal{X}_{nm, n'm'} a_{nm}^+ a_{n'm'}, \quad (\text{П.1.2})$$

где $\mathcal{X}_{nm, n'm'}$ — матричный элемент координаты, взятый на функциях Ванье (n (n') — индекс номера зоны, m (m') — номер узла)

$$\mathcal{X}_{nm, n'm'} = \delta_{nn'} \delta_{mm'} X_m + \int \varphi_{n0}^+ (r - [R_m - R_{m'}]) x \varphi_{n'0} (r) d^3r. \quad (\text{П.1.3})$$

Функции Ванье связаны с функциями Блоха соотношениями

$$\varphi_{nm} (r) = \varphi_{n0} (r - R_m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(-ikR_m) \psi_{nk} (r), \quad (\text{П.1.4})$$

$$\psi_{nk} (r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m \exp(ikR_m) \varphi_{nm} (r).$$

Согласно (П.1.3) оператор d_x может быть представлен в виде суммы двух членов:

$$d_0 = e \sum_{n, m} X_m a_{nm}^+ a_{nm}, \quad d' = e \sum_{n, n', m} T_{nn'} (G) a_{n, m+G}^+ a_{n', m}, \quad (\text{П.1.5})$$

где

$$T_{nn'} (G) = \int \varphi_{n0}^* (r - G) x \varphi_{n'0} (r) d^3r. \quad (\text{П.1.6})$$

Переходя в k -представление, получим для d'

$$d' = e \sum_{n, n'} \sum_k Q_{nn'} (k) a_{nk}^+ a_{n'k}, \quad (\text{П.1.7})$$

где

$$Q_{nn'} (k) = \sum_G e^{-ikG} T_{nn'} (G) = iN \int_{\Omega} u_{nk}^* (r) \frac{\partial u_{n'k} (r)}{\partial k_x} d^3r, \quad (\text{П.1.8})$$

\int_{Ω} означает интегрирование по элементарной ячейке.

При получении правой части (П.1.8) использовалась связь (П.1.4), представление блоховской функции $\psi_{nk}(r)$ в виде $\exp(ikr) u_{nk}(r)$ и соотношение

$$\sum_m \exp(i(k' - k) R_m) X_m = -i \frac{\partial}{\partial k'} N \delta_{kk'}. \quad (\text{П.1.9})$$

Известно, что при отсутствии точки или линии смыкания зон $u_{nk}(r)$ есть аналитическая функция от k , т. е. (П.1.9) определено при всех k (см. [53]). Однако ввиду ограниченности u_{nk} и $\partial u_{nk}/\partial k$ внутри зоны Бриллюэна выражение (П.1.9) при $V \rightarrow \infty$ стремится к конечному пределу, ибо интеграл в (П.1.9) имеет порядок $1/N$, что следует из условия нормировки

$$\int_{\Omega} |u_{nk}(r)|^2 d^3r \sim 1/N.$$

Подставим $d_x = d_0 + d'$ в формулу Кубо (П.1.1). Тогда коррелятор в формуле (П.1.1) будет выражен через следующие величины:

$$\langle d_0(t) d_0 \rangle, \langle d'(t) d_0(0) \rangle \text{ и } \langle d_0(t) d'(0) \rangle, \langle d'(t) d'(0) \rangle.$$

Покажем, что при любом конечном N перекрестные члены $\langle d'(t) d_0(0) \rangle$ и $\langle d_0(t) d'(0) \rangle$ всегда могут быть обращены в нуль при надлежащем выборе начала отсчета узлов решетки, например при $\sum_m R_m = 0$. Рассмотрим член $\langle d_0(t) d'(0) \rangle$, равный, с учетом циклических граничных условий,

$$e^2 \sum_{n, n_1, n_1'} \sum_{m, m_1} X_m \tau_{n_1, n_1'}(G) \langle (a_{n_0}^+ a_{n_0})_t a_{n_1, m_1-m+G}^+ a_{n_1, m_1-m} \rangle. \quad (\text{П.1.10})$$

Суммирование по m может быть выполнено независимо. Но в силу условия $\sum_m R_m = 0$ перекрестные члены типа $\langle d_0(t) d'(0) \rangle$ обращаются в нуль.

Используем неравенство, справедливое для любого эрмитова оператора A :

$$\langle A(t) A(0) \rangle \leq \langle A^2(0) \rangle. \quad (\text{П.1.11})$$

Теперь мы в состоянии показать, что члены, содержащие $\langle d'(t) d'(0) \rangle$, выпадают из формулы для электропроводности (П.1.1) при таком предельном переходе, когда сначала $V \rightarrow \infty$, а затем $t \rightarrow \infty$. Выражение $\langle d'(t) d'(0) \rangle$ входит в σ в виде

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \left[\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \langle d'(t) d'(0) \rangle \right]. \quad (\text{П.1.12})$$

Используя (П.1.11), имеем

$$\frac{1}{tV} |\langle d'(t) d'(0) \rangle| \leq \frac{1}{tV} \langle (d'(0))^2 \rangle. \quad (\text{П.1.13})$$

Подставив правую часть (П.1.7) в $\langle (d'(0))^2 \rangle$, получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{tV} \langle (d'(0))^2 \rangle &= \\ &= \frac{1}{tV} \sum_{k_1, k_2} \sum_{n_1, n_1', n_2, n_2'} Q_{n_1 n_1'}(k_1) Q_{n_2 n_2'}(k_2) \langle a_{k_1 n_1}^+ a_{k_1 n_1} a_{k_2 n_2}^+ a_{k_2 n_2} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{П.1.14})$$

Переходя к пределу $V \rightarrow \infty$, в нижшем приближении по электронной плотности n получим

$$\frac{1}{tV} \langle (d'(0))^2 \rangle = \frac{1}{t} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{n_1, n_2} Q_{n_1 n_1}(k) Q_{n_2 n_2}(k) \langle a_{k n_1}^+ a_{k n_2} \rangle. \quad (\text{П.1.15})$$

Здесь $Q_{nn'}(\mathbf{k})$ — ограниченные функции \mathbf{k} . Сначала оценим вклад от членов, отвечающих $n_1 = n_2$. При этом $\langle a_{kn_1}^+ a_{kn_1} \rangle = n(\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}))$ — функция распределения в n_1 -й зоне. Функции $n(\varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}))$ и $\sum_n |Q_{n_1 n}(\mathbf{k})|^2$ ограничены во всем интервале \mathbf{k} и знакопостоянны. Поэтому $n(\varepsilon)$ можно вынести за знак интеграла по \mathbf{k} при некотором значении \mathbf{k}_{n_1} . Выразим Q через T согласно (П.1.8) и подставим в (П.1.15). Используя (П.1.6), суммируя по промежуточным n с использованием правила сумм $\sum_{n, m} \varphi_{nm}(r) \varphi_{nm}'(r) = \Omega_0 \delta(r - r')$, получим, что соответствующий вклад равен

$$\frac{t}{t} \sum_{n_1} n(\varepsilon(\mathbf{k}_{n_1})) \int |\varphi_{n_1}(r)|^2 x^2 d^3 r \sim \frac{a^2}{t} \sum_{n_1} n(\varepsilon(\mathbf{k}_{n_1})).$$

Поскольку $n(\varepsilon)$ — убывающая функция от ε , то ряд по n_1 сходится, и при $t \rightarrow \infty$ соответствующий член вклада не дает. Вклад в интеграл по \mathbf{k} за счет членов с $n_1 \neq n_2$ тоже конечен, ибо с ростом $n_1 - n_2$ функция $\langle a_{kn_1}^+ a_{kn_2} \rangle$, отличная от нуля только за счет многофононных межзонных переходов, быстро убывает по мере разнесения зон. Поэтому вклад (П.1.15) по мере роста t стремится к нулю.

Применение подобных оценок к членам типа $\langle d_0(t) d_0(0) \rangle$ приводит к выражению

$$\frac{1}{tV} \sum_{n, m} X_m^2 \langle a_{nm}^+ a_{nm} \rangle. \quad (\text{П.1.16})$$

Очевидно, что при $V \rightarrow \infty$ множитель при $1/t$ стремится к бесконечности. Конкретные вычисления, приведенные в гл. I, показывают, что вклад этих членов в проводимость конечен.

Итак, имеются некоторые основания полагать, что в том случае, когда отсутствуют точки или линии стыка зон, вклад в электропроводность дает лишь диагональная по узлам часть оператора дипольного момента.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

ГРАФИЧЕСКАЯ ТЕХНИКА В УЗЕЛЬНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ ДЛЯ ПМР

Для вычисления величины $M_{mm'}^{mm'}(s)$ (см. (I.55)) разложим в числителе (I.55) все три экспоненты под знаком шпура по формуле Фейнмана

$$\begin{aligned} \exp(-\beta(\mathcal{H}_0 + U)) &= \\ &= \exp(-\beta\mathcal{H}_0) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\beta} d\lambda_n \int_0^{\lambda_n} d\lambda_{n-1} \dots \int_0^{\lambda_2} d\lambda_1 U(-i\hbar\lambda_n) \dots U(-i\hbar\lambda_1), \end{aligned} \quad (\text{П.2.1})$$

$$\begin{aligned} \exp\left(i \frac{t}{\hbar} (\mathcal{H}_0 + U)\right) &= \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 U(t_1) \dots U(t_n) \exp\left(\frac{i}{\hbar} t\mathcal{H}_0\right), \end{aligned} \quad (\text{П.2.2})$$

$$\begin{aligned} \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} (\mathcal{H}_0 + U)\right) &= \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} t\mathcal{H}_0\right) \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 U(t_n) \dots U(t_1), \end{aligned} \quad (\text{П.2.3})$$

где $U(t) = \exp\left(i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}_0\right) U \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}_0\right)$, и используем явное выражение (I.42) для U . Отметим, что при взятии шпура в знаменателе (I.55) достаточно ограничиться в нижнем приближении по концентрации n членом нулевого порядка по U . Произвольный (в данном случае k -й) член разложения $M_{mm'}^{mm'}(s)$ по U имеет структуру

$$\langle a^+ a a^+ a \dots a^+ a \rangle \langle \exp[\Delta \hat{S}_{m_1 g_1}(t_1)] \dots \exp[\Delta \hat{S}_{m_k g_k}(t_k)] \rangle, \quad (\text{П.2.4})$$

где $\Delta \hat{S}_{mg}(t)$ — форма, линейная по b и b^+ ,

$$\Delta \hat{S}_{mg}(t) = (\hat{S}_{m+g} - \hat{S}_m)t = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \{ \Delta(m, g, q) \exp(i\omega_q t) b_q^+ - \text{э. с.} \}. \quad (\text{П.2.5})$$

Электронные и фоновые усреднения производятся независимо. Электронные средние вычисляются непосредственно, так как в нашем приближении имеется электронное вырождение по узельным индексам, и электронное среднее не содержит времен. В нижнем по n приближении остается лишь один вариант электронных спариваний:

$$\langle \underbrace{a^+ a a^+ a a^+}_{\dots} \dots \underbrace{a a^+ a a^+}_{\dots} a \rangle, \quad (\text{П.2.6})$$

при этом все спаривания, изображенные нижними скобками, дают единицу. Единственное спаривание, дающее n , изображено верхней скобкой. В результате электронных спариваний получаются определенные соотношения между узельными индексами. Фоновые средние имеют структуру

$$\langle e^{A_1 b^+ - B_1 b} e^{A_2 b^+ - B_2 b} \dots e^{A_k b^+ - B_k b} \rangle. \quad (\text{П.2.7})$$

Здесь A_i, B_i определены в соответствии с (П.2.4), (П.2.5).

Усреднение производится по распределению Планка, каждая нормальная q -я координата усредняется независимо от других. Такие средние легко вычисляются, если принять во внимание операторное тождество

$$e^{\hat{P} + \hat{Q}} = e^{\hat{P}} e^{\hat{Q}} e^{-\frac{1}{2} [\hat{P}, \hat{Q}]} \quad (\text{П.2.8})$$

справедливое для любых двух операторов \hat{P} и \hat{Q} , коммутирующих на c -число; поскольку $[b^+, b] = 1$, то это соотношение применимо и для операторов b, b^+ . Последовательное применение (П.2.8) к (П.2.7) позволяет привести последнее к виду

$$\langle e^{Ab^+} e^{Bb} \rangle_C,$$

где A, B, C — некоторые c -числа, которые легко вычисляются, если использовать следующие соотношения для бозевских операторов (более подробно см. в Приложении I к работе [31])

$$\langle e^{Ab^+} e^{Bb} \rangle = e^{N_q AB}, \quad N_q = (e^{\beta \hbar \omega_q} - 1)^{-1}.$$

В результате получим для (П.2.7)

$$\exp \left\{ - \left(N_q + \frac{1}{2} \right) \sum_{i=1}^n A_i B_i - \frac{1}{2} \sum_{i < k} (A_i B_k - A_k B_i) - \left(N_q + \frac{1}{2} \right) \sum_{i < k} (A_i B_k + A_k B_i) \right\} \quad (\text{П.2.9})$$

и, используя конкретные выражения для A_i, B_i , следующие из (П.2.5), имеем *)

$$A_i B_i = \frac{|\gamma_q|^2}{N} (1 - \cos q g_i), \quad (\text{П.2.10})$$

$$A_i B_k \pm A_k B_i = -\frac{1}{N} |\gamma_q|^2 a_{ik}(q) \begin{cases} \cos \omega_q (t_i - t_k), \\ \sin \omega_q (t_i - t_k), \end{cases} \quad (\text{П.2.11})$$

$$a_{ik}(q) = \cos [q(m_i + g_i - m_k)] + \cos [q(m_i - m_k - g_k)] - \\ - \cos [q(m_i - m_k)] - \cos [q(m_i + g_i - m_k - g_k)]. \quad (\text{П.2.12})$$

Таким образом, взятие шпура может быть выполнено в члене любого порядка по U . Общие правила написания члена любого порядка удобно сформулировать в виде некоторой графической техники, используя введенный Константиновым и Перелем контур в плоскости комплексного времени. Замечая, что

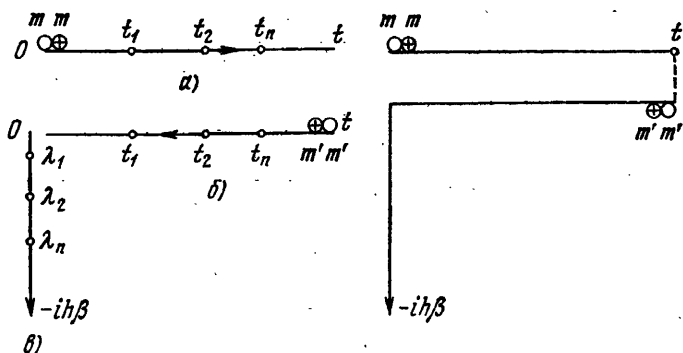


Рис. 12. Контур C в плоскости комплексного времени.

разложение $M(s)$ сводится к разложению в (1.55) трех экспонент под знаком шпура (П.2.1) — (П.2.3), вводим контур, состоящий из трех отрезков.

Один отрезок от 0 до t используем для записи разложения (П.2.3) величины $\exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}\right)$ (рис. 12, а). На нем операторы упорядочиваются против

направления, указанного стрелкой. В самом начале стоит оператор $a_m^+ a_m$

(левая клемма). Для разложения (П.2.2) величины $\exp\left(i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}\right)$ введем от-

резок, идущий из t в 0 (рис. 12, б). Здесь также операторы упорядочены

против направления контура (антихронологически), операторы $a_m^+ a_m$ (правая

клемма), следующие за $\exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}\right)$, но предшествующие $\exp\left(i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}\right)$,

располагаем в самом начале этого отрезка. Для (П.2.1) разложе-

ния $\exp(-\beta \mathcal{H})$ вводим вертикальный контур (на нем «время» чисто мнимо),

идущий от 0 к $-ih\beta$ (рис. 12, в). Здесь опять операторы упорядочены

против направления стрелки. Соединяя эти три участка в один контур C на

плоскости комплексного времени, получаем контур, изображенный на рис. 12

и являющийся основой каждого графика (оба горизонтальных участка на

рис. 12 в действительности совпадают).

*) В (П.2.10), (П.2.11) опущены члены, нечетные по q , поскольку после суммирования по q они пропадут (см., например, свойства (A) на стр. 227).

Теперь ясно, что в m -м порядке по U вклад в $M(s)$ состоит из суммы графиков со всевозможными распределениями m точек по трем отрезкам контура C (см., например, графики второго порядка, изображенные на рис. 13). Электронные спаривания будем обозначать сплошными линиями, выходящими из левой клеммы, проходящими последовательно все точки верхнего отрезка контура. Из его крайней точки электронная линия входит в правую клемму, и, выходя из нее, опять последовательно соединяет все точки на

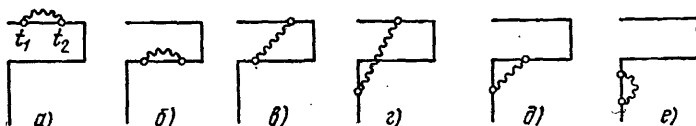


Рис. 13. Графики второго порядка.

нижней горизонтальной части контура и затем все точки вертикальной части контура. Из последней точки линия возвращается в левую клемму. На рис. 14

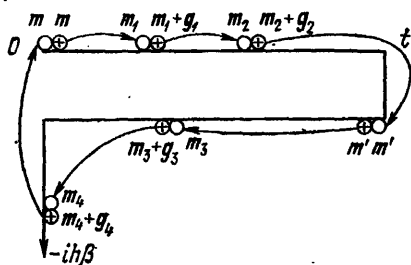


Рис. 14. График четвертого порядка в линейном приближении по n (только одна «неправильная» линия $m_4 + g_4 \rightarrow m$).

изображены электронные спаривания для некоторого расположения точек. Для наглядности операторы a изображены знаком \circ , а a^\dagger — знаком \oplus . Линия, выходящая из \oplus и входящая в \circ , означает спаривание, поэтому оба узельных индекса должны быть равны (например, $m = m_1$, $m_1 + g_1 = m_2$, $m_2 + g_2 = m_3$ и т. д.).

Фононное среднее, отвечающее данному графику, может быть представлено следующим образом. Все внутренние точки (за исключением клемм) соединяются волнистыми линиями попарно. Таким образом, число волнистых линий равно числу пар

точек, которое можно выбрать из n точек, т. е. $C_n^2 = n(n-1)/2$, где n — порядок графика.

Каждой внутренней точке t_i соответствует множитель

$$\frac{i}{\hbar} J(g_i) \exp(-S_T(g_i)),$$

где

$$S_T(g_i) = \frac{1}{2N} \sum_q |\gamma_q|^2 (1 - \cos qg_i) \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \omega_q}{2kT} \right). \quad (\text{П.2.13})$$

Волнистой линии, идущей из точки t_i в точку t_k (t_k предшествует по направлению контура точке t_i), соответствует множитель

$$Z_{ik}(t_i - t_k) = \exp \{ F_{ik}(t_i - t_k + i\hbar\beta/2) \}, \quad (\text{П.2.14})$$

где

$$F_{ik}(z) = \frac{1}{2N} \sum_q \Gamma_q a_{ik}(q) \cos \omega_q z, \quad \Gamma_q = \frac{|\gamma_q|^2}{\operatorname{sh}(\hbar \omega_q \beta/2)}. \quad (\text{П.2.15})$$

Величина $a_{ik}(q)$ определяется согласно (П.2.12).

Далее необходимо произвести суммирование по всем узельным индексам (с учетом ограничений, налагаемых электронными спариваниями) и интегрирование по всем внутренним временам в соответствии с порядком, задаваемым расположением точек на контуре C . Окончательное выражение (для дан-

ного распределения точек по частям контура C) умножается на $(-1)^{n_1}$, где n_1 — число точек на верхней части горизонтального участка контура.

Важно отметить, что показатель экспоненты для $Z_{ik}(t)$, т. е. для $F_{ik}(t)$, при $t \rightarrow \infty$ стремится к нулю из-за наличия дисперсии фононов (можно показать, что, как правило, $F(t) \sim t^{-1/2}$ при $\omega_0 t \gg 1$), а следовательно, $Z_{ik} |_{t \rightarrow \infty} \rightarrow 1$. Поэтому каждый член ряда для $M(s)$ будет стремиться к бесконечности как некоторая степень $1/s$ при $s \rightarrow 0$ ввиду наличия интегрирования по t в пределах от 0 до ∞ . Точнее, вклад от графика, содержащего k точек на горизонтальных участках контура, ведет себя при $s \rightarrow 0$ как полином степени $k+1$ от $1/s^*$.

Это свойство разложения в ряд теории возмущений корреляторов, зависящих от времени, хорошо известно (см., например, [23, 28]) и связано с тем, что такое разложение в действительности является итерационным рядом некоторого интегрального уравнения для $M(s)$. Этот ряд теряет смысл при $s \rightarrow 0$. Во многих случаях структура указанного итерационного ряда позволяет установить вид этого уравнения, если собрать все члены разложения при заданных степенях $1/s$. В случае, рассмотренном Константиновым и Перелем [23], это выполнялось непосредственно, так как при использовании гамильтониана Фрелиха (см. (I, 20a)) степени $1/s$ уже явно содержатся в каждом члене разложения по H_{int} . Интегрирование по внутренним временам в этом случае тривиально, так как зависимость от времени входит во все графики [23] только в простом экспоненциальном виде

$$\exp \{i(\omega_1 t_1 + \omega_2 t_2 + \dots + \omega_k t_k)\}. \quad (\text{П.2.16})$$

В рассматриваемом нами случае зависимость подынтегрального выражения от внутренних времен имеет гораздо более сложный вид, и определяется функциями вида (П.2.14), поэтому интегрирование по t в явном виде выполнить невозможно. Здесь необходимо применить некоторую вычислительную процедуру, состоящую в том, что из вклада данного графика вычитается некоторое выражение простого вида, которое компенсирует указанные расходимости. Чтобы не изменить результат, должна быть прибавлена сумма всех таких «контрчленов», но ввиду простой структуры каждого «контрчлена» такой ряд может оказаться легко суммируемым. Предварительно модифицируем изложенную графическую технику, используя еще один прием Константинова и Переля, что делает возможным выделение указанных особенностей.

*) Для иллюстрации рассмотрим график с двумя точками, изображенный на рис. 13, а. Его вклад пропорционален следующему интегралу:

$$I_2 = \int_0^{\infty} e^{-st} dt \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 Z_{12}(t_1 - t_2). \quad (\text{а})$$

Представим $Z_{12}(t)$ в виде $[Z_{12}(t) - Z_{12}(\infty)] + Z_{12}(\infty)$. Тогда интеграл (а) представится в виде суммы двух интегралов $I_2^{(1)} + I_2^{(2)}$, где

$$I_2^{(1)} = \int_0^{\infty} e^{-st} dt \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 Z_{12}(\infty) = \frac{1}{3!} \frac{1}{s^3} Z_{12}(\infty),$$

$$I_2^{(2)} = \int_0^{\infty} e^{-st} dt \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 [Z_{12}(t_1 - t_2) - Z_{12}(\infty)].$$

Нетрудно убедиться, что ввиду того, что подынтегральное выражение в $I_2^{(2)}$ стремится к нулю при $t_1 - t_2 \rightarrow \infty$, то $I_2^{(2)}$ ведет себя как $1/s^2$. Итак, мы представили I_2 в виде $a/s^3 + b/s^2$.

Заметим, что если график содержит точки на обоих горизонтальных частях контура, то вклад от него содержит две независимые группы зацепляющихся интегралов

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{r-1}} dt_r \int_0^t dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_2 \dots \int_0^{t'_{p-1}} dt'_p, \quad (\text{П.2.17})$$

где, например, t — времена, лежащие на верхнем, а t' — на нижнем участках контура. Поскольку от указанного выражения должна быть взята лапласова преобразованная, то желательно иметь под знаком интеграла по t не два независимых зацепляющихся интеграла, а один последовательно зацепляющийся интеграл. Выражение вида (П.2.17) всегда можно представить в виде суммы некоторого числа однократно зацепляющихся интегралов. Например, вклад графика с двумя точками (рис. 13, в) имеет вид

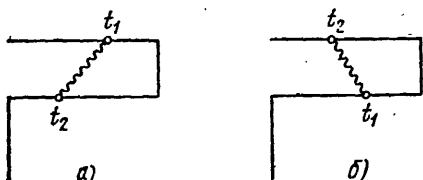


Рис. 15. Графики второго порядка.

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 F(t_1, t_2), \quad (\text{П.2.18})$$

что можно представить в виде суммы однократно зацепляющихся интегралов:

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 + \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1. \quad (\text{П.2.19})$$

Каждому из двух членов в (П.2.19) мы сопоставляем два разных графика, отличающихся расположением точек на верхней части горизонтального контура (рис. 15). Такая процедура может быть выполнена в любом порядке. Например, графику с тремя точками, две из которых находятся на верхнем отрезке контура, а одна на нижнем, соответствует набор трех разных графиков, отличающихся расположением нижней точки относительно двух верхних точек, и т. д. Такой прием был впервые предложен в [23] для случая слабой связи. В дальнейшем мы будем иметь дело лишь с такими графиками. Все правила графической техники, изложенные выше, справедливы и для них, кроме того, что интегрирование по внутренним временам всегда дается однократно зацепляющимся интегралом с порядком, соответствующим расположению точек на контуре графика.

Как уже отмечалось выше, каждый член разложения $M(s)$ расходится при $s \rightarrow 0$ как некоторая степень $1/s$. Поэтому при вычислении электропроводности нельзя ограничиваться никаким конечным числом членов. Это не удивительно, так как в противном случае, устремив взаимодействие к нулю, мы получили бы равную нулю электропроводность, в то время как в отсутствие взаимодействия она должна стать равной бесконечности. Отсюда видно, что для вычисления электропроводности необходимо суммирование бесконечного числа членов ряда. Оказывается, что такое суммирование сводится к получению для $M(s)$ некоторого уравнения. Изложим схему его вывода.

Выше отмечалось, что член n -го порядка разложения ведет себя как полином от $1/s$ степени $n+1$. Поэтому этот член можно представить в виде

$$\begin{aligned} M^{(n)}(s) &= \frac{1}{s} \left[A_n^{(n)} \frac{1}{s^n} + A_{n-1}^{(n)} \frac{1}{s^{n-1}} + \dots + A_1^{(n)} \frac{1}{s} + A_0^{(n)} \right] = \\ &= \frac{1}{s} \sum_{k=0}^{n+1} A_k^{(n)} \left(\frac{1}{s} \right)^k. \quad (\text{П.2.20}) \end{aligned}$$

Перестроим теперь весь ряд для $M(s)$ по степеням $1/s$. При $1/s$, очевидно, будет стоять множитель $\sum_{k=0}^{\infty} A_0^{(k)}$, а при $(1/s)^2$ — множитель $\sum_{k=0}^{\infty} A_1^{(k)}$, при $1/s^p$ — множитель $\sum_{k=0}^{\infty} A_{p-1}^{(k)}$ и т. д. Структура рядов $\sum_{k=0}^{\infty} A_p^{(k)}$ такова, что все они выражаются через некоторые величины $\Gamma_{m_1, m_2}^{m_1, m_2}$ и $\mathbb{W}_{m_2, m_4}^{m_1, m_3}$ так, что

$$\sum_{k=0}^{\infty} A_0^{(k)} = \Gamma_{m_1, m_2}^{m_1, m_2}, \quad (\text{П.2.21})$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} A_1^{(k)} = \sum_{m_1, m_2} \Gamma_{m_1, m_2}^{m_1, m_2} \mathbb{W}_{m_2, m_4}^{m_1, m_3}, \quad (\text{П.2.22})$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} A_2^{(k)} = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_3, m_4}} \Gamma_{m_1, m_2}^{m_1, m_2} \mathbb{W}_{m_2, m_4}^{m_1, m_3} \mathbb{W}_{m_4, m_6}^{m_3, m_5}, \quad (\text{П.2.23})$$

и т. п. Заметим, что все $A_p^{(k)}$ относительно узельных индексов имеют вид $(A_p^{(k)})_{m_1, m_2}^{m_1, m_2}$. Согласно (П.2.21) — (П.2.23) разложение $M(s)$ по степеням $1/s$ символически можно представить в виде следующего ряда:

$$M = \hat{\Gamma} \frac{1}{s} + \hat{\Gamma} \frac{1}{s} \hat{\mathbb{W}} \frac{1}{s} + \hat{\Gamma} \frac{1}{s} \hat{\mathbb{W}} \frac{1}{s} \hat{\mathbb{W}} \frac{1}{s} + \dots = \hat{\Gamma} \hat{P}, \quad (\text{П.2.24})$$

где

$$\hat{P} = \frac{1}{s} + \frac{1}{s} \hat{\mathbb{W}} \frac{1}{s} + \frac{1}{s} \hat{\mathbb{W}} \frac{1}{s} \hat{\mathbb{W}} \frac{1}{s} + \dots, \quad (\text{П.2.25})$$

а $\hat{\Gamma}$ и $\hat{\mathbb{W}}$ — матрицы, построенные из величин $\Gamma_{m_1, m_2}^{m_1, m_2}$ и $\mathbb{W}_{m_2, m_4}^{m_1, m_3}$.

Из (П.2.25) видно, что \hat{P} удовлетворяет уравнению

$$\hat{P} = \frac{1}{s} + \frac{1}{s} \hat{\mathbb{W}} \hat{P}. \quad (\text{П.2.26})$$

По самому способу получения $\hat{\mathbb{W}}$ и $\hat{\Gamma}$ должны быть некоторыми рядами по степеням взаимодействия.

Теперь выведем уравнение (П.2.26) и изложим рецепт получения величин $\hat{\Gamma}$ и $\hat{\mathbb{W}}$, используя графическую технику. Чтобы получить разложение вида (П.2.20), надо выделить расходимости $1/s$. Замечая, что источником расходимостей является стремление $Z_{ik}(t)$ при $t \rightarrow \infty$ к конечному пределу (именно, $Z_{ik}(\infty) = 1$), представим $Z_{ik}(t_i - t_k)$ в каждом графике в виде

$$Z_{ik}(t_i - t_k) = \tilde{Z}_{ik}(t_i - t_k) + 1.$$

Величина $\tilde{Z}_{ik}(t) = Z_{ik}(t) - 1$ стремится к нулю при $t \rightarrow \infty$ (*). Тогда вклад от некоторого графика, пропорциональный $\prod_{i < k} Z_{ik}(t_i - t_k)$, может быть представлен в виде произведения $\prod_{i < k} [\tilde{Z}_{ik}(t_i - t_k) + 1]$. Выполняя умножение,

видим, что вклад, соответствующий одному исходному графику, можно представить в виде суммы некоторого числа иных графиков, которые строятся по тем же правилам, что и прежде, кроме того, что в них волнистой фонной

* Этот прием аналогичен используемому в майеровской теории неидеального газа.

линии теперь соответствует величина Z_{ik} . Например, графика третьего порядка теперь соответствует сумма восьми графиков нового типа на рис. 16. Практически можно «генерировать» новые графики (построенные с помощью Z_{ik}) из старых по очень простому рецепту: вместо старого графика надо нарисовать такой же график (но иметь в виду, что каждой линии теперь

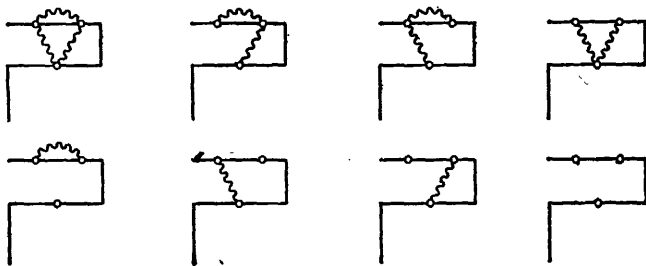


Рис. 16. Модифицированные графики третьего порядка.

соответствует Z_{ik}) и прибавить сумму графиков, получающихся из него удалением любой одной, любой пары, любых n линий.

Отличительной чертой графиков нового типа является то, что они могут содержать так называемые «свободные сечения». Мы будем говорить, что график содержит свободное сечение, если его можно пересечь вертикальной линией, не пересекая ни одной волнистой фоновой линии. Для примера на рис. 17 показаны графики с одним *а*), двумя *б*), тремя *в*) и четырьмя *г*)

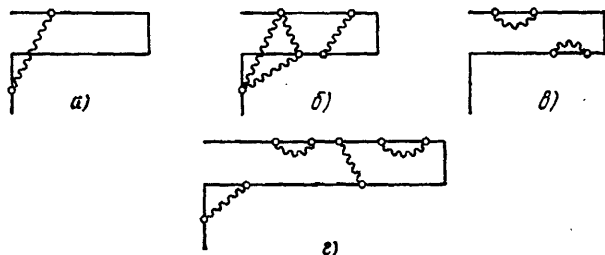


Рис. 17. Графики, содержащие разное число свободных сечений.

свободными сечениями. Введение графиков нового типа позволяет осуществить перестройку итерационного ряда для $M(s)$ по степеням $1/s$ вида (П.2.24), если учесть, что каждому свободному сечению соответствует множитель $1/s$ (это свойство свободных сечений выводится ниже). Именно, первый член в (П.2.24) соответствует сумме всех графиков с одним свободным сечением, второй — сумме всех графиков с двумя свободными сечениями и т. д. Нетрудно понять, что любой из графиков нового типа имеет вид совокупности некоторого числа блоков (частей, не содержащих свободных сечений), соединенных между собой свободными сечениями (рис. 18).

Существуют блоки двух типов: а) внутренние блоки (мы будем называть их вероятностями перехода, однако следует помнить, что они могут быть комплексными), не содержащие точек на мнимой части контура (блоки 2, 3 на рис. 18); б) угловые части (блок 1 на рис. 18), содержащие хотя бы одну точку на мнимой части контура, а следовательно, и левую клемму. Каждый внутренний блок характеризуется четырьмя узельными индексами и имеет структуру $W_{m_2, m_1}^{(i) m_1, m_2}$. Он всегда нулевого порядка по электронной плот-

ности n . Угловая часть имеет структуру $\Gamma_{mm_2}^{(i)}$ и пропорциональна первой степени n (см. Приложение 4). Внутренние блоки $\Gamma_{mm_2}^{(i)}$ и $W_{m_2 m_1}^{(i)}$ можно представить в виде «скелетных» диаграмм и более сложных блоков, получающихся из «скелетных» путем вставления «внутренних» скелетных блоков и точек. По определению «скелетный» график получается из данного удалением из него всех «пустых» точек и внутренних блоков, т. е. блоков, которые не связаны фоновыми линиями с остальными частями графика, т. е. с его «скелетом» и другими внутренними блоками. Все это очень напоминает обычные приводимые графики в теории поля, за тем лишь исключением, что из одной точки может исходить много фоновых линий ($n-1$ линий в графике

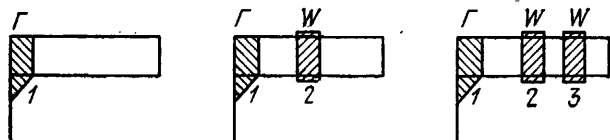


Рис. 18. Различные блоки (Γ и W), разделенные свободными сечениями.

с n точками). Необычным является и появление «пустых» точек. Оказывается, что суммирование «пустых» точек легко выполняется и дает выражения вида $\exp\left(-i \frac{\tau}{\hbar} \varepsilon(\mathbf{k})\right)$, где $\varepsilon(\mathbf{k})$ — энергия полярона. Поскольку $\varepsilon(\mathbf{k}) \sim \Delta E \times \exp(-S_T)$, то при не слишком низких температурах в пределах точности вычислений можно заменить все $\exp\left(-i \frac{\tau}{\hbar} \varepsilon(\mathbf{k})\right)$ на 1. Такие же показатели в экспонентах получаются, если проводить расчеты в k -представлении с самого начала, как это делалось в [31] (см. § 16 в I части книги). Суммирование внутренних блоков в заданном «скелете» при не слишком малых $\Delta\omega/\omega_0$ изменяет поведение подынтегральных выражений (по сравнению со скелетным) лишь на временах $t \sim 1/W$ ($W \ll \omega_0$) существенно больших, чем те, которые определяют основную вклад скелета. Это и означает, что во всех порядках по J предпочтительнее холстейновский рецепт устранения расходимостей («вычитательная процедура»). Поэтому в дальнейшем мы будем, как правило, вычислять лишь «скелетные» диаграммы. Процедура Ван Хове также приводит к появлению затухающих множителей под знаком многократных интегралов по t . Однако по тем же самым причинам разумно и в них выделять «диагональные переходы».

Теперь для примера просуммируем простейшие графики с «пустыми» точками, которые содержат только одну фоновую линию, соединяющую точки 1 и 2, и отличаются лишь числом и расположением «пустых» точек в промежутке t_2, t_1 на верхней и нижней частях контура. Вклад в подынтегральное выражение от суммы таких графиков можно записать как

$$W_{nn'}^{mm'}(t_2 - t_1) = \sum_{g, g'} Z_{12}(t_2 - t_1, m - m'; g, g') \tilde{P}_{nn'+g, m'-g'}^{m+g, m'-g'}(t_2 - t_1), \quad (\text{П. 2.27})$$

где \tilde{P} удовлетворяет уравнению

$$\frac{d\tilde{P}_{n, n'}^{m+g, m'-g'}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \sum_{g_1} J(g_1) e^{-S_T(g_1)} \left[\tilde{P}_{n, n'}^{m+g, m'-g'-g_1} - \tilde{P}_{n, n'-g_1}^{m+g, m'-g'} \right] \quad (\text{П. 2.28})$$

с начальным условием

$$\tilde{P}_{n, n'}^{m, m'}(t) \Big|_{t=0} = \delta_{mm'} \delta_{nn'}.$$

Решение его можно искать в виде

$$P_{n, n'}^{m+g, m'-g'}(t) = \sum_{k_1, k_2} P_{k_2}^{k_1}(t) \exp \{ i [k_1 (m + g - m' + g') - k_2 (n - n')] \}. \quad (\text{П. 2.29})$$

Из (П. 2.28), учитывая (П. 2.29), получаем

$$P_{k_2}^{k_1}(t) = \frac{1}{N^2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2)] t \right\}, \quad (\text{П. 2.30})$$

где

$$\varepsilon(k) = \sum_g \exp(-ikg) J(g) \exp[-S_T(g)].$$

Тогда

$$\begin{aligned} W_{nn'}^{mm'}(t_2 - t_1) &= \sum_{g, g'} \frac{1}{N^2} \sum_{k_1, k_2} Z_{12}(t_2 - t_1, m - m', g, g') \times \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2)] (t_2 - t_1) \right\} \times \\ &\quad \times \exp \{ i (m + g - m' + g') k_1 - i (n - n') k_2 \}. \end{aligned} \quad (\text{П. 2.31})$$

Поскольку все характерные времена меньше $\frac{\hbar}{J} \exp[S_T(g)]$, то пренебрегая $\varepsilon(k)$ в экспонентах, имеем

$$W_{n, n'}^{m, m'}(t_2 - t_1) = \sum_{g, g'} Z_{12}(t_2 - t_1) \delta_{nn'} \delta_{m+g, m'-g'}, \quad (\text{П. 2.32})$$

что отвечает «скелетному» графику без «пустых» точек.

Вернемся теперь к задаче получения уравнения для $M_{mm'}^{mm'}(s)$. Обозначим через $\Gamma^{(i)}$ (или $W^{(i)}$) сумму вкладов в Γ (или в W), отвечающих всем графикам с i -точками ($\sim J^i$). Тогда будем иметь

$$\Gamma_{mm_2}^{mm_1} = \sum_{(i)} \Gamma_{mm_2}^{(i)mm_1}, \quad (\text{П. 2.33})$$

$$W_{m_2 m_4}^{m_1 m_3} = \sum_{(i)} W_{m_2 m_4}^{(i)m_1 m_3}. \quad (\text{П. 2.34})$$

Здесь суммируются всевозможные графики, соответствующие блокам данного типа. Вводя графические обозначения для Γ и W (мы будем называть их полной угловой частью и полным внутренним блоком), легко видеть, что M имеет графическую структуру, изображенную на рис. 18. Аналитическое выражение для суммы на рис. 18 есть

$$M_{mm'}^{mm'} = \Gamma_{mm'}^{mm'} \frac{1}{s} + \sum_{m_1, m_2} \Gamma_{mm_2}^{mm_1} \frac{1}{s} W_{m_2 m'}^{m_1 m'} \frac{1}{s} + \dots, \quad (\text{П. 2.35})$$

а Γ и W имеют структуру (П. 2.33) и (П. 2.34). Поэтому, как прежде, можно представить $M_{mm'}^{mm'}(s)$ в виде

$$M_{mm'}^{mm'}(s) = \sum_{m_1, m_2} \Gamma_{mm_2}^{mm_1} P_{m_2 m'}^{m_1 m'}, \quad (\text{П. 2.36})$$

где P представляется в виде графической суммы (рис. 19) или в аналитической форме

$$P_{m_1 m_2}^{m_1' m_2'}(s) = \frac{1}{s} + \frac{1}{s} W_{m_2 m_2'}^{m_1 m_1'} \frac{1}{s} + \frac{1}{s} \sum_{m_3, m_4} W_{m_2 m_4}^{m_1 m_3} \frac{1}{s} W_{m_4 m_2'}^{m_3 m_1'} \frac{1}{s} + \dots \quad (\text{П.2.37})$$

Выражение (П.2.37) аналогично (П.2.25), т. е. P удовлетворяет уравнению

$$s P_{m_2 m_2'}^{m_1 m_1'} = \delta_{m_1 m_2} \delta_{m_1 m_2'} + \sum_{m_3, m_4} W_{m_2 m_4}^{m_1 m_3} P_{m_4 m_2'}^{m_3 m_1'} \quad (\text{П.2.38})$$

аналогичному (П.2.26). Графически (П.2.38) представлено на рис. 20. Итак, мы достигли поставленной цели — избавились от расходимостей по степеням $\frac{1}{s}$. Решив уравнение (П.2.38), выразим M через компактные блоки Γ и W , не

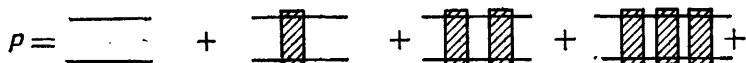


Рис. 19. Сумма графиков для $P(s)$.

содержащие степеней $1/s$. Одновременно мы получили рецепт, позволяющий написать W и Γ в любом порядке теории возмущений.

Заметим, что величина P может быть представлена в виде

$$P_{m_1 m_2}^{m_1' m_2'}(s) = \int_0^\infty e^{-st} dt \frac{\text{Sp} \{ \langle 0 | \exp(-\beta \mathcal{H}_0) a_{m_2} (a_{m_1}^+ a_{m_2}')_t a_{m_1}^+ | 0 \rangle \}}{\text{Sp}(\exp(-\beta \mathcal{H}_0))} \quad (\text{П.2.39})$$

Здесь $\langle 0 | \dots | 0 \rangle$ означает взятие вакуумного матричного элемента по электронным операторам, а шпур берется по фоновым переменным.

Величина $(a_{m_1}^+ a_{m_2}')_t$ является оператором в гейзенберговском представлении с гамильтонианом $\mathcal{H}_0 + U$. Действительно, разлагая (П.2.39) в ряд

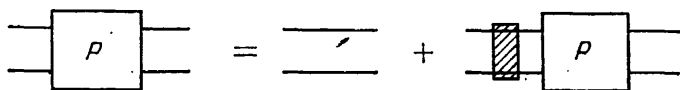


Рис. 20. Графическое уравнение для $P(s)$.

по взаимодействию, мы получим, что каждый член разложения представляется графиками, построенными по указанным выше правилам, за исключением того, что здесь отсутствуют графики с точками на мнимой части контура. Кроме того, операторная структура (П.2.39) относительно электронных операторов такова, что электронное среднее (вакуумное) не зависит от t . Другими словами, отсутствуют как раз те элементы, которые в (П.2.36) были отнесены к угловой части Γ . Представление (П.2.39) удобно для установления некоторых общих свойств P . Например, суммируя (П.2.39) по индексу m_1' , получаем

$$\sum_{m_1'} P_{m_2 m_2'}^{m_1 m_1'}(s) = \int_0^\infty e^{-st} dt \frac{\text{Sp} \left\{ \langle 0 | \exp(-\beta \mathcal{H}_0) a_{m_2} \sum_{m_1'} (a_{m_1}^+ a_{m_2}')_t a_{m_1}^+ | 0 \rangle \right\}}{\text{Sp}(\exp(-\beta \mathcal{H}_0))} \quad (\text{П.2.40})$$

Учитывая, что $\sum_m a_m^+ a_m = 1$ ($a_m^+ | 0 \rangle$ — одночастичное состояние), имеем

$$\sum_{m'} P_{m_1 m_2}^{m_1 m'}(s) = \frac{1}{s} \frac{\text{Sp} \{ \langle 0 | \exp(-\beta \mathcal{H}_0) a_{m_2}^+ a_{m_1}^+ | 0 \rangle \}}{\text{Sp}(\exp(-\beta \mathcal{H}_0))} = \frac{1}{s} \delta_{m_1 m_2}. \quad (\text{П.2.41})$$

При $m_1 = m_2$ из (П.2.41) следует

$$\sum_{m'} P_{mm'}^{mm'}(t) = 1. \quad (\text{П.2.42})$$

Свойство свободных сечений. Выше упоминалось, что каждому свободному сечению соответствует множитель $1/s$. Докажем это правило.

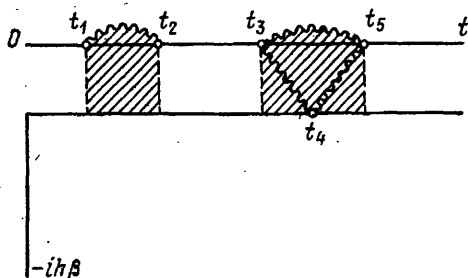


Рис. 21. График с двумя блоками второго и третьего порядков.

Вклад любого графика, составленного из p блоков, разделенных свободными сечениями, может быть записан в соответствии с графическими правилами следующим образом (нижний индекс у W будет означать порядковый номер блока):

$$\int_0^\infty e^{-st} dt \int_0^t dt_{2p} \int_0^{t_{2p}} dt_{2p-1} W_p(t_{2p} - t_{2p-1}) \int_0^{t_{2p-1}} dt_{2p-2} \int_0^{t_{2p-2}} dt_{2p-3} \times \\ \times W_{p-1}(t_{2p-2} - t_{2p-3}) \dots \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 W_1(t_2 - t_1). \quad (\text{П.2.43})$$

Например, вклад графика на рис. 21 пропорционален

$$\int_0^\infty e^{-st} dt \int_0^t dt_5 \int_0^{t_5} dt_4 \int_0^{t_4} dt_3 F^{(2)}(t_4 - t_5, t_5 - t_3, t_4 - t_3) \int_0^{t_3} dt_2 \times \\ \times \int_0^{t_2} dt_1 F^{(1)}(t_2 - t_1) = \int_0^\infty e^{-st} dt \int_0^t dt_5 \int_0^{t_5} dt_3 \int_0^{t_5} dt_4 F^{(2)}(t_4 - t_5, t_5 - t_3, t_4 - t_3) \times \\ \times \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 F^{(1)}(t_2 - t_1). \quad (\text{П.2.44})$$

Представив интеграл по t_4 в виде интеграла по $t'_4 = t_4 - t_3$

$$\int_0^{t_5-t_3} dt'_4 F^{(2)}[t'_4 - (t_5 - t_3), t_5 - t_3, t'_4], \quad (\text{П.2.45})$$

мы видим, что (П.2.44) приводится к виду (П.2.43), где W_2 пропорционально выражению (П.2.45), а W_1 представлено через $F^{(1)}(t_2 - t_1)$. Выразим все W_i в (П.2.43) через их лапласовы преобразованные согласно соотношению

$$W_i(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \exp(s_i \tau) W(s_i) ds_i \quad (\text{П.2.46})$$

Тогда мы получаем, что (П.2.43) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi i} \int_L W_p(s_p) ds_p \frac{1}{2\pi i} \int_L W_{p-1}(s_{p-1}) ds_{p-1} \dots \frac{1}{2\pi i} \int_L W_1(s_1) ds_1 \times \\ & \times \int_0^\infty e^{-st} dt \int_0^t dt_{2p} e^{s_p t_{2p}} \int_0^{t_{2p}} e^{-s_{p-1} t_{2p-1}} dt_{2p-1} \int_0^{t_{2p-1}} e^{s_{p-1} t_{2p-2}} dt_{2p-2} \times \\ & \times \int_0^{t_{2p-2}} e^{-s_{p-1} t_{2p-3}} dt_{2p-3} \times \dots \times \int_0^{t_2} e^{s_1 t_2} dt_2 \int_0^{t_2} e^{-s_1 t_1} dt_1. \end{aligned} \quad (\text{П.2.47})$$

Интегрируя последовательно все t_i , начиная с t_1 , удается вычислить все интегралы до конца; при этом (П.2.47) принимает вид

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{s} \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{W_p(s_p) ds_p}{s - s_p} \right) \left(\frac{1}{s} \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{W_{p-1}(s_{p-1}) ds_{p-1}}{s - s_{p-1}} \right) \dots \\ & \dots \left(\frac{1}{s} \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{W_1(s_1) ds_1}{s - s_1} \right) \frac{1}{s}; \end{aligned} \quad (\text{П.2.48})$$

⁽¹⁾ $W(s)$ аналитична в правой полуплоскости, т. е. по формуле Коши имеем

$$\frac{1}{2\pi i} \int_L W_i(s_i) \frac{ds_i}{s - s_i} = W_i(s). \quad (\text{П.2.49})$$

Поэтому (П.2.48) сводится к виду

$$\frac{1}{s} W_p(s) \frac{1}{s} W_{p-1}(s) \frac{1}{s} \dots \frac{1}{s} W_1(s) \frac{1}{s}, \quad (\text{П.2.50})$$

таким образом, вклад графика, содержащего свободные сечения, равен произведению вкладов всех блоков на произведение вкладов от каждого свободного сечения; последний, как то видно из (П.2.50), есть множитель $1/s$.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНАЯ МАЛОСТЬ ВЕРОЯТНОСТЕЙ НЕДИАГОНАЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ $W_{m_1, m_2}^{m_1, m_2}$

1) Простейшим примером недиагонального блока является пустая точка, вклад от которой равен $\pm i \frac{J(g)}{\hbar} \exp(-S_T(g))$, т. е. он экспоненциально мал.

2) Для графика с двумя точками на верхнем временном отрезке контура C , отвечающего члену $W_{m, m}^{m, m+g_1+g_2}$, имеем (ср. с (16.23)

в I части книги)

$$\left(\frac{J}{\hbar}\right)^2 \exp[-S_T(\mathbf{g}_1) - S_T(\mathbf{g}_2)] \int_0^\infty dt \left\{ \exp \left[\sum_q \Gamma_{12}(\mathbf{q}) \cos(\omega_q t + i\alpha_q) \right] - 1 \right\}, \quad (\text{П.3.1})$$

где

$$\Gamma_{12}(\mathbf{q}) = \frac{|\gamma_q|^2 a_{12}(\mathbf{q})}{2N \operatorname{sh} \alpha_q}, \quad \alpha_q = \frac{\hbar \omega_q}{2kT},$$

$$a_{12}(\mathbf{q}) = 1 + \cos(\mathbf{q}\mathbf{g}_1 + \mathbf{q}\mathbf{g}_2) - \cos \mathbf{q}\mathbf{g}_1 - \cos \mathbf{q}\mathbf{g}_2.$$

При $\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 = 0$ выражение (П.3.1) описывает вероятность перескока $\mathcal{W}_h^{(2)}(\mathbf{g})$ на соседний узел. Для $\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 \neq 0$ подынтегральная функция при $t=0$, помноженная на $\exp[-S_T(\mathbf{g}_1) - S_T(\mathbf{g}_2)]$, мала как

$$\exp \left\{ -\frac{1}{2N} \sum_q |\gamma_q|^2 [1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{g}_1 + \mathbf{q}\mathbf{g}_2)] \operatorname{cth} \alpha_q \right\} = \exp(-\alpha S_T) \ll 1. \quad (\text{П.3.2})$$

Отличие $\exp(-\alpha S_T)$ от $\exp(-S_T)$ заключается в замене $1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{g}) \rightarrow 1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{g}_1 + \mathbf{q}\mathbf{g}_2)$, что, очевидно, не меняет порядка величины показателя

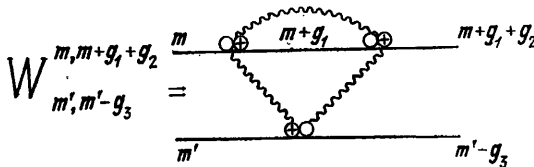


Рис. 22. Вероятность недиагонального перехода третьего порядка.

экспоненты. Напишем отдельно выражения для мнимой и действительной частей:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \mathcal{W}_{m, m}^{m, m+g_1+g_2} &= \\ &= \beta \left(\frac{J}{\hbar}\right)^2 \exp[-S_T(\mathbf{g}_1) - S_T(\mathbf{g}_2)] \int_0^1 \exp \left[\sum_q \Gamma_{12}(\mathbf{q}) \operatorname{ch}(\alpha_q x) \right] dx, \quad (\text{П.3.3}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \mathcal{W}_{m, m}^{m, m+g_1+g_2} &= \\ &= \left(\frac{J}{\hbar}\right)^2 \exp[-S_T(\mathbf{g}_1) - S_T(\mathbf{g}_2)] \int_0^\infty dt \left\{ \exp \left[\sum_q \Gamma_{12}(\mathbf{q}) \cos(\omega_q t) \right] - 1 \right\}. \quad (\text{П.3.4}) \end{aligned}$$

Следует рассмотреть два случая: $a_{12} > 0$ и $a_{12} < 0$. В первом случае ($a_{12} > 0$) максимальное значение показателя экспоненты в (П.3.3) будет при значении $x=1$, и вклад, по крайней мере, мал как (П.3.2). Во втором случае при $a_{12} < 0$ надо разлагать показатель экспоненты вблизи $x=0$, и вклад мал, как

$$\exp[-S_T(\mathbf{g}_1) - S_T(\mathbf{g}_2) + F_{12}(0)] \ll 1, \quad (\text{П.3.5})$$

Здесь

$$F_{12}(0) = \frac{1}{2N} \sum_q \frac{|\gamma_q|^2}{\operatorname{sh} \alpha_q} a_{12}(\mathbf{q}).$$

Рассмотрим теперь (П.3.4), т. е. вещественную часть блока. При не слишком малой дисперсии можно утверждать, что уже при $t \approx \omega_0^{-1}$ абсолютная величина показателя во второй экспоненте (П.3.4) уменьшится на величину, сравнимую с абсолютной величиной показателя при $t = 0$, т. е. при $t \approx \omega_0^{-1}$ компенсации множителя $\exp[-S_T(g_1) - S_T(g_2)]$ заведомо не произойдет. Поэтому достаточно рассмотреть возможность компенсации при $\omega_0 t \ll 1$, когда можно разлагать в ряд по t в показателе (П.3.4). Если в этом разложении коэффициент при t^2 отрицателен, то можно воспользоваться методом перевала. Порядок малости при этом определяется величиной

$$\exp[-S_T(g_1) - S_T(g_2) + F_{12}(0)] = \exp[-S_T(g_1 + g_2)] \exp \varphi_{12}, \quad (\text{П.3.6})$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_{12} &= -S_T(g_1) - S_T(g_2) + S_T(g_1 + g_2) + F_{12}(0) = \\ &= \frac{1}{2N} \sum_q |\gamma_q|^2 \text{th} \left(\frac{\alpha_q}{2} \right) [-(1 - \cos(qg_1)) - (1 - \cos(qg_2)) + \\ &\quad + (1 - \cos(qg_1 + qg_2))]. \end{aligned} \quad (\text{П.3.6a})$$

Используя выражения для S и F , можно переписать (П.3.6) в виде

$$\begin{aligned} \exp \left[-S_T(g_1 + g_2) - \frac{\tilde{E}_a(g_1, T) + \tilde{E}_a(g_2, T) - \tilde{E}_a(g_1 + g_2, T)}{2kT} \right] = \\ = \exp \left(-\alpha S_T - \gamma \frac{\tilde{E}_a}{kT} \right). \end{aligned} \quad (\text{П.3.7})$$

Если коэффициент при члене t^2 положителен, то $t = 0$ не есть точка перевала, $F(t)$ растет с ростом t и, очевидно, перевальная точка будет в области $t \sim \omega_0^{-1}$. Так может быть, например, если $g_1 + g_2 = 2g_1$; тогда выражение

$$1 + \cos(qg_1 + qg_2) - \cos(qg_1) - \cos(qg_2) = 1 + \cos(2qg_1) - 2 \cos(qg_1) \quad (\text{П.3.8})$$

можно под знаком суммы по q в (П.3.6a) заменить выражением

$$2 \cos(qg_1) [\cos(qg_1) - 1]. \quad (\text{П.3.9})$$

Если основной вклад в сумму по q дают малые q , то в этом случае коэффициент при t^2 действительно положителен, т. е. перевальная точка находится не в нуле. При этом компенсации фактора $\exp(-2S_T(g_1))$ не может произойти, и по порядку величины интеграл будет меньше, чем (П.3.6) или (П.3.7).

3) Докажем, что при произвольном числе точек (n на верхнем и l на нижнем отрезках контура C) вклад в W_{mm}^{0m} по крайней мере содержит экспоненциальную малость вида

$$\exp \left\{ -S_T(m) - \frac{E_a(m - m') + E_a(m') - E_a(m)}{2kT} \right\}, \quad (\text{П.3.10})$$

если все перевальные точки по приведенным временам (см. ниже) лежат в нуле или на мнимой оси.

Каждой точке на верхнем (нижнем) отрезке контура C , в которой узельный индекс меняется на g_i (g'_j), сопоставим время t_i (t'_j), где $i = 1, 2, \dots, n$, $j = 1, 2, \dots, l$. Индексы u g_i , t_i на верхнем отрезке возрастают слева направо (от 1 до n), а u g'_j , t'_j на нижнем отрезке — справа налево (от 1 до l). Удобно положить $t_1 = 0$ (блок с $(n + l)$ точками зависит от $(n + l - 1)$ времен).

Совокупности всех графиков с различным взаимным расположением n точек на верхнем отрезке и l точке на нижнем отрезке контура C соответствует следующая комбинация интегралов:

$$\int_0^{\infty} dt_2 \int_{t_2}^{\infty} dt_3 \dots \int_{t_{n-1}}^{\infty} dt_n \int_{-\infty}^{\infty} dt'_l \int_{t'_l}^{\infty} dt'_{l-1} \dots \int_{t'_2}^{\infty} dt'_1.$$

Сместим все t'_j (на нижнем отрезке) на $i\hbar\beta/2$, при этом пределы интегрирования не изменятся, но во временных аргументах тех фононных связей, которые соединяют точки на верхнем отрезке контура C с точками на нижнем отрезке контура C , выпадут все $i\hbar\beta/2$. Очевидно, что показатель экспоненты для $\mathbb{W}_{mm'}^{0m'}$ можно представить в виде суммы двух членов:

$$- \sum_q \frac{|Y_q|^2}{2N \operatorname{sh} \alpha_q} \left[\operatorname{ch} \alpha_q A_q(\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_n; \mathbf{g}'_1, \mathbf{g}'_2, \dots, \mathbf{g}'_l) + B_q(\mathbf{g}_1 \dots \mathbf{g}_n; \mathbf{g}'_1, \mathbf{g}'_2, \dots, \mathbf{g}'_l) \right]. \quad (\text{П.3.11})$$

Первый вклад (пропорциональный $\operatorname{ch} \alpha_q$) проистекает от всех $S_T(\mathbf{g}_i)$ и $S_T(\mathbf{g}'_j)$ и от всех фононных связей, соединяющих только пары точек, лежащих на одном отрезке контура C (либо на верхнем, либо на нижнем), т. е.

$$\begin{aligned} A_q(\mathbf{g}_1 \dots \mathbf{g}_n, \mathbf{g}'_1 \dots \mathbf{g}'_l) &= \\ &= \sum_{i=1}^n (1 - \cos q \mathbf{g}_i) - \sum_{i < i'} a_{ii'}(q) + \sum_{j=1}^l (1 - \cos q \mathbf{g}'_j) - \sum_{j < j'} a_{jj'}(q) = \\ &= 1 - \cos q (\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 + \dots + \mathbf{g}_n) + 1 - \cos q (\mathbf{g}'_1 + \mathbf{g}'_2 + \dots + \mathbf{g}'_l) = \\ &= 2 - \cos q \mathbf{m}' - \cos q (\mathbf{m}' - \mathbf{m}). \quad (\text{П.3.12}) \end{aligned}$$

Второй вклад обусловлен связками, соединяющими пары точек, лежащих на разных отрезках контура C , т. е.

$$\begin{aligned} B_q &= - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^l a_{ij}(q) = \\ &= -1 - \cos q (\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 + \dots + \mathbf{g}_n + \mathbf{g}'_1 + \dots + \mathbf{g}'_l) + \\ &+ \cos q (\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 + \dots + \mathbf{g}_n) + \cos q (\mathbf{g}'_1 + \mathbf{g}'_2 + \dots + \mathbf{g}'_l) = \\ &= -1 - \cos q \mathbf{m} + \cos q \mathbf{m}' + \cos q (\mathbf{m}' - \mathbf{m}). \quad (\text{П.3.13}) \end{aligned}$$

В квадратной скобке в (П.3.11) прибавим и вычтем $B_q \operatorname{ch} \alpha_q$. Учитывая, что $(\operatorname{ch} \alpha - 1)/\operatorname{sh} \alpha = \operatorname{th}(\alpha/2)$, получим (П.3.10).

Если некоторые из перевальных точек лежат на мнимой оси, то, оценивая многократный интеграл сверху, можно показать, что вклад может быть только меньше, чем (П.3.10). Например, при высоких T появляется дополнительный множитель типа $\exp\left(-\delta \frac{E_a}{kT}\right)$ (где $\delta \geq 1$), но не типа $\exp(-S_T)$.

Если некоторые из перевальных точек t_{i0} лежат на действительной оси, причем $t_{i0} \approx 1/\omega_0$, то экспоненциальная малость ослабляется. Проиллюстрируем сделанное утверждение на примере графика на рис. 22. В общем случае этот вопрос пока еще не исследован.

4) Графику с тремя точками на рис. 22 при $m' = m + g_1 + g_2 + g_3$ для гексагональных кристаллов в случае $g_1 + g_2 + g_3 \neq 0$, $g_2 + g_3 = 0$, $g_1 + g_2 = g$ соответствует выражение

$$\begin{aligned} W_{g_1 g}^{(3)0g} = i \left(\frac{J}{\hbar} \right)^3 \exp(-3S_T(g)) \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \int_0^{\infty} dt_2 \exp \left\{ \sum_q \Gamma_q \left[\cos \omega_q \left(t_2 + \frac{i\hbar\beta}{2} \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - \cos \omega_q t_3 + 2 \cos \omega_q (t_3 - t_2) \right] \right\}. \quad (\text{П.3.14}) \end{aligned}$$

При $\text{ch } \alpha > 2$ существует вклад от перевальных точек, лежащих на мнимой оси, для которого (П.3.10) следует понимать как оценку сверху. При $\text{ch } \alpha < 2$ необходимо рассматривать другие перевальные точки, для которых $\text{Re } t_2 \neq 0$ и $\text{Re } t_3 \neq 0$. Обозначим показатель экспоненты в подынтегральном выражении в (П.3.14) через $F(x, y)$, где $x = t_2 \omega_0$, $y = t_3 \omega_0$. Приближенное значение для перевальной точки $x_0 = x'_0 + i x''_0$, $y_0 = y'_0 + i y''_0$ и для $F(x_0, y_0)$ можно найти, исследуя на экстремум квадратную скобку в (П.3.14) (такой метод строг лишь при $\frac{\Delta\omega}{\omega} \pi \ll 1$). Получим новую перевальную точку:

$$x'_0 = \frac{\pi}{2} - z', \quad y'_0 = \frac{\pi}{2} + z', \quad x''_0 = -\frac{\alpha}{2} - z'', \quad y''_0 = -\frac{\alpha}{2} + z'',$$

где $z' = \arcsin \left[\frac{1}{4} \frac{\text{ch}(\alpha/2 - z'')}{\text{ch } 2z''} \right]$, а z'' определяется из уравнения $\text{sh } 2z'' \times (7 + 8 \text{ch } 2z'') = \text{sh } \alpha$.

При $\text{sh } \alpha < 15$ имеем

$$z'' \approx \text{sh } \alpha/30, \quad z' \approx \arcsin \left(\frac{1}{4} \text{ch } \frac{\alpha}{2} \right),$$

$$\begin{aligned} F(x_0, y_0) \approx \sum_q \Gamma_q \left(\frac{1}{8} \text{ch } \alpha_q + \frac{17}{8} \right) \approx \\ \approx \frac{9}{4} S_T - \frac{17}{16} \sum_q \frac{|\gamma_q|^2}{N} (1 - \cos qg) \text{th} \left(\frac{\alpha_q}{2} \right). \quad (\text{П.3.15}) \end{aligned}$$

Показатель экспоненты в (П.3.14) равен

$$-3S_T(g) + F(x_0, y_0) \approx -\frac{3}{4} S_T - \frac{17}{16} \frac{E_a}{kT}. \quad (\text{П.3.16})$$

Впрочем, при не слишком малой дисперсии оценки (П.3.15), а следовательно и (П.3.16) явно завышены.

Рассмотрим еще один пример. Блоку $W_{0,0}^{(3)m,m+g}$, которому соответствует график с тремя точками на одной оси ($g_1 = -g_2 = g_3 = g$), сопоставляется аналитическое выражение

$$\begin{aligned} \left(\frac{i}{\hbar} J \right)^3 e^{-3S_T} \int_0^{\infty} dt_1 \int_0^{\infty} dt_2 \exp \left\{ \sum_q \Gamma_q \cdot 2 \cdot \left[\cos \omega_q \left(t_1 + i \frac{\hbar\beta}{2} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \cos \omega_q \left(t_2 + \frac{i\hbar\beta}{2} \right) - \cos \omega_q \left(t_1 + t_2 + \frac{i\hbar\beta}{2} \right) \right] \right\}. \quad (\text{П.3.17}) \end{aligned}$$

Аналогичные исследования показывают, что перевальной точке соответствуют

$$x'_0 = y'_0 = \pi/3, \quad x''_0 = y''_0 = -2/3\alpha; \quad \text{Re } F(x_0, y_0) = 3 \sum_q \Gamma_q \text{ch}(\alpha_q/3),$$

т. е. показатель экспоненты в (П.3.17) равен

$$-\frac{3}{2} \frac{1}{N} \sum_q |\dot{\gamma}_q|^2 (1 - \cos qg) \frac{[\text{ch } \alpha_q - \text{ch}(\alpha_q/3)]}{\text{sh } \alpha_q}$$

и с увеличением T от значения $\bar{T} \approx \frac{\hbar\omega_0}{k} \frac{1}{3 \ln 2}$ (выше которого вклад от данной перевальной точки превышает вклад от всех других перевальных точек) до значений $T > \frac{\hbar\omega_0}{2k}$ плавно изменяется от

$$-S(T) \approx -\frac{9}{7} \gamma \approx -\frac{18}{7} \frac{E_a}{\hbar\omega_0} \quad \text{до} \quad -\frac{4}{3} \frac{E_a}{kT} \approx -\frac{2}{3} \gamma \frac{\hbar\omega_0}{kT}.$$

Итак, в обоих рассмотренных примерах видно, что в области достаточно высоких температур экспоненциальная малость недиагональных блоков может ослабляться.

ПРИЛОЖЕНИЕ 4

АНАЛИЗ ГРАФИКОВ ДЛЯ ВЕРШИН $\Gamma_{mm_1}^{mm_2}$

Для вершин нулевого порядка имеем

$$\Gamma_{mm_1}^{(0)mm_2} = \delta_{m_1, m_2} \delta_{mm_1} (N_e/N). \quad (\text{П.4.1})$$

Множитель N_e/N получается из-за того, что одна линия, идущая в клемму $\ominus \oplus$ mm , «неправильная». Нормировка N_e/N вместо обычной $N_e/V = n$ выбрана для удобства. Вершина (недиагональная) первого порядка, т. е. «пустая» пара точек $m \ominus g$ m на мнимой оси, описывается формулой

$$\Gamma_{mm_2}^{(1)mm_1} = \Gamma_{m, m-g}^{m, m} = \delta_{mm_1} \delta_{m_2, m-g} \frac{N_e}{N} \frac{J(g)}{kT} \exp[-S_T(g)]. \quad (\text{П.4.2})$$

Вершине второго порядка отвечают три графика на рис. 23, которым сопоставляются два выражения вида

$$\Gamma_{m, m-g_2}^{(2)m, m+g_1} = J(g_1) J(g_2) \exp[-S_T(g_1) - S_T(g_2)] L_1, \quad (\text{П.4.3})$$

$$\Gamma_{m, m-g_1-g_2}^{(2)m, m} = J(g_1) J(g_2) \exp[-S_T(g_1) - S_T(g_2)] (-L_1 + L_2), \quad (\text{П.4.4})$$

$$L_1 = \frac{i}{\hbar} \int_0^\beta dz_1 \int_0^\infty dt \left\{ \exp F_{12} \left(t - iz_1 + i \frac{\hbar\beta}{2} \right) - 1 \right\} = \frac{i\beta}{\hbar} \int_0^\infty (e^{F_{12}(t)} - 1) dt, \quad (\text{П.4.5})$$

$$L_2 = \int_0^\beta dz_1 \int_0^{z_1} dz_2 \exp F_{12} \left(z_2 - z_1 + \frac{\hbar\beta}{2} \right) = \beta \int_0^\beta e^{F_{12}(z)} dz. \quad (\text{П.4.6})$$

Здесь F_{12} определяется формулами (П.2.15), (П.2.12), и

$$a_{12} = \Gamma + \cos(qg_1 + qg_2) - \cos(qg_1) - \cos(qg_2).$$

При переходе к правым частям в (П.4.5) и (П.4.6) использовалось свойство $F_{12}(z) = F_{12}(-z)$, т. е. что

$$\int_{-\beta/2}^{\beta/2} dz_1 \int_0^{z_1} \exp F_{12}(z_2) dz_2 = 0.$$

В случае $g_1 + g_2 = 0$ для $\text{Re } \Gamma_{\text{mm}}^{(2)}$ остается один только вклад от L_2 , равный $\eta_3 = (J/kT) \eta_1$. Он отвечает учету поправок к функции распределения

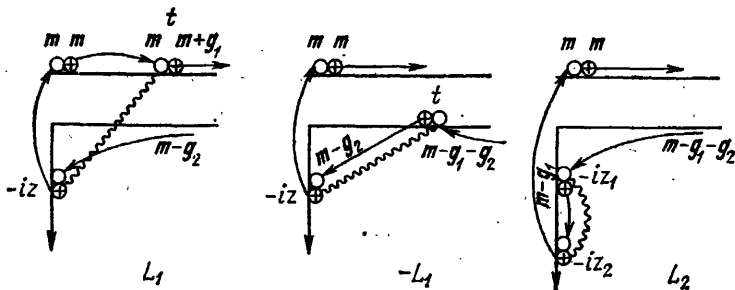


Рис. 23. Вершина третьего порядка.

(см. Приложение 5) за счет поправок к химическому потенциалу. В случае $g_1 + g_2 \neq 0$ имеем (ср. с (П.3.1))

$$\text{Im } \Gamma \sim \exp[-S_T(g_1 + g_2)],$$

$$\text{Re } \Gamma = \left(\frac{J}{kT}\right)^2 \exp[-S_T(g_1) - S_T(g_2)] \times$$

$$\times \int_0^1 \exp \left\{ \frac{1}{2N} \sum_q \frac{|\gamma_q|^2}{\text{sh } \alpha_q} a_{12}(q) \text{ch } (\alpha_q x) \right\} dx. \quad (\text{П.4.7})$$

При $a_{12} > 0$ максимальное значение показателя экспоненты в (П.4.7) достигается при $x = 1$, и вклад мал, как (см. Приложение 3)

$$\exp[-S_T(g_1 + g_2)].$$

При $a_{12} < 0$ надо разлагать в ряд показатель экспоненты вблизи $x = 0$, и вклад мал, как

$$\exp(-S_T(g_1) - S_T(g_2) + F_{12}(0)) =$$

$$= \exp \left\{ -S_T(g_1 + g_2) - \frac{\tilde{E}_a(g_1, T) + \tilde{E}_a(g_2, T) - \tilde{E}_a(g_1 + g_2, T)}{2kT} \right\} =$$

$$= \exp \left(-\alpha S_T - \gamma \frac{\tilde{E}_a}{kT} \right).$$

В следующих порядках экспоненциальная малость недиагональных вершин сохраняется. Поправки для диагональных вершин всегда можно связать

с поправками к химическому потенциалу более высокого порядка по η_1 . Более подробно мы этот вопрос не разбираем, поскольку в § 10 гл. I показано, что «вершины» можно устранить из рассмотрения, а вместо них появляется точная функция распределения, подробный анализ которой приводится в Приложении 5.

ПРИЛОЖЕНИЕ 5

ОЦЕНКА ТОЧНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЛЯРОНА ПО ИМПУЛЬСАМ $n(k)$

Покажем, что для поляронов малого радиуса зависимостью $n(k)$ от квазиимпульса можно пренебречь, т. е. для вычисления электропроводности можно использовать выражения (1.87) и (1.96), справедливые для случая узкой энергетической зоны квазичастиц.

Согласно определению имеем

$$n(k) = \langle a_k^+ a_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{m, G} e^{ikG} \langle a_{m+G}^+ a_m \rangle = \sum_G e^{ikG} \langle a_G^+ a_0 \rangle. \quad (\text{П.5.1})$$

Формальное разложение имеет вид

$$n(k) = \sum_G \exp(ikG) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\beta} d\lambda_n \dots \dots \int_0^{\lambda_2} d\lambda_1 \frac{\text{Sp} \{ \exp(-\beta \mathcal{H}_0) U(\lambda_n) \dots U(\lambda_1) a_G^+ a_0 \}}{\text{Sp} \{ \exp(-\beta \mathcal{H}_0 - \beta U) \}}. \quad (\text{П.5.2})$$

Здесь использованы обозначения (I.41), (I.42), (П.2.1) — (П.2.5). Учитывая, что поправки к нулевой статсумме $\text{Sp}(\exp(-\beta \mathcal{H}_0))$ за счет U порядка $N_e/N \ll 1$, а среднее, стоящее в числителе (П.5.2), само порядка N_e/N , в используемом приближении законно отбросить U в знаменателе (П.5.2), вычисляя числитель в низшем по n приближении.

Для величины $\langle a_G^+ a_0 \rangle$ получаем (ср. с (П.2.4))

$$\langle a_G^+ a_0 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\beta} d\lambda_n \dots \int_0^{\lambda_2} d\lambda_1 \sum_{m_n, g_n} \dots \sum_{m_1, g_1} J(g_n) \dots J(g_1) \times \\ \times \langle a_{m_n+g_n}^+ a_{m_n} \dots a_{m_1+g_1}^+ a_{m_1} a_G^+ a_0 \rangle_e \langle \exp[\Delta S_{m_n, g_n}(\lambda_n) \dots \Delta S_{m_1, g_1}(\lambda_1)] \rangle_{ph}. \quad (\text{П.5.3})$$

Здесь $\langle \dots \rangle_e$ — усреднение по невзаимодействующим электронам, $\langle \dots \rangle_{ph}$ — усреднение по Планку. Электронные операторы при спаривании дают (в низшем по электронной плотности приближении)

$$n_0 \delta_{m_1, G} \delta_{m_2, G+g_1} \delta_{m_3, G+g_1+g_2} \dots \delta_{m_n, G+g_1+g_2+\dots+g_{n-1}} \delta_{m_n+g_n, 0}. \quad (\text{П.5.4})$$

Значение n_0 , по порядку величины равное N_e/N , подлежит определению в окончательном результате из условия сохранения полного числа электронов. Из (П.5.4) следует, что суммирование в (П.5.3) по узельным индексам сводится к сумме по $g_1, g_2, g_3, \dots, g_{n-1}, g_n$ при условии

$$g_1 + g_2 + g_3 + \dots + g_n = -G. \quad (\text{П.5.5})$$

С учетом (П.5.4) и (П.5.5) можно написать $\Delta S_{m_k, g_k}(\lambda_k) = N^{-1/2} \sum_q \chi_q$ и

$$\chi_q = e^{i\lambda_k \omega_q} [b_q^+ \gamma_q e^{iq(g+g_1+g_2+\dots+g_{k-1})} (e^{iqg_k} - 1)] - e^{-i\hbar\omega_q \lambda_k} [\dots]^+, \quad (\text{П.5.6})$$

где $[\dots]^+$ есть эрмитово сопряженная выражению в первой квадратной скобке. Учитывая, что нормальные координаты, соответствующие различным q , усредняются независимо друг от друга, нам достаточно найти среднее вида

$$\langle \exp(A_n b_q^+ - B_n b_q) \exp(A_{n-1} b_q^+ - B_{n-1} b_q) \dots \dots \exp(A_1 b_q^+ - B_1 b_q) \rangle. \quad (\text{П.5.7})$$

Рецепт вычисления этих средних описан в Приложении 2 (см. формулы (П.2.4) — (П.2.12)), следует только заменить t_k на $i\lambda_k \hbar$.

Теперь можно сформулировать графические правила для написания общего члена разложения (П.5.3). Член m -го порядка изображается теперь единственным графиком (рис. 24). Внешняя точка (клемма) $a_g^+ a_g$ изображена в нижней части оси; n внутренних точек располагаются в последовательности, указанной на рис. 24. Все внутренние точки связаны волнистыми фоновыми линиями. Каждой внутренней точке i сопоставляется «время» λ_i и вектор g_i . Каждой точке i соответствует множитель

$$\tilde{Y}_i = J(g_i) \exp[-S_T(g_i)], \quad (\text{П.5.8})$$

где

$$S_T(G) = \frac{1}{2N} \sum_q |\gamma_q|^2 (1 - \cos qG) \text{cth } \alpha_q. \quad (\text{П.5.9})$$

Каждой линии, идущей из точки i в точку k ($i < k$), сопоставляется множитель

$$Z_{ik}(\lambda_i - \lambda_k) = \exp \left\{ \frac{1}{2N} \sum_q |\gamma_q|^2 \frac{1}{\text{sh } \alpha_q} a_{ik}(q) \text{ch} \left[\hbar\omega_q \left(\lambda_i - \lambda_k + \frac{\beta}{2} \right) \right] \right\}. \quad (\text{П.5.10})$$

Полученное произведение интегрируется по всем λ_i в порядке, указанном в (П.5.3), суммируется по всем g_i с учетом соотношения

$$\sum_{i=1}^m g_i = -G \quad (\text{П.5.11})$$

и умножается на $(-1)^m n_j$. Для удобства полезно записать условие (П.5.11) в явном виде, введя в сумму по всем g_i множитель

$$\frac{1}{N} \sum_k \exp\{-ik(g_1 + g_2 + \dots + g_m + G)\}. \quad (\text{П.5.12})$$

Тогда легко видеть, что, согласно (П.5.1), выражение для $n(k)$ примет вид

$$n(k) = n_j \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \sum_{g_1 \dots g_m} \exp[-ik(g_1 + \dots + g_m)] \int_0^{\beta} d\lambda_m \dots \dots \int_0^{\lambda_1} d\lambda_1 \left(\prod_{p=1}^m \tilde{Y}_p \right) \prod_{i < k} Z_{ik}(\lambda_i - \lambda_k). \quad (\text{П.5.13})$$

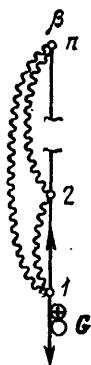


Рис. 24. Контур для графического представления $n(k)$.

Отметим, что имеет место соотношение

$$\left(\prod_{p=1}^m J_p \prod_{i < k} Z_{ik}(\lambda_i - \lambda_k) \right) = \prod_{f=1}^m J(g_p) \exp[-S_T(g_1 + g_2 + \dots + g_m)] \quad (\text{П.5.14})$$

при $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m = 0$. В (П.5.13) имеются члены, не содержащие экспоненциальной малости, соответствующие случаю $g_1 + g_2 + \dots + g_m = 0$ согласно (П.5.9), при этом $S_T(0) = 0$. Они дают вклад в не зависящую от k часть $n(k)$. Чтобы их выделить, перепишем (П.5.11) в виде

$$n(k) = n_0 \sum_G \exp(-ikG) f(G). \quad (\text{П.5.15})$$

Определим n_0 из условия нормировки (Ω — объем элементарной ячейки)

$$N_e = \sum_k n(k) = N n_0 f(0), \quad n_0 = \frac{N_e}{N} f^{-1}(0) = n \Omega f^{-1}(0). \quad (\text{П.5.16})$$

Отсюда окончательно имеем

$$n(k) = n \Omega \left\{ 1 + f^{-1}(0) \sum_{G \neq 0} e^{-ikG} f(G) \right\}, \quad (\text{П.5.17})$$

где

$$f(G) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \sum_{g_1 \dots g_m} \prod_p J(g_p) \delta_{G, g_1 + \dots + g_m} \times \\ \times \exp(-S_T(G)) \int_0^{\beta} d\lambda_m \dots \int_0^{\lambda_2} d\lambda_1 \prod_{i < k} \frac{Z_{ik}(\lambda_i - \lambda_k)}{Z_{ik}(0)}. \quad (\text{П.5.18})$$

Приведем оценку первых трех членов разложения по J для $f(g)$ (g — ближайший сосед).

Для $f^{(1)}$ имеем

$$f^{(1)}(g) = -J(g) \exp[-S_T(g)] \int_0^{\beta} d\lambda = -J(g) \exp[-S_T(g)] / kT. \quad (\text{П.5.19})$$

Подстановка этого члена в (П.5.17) дает $n^{(1)}(k) = \Omega n (1 - \varepsilon_p^{(0)}(k) / kT)$, где

$$\varepsilon_p^{(0)}(k) = \sum_g J(g) \exp(-S_T(g)) \exp(ikg)$$

— энергия полярона в нулевом приближении. Функция $f(0)$ подставлялась в (П.5.17) в нулевом по J приближении.

Далее для $f^{(2)}$ получаем

$$f^{(2)}(g) = \exp(-S_T(g)) \sum_{g_1} J(g - g_1) J(g_1) \int_0^{\beta} (\beta - \lambda) \frac{Z_{12}(\lambda)}{Z_{12}(0)} d\lambda. \quad (\text{П.5.20})$$

Член $f^{(2)}(g)$ отличен от нуля только в кристаллах тригональной системы ($g_1 + g_2 + g_3 = 0$). Вводя последовательно переменные $\lambda' = \lambda - \beta/2$, $\lambda' = \beta x/2$, $x = 1 - y$ и обозначая

$$\hbar \omega_q / 2kT = \alpha_q, \quad |v_q|^2 a_{ik}(q) / 2N = \Gamma_{ik}(q),$$

получим

$$\begin{aligned}
 f^{(2)}(g) &= \frac{J}{kT} \exp[-S_T(g)] \frac{J}{4kT} \times \\
 &\times \int_{-1}^1 (1-x) \exp \left\{ \sum_q \frac{\Gamma_{ik}(q)}{\text{sh } \alpha_q} [\text{ch}(x\alpha_q) - \text{ch } \alpha_q] \right\} dx = \\
 &= \frac{J}{kT} \exp[-S_T(g)] \frac{J}{2kT} \times \\
 &\times \int_0^1 \exp \left\{ \sum_q \Gamma_{ik}(q) \left[\frac{\text{ch } \alpha_q (\text{ch}(\alpha_q y) - 1)}{\text{sh } \alpha_q} - \text{sh}(\alpha_q y) \right] \right\} dy = \\
 &= \frac{J}{kT} \exp[-S_T(g)] \frac{J}{2kT} \int_0^1 \exp \left[-y \sum_q \Gamma_{ik}(q) \alpha_q \right] dy \approx \\
 &\approx \frac{J}{kT} \exp[-S_T(g)] \eta_1. \quad (\text{П.5.21})
 \end{aligned}$$

Аналогичная процедура дает для $f^{(3)}(g)$

$$f^{(3)}(g) = \frac{J}{kT} \exp[-S_T(g)] \eta_1^2 a_3,$$

где a_3 — коэффициент порядка единицы. Это позволяет записать $f(g)$ в виде

$$f(g) = -\frac{J}{kT} \exp[-S_T(g)] \Phi(g, \eta_1), \quad \lim_{\eta_1 \rightarrow 0} \Phi(g, \eta_1) \rightarrow 1. \quad (\text{П.5.22})$$

Аналогичные выражения можно написать для любых $f(\mathbf{G})$

$$f(\mathbf{G}) = -\frac{J}{kT} \exp[-S_T(\mathbf{G})] \Phi(\mathbf{G}, \eta_1), \quad \lim_{\eta_1 \rightarrow 0} \Phi(\mathbf{G}, \eta_1) \rightarrow \eta_1^p \rightarrow 0, \quad (\text{П.5.23})$$

где p — число элементарных трансляций, содержащихся в векторе \mathbf{G} . Поскольку условие малости радиуса полярона имеет вид $\eta_1 \ll 1$, задача об отыскании точного вида функций $\Phi(\mathbf{G}, \eta_1)$ при $\mathbf{G} \neq 0$ интереса не представляет. Мы не будем пытаться определить $\Phi(0, \eta_1)$ и точный вид функции $f(0)$, поскольку известно, что экспоненциальной малости (вида $\exp(-S_T)$) она не содержит.

Итак, $n(\mathbf{k})$ представляется в виде

$$n(\mathbf{k}) = n\Omega_0 \left\{ 1 + \frac{J}{kT} \exp[-S_{\text{min}}(T)] f(\mathbf{k}) \right\} \approx n\Omega = \frac{N_e}{N}, \quad (\text{П.5.24})$$

что и требовалось доказать.

ПРИЛОЖЕНИЕ 6 ГРАФИЧЕСКАЯ ТЕХНИКА ПРИ НАЛИЧИИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИИ

Графическая техника с учетом пространственной дисперсии в применении к обычной формуле Кубо, записанной через корреляторы токов, обсуждалась Константиновым и Перелем в [23] (метод КП). Ниже подробное рассмотрение будет проведено для формулы Кубо в представлении дипольных моментов (см. (1.14)). Это позволит представить формулы для электропроводности

в виде, особенно удобном для осуществления предельных переходов к обычному случаю слабой связи и к случаю поляронов малого радиуса. Кроме того, это позволит создать некоторый единый формализм (в терминах теории стохастических явлений) для описания процессов переноса в конфигурационном пространстве или в смешанном ($\mathbf{k} - \mathbf{R}$)-представлении (см. п. 6 во Введении ко второй части).

Переходя от узельного представления для электронных операторов к импульсному в формуле (I. 14), получим

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2kT} \frac{1}{V} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{m}'} (X_{\mathbf{m}} - X_{\mathbf{m}'})^2 \times \\ \times \operatorname{Re} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \exp[-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \mathbf{R}_{\mathbf{m}} - i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \mathbf{R}_{\mathbf{m}'}] \times \\ \times \int_0^{\infty} \exp(-st) \langle (a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2})_t a_{\mathbf{k}_3}^+ a_{\mathbf{k}_4} \rangle dt. \quad (\text{П.6.1})$$

Ввиду трансляционной симметрии выражение под знаком суммы по $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4$ должно зависеть только от разности $\mathbf{m} - \mathbf{m}'$, а поэтому оно отлично от нуля лишь при $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4 = \boldsymbol{\kappa}$. Положим

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}' + \boldsymbol{\kappa}/2, \quad \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}' - \boldsymbol{\kappa}/2, \quad \mathbf{k}_3 = \mathbf{k} - \boldsymbol{\kappa}/2, \quad \mathbf{k}_4 = \mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}/2,$$

тогда (П.6.1) перейдет в

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2kTV} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \sum_{\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \operatorname{Re} \left[\left[\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{m}} X_{\mathbf{m}}^2 \exp(-i\boldsymbol{\kappa} \mathbf{R}_{\mathbf{m}}) \right] M(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\kappa}; s) \right]. \quad (\text{П.6.2})$$

Сумму по \mathbf{m} в (П.6.2) можно представить в виде

$$-N \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\kappa}_x^2} \delta_{\boldsymbol{\kappa}, 0} = -N \frac{(2\pi)^3}{V} \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\kappa}_x^2} \delta(\boldsymbol{\kappa}).$$

Переходя в (П.6.2) от суммирования по $\boldsymbol{\kappa}$ к интегрированию, полагая

$$\sum_{\boldsymbol{\kappa}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\boldsymbol{\kappa}, \text{ и дважды интегрируя по } \boldsymbol{\kappa} \text{ по частям, получим}$$

$$\sigma_{xx} = - \frac{e^2}{2kT} \frac{1}{V} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\kappa}_x^2} \operatorname{Re} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} M(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\kappa}; s) \right] \Big|_{\boldsymbol{\kappa}=0}. \quad (\text{П.6.3})$$

Величину $M(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\kappa}; s)$, равную

$$M(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\kappa}; s) = \int_0^{\infty} e^{-st} \langle (a_{\mathbf{k}'+\boldsymbol{\kappa}/2}^+ a_{\mathbf{k}'-\boldsymbol{\kappa}/2})_t a_{\mathbf{k}-\boldsymbol{\kappa}/2}^+ a_{\mathbf{k}+\boldsymbol{\kappa}/2} \rangle dt, \quad (\text{П.6.4})$$

будем вычислять с помощью графической техники КП, разлагая ее в ряд по «эффективному» взаимодействию носителей тока с рассеивателями. (Этот для поляронов определен согласно (I. 38)).

Контур, вдоль которого упорядочиваются операторы, такой же, как на рис. 12. В принятом приближении надо учитывать лишь те графики, которые дают вклад первой степени по электронной концентрации n , т. е., по терминологии КП, имеющие лишь одну неправильную линию.

Легко понять, что эта неправильная линия всегда входит в точку $\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}/2$ левой клеммы. Каждый член ряда конструируется из компактных частей

двух типов: угловой части $\Gamma_{k+\kappa/2, k_1-\kappa/2}^{k-\kappa/2, k_1-\kappa/2}$ и внутренних блоков (вероятностей) $\mathbb{W}_{k_1+\kappa/2, k_2+\kappa/2}^{k_1-\kappa/2, k_2-\kappa/2}$ соединенных свободными сечениями, которым соответствует множитель

$$\left\{ s + \frac{i}{\hbar} [\varepsilon(k + \kappa/2) - \varepsilon(k - \kappa/2)] \right\}^{-1}.$$

Способ выделения свободных сечений определяется видом \mathcal{H}_{int} . Случай однофононного рассеяния описан в [23]. Случай многофононного рассеяния (для \mathcal{H}_{int} вида (1.38)) в k -представлении разобран в [31, 45].

Угловая часть содержится в каждом графике (с произвольным числом свободных сечений) только один раз, она содержит левую клемму (которой соответствуют индексы $k + \kappa/2$, $k - \kappa/2$) и несет зависимость от концентрации. Конкретное выражение для нее иное, чем в методе КП, поскольку те- перь в левой клемме нет оператора скорости.

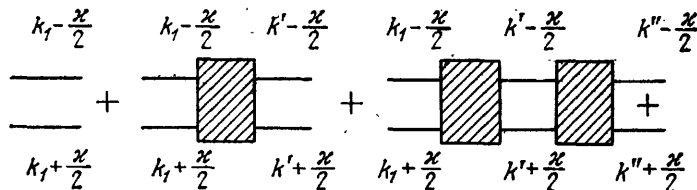


Рис. 25. Сумма графиков для $P_{k_1+\kappa/2, k'+\kappa/2}^{k_1-\kappa/2, k'-\kappa/2}(s)$.

Из графической структуры M ясно, что эта величина может быть также представлена в виде

$$M(k, k', \kappa; s) = \sum_{k_1} \Gamma_{k+\kappa/2, k_1+\kappa/2}^{k-\kappa/2, k_1-\kappa/2} P_{k_1+\kappa/2, k'+\kappa/2}^{k_1-\kappa/2, k'-\kappa/2} \quad (\text{П.6.5})$$

где $P_{k_1+\kappa/2, k'+\kappa/2}^{k_1-\kappa/2, k'-\kappa/2}$ представляется графической суммой на рис. 25 и может быть написана в компактной форме:

$$\int_0^{\infty} e^{-st} dt \frac{\text{Sp} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}_0} \langle 0 | \hat{a}_{k+\kappa/2} (a_{k'+\kappa/2}^+ a_{k-\kappa/2})_t a_{k-\kappa/2}^+ | 0 \rangle \right\}}{\text{Sp} (e^{-\beta \mathcal{H}_0})}. \quad (\text{П.6.6})$$

Здесь $\langle 0 | A | 0 \rangle$ означает матричный элемент электронного оператора A , взятый между состояниями электронного вакуума, \mathcal{H}_0 — гамильтониан рассеивателей (например, фононов).

Отметим, что Γ обязательно содержит хотя бы одну точку на мнимой оси контура, а P таких точек не содержит. В дальнейшем для описанных выше величин используем более компактные обозначения: $\Gamma(k, k_1, \kappa)$, $\mathbb{W}(k_1, k_2, \kappa)$, $P(k_1, k', \kappa)$. Из рис. 25 видно, что функция $P(k_1, k', \kappa)$ подчиняется уравнению

$$\left\{ s + \frac{i}{\hbar} [\varepsilon(k_1 + \kappa/2) - \varepsilon(k_1 - \kappa/2)] \right\} P(k_1, k', \kappa; s) = \\ = \delta_{kk'} + \sum_{k_2} \mathbb{W}(k_1, k_2, \kappa) [P(k_2, k', \kappa; s) - P(k_1, k', \kappa; s)]. \quad (\text{П.6.7})$$

Обозначая

$$\sum_k \Gamma(k, k_1, \kappa) = \Gamma(k_1, \kappa), \quad \sum_{k'} P(k_1, k', \kappa, s) = F(k_1, \kappa, s), \quad (\text{П.6.8})$$

запишем (П.6.3) в виде

$$\sigma = -\frac{e^2}{2kT} \frac{1}{V} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \operatorname{Re} \left\{ \frac{d^2}{d\kappa_x^2} \sum_k [\Gamma(k_1, \kappa; s) F(k_1, \kappa; s)] \right\} \Big|_{\kappa=0}. \quad (\text{П.6.9})$$

Формула (П.6.9) справедлива в самом общем случае, а не только в случае поляронов малого радиуса. Используя (П.6.7) и (П.6.8), получим для $F(k, \kappa; s)$ уравнение в виде

$$\left\{ s + \frac{i}{\hbar} [\varepsilon(k + \kappa/2) - \varepsilon(k - \kappa/2)] \right\} F(k, \kappa; s) = \\ = 1 + \sum_{k_1} W(k, k_1, \kappa) [F(k_1, \kappa; s) - F(k, \kappa; s)]. \quad (\text{П.6.10})$$

Дальнейшая цель — устранить из всех выражений трудно интерпретируемую вершину Γ и выразить все наблюдаемые величины через величины, имеющие простой физический смысл: $n(k)$ — точную одночастичную функцию распределения в импульсном пространстве, вероятности перехода $W(k, k')$ и их производные

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k_x}, \quad W_1(k, k') = \left[\frac{\partial}{\partial \kappa_x} W(k, k', \kappa) \right] \Big|_{\kappa=0}, \\ W_2(k, k') = \left[\frac{\partial^2}{\partial \kappa_x^2} W(k, k', \kappa) \right] \Big|_{\kappa=0} \quad (\text{П.6.11})$$

и через лапласову преобразованную $P(k, k'; s)$ от функции условной вероятности $P(k, k'; t)$ (ср. с (I.133))

$$P^0(k, k'; t) = \\ = [\operatorname{Sp}(\exp[-\beta \mathcal{H}_0])]^{-1} \operatorname{Sp} \left\{ \exp[-\beta \mathcal{H}_0] \langle 0 | a_x (a_x^\dagger, a_x)_t a_k^\dagger | 0 \rangle \right\}. \quad (\text{П.6.12})$$

Уравнение для $P(k, k'; s)$ (ср. с (I.119)) получается из (П.6.7) при $\kappa \rightarrow 0$

$$sP(k, k'; s) = \delta_{kk'} + \sum_{k_1} W(k, k_1) P(k_1, k'; s). \quad (\text{П.6.13})$$

При написании (П.6.13) использовалось свойство сумм (равенство «прихода» и «ухода»), аналогичное (I.61):

$$\sum_{k_1 \neq k} W(k, k_1; s) = -W(k, k; s).$$

Заметим, что сумма $\sum_{k_1} \Gamma(k_1, \kappa; s) F(k_1, \kappa; s)$ в (П.6.9) соответствует

$\bar{\Gamma}(\kappa) P(\kappa)$ в (I.109), т. е.

$$\bar{\Gamma}(\kappa) = \frac{1}{N} \sum_k \Gamma(k, \kappa) L(k, \kappa), \quad \text{где } L(k, \kappa) = F(k, \kappa)/P(\kappa), \quad (\text{П.6.14})$$

и производные по κ от $\bar{\Gamma}(\kappa)$ могут содержать степени $1/s$, хотя операция дифференцирования $\Gamma(k_1, \kappa; s)$ по κ свободных сечений не дает. Используя обозначения

$$\Gamma(k, \kappa; s) \Big|_{\kappa=0} = \Gamma(k), \quad \frac{\partial}{\partial \kappa_x} F(k, \kappa) \Big|_{\kappa=0} = F_1(k), \quad \frac{\partial^2}{\partial \kappa_x^2} F(k, \kappa) \Big|_{\kappa=0} = F_2(k), \quad (\text{П.6.15})$$

запишем (П.6.9) в виде

$$\sigma = - \frac{e^2}{2kTV} \lim_{s \rightarrow 0} s^2 \operatorname{Re} \sum_k \Gamma(k) F_2(k). \quad (\text{П.6.16})$$

Чтобы получить (П.114), осталось доказать, что $\Gamma(k)$ в (П.6.16) можно заменить на $n(k)$.

Дифференцируя (П.6.10) по x один раз и дважды и полагая потом $x=0$, используя (П.6.8) и (П.6.6), получим

$$F_1(k) = \frac{i}{s} \left[v_x(k) - i \sum_{k'} W_1(k, k') F(k') \right] + \sum_{k'} W(k, k') F_1(k'),$$

$$sF_2(k) = \frac{i}{s} \sum_{k'} W_2(k, k') + 2iF_1(k) \sum_{k_1} [v_x(k) \delta_{kk_1} - iW_1(k, k_1)] + \quad (\text{П.6.17})$$

$$+ \sum_{k'} W(k, k') F_2(k').$$

Согласно (П.6.13) $P(k, k'; s)$ является функцией Грина оператора \hat{L}_k , который действует на произвольные функции $\varphi(k)$ следующим образом:

$$\hat{L}_k \varphi(k) = s\varphi(k) - \sum_{k_1} W(k, k_1) \varphi(k_1). \quad (\text{П.6.18})$$

Уравнения (П.6.17) для F_1 и F_2 являются линейными и неоднородными относительно каждой из этих функций. Их можно представить в виде

$$\hat{L}_k F_1(k) = A(k), \quad \hat{L}_k F_2(k) = B(k),$$

а их решения выразить через функцию Грина $P(k, k'; s)$

$$F_1 = \frac{1}{s} \sum_{k_1} P(k, k_1; s) \left[-iv_x(k_1) + \sum_{k_2} W_1(k_1, k_2) \right], \quad (\text{П.6.19})$$

$$F_2 = \frac{1}{s} \sum_{k_1} P(k, k_1; s) \Phi(k_1), \quad (\text{П.6.20})$$

где

$$\Phi(k_1) = \sum_{k_2} W_2(k_1, k_2) - 2 \sum_{k_2, k_3, k_4} [v_x(k_1) \delta_{k_1 k_2} - iW_1(k_1, k_2)] P(k_2, k_3) [v_x(k_3) \delta_{k_3 k_4} - iW_1(k_3, k_4)]. \quad (\text{П.6.21})$$

Согласно (П.6.5) (при $x=0$) имеем

$$\sum_{k_1} \Gamma(k_1) P(k_1, k_2) = \sum_k \sum_{k_1} \Gamma(k, k_1) P(k_1, k_2) =$$

$$= \sum_k M(k, k_2) = \frac{1}{s} \langle a_k^+ a_{k_2} \rangle. \quad (\text{П.6.22})$$

Подставляя (П.6.20) в (П.6.16), используя (П.6.22) и выбирая нормировку

$$\langle a_k^+ a_k \rangle = n(k), \quad \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n(k) = N_e, \quad (\text{П.6.23})$$

имеем

$$\sigma = \frac{e^2}{2kT} \sum_k n(k) \Phi(k), \quad (\text{П.6.24})$$

что совпадает с (I.117). Чтобы получить (I.114), используем соотношение

$$s \sum_{\mathbf{k}_1} n(\mathbf{k}_1) P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}; s) = n(\mathbf{k}), \quad (\text{П.6.25})$$

вытекающее из (I.135), и подставим (П.6.25) в (П.6.24). Принимая во внимание (П.6.20), приходим к (I.114).

ПРИЛОЖЕНИЕ 7

ВЫЧИСЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕСКОКА $W_h(g)$ ПРИ ПРОИЗВОЛЬНЫХ η_2 [43, 46, 47]

А. Точный рецепт вычисления $W_h(g)$, не основанный на суммировании графиков. Из (I.71) видно, что при $\hbar/(E_a kT)^{1/2} < t < W_h^{-1}(g)$ существует замкнутое выражение для $W_h(g)$

$$W_h(g) = \frac{d}{dt} P(m+g, m; t). \quad (\text{П.7.1})$$

Здесь $P(m+g, m; t)$ — функция условной вероятности, описывающая переход с узла m на узел $m+g$. Ограничимся «двухузельным» приближением (т. е. $\eta_3 < 1$, η_2 произвольно). Узлы m и $m+g$ обозначим через 1 и 2 соответственно.

Введем операторную (по фоновым переменным) амплитуду перехода $Z_{12}(t) \equiv Z(t)$, описывающую переход с узла 1 на узел 2:

$$\langle 0 | a_2 e^{-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}} a_1^+ | 0 \rangle = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} t (\mathcal{H}_0 - Aq_2) \right\} Z(t), \quad (\text{П.7.2})$$

где $\langle 0 | \dots | 0 \rangle$ означает усреднение по электронному вакууму, \mathcal{H} — «двухузельный» гамильтониан, написанный с учетом дисперсии оптических фононов

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - Aq_1 a_1^+ a_1 - Aq_2 a_2^+ a_2 + J(a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1), \quad (\text{П.7.3})$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_q \hbar \omega_q (b_q^+ b_q + 1/2), \quad (\text{П.7.4})$$

$$-Aq_m = \frac{1}{(2N)^{1/2}} \sum_q \hbar \omega_q [\gamma_q^* \exp(-iqR_m) b_q + \gamma_q \exp(iqR_m) b_q^+]. \quad (\text{П.7.5})$$

Тогда, в соответствии с (I.57), функцию условной вероятности $P(2, 1; t)$ можно (при $W^{-1}(g) > t \gg t_0$) представить в виде

$$P(2, 1; t) = \langle Z^+(t) Z(t) \rangle_1. \quad (\text{П.7.6})$$

Шпур $\langle \dots \rangle_m$ по фоновым переменным в (П.7.6) означает усреднение по Гиббсу с $\exp\{-\beta \mathcal{H}_0(m)\}$, где ($m = 1, 2$)

$$\mathcal{H}_0(m) = \mathcal{H}_0 - Aq_m - E_b. \quad (\text{П.7.7})$$

Из (П.7.2) следует, что вторично квантованный оператор $Z(t)$, действующий на фоновые числа заполнения, подчиняется системе двух операторных уравнений («двухузельное» приближение)

$$i\hbar \frac{dZ(t)}{dt} = JR^+(t) \Phi(t), \quad i\hbar \frac{d\Phi(t)}{dt} = JR(t) Z(t), \quad (\text{П.7.8})$$

причем граничные условия имеют вид

$$Z(0) = 0, \quad \Phi(0) = 1, \quad (\text{П.7.8a})$$

а оператор $R(t)$ определяется формулой

$$R(t) = \exp\left(i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}_0(2)\right) \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}_0(1)\right). \quad (\text{П.7.9})$$

С помощью (П.7.1), (П.7.6) выражение для $\mathcal{W} = \mathcal{W}_h(g)$ можно представить в виде [43, 46]

$$\mathcal{W} = \frac{d}{dt} P(2, 1; t) = \frac{d}{dt} \langle Z^+(t) Z(t) \rangle_1. \quad (\text{П.7.10})$$

Итерируя систему (П.7.8) по J , подставляя получающиеся при этом ряды для Z и Z^+ в (П.7.10) и усредняя по фоновым числам заполнения, можно представить выражение для \mathcal{W} в виде бесконечного ряда по степеням J^{2n} , причем каждому члену этого ряда можно сопоставить соответствующий график для $\mathcal{W}_h(g)$, получаемый с помощью графической техники, описанной в Приложении 2 (подробнее см. [43, 46]).

Анализ бременных интегралов, входящих в определение всех членов $\mathcal{W}_{2n}(g)$ показывает [46, 47], что характерный масштаб времени \bar{t} , на котором сходятся все временные интегралы, равен

$$\bar{t} = \hbar [4kT \langle E_a(q, g) (\hbar\omega_q)^2 \rangle]^{-1/4} \approx \frac{\hbar}{[4kT E_a]^{1/4} (\hbar\omega_0)^{1/2}}. \quad (\text{П.7.11})$$

Поскольку $\bar{t}\omega_0 \ll 1$, то можно разложить показатели экспонент во всех подинтегральных выражениях в ряд по $\omega_0 t$, отбросив все члены $\sim t^5$ и выше, и благодаря быстрой сходимости интегралов воспользоваться асимптотическими решениями при $t \rightarrow \infty$ *). Это позволяет проводить вычисления с помощью упрощенной двухузельной задачи, не учитывающей дисперсии оптических фононов (см. ниже), в которой также производится разложение по степеням $\omega_0 t$ до t^4 включительно.

Б. Упрощенная двухузельная модель (без учета дисперсии). Переход к модели без дисперсии осуществляется следующим образом. В гамильтониане (П.7.3) величина A считается константой, а q_i отождествляется с координатой i -го узла. Нулевой гамильтониан \mathcal{H}_0 представляется в виде

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p_1^2}{2M} + \frac{\omega_0^2 M}{2} q_1^2 + \frac{p_2^2}{2M} + \frac{\omega_0^2 M}{2} q_2^2, \quad (\text{П.7.12})$$

где p_i — импульс i -го узла, M — масса ядра. Вводя относительные координаты

$$q = q_1 - q_2, \quad Q = q_1 + q_2$$

и канонически сопряженные им импульсы P и Q , можно убедиться [43] в том, что электроны не связаны с Q и P , а та часть \mathcal{H}_M гамильтониана \mathcal{H} , в которой электронные и единственная колебательная (q) степени свободы зацепляются, представляется в виде

$$\mathcal{H}_M = \frac{p^2}{M} + \frac{M\omega^2}{4} q^2 + \frac{Aq}{2} (a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2) + J (a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1). \quad (\text{П.7.13})$$

*) Вопрос о разложении показателей экспонент в ряд обсуждался в [46]. Например, для графика с четырьмя точками ($\sim \eta_2^2$) разложенный показатель имеет вид

$$- \tau_1^2 \tau_2^2 + t_0^2 \tau_1 \tau_2 - it_0 (\tau_1^2 \tau_2 + \tau_1 \tau_2^2), \quad (\text{A})$$

где $\tau = t/\bar{t}$. Членами порядка τ^5 и выше в квазиклассическом приближении ($\hbar\omega_0/2kT < 1$) можно пренебречь (см. [46]). Интегрирование по τ_1 и τ_2 производится в пределах от 0 до ∞ . Очевидно, что квадратичными членами по τ в (A) ограничиться нельзя, ибо интегралы по τ_1 и τ_2 разойдутся. Такой сложный вид показателей вполне соответствует физическому содержанию задачи (см. раздел Г настоящего приложения).

При этом формулы (П.7.2), (П.7.6), (П.7.8), (П.7.10) не изменяются, а выражение для $R(t)$ принимает вид

$$R(t) = \exp\left(i \frac{t}{\hbar} \left(\mathcal{H}'_0 - \frac{Aq}{2}\right)\right) \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \left(\mathcal{H}'_0 + \frac{Aq}{2}\right)\right) \rightarrow T \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} A \int_0^t g(t') dt'\right\}, \quad (\text{П.7.9a})$$

где

$$\mathcal{H}'_0 = \frac{p^2}{2M'} + \frac{M'\omega^2}{2} q^2, \quad M' = \frac{M}{2}, \quad g(t) = \exp\left(i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}'_0\right) q \exp\left(-i \frac{t}{\hbar} \mathcal{H}'_0\right),$$

символ T означает упорядочение во времени.

В. Качественные рассуждения в рамках упрощенной двухузельной модели. Найдем стационарные состояния гамильтониана (П.7.13) в адиабатическом приближении [43]. Для этого представим волновую функцию в виде

$$\Phi = c_1(q) a_1^+ |0\rangle + c_2(q) a_2^+ |0\rangle. \quad (\text{П.7.14})$$

При этом c_1 и c_2 зависят от q как от параметра и определяются из системы уравнений

$$\left(\frac{Aq}{2} - E\right) c_1 + J c_2 = 0, \quad J c_1 - \left(\frac{Aq}{2} + E\right) c_2 = 0. \quad (\text{П.7.15})$$

Адиабатические электронные термы $E^\pm(q)$ находятся из секулярного уравнения, соответствующего системе (П.7.15):

$$E^\pm(q) = \pm \sqrt{\left(\frac{Aq}{2}\right)^2 + J^2}. \quad (\text{П.7.16})$$

Минимальное расстояние между E^+ и E^- равно $2J$. Эффективная потенциальная энергия колебательного движения равна

$$U^\pm(q) = \frac{M\omega^2 q^2}{4} \pm \sqrt{\left(\frac{Aq}{2}\right)^2 + J^2}. \quad (\text{П.7.17})$$

$U^-(q)$ представляется кривой (рис. 26) с двумя минимумами в точках $\pm q_{\min}$, причем $q_{\min} \approx A/M\omega^2$, а глубина минимума равна $-E_a$. Здесь $E_a = Aq_{\min}/4 = A^2/4M\omega^2$ — энергия активации. Пунктирные параболы соответствуют двум электронным термам при $J = 0$.

Если вероятность перехода с одной адиабатической кривой на другую, вызванная отклонением от адиабатичности, мала, то поведение системы всецело определяется движением ядер. При $2J/kT \gg 1$, наличием кривой U^+ можно полностью пренебречь, при этом ядра совершают движение с потенциальной энергией U^- , а электрон адиабатически следует за движением ядер. При $kT \ll E_a$, когда колебания происходят вблизи одного из минимумов кривой $U^-(q)$, электрон с точностью до $\eta_1 \ll 1$ локализован вблизи одного из узлов, а переход его на другой узел происходит вследствие перехода колебательной системы в окрестности другого минимума, что связано с преодолением потенциального барьера высотой E_a . Вероятность перехода в единицу времени колебательной системы, а следовательно и соответствующая вероятность перескока электрона на другой узел, определяется формулой Крамерса (см. § 7 гл. III в [69])

$$W_0 = \frac{\omega}{2\pi} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (\text{П.7.18})$$

описывающей прохождение классической частицы потенциального барьера. Формула (П.7.18) справедлива в адиабатическом пределе, когда вероятностью

перехода $E^+ \rightleftharpoons E^-$ можно пренебречь. Оценить пределы применимости этого условия можно на основе теории неадиабатических переходов Ландау — Зинера [115—126], согласно которой вероятность перехода \mathcal{P} при однократном прохождении системой точки квазидересечения термов ($q = 0$) в наших обозначениях есть (подробнее см. Приложение III в [21])

$$\mathcal{P} = \exp\left(-\frac{2\pi J^2}{\hbar A v}\right), \quad (\text{П.7.19})$$

где v — скорость ядер в точке $q = 0$, равная $v_T x^{1/2}$, а $v_T = (2kT/M)^{1/2}$, $x = (E - E_a)/kT$.

Формулу (П.7.19) удобно переписать в виде

$$\mathcal{P}(x, \eta_2) = \exp\left(-\frac{\pi}{2} \frac{\eta_2}{\sqrt{x}}\right), \quad (\text{П.7.20})$$

откуда видно, что при тепловых скоростях (когда $x \approx 1$) условием применимости (П.7.18) является $\mathcal{P}(x, \eta_2) \ll 1$, т. е. $\eta_2 > 1$.

Если в соответствии с (II.11) записать формулу для W в виде

$$W(g) = W_0 F_g(\eta_2), \quad (\text{П.7.21})$$

то из вышесказанного следует, что в предельном случае $\eta_2 > 1$ функция $F_g \rightarrow 1$, и мы приходим к формуле (П.7.18). В случае $\eta_2 \ll 1$, согласно (II.18), (II.19), $F_g \rightarrow \pi^{3/2} \eta_2$.

Наша задача состоит в вычислении $F_g(\eta_2)$ при произвольных η_2 . Формула (П.7.21) допускает следующую наглядную интерпретацию. W_0 — есть

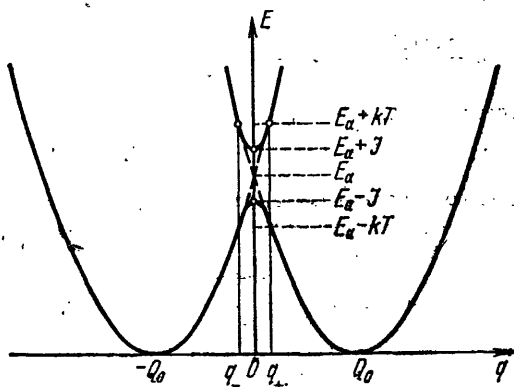


Рис. 26. Адиабатические колебательные термы для упрощенной двухузловой задачи.

Здесь $q_+ = |q_-| = Q_0 \frac{kT}{E_a} x$, $x = \frac{E - E_a}{kT}$, $Q_0 = q_{\min} = \frac{A}{M\omega^2}$.

вероятность перехода колебательной системы через потенциальный барьер на рис. 26, $F_g(\eta_2)$ есть вероятность того, что после перехода колебательной системы через барьер электрон также перейдет с узла на узел. При $\eta_2 \ll 1$ вероятность электронного перехода $F_g(\eta_2) \sim \eta_2$, т. е. является малой. Если электронный переход не произошел, то за время $t_0^{(1)} \sim 1/W_0$ система возвращается в исходное состояние, т. е. перескок не произошел, ибо состояние колебательной системы после перехода через барьер не было «стабилизировано» соответствующим электронным переходом. Если же электронный переход совершился (с вероятностью $\sim \eta_2$), то колебательная система будет стабилизирована вблизи нового положения равновесия, что означает, что перескок произошел. При $\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$ эти рассуждения нуждаются в существенном уточнении [67].

Итак, в случае $\eta_2 \ll 1$ переход колебательной системы слабо коррелирован с переходом электрона с узла на узел. В случае же $\eta_2 \gg 1$ имеет место почти полная корреляция между колебаниями и электроном, так что переход колебательной системы через барьер почти наверняка приводит к переходу электрона на соседний узел, т. е. электрон адиабатически следует за колебательной системой.

В силу вышесказанного параметр η_2 разумно назвать параметром адиабатичности, а условие

$$\eta_2 \geq 1 \quad (\text{П.7.22})$$

следует назвать условием адиабатичности.

Г. *Квазиклассический метод нахождения* $F(\eta_2)$. Переход к квазиклассическому описанию в формулах (П.7.6), (П.7.8), (П.7.9а), (П.7.10) выполнен в [46], где доказано, что при $\hbar\omega_0/2kT < 1$ и для $\omega_0 t < 1$ выражение для P можно представить в виде

$$P = \frac{1}{kT} \int_0^{\infty} dE \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi |Z(E, \varphi; t)|^2. \quad (\text{П.7.23})$$

Здесь усреднение осуществляется путем интегрирования по энергии E классического осциллятора, отвечающего одной из пунктирных парабол на рис. 26, и по его фазе φ .

Функция $Z(E, \varphi; t)$ имеет смысл квазиклассической амплитуды неадиабатического перехода и подчиняется системе уравнений

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dZ(E, \varphi; t)}{dt} &= JR_{\text{кл}}^*(E, \varphi; t) \Phi(E, \varphi; t), \\ i\hbar \frac{d\Phi(E, \varphi; t)}{dt} &= -JR_{\text{кл}}^*(E, \varphi; t) Z(E, \varphi; t) \end{aligned} \quad (\text{П.7.24})$$

с граничными условиями при $t \rightarrow T$, $T \rightarrow \infty$ (точнее при $1/\omega_0 > T \gg \bar{t}$)

$$Z(-T) = 0, \quad \Phi(T) = 1. \quad (\text{П.7.24а})$$

$R_{\text{кл}}^*$ есть комплексно сопряженная величина $R_{\text{кл}}$, которая находится из выражения (П.7.9а), если опустить в нем знак T -произведения, а вместо $q(t)$ подставить классическую величину

$$q_{\text{кл}}(t) = -\sqrt{\frac{2E}{M\omega_0^2}} \cos(\omega_0 t + \varphi). \quad (\text{П.7.25})$$

Итак, для перехода к квазиклассике недостаточно заменить R на $R_{\text{кл}}$, необходимо еще изменить граничные условия (ср. (П.7.24а с П.7.8 а)) и поменять знак в правой части второго уравнения в (П.7.8). Необходимость смены знака легко понять, если учесть, что наклоны термов (пунктирные участки парабол на рис. 26) в точке $q = 0$ — разные [124—126].

На следующем этапе решения задачи (см. [46]) удается устранить переменную φ и представить окончательную формулу для W в виде

$$W = \frac{\omega_0}{2\pi} \int_0^{\infty} \exp(-\beta E) d(\beta E) \lim_{T \rightarrow \infty} |Z_0(E, \eta_2, t_0, T)|^2, \quad (\text{П.7.26})$$

Здесь Z_0 по-прежнему имеет смысл квазиклассической амплитуды неадиабатического перехода, но вычисляется она из другой системы уравнений

$$i \frac{dZ(\tau)}{d\tau} = \alpha R_0^*(\tau) \Phi_0(\tau), \quad i \frac{d\Phi_0(\tau)}{d\tau} = -\alpha R_0(\tau) Z_0(\tau) \quad (\text{П.7.27})$$

с граничными условиями

$$\Phi_0(\infty) = 1, \quad Z_0(-\infty) = 0. \quad (\text{П.7.27a})$$

В (П.7.27) введены следующие обозначения:

$$\alpha = (\eta_2/2)^{1/2}, \quad \tau = t/\bar{t}, \quad x = \frac{(E - E_a)}{kT}, \quad R_0 = \exp \left[i \left(\frac{x\tau}{t_0} - \frac{\tau^3}{3} t_0 \right) \right]. \quad (\text{П.7.28})$$

Квазиклассические уравнения (П.7.27) описывают движение некоторой «эффективной частицы» по пересекающимся термам, изображенным на рис. 26 наклонными пунктирными прямыми. Разложение $\cos \omega_0 t$ и $\sin \omega_0 t$ в ряд по степеням t , приводящее к замене $R_{kl} \rightarrow R_0$, соответствует *приближению линейности термов* (по q), что справедливо только вблизи точки их пересечения.

В [47] доказано, что уравнения (П.7.27) соответствуют задаче о многократном прохождении области неадиабатичности, когда две точки поворота близки к точке $q = 0$, в которой термы пересекаются под противоположными по знаку углами. Эта задача весьма сложна, поскольку закон сохранения потока имеет в этом случае нестандартный вид (ср. с [124]):

$$|Z(\tau)|^2 - |\Phi(\tau)|^2 = \text{const}. \quad (\text{П.7.29})$$

В принятых обозначениях формулу (П.7.26) можно переписать в виде

$$W = \frac{\omega_0}{2\pi} \exp \left(-\frac{E_a}{kT} \right) \int_{-x_0}^{\infty} e^{-x} F(\eta_2, t_0, x) dx, \quad (\text{П.7.30})$$

где $x_0 = E_a/kT \gg 1$

$$F(\eta_2, t_0, x) = \lim_{T \rightarrow \infty} |Z_0(\eta_2, t_0, x; T)|^2. \quad (\text{П.7.31})$$

Сравнивая с (П.7.21), получаем

$$K(\eta_2, t_0) = \int_{-x_0}^{\infty} e^{-x} F(\eta_2, t_0; x) dx. \quad (\text{П.7.32})$$

Величина $F(\eta_2, t_0; x)$ есть вероятность перескока электрона с узла на узел (см. раздел В этого Приложения). Она просуммирована по J , но еще не усреднена по статистике (не проинтегрирована по x).

В работе [47] показано, что весь интервал интегрирования по x удобно разделить на три разные области: I, II и III. Подбарьерная область III ($E < E_a$) отвечает интервалу $-x_0 < x < -t_0^{1/2}$. Соответствующий вклад в (П.7.32), описывающий туннельное просачивание колебательной системы через барьер, экспоненциально мал и может быть отброшен. Вклад от области II, отвечающей интегрированию вблизи барьера ($-t_0^{1/2} < x < t_0^{1/2}$), также мал. Основной вклад в (П.7.32) происходит от надбарьерной области I ($x > t_0^{1/2}$). В соответствии с качественными соображениями, изложенными в разделе В, эффективным параметром разложения здесь оказывается не η_2 , а «параметр Мессии»:

$$\eta_2(E) = \frac{J^2}{\hbar \omega_0 [E_a(E - E_a)]^{1/2}} = \frac{\eta_2}{\sqrt{x}}.$$

Поэтому в каждом члене разложения наибольший вклад в интеграл дает интегрирование вблизи нижнего предела ($x \sim t_0^{1/2}$). Поэтому интегрирование

степеней η_2/\sqrt{x} приводит к накоплению степеней $\eta_2 t_0^{-1/2}$, что находится в соответствии с результатами графической техники (см. (II.19), (II.20)). Однако актуальная область интегрирования по x «для просуммированной по η_2 » функции $F(\eta_2, t, x)$ вовсе не лежит вблизи нижнего предела. Это явно видно из точного выражения для $F(\eta_2, t_0, x)$, полученного в [47] (см. формулу (30)). В некотором весьма грубом приближении (без учета интерференции) его можно представить в виде

$$F_I(\eta_2, t_0, x) = 2 \frac{1 - \mathcal{P}(\eta_2, t_0, x)}{2 - \mathcal{P}(\eta_2, t_0, x)}. \quad (\text{П.7.33})$$

Здесь $\mathcal{P}(\eta_2, t_0, x)$ определено формулой (П.7.20). Таким образом (П.7.33) совпадает с выражением (III.6), приведенным в Приложении III работы Холстейна [21].

Отметим, однако, что исходная квазиклассическая (с классическими $q(t)$) система уравнений (II.1) из Приложения II работы Холстейна [21], приводит к системе уравнений, отличающейся от (П.7.24) и (П.7.27) заменой знака во втором уравнении, что соответствует *одинаковому знаку наклона термов*, а не случаю, изображенному на рис. 26. При этом закон сохранения потоков будет отличаться от (П.7.29) заменой знака перед $|\Phi(\tau)|^2$ с минуса на плюс. Это означает, что квазиклассическая система уравнения Холстейна не соответствует исходной квантовомеханической задаче, однако он следующим образом «подправил» себя. В своих уравнениях он пренебрег влиянием обеих точек поворота и использовал тот факт (тогда еще никем не доказанный!), что вероятность неадиабатического перехода с одного линейного терма на другой при однократном прохождении точки $q=0$ не зависит от знака наклона термов и равна $1 - \mathcal{P}$.

Далее, руководствуясь только наглядными соображениями, он постулировал такой рецепт суммирования «однократных» вероятностей (см. Приложение III работы [21]), который должен был бы позволить учесть все то, что не могли описать его уравнения, а именно: многократность прохождения изображающей частицы точки $q=0$ и разный знак наклона термов. Из анализа наших точных уравнений (П.7.27) следует [47], что в том случае, когда интерференцией между последовательными актами перехода можно пренебречь, рецепт Холстейна правилен. В противном случае для $F_I(\eta_2, t_0, x)$ надо пользоваться выражением (30) из [47]. Нестрогость рассмотрения в [21] проявляется еще и в том, что в [21] не доказана возможность использования двухузельной модели без дисперсии с одной эффективной колебательной координатой для решения исходной задачи с бесконечно большим числом колебательных степеней свободы. Впервые это было сделано в [46], где был доказан следующий рецепт перехода от упрощенной двухузельной задачи к исходной. В выражении вида

$$W = \frac{\omega_0}{2\pi} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) F(\eta_2, t_0), \quad (\text{П.7.34})$$

где $F(\eta_2, t_0)$ определено согласно (П.7.32), а $F(\eta_2, t_0, x)$ — согласно (П.7.31) или (П.7.33), следует произвести следующие замены:

$$\omega_0 \rightarrow \tilde{\omega}, \quad E_a \rightarrow E_a(g), \quad \eta_2 = \frac{J^2}{\hbar\omega_0(E_a kT)^{1/2}} \rightarrow \eta_2(g),$$

$$t_0^2 = \left(\frac{E_a}{kT}\right)^{1/2} \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \rightarrow t_0^2(g),$$

где $\tilde{\omega}$, $E_a(g)$, $\eta_2(g)$, $t_0^2(g)$ определены согласно (II.12) — (II.14).

ПРИЛОЖЕНИЕ 3
ВЫЧИСЛЕНИЕ $n(\mathbf{k}_\perp)$ ДЛЯ ПМР

Вычисление $n(\mathbf{k}_\perp)$ следует производить с помощью формулы (IV. 47). Величина $\tilde{W}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp)$ может быть представлена в виде (ср. с (I. 120))

$$\tilde{W}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp) = \sum_{m_x} \frac{1}{N_\perp} \sum_{\substack{m_{1\perp}, m_{2\perp} \\ m_{3\perp}, m_{4\perp}}} W_{0, m_{2\perp}; m_x, m_{4\perp}}^{0, m_{1\perp}; m_x, m_{3\perp}} \times \\ \times e^{ik'_\perp(m_{1\perp} - m_{2\perp})} e^{-ik_\perp(m_{3\perp} - m_{4\perp})}. \quad (\text{П.8.1})$$

Те члены в сумме, которые отвечают условию $m_x = 0, m_{1\perp} = m_{3\perp}, m_{2\perp} = m_{4\perp}$, не содержат экспоненциальной малости вида $\exp(-S_T)$. Обозначим соответствующий вклад $\tilde{W}^0(\mathbf{k}'_\perp - \mathbf{k}_\perp)$ и представим $\tilde{W}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp)$ в таком виде:

$$\tilde{W}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp) = \tilde{W}^{(0)}(\mathbf{k}'_\perp - \mathbf{k}_\perp) + \tilde{W}^{(1)}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp), \quad (\text{П.8.2})$$

где $\tilde{W}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp) \sim \exp(-S_T)$, а величина $\tilde{W}^{(0)}(\mathbf{k}'_\perp - \mathbf{k}_\perp)$ удовлетворяет условию

$$\sum_{\mathbf{k}'_\perp} \tilde{W}^{(0)}(\mathbf{k}'_\perp - \mathbf{k}_\perp) = 0. \quad (\text{П.8.3})$$

Произведем аналогичное разбиение для $n(\mathbf{k}_\perp)$:

$$n(\mathbf{k}'_\perp) = n^{(0)}(\mathbf{k}'_\perp) + n^{(1)}(\mathbf{k}'_\perp) \quad (\text{П.8.4})$$

и подставим (П.8.2) и (П.8.4) в (IV. 47). Полагая $n^{(0)}(\mathbf{k}_\perp) \approx \text{const} \sim 1/N_\perp$, $n^{(1)}(\mathbf{k}'_\perp) = \frac{1}{N_\perp} f(\mathbf{k}'_\perp)$ и используя (П.8.3), перепишем (IV. 47) в виде

$$\frac{1}{N_\perp} \sum_{\mathbf{k}'_\perp} f(\mathbf{k}'_\perp) \tilde{W}^{(0)}(\mathbf{k}'_\perp - \mathbf{k}_\perp) = -g(\mathbf{k}_\perp), \quad (\text{П.8.5})$$

где

$$g(\mathbf{k}_\perp) = \frac{1}{N_\perp} \sum_{\mathbf{k}'_\perp} \tilde{W}^{(1)}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp) = \\ = \sum_{\substack{m_x, m_{1\perp}, G \\ (m_\perp \neq 0, G_\perp \neq 0)}} \tilde{W}_{0, 0; m_x, m_{1\perp} + G_\perp}^{0, 0; m_x, m_{1\perp}} e^{ik_\perp G_\perp} \sim e^{-S_T}. \quad (\text{П.8.6})$$

Интегральное уравнение (П.8.5) с разностным ядром легко решается

$$f(\mathbf{k}'_\perp) = -\frac{1}{N_\perp} \sum_{m_\perp \neq 0} e^{ik'_\perp m_\perp} \sum_{\mathbf{k}_\perp} g(\mathbf{k}_\perp) e^{-ik_\perp m_\perp} \times \\ \times \left\{ \sum_{\mathbf{k}'_\perp} \tilde{W}^{(0)}(\mathbf{k}'_\perp) e^{-ik'_\perp m_\perp} \right\}^{-1}. \quad (\text{П.8.7})$$

Подставляя в (П.8.7) выражения для $\tilde{W}^{(0)}(\mathbf{k}_\perp)$ и $g(\mathbf{k}_\perp)$, приходим к (IV. 49).

ЭЛЕМЕНТЫ ГРАФИЧЕСКОЙ ТЕХНИКИ В k -ПРЕДСТАВЛЕНИИ

ПРИ $H \neq 0, E \neq 0$

Схема действия типична для обобщенного метода КП (см., например, Приложение 2). Вводится контур C (рис. 22). Каждая из трех экспонент, входящих в определение M (см. (V. 14) и (V. 20)), разлагается в ряд по $\mathcal{H}'_{\text{int}}$, что изображается появлением соответствующего числа точек на мнимом и двух горизонтальных отрезках контура C . В низшем порядке по концентрации все точки соединены электронными линиями последовательно вдоль контура. Однако каждая линия обладает теперь двумя индексами k' и k , соответствующими началу и концу линии, и ей сопоставляется множитель

$$A(k, k'; t - t') = \langle 0 | a_k \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}'_e + \mathcal{H}_E)(t - t') \right\} a_{k'}^+ | 0 \rangle. \quad (a)$$

Здесь $(t - t')$ — разность «времен» между конечной и начальной точками, которые эта линия соединяет.

Каждой точке сопоставляется множитель $\pm \frac{i}{\hbar} \hat{\Phi}_{kk'}(t)$. Здесь t — «время» точки, определяющее ее положение на контуре, $k'(k)$ — индексы входящей в (выходящей из) нее электронной линии, знак $- (+)$ выбирается для точек на верхней (нижней) части контура; $\hat{\Phi}_{kk'}(t)$ — записанный в представлении взаимодействия фоновый оператор, входящий в определение

$$\mathcal{H}'_{\text{int}} = \sum_{k, k'} \hat{\Phi}_{kk'} a_{k'}^+ a_k$$

в k -представлении*). Расстановка операторов $\hat{\Phi}$ под знаком шпура производится *против* направления контура C . При усреднении по фоновым числам заполнения возникают фоновые «свертки» от произведения произвольного числа операторов $\hat{\Phi}$, вид которых зависит от модели (см., например, Приложение 2). Как и раньше, назовем «блоком» график, включающий в себя произвольное число точек, который нельзя рассеять вертикальным сечением так, чтобы не задеть ни одну из фоновых линий. Блок будет зависеть от четырех индексов k_j (по числу входящих и выходящих из него линий). Формальное определение величин Γ , W и P такое же, как и раньше: Γ — блок, расположенный левее самого левого свободного сечения и содержащий точки на мнимой оси; W — блок, целиком лежащий на горизонтальном участке контура C и отделенный двумя свободными сечениями слева и справа от других блоков; P — все то, что лежит правее Γ и включает в себя крайнее левое свободное сечение. Поскольку вершина Γ в окончательный ответ (V. 44) не входит, мы не будем описывать соответствующие ей графики, в которых часть точек обязательно лежит на мнимом отрезке контура C . Графики для W и P лежат целиком на горизонтальном участке контура. В низшем порядке по концентрации носителей n , по аналогии со случаем $E = 0, H = 0$ (ср. с (I. 57) и с (II. 6.6)) и случаем $E \neq 0, H = 0$ (ср. с (IV. 31)), определим $P_{k_1 k_2}^{k_3 k_4}$

$$\begin{aligned} &*) \text{ Практически иногда удобнее воспользоваться соотношением } \hat{\Phi}_{kk'} = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{m, m'} \hat{\Phi}_{mm'} \exp \{ ik'm' - ikm \} \text{ и взять } \hat{\Phi}_{mm'} \text{ из выражения для } \mathcal{H}'_{\text{int}} = \\ &= \sum_{m, m'} a_m^+ a_{m'} \hat{\Phi}_{mm'}, \text{ записанного в узельном представлении, например из (I. 20)} \end{aligned}$$

для гамильтониана Фрейдха и из (V. 9) в случае ПМР,

в замкнутом виде как

$$P_{k_2 k_4}^{k_1 k_3} = \frac{1}{\text{Sp} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{ph}}} \right\}} \int_0^{\infty} dt e^{-st} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{ph}}} \langle 0 | a_{k_2} e^{\frac{i}{\hbar} t (\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)} \times \right. \\ \left. \times a_{k_1}^+ a_{k_3} e^{-\frac{i}{\hbar} t (\mathcal{H}' + \mathcal{H}_E)} a_{k_1}^+ | 0 \rangle \right\}. \quad (\text{П.9.1})$$

Здесь шпур берется по фоновым числам заполнения и усредняется по электронному вакууму. В тождественности определений $P_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}$ с помощью (П.9.1) и (V.28) можно убедиться путем последовательного сопоставления всего набора графиков, возникающих при разложении (П.9.1) в ряд по $\mathcal{H}'_{\text{int}}$ и построенных по правилам, описанным выше, и набора графиков, возникающих при разложении $M_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}$ по $\mathcal{H}'_{\text{int}}$ и стоящих справа от самого левого «свободного сечения», т. е. правее Г. При этом нет необходимости вычислять отдельные графики, достаточно убедиться в тождественности их топологических свойств (т. е. направления электронных линий, типы блоков и т. д.).

Чтобы доказать (V.29), достаточно представить $P_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(s)$ в виде ряда

$$P_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(s) = \mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(s) + \mathcal{P}_{k_2 k_2}^{k_1 k_1'}(s) \mathcal{W}_{k_2 k_4}^{k_1' k_3'}(s) \mathcal{P}_{k_4 k_4}^{k_3' k_3}(s) + \\ + \mathcal{P}_{k_2 k_2}^{k_1 k_1'}(s) \mathcal{W}_{k_2 k_4}^{k_1' k_3'}(s) \mathcal{P}_{k_4 k_6}^{k_3' k_5'}(s) \mathcal{W}_{k_6 k_8}^{k_5' k_7'}(s) \mathcal{P}_{k_8 k_4}^{k_7' k_3}(s) \dots, \quad (\text{П.9.2})$$

где функция $\mathcal{P}(s)$ отвечает свободному сечению. Из (П.9.2) и (П.9.1) следует, что $\mathcal{P}(s)$ должна совпадать с $P(s)$, вычисленной в нулевом приближении по $\mathcal{H}'_{\text{int}}$, т. е.

$$\mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(s) = P_{k_2 k_4}^{(0) k_1 k_3}(s) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} P_{k_2 k_4}^{(0) k_1 k_3}(t), \quad (\text{П.9.3})$$

где

$$P_{k_2 k_4}^{(0) k_1 k_3}(t) = A(k_2, k_4; -t) A(k_3, k_1; t). \quad (\text{П.9.4})$$

Интегрируя (П.9.3) по t по частям, получим $s\mathcal{P}(s)$ и член, содержащий коммутатор $[(\mathcal{H}'_e + \mathcal{H}'_E), a_{k_1}^+ a_{k_3}]$ под знаком интеграла. Используя явные выражения (V.18) для \mathcal{H}'_e и (V.10) для \mathcal{H}'_E и вычисляя коммутатор, замечаем, что получившееся выражение после интегрирования по частям по некоторым из k сводится к выражению типа (П.9.3), но со смещенными аргументами, т. е.

$$s\mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(s) = \delta_{k_1, k_3} \delta_{k_2, k_4} - \frac{eE}{\hbar} \left(\frac{d}{dk_4} + \frac{d}{dk_3} \right) \mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(s) + \\ + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{m}} \varepsilon(\mathbf{m}) \left\{ e^{-i\mathbf{m}k_1} \mathcal{P}_{k_2, k_4 - \mathbf{A}(\mathbf{m})}^{k_1, k_3}(s) - e^{-i\mathbf{m}k_3} \mathcal{P}_{k_2, k_4 + \mathbf{A}(\mathbf{m})}^{k_1, k_3}(s) \right\}. \quad (\text{П.9.5})$$

Вместо того чтобы доказывать (П.9.2), мы ограничимся здесь доказательством более простого утверждения: во втором порядке по $\mathcal{H}'_{\text{int}}$ функция P может быть представлена в следующем виде:

$$P_{k_2 k_4}^{(2)k_1 k_3} (s) = \mathcal{P}_{k_2 k_2}^{k_1 k_1'} (s) \mathcal{W}_{k_2 k_4}^{(2)k_1' k_3'} (s) \mathcal{P}_{k_4 k_4}^{k_3 k_3'} (s) + \\ + \mathcal{P}_{k_2 k_2}^{k_1 k_1'} (s) \mathcal{W}_{k_2 k_4}^{(1)k_1' k_3'} (s) \mathcal{P}_{k_4 k_6}^{k_3 k_5'} (s) \mathcal{W}_{k_6 k_8}^{(1)k_5' k_7'} (s) \mathcal{P}_{k_8 k_4}^{k_7 k_3'} (s), \quad (\text{П.9.2a})$$

где \mathcal{W} и \mathcal{W}' — блоки первого и второго порядков по $\mathcal{H}'_{\text{int}}$, входящие в определение $\mathcal{W} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(n)}{\mathcal{W}}$.

Доказательство (П.9.2) следует проводить по такой же системе. Рассмотрим, например, вклад, проистекающий от разложения экспоненты $\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} t \mathcal{H} \right\}$ в (П.9.1) в ряд до $(\mathcal{H}'_{\text{int}})^2$, заменяя при этом $\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t \right\}$ на $\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} t \mathcal{H}_0 \right\}$. Полагая, что $\mathcal{H}'_{\text{int}} = \sum_{k, k'} a_k^+ a_k \hat{\Phi}_{kk'}$ и обозначая оператор эволюции $\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} t (\mathcal{H}'_e + \mathcal{H}_E) \right\} \rightarrow \hat{A}(t)$ (его матричный элемент описывается формулой (а) на стр. 402), получим

$$\text{уход } P_{k_2 k_4}^{(2)k_1 k_3} = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_{k_5, k_5'; k_6, k_6'} \int_0^{\infty} dt e^{-st} \int_0^{t_1} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \times \\ \times \text{Sp} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{ph}}} \hat{\Phi}_{k_5 k_5'}(t_1) \hat{\Phi}_{k_6 k_6'}(t_2) \right\} \times \\ \times \langle 0 | a_{k_2} \hat{A}(-t) a_{k_4}^+ a_{k_3} \hat{A}(t-t_1) a_{k_5}^+ a_{k_5'} \hat{A}(t_1-t_2) a_{k_6}^+ a_{k_6'} \hat{A}(t_2) a_{k_1}^+ | 0 \rangle = \\ = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_{k_5, k_5'; k_6, k_6'} \int_0^{\infty} dt_2 \int_{t_2}^{\infty} dt_1 \int_{t_1}^{\infty} dt e^{-st} \langle \hat{\Phi}_{k_5 k_5'}(t_1-t_2) \hat{\Phi}_{k_6 k_6'}(0) \rangle \times \\ \times A(k_2, k_4, -t) A(k_3, k_5, t-t_1) A(k_5', k_6, t_1-t_2) A(k_6', k_1, t_2) = \\ = \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_{k_5, k_5'; k_6, k_6'} \int_0^{\infty} dt \int_0^{\infty} dt_1 \int_0^{\infty} dt_2 e^{-s(t+t_1+t_2)} \langle \hat{\Phi}_{k_5 k_5'}(t_1) \hat{\Phi}_{k_6 k_6'}(0) \rangle \times \\ \times A(k_2, k_4, -t-t_1-t_2) A(k_3, k_5, t) A(k_5', k_6, t_1) A(k_6', k_1, t_2). \quad (\text{П.9.6})$$

Используя очевидное равенство

$$A(k_2, k_4, -t-t_1-t_2) = \\ = \sum_{k_1', k_2'} A(k_2, k_2', -t_2) A(k_2', k_1', -t_1) A(k_1', k_4, -t) \quad (\text{П.9.7})$$

и определения (П.9.3) и (П.9.4) для $\mathcal{P}(s)$ и $\mathcal{P}(t)$, перепишем (П.9.6) в виде

$$\sum_{\substack{k_5 k_5', k_6 k_6' \\ k_1 k_1', k_2 k_2'}} \mathcal{P}_{k_2 k_2'}^{k_1 k_1', k_5 k_5', k_6 k_6'}(s) \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^\infty dt_1 e^{-st_1} \mathcal{P}_{k_2 k_2'}^{k_6 k_6', k_5 k_5'}(t_1) \times \\ \times \langle \hat{\Phi}_{k_5 k_5'}(t_1) \hat{\Phi}_{k_6 k_6'}(0) \rangle \mathcal{P}_{k_1 k_1'}^{k_5 k_5', k_6 k_6'}(s). \quad (\text{П.9.8})$$

Средние типа $\langle \hat{\Phi}(t) \hat{\Phi} \rangle$, вообще говоря, могут содержать сингулярный вклад $\langle \hat{\Phi} \rangle \langle \hat{\Phi} \rangle$ (см., например, Приложение 2), связанный с диагональными переходами. Выделим его:

$$\langle \hat{\Phi}(t) \hat{\Phi}(0) \rangle \equiv \langle \hat{\Phi}(t) \hat{\Phi}(0) \rangle - \langle \hat{\Phi} \rangle \langle \hat{\Phi} \rangle. \quad (\text{П.9.9})$$

Вводя обозначения

$$\mathbb{W}_{k_2 k_4}^{(1) k_1 k_3} = -\frac{i}{\hbar} \delta_{k_2, k_4} \langle \hat{\Phi}_{k_3 k_1} \rangle, \quad (\text{П.9.10})$$

$$\text{уход } \mathbb{W}_{k_2 k_4}^{(2) k_1 k_3} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{k_5, k_6} \int_0^\infty e^{-st} dt \langle \hat{\Phi}_{k_3 k_5}(t) \hat{\Phi}_{k_6 k_4}(0) \rangle \mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_5 k_6}(t), \quad (\text{П.9.11})$$

видим, что (П.9.6) действительно представляется в виде (П.9.2а).

Следует учесть еще два вклада в $\mathbb{P}^{(2)}$. Первый из них получается при разложении $\exp\left\{\frac{i}{\hbar} t \mathcal{H}\right\}$ в (П.9.1) в ряд до $(\mathcal{H}_{\text{int}})^2$. Его рассмотрение проводится аналогично и приводит к таким же результатам, но с заменой выражений (П.9.10), (П.9.11) на

$$\mathbb{W}_{k_2 k_4}^{(1) k_1 k_3} = \frac{i}{\hbar} \delta_{k_1 k_3} \langle \hat{\Phi}_{k_1 k_4} \rangle, \quad (\text{П.9.12})$$

$$\text{уход } \mathbb{W}_{k_2 k_4}^{(2) k_1 k_3} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{k_5, k_6} \int_0^\infty e^{-st} dt \mathcal{P}_{k_5 k_6}^{k_1 k_3}(t) \langle \hat{\Phi}_{k_2 k_5}(0) \hat{\Phi}_{k_6 k_4}(t) \rangle. \quad (\text{П.9.13})$$

В обычной технике КП при $E=0$, $N=0$ выражения (П.9.11) и (П.9.13) комплексно сопряжены. Поэтому их сумма есть величина вещественная и имеет смысл «уходной» вероятности.

Второй вклад возникает при разложении обеих экспонент в (П.9.1) до 1-й степени по \mathcal{H}_{int} и содержит тройной интеграл, который следует разбить на два

$$\int_0^\infty dt \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \rightarrow \int_0^\infty dt \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 + \int_0^\infty dt \int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2,$$

как это всегда делается в методе КП. Рассмотрение каждого из этих вкладов проводится по описанной выше схеме. Их сумма тоже представляется в

виде (П.9.2а), но с иным $\mathbb{W}^{(2)}$

$$\text{приход } \mathbb{W}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{k_s, k_0} \int_0^\infty e^{-st} dt \left\{ \langle \langle \hat{\Phi}_{k_0 k_1}(t) \hat{\Phi}_{k_2 k_3}(0) \rangle \rangle \mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(t) + \right. \\ \left. + \mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(t) \langle \langle \hat{\Phi}_{k_2 k_3}(0) \hat{\Phi}_{k_0 k_1}(t) \rangle \rangle \right\}, \quad (\text{П.9.14})$$

что отвечает «приходному» члену в уравнении (V. 29).

Можно убедиться, что в высших порядках по \mathcal{H}_{int} тоже получается разложение типа (П.9.2), т. е. «свободному сечению» всегда будет соответствовать \mathcal{P} . Графические правила для написания \mathbb{W} в любом порядке по \mathcal{H}_{int} основаны на принципах, описанных в начале этого приложения. Если не

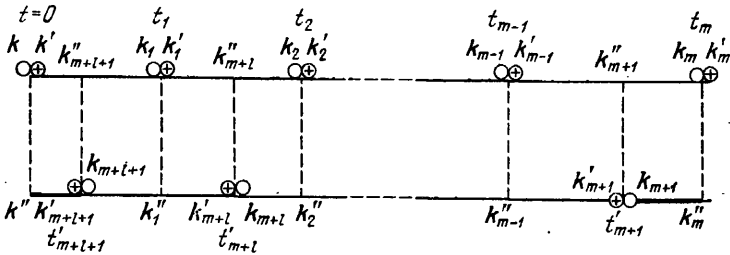


Рис. 27. График, содержащий $m+1$ точек на верхнем отрезке контура C и $l+1$ на нижнем. Пересечению пунктирных линий с отрезками контура отвечают «фиктивные» точки.

конкретизировать процедуру усреднения по фоннным числам заполнения от произведения из произвольного числа операторов $\hat{\Phi}$ (для случая ПМР она определена в Приложении 2, для гамильтониана Фрелиха — в [23]), то можно сказать, что графику, изображенному на рис. 27, отвечает фоннное среднее*)

$$\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{m+1} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{l+1} \langle \langle \hat{\Phi}_{k_{m+l+1}, k_{m+l+1}'}^{(t_{m+l+1})} \hat{\Phi}_{k_{m+l}', k_{m+l}''}^{(t_{m+l})} \dots \\ \dots \hat{\Phi}_{k_{m+1}', k_{m+1}''}^{(t_{m+1})} \hat{\Phi}_{k_m, k_m'}^{(t_m)} \dots \hat{\Phi}_{k_1 k_1'}^{(t_1)} \hat{\Phi}_{k k'}^{(0)} \rangle \rangle, \quad (\text{П.9.15})$$

где $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ означает исключение диагональных по отношению к начальному состоянию промежуточных состояний. Например, для N точек

$$\langle \langle \prod_{i=1}^N \hat{\Phi}_i \rangle \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^N \hat{\Phi}_i \right\rangle - \sum_{l=1}^{N-1} \left\langle \prod_{i=1}^l \hat{\Phi}_i \right\rangle \left\langle \prod_{j=l+1}^N \hat{\Phi}_j \right\rangle.$$

Далее следует написать множители, отвечающие вкладу от электронных линий, содержащихся внутри блока на рис. 27. Это можно сделать двумя равноценными способами.

А. *Определение \mathbb{W} через матричные элементы оператора эволюции $A(t)$.* Электронные линии, заключенные между вертикальными сечениями, проходящими через крайнюю левую точку ($t=0$) и крайнюю правую ($t=t_m$), причем t_m — наибольшее из времен, назовем внутренними. Отметим, что среди

*) Расстановка времен в (П.9.15) произведена в соответствии с правилами на стр. 402. Время $t=0$ всегда удобно сопоставлять крайней левой точке, независимо от того, где она расположена, — на верхнем (как это изображено на рис. 27) или на нижнем отрезке контура C_2 .

внутренних линий имеются две, только одним концом соединенные с внутренней точкой, а другим опирающиеся на крайние сечения (см. рис. 27). Четверем внешним электронным линиям (пунктирные линии на рис. 27) сопоставляется лишь по одному индексу k (внешние индексы блока W). Каждой внутренней электронной линии сопоставляется матричный элемент оператора эволюции $A(k, k', t - t')$ (здесь $k(k')$ — индекс конца (начала) линии, а $t(t')$ — время, соответствующее концу (началу) ее), описывающий изменение во времени электронного состояния под действием внешних полей. Направление линий — слева направо на верхнем временном отрезке и справа налево на нижнем. Например, для графика на рис. 27 имеется $m + 1$ таких линий сверху и $(l + 1)$ снизу. Им соответствует множитель

$$A(k_1, k', t_1) A(k_2, k'_1, t_2 - t_1) \dots A(k_m, k'_{m-1}, t_m - t_{m-1}) \times \\ \times A(k_{m+1}, k''_m, t_{m+1} - t_m) \dots A(k_{m+l+1}, k'_{m+l}, t_{m+l+1} - t_{m+l}) \times \\ \times A(k'', k'_{m+l+1}, -t_{m+l+1}). \quad (\text{П.9.16})$$

Б. Определение W через функции $\mathcal{P}(t)$. Прежде чем сформулировать правила, проведем дополнительные построения. Через каждую из точек, которой сопоставляется время t_j , проведем вертикальное сечение, которое пересечет электронную линию, идущую вдоль противоположного участка контура. Каждой такой точке пересечения — «фиктивной» точке — сопоставим дополнительное промежуточное электронное состояние k''_j . При прохождении линии через «фиктивную» точку электронный индекс не меняется. Эти вертикальные сечения разобьют всю временную ось на $n - 1$ интервалов, внутрь каждого из которых попадает два отрезка электронных линий (верхней и нижней). Поэтому каждому интервалу сопоставляется множитель

$$\mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(t - t') \equiv A(k_2, k_4, t' - t) A(k_3, k_1, t - t'),$$

где $t(t')$ — время, соответствующее правому (левому) сечению, ограничивающему интервал, k_1 и k_3 (k_4 и k_2) — индексы начала и конца верхней (нижней) электронной линии внутри интервала. Среди индексов k_1, k_2 и k_3, k_4 имеется по одному, относящемуся к «фиктивной» точке. Например, для случая, изображенного на рис. 27, имеем

$$\mathcal{P}_{k''_m, k_{m+l+1}}^{k, k''_{m+l+1}}(t_{m+l+1}) \mathcal{P}_{k'_{m+l+1}, k''_1}^{k''_{m+l+1}, k'_1}(t_1 - t_{m+l+1}) \dots \\ \dots \mathcal{P}_{k''_{m-1}, k'_{m+1}}^{k''_{m-1}, k''_{m+1}}(t_{m+1} - t_{m-1}) \mathcal{P}_{k'_{m+1}, k''_m}^{k''_{m+1}, k''_m}(t_m - t_{m+1}). \quad (\text{П.9.17})$$

Умножая (П.9.16) или (П.9.17) на (П.9.15), суммируя по всем промежуточным k_j, k'_j, k''_j и интегрируя по всем временам, получим аналитическое выражение, соответствующее графическому вкладу в W , изображенному на рис. 27. Для проведения этих вычислений надо знать вид функций $\mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(t)$ или $A(k, k', t - t')$ и вид «сверток» (П.9.15). Удобно выразить (см. ниже) все $\mathcal{P}_{k_2 k_4}^{k_1 k_3}(t)$ через функции $\mathcal{P}(k, k', \kappa; t)$

$$\mathcal{P}(k, k', \kappa, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \left[e \left(k + \frac{eE}{\hbar} \tau + \frac{\kappa}{2} + A(i\sqrt{V}_k) \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - e \left(k + \frac{eE}{\hbar} \tau - \frac{\kappa}{2} - A(i\sqrt{V}_k) \right) \right] \right\} \delta_{k + \frac{eE}{\hbar} t, k'}, \quad (\text{П.9.18})$$

являющиеся оригиналом для лапласова образа $\mathcal{P}(k, k', \kappa, s)$, удовлетворяющего уравнению (V.33).

Опишем основные этапы вывода уравнения (V.33). В (П.9.5) проведем замену:

$$k_{1,2} \rightarrow k \mp \frac{\kappa' + \eta}{2},$$

$$k_{3,4} \rightarrow k' + A(m') \mp \frac{\kappa'}{2}.$$

При этом $\delta_{k_1, k_3} \delta_{k_2, k_4} \rightarrow \delta_{\eta, 0} \delta_{k, k' + A(m')}$. Умножая затем (П.9.5) на $\frac{1}{N} \exp[i(\kappa - \kappa')m]$, суммируя по κ' , η , m' и используя связь типа (V.30), получим слева $s\mathcal{P}(k, k', \kappa, s)$, а два первых члена справа примут вид $\delta_{k, k'} - \frac{eE}{\hbar} \frac{d}{dk'} \mathcal{P}(k, k', \kappa, s)$. Полагая

$$k = \frac{k_1 + k_2}{2}, \quad k' = \frac{k_3 + k_4}{2}, \quad \kappa = k_4 - k_3, \quad \eta = k_2 - k_1 + k_3 - k_4$$

и подставляя вместо k_1, k_3 верхние, а вместо k_2, k_4 нижние индексы обоих \mathcal{P} в фигурной скобке в (П.9.5), перепишем их в виде

$$\begin{aligned} & \mathcal{P}\left(k, k' + A\left(m' - \frac{m}{2}\right), \kappa' - A(m), \eta + A(m), s\right); \\ & \mathcal{P}\left(k, k' + A\left(m' + \frac{m}{2}\right), \kappa' - A(m), \eta + A(m), s\right). \end{aligned} \quad (\text{П.9.19})$$

Используя соотношение

$$\begin{aligned} & \mathcal{P}(k, k', \kappa', \eta, s) = \\ & = \frac{1}{N^2} \sum_{m_1, m_2, \kappa} e^{i\eta m_1} e^{i(\kappa' - \kappa_1)m_2} \mathcal{P}(k + A(m_1), k' + A(m_1 - m_2), \kappa_1, s), \end{aligned}$$

представим третий член справа в (П.9.5), с учетом дополнительного суммирования по κ' , η и m' , следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar} \frac{1}{N^3} \sum_{\substack{m, m', m_1, m_2 \\ \kappa', \kappa_1, \eta}} e(m) e^{im_1(\eta + A(m))} e^{i(\kappa - \kappa')m'} e^{im_2(\kappa' - A(m) - \kappa_1)} e^{-im(k' + A(m'))} \times \\ & \times \left\{ \mathcal{P}\left(k + A(m_1), k' + A\left(m_1 - m_2 + m' - \frac{m}{2}\right), \kappa_1\right) e^{-im\frac{\kappa'}{2}} - \right. \\ & \left. - \mathcal{P}\left(k + A(m_1), k' + A\left(m_1 - m_2 + m' + \frac{m}{2}\right), \kappa_1\right) e^{im\frac{\kappa'}{2}} \right\}. \quad (\text{П.9.20}) \end{aligned}$$

Суммируя по η , получим $N\delta_{m_1, 0}$, т. е. остается пятикратная сумма по $m, m', m_2, \kappa', \kappa_1$. Суммируя по m_2 при первом \mathcal{P} , получим $N\delta_{m', m_2 - \frac{m}{2}}$, а при втором \mathcal{P} получим $N\delta_{m', m_2 + \frac{m}{2}}$. После этого суммирование по m' дает $\delta_{\kappa_1, \kappa}$,

и (П.9.20) примет вид

$$\frac{i}{\hbar} \sum_m \varepsilon(m) \left\{ e^{-im \left(k' + \frac{\kappa}{2} \right)} \mathcal{P}(k, k' - A(m), \kappa) - \right. \\ \left. - e^{-im \left(k' - \frac{\kappa}{2} \right)} \mathcal{P}(k, k' + A(m), \kappa) \right\} = \frac{i}{\hbar} \left[\varepsilon \left(k' + \frac{\kappa}{2} + A(i\nabla_{k'}) \right) - \right. \\ \left. - \varepsilon \left(k' - \frac{\kappa}{2} - A(i\nabla_{k'}) \right) \right] \mathcal{P}(k, k', \kappa),$$

т. е. уравнение для $\mathcal{P}(k, k', \kappa, s)$ совпадает с (V.33).

Используя (П.9.19), выразим все $\mathcal{P}_{k_1 k_2}^{k_1 k_2}(t)$ в (П.9.17) через $\mathcal{P}(k, k', \kappa, t)$ со смещенными аргументами. Если вид фоновых сверток известен, то вычисление W можно выполнить до конца.

Для ПМР в области высоких и средних T можно положить $\varepsilon_p(k) \rightarrow 0$, тогда $\mathcal{P}(k, k', \kappa, t) = \delta_{k + \frac{\varepsilon p}{\hbar} t, k'}$. Средние типа (П.9.15) для ПМР известны

(см. Приложение 2), т. е. задача сводится к вычислению блоков, описанных в Приложениях 2—4, но с учетом дополнительных правил A и A' на стр. 329. Соответствующие расчеты проделаны в [113, 114].

ЛИТЕРАТУРА

К I ЧАСТИ

1. S. I. Pekar, Untersuchungen über die Elektronentheorie Kristalle, Akademie Verlag, Berlin, 1954 (С. И. Пекар, Исследования по электронной теории кристаллов, Гостехиздат, 1951).
2. L. D. Landau, Physik Z. Sowjetunion 3, 644 (1933) (см. Л. Д. Ландау, Собрание трудов, т. I, М., «Наука», 1969, стр. 90).
3. H. Fröhlich, H. Pelzer, S. Zienau, Phil. Mag. 41, 221 (1950).
4. R. P. Feynman, R. W. Hellwarth, C. K. Iddings, P. M. Platzman, Phys. Rev. 127, 1004 (1962).
5. J. Yamashita, T. Kurosawa, Phys. Chem. Solids 5, 34 (1958).
- 5a. J. Yamashita, T. Kurosawa, J. Phys. Soc. Japan 15, 802 (1960).
6. T. Holstein, Ann. Phys. 8, 343 (1959).
7. T. G. Castner, W. Känzig, Phys. Chem. Solids 3, 178 (1957).
8. H. Fröhlich, Advan. Phys. 3, 325 (1954).
9. J. Appel, Phys. Rev. Lett. 17, 1045 (1966).
- 9a. E. Burstein, in «1966 Tokyo Summer Lectures in Theoretical Physics» (R. Kubo, H. Kamimura, eds.) Part I, p. 1, W. A. Benjamin, N. Y., 1967.
- 9b. H. Fröhlich, in «Polarons and Excitons» (C. C. Kuper & C. D. Whitfield, eds.), p. 12, Plenum Press, N. Y., 1962.
10. С. В. Тябликов, ЖЭТФ 23, 381 (1952).
11. F. Bloch, Z. Physik 52, 555 (1928).
12. G. L. Sewell, Phil. Mag. 3, 1361 (1958).
13. A. Sommerfeld, H. Bethe, in «Handbuch der Physik» (H. Geiger, K. Schneel, eds.), v. 24, Part II, 2nd ed. Springer, Berlin, 1933. (см. перевод, Г. Бете, А. Зоммерфельд, Электронная теория металлов, ОНТИ, 1938).
14. H. Ehrenreich, Phys. Chem. Solids 2, 131 (1957).
15. H. Ehrenreich, M. H. Cohen, Phys. Rev. 115, 786 (1959).
16. V. Ambegaokar, W. Kohn, Phys. Rev. 117, 423 (1960).
17. S. L. Adler, Phys. Rev. 126, 413 (1962).
18. H. Haken, Z. Physik 139, 66 (1954).
19. H. Haken, in «Halbleiter Probleme» (W. Schottky, ed.), v. 2, p. 1, Vieweg, Braunschweig, 1955.
20. T. D. Schultz, Tech. Rept. Nr. 9. Solid State and Molecular Theory Group, M. I. T., Cambridge, Massachusetts, 1956.
21. G. D. Whitfield, R. Puff, Phys. Rev. 139, A338 (1965).
- 21a. D. M. Larsen, Phys. Rev. 144, 697 (1966).
22. H. Stuart, T. Gast, in «Landolt — Börnstein Tables» (K. H. Hellwege, M. H. Hellwege, eds.) 6th ed., v. II, P. 6, p. 451, Springer, Berlin, 1959.
23. R. B. Barnes, Z. Physik 75, 723 (1932).
24. G. O. Jones, D. H. Martin, P. A. Mawer, C. H. Perry, Proc. Roy. Soc. A261, 10 (1961).
25. G. Ascarelli, F. C. Brown, Phys. Rev. Lett. 9, 209 (1962).
26. M. Mikkor, K. Kanazawa, F. C. Brown, Phys. Rev. Lett. 15, 489 (1965); Phys. Rev. 162, 848 (1967).
27. F. Oswald, R. Schade, Z. Naturforsch. 9a, 611 (1954).

28. G. Picus, E. Burstein, V. W. Hnsvirs, M. Hass, Phys. Chem. Solids, **8**, 282 (1959).
29. C. Hilsum, in «Physics of Semiconductors» (M. Hulin, ed.), p. 1127, Dunod, Paris, 1964.
30. T. S. Moss, Optical Properties of Semiconductors (C. A. Hogarth, ed.) p. 207, Academic Press, N. Y., 1959 (см. перевод, Т. С. Мосc, Оптичеcкие свойства полупроводников, «Мир», 1970).
31. P. M. Platzman, Phys. Rev. **125**, 1961 (1962).
32. B. Segall, M. R. Lorenz, R. E. Halsted, Phys. Rev. **129**, 247 (1962).
33. R. L. Petritz, W. W. Scanlon, Phys. Rev. **97**, 1620 (1955).
34. C. V. Raman, Proc. Indian Acad. Sci. **A26**, 388 (1947).
35. A. R. Hutson, in «Semiconductors» (N. B. Hannay, ed.) p. 575, Reinhold, N. Y., 1959 (см. перевод, «Полупроводники», сб. под ред. Хеннея, ИЛ, 1962).
36. A. R. Hutson, Phys. Rev. **108**, 222 (1957).
37. E. Engelhard, Ann. Physik **17**, 501 (1933).
38. A. S. Barker, Phys. Rev. **145**, 391 (1966).
39. A. H. Kahn, A. J. Leyendecker, Phys. Rev. **135A**, 1321 (1964).
40. D. M. Eagles, J. Phys. Chem. Solids **25**, 1243 (1964).
41. H. A. Bethe, F. de Hoffman, «Mesons and Fields», v. II, p. 202, Harper, Row, N. Y., 1955 (см. перевод, Г. Бере, Ф. Гофман, Мезоны, ИЛ, 1957).
42. F. Haga, Progr. Theoret. Phys. (Kyoto) **11**, 449 (1954).
43. M. Gurari, Phil. Mag. **44**, 329 (1953).
44. T. D. Lee, D. Pines, Phys. Rev. **88**, 960 (1952).
45. T. D. Lee, F. Low, D. Pines, Phys. Rev. **90**, 297 (1953).
46. T. D. Lee, D. Pines, Phys. Rev. **92**, 883 (1953).
47. E. P. Gross, Phys. Rev. **100**, 1571 (1955).
48. R. P. Feynman, Phys. Rev. **97**, 660 (1955).
49. T. D. Schultz, Phys. Rev. **116**, 526 (1959).
50. G. Höhler, Z. Physik, **140**, 192 (1955).
51. С. И. Пекар, ЖЭТФ **16**, 341 (1946); **16**, 335 (1946).
52. Л. Д. Ландау, С. И. Пекар, ЖЭТФ **18**, 419 (1948).
53. J. J. Markham, F. Seitz, Phys. Rev. **74**, 1014 (1948).
54. N. F. Mott, M. J. Littleton, Trans. Faraday Soc. **34**, 485 (1938).
55. F. Seitz, Rev. Mod. Phys. **18**, 384 (1946); **26**, 7 (1954).
56. С. И. Пекар, М. Ф. Дейген, ЖЭТФ **18**, 481 (1948).
57. M. Born, R. Oppenheimer, Ann. Physik **84**, 457 (1927).
58. S. I. Pekar, Fortschr. Physik **1**, 367 (1954); С. И. Пекар, УФН **50**, 197 (1953).
59. G. Höhler, Z. Physik **146**, 372 (1956).
60. G. Höhler, Z. Physik **146**, 571 (1956).
61. Н. Н. Боголюбов, Укр. М. Ж. **2**, 3 (1950); Fortschr. Phys., Sonderband **4**, 1 (1961).
62. С. В. Тябликов, ЖЭТФ **21**, 377 (1951); Fortschr. Phys., Sonderband **4**, 231 (1961).
63. G. R. Allcock, Advan. Phys. **5**, 412 (1956).
64. G. R. Allcock, in «Polarons and Excitons» (C. R. Kuper, G. D. Whitfield, eds.), p. 45, Plenum Press, N. Y., 1962.
65. R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20**, 367 (1949).
66. T. D. Schultz in «Polarons and Excitons» (C. G. Kuper, G. D. Whitfield, eds.), p. 71, Plenum Press, N. Y., 1962.
67. R. P. Feynman, Phys. Rev. **76**, 749 (1949).
68. R. P. Feynman, Phys. Rev. **80**, 440 (1950).
69. E. W. Montroll, Commun. Pure Appl. Math. **5**, 415 (1952).
70. Y. Osaka, Progr. Theoret. Phys. (Kyoto) **22**, 437 (1959).
71. М. А. Кривоглаз, С. И. Пекар, Изв. АН СССР, сер. физ. **21**, 3 (1957); **21**, 16 (1957); **21**, 33 (1957).
72. R. W. Hellwarth, P. M. Platzman, Phys. Rev. **128**, 1599 (1962).
73. S. T. Nettel, Phys. Rev. **128**, 2573 (1962).
74. W. Kohn, Phys. Rev. **105**, 509 (1957).

75. A. A. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, 1962.
76. G. D. Whitfield, R. D. Puff, in «Polarons and Excitons» (C. G. Kuper, G. D. Whitfield, eds.), p. 171, Plenum Press, N. Y., 1962.
77. D. Pines, там же, p. 155.
78. D. J. Scalapino, J. R. Schrieffer, J. M. Wilkins, Phys. Rev. 148, 263 (1966).
79. W. V. Haeringen, Phys. Rev. 137, A1902 (1965).
80. L. P. Kadanoff, M. Revzen, Nuovo Cimento 33, 397 (1964).
81. H. Y. Fan, Solid State Phys. 1, 283 (1955).
82. J. A. Swanson, Phys. Rev. 99, 1799 (1955).
83. W. Kohn, J. H. Lutlinger, Phys. Rev. 108, 590 (1957).
84. D. A. Greenwood, Proc. Phys. Soc. (London) 71, 585 (1958).
85. F. Seitz, Phys. Rev. 73, 549 (1948).
86. E. M. Conwell, Phys. Rev. 143, 657 (1966).
87. D. J. Howarth, E. H. Sondheimer, Proc. Roy. Soc. A219, 53 (1953).
88. M. Kohler, Z. Physik 124, 772 (1948); 125, 679 (1949).
89. H. Fröhlich, Proc. Roy. Soc. A160, 230 (1937).
90. F. E. Low, D. Pines, Phys. Rev. 98, 414 (1955).
91. F. E. Low, Phys. Rev. 97, 1392 (1955).
92. L. P. Kadanoff, Phys. Rev. 130, 1364 (1963).
93. H. S. Meijer, D. Polder, Physica 19, 225 (1953).
94. G. D. Mahan, J. J. Hopfield, Phys. Rev. Lett. 12, 241 (1964).
95. H. Gabriel, Z. Naturforsch. 19a, 1591 (1964).
96. A. R. Hutson, Phys. Rev. Lett. 4, 505 (1960); J. Appl. Phys. 32, 2287 (1961).
97. L. Nordheim, Ann. Physik 9, 607 (1931).
98. W. Shockley, Electrons and Holes in Semiconductors, with Applications to Transistor Electronics, Van Nostrand, Princeton, N. Jersey, 1950 (см. перевод, В. Шокли, Теория электронных полупроводников. Приложения к теории транзисторов, ИЛ, 1953).
99. Е. А. Перлин, ЖЭТФ 20, 274 (1950).
100. W. A. Harrison, Phys. Rev. 101, 903 (1956).
101. J. Appel, W. B. Teutsch, J. Phys. Chem. Solids 23, 1521 (1962).
102. R. Stratton, J. Phys. Chem. Solids 23, 1011 (1962).
103. R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 12, 570 (1957).
104. R. P. Feynman, Phys. Rev. 84, 108 (1951).
105. P. M. Platzman in «Polarons and Excitons» (C. G. Kuper, G. D. Whitfield, eds.), p. 126, Plenum Press, N. Y., 1962.
106. W. E. Pinson, R. Bray, Phys. Rev. 136, A1449 (1964).
107. Y. Osaka, Progr. Theoret. Phys. (Kyoto) 25, 517 (1961).
108. A. Morita, Sci. Rept. Tohoku Univ., First Ser. 38, 1 (1954); 38, 158 (1954); 39, 73 (1955).
109. M. Gell-Mann, M. L. Goldberger, Phys. Rev. 91, 398 (1953).
110. D. C. Langreth, L. P. Kadanoff, Phys. Rev. 133, A1070 (1964).
111. W. Gröbner, N. Hofreiter, Table of Integrals, Springer, Vienna, 1950.
112. D. Pines, P. Nozières, The Theory of Quantum Liquids, Benjamin, N. Y., 1966 (см. перевод, Д. Пайнс, Ф. Нозьер, Теория квантовых жидкостей: Нормальные ферми-жидкости, «Мир», 1967).
113. J. Appel, Phys. Rev. 133, A280 (1964).
114. В. Н. Буймистров, ФТТ 5, 3264 (1963).
- 114a. R. C. Brandt, F. C. Brown, Bull. Am. Phys. Soc. 12, 316 (1967).
115. D. C. Burnham, F. C. Brown, R. S. Knox, Phys. Rev. 119, 1560 (1960).
- 115a. D. C. Langreth, Phys. Rev. 159, 500 (1967).
- 115b. R. K. Ahrenkiel, F. C. Brown, Phys. Rev. 136, A223 (1964).
116. А. И. Губанов, Н. И. Кривко, Н. М. Рейнов, ЖЭТФ 38, 341 (1960).
117. W. S. Vaer, R. N. Dexter, Phys. Rev. 135, A1388 (1964).
118. K. Sawamoto, J. Phys. Soc. Japan 18, 1224 (1963).
119. W. W. Piper, D. T. Marple, J. Appl. Phys. 32, 2237 (1961).
120. M. Balkanski, J. J. Hopfield, Phys. Status Solidi 2, 623 (1962).
121. F. C. Brown, N. Inchauspe, Phys. Rev. 121, 1303 (1961).

122. R. Van Heyningen, Phys. Rev. **128**, 2112 (1962).
123. L. Chollet, J. Rossel, Proc. Intern. Conf. Semicond. Phys. Prague, 1960, p. 677, Czech. Acad. Sci., Prague, 1961; P. Süptitz, Z. Physik **153**, 174 (1958).
124. H. Ehrenreich, Phys. Chem. Solids **8**, 129 (1959).
125. H. Ehrenreich, Phys. Chem. Solids **12**, 97 (1959).
126. R. P. Chasmar, Phys. Chem. Solids **20**, 164 (1961).
127. H. Ehrenreich, Phys. Rev. **120**, 1951 (1960).
128. C. Hülsun, Proc. Phys. Soc. (London) **78**, 414 (1960).
129. R. G. Breckenridge, W. R. Hosler, Phys. Rev. **91**, 793 (1953).
130. H. P. R. Frederikse, J. Appl. Phys. Suppl. **32**, 2211 (1961).
- 130a. H. P. R. Frederikse, W. R. Hosler, J. H. Becker, Proc. Intern. Conf. Semicond. Phys., Prague, 1960, p. 868, Czech. Acad. Sci., Prague, 1961.
- 130b. B. H. Богомолов, В. П. Жузе, ФТТ **5**, 3285 (1963).
131. E. Fortin, F. L. Weichmann, Can. J. Phys. **44**, 155 (1966).
132. F. A. Kröger, F. A. Vink, J. Volger, Philips Res. Rept. **10**, 39 (1955).
133. H. J. Van Daal, C. Greebe, W. F. Knippenberg, H. J. Vink, J. Appl. Phys. **32**, 2225 (1961).
134. O. N. Tufte, P. W. Chapman, Phys. Rev. **155**, 796 (1967).
- 134a. H. P. R. Frederikse, W. R. Hosler, Phys. Rev. **161**, 822 (1967).
135. T. Masumi, Phys. Rev. **129**, 2564 (1963).
- 135a. F. Nakazawa, H. Kanzaki, J. Phys. Soc. Japan **20**, 468 (1965).
136. M. Mikkor, F. C. Brown, Phys. Rev. **162**, 841 (1967).
137. C. Herring, Phys. Rev. **96**, 1163 (1954).
138. R. N. Hall, J. R. Racette, H. Ehrenreich, Phys. Rev. Lett. **4**, 456 (1960); R. N. Hall, Proc. Intern. Conf. Semicond. Phys. Prague, 1960, p. 193, Czech. Acad. Sci., Prague, 1961.
139. Л. В. Келдыш, Ю. В. Конаев, ФТТ **5**, 1411 (1963).
140. G. B. Mahan, C. B. Duke, Phys. Rev. **149**, 705 (1966).
141. W. S. Baer, Phys. Rev. **144**, 734 (1966).
- 141a. S. Visvanathan, Phys. Rev. **120**, 376 (1960); **120**, 379 (1960).
- 141b. В. Л. Гуревич, И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов ФТТ **4**, 1252 (1962).
- 141в. R. Newman, Phys. Rev. **111**, 1518 (1958).
- 141г. W. G. Spitzer, J. M. Whelan, Phys. Rev. **114**, 59 (1959).
- 141д. D. G. Thomas, Phys. Chem. Solids **10**, 47 (1959).
- 141e. S. H. Wemple, Phys. Rev. **137**, A1575 (1965).
142. E. J. Johnson, D. M. Larsen, Phys. Rev. Lett. **16**, 655 (1966); Proc. Intern. Conf. Semicond. Phys., 1966, p. 443; Phys. Soc. Japan, Kyoto, 1966.
143. D. M. Larsen, Phys. Rev. **135**, A419 (1964).
- 143a. R. M. White, C. S. Koonce, Phys. Rev. Lett. **17**, 436 (1966).
- 143b. D. H. Dickey, E. J. Johnson, D. M. Larsen, Phys. Rev. Lett. **18**, 599 (1967).
144. L. P. Howland, Phys. Rev. **109**, 1927 (1958).
145. L. G. Parratt, E. L. Jossem, Phys. Rev. **97**, 916 (1955).
146. S. J. Nettel, Phys. Rev. **121**, 425 (1961).
147. G. L. Sewell, Phil. Mag. **3**, 1361 (1958).
148. P. O. Löwdin, Advan. Phys. **5**, 1 (1956).
149. F. Seitz, The Modern Theory of Solids, p. 470, McGraw-Hill, N. Y., 1940 (см. перевод, Ф. Зейтц, Современная теория твердого тела, Гостехиздат, 1949).
150. J. H. Van Vleck, J. Chem. Phys. **3**, 803 (1935); **3**, 807 (1935).
151. K. Huang, A. Rhys, Proc. Roy. Soc. **A204**, 406 (1950).
152. A. H. Wilson, The Theory of Metals, 1950, p. 251, Cambridge Univ. Press, London and N. Y., 1953 (см. перевод, А. Вильсон, Квантовая теория металлов, Гостехиздат, 1941).
153. М. И. Клингер, ДАН СССР **142**, 1065 (1962).
154. М. И. Клингер, Physics of Semiconductors (A. Stickland, ed.), p. 205, Phys. Soc., London, 1962.
155. М. И. Клингер, ФТТ **4**, 3075 (1962).
156. М. И. Клингер, ФТТ **4**, 3086 (1962).
157. И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ **43**, 1843 (1962).

158. И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов, ФТТ 5, 2799 (1963).
159. Е. К. Кудинков, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ 49, 867 (1965).
160. Э. Л. Нагаев, ФТТ 4, 2201 (1962); Р. Р. Догонадзе, Ю. А. Чизматжиев, ФТТ 3, 3712 (1961); Р. Р. Догонадзе, А. А. Черненко, Ю. А. Чизматжиев, ФТТ 3, 3720 (1961).
161. L. Friedman, T. Holstein, Ann. Phys. (N. Y.) 21, 494 (1963).
- 161a. T. Holstein, L. Friedman, Phys. Rev. 165, 1019 (1968).
162. J. Schnakenberg, Z. Physik 185, 123 (1965).
163. Ю. А. Фирсов, ФТТ 5, 2149 (1963).
164. М. И. Клингер, Phys. Status Solidi 2, 1062 (1962).
- 164a. М. И. Клингер, Phys. Status Solidi 11, 499 (1965).
165. J. Schnakenberg, Z. Physik 190, 209 (1966).
166. H. Fröhlich, S. Machlup, T. K. Mitra, Physik Kondensierten Materie 1, 359 (1963).
167. A. Messiah, Quantum Mechanics, v. II, p. 732, Wiley, N. Y., 1962.
168. H. G. Reik, Phys. Lett. 5, 236 (1963).
169. L. Friedman, Phys. Rev. 135, A233 (1964).
170. R. Peierls, Quantum Theory of Solids, p. 124, Oxford Univ. Press (Clarendon). Lnd. — N. Y., 1954 (см. перевод, Р. Пайерлс, Квантовая теория твердых тел, ИЛ, 1956).
171. М. С. Wang, G. E. Ulenbeck, Rev. Mod. Phys. 17, 323 (1945).
- 171a. J. Bardeen, W. Shockley, Phys. Rev. 80, 69 (1950).
172. H. Fröhlich, G. L. Sewell, Proc. Phys. Soc. (London) 74, 643 (1959).
173. C. Zener, in «Imperfections in Nearly Perfect Crystals» (W. Shockley, ed.), p. 289, Wiley, N. Y., 1952.
174. C. Zener, Proc. Roy. Soc. A137, 796 (1932).
175. C. Herring, Proc. Intern. Conf. Semicond. Phys., Prague, 1960, p. 60, Czech. Acad. Sci., Prague, 1961.
176. W. Haubenreisser, Phys. Status Solidi 1, 619 (1961).
177. W. Haubenreisser, Ph. D. Dissertation, Universität Jena (1960).
178. C. Zener, Phys. Rev. 82, 403 (1951).
179. R. Heikes, in «Transition Metal Compounds» (E. R. Schatz, ed.), p. 1, Gordon & Breach, N. Y., 1964.
180. J. Appel, Phys. Rev. 141, 506 (1966).
181. L. van Hove, Phys. Rev. 95, 1374 (1954).
182. P. G. de Gennes, Phys. Rev. 118, 141 (1960).
183. L. van Hove, Physica 21, 901 (1955).
184. О. В. Константинов, В. И. Перель, ЖЭТФ 39, 197 (1960).
185. T. Holstein, Ann. Phys. (N. Y.) 29, 410 (1964).
186. P. M. Morse, H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics, Part I, p. 437, McGraw-Hill, N. Y., 1953 (см. перевод, Ф. М. Морс, Г. Фешбах, Методы теоретической физики, ИЛ, 1958).
187. A. C. Beer, Galvanomagnetic Effects in Semiconductors, Solid State Phys. Suppl. 4, 54 (1963).
188. J. Appel, Z. Naturforsch. 9a, 167 (1954).
189. R. Peierls, Z. Physik 80, 763 (1933).
190. L. Friedman, Phys. Rev. 131, 2445 (1963).
191. H. G. Reik, Solid State Commun. 1, 67 (1963).
192. H. G. Reik, D. Heese, J. Phys. Chem. Solids 28, 581 (1967).
193. М. И. Клингер, Phys. Lett. 7, 102 (1963).
194. Г. М. Генкин, ФТТ 6, 1608 (1964).
195. P. Brauer, Z. Naturforsch. 6a, 255 (1951).
196. P. Brauer, Semiconductors and Phosphors (M. Schön, H. Welker, eds.), p. 63, Wiley (Interscience), N. Y., 1958.
197. H. Fröhlich, Theory of Dielectrics, p. 98, Oxford Univ. Press, Lnd. and N. Y., 1949 (см. перевод, Г. Фрелих, Теория диэлектриков, ИЛ, 1960).
198. G. L. Sewell, Phys. Rev. 129, 597 (1963).
199. M. Pollak, T. H. Geballe, Phys. Rev. 122, 1742 (1961).
200. D. M. Eagles, Phys. Rev. 130, 1381 (1963); 145, 645 (1966).
201. L. Onsager, Phys. Rev. 37, 405 (1931); 38, 2265 (1931),

202. *R. Kubo, M. Yokota, S. Nakajima, J. Phys. Soc. Japan, 12, 1203 (1957).*
203. *O. Madelung, Z. Naturforsch. 13a, 22 (1958).*
204. *J. Appel, Phil. Mag. 6, 167 (1961).*
205. *K. Schotte, Z. Physik 196, 393 (1966).*
206. *M. Tsuji, J. Phys. Soc. Japan 14, 1640 (1959).*
207. *M. H. Chadda, A. P. B. Sinha, Indian J. Pure Appl. Phys. 1, 161 (1963).*
208. *C. J. Delbecq, B. Smaller, P. H. Yuster, Phys. Rev. 111, 1235 (1958).*
209. *W. Kanzig, Proc. Intern. Conf. Semicond. Phys., Prague, 1960, p. 705, Czech. Acad. Sci., Prague, 1961.*
210. *D. P. Snowden, H. Saltsburg, Phys. Rev. Lett. 14, 497 (1965).*
211. *S. van Houten, A. J. Bosman in «Transition Metal Compounds» (E. K. Schatz, ed.), p. 123, Gordon & Breach, N. Y., 1964.*
212. *H. G. Reik, R. Mühlstroh, Solid State Commun. 5, 105 (1967).*
213. *R. Mühlstroh, H. G. Reik, Phys. Rev. 162, 703 (1967).*
214. *P. Gerthsen, R. Groth, K. H. Hårdtl, D. Heese, H. G. Reik, Solid State Commun. 3, 165 (1965).*
215. *H. G. Reik, E. Kauer, P. Gerthsen, Phys. Lett. 8, 29 (1964).*
216. *P. Gerthsen, R. Groth, K. H. Hårdtl, Phys. Status Solidi 11, 303 (1965).*
217. *F. J. Morin, Phys. Rev. 83, 1005 (1951); 93, 1195 (1954); 93, 1199 (1954); Bell System Tech. J. 37, 1047 (1958).*
218. *R. R. Heikes, W. D. Johnston, J. Chem. Phys. 26, 582 (1957).*
219. *C. P. Slichter, Principles of Magnetic Resonance, p. 177, Harper, N. Y., 1963.*
220. *J. A. Ghormley, H. A. Levy, J. Phys. Chem. 56, 548 (1952).*
221. *C. J. Delbecq, P. Pringsheim, P. H. Yuster, Z. Physik 138, 1266 (1954).*
222. *S. J. Nettel, in «Polarons and Excitons» (C. G. Kuper, G. D. Whitfields, eds.), p. 245, Plenum Press, N. Y., 1962.*
223. *J. G. de Boer, E. J. W. Verwey, Proc. Phys. Soc. (London) B49, 59 (1937).*
224. *G. H. Jonker, S. van Houten, «Halbleiter Probleme» (F. Sauter ed.) v. 6, p. 118, Vieweg, Braunschweig, 1961.*
225. *N. F. Mott, Nuovo Cimento Suppl. 7, 318 (1958).*
226. *W. Kohn, Phys. Rev. 133, A171 (1964).*
227. *J. Hubbard, in «Transition Metal Compounds» (E. R. Schatz ed.), p. 99, Gordon & Breach, N. Y., 1964.*
228. *J. B. Goodenough, там же, p. 65.*
229. *P. W. Anderson, Solid State Phys. 14, 99 (1963).*
230. *P. W. Anderson, Phys. Rev. 115, 2 (1959).*
231. *F. J. Morin, Phys. Rev. Lett. 3, 34 (1959).*
232. *D. Adler, J. Feinlieb, Phys. Rev. Lett. 12, 700 (1964).*
233. *E. J. W. Verwey, P. W. Haaijman, F. C. Roweljn, G. W. van Oosterhout, Philips Res. Rept. 5, 173 (1950).*
234. *K. Hauffe, Reaktionen in und an festen Stoffen, Springer Berlin, 1955.*
235. *J. Rudolph, Z. Naturforsch. 13a, 757 (1958); 14a, 727 (1959).*
236. *F. A. Kröger, H. J. Vink, J. Phys. Chem. Solids 5, 208 (1958).*
237. *F. A. Kröger, H. J. Vink in «Halbleiter Probleme» (W. Schottky ed.), v. 1, p. 128, Vieweg, Braunschweig, 1954.*
238. *W. Schottky, там же, v. 4, p. 118, 1958.*
239. *C. G. Koops, Phys. Rev. 83, 121 (1951).*
240. *W. Heywang, Z. Angew. Phys. 16, 1 (1963).*
241. *P. Gerthsen, K. H. Hårdtl, Z. Naturforsch. 18a, 423 (1963).*
242. *G. H. Jonker, Solid State Electron. 7, 895 (1964).*
243. *R. E. Cech, E. I. Alessandrini, Trans. Am. Soc. Metals 51, 151 (1959).*
244. *A. V. L. Verneuil, U. S. Patent 1,004,505 (1911).*
245. *R. Newman, R. M. Chrenko, Phys. Rev. 114, 1507 (1959).*
246. *K. V. Rao, A. Smakula, J. Appl. Phys. 36, 2031 (1965).*
247. *A. J. Bosman, S. van Houten, Proc. 7th Intern. Conf. Phys. Semicond., Paris, 1964, p. 1203, Academic Press, N. Y., 1964.*
248. *R. G. Miller, R. R. Heikes, J. Chem. Phys. 28, 348 (1958).*
249. *S. van Houten, J. Phys. Chem. Solids 23, 1045 (1962).*

250. R. R. Heikes, A. A. Maradudin, R. C. Miller, Ann. Phys. (Paris) 8, 733 (1963).
251. S. van Houten, Phys. Chem. Solids 17, 7 (1960).
252. S. P. Mitoff, J. Chem. Phys. 35, 882 (1961).
253. S. Koide, J. Phys. Soc. Japan 20, 123 (1965).
254. M. Nachman, L. N. Cofocaru, L. V. Rybko, Phys. Status Solidi 8, 733 (1965).
255. M. Nachman, F. G. Popescu, J. Rutter, Phys. Status Solidi 10, 519 (1965).
256. G. Parravano, J. Chem. Phys. 23, 5 (1954).
257. В. П. Жузе, И. А. Шельх, ФТТ 5, 1756 (1963).
258. Ксендзов, Л. Н. Ансельм, Л. Л. Васильева, В. М. Латышева, ФТТ 5, 1537 (1963).
259. M. Roilos, P. Nagels, Solid State Commun. 2, 285 (1964).
260. A. J. Bosman, H. J. van Daal, G. F. Knuvers, Phys. Lett. 10, 372 (1965).
261. A. J. Bosman, C. Crevecoeur, Phys. Rev. 144, 763 (1966).
262. H. J. van Daal, A. J. Bosman, Phys. Rev. 158, 736 (1967).
263. I. G. Austin, A. J. Springthorpe, B. A. Smith, Phys. Lett. 21, 20 (1966).
264. J. Yamashita, in «Transition Metal Compounds» (E. R. Schatz ed.), p. 163, Gordon & Breach, N. Y., 1964.
265. A. C. Switendick, Quart. Progr. Rept., No. 49, p. 41. Solid State and Molecular Theory Group, M. I. T. Cambridge, Massachusetts, 1963.
266. J. C. Slater, Phys. Rev. 51, 846 (1937).
267. E. J. W. Verwey, P. B. Braun, E. W. Gorter, F. C. Romeijn, J. H. van Santen, Z. Physik Chem. (Leipzig) 198, 6 (1951); J. M. Lavine, Phys. Rev. 114, 482 (1959); P. A. Miles, W. B. Westphal, A. van Hippel, Rev. Mod. Phys. 29, 279 (1957).
268. B. Fisher, D. S. Tannhauser, J. Chem. Phys. 44, 1663 (1966).
269. G. H. Jonker, Phys. Chem. Phys. 9, 165 (1959).
270. G. H. Jonker, Physica 20, 1118 (1954).
271. J. H. van Santen, G. H. Jonker, Physica 16, 599 (1950).
272. J. Volger, Physica 20, 49 (1954).
273. P. Gerthsen, K. H. Härdtl, Z. Naturforsch. 17a, 514 (1962).
274. H. P. R. Frederikse, W. R. Thurber, W. R. Hosler, Phys. Rev. 134, A442 (1964).

ЛИТЕРАТУРА, ДОБАВЛЕННАЯ РЕДАКТОРОМ В ПРИМЕЧАНИЯХ К I ЧАСТИ

- 1*. В. Н. Богомолов, Е. К. Кудинов, Д. Н. Мирлин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 9, 2077 (1967).
- 2*. I. G. Austin, N. F. Mott, Adv. Phys. 18, 41 (1969).
- 3*. М. Борн, Х. Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, 1958.
- 4*. D. M. Eagles, Phys. Rev. 145, 645 (1966).
- 5*. Е. Ф. Гросс, С. А. Пермогоров, В. В. Травников, А. В. Селькин, J. Phys. Chem. Solids 31, 2595 (1970).
- 6*. A. L. Mears, R. A. Stradling, E. K. Inall, J. Phys. C. 1, 821 (1968).
- 7*. Л. И. Коровин, С. Т. Павлов, Письма в ЖЭТФ 6, 525 (1967); ЖЭТФ 53, 1708 (1967).
- 7*а. Л. И. Коровин, С. Т. Павлов, Письма в ЖЭТФ 6, 970 (1967).
- 7*б. Л. И. Коровин, С. Т. Павлов, ЖЭТФ 55, 349 (1968).
- 7*в. Л. И. Коровин, ФТТ 12, 945 (1970).
- 7*г. Л. И. Коровин, ФТТ 13, 332 (1971).
- 7*д. К. Л. Ngai, E. J. Johnson, Phys. Rev. Lett. 29, 1606 (1972).
- 7*е. В. И. Иванов-Омский, Е. М. Шерегай, ФТТ 16, 238 (1974).
- 7*ж. И. Глязов, Л. И. Коровин, ФТТ 16, 2693 (1974).
- 7*з. В. И. Голубев, В. И. Иванов-Омский, Е. М. Шерегай, ФТТ 17, 152 (1975).
- 8*. И. Б. Левинсон, Письма в ЖЭТФ 42, 496 (1970).
- 9*. И. Б. Левинсон, А. Б. Матулис, Л. М. Щербаков, ЖЭТФ 61, 843 (1971).

- 10*. Б. И. Каплан, И. Б. Левинсон, ФТТ 14, 1412 (1972).
 11*. Б. И. Каплан, И. Б. Левинсон, ФТТ 14, 1663 (1972).
 12*. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 10, 2600 (1968).
 12*а. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 11, 537 (1969), депов. ВИНИТИ № 269-68, 24 (1969).
 13*. H. G. Reik, Phys. Lett. 8, 24 (1964).
 14*. И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ 45, 378 (1963).
 15*. Е. К. Кудинов, Ю. А. Фирсов, ФТТ 8, 666 (1966).
 16*. И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов, ФТТ 9, 3422 (1967).
 17*. И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ 54, 826 (1968).
 18*. Е. К. Кудинов, Ю. А. Фирсов, ФТТ 7, 546 (1965).
 19*. Ю. А. Фирсов, ФТТ 10, 3027, 1968.
 20*. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 16 (3), 811, 1937 (1974), ФТТ 16 (3), 1941 (1974).
 21*. Е. К. Кудинов, Д. И. Мирлин, Ю. А. Фирсов ФТТ 11, 2789 (1969).
 22*. D. M. Eagles, in «Polarons and Excitons», Scottish Universities, Summer School 1962, p. 255, Edinburgh and London, 1963.
 23*. Ю. А. Фирсов, ФТТ 10, 1950 (1968).
 24*. Е. К. Кудинов, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ 47, 601 (1964).
 25*. А. Л. Эфрос, ФТТ 9, 1152 (1967).
 26*. В. Н. Богомолов, Е. К. Кудинов, Ю. А. Фирсов, ФТТ 9, 3175 (1967).
 27*. D. Adler, H. Brooks, Phys. Rev. 155, 826 (1967).
 28*. А. Г. Аронов, Е. К. Кудинов, ЖЭТФ 55, 1344 (1968).
 29*. Г. Е. Воловик, В. М. Эдельштейн, ЖЭТФ 65, 1947 (1973).
 30*. E. Kartheuser, P. Eorard, J. Devreese, Phys. Rev. Lett. 22 (3), 94 (1969); Sol. State Comm. 7, 767 (1969); J. Devreese, A. B. Kunz, T. C. Collins, Sol. State Comm. 11 (5), 673 (1972).
 31*. W. E. Spear, Adv. Phys. 23, № 3, 523 (1974).
 32*. И. Г. Ланг, Кандидатская диссертация, Ленинград, 1964.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

Теория поляронов большого радиуса

1. С. И. Пекар, Исследования по электронной теории кристаллов, Гостехиздат, 1951.
2. С. В. Тябликов, ЖЭТФ 21, 17 (1951). К теории взаимодействия частицы с квантовым ролею.
3. С. В. Тябликов, ДАН 81, 31 (1951). Возбужденные состояния частицы в поле.
4. С. И. Пекар, Об электронных полупроводниках металлического типа. в сб. посв. С. М. Вавилову, Изд-во АН СССР, 1952.
5. С. И. Пекар, ЖЭТФ 27, 651 (1954). О расчете поляронов прямыми вариационными методами.
6. В. М. Буймистров, С. И. Пекар, ЖЭТФ 33, 1271 (1957). Квантовые состояния частиц, взаимодействующих с гармонически колеблющимся континуумом при произвольной силе связи II. (Случай трансляционной симметрии).
7. С. И. Пекар, В. М. Буймистров, ЖТФ 27, 2667 (1957). Теория поляронов при произвольной силе связи между электроном и оптическими колебаниями решетки.
8. М. Ш. Гитерман, К. В. Толпыго, ЖЭТФ 32, 874 (1957). Зонная структура энергетического спектра полярона большого радиуса.
9. М. Ф. Дейген, С. И. Пекар, ЖЭТФ 34, 684 (1968). Сверхтонкое взаимодействие и спин-электронный резонанс в поляронах и экситонах.
10. В. А. Москаленко, ЖЭТФ 34, 346 (1958). К теории теплового возбуждения полярона.
11. А. В. Тулуб, ЖЭТФ 41, 1828 (1961). Медленные электроны в полярных кристаллах.
12. С. В. Тябликов, ФТТ 3, 3445 (1961). Метод функций Грина в теории адиабатического приближения.

13. В. Л. Винецкий, ЖЭТФ 40, № 5, 1459 (1961). О биполярных состояниях носителей тока в ионных кристаллах.
14. F. Garcia-Moliner, Phys. Rev. 130, 2290 (1963). Проводимость в магнитном поле и поляронное рассеяние в слабо ионных кристаллах.
15. D. C. Langreth, Phys. Rev. 137A, 760 (1965). Подвижность поляронов в приближении Ли — Лоу — Пайнса.
16. G. D. Mahan, Phys. Rev. 142, 366 (1966). Подвижность поляронов.
17. A. Weijland, Physica 32, 625 (1966). Дрейфовая подвижность поляронов большого радиуса при промежуточной связи.
18. J. Devreese, R. Evrard, Phys. Lett. 23, 196 (1966). О фейнмановских поляронах.
19. Y. Osaka, J. Phys. Soc. Japan 21, 423 (1966). Подвижность поляронов при конечных температурах в пределе слабой связи.
20. С. И. Пекар, ЖЭТФ 55, 1997 (1968). Теория поляронов в многодолинных кристаллах. I. Слабое взаимодействие электрона с поляризационными колебаниями.
21. H. Arnold, H. Kahn, Phys. Rev. 172, 813 (1968). Поляроны в случае анизотропных энергетических зон.
22. D. M. Larsen, Phys. Rev. 174, 1041 (1968). Эффективная масса поляронов в случае промежуточной связи.
23. S. L. Trubatch, Phys. Rev. 174, 1555 (1968). Разрешение проблемы убегания для поляронов.
24. D. M. Larsen, Phys. Rev. 180, 919 (1969). Теория эффективной массы для поляронов во внешних полях.
25. E. Kartheuser, R. Evrard, J. Devreese, Phys. Rev. Lett. 22, 94 (1969). Механизм поглощения света свободными континуальными поляронами.
26. В. И. Мельников, Э. И. Раиба, Письма в ЖЭТФ 10, 95, 359 (1969). Связанные состояния полярона и фонона.
27. D. M. Eagles, Phys. Rev. 181, 1278 (1969). Теория переходов из состояний, отвечающих поляронам большого радиуса, в состояния, отвечающие поляронам малого радиуса, в случае сверхпроводящего SrTiO_3 допированного Zr.
28. Э. Л. Нагаев, ЖЭТФ 57, 469 (1969). Экситонные поляроны и плазмонно-экситонные волны.
29. K. K. Thornber, R. P. Feynman, Phys. Rev. 1B, № 10, 4099 (1970). Скорость, приобретаемая электроном в полярном кристалле в присутствии электрического поля.
30. M. Inoue, C. K. Mahutte, S. Wang, Phys. Rev. 2B, № 2, 539 (1970). Электронные поляроны в щелочногалогенидных кристаллах.
31. J. T. Marshall, M. S. Chawla, Phys. Rev. 2B, № 10, 4283 (1970). Вычисление поляронных эффективных масс с помощью фейнмановского метода интегрирования по путям.
32. J. T. Marshall, B. V. Stewart, Phys. Rev. 2B, № 10, 4001 (1970). Поляронная масса. I. Свободный полярон.
33. H. Hermanson, Phys. Rev. 2B, 5043 (1970). Экситон-фононное зонное состояние и вибронные спектры в твердых телах.
34. Е. П. Покатилов, А. А. Кисканов, ФТП 4, 766 (1970). Оптический полярон в магнитном поле.
35. K. K. Thornber, Phys. Rev. 3B, № 6, 1929 (1971). Линейный и нелинейный электронный перенос в электрон-фононных системах. Самосогласованное приближение в методе интегрирования по траекториям.
36. Ping Sheng, J. D. Dow, Phys. Rev. 4B, № 4, 1343 (1971). Теория промежуточной связи: применение аппроксимант Паде.
37. D. Juretic, Phys. Stat. Sol. 47, № 1, K49 (1971). Диаграммный метод для определения энергии основного состояния полярона.
38. R. Abe, K. Okamoto, J. Phys. Soc. Japan 31, № 5, 1337 (1971); 33, № 2, 343 (1972). Улучшенное выражение для действия в фейнмановской теории поляронов. I, II.
39. J. Devreese, W. Haybrecht, L. Lemmens, Phys. Stat. Sol. 48, № 1, 77 (1971). Оптическое поглощение свободными поляронами при слабой связи.

40. Г. М. Шмелев, ФТТ 13, № 12, 3664 (1971). Оптический полярон в сильном электрическом поле.
41. А. А. Кисканов, Е. П. Покатилов, ЖЭТФ 66, № 1, 312, 1976 (1971). Теория электропроводности поляронов в магнитном поле.
42. Г. М. Шмелев, Р. Д. Зильберман, ФТТ 13, 3410 (1971). Рассеяние медленных поляронов F -центрами.
43. R. von Baltz, Phys. Stat. Sol. (b) 50, № 1, 271 (1972). Метод функций Грина для определения зависимости энергии полярона от его импульса.
44. E. Kartheuser, R. Euvard, Sol. St. Comm. 10, № 1, 15 (1972). Стабилизация в магнитном поле внутренних возбужденных состояний полярона.
45. H. B. Shore, L. M. Sander, Phys. Rev. 7B, № 10, 4537 (1973).
46. К. К. Bajaj, T. D. Clark, Phys. Stat. Sol. 52, № 1, 195 (1972). Энергетический спектр связанного полярона.
47. С. И. Пекар, В. И. Шека, Г. В. Дмитриенко, ЖЭТФ 63, 1956 (1972). Теория поляронов в многодолинных полупроводниках. II. Сильное взаимодействие электрона с поляризационными колебаниями решетки.
48. Т. М. Wu, K. J. Yang, Phys. Rev. Lett. 29, № 6, 364 (1972). Соотношение между энергией и импульсом оптического полярона в случае слабой связи.
49. J. T. Devreese, A. B. Kunz, T. C. Collins, Sol. St. Comm. 11, № 5, 673 (1972). Резонансы в оптическом поглощении в щелочногалогидных кристаллах, обусловленные электронными поляронами.
50. J. Devreese, J. de Sitter, M. Goovaerts, Phys. Rev. 5B, № 6, 2367 (1972). Оптическое поглощение поляронами в приближении Фейнмана — Холлварта — Иддингса — Платцмана.
51. Antwerp. Advances Study Institute 1971 on Fröhlich Polarons and Electron-Phonon Interaction in Polar Semiconductors. Amsterdam, Netherlands: North-Holland (1972). Обзор основных достижений по теории континуальных поляронов с 1962 г. по 1971 г.
52. M. J. Goovaerts, J. M. de Sitter, J. T. Devreese, Phys. Rev. 7B, № 6, 2639 (1973). Численные расчеты двухфононных пиков в оптическом поглощении свободными поляронами в пределе сильной связи.
53. W. Haubrecht, J. M. de Sitter, J. T. Devreese, Sol. St. Comm. 13, № 2, 163 (1973). Температурная зависимость оптического поглощения, обусловленного свободными поляронами.
54. С. М. Пекар, Л. С. Хазан, В. И. Шека, ЖЭТФ 65, № 5, 1999 (1973). Теория поляронов в многодолинных кристаллах. III. Произвольная сила связи электрона с поляризационными колебаниями решетки.
55. T. D. Clark, K. K. Bajaj, Phys. Stat. Sol. (b) 56, № 1, 211 (1973). Вариационные расчеты энергетического спектра связанного полярона.
56. R. A. Bari, Phys. Rev. Lett. 30, № 17, 790 (1973). Экситонные поляроны в молекулярных кристаллах.
57. E. D. Kartheuser, P. Negrete, Phys. Stat. Sol. (b) 57, № 1, 77 (1973). Влияние магнитного поля на электрон-фононные корреляционные эффекты в полярных кристаллах.
58. L. F. Lemmens, J. T. Devreese, Sol. St. Comm. 12, № 10, 1067 (1973). Теорема 1 : 2 : 3 : 4 и основное состояние свободных поляронов.
59. J. M. Vail, Phys. Rev. 7B, № 12, 5359 (1973). Улучшенная формулировка теории, позволяющая учесть некоторые фононные эффекты при анализе электронных дефектов и поляронов в ионных кристаллах.

Теория пьезополяронов

1. Е. П. Покатилов, ФТТ 6, № 9, 2809 (1964). Локальные и поляронные состояния электронов в пьезокристалле.
2. Е. П. Покатилов, ФТТ 7, 2476 (1965). О влиянии пьезополяронного эффекта на энергию основного состояния, эффективную массу носителя тока и спектр примесного поглощения.
3. D. M. Larsen, Phys. Rev. 142, № 2, 428 (1966). Циклотронный резонанс на пьезополяронах.

4. S. I. Miyake, Phys. Rev. **170**, № 3, 726 (1968). Циклотронный резонанс на пьезополяронах в квантовом пределе.
5. G. Whitfield, I. Gersiner, K. Tharmalingam, Phys. Rev. **165**, № 3, 993 (1968). Движение пьезополярона при нулевой температуре.
6. А. А. Клюканов, Е. П. Показилов, ФТТ **11**, 766 (1969). Энергия и эффективная масса пьезополярона.
7. M. Engineer, G. Whitfield, Phys. Rev. **179**, № 3, 869 (1969). Пьезополяроны в случае сильной связи.
8. А. А. Клюканов, Е. П. Показилов, Phys. Stat. Sol. **39**, 277 (1970). Термодинамические функции пьезополяронов в постоянном магнитном поле и циклотронный резонанс.
9. G. Whitfield, P. M. Platzman, Phys. Rev. **6B**, 3987 (1972). Сильная и слабая связь для пьезополяронов (содержится обзор предшествующих работ по пьезополярону).
10. В. М. Эдельштейн, ЖЭТФ **63**, № 4, 1525 (1972). К теории пьезополярона.
11. M. Rona, G. Whitfield, Phys. Rev. **B7**, 2727 (1973). Связь между энергией и импульсом для пьезополярона.
12. Г. Е. Воловик, В. М. Эдельштейн, ЖЭТФ **65**, № 5, 1947 (1973). Подвижность пьезополярона при сильной связи.
13. M. Engineer, G. Whitfield, J. Phys. Soc. Japan **34**, № 2, 564 (1973). Подвижность пьезополярона при сильной связи.
14. К. К. Bajaj, Sol. St. Comm. **12**, № 11, 1197 (1973). Энергия основного состояния для связанного пьезополярона.
15. Г. Е. Воловик, В. М. Эдельштейн, ЖЭТФ **67**, № 1, 273 (1974). Энергия пьезополярона при больших импульсах.

Теория конденсонов

1. М. Ф. Дейген, С. И. Пекар, ЖЭТФ **21**, 803 (1951). О состоянии электрона проводимости в идеальном гомеоплярном кристалле.
2. Y. Toyazawa, Progr. Theor. Phys. **26**, 29 (1961). Автолокализация электрона, обусловленная взаимодействием с акустическими фононами.
3. Л. С. Кукушкин, ЖЭТФ **57**, 1224 (1969). Электрон-фононные состояния в гомеоплярных кристаллах, вызванные сильным магнитным полем.
4. К. С. Кабисов, Е. П. Показилов, УФЖ **17**, № 4, 671 (1972). Зависимость энергии и массы конденсонов и пьезополяронов от скорости их движения.
5. A. Sumi, J. Toyazawa, J. Phys. Soc. Japan, **35**, № 1, 137 (1973). Разрывы в основном полярном состоянии.

МАГНИТНЫЕ ПОЛЯРОНЫ

1. Э. Л. Нагаев, Письма в ЖЭТФ **6**, 484 (1967). Основное состояние и аномальный магнитный момент электронов проводимости в антиферромагнитном полупроводнике.
2. Л. Н. Булаевский, Э. Л. Нагаев, Д. И. Хомский, ЖЭТФ **54**, 1562 (1968). Новый тип автолокализованного состояния электрона проводимости в антиферромагнитном полупроводнике.
3. М. А. Кривоглаз, А. А. Трущенко, ФТТ **11**, № 11, 3119 (1968). Носители тока в ферромагнитных полупроводниках. Сильное взаимодействие.
4. Э. Л. Нагаев, ЖЭТФ **56**, 1013 (1969). Электроны, косвенный обмен и локализованные магноны в магнитоактивных полупроводниках.
5. Т. Касуца, Sol. St. Comm. **8**, № 19, 1551 (1970). Подвижность парамагнитного полярона большого радиуса.
6. Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев, ЖЭТФ **59**, № 2, 533 (1970). Магнитный полярон в ферромагнитном кристалле.
7. P. Richmond, J. Phys. **C3**, 2402 (1971). Электрон в ферромагнитном кристалле (магнитный полярон).
8. M. Umehara, T. Kasuya, J. Phys. Soc. Japan, **33**, № 3, 602 (1972). Теория автолокализованного антиферромагнитного полярона.

9. *Y. Yanase*, Int. J. Magn. 2, № 3, 99 (1972). Магнитные поляроны в парамагнитных полупроводниках.
10. *J. Kubler*, Zs. f. Phys. 250, № 4, 324 (1972). Теория автолокализованных спин-поляронов в парамагнетиках.
11. *D. T. Vigen*, J. Phys. C6, № 6, 967 (1973). Подвижность автолокализованных спин-поляронов в парамагнетиках.
12. *М. А. Кривоглаз*, Письма в ЖЭТФ 17, № 5, 188 (1973). О возможности существования автолокализованных состояний носителей тока в магнитных полупроводниках с узкими разрешенными зонами.
13. *М. А. Кривоглаз*, УФН 111, № 4, 617 (1973). Флуктуационные состояния электронов.

КО II ЧАСТИ

1. *Л. Д. Ландау*, Sow. Phys. 3, 664 (1933).
2. *С. И. Пекар*, Исследования по электронной теории кристаллов, Гостехиздат, 1951.
3. *R. P. Feynman*, Phys. Rev. 97, 660 (1955).
4. *С. В. Тябликов*, ЖЭТФ 21, 377 (1951).
5. *G. L. Sewell*, Phil. Mag. 36, 1361 (1958).
6. *T. Holstein*, Ann. Phys. 8, 325 (1959).
7. *T. G. Cartner, W. Känzig*, Journ. Phys. Chem. Sol. 3, 178 (1957).
8. *В. Н. Богомолов, Е. К. Кудинов, Ю. А. Фирсов*, ФТТ, 9, № 11, 3175 (1967).
9. *I. G. Austin, N. G. Mott*, Adv. Phys. 18, № 71, 41 (1969).
10. *H. G. Reik, R. Mühlstroh*, Sol. State Comm. 5, 105 (1967).
11. *D. M. Eagles*, Phys. Rev. 181, № 3, 1278 (1969).
12. *A. J. Bosman, H. J. van Daal*, Adv. Phys. 19, № 73, 1 (1970).
13. *P. W. Anderson*, Phys. Rev. 115, 2 (1959).
14. *C. Herring*, в сб. «Ferromagnetism» IV, ed. by T. Rado, H. Suhl, New York, 1966.
15. *N. F. Mott*, Rev. Mod. Phys. 40, № 4, 677 (1968).
16. *D. Adler*, Sol. State Phys. 21, 1 (1968).
17. *Ю. А. Фирсов*, Труды Зимней школы ФТИ в Луге, ФТИ-361, Ленинград, 1971.
18. *А. Ф. Иоффе*, Canad. Journ. Phys. 26, 582 (1957).
19. *R. Heikes, W. Johnston*, J. Chem. Phys. 26, 582 (1957).
20. *J. Yamashita, T. Kurosawa*, J. Phys. Chem. Sol. 5, 34 (1958).
21. *T. Holstein*, Ann. Phys. 8, 343 (1959).
22. *R. Kubo*, J. Phys. Soc. Japan 12, 570 (1957).
23. *О. В. Константинов, В. И. Перель*, ЖЭТФ 39, 197 (1960).
24. *О. В. Константинов, В. И. Перель*, ЖЭТФ 39, 861 (1960).
25. *В. Л. Гуревич, Ю. А. Фирсов*, ЖЭТФ 40 (№ 1), 199 (1961).
26. *В. Л. Фирсов, В. Л. Гуревич*, ЖЭТФ 41 (№ 2), 512 (1961).
27. *В. Л. Гуревич, Ю. А. Фирсов*, ЖЭТФ 41 (№ 4), 1151 (1961).
28. *L. van Hove*, Physica 21, 517, 901 (1955); 22, 343 (1956).
29. *L. van Hove, E. Verboven*, Physica 27, 418 (1961).
30. *A. Janner, L. Van Hove, E. Verboven*, Physica 28, 1341 (1962).
31. *И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов*, ЖЭТФ 43 (№ 5), 1843 (1962).
32. *И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов*, ЖЭТФ 45 (№ 2), 378 (1963); ФТТ 5 (№ 10), 2799 (1963).
33. *Ю. А. Фирсов*, ФТТ 5 (№ 8), 2149 (1963).
34. *L. Friedman*, Phys. Rev. 131, 2455 (1963).
35. *L. Friedman, T. Holstein*, Ann. Phys. 21, 494 (1963).
36. *М. И. Клиггер*, Phys. Stat. Sol. 11, 499 (1965); 12, 765 (1965).
37. *D. M. Eagles*, p. 255, in «Polarons and Excitons», ed. by C. G. Kuper, G. D. Whitefield; Scottish Universities Summer School 1962; Edingburgh and London (1963).
38. *D. M. Eagles*, Phys. Rev. 130, 1381 (1963).
39. *H. G. Reik*, Sol. State Comm. 1, 67 (1963).

40. М. И. Клинггер, Phys. Lett. 7, 102 (1963).
41. D. M. Eagles, J. Phys. Chem. Sol. 25, 1243 (1964).
- 42а. Я. М. Ксендзов, Изв. АН СССР, сер. физ. 35, 1178 (1971).
42. Е. К. Кудинов, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ 47, 601 (1964).
43. Е. К. Кудинов, Ю. А. Фирсов, ФТТ 7, 546 (1965).
44. Е. К. Кудинов, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ 49, 867 (1965).
45. Е. К. Кудинов, Ю. А. Фирсов, ФТТ 8, 666 (1966).
46. И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов, ФТТ 9, 3422 (1967).
47. И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ 54, 826 (1968); И. Г. Ланг ФТТ 10, 3281 (1968).
48. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 10, 2600 (1968).
49. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 10, 1364 (1968).
50. В. Н. Богомолов, Е. К. Кудинов, Д. Н. Мирлин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 9, 2077 (1967).
51. Ю. А. Фирсов, ФТТ 10, № 7, 1950 (1968).
52. Е. К. Кудинов, Д. Н. Мирлин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 11, № 10, 2789 (1969).
53. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, Proc. Xth Intern. Conf. on the Physics of Semiconductors; стр. 767 (1970).
54. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 13, № 11, 3246 (1971); 14, 1857 (1972).
55. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ 61, № 6, 2373 (1971).
56. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 14, 3599 (1972).
57. Ю. А. Фирсов, ФТТ 10, № 10, 3027 (1968).
58. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 12, № 2, 627 (1970).
59. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 14, № 2, 463 (1972).
60. D. Emin, T. Holstein, Ann. Phys. 53, 439 (1969).
61. D. Emin, Ann. Phys. 64(2), 336 (1971).
62. G. H. Wannier, Phys. Rev. 52, 191 (1937).
63. E. I. Blount, Sol. State Phys. 13, 305 (1962).
64. L. Friedlan, Phys. Rev. 135A, 233 (1964).
65. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, Деп. ВИНТИ, № 269—68 (1968); ФТТ 11, 537 (1969).
66. М. И. Клинггер, Rep. Progr. Phys. 31, 225 (1968).
67. D. Emin, Phys. Rev. Lett. 25, 1751 (1970); Phys. Rev. 3B, 1321 (1971); Phys. Rev. 4B (10), 3639 (1971).
68. В. Феллер, Введение в теорию вероятностей и ее приложения, ИЛ, 1952.
69. С. Чандрасекар, Стохастические проблемы в физике и астрономии, ИЛ, 1947.
70. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, Высшие трансцендентные функции, «Наука», М., 1966.
71. J. E. Moual, Proc. Cambr. Phil. Soc. 45, 99 (1949).
72. В. В. Брыксин, ФТТ 14, 2902 (1972).
73. Ю. Швингер, Броуновское движение квантового осциллятора, ИЛ, 1962.
74. M. Toda, J. Phys. Soc. Japan 13, № 11, 1266 (1952); 14, № 6, 722 (1959).
75. T. Kotera, M. Toda, J. Phys. Soc. Japan 14, № 11, 1475 (1959).
76. J. McKenna, H. L. Frisch, Phys. Rev. 145, № 1, 93 (1966).
77. H. G. Reik, Phys. Lett. 5, 236 (1963); 8, 29 (1964).
78. J. Schnakenberg, Z. für Physik 185, 123 (1965); 190, 209 (1965).
79. В. В. Брыксин, ФТТ 14, 802 (1972).
80. S. Doniach, Proc. Phys. Soc. 73, 849 (1959).
81. Ю. А. Фирсов, В. Л. Гуревич, ЖЭТФ 41, 512 (1961).
82. В. Л. Гуревич, А. И. Ларкин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 4, 185 (1962).
83. В. В. Varga, Phys. Rev. 137A, 1896 (1965).
84. D. M. Eagles, Phys. Rev. 145, 645 (1966).
85. Э. И. Раиба, ЖЭТФ 50, 1064 (1966).
86. М. Борн, Х. Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, 1952.
87. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ 17, 1017, 1076 (1947).
88. А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс, Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, «Мир», 1965.

89. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ЖЭТФ 58, № 3, 1025 (1970).
90. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 12, № 4, 1030 (1970).
91. K. Huang, A. Rhys, Proc. Roy. Soc. A204, 406 (1950).
92. М. А. Кривоглаз, С. И. Пекар, Тр. Ин-та физики АН УССР 4, 37 (1953).
93. Б. И. Давыдов, ЖЭТФ 7, 1069 (1937).
94. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ 47, № 10, 1515 (1964).
95. И. Б. Левинсон, ЖЭТФ 57, 660 (1969).
96. G. H. Wannier, Phys. Rev. 117, 432 (1960); Rev. Mod. Phys. 34, 645 (1962).
97. S. Machiwa, Phys. Rev. Lett. 24, 1175 (1970).
98. S. Miyake, R. Kubo, Phys. Rev. Lett. 9, 62 (1962).
99. K. Tani, Progr. Theor. Phys. 32, 167 (1964).
100. C. Zener, Proc. Roy. Soc. 145A, 523 (1934).
101. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ 33, 994 (1957).
102. E. O. Kane, J. Phys. Chem. Sol. 12, 181 (1960).
103. W. V. Houston, Phys. Rev. 57, 184 (1940).
104. J. Zak, Phys. Rev. Lett. 20, 1477 (1968); Phys. Rev. 181, 1366 (1969).
105. G. H. Wannier, Phys. Rev. 181, 1364 (1969).
106. А. Л. Эфрос, ФТТ 9, 1152 (1967); 10, 2844 (1968).
107. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, Sol. State Comm. 10 (6), 471 (1972).
108. A. Z. Hed, P. J. Freud, Journ. Non-Cryst. Sol. 2, 484 (1970).
109. R. Holstein, L. Friedman, Phys. Rev. 165, 1019 (1967).
110. В. В. Брыксин, Канд. диссертация, ИПАН, Ленинград, 1970.
111. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 15, 3235 (1973).
112. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 15, 3344 (1973).
113. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 16, № 3, 811 (1974).
114. В. В. Брыксин, Ю. А. Фирсов, ФТТ 16, № 7, 1941 (1974).
115. C. Zener, Proc. Roy. Soc. A137, 696 (1932).
116. Л. Д. Ландау, Phys. Zs. Sow. 2, 41 (1932).
117. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, I, Физматгиз (1963).
118. E. C. Stueckelberg, Helv. Phys. Acta 5, 369 (1932).
119. D. R. Bates, Proc. Roy. Soc. A257, 22 (1960).
120. Е. Е. Никитин, Оптика и спектроскопия 11, № 4, 452 (1961).
121. А. М. Дыхне, А. В. Чаплик, ЖЭТФ 43, 889 (1962).
122. Г. В. Дубровский, ЖЭТФ 46, 863 (1964).
123. Е. Е. Никитин, В. К. Быховский, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ 47, 750 (1964).
124. М. Я. Овчинникова, ДАН СССР 161, 141 (1965).
125. Г. В. Дубровский, Вестн. ЛГУ, физ. 16, 24 (1967).
126. М. А. Воротынцев, Р. Р. Догондзе, А. М. Кузнецова, ФТТ 12, 1605 (1970).
127. Термодинамика необратимых процессов, Лекции в летней школе физики им. Энрико Ферми, ИЛ, Москва, 1962.
128. G. V. Arnold, T. Holstein, Phys. Rev. Lett. 33, № 26, 1547 (1974).
129. I. G. Austin, J. Phys. C.5, № 13, 1687 (1972).