1995 PHYSICS AND TECHNICS OF SEMICONDUCTORS vol. 29, N 5

ПОЛЯРОНЫ МАЛОГО РАДИУСА. ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА

Ю.А.Фирсов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021, Санкт-Петербург, Россия
(Получена 11 января 1995 г. Принята к печати 23 января 1995 г.)

Теория поляронов малого радиуса — это обширная область физики твердого тела. Сейчас в ней наблюдается новый всплеск активности, особенно за рубежом. Не в последнюю очередь это связано с исследованиями высокотемпературных сверхпроводников и фуллеренов. Автор не претендует на полноту изложения всех аспектов и приложений теории поляронов малого радиуса и не ставит своей целью составление исчерпывающей библиографии. В соответствии с принципами, положенными в основу составления этого юбилейного сборника, посвященного памяти Анатолия Робертовича Регеля, в данном обзоре излагаются результаты, полученные автором и его коллегами И.Г. Ланг, Е.К. Кудиновым и В.В. Брыксиным, начатые в Институте полупроводников, когда его директором стал Анатолий Робертович, и продолженные в Физико-техническом институте АН СССР.

Речь будет идти о принципах построения теории кинетических явлений, когда носителями тока являются поляроны малого радиуса. Естественно, что логически вписывающиеся в схему данного обзора важные результаты других авторов тоже нашли в нем свое отражение.

Введение

Абрам Федорович Иоффе неоднократно обращал внимание физиков на то, что существуют полупроводники, в которых подвижность носителей тока μ настолько мала, что явления переноса в них не могут быть описаны с помощью кинетического уравнения Больцмана [1]. Для иллюстрации этой мысли воспользуемся обычной формулой для подвижности, следующей из кинетического уравнения,

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*} = \xi \frac{e}{\hbar} \lambda l. \tag{1}$$

Здесь τ — время релаксации, m^* — эффективная масса, λ — длина волны де Бройля носителя тока, l — длина свободного пробега, ξ — безразмерный множитель порядка единицы.

Критерий применимости кинетического уравнения (в случае статистики Больцмана) имеет вид

$$\hbar/\tau kT < 1, \qquad \text{или} \qquad \lambda/l < 1, \tag{2}$$

где k — постоянная Больцмана. Это условие означает, что неопределенность энергии носителя тока за счет рассеяния должна быть меньше его средней энергии, или, что то же самое, длина его свободного пробега l должна быть больше λ.

Используя (1) перепишем условие (2) в виде

$$\frac{\hbar}{\tau kT} \approx 20\,\frac{m}{m^*}\,\frac{500\,\text{K}}{T}\,\frac{1\,\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}}{\mu} < 1. \tag{3}$$

Здесь m — масса свободного электрона. Из (3) видно, что при $m^* \approx m$ и $\mu \approx 1\,\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ критерий (3) нарушается. Однако существует много веществ, для которых $\mu \leqslant 1\,\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$. Как строить теорию явлений переноса в том случае, когда $l \sim \lambda$? Это означает очень сильное рассеяние и, следовательно, очень сильное взаимодействие с рассеивателями — фононами. Для длинноволновых оптических поляризационных фононов оно характеризуется безразмерной константой связи α

$$\alpha = \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right)\frac{e^2}{2l_0\hbar\omega_0}. \tag{4}$$

Здесь ε_0 и ε_∞ — статическая и высокочастотная диэлектрические проницаемости, $l_0 = (\hbar/2m^*\omega_0)^{1/2}$ — характерная длина, определяемая из условия $\hbar^2/2m^*l_0^2 = \hbar\omega_0$, где ω_0 — предельная частота оптического фонона. Заметим, что $l_0 \gg a$, где a — постоянная решетки.

Для многих ионных кристаллов $\alpha \gg 1$. Носители тока в этом случае одеты в «фононную шубу». Их назвали поляронами. Они могут быть большого радиуса ($r_p \gg a$) — ПБР, и малого радиуса ($r_p \leqslant a$) — ПМР. Исследования ПБР начались гораздо раньше, чем ПМР, с пионерской работы Л.Д. Ландау [2]. Теория ПБР активно развивалась С.И. Пекаром (см., например, [3]), Боголюбовым [4], Тябликовым [5], Фрейлихом [6] и Фейнманом [7,8]. Глядя на формулу (1), можно надеяться, что замена m^* на бóльшую поляронную массу M_p облегчит выполнение критерия (3) (или (2)) даже при $\mu < 1\,\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$. Однако исследования [6–8] показали, что при $\alpha < 10$ масса ПБР изменяется не очень сильно, $M_p \simeq m^*(1 + \alpha/6)$. В адиабатическом пределе, $\alpha > 10$, эффекты перенормировки сильны:

$$E_p \simeq -0.1\alpha^2\hbar\omega_0, \qquad M_p = 0.025\alpha^4 m^*,$$

$$r_p = l_0\frac{10}{\alpha} = 10\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right)\frac{m}{m^*}\,a_B. \tag{5}$$

Здесь E_p — поляронный сдвиг, $a_B = \hbar^2/me^2$ — радиус Бора. Из (5) видно, что с ростом α радиус полярона уменьшается, однако в случае $r_p \to a$ континуальное приближение, используемое в теории ПБР, уже неприменимо, и надо строить теорию ПМР с учетом дискретности решетки. Что же дает теория ПБР для описания малой подвижности? Для высоких температур ($kT > \hbar\omega_0$) С.И. Пекар [3] получил выражения для подвижности при одноквантовом (испускание или поглощение одного фонона) и двухквантовом рассеянии, соответственно

$$\mu^{(1)} = \mu_0 \left(\frac{m^*}{M_p}\right)^{1/2} \left(\frac{kT}{\hbar\omega_0}\right)^{1/2} 0.77\alpha \simeq \frac{5}{\alpha} \left(\frac{kT}{\hbar\omega_0}\right)^{1/2} \mu_0,$$

$$\mu^{(2)} = \mu^{(1)} \frac{\hbar\omega_0}{kT} \frac{200}{\alpha^2}, \tag{6}$$

где μ_0 — характерный масштаб подвижности,

$$\mu_0 \,[\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}] = \frac{el_0^2}{\hbar} = \frac{e}{2m^*\omega_0} = 20\,\frac{m}{m^*}\,\frac{4\cdot 10^{13}\ \text{с}^{-1}}{\omega_0}. \tag{7}$$

Фактически μ_0 всегда превышает значение $1\,\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, и величины $\mu^{(1)}$ и $\mu^{(2)}$ не могут сильно отличаться от μ_0. К тому же теория Пекара неприменима, когда двухквантовое рассеяние становится эффективней, чем одноквантовое, т.е. при $\alpha^2 > 200\hbar\omega/kT$, ибо в этом случае должны быть учтены все более и более многоквантовые процессы рассеяния. Образно говоря, с ростом α шуба становится «менее прочной», радиус полярона (размер шубы), согласно [5], уменьшается, и мы переходим к случаю ПМР, т.е. $r_p \leqslant a$, когда механизм переноса может стать принципиально не зонным. А.Ф. Иоффе предположил [1], что в случае нарушения условия (2) это могут быть прыжки с узла на узел. Хайкс и Джонстон [9], анализируя экспериментальные данные для NiO, пришли к выводу, что в области высоких температур подвижность носителей тока в NiO имеет активационный характер, откуда они заключили, что в этом случае реализуется активационный прыжковый механизм, как это имеет место для диффузии ионов по междоузлиям. Но как это все описать строго математически? Ведь на первый взгляд эти рассуждения противоречат теореме Блоха, согласно которой волновой пакет, описывающий носитель тока, локализованный на узле, обязательно расплывается по всему кристаллу и именно это состояние является стационарным. Однако пионерские работы [5,10,11], в которых был изучен энергетический спектр ПМР (но не механизм переноса), показали, что масса ПМР может быть очень большой, а ширина разрешенной зоны ПМР, ΔE_p, очень малой:

$$\Delta E_p \simeq \Delta E \left(-\gamma \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right). \tag{8}$$

Здесь ΔE — ширина исходной (неперенормированной) зоны, безразмерная константа связи γ больше, чем α (см. далее). С ростом температуры ($kT > \hbar\omega_0/2$) зона сужается, и можно предположить, что неопределенность в энергии за счет многофононного взаимодействия станет больше, чем ΔE_p. Тогда понятие о поляронной зоне потеряет смысл и более адекватным станет описание в терминах состояний ПМР, локализованных на узлах (узельное представление), а «остаточное» (после образования «шубы») взаимодействие с фононами будет обеспечивать переходы с узла на узел путем надбарьерного переноса или подбарьерного туннельного просачивания. Холстейн [12] впервые попытался оформить эти идеи математически. Он постулировал, что при высоких температурах движение ПМР есть совокупность случайных блужданий с узла на узел. Используя вид волновых функций ПМР, локализованных на узлах, и выделяя недиагональные по узлам (пропорциональные J, где J — обменный интеграл для соседних узлов) члены гамильтониана в качестве оператора возмущения, он вычислил вероятность $W(T)$ прыжка ПМР на соседний узел. Далее он предположил, что процесс блуждания — марковский. Это позволило ему записать коэффициент диффузии в виде

$$D = \frac{1}{2}\, a^2 W(T). \tag{9}$$

При высоких температурах, $kT > \hbar\omega_0/2$, вероятность прыжка, согласно [12], равна

$$W(T) = \frac{\omega_0}{2\pi}\, f(\eta_2)\mathrm{e}^{-E_a/kT}. \tag{10}$$

Здесь E_a — энергия активации, $E_a \simeq (\gamma/2)\hbar\omega_0$ (подробнее см. разд. 1, 2), $f(\eta_2)$ — безразмерная функция от безразмерного параметра $\eta_2 = J^2/\hbar\omega_0(E_a kT)^{1/2}$, где J — обменный интеграл, характеризующий ширину ΔE исходной электронной зоны. Для кубических кристаллов $\Delta E = 2zJ$, где z — число ближайших соседей. Функция $f(\eta_2)$ не превышает значений порядка 1,

$$f(\eta_2) \simeq \begin{cases} \pi^{3/2}\eta_2 & \text{при } \eta_2 \ll 1, \\ 1 & \text{при } \eta_2 > 1. \end{cases} \tag{11}$$

Для прыжков ионов по междоузлиям результат для $W(T)$ похож на (10), однако в (10) входит электронная характеристика J.

Из соотношения Эйнштейна, $\mu = eD/kT$, для прыжковой подвижности, μ_h, получим

$$\mu_h = u_0 \frac{1}{2\pi}\, \frac{\hbar\omega_0}{kT}\, f(\eta_2)\mathrm{e}^{-E_a/kT}, \tag{12}$$

где u_0 — характерный масштаб подвижности, $u_0 \ll \mu_0$ (ср. с (7)),

$$u_0\,[\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}] = \frac{ea^2}{\hbar} \approx 1.6(a/3\,\text{Å})^2. \tag{13}$$

Из-за наличия активационного множителя в (12) имеем $\mu_h \ll 1\,\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$. Итак, в прыжковом режиме подвижность ПМР действительно мала. Если считать, что неопределенность в энергии равна $\hbar W(T)$, то она действительно больше ΔE_p и переход в узельное представление (см. выше) оправдан.

Холстейн предположил, что при низких температурах, $kT < \hbar\omega_0/2\ln\gamma$, реализуется обычный больцмановский перенос в импульсном **k**-пространстве, но по узкой поляронной зоне, и получил

$$\mu_B = \frac{e}{kT}\langle v_p^2(\mathbf{k})\tau(\mathbf{k})\rangle = u_0 \frac{1}{2}\, \frac{\Delta E_p}{zkT}\, \frac{\Delta E_p}{z\hbar}. \tag{14}$$

Здесь $\mathbf{v}_p(\mathbf{k})$ — скорость полярона, τ — время релаксации. В качестве τ он предложил использовать $W_2^{-1}(T)$ в низшем порядке по J, но вычисленное при $kT < \hbar\omega_0/2$. Например, при $kT_0 < kT < \hbar\omega_0/2$, где $kT_0 = \hbar\omega_0/2\ln\gamma$,

$$\tau_2^{-1} = W_2 \simeq \pi^{3/2}\frac{J^2}{\hbar(E_a\hbar\omega_0)^{1/2}}\left(2\,\mathrm{sh}\,\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{4E_a}{\hbar\omega_0}\,\mathrm{th}\,\frac{\hbar\omega_0}{4kT}.\right) \qquad (15)$$

При $kT > \hbar\omega_0/2$ выражение (15) переходит в (10) (при $\eta_2 < 1$). Подставляя (15) в (9) и используя соотношение Эйнштейна, получим для μ_n выражение, пригодное в более широком интервале температур ($T > T_0$), чем (12). В интервале $T_1 < T < T_0$, где T_1 определяется из условия $kT_1 \approx (1/z)\Delta E_p$, имеем

$$\tau_2^{-1} \simeq W_2 \simeq \frac{J^2}{\hbar^2\Delta\omega}\,\gamma^2 \mathrm{e}^{-2\gamma}\,\mathrm{sh}^2\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right), \qquad (16)$$

где $\Delta\omega$ — ширина полосы дисперсии оптических фононов. При $T < T_0$ получим

$$\mu_B \simeq u_0\frac{\hbar\Delta\omega}{kT}\,\gamma^{-2}\,\mathrm{sh}^2\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) > u_0, \qquad (17)$$

т.е. подвижность перестает быть малой. Итак, с ростом T подвижность сначала убывает, а потом начинает расти. Температуру перехода от зонного механизма к прыжковому, T_3, Холстейн предложил определять из условия

$$\mu_h(T_3) = \mu_B(T_3). \qquad (18)$$

Используя (12), (14) и (15), из (18) получим

$$\frac{\Delta E_p}{z} \simeq \frac{\hbar}{\tau_2(T_3)} = \hbar W_2(T_3). \qquad (19)$$

Итак, согласно Холстейну переход от зонного режима к прыжковому происходит, когда неопределенность в энергии полярона сравнивается с шириной поляронной зоны. Далее мы увидим, что вместо (15) для τ надо использовать другое выражение, и это приведет к тому, что возникает широкая промежуточная область температур, где будет реализовываться принципиально иной механизм переноса, названный нами туннельным (см. разд. 2).

Работа Холстейна [12], основные результаты которой были приведены выше, имела огромное влияние на все дальнейшие исследования. Однако оставалось выполнить еще очень обширную программу исследований.

1. Исходя из общих принципов построить единый математический формализм для описания процессов переноса в конфигурационном (узельном) пространстве.

2. Доказать, что отдельные акты перескока некоррелированы, т.е. что процесс действительно марковский, только в этом случае формула (9) справедлива. При каких условиях марковость нарушается?

3. Выяснить мехнизм переноса в области промежуточных температур, где не реализуется ни зонный, ни прыжковый механизмы.

4. Найти основные безразмерные параметры теории и постараться расширить теорию на ту область значений параметров, где они не малы.

5. Предложить строгий метод вычисления других кинетических коэффициентов.

Было ясно, что исходить следовало из формулы Кубо [13] для электропроводности

$$\sigma_{xx} = \beta \frac{1}{V} \lim_{s\to 0} \mathrm{Re} \int_0^\infty \mathrm{e}^{-st} \frac{1}{Z} \mathrm{Sp}\left\{ \mathrm{e}^{-\beta H} j_x(t) j_x(0) \right\} dt. \tag{20}$$

Здесь $\beta = 1/kT$, V — объем системы, Z — статистическая сумма, H — полный гамильтониан системы, $j(t)$ — оператор тока в гейзенберговском представлении. Константинов и Перель [14] предложили графическую технику для расшифровки формулы Кубо, основанную на разложении «по степеням $1/s$» (метод КП), и получили транспортное уравнение в $\mathbf{k}$-представлении. Гуревич и Фирсов [15], используя эту технику, получили из (20) формулу Цицейки, описывающую прыжковый механизм (в непрерывной среде) для осцилляторов Ландау в сильном магнитном поле, но при слабом взаимодействии с фононами. Кстати, это позволило предсказать новый эффект — магнитофононный резонанс, обнаруженный и исследованный Парфеньевым и Шалытом [16,17].

Итак, к концу 1960 г. программа действий была ясна. В это время А.Ф. Иоффе умер и директором ИП АН СССР стал А.Р. Регель. Он тоже призывал теоретиков к построению последовательной теории малой подвижности. К решению этой задачи в ИП АН независимо приступили две группы исследователей: И.Г. Ланг и Ю.А. Фирсов [18–20] положили в основу специальное каноническое преобразование (см. далее) и модифицированный метод КП; М.И. Клингер [21,22] воспользовался методом Ван Хова [23].

1. Каноническое преобразование в теории ПМР [18–20]

Вторично квантованный гамильтониан электрон-фононной системы в $\mathbf{k}$-представлении имеет вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{+} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left(b_{\mathbf{q}}^{+} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) +$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left(\gamma_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{+} a_{\mathbf{k}}^{+} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \gamma_{\mathbf{q}}^{+} b_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}^{+} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right). \tag{21}$$

Здесь $a^{+}(a)$ и $b^{+}(b)$ — операторы рождения (уничтожения) электронов и фононов. Первые два члена в (21) описывают свободные электроны и фононы, $\varepsilon(\mathbf{k})$ — зонная энергия электрона, $\omega_{\mathbf{q}}$ — частота оптического (поляризационного) фонона. Третий член в (21) есть гамильтониан взаимодействия, описывающий рассеяние электрона с рождением (уничтожением) *одного* фонона. N —число элементарных ячеек в объеме V. Безразмерная функция $\gamma_{\mathbf{q}}$ характеризует взаимодействие

$$|\gamma_{\mathbf{q}}|^2 = 8\pi\alpha \frac{l_0}{q^2\Omega} f(\mathbf{qg}), \tag{22}$$

где Ω — объем элементарной ячейки, $\mathbf{q}$ — волновой вектор фонона, $\mathbf{g}$ — вектор ближайшего соседа в решетке, фрейлиховская константа α и длина l_0 определены выше (см. (4)). При $\mathbf{qg} \ll 1$ имеем безразмерную функцию $f \simeq 1$. Для ПБР $q \sim r_p^{-1} \ll a^{-1}$ и функцию f в (22) можно заменить на 1. Для ПМР этого делать нельзя. Поскольку константа связи $\gamma_{\mathbf{q}}$ велика, разлагать формулу Кубо (20) по степеням $\gamma_{\mathbf{q}}$ неконструктивно. Ланг и Фирсов [17] предложили каноническое преобразование, «одевающее электроны в поляронную шубу», гамильтониан взаимодействия при этом становится *многофононным*, но в теории возникают малые параметры, по которым и можно разлагать формулу Кубо.

Эту процедуру удобнее проводить, когда исходный гамильтониан (21) переписан в *узельном* представлении (для электронов)

$$H = \sum_{\mathbf{m},\mathbf{g}} J(\mathbf{g}) a^+_{\mathbf{m}+\mathbf{g}} a_{\mathbf{m}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left(b^+_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) -$$
$$- \sum_{\mathbf{m}} a^+_{\mathbf{m}} a_{\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left[U^*_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}) b_{\mathbf{q}} + U_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}) b^+_{\mathbf{q}} \right]. \tag{23}$$

Здесь $\mathbf{m}$ — векторный номер узла решетки, $a^+_{\mathbf{m}}$, $a_{\mathbf{m}}$ — операторы рождения (уничтожения) электрона на узле $\mathbf{m}$. Безразмерная величина $U_{\mathbf{m}}(\mathbf{q})$ характеризует смещение, возникающее вследствие поляризации решетки электроном, сидящим на узле $\mathbf{m}$,

$$U_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}) = -\gamma_{\mathbf{q}} \left(\frac{1}{2N} \right)^{1/2} \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{\mathbf{m}}}, \tag{24}$$

где $\mathbf{R}_{\mathbf{m}}$ — вектор узла $\mathbf{m}$ в решетке. $J(\mathbf{g})$ — обменный интеграл между узлами $\mathbf{m}+\mathbf{g}$ и $\mathbf{m}$. В дальнейшем мы ограничимся случаем, когда $\mathbf{g}$ соответствует ближайшим соседям. Переходя в $\mathbf{k}$-представление путем подстановки

$$a_{\mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\mathbf{m}}} \tag{25}$$

и суммируя по $\mathbf{m}$, мы приходим к виду (21), т.е. (21) и (23) эквивалентны. При этом $\varepsilon(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{g}} J(\mathbf{g}) \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{g}}$. Точное каноническое преобразование легче найти для (23), ибо в нем самый большой член (последний) диагонален по электронным операторам. Это преобразование осуществляется с помощью оператора $\exp(-S)$, где

$$S = \sum S_{\mathbf{m}} a^+_{\mathbf{m}} a_{\mathbf{m}}. \tag{26}$$

Преобразованный гамильтониан $\tilde{H} = \mathrm{e}^{-S} H \mathrm{e}^{S}$ принимает вид

$$\tilde{H} = -\sum_{\mathbf{m}} a^+_{\mathbf{m}} a_{\mathbf{m}} E_b + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left(b^+_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\mathbf{m},\mathbf{g}} J(\mathbf{g}) a^+_{\mathbf{m}+\mathbf{g}} a_{\mathbf{m}} \Phi_{\mathbf{m},\mathbf{g}} + \Delta H. \tag{27}$$

Здесь E_b — поляронный сдвиг,

$$E_b = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2. \tag{28}$$

Оператор ΔH описывает эффективное притяжение между носителями тока за счет виртуального обмена фононами,

$$\Delta H = -\sum_{\mathbf{m}_1 \neq \mathbf{m}_2} a^+_{\mathbf{m}_1} a_{\mathbf{m}_1} a^+_{\mathbf{m}_2} a_{\mathbf{m}_2} \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \cos\Big[\mathbf{q}(\mathbf{R}_{\mathbf{m}_1} - \mathbf{R}_{\mathbf{m}_2})\Big]. \tag{29}$$

Если образование биполяронов невыгодно (подробнее см. разд. 13), то при малых концентрациях носителей тока этот член можно опустить. Третий член в (27) описывает многофононное взаимодействие при смещении носителя тока (полярона) с узла $\mathbf{m}$ на узел $\mathbf{m}+\mathbf{g}$ посредством оператора

$$\Phi_{\mathbf{m},\mathbf{g}} = \exp(S_{\mathbf{m}+\mathbf{g}} - S_{\mathbf{m}}). \tag{30}$$

В (30) содержатся вклады, как диагональные по фононным операторам, т.е. зависящие только от $\hat{N}_{\mathbf{q}} = b^+_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}$, так и недиагональные. Прибавим и вычтем в (30) усредненный по статистике диагональный вклад $\langle \Phi_{\mathbf{g}} \rangle$ (т.е. $\hat{N}_{\mathbf{q}} \to N_{\mathbf{q}} = [\exp(\hbar\omega_{\mathbf{q}}/kT) - 1]^{-1}$) [17,18]:

$$\langle \Phi_{\mathbf{m},\mathbf{g}} \rangle = \mathrm{e}^{-S_T(\mathbf{g})}, \qquad S_T(\mathbf{g}) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos \mathbf{q}\mathbf{g}) \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2kT}. \tag{31}$$

И снова перейдем в $\mathbf{k}$-представление. В итоге получим

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + H_{\text{int}}, \tag{32}$$

где

$$\tilde{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \varepsilon_p(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left(b^+_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right), \tag{33}$$

$\varepsilon_p(\mathbf{k})$ — перенормированная энергия «зонного» полярона,

$$\varepsilon_p(\mathbf{k}) = -E_b + \sum_{\mathbf{g}} J(\mathbf{g}) \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{g}} \mathrm{e}^{-S_T(\mathbf{g})}. \tag{34}$$

Например, для кубического кристалла имеем $\varepsilon_p(\mathbf{k}) = -E_b + \varepsilon(\mathbf{k})\mathrm{e}^{-S_T}$, где $\varepsilon(\mathbf{k})$ — энергия электрона: $\varepsilon(\mathbf{k}) = 2J[\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a]$. Ширина исходной зоны — $\Delta E = 12J$, ширина поляронной зоны —

$\Delta E_p = \Delta E \mathrm{e}^{-S_T}$, т.е. она у́же исходной в e^{-S_T} раз ($\mathrm{e}^{-S_T} \ll 1$). С ростом T увеличивается S_T (см. (31)), и поляронная зона сужается. Поляронное состояние более выгодно, если поляронная зона лежит ниже нижнего края электронной зоны, т.е. если

$$E_p > \frac{\Delta E}{2} \to 6J. \tag{35}$$

Это и есть основное условие образования ПМР. Итак, для образования ПМР надо, чтобы исходные зоны были узкими, т.е. величины J не слишком большие, а константа связи большая (см. (28)).

Гамильтониан взаимодействия H_{int} в (32) имеет вид

$$H_{\text{int}} = \sum a^+_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} \frac{1}{N} \sum J(\mathbf{g}) \left(\Phi_{\mathbf{mg}} - \langle \Phi_{\mathbf{g}} \rangle\right) \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R_m} - i\mathbf{k}'\mathbf{g}}. \tag{36}$$

Итак, основная цель достигнута: выделен полярон и найден оператор H_{int}, описывающий его взаимодействие с колебаниями решетки. В.В. Брыксин показал [25], что точно такое же каноническое преобразование можно совершить для более сложного, чем (23), исходного гамильтониана. Например, можно вместо константы $J(\mathbf{g})$ ввести в (23) обменный интеграл $J_{\mathbf{mm}'}$, экспоненциально зависящий от неравновесных атомных смещений $\mathbf{U_m}$,

$$J_{\mathbf{mm}'} = J^{(0)}_{\mathbf{mm}'} \exp\left(-\frac{1}{\rho} |\mathbf{R_m} + \mathbf{U_m} - \mathbf{R_{m'}} - \mathbf{U_{m'}}|\right). \tag{37}$$

Здесь ρ — радиус локализованного на узле состояния (для функции Ваннье), $\rho < a$, где a — постоянная решетки. Предполагая, что $|\mathbf{U_m} - \mathbf{U_{m'}}| \ll |\mathbf{R_m} - \mathbf{R_{m'}}|$, ограничиваясь ближайшими соседями ($\mathbf{m}' = \mathbf{m} + \mathbf{g}$) и раскладывая, как обычно, $\mathbf{U_m}$ в ряд по фононным смещениям, получим

$$J_{\mathbf{m}'\mathbf{m}} = J(\mathbf{g}) \exp\left(-\frac{\mathbf{g}(\mathbf{U_{m'}} - \mathbf{U_m})}{\rho a}\right) = J(\mathbf{g}) \exp\Big(-\sum_{\mathbf{q}} (V^*_{\mathbf{mm}'} b^+_{\mathbf{q}} + V_{\mathbf{mm}'} b_{\mathbf{q}})\Big), \tag{38}$$

где

$$V_{\mathbf{m}'\mathbf{m}}(\mathbf{q}) = \left(\frac{1}{2N}\right)^{1/2} \delta(\mathbf{g}, \mathbf{q}) \left[\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{R_m}} - \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{R_{m'}}}\right],$$

$$\delta(\mathbf{g}, \mathbf{q}) = -\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_{\mathbf{q}}}\right)^{1/2} (\mathbf{e_q}\mathbf{g}) \frac{1}{a\rho}, \tag{39}$$

M — масса атома решетки, $\mathbf{e_q}$ — собственный вектор поляризационного фонона. Итак, подставляя (38) вместо $J(\mathbf{g})$ в (23), мы будем иметь сильно нелинейную зависимость от операторов b, b^+ в уже исходном гамильтониане. Совершая каноническое преобразование (26), можно привести $\tilde{H}$ к виду (27), но с заменой

$$\Phi_{\mathbf{m,g}} \to \Psi_{\mathbf{m,g}} = \exp\Big(\sum_{\mathbf{q}} \left[\Gamma^*_{\mathbf{mm}'}(\mathbf{q}) b^+_{\mathbf{q}} + \Gamma_{\mathbf{m}'\mathbf{m}}(\mathbf{q}) b_{\mathbf{q}}\right]\Big), \tag{40}$$

где $\Gamma_{\mathbf{m}'\mathbf{m}}(\mathbf{q}) = -U_{\mathbf{m}'}(\mathbf{q}) + U_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}) - V_{\mathbf{m}'\mathbf{m}}(\mathbf{q})$. Поскольку операторная структура многофононного оператора $\Psi_{\mathbf{m},\mathbf{g}}$ такая же, как и для $\Phi_{\mathbf{m},\mathbf{g}}$, все вычисления проводятся точно так же. Например, в выражении (31) для $S_T(\mathbf{g})$ надо заменить $|\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \to |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 - \delta^2(\mathbf{g},\mathbf{q})$, т.е. температурно-зависимая часть перенормировки поляронной зоны будет состоять из двух вкладов разного знака. Положительный вклад в $S_T(\mathbf{g})$ связан с поляронным утяжелением частицы, а отрицательный вклад обусловлен ростом вероятности межузельного туннелирования по мере увеличения амплитуды фононных колебаний. В области высоких температур ($kT > \hbar\omega_0/z$) он равен $(1/2\rho^2)\langle U^2_{\mathbf{mm}'}\rangle$, где $\langle U^2_{\mathbf{mm}'}\rangle$ — среднеквадратичное смещение атомов, что по порядку величины равно $kT/\mu\omega_0^2\rho^2$ и может достигать значений порядка единицы. Но при больших константах связи общий знак S_T не изменится. Последствия замены (40) в выражении для подвижности будут обсуждены далее.

2. Описание движения носителя тока по узлам решетки с помощью функций условной вероятности [24,26,27]

Теперь можно воспользоваться формулой Кубо (20), которая инвариантна относительно канонического преобразования (26), и провести в ней разложение по степеням H_{int} в виде (36), т.е. не по степеням большой константы связи γ, а по степеням малого параметра $J(\mathbf{g})$. Поскольку он имеет размерность энергии, реальные безразмерные параметры теории будут представляться в виде отношений J к E_a, kT, $\hbar\omega_0$ и т.д. Все эти вопросы были подробно разобраны в работах [18–20,28,29] Ланг и Фирсова, где была построена принципиально новая графическая техника для многофононных операторов H_{int} (см. [18,26]) и дан строгий вывод выражений для μ_h и μ_t — прыжкового и туннельного вкладов в подвижность. Эти вычисления проводились в $\mathbf{k}$-представлении, т.е. с использованием для гамильтониана $\tilde{H}$ выражений (32), (33) и (36). Далее будет описан иной, на наш взгляд более общий и более наглядный подход, развитый в последующих работах Ю.А. Фирсова и Е.К. Кудинова [26,27], позволяющий не только воспроизвести результаты [18,20], но и получить много нового. В работах [26,27] использовалось узельное представление, т.е. гамильтониан брался в виде (27) (член ΔH опускался). Узельное представление эффективно в области высоких ($kT > \hbar\omega_0/2$) и промежуточных температур, где ширину поляронной зоны можно считать малой,

$$\Delta E_p < kT, \qquad \Delta E_p < \hbar/\tau. \tag{41}$$

Второе из условий (41) исключает возможность зонного переноса, описываемого с помощью уравнения Больцмана (см. Введение). В этом случае выражение для подвижности, получающееся из формулы Кубо после соответствующих упрощений, принимает вид [26]

$$\mu = \frac{e}{2kT}\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\sum_{\mathbf{m}} X^2_{\mathbf{m}} P(\mathbf{m},t) = \frac{e}{2kT}\lim_{s\to\infty} s^2 \sum_{\mathbf{m}} X^2_{\mathbf{m}} P(\mathbf{m},s). \tag{42}$$

Здесь $P(\mathbf{m}, s)$ и $P(\mathbf{m}, t)$ есть сокращенные обозначения для диагональных компонент $P_{\mathbf{m}0}^{\mathbf{m}0}(s)$ и $P_{\mathbf{m}0}^{\mathbf{m}0}(t)$ функций условных вероятностей:

$$P_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}(t) = \frac{1}{\mathrm{Sp}(\mathrm{e}^{-\beta H_0})} \mathrm{Sp}\left\{\mathrm{e}^{-\beta H_0} \left\langle 0 | a_{\mathbf{m}_2} (a_{\mathbf{m}'}^+ a_{\mathbf{m}'})_t a_{\mathbf{m}_1}^+ | 0 \right\rangle \right\}, \tag{43}$$

где H_0 — диагональная по операторам a и b часть гамильтониана (27), $(a_{\mathbf{m}'}^+ a_{\mathbf{m}'})_t$ — оператор положения носителя тока на узле $\mathbf{m}'$ в момент времени t в гейзенберговском представлении (с оператором (27)),

$$P_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}(s) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-st} P_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}(t) dt, \tag{44}$$

т.е. $P(s)$ есть результат преобразования Лапласа $P(t)$. Для величин $P(s)$ имеется условие нормировки —

$$\sum_{\mathbf{m}'} P_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}(s) = \frac{1}{s} \delta_{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_2}. \tag{45}$$

Диагональные компоненты $P_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}\mathbf{m}'}(t)$ есть функции вероятности, определяющие вероятность найти поляронн на узле $\mathbf{m}'$ в момент времени t, если достоверно известно, что при $t = 0$ он находился на узле $\mathbf{m}$.

Итак, эти функции имеют обычный в теории стохастических явлений смысл. Недиагональные компоненты $P_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}(t)$ описывают не только смещение центра тяжести волнового пакета, но и его расплывание за счет туннельных эффектов, связывающих узлы $\mathbf{m}_1$ и $\mathbf{m}_2$ ($\mathbf{m}_1 \neq \mathbf{m}_2$) в конечном состоянии (подробнее об этом см в [26]). Диагональные и недиагональные компоненты функции условий вероятности подчиняются следующей системе уравнений:

$$sP_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}\mathbf{m}'}(s) = \delta_{\mathbf{m}\mathbf{m}'} + \sum_{\mathbf{m}_1 \neq \mathbf{m}} W_{\mathbf{m}\mathbf{m}_1}^{\mathbf{m}\mathbf{m}_1} \left[P_{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}(s) - P_{\mathbf{m}\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}\mathbf{m}'}(s)\right] + \sum_{\mathbf{m}_1 \neq \mathbf{m}} W_{\mathbf{m}\mathbf{m}_2}^{\mathbf{m}\mathbf{m}_1} P_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}(s),$$

$$sP_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}(s) = W_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_2}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_1} P_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}(s) + \sum_{\mathbf{m}_3} W_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_3}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_3} P_{\mathbf{m}_3\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_3\mathbf{m}'} + {\sum_{\mathbf{m}_3}}' W_{\mathbf{m}_3\mathbf{m}_4}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_3} P_{\mathbf{m}_4\mathbf{m}'}^{\mathbf{m}_3\mathbf{m}'}(s). \tag{46}$$

Штрих у знака суммы в (46) означает $\mathbf{m}_3 \neq \mathbf{m}_4$ и одновременно $\mathbf{m}_1 \neq \mathbf{m}_3$ или $\mathbf{m}_2 \neq \mathbf{m}_4$. Вероятности W зависят от вида H_{int} и определяются в рамках графической техники. Они описывают различные процессы в конфигурационном пространстве: $W_{\mathbf{m}\mathbf{m}_1}^{\mathbf{m}\mathbf{m}_1}$ описывают прыжки с узла $\mathbf{m}_1$ на узел $\mathbf{m}$ и обеспечивают прыжковый вклад в подвижность, $W_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_2}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_1}$ и соответствующие им «времена релаксации»

$$\tau(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2) = -\left(W_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_2}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_1}\right)^{-1} \tag{47}$$

входят в уравнение для недиагональных компонент $P_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}}$, которое описывает некоторый процесс прихода к равновесию в узельном пространстве (подробнее см. в [24,26]). Поэтому эти две диагональные компоненты W в общем случае не равны друг другу. Используя гипотезу

(15), Холстейн предположил их равенство, что и привело к потере им туннельного вклада в подвижность. Различные недиагональные компоненты W описывают вероятность смещения волнового пакета и его расплывание.

Итак, движение квантового объекта по узлам решетки более сложно, чем классические случайные блуждания. Все вышеуказанное не было ограничено рамками теории ПМР. Используя гамильтониан H в виде (27), включив первые два члена в определение H_0, опуская четвертый член и взяв третий член в (27) в качестве $H_{\rm int}$, мы может провести конкретные вычисления величин W для ПМР, используя графическую технику для определения сверток многофононных операторов (30), развитую в работах [18–20] Ланг и Фирсова. Оказывается, что при промежуточных и высоких температурах недиагональные компоненты W всегда меньше диагональных. Поэтому в нулевом приближении можно опустить последний член в первом из уравнений (46). Получим замкнутую систему уравнений только для диагональных P. Оно имеет классический вид и легко решается,

$$sP(\mathbf{m},s) = \delta_{\mathbf{m}0} + \sum_{\mathbf{G}\neq 0} W(\mathbf{G},s)\Big[P(\mathbf{m}-\mathbf{G},s) - P(\mathbf{m},s)\Big], \tag{48}$$

где $\mathbf{G}$ — вектор в прямой решетке (не обязательно связывающий только ближайших соседей). Хотя W конечны при $s \to 0$, но от s зависят, поэтому во временно́м представлении (48) принимает вид

$$\frac{\partial P(\mathbf{m},t)}{\partial t} = -\sum_{\mathbf{G}\neq 0} \int\limits_0^t W(\mathbf{G},\tau)\Big[P(\mathbf{m},t-\tau) - P(\mathbf{m}-\mathbf{G},t-\tau)\Big]d\tau \tag{49}$$

с начальным условием $P(\mathbf{m},t)|_{t=0} = \delta_{\mathbf{m}0}$. Итак, величина $P(\mathbf{m},t)$, вообще говоря, удовлетворяет интегродифференциальному по времени уравнению, поэтому движение ПМР в общем случае является немарковским, т.е. процесс блуждания ПМР обладает памятью, ибо $\partial P/\partial t$ в момент времени t определяется значениями $P(t')$ во все предшествующие моменты, начиная с $t' = 0$. Оказывается [26], что в том случае, когда J достаточно мало, а фононная дисперсия $\Delta\omega$ не слишком мала, величина $W(\mathbf{G},\tau)$ отлична от нуля только в узком интервале

$$0 < \tau < t_0 \simeq \hbar(E_a kT)^{-1/2} \ll \omega_0^{-1}, \tag{50}$$

и в этом случае процесс — марковский (немарковский процесс при $\Delta\omega \ll \omega_0$ изучался в [30,31], но до конца этот вопрос не решен до сих пор). В марковском случае уравнение (44) становится дифференциальным, т.е. (48) решается в пределе $s \to 0$ и из (42) получим [24,26]

$$\mu = \mu_h = \frac{e}{2kT} \sum_{\mathbf{G}} G_x^2 W(\mathbf{G}). \tag{51}$$

Это типичное выражение для прыжкового вклада (ср. с (12)), однако в (51) содержатся вклады от прыжков не только на ближайшие узлы.

Анализ этой формулы будет выполнен далее, а сейчас будет получен другой вклад в подвижность, который было предложено назвать туннельным. Линейная система уравнений (46) позволяет выразить недиагональные компоненты P относительно диагональных:

$$P^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}'}_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}'} = \sum_{\mathbf{m}_3} L^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_3}_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_3} P^{\mathbf{m}_3\mathbf{m}'}_{\mathbf{m}_3\mathbf{m}'}. \tag{52}$$

Здесь $L^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_3}_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_3}$ — некоторые матрицы. Подставляя (52) в последний член 1-го уравнения в (46), мы получим систему линейных уравнений для диагональных величин P, которая имеет тот же вид, что и (48), но с перенормированными вероятностями:

$$\overline{\overline{W}}(\mathbf{m}-\mathbf{m}_1) = W^{\mathbf{m}\mathbf{m}_1}_{\mathbf{m}\mathbf{m}_1} + \sum_{\mathbf{m}_2\neq\mathbf{m}_3} W^{\mathbf{m}\mathbf{m}_2}_{\mathbf{m}\mathbf{m}_3} L^{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_1}_{\mathbf{m}_3\mathbf{m}_1}. \tag{53}$$

Поэтому для μ получается формула вида (51) с заменой $W \to \overline{\overline{W}}$. Найти общее выражение для матрицы L не представляется возможным, однако ее можно представить в виде ряда по степеням отношения недиагональных компонент W к диагональным:

$$L^{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_1}_{\mathbf{m}_3\mathbf{m}_1} = \tau(\mathbf{m}_2-\mathbf{m}_3) W^{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_1}_{\mathbf{m}_3\mathbf{m}_1} +$$

$$+\tau(\mathbf{m}_2-\mathbf{m}_3) \sum_{\mathbf{m}_4,\mathbf{m}_5}{}' W^{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_4}_{\mathbf{m}_3\mathbf{m}_5} \tau(\mathbf{m}_4-\mathbf{m}_5) W^{\mathbf{m}_4\mathbf{m}_1}_{\mathbf{m}_5\mathbf{m}_1} + \dots, \tag{54}$$

где штрих у суммы означает $\mathbf{m}_4 \neq \mathbf{m}_5$ и одновременно $\mathbf{m}_4 \neq \mathbf{m}_2$ или $\mathbf{m}_5 \neq \mathbf{m}_3$. Здесь $\tau(\mathbf{m}_2-\mathbf{m}_3) = -(W^{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_2}_{\mathbf{m}_3\mathbf{m}_3})^{-1}$ — обратная вероятность, условно называемая «временем релаксации». Она характеризует временную эволюцию недиагональных компонент функции условной вероятности P с учетом трения, обусловленного многофононными процессами взаимодействия (подробнее см. [24], гл. 1, ч. 2, § 7). Все вероятности вычисляются в рамках модифицированной графической техники (см. математические приложения в [24]) и представляются в виде рядов по степеням безразмерных параметров $\eta_1 = J/E_a$, $\eta_2 = J^2/\hbar\omega_0(E_a kT)^{1/2}$, $\eta_3 = J/kT$ и т.д. (см. далее, разд. 4). В низшем по J приближении недиагональные вероятности пропорциональны $\Delta E_p/\hbar z$, т.е. выражение (54) есть ряд по степеням параметра $(\Delta E_p/\hbar z)\tau$. Если этот параметр мал, т.е. если неопределенность в энергии $\hbar/\tau$ больше ширины поляронной зоны, что отвечает условию (41), то ряд (54) можно оборвать, оставив в нем только первый член. В итоге получим

$$\mu = \mu_h + \mu_t = \frac{e}{2kT}\sum_{\mathbf{m}} X^2_{\mathbf{m}} W(\mathbf{m}) + \frac{e}{2kT}\sum_{\mathbf{m},\mathbf{m}_1\neq\mathbf{m}_2} X^2_{\mathbf{m}} W^{\mathbf{m}\mathbf{m}_1}_{\mathbf{m}\mathbf{m}_2} W^{\mathbf{m}_1 0}_{\mathbf{m}_2 0}\tau(\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2). \tag{55}$$

Здесь первый член отвечает прыжковому вкладу, а второй — туннельному. Термин «туннельный» используется, чтобы отличить этот механизм переноса от зонного, который реализуется при обратном условии

$\Delta E_p/z\hbar > \hbar/\tau$. Он лучше отражает и физическую суть процесса (см. [24], гл. 1, ч. 2, § 7). Если J не слишком велико, то в области промежуточных температур для ПМР имеет место следующая цепочка неравенств:

$$\tau^{-1}(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2) = \left| W^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_1}_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_2} \right| > W^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_2}_{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_2} = W_h(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2) \gg W^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_3}_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_4}. \quad (56)$$

Индекс h используется, чтобы отличать диагональную вероятность $W^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_2}_{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_2}$, описывающую прыжки с узла на узел, от другой диагональной вероятности $W^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}_1}_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}_2}$, соответствующей обратному времени релаксации для недиагональных компонент функции условной вероятности. Напомним, что Холстейн не различал τ^{-1} и W_h.

Температура T_3, при которой $\mu_h = \mu_t$, определяется из условия

$$W(\mathbf{m}) = \sum_{\mathbf{m}_1 \neq \mathbf{m}_2} W^{\mathbf{m}\mathbf{m}_1}_{\mathbf{m}\mathbf{m}_2} W^{\mathbf{m}_1 0}_{\mathbf{m}_2 0} \tau(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2), \quad (57)$$

которое в пределе малых J принимает вид

$$\left(\frac{2J\mathrm{e}^{-S_T}}{\hbar} \right)^2 = W_h \tau^{-1}. \quad (57)$$

Поскольку $\tau^{-1} > W_h$, то эта температура лежит выше, чем та, которую определил Холстейн из условия (19). Итак, существует интервал температур $T_2 < T < T_3$ (здесь T_2 — температура, ниже которой $\Delta E_p/z\hbar < \hbar/\tau$), где подвижность описывается вторым членом в (55) и обусловлена туннельным механизмом переноса. При $T < T_2$ реализуется зонный перенос (по узкой зоне). При $T > T_3$ основным является прыжковый перенос.

Итак, программа, сформулированная в п. 1 Введения, частично выполнена. Другие результаты, имеющие отношение к п. 1 Введения, будут описаны в разд. 4.

3. Статическая электропроводность ПМР в пределе малых J

При малых J суммирование по $\mathbf{m}$ в выражении (55) можно ограничить только ближайшими соседями ($\mathbf{m} = \mathbf{g}$). При $T > T_0$, где

$$kT_0 \simeq \frac{\hbar\omega_0}{2\mathrm{Arsh}(2\gamma)}, \quad (58)$$

выражение для $W_h(\mathbf{g})$ принимает вид (15) с показателем экспоненты

$$\frac{\tilde{E}_a(T)}{kT} = \Omega \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos \mathbf{q}\mathbf{g}) \operatorname{th} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{4kT} \simeq \frac{4E_a}{\hbar\omega_0} \operatorname{th} \frac{\hbar\omega_0}{4kT}. \quad (59)$$

Здесь и далее интегрирование по $\mathbf{q}$ проводится в пределах 1-й зоны Бриллюэна. Выражение справа в (59) получается в пренебрежении дисперсией оптических фононов, что допустимо, если удовлетворяется условие [12]

$$2\pi \frac{\Delta\omega}{\omega_0} \left(\frac{E_a}{\hbar\omega_0} \cosh \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right)^{1/2} > 1. \tag{60}$$

Энергия активации E_a определяется формулой

$$E_a = \Omega \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos \mathbf{qg}) \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{4} \simeq \frac{\gamma}{2} \hbar\omega_0, \tag{61}$$

где константа связи γ равна

$$\gamma = \frac{1}{2} \Omega \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 (1 - \cos \mathbf{qg}). \tag{62}$$

В этом же приближении выражение для S_T имеет вид

$$S_T = \gamma \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right). \tag{63}$$

Множитель η_2 в (11) при $T > T_0$ следует заменить:

$$\eta_2 \to \frac{J^2}{\hbar\omega_0} \left[\frac{1}{2} \Omega \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \omega_{\mathbf{q}}^2 (1 - \cos \mathbf{qg}) \cosh \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2kT} \right]^{-1/2} \simeq$$

$$\simeq 2 \frac{J^2}{E_a^{1/2} (\hbar\omega_0)^{3/2}} \operatorname{sh}^{1/2} \left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right). \tag{64}$$

Итак, при малых J выражение для прыжкового вклада в подвижность фактически совпадает с холстейновским. Однако выражения для второго вклада, который он ассоциировал с зонным, а мы называем туннельным, сильно отличаются. Выражение для τ_4^{-1} в нашем случае не содержит экспоненциально малого множителя $\exp(-E_a/kT)$ или $\exp(-2S_T)$, хотя и пропорционально J^4 [19,20],

$$\tau_4^{-1} \simeq \eta_1^4 \frac{\omega_0^2}{\Delta\omega} \left(\operatorname{sh} \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right)^{-2}. \tag{65}$$

Температурная зависимость в (65) отвечает двухфононному рассеянию ПМР (с испусканием и поглощением фонона и наоборот). В низшем приближении по J и по степеням $\exp(-S_T)$ и $\exp(-\tilde{E}_a/kT)$ имеем [19,20]

$$\mu_t = u_0 \frac{J^2}{\hbar\omega_0 kT} \frac{\Delta\omega}{\omega_0} \eta_1^{-4} \operatorname{sh}^2 \left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right) \exp \left(-2\gamma \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \right). \tag{66}$$

Эта формула применима, если $\eta_1 = J/E_a > \gamma^2 l^{-\gamma}$. При обратном неравенстве справедлив результат Холстейна, получающийся при замене $\tau^{-1} \to \tau_2^{-1} = W_h^{(2)}$.

Условие (57) для определения T_3 принимает вид

$$(\operatorname{sh} \alpha_3)^{3/2} \exp \left[-\frac{\operatorname{sh} \alpha_0}{\operatorname{sh} \alpha_3} \right] = \frac{\omega_0}{\Delta\omega} \gamma^{-1/2} \eta_1^4, \tag{67}$$

где $\alpha_0 = \hbar\omega_0/2kT_0$, т.е. $\operatorname{sh} \alpha_0 = 2\gamma$, $\alpha_3 = \hbar\omega_0/2kT_3$. Поскольку правая часть меньше 1, то из (67) следует, что $T_3 > T_0$.

4. О расширении пределов применимости теории

Снятие ограничений на величину различных безразмерных параметров теории означает не просто изменение вида формул, но может отражать изменение физической природы самого явления.

Рассмотрим сначала область высоких температур, $kT > \hbar\omega_0/2$. Здесь основными параметрами малости, содержащими J, являются

$$\eta_1 = \frac{J}{E_a}, \qquad \eta_2 = \frac{J^2}{\hbar\omega_0(E_a kT)^{1/2}}, \qquad \eta_3 = \frac{J^2}{kTE_a}, \qquad \frac{J}{kT}. \tag{68}$$

Отказ от условия $\eta_1 > 1$ означает переход к случаю поляронов большого радиуса [12].

Снятие ограничения $\eta_2 < 1$ (при $T > T_0$) означает переход к «адиабатическим» прыжкам [12,29]. Объясним это подробнее. Прыжок ПМР с узла на узел происходит в два этапа. На соседнем узле, где еще нет полярона, флуктуационным образом возникает «пустая» поляронная яма. Вероятность такого процесса пропорциональна $\exp(-E_a/kT)$. В эту пустую яму протуннелирует электрон, находившийся в соседней занятой поляронной яме. Процесс «схлопывания» опустевшей ямы обычно не рассматривается. Туннельный переход происходит только в условиях симметричного резонанса, когда энергетические электронные уровни в обеих ямах одинаковы. Время туннелирования t_1 порядка $\hbar/2J$. Время, $\bar{t}$, в течение которого сохраняются условия, благоприятные для симметричного резонанса, равно $\hbar(\hbar\omega_0)^{-1/2}(E_a kT)^{-1/4}$. Итак, $\bar{t}$ характеризует инерционность фононной системы, а t_1 — электронной. Ясно, что при $\bar{t} < t_1$ электрон не успевает протуннелировать, т.е. вероятность перехода мала и, наоборот, при $\bar{t} > t_1$ процесс характеризуется максимальной вероятностью (см. [24]).

Параметр η_2 есть квадрат отношения этих двух времен: $\eta_2 = (\bar{t}/t_1)^2$.

Ланг и Фирсов [28,29] вычислили вероятность $W(\mathbf{g})$ для $kT > \hbar\omega_0/2$ при произвольных η_2:

$$W(\mathbf{g}) = \frac{\omega_0}{2\pi}\exp(-E_a/kT)\int\limits_{x_0}^{\infty}\exp(-x)\,\frac{2\{1-\exp[-(\pi/2)\eta_2(1/\sqrt{x})]\}}{2-\exp[-(\pi/2)\eta_2(1/\sqrt{x})]}\,dx. \tag{69}$$

Здесь $x = (E - E_a)/kT$ — энергия некоторой «эффективной» частицы, отсчитанная от высоты барьера,

$$x_0 = \left[\frac{E_a}{kT}\left(\frac{\hbar\omega_0}{kT}\right)^2\right]^{1/3} \approx \left(\frac{\hbar}{\bar{t}kT}\right)^{4/3}. \tag{70}$$

Если неопределенность в энергии $\hbar/\bar{t}$, связанная с конечностью интервала $\bar{t}$ (см. выше), меньше kT, то $x_0 < 1$ и величина x_0 не входит в ответ. Предельные случаи $\eta_2 \ll 1$ и $\eta \gg 1$ в (69) соответствуют (11). Случай $x_0 > 1$ рассмотрели Арнольд и Холстейн [32,33]. Ряд по J им собрать не удалось, но они утверждают, что при $x_0 > 1$ отношения вклада $\sim J^4$ к вкладу $\sim J^2$ равно не η_2, а

$$\eta_2\,\frac{1}{x^{3/2}} \simeq \left(\frac{J}{\hbar\omega_0}\right)^2\frac{kT}{E_a} < 1. \tag{71}$$

В [25] показано, что при учете зависимости обменного интеграла от неравновесных атомных смещений (см. (37)) в высокотемпературном пределе $kT > \hbar\omega_0/2$ при $\eta_2 < 1$ в формуле (10) для $W_h^{(2)}$ меняется показатель экспоненты:

$$-\frac{E_a}{kT} \to -\frac{E_a}{kT} + \frac{kT}{\varepsilon}, \tag{72}$$

где

$$\varepsilon^{-1} = 4\Omega \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{(1-\cos \mathbf{qg})}{\hbar\omega_\mathbf{q}} \delta_\mathbf{q}^2 - \frac{1}{E'_a} \left\{ \Omega \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} (1-\cos \mathbf{qg}) \delta_\mathbf{q} \gamma_\mathbf{q} \right\}^2, \tag{73}$$

$\delta_\mathbf{q}$ и $\gamma_\mathbf{q}$ определены в разд. 1, E'_a отличается от E_a заменой $|\gamma_\mathbf{q}|^2 \to |\gamma_\mathbf{q}|^2 + |\delta_\mathbf{q}|^2$ в формуле (61). Выражение (73) можно приближенно представить в виде

$$\varepsilon^{-1} \simeq \frac{1}{M\omega_0^2\rho^2} \left(\xi_1 - \xi_2 \frac{E_a}{E'_a} \right) > 0, \tag{73a}$$

где ξ_1 и ξ_2 — числа порядка единицы. Итак, по порядку величины второй член в (72) равен отношению среднеквадратичного смещения атомов к квадрату длины ρ^2, на которой спадает обменный интеграл J (см. в конце разд. 1). Следует также заменить $E_a \to E'_a$ в предэкспоненте, т.е. в выражении для η_2. Если $\eta_1 < 1$, $\eta_3 = J^2/E_a kT < 1$, но $\eta_2 > 1$ и $J/kT > 1$, то в выражении (10) следует заменить $E_a \to E_a - J$ (72), т.е. прыжковая подвижность возрастает.

Обсудим теперь вклад в μ_h за счет прыжков на более удаленные узлы с вектором $\mathbf{G}$ ($|\mathbf{G}| > |\mathbf{g}|$). Если $|\gamma_\mathbf{q}|^2\hbar\omega_\mathbf{q}$ плавно убывает с ростом $\mathbf{q}$, то $E_a(\mathbf{G})$ возрастает с ростом $\mathbf{G}$:

$$E_a(\mathbf{G}) = \frac{1}{4}\Omega \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} |\gamma_\mathbf{q}|^2 \hbar\omega_\mathbf{q}(1-\cos \mathbf{qG}). \tag{74}$$

Из (74) видно, что $\lim\limits_{G\to 0} E_a(\mathbf{G}) \to E_b/2 > E_a(\mathbf{g})$.

Для прыжка на узел, удаленный на расстояние $\mathbf{G} = \mathbf{i}n_1g_1 + \mathbf{j}n_2g_2 + \mathbf{k}n_3g_3$, разложение функции $F(\mathbf{G})$, стоящей перед активационной экспонентой (для прыжков между ближайшими соседями она обозначалась как $f(\eta_2)$), начинается с члена $\eta_3^{n_1+n_2+n_3-1}$ (см. [24]). Соответственно, вклад $\sim J^{2n}$ в вероятность прыжка на большое расстояние вместо η_2^n в $F(\mathbf{G})$ будет содержать множитель $\eta_2^{n-m-p}\eta_3^m\eta_1^{2p} \ll \eta_2^n$ ($m = n_1 + n_2 + n_3 - 1$). Итак, при $\eta_3 \ll 1$ вероятность прыжка на все более удаленные узлы убывает за счет убывания $F(\mathbf{G})$ и возрастания $E_a(\mathbf{G})$. Однако из (51) видно, что для соответствующих парциальных вкладов в подвижность с ростом G растет G_x^2 и возрастает число возможных конечных состояний для прыжков. Поэтому уже при $\eta_2 \lesssim 1$ температурная зависимость прыжкового вклада в подвижность может быть довольно сложной, а сам вклад μ_h гораздо бóльшим, чем в случае учета прыжков только между ближайшими соседями. Случай $\eta_3 > 1$

для прыжкового механизма вообще не изучен. Для оценки туннельного вклада в подвижность μ_t при не слишком малых $\eta_3 \lesssim 1$ надо изучить зависимость «недиагональных» вероятностей $W^{\mathbf{mm}_1}_{\mathbf{mm}_2}$ и времен релаксации $\tau(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)$ от параметра η_3. В [24], приложение 3, ч. 2, и в [26] показано, что при $T > T_0$ вклад $\sim J^{2n+1}$ имеет вид

$$W^{\mathbf{mm}_1}_{\mathbf{mm}_2} = \frac{J}{\hbar}\,\eta_3^n \mathrm{e}^{-\alpha_n S_T}\,\mathrm{e}^{-\gamma_n (E_a/kT)}. \tag{75}$$

В низшем порядке ($n = 0$) имеем $\alpha_0 = 1$, $\gamma_0 = 0$. С ростом n числа α_n убывают, а γ_n растут, но не превышают значений порядка 1, т.е. экспоненциальная малость ослабляется и с ростом η_3 все бо́льшими становятся вклады с бо́льшим индексом n, причем туннельный вклад μ_t может стать преобладающим даже при довольно высоких температурах. Поведение $[\tau(\mathbf{G})]^{-1}$ при произвольных η_3 исследовали Брыксин и Фирсов [34]. Члены ряда (по степеням J) разделяются на две группы: члены 1-й группы (типа τ_4^{-1}) активационного фактора не содержат, а члены 2-й группы (типа τ_2^{-1}) экспоненциально малы ($\sim \mathrm{e}^{-2\gamma}$). Основными параметрами разложения оказываются η_1, γ^{-1} и $\xi = J^2/E_a\hbar\Delta\omega$. Первую совокупность членов удалось просуммировать при произвольных η_3 и ξ. Она по-прежнему пропорциональна η_1^4 (как и τ_4^{-1}), но имеет дополнительный малый множитель порядка $\exp(-a\xi)$, где $a \geqslant 1$, т.е. значения T_3 смещаются в сторону более высоких температур. Для того чтобы совокупность членов типа τ_4^{-1} давала больший вклад, чем совокупность типа τ_2^{-1}, необходимо выполнение критерия $a\xi < 4E_a/\hbar\omega_0$, что эквивалентно условию отсутствия локальных колебаний в фононном спектре, которые могут возникать из-за того, что носитель тока долго (по сравнению с ω_0^{-1}) сидит на узле решетки (подробнее см. в [24]).

Напомним, что параметр η_3 равен квадрату отношения двух времен ($\eta_3 = t_0^2/t_1^2$): времени перескока $t_0 = \hbar(E_a kT)^{-1/2}$ и времени $t_1 \simeq \hbar/J$, характеризующего скорость расплывания волнового пакета для «голого» электрона, посаженного на узел. В случае $\eta_3 > 1$ электронный волновой пакет успеет расплыться на большее количество узлов, прежде чем снова будет автолокализован. Электрон выскакивает из поляронной ямы и «пробегает» много элементарных ячеек, прежде чем будет локализован в другой поляризационной яме. Такой механизм было предложено назвать эстафетным [24]. К сожалению, конкретных выражений для μ_h и μ_t в случае $\eta_3 > 1$ получить не удалось (ряды по степеням параметра η_3 просуммировать трудно). В случае низких температур, когда определяющим вкладом в подвижность является туннельный, результаты еще более скудные. Лучше всего исследована зависимость $\tau^{-1}(\mathbf{G})$ от η_1, γ^{-1} и $\xi = J^2/E_a\hbar\Delta\omega$ (см. [19,20,24,34]). Недиагональные вероятности $W^{\mathbf{mm}_1}_{\mathbf{mm}_2}$ при $T < T_0$ практически не исследовались. В работах [19,20] Ланг и Фирсова изучалась структура рядов для «вершин», что фактически одно и то же при $(1/z)\Delta E_p < kT$. Основными безразмерными параметрами при $T < T_0$ являются (согласно [19,20])

$$\eta_1 = \frac{J}{E_a}, \qquad \eta_2' = \frac{J^2}{2E_a\hbar\omega_0}, \qquad \eta_2'' = \eta_2' \ln\gamma, \qquad \xi = \frac{J^2}{E_a\Delta\omega\hbar}. \tag{76}$$

Очевидно, что структура рядов (по степеням этих параметров) для вершин, недиагональных вероятностей и для ширины поляронной зоны ΔE_p должна быть похожей. В рамках двухузельной модели при $\eta_1 \ll 1$ Холстейн [12] оценил в адиабатическом приближении расщепление двух уровней δE. Эта величина до какой-то степени характеризует ΔE_p. Результаты Холстейна можно представить в виде

$$\delta E = J\mathrm{e}^{-\gamma}(\pi\eta_2')^{1/2}\exp\left[\eta_2'\ln\left(\frac{1}{\eta_1}4\mathrm{e}^{1/2}\right)\right]. \qquad (77)$$

Два первых множителя в (77) соответствуют результату для ΔE_p в пределе малых J. Два последних множителя описывают перенормировку (уширение зоны) при $\eta_2' > 1$. Показатель экспоненты в (77) можно представить в виде

$$\eta_2'(1/2 + \ln 2) + \eta_2'' + \eta_2'\ln\left(\frac{\hbar\omega_0}{J}\right), \qquad (78)$$

т.е. помимо параметров γ, η_1, η_2' в теории может возникнуть независимый параметр $J/\hbar\omega_0$. Однако в случае, разобранном Холстейном, в явном виде он не возникает и может быть убран в определение η_1, η_2', η_2'' (см. (77)).

Еще более точное выражение для δE было недавно приведено в работе [35], однако и в нем не фигурирует отношение $J/\hbar\omega_0$ в качестве независимого параметра. К сожалению, для W, входящего в определение μ_t, результата, аналогичного (77), при произвольных параметрах (76) пока никем не получено. Если результат перенормировки будет похож на (77), то величина μ_t возрастет и переход от туннельного переноса к зонному может наступить раньше.

Согласно [35] в формуле (77) надо сделать следующие уточнения: 1) в предэкспоненту (77) следует ввести дополнительный множитель $\beta^{5/2}\lambda^{1-\beta}(1+\beta)^{-\beta}$, где $\beta = \sqrt{1-\lambda^{-2}}$; 2) в показатель экспоненты под знаком логарифма надо ввести дополнительнай множитель $(1/2)(1+\beta)$. Поскольку в наших обозначениях $\lambda^{-1} = \eta_1$, то эти поправки сводятся лишь к уточнению зависимости δE от малого параметра η_1 и дополнительной зависимости от отношения $J/\hbar\omega_0$ в явном виде не вносят. Поэтому мы ограничимся анализом выражения (77).

Иногда встречается утверждение, что теория возмущений неприменима даже в пределе $J \to 0$. При этом ссылаются на выражение (77), которое в пределе $J \to 0$ дает

$$\delta E = \hbar\omega_0\left(\frac{\gamma}{\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\gamma}.$$

Напомним, что само адиабатическое приближение в пределе малых J неприменимо. Интересно понять, при каких значениях J результаты двух приближений сшиваются. Согласно [19,20] из (76) следует, что недиабатическая теория возмущений по степеням J справедлива вплоть до значений $\eta_2'' \simeq 1$, т.е. при ($J/\hbar\omega_0 \lesssim \gamma/\ln\gamma > 1$). В области значений $\eta_2'' \simeq 1$ оба решения для δE сшиваются. Покажем это. Сшивание происходит, когда дополнительный множитель в (77) сравнивается с 1.

Значение η_2', при котором это происходит, обозначим через x:

$$\left(\frac{1}{\pi x}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{x}{2}(1+\ln 4\gamma)+\frac{1}{2}x\ln\frac{1}{x}\right] \simeq 1. \tag{79}$$

Итак, надо решить трансцендентное уравнение

$$x(1+\ln 4\gamma)+(1+x)\ln\frac{1}{x}-\ln\pi = 0. \tag{80}$$

Холстейн [12] предложил считать $x \simeq 1$, что соответствует $(J/\hbar\omega_0)^2 \simeq$ $\simeq \gamma \gg 1$. В этом случае левая часть в (79) равна не 1, а $(4\gamma/\pi)^{1/2}$. Точность можно повысить, полагая $x = \ln\pi(1+\ln 4\gamma)^{-1}$. Тогда левая часть (79) равна $(\ln 4\gamma/\ln\pi)^{1/2}$, что не очень сильно отличается от 1 даже при достаточно больших γ. Фактически такое значение x соответствует значению $\eta_2'' = \eta_2' \ln 4\gamma \simeq 1$, что совпадает с утверждением Ланг и Фирсова [19,20]. Итак, адиабатическое приближение становится справедливым не при $(J/\hbar\omega_0)^2 \gtrsim 1$, а при бо́льших значениях параметра J, определяемых из условия

$$\left(\frac{J}{\hbar\omega_0}\right)^2 > \frac{\gamma}{\ln 4\gamma} > 1. \tag{81}$$

При меньших значениях J можно ограничиваться первыми членами в ряду теории возмущений по J.

Решая уравнение (80) численно, можно получить $x = f(\gamma)$, где $f(\gamma) < 1$ при $\gamma > 1$, но основное утверждение $J/\hbar\omega_0 > 1$ сохраняется. Напомним, что формула (77) получена в рамках двухузельной модели. В работе [35] проделаны численные расчеты не только для двухузельной, но и для четырех- и шестиузельной моделей. Графики зависимости δE от γ (в обозначениях [35] $\gamma = g^2$) при различных значениях $J/\hbar\omega_0$ (в обозначениях [35] $J = t$) приведены только для двухузельной модели. При $J/\hbar\omega_0 \simeq 1.1$ точные результаты ближе к данным теории возмущений, а при $J/\hbar\omega_0 \simeq 2$ и $4 < \gamma < 8$ они лучше согласуются с адиабатическим приближением. Это не противоречит критерию (81).

5. Общие выражения для подвижности в (k–R)-представлении [26,27]

Как отмечалось в разд. 2, описание движения в узельном пространстве эффективно, пока $(1/z)\Delta E_p < kT$, т.е. когда функция распределения по поляронной зоне $n(\mathbf{k}) \simeq \text{const}$. По мере понижения температуры или увеличения J и уменьшения γ (но при $\gamma > 1$), т.е. с ростом ΔE_p, область низких температур, где этот подход недостаточен, расширяется. Приведенные далее формулы справедливы в этой области температур и переходят в полученные выше (разд. 2) по мере роста T. Таким образом, этот подход позволяет единым образом описать зонный туннельный и прыжковый механизмы переноса.

Пусть $n(\mathbf{k})$ — точная равновесная одночастичная функция распределения для ПМР. Выберем нормировку в виде (в расчете на один ПМР)

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) = \Omega \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, n(\mathbf{k}) = 1. \tag{82}$$

Точное выражение для подвижности согласно [24,27] равно

$$\mu_{xx} = \frac{e}{2kT}\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}R_x^2\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k})F(\mathbf{k},\mathbf{R};t) =$$

$$= -\frac{e}{kT}\lim_{s\to\infty} s^2 \sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k})\left.\frac{\partial^2 F(\mathbf{k},\boldsymbol{\kappa};s)}{\partial\kappa_x^2}\right|_{\kappa=0}. \tag{83}$$

Суммы по $\mathbf{k}$ в (83) определены, как в (82), и интегрирование по $\mathbf{k}$ производится в пределах 1-й зоны Бриллюэна. Функция $F(\mathbf{k},\mathbf{R};t)$ определяется формулой

$$F(\mathbf{k},\mathbf{R};t) = \sum_{\boldsymbol{\Delta}} \mathrm{e}^{-2i\mathbf{k}\boldsymbol{\Delta}}\, P_{\mathbf{R}+\boldsymbol{\Delta},0}^{\mathbf{R}-\boldsymbol{\Delta},0}(t). \tag{84}$$

Функция условной вероятности в узельном пространстве, P, определена формулой (43). В случае узких зон (перенормированных)

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k})\mathrm{e}^{-2i\mathbf{k}\boldsymbol{\Delta}} = \delta_{\boldsymbol{\Delta},0}, \tag{85}$$

и мы возвращаемся к формуле (42).

$F(\mathbf{k},\boldsymbol{\kappa};s)$ — фурье-компонента по координате $\mathbf{R}$ и результат преобразования Лапласа по t функции $F(\mathbf{k},\mathbf{R};t)$, имеющей много общего с одночастичной вигнеровской матрицей плотности (подробнее см. в [27] и [24], гл. 1, ч. 2, § 10).

Уравнение для $F(\mathbf{k},\boldsymbol{\kappa};s)$ типично для метода КП [14]:

$$\left\{s + \frac{i}{\hbar}\left[\varepsilon\left(\mathbf{k}+\frac{\boldsymbol{\kappa}}{2}\right) - \varepsilon\left(\mathbf{k}-\frac{\boldsymbol{\kappa}}{2}\right)\right]\right\}F(\mathbf{k},\boldsymbol{\kappa};s) = 1 + \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k},\mathbf{k}';\boldsymbol{\kappa})F(\mathbf{k}',\boldsymbol{\kappa};s). \tag{86}$$

Здесь $W(\mathbf{k},\mathbf{k}';\boldsymbol{\kappa})$ — вероятность рассеяния квазичастицы из состояния $\mathbf{k}$ в $\mathbf{k}'$ при наличии слабой пространственной дисперсии ($\boldsymbol{\kappa} \neq 0$). Эти величины определяются с помощью графической техники. Можно избежать решения уравнения (86) в присутствии слабой пространственной дисперсии ($\boldsymbol{\kappa} \neq 0$, $\boldsymbol{\kappa} \to 0$). Кудинов и Фирсов [27] показали, что, используя формулы (83) и (86), можно представить σ_{xx} в виде

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{2kT}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} n(\mathbf{k}_1)W_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2) +$$

$$+ \frac{e^2}{2kT}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} n(\mathbf{k}_1)\left[v_x(\mathbf{k}_1)\delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} - iW_1(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)\right]\times$$

$$\times \lim_{s\to 0} P(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_3;s)\left[v_x(\mathbf{k}_3)\delta_{\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4} - iW_1(\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4)\right]. \tag{87}$$

Здесь

$$W_1(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \left[\frac{\partial W(\mathbf{k},\mathbf{k}',\kappa)}{\partial \kappa_x}\right]_{\kappa=0}, \quad W_2(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \left[\frac{\partial^2 W(\mathbf{k},\mathbf{k}',\kappa)}{\partial \kappa_x^2}\right]_{\kappa=0}. \tag{88}$$

$v_x(\mathbf{k}) = (1/\hbar)[\partial\varepsilon(\mathbf{k})/\partial k_x]$, где $\varepsilon(\mathbf{k})$ — точная (перенормированная) энергия квазичастицы. $P(\mathbf{k},\mathbf{k}';s)$ есть функция, полученная преобразованием Лапласа от функции $P(\mathbf{k},\mathbf{k}';t)$, 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. Ее формальное определение похоже на (43) с заменой $\mathbf{m} \to \mathbf{k}$, $\mathbf{m}_1 = \mathbf{m}_2 \to \mathbf{k}'$. Уравнение для $P(\mathbf{k},\mathbf{k}';s)$ имеет вид [27]

$$sP(\mathbf{k},\mathbf{k}';s) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}_1} W(\mathbf{k},\mathbf{k}_1)\left[P(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}';s) - P(\mathbf{k},\mathbf{k}';s)\right]. \tag{89}$$

Вероятности рассеяния квазичастиц из состояния $\mathbf{k}$ в состояние $\mathbf{k}_1$ соответствует величина W из (86) при $\kappa = 0$, т.е. в отсутствие пространственной дисперсии. В [27] показано, как из формул (83) и (87) можно получить известные результаты в случае слабой связи с фононами и в пределе очень сильной связи для ПМР. Переход от (83) к (42) для ПМР был пояснен выше. В случае слабой связи, $\lambda \ll 1$, в (87) надо пренебречь величинами W_1 и W_2, ибо они пропорциональны λ^2. Из (89) следует, что $P(\mathbf{k},\mathbf{k}') \sim \tau \sim \lambda^{-2}$ и мы приходим к обычному выражению для σ_{xx}.

В случае сильной связи 1-й член в (87) описывает прыжковый вклад. Для ПМР при $T > T_2$ имеем $n(\mathbf{k}_1) \to 1$, т.е. 1-й член в (87) пропорционален

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} W_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2) = \sum_{\mathbf{m}} X_m^2 W_h(\mathbf{m}). \tag{90}$$

В [27] и в [24] (гл. 1, ч. 2, § 10) показано, что 2-й член в (87) описывает туннельный вклад при $\Delta E_p < \hbar/\tau$. Там же можно найти и стохастическую интерпретацию функций F и P. Подобного рода подход особенно эффективен при описании переноса в сильном электрическом поле E и эффекта Холла, поскольку в случае ПМР действие E и магнитного поля H в основном осуществляется через их влияние на вероятности перехода.

6. Высокочастотная проводимость [36–38]

Чтобы вычислить безразмерный коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$ или коэффициент $K(\omega)$, имеющий размерность обратной длины, достаточно найти комплексную проводимость $\sigma(\omega)$. Полная диэлектрическая проницаемость среды равна

$$\varepsilon(\omega) = \bar{\varepsilon}(\omega) + \Delta\varepsilon(\omega), \tag{92}$$

где $\Delta\varepsilon(\omega)$ отвечает основному механизму поглощения в рассматриваемом диапазоне частот, а $\bar{\varepsilon}(\omega)$ включает все прочие механизмы. Разобьем в (92) все функции на вещественные ($'$) и мнимые ($''$) части. В случае слабого поглощения, когда $\varepsilon''/\varepsilon' \ll 1$, получим (полагая $\bar{\varepsilon}'' = 0$)

$$K(\omega) = \frac{\omega}{c}\,\alpha(\omega), \qquad \alpha(\omega) = \frac{\Delta\varepsilon''(\omega)}{2\sqrt{\varepsilon'}}, \tag{93}$$

где

$$\Delta\varepsilon(\omega) = i\,\frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega}. \tag{94}$$

При $\Delta\varepsilon'/\varepsilon' \ll 1$ показатель преломления $n(\omega) = \sqrt{\varepsilon'(\omega)}$ равен

$$n = \bar{n} + \Delta n, \qquad \bar{n} = \sqrt{\bar{\varepsilon}}, \qquad \Delta n = \Delta\varepsilon'/2\bar{n}'. \tag{95}$$

Формулу Кубо для $\sigma_{xx}(\omega)$ удобно переписать в виде [36]

$$\sigma_{xx}(\omega) = -\frac{1}{V\hbar\omega}\int\limits_0^\infty \mathrm{e}^{-i\omega t - st}\,\{\langle j_x(t)j_x(0)\rangle - \langle j_x(0)j_x(t)\rangle\}\,dt\, +$$

$$+\frac{i}{V\omega}\int\limits_0^\beta \langle j_x(-i\hbar\lambda)j_x(0)\rangle d\lambda. \tag{96}$$

Вклад в $\sigma'(\omega) = \operatorname{Re}\sigma_{xx}(\omega)$ будет давать лишь 1-й член в (96). Графическая техника для вычисления корреляторов тока, входящих в (96), была разработана при вычислении статической электропроводности, и все различие состоит в замене $s \to s + i\omega$ при вычислении интегралов по времени.

Далее будут приведены основные результаты для «внутризонного» поглощения и для межзонных оптических переходов.

Внутризонное поглощение. Под внутризонным поглощением здесь понимается неактивационный переход полярона с узла на узел под действием света. Впервые этот вопрос обсуждался Иглсом [39]. Формула Кубо для $\sigma_{xx}(\omega)$ применялась в работах Рейка [40] и Клингера [41]. В прыжковой области ($T > T_0$) при малых $\eta_3 = J^2/kTE_a$ в соответствии с [39–43] из (96) получим

$$\sigma'(\omega) = neu_0\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\frac{J^2}{\sqrt{E_a kT}}\,\frac{1-\exp(-\beta\hbar\omega)}{\hbar\omega}\exp\left[-\frac{(\hbar\omega - 4E_a)^2}{16kTE_a}\right]. \tag{97}$$

При $\omega \to 0$ результат переходит в (12). Формула (97) не точна. Используя подход, развитый для вычисления спектров поглощения света в F-центрах, Мирлин и др. [38] получили для $\sigma'(\omega)$ более точную формулу с учетом слабой частотной асимметрии,

$$\sigma'(\omega) = \sigma(0)f(\omega), \tag{98}$$

$$f(\omega) = \frac{\operatorname{sh}\alpha}{\alpha}\left(1+x^2\right)^{-1/4} \exp\left\{\Gamma\left[-x\operatorname{Arsh}x + \left(1+x^2\right)^{1/2} - 1\right]\right\},$$

$$\alpha = \frac{\hbar\omega}{2kT}, \qquad x = \frac{\omega}{\Gamma\omega_0}; \qquad \Gamma = \frac{8E_a kT}{(\hbar\omega_0)^2}.$$

Разлагая в ряд по $x < 1$, получим переход от (98) к (97). Случай $T < T_0$ при малой дисперсии, $\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$, обсуждался в [42,43], а при $\Delta\omega/\omega_0 \simeq 1$ — в [38].

Учет возможности индуцированных прыжков на более отдаленные узлы (в формулах (97) и (98) учтены лишь переходы между ближайшими соседями) приводит к дополнительной асимметрии «колокола». Суммарная кривая $\sigma'(\omega)$ будет представлять собой набор гауссовых кривых (типа (97)), расположенных в интервале от $E_a(\mathbf{g})$ до $E_b/2$ и убывающих по амплитуде (при $\eta_3 < 1$) [24]. С ростом η_2 возникает дополнительное уширение, ибо на высоте $4E_a$ над низшим поляронным уровнем имеется непрерывный спектр в энергетическом интервале $2zJ$ (z — число ближайших соседей), и при $\eta_3 > 1$ выбитый светом из поляронной ямы электрон посредством туннельного эффекта может сместиться на большое расстояние, прежде чем снова будет автолокализован («эстафетный» механизм). Подробнее об этом см. в [43] и [24], (гл. 2, ч. 2, § 2).

Колоколообразная кривая для $K(\omega)$ в случае поглощения на свободных носителях тока, а не на F-центрах, наблюдалась для многих веществ и была подробно проанализирована на примере рутила TiO_2 [38]. С учетом других экспериментальных фактов это позволило впервые надежно показать, что носителями тока в рутиле являются ПМР [44].

Несколько слов о внутризонном поглощении в области малых частот $\hbar\omega \ll 4E_a$, т.е. слева от колокола. Прыжковый вклад здесь слабо растет с ростом ω, а туннельный вклад описывается выражением типа формулы Друде–Лоренца:

$$\sigma_t'(\omega) \simeq \sigma_t(0)\left[1 + \omega^2\tau^2(\omega)\right]^{-1}. \tag{99}$$

При $\omega > \omega_0$ величина $\tau(\omega)$ начинает немонотонно зависеть от ω. Детально область $\omega_0 < \omega < 4E_a/\hbar$ не исследовалась.

Межзонные оптические переходы. Иглс [39] исследовал оптические переходы между двумя разными поляронными зонами (при $\eta_3 \ll 1$) и переход из широкой валентной зоны в узкую поляронную. Кудинов и Фирсов [36,43] рассматривали переходы с глубокого атомного уровня (или из узкой электронной зоны), электроны которого слабо связаны с фононами, в узкую поляронную зону при $\eta_3 < 1$ и $\eta_3 > 1$, а также переход из узкой валентной поляронной зоны в широкую зону проводимости, в которой связь электронов с фононами слабая [43]. В качестве примера рассмотрим переход с глубокого атомного уровня в узкую поляронную зону [36]. Если переход разрешен, а связь с фононами электронов, находящихся на этом нижнем уровне, слабая, то из (96) следует

$$\sigma(\omega) = \Delta\sigma(\omega) + \frac{ie^2 n_0}{2m} f_{01} \frac{2\Omega + \omega}{\Omega(\Omega + \omega)}, \tag{100}$$

где f_{01} — безразмерная сила осциллятора, m — масса свободного электрона, $\hbar\Omega$ — расстояние между глубоким уровнем (индекс 0) и центром неперенормированной верхней зоны 1, $\hbar\tilde{\Omega} = \hbar\Omega - E_b$ — расстояние между глубоким уровнем и центром поляронной зоны, образовавшейся из зоны 1, n_0 — концентрация электронов на нижнем уровне 0.

Второй член в (100) плавно зависит от частоты, и все особенности содержатся в первом члене:

$$\Delta\sigma(\omega) = \frac{e^2 n_0}{2m} f_{01} \frac{\Omega_0}{\omega} \int\limits_0^\infty \exp\left[-S_T^{(0)} + F_0^*\left(t + \frac{i\hbar\beta}{2}\right)\right] \times$$

$$\times \exp[-i(\omega - \tilde{\Omega})t] \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) dt, \qquad (101)$$

где

$$S_T^{(0)} = \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}|^2 \operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}\beta}{2}\right);$$

$$F_0^*\left(t + \frac{i\hbar\beta}{2}\right) = \frac{1}{2N}\sum_{\mathbf{q}} \frac{|\gamma_{\mathbf{q}}|^2}{\operatorname{sh}(\hbar\omega_{\mathbf{q}}\beta/2)} \cos\left[\omega_{\mathbf{q}}\left(t - \frac{i\hbar\beta}{2}\right)\right],$$

τ^{-1} есть некоторое характерное затухание. По сравнению со случаем внутризонных переходов между соседними узлами в (101) отсутствует множитель $1 - \cos(\mathbf{qg})$ под знаком суммы по $\mathbf{q}$. Функция $F_0^*(t + i\hbar\beta/2)$ убывает с ростом t не медленнее, чем $O(t^{-3/2})$. Поэтому $\exp(F_0^*) \to 1$ при $t \to \infty$, и при $\omega = \tilde{\Omega}$ в (101) имеет место сингулярность вида $(\omega - \tilde{\Omega})^{-1}$. Эта сингулярность отвечает бесфононному пику. Интегральная интенсивность этого пика — порядка $\exp(-S_T^{(0)})$. Этот фактор отражает конечную вероятность того, что к моменту электронного перехода фононная система флуктуационным образом сместится в новое положение, соответствующее нахождению электрона на верхнем уровне (см. [24], гл.3, § 3). Этот фактор аналогичен фактору Дебая–Уоллера.

Кроме бесфононного пика возникают еще два всплеска разной интенсивности на частотах $\tilde{\Omega} \pm \omega_0$. Справа от бесфононного пика появляется колоколообразный горб такого же вида, как и при внутризонном поглощении, и имеющий такую же природу. Кривые для $K(\omega)$ и $\Delta n(\omega)$ приведены в [36] и в [24].

При рассмотрении межзонных оптических переходов из узкой поляронной валентной зоны в широкую зону проводимости [43] и из широкой валентной зоны в узкую поляронную зону проводимости [39] получены качественно похожие результаты: частотная зависимость на крае поглощения не степенная, а почти гауссова, и край поглощения при $kT > \hbar\omega_0/2$ сильно смещается при изменении температуры.

Интересные экспериментальные возможности открывают теоретические исследования оптического поглощения ПМР в магнитном поле [45] и в сильном электрическом поле [46]. Однако даже в статическом случае влияние полей H и E требует особого рассмотрения, и этому посвящены следующие два раздела.

7. Явления переноса в сильном электрическом поле [47–52]

Легче всего учесть влияние сильного электрического поля $\mathbf{E}$ на движение ПМР в прыжковом режиме. Если предположить, что разница в энергии ПМР на двух соседних узлах есть $e\mathbf{gE}$, то при вычислении вероятности прыжка эта величина (деленная на $\hbar$) будет фигурировать как частота. Поэтому и ответ для $\sigma_h(E)$ будет похожим на (97):

$$j = E\sigma_h(E); \qquad \sigma_h(E) = \sigma_h(0)\frac{\mathrm{sh}(eaE/2kT)}{(eaE/2kT)} \exp\left[-\frac{(eaE)^2}{16kTE_a}\right]. \tag{102}$$

Здесь $\sigma_h(\omega)$ — статическая электропроводность в прыжковом режиме в слабом электрическом поле. Более детальное обсуждение этого вопроса на качественном уровне можно найти в работе Эфроса [53] и в книге [54]. Далее мы получим результат (102) как частный случай исходя из общей теории явлений переноса в сильном электрическом поле E. При этом удается описать влияние E и на туннельный механизм переноса и предсказать новый эффект — электрофононный резонанс.

В [48] показано, что наиболее общим определением для тока в произвольном по величине электрическом поле является (если пренебречь межэлектронным взаимодействием)

$$j = -n \lim_{s\to 0} \lim_{V\to\infty} s^2 \int\limits_0^\infty dt e^{-st} \frac{1}{Z_0} \mathrm{Sp}\left\{e^{-\beta\mathcal{H}}[D(t) - D(0)]\right\}, \tag{103}$$

где $\beta = (kT)^{-1}$, $Z_0 = \mathrm{Sp}\{\exp(-\beta\mathcal{H}_{\mathrm{ph}})\}$, гамильтониан системы $\mathcal{H}$ равен

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathrm{ph}} + \mathcal{H}_e^{(0)} + \mathcal{H}_{\mathrm{int}}, \tag{104}$$

где 1-й член — гамильтониан фононного поля, $\mathcal{H}_e^{(0)}$ — гамильтониан перенормированных носителей тока (в нашем случае ПМР). Оператор дипольного момента $\mathbf{D} = \mathbf{d} + \mathbf{d}'$ содержит диагональную ($\mathbf{d}$) и недиагональную ($\mathbf{d}'$) по узлам части,

$$\mathbf{d} = e\sum_{\mathbf{m}} R_{\mathbf{m}} a^+_{\mathbf{m}} a_{\mathbf{m}}; \qquad \mathbf{d}' = e\sum_{\mathbf{m},\mathbf{g}} \mathbf{L}(\mathbf{g}) a^+_{\mathbf{m}+\mathbf{g}} a_{\mathbf{m}}. \tag{105}$$

В присутствии внешнего электрического поля имеем гамильтониан

$$H = \mathcal{H} - \mathbf{DE}. \tag{106}$$

В формуле (103) $D(t)$ — оператор дипольного момента в гейзенберговском представлении с оператором H. В [48] строго доказано, что в формуле (103) стоящий в квадратных скобках оператор $\mathbf{D}$ можно заменить на его диагональную часть, т.е. на $\mathbf{d}$. Для оператора $\mathbf{D}$, входящего в определение H (см. (106)), этого делать нельзя, но можно включить $\mathbf{d}' = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{L}(\mathbf{k}) a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}$ (после перехода в $\mathbf{k}$-представление) в определение $\mathcal{H}_e$:

$$\mathcal{H}_e = \mathcal{H}_e^{(0)} - \mathbf{d}'\mathbf{E} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}, \tag{107}$$

где $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) - e\mathbf{EL}(\mathbf{k})$. Заметим, что порядок перехода к пределам $s \to 0, V \to \infty$ должен быть именно таким. Обратный порядок отвечает эффекту поля.

Наиболее удобно вести вычисления в представлении «штарковской лестницы» (α-представление). Это частный случай хаустоновского представления [55]. В α-представлении гамильтониан $\mathcal{H}_e - \mathbf{dE}$ диагонализуется,

$$\mathcal{H}_e - \mathbf{dE} = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha,$$

$$\varepsilon_\alpha = -eEX_\mathbf{m} + \varepsilon(\mathbf{k}_\perp); \qquad \varepsilon(\mathbf{k}_\perp) = \frac{1}{N_x}\sum_{k_x} \varepsilon(\mathbf{k}). \tag{108}$$

Здесь N_x — нормировочное число при суммировании по k_x. Например, оно равно числу атомов решетки вдоль оси $\mathbf{x}$, если $\mathbf{E} \parallel \mathbf{x}$ и $\mathbf{x}$ есть одна из осей симметрии кристалла. Из (108) видно, что набор квантовых чисел содержит $\mathbf{k}_\perp = \{k_y, k_z\}$ и $X_\mathbf{m} = (\mathbf{R}_\mathbf{m})_x$. Связь между α- и $\mathbf{k}$-представлениями описывается линейными соотношениями

$$a_\alpha = \frac{1}{N_x^{1/2}} \sum_{k_x} a_\mathbf{k} \exp\Big[ik_x X_\mathbf{m} + i\chi(\mathbf{k})\Big], \tag{109}$$

где $\chi(\mathbf{k})$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$eE\frac{\partial \chi}{\partial k_x} = \varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}_\perp). \tag{110}$$

Поэтому выражение в квадратных скобках (109) можно представить в виде

$$ik_x X_\mathbf{m} + i\chi(\mathbf{k}) = -\frac{i}{eE}\int_0^{k_x} [\varepsilon_\alpha - \varepsilon(\mathbf{k}')]dk_x'. \tag{111}$$

В этом α-представлении удается представить формулу (103) для тока в виде

$$\lim_{s\to 0}\lim_{V\to\infty} s^2 \sum_{\alpha,\alpha'} (X_{\mathbf{m}'} - X_\mathbf{m}) M_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'}. \tag{112}$$

Итак, задача о вычислении тока сведена к «распутыванию» величины $M_{\alpha\alpha'}^{\alpha\alpha'}$, которая теперь представляется в виде бесконечного ряда по степеням

$$\left[s - \frac{i}{\hbar} eE(X_{\mathbf{m}_1} - X_{\mathbf{m}_2})\right]^{-1},$$

что соответствует вкладу от «квазисвободных» сечений, и по степеням s^{-1}, что, как и раньше (при слабых полях), соответствует вкладу от «свободных» сечений. Суммирование по степеням s^{-1} приводит к некоторому транспортному уравнению в α-представлении (подробнее см. в [48] и [24], гл. 4), справедливому при любых значениях электрического поля. Далее приводится точное выражение для тока в виде ряда по степеням E^{-1}, которое особенно удобно для последующего анализа в случае ПМР:

$$j_x = en \sum_{\mathbf{k}'_\perp} n(\mathbf{k}'_\perp) \sum_{X_\mathbf{m}, \mathbf{k}_\perp} X_\mathbf{m} \tilde{W}^{0X_\mathbf{m}}_{0X_\mathbf{m}}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp). \quad (113)$$

Здесь $\tilde{W}$ — «эффективная» вероятность перехода из состояния $\alpha' = \{0, \mathbf{k}'_\perp\}$ в состояние $\alpha = \{X_\mathbf{m}, \mathbf{k}_\perp\}$. Она записывается в виде ряда «по степеням $1/E$»

$$\tilde{W}^{X_\mathbf{m}X_{\mathbf{m}'}}_{X_\mathbf{m}X_{\mathbf{m}'}}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{k}'_\perp) = W^{X_\mathbf{m}X_{\mathbf{m}'}}_{X_\mathbf{m}X_{\mathbf{m}'}}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{k}'_\perp) +$$

$$+ \sum_{\mathbf{k}''_\perp} \sum_{\substack{X_{\mathbf{m}_1}, X_{\mathbf{m}_2} \\ (X_{\mathbf{m}_1} \neq X_{\mathbf{m}_2})}} W^{X_\mathbf{m}X_{\mathbf{m}_1}}_{X_\mathbf{m}X_{\mathbf{m}_2}}(\mathbf{k}_\perp, \mathbf{k}''_\perp) \frac{\hbar}{ieE(X_{\mathbf{m}_2} - X_{\mathbf{m}_1})} W^{X_{\mathbf{m}_1}X_{\mathbf{m}'}}_{X_{\mathbf{m}_2}X_{\mathbf{m}'}}(\mathbf{k}''_\perp, \mathbf{k}'_\perp) + \ldots \quad (114)$$

Здесь W — обычные вероятности перехода из состояния α в α' (не содержащие квазисвободных сечений). Они определяются графической техникой и зависят от электрического поля. Зависящая от силы электрического поля функция распределения $n(\mathbf{k}_\perp)$ по компоненте $\mathbf{k}_\perp$ волнового вектора $\mathbf{k}$, перпендикулярной к полю, определяется из уравнения

$$\sum_{\mathbf{k}'_\perp} n(\mathbf{k}'_\perp) \tilde{W}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp) = 0, \quad (115)$$

где $\tilde{W}$ — вероятность перехода из состояния $\mathbf{k}_\perp$ в $\mathbf{k}'_\perp$ — определена формулой

$$\tilde{W}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp) = \sum_{X_\mathbf{m}} \tilde{W}^{0X_\mathbf{m}}_{0X_\mathbf{m}}(\mathbf{k}'_\perp, \mathbf{k}_\perp), \quad (116)$$

а условие нормировки для $n(\mathbf{k}_\perp)$ имеет вид

$$\sum_{\mathbf{k}_\perp} n(\mathbf{k}_\perp) = 1. \quad (117)$$

Итак, формулы (113)–(117) полностью определяют ток в сильном электрическом поле [48]. Несколько необычным выглядит разложение (114) по степеням $1/E$. Брыксин [52] показал, что суммирование этого ряда в общем случае приводит к некоторому транспортному уравнению типа кинетического, в котором электрическое поле входит не только слева (как обычно), но и в правую часть через зависимость ядра этого интегрального уравнения от E. В интересующем нас случае ПМР при $T > T_2$ можно положить $n(\mathbf{k}_\perp) = \mathrm{const}$, а величины W и $\tilde{W}$, входящие в (114), связаны с аналогичными величинами в узельном представлении посредством простого фурье-преобразования (ибо при $T > T_2$ зоны для ПМР узкие). В итоге из (113) следует, что для ПМР [47,51]

$$j_x = en \sum_\mathbf{m} X_\mathbf{m} \tilde{W}^{0\mathbf{m}}_{0\mathbf{m}} = en \sum_\mathbf{m} X_\mathbf{m} \operatorname{sh}\left(\frac{eEX_\mathbf{m}}{2kT}\right) \tilde{\tilde{W}}^{0\mathbf{m}}_{0\mathbf{m}}, \quad (118)$$

где $\tilde{W}_{0\mathbf{m}}^{0\mathbf{m}}$ и $\tilde{W}_{0\mathbf{m}}^{0\mathbf{m}}$ — эффективные вероятности перехода с узла «0» на узел «$\mathbf{m}$» (ср. с (53) в разд. 2), связанные соотношением

$$\tilde{W}_{0\mathbf{m}}^{o\mathbf{m}} = \tilde{\tilde{W}}_{0\mathbf{m}}^{0\mathbf{m}} \exp\left(\frac{eEX_{\mathbf{m}}}{2kT}\right), \tag{119}$$

и величина $\tilde{\tilde{W}}$ симметрична относительно замены $\mathbf{m} \to -\mathbf{m}$ или $\mathbf{E} \to -\mathbf{E}$. Из (114) получим

$$\tilde{\tilde{W}}_{0\mathbf{m}}^{0\mathbf{m}} = \overset{(s)}{W}{}_{0\mathbf{m}}^{0\mathbf{m}} + \sum_{\substack{\mathbf{m}_1,\mathbf{m}_2 \\ (X_{\mathbf{m}_1} \neq X_{\mathbf{m}_2})}} \overset{(s)}{W}{}_{0\mathbf{m}_2}^{0\mathbf{m}_1} \frac{\hbar}{ieE(X_{\mathbf{m}_1} - X_{\mathbf{m}_2})} \overset{(s)}{W}{}_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}} + \ldots \tag{120}$$

Величины $\overset{(s)}{W}$ в (120) симметричны по E, т.е. из них также выделен множитель $\exp(eEX_{\mathbf{m}}/2kT)$. В рамках приближений, аналогичных тем, что были сделаны при слабых полях в § 2 (см. неравенства (56)) получим [47,51]

$$\tilde{\tilde{W}}_{0\mathbf{m}}^{0\mathbf{m}} = \overset{(s)}{W}{}_{0\mathbf{m}}^{0\mathbf{m}} + \sum_{\substack{\mathbf{m}_1,\mathbf{m}_2 \\ (\mathbf{m}_1 \neq \mathbf{m}_2)}} \frac{\overset{(s)}{W}{}_{0\mathbf{m}_2}^{0\mathbf{m}_1} \overset{(s)}{W}{}_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}} \tau_E(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)}{1 + [(eE/\hbar)(X_{\mathbf{m}_1} - X_{\mathbf{m}_2})]^2 \tau_E^2(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)}. \tag{121}$$

При $E \to 0$ из (121) следует результат, приведенный в разд. 2 (см. (53) и (54)).

Итак, величину $\sigma(E) = j(E)/E$ тоже можно разбить на две части — прыжковую, $\sigma_h(E)$, и туннельную, $\sigma_t(E)$,

$$\sigma_h(E) = \frac{e^2 n}{2kT} \sum_{\mathbf{m}} X_{\mathbf{m}}^2 \frac{\operatorname{sh}(eEX_{\mathbf{m}}/2kT)}{(eEX_{\mathbf{m}}/2kT)} \overset{(s)}{W}{}_{0\mathbf{m}}^{0\mathbf{m}}, \tag{122}$$

$$\sigma_t(E) = \frac{e^2 n}{2kT} \sum_{\mathbf{m}} X_{\mathbf{m}}^2 \frac{\operatorname{sh}(eEX_{\mathbf{m}}/2kT)}{(eEX_{\mathbf{m}}/2kT)} \times$$

$$\times \sum_{\substack{\mathbf{m}_1,\mathbf{m}_2 \\ (\mathbf{m}_1 \neq \mathbf{m}_2)}} \frac{\overset{(s)}{W}{}_{0\mathbf{m}_2}^{0\mathbf{m}_1} \overset{(s)}{W}{}_{\mathbf{m}_2\mathbf{m}}^{\mathbf{m}_1\mathbf{m}} \tau_E(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)}{1 + [(eE/\hbar)(X_{\mathbf{m}_1} - X_{\mathbf{m}_2})]^2 \tau_E^2(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)}. \tag{123}$$

Например, в случае учета прыжков только между ближайшими соседями симметричная по E часть для W, входящая в (122), равна

$$\overset{(s)}{W}{}_h(E) = W_h(0) \exp\left[-\frac{(eaE)^2}{16kTE_a}\right] \tag{124}$$

и соответствующий вклад совпадает с (102).

В случае не очень сильных электрических полей ($\tau(E)/\tau(0) \simeq 1$, $eaE/2kT \ll 1$) зависимость σ_t от E напоминает зависимость от магнитного поля для поперечной электропроводности в сильных, но не квантующих магнитных полях. В более сильных электрических полях начинает проявляться зависимость τ от E. Если при $E = 0$ основной вклад в τ вносили двухфононные процессы ($\tau^{-1} \sim \mathrm{sh}^{-2}(\hbar\omega_0/2kT)$), что отвечало наличию δ-функции вида $\delta(\omega_{\mathbf{q}_2} - \omega_{\mathbf{q}_1})$ в выражении для τ^{-1}, то с ростом E в игру вступают однофононные ($\delta(\omega_{\mathbf{q}} - \Omega_E)$), трехфононные

$$\Big(\delta(\omega_{\mathbf{q}_1} + \omega_{\mathbf{q}_2} - \omega_{\mathbf{q}_3} - \Omega_E), \qquad \delta(\omega_{\mathbf{q}_1} + \omega_{\mathbf{q}_2} + \omega_{\mathbf{q}_3} - \Omega_E)\Big)$$

и другие многофононные процессы. Здесь $\Omega_E = eaE/\hbar$ — расстояние между ближайшими штарковскими уровнями. Это приведет к тому, что $\tau(E)$, а следовательно, и $\sigma_t(E)$ будут немонотонно зависеть от электрического поля. При слабой дисперсии оптических фононов ($\Delta\omega \ll \omega_0$) эти немонотонности будут иметь вид осцилляций, период которых определяется резонансным условием $MeaE = N\hbar\omega_0$ ($M, N = 1, 2, 3\ldots$). Здесь M указывает число штарковских уровней, укладывающихся 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 (ЭФР) был предсказан теоретически в 1970 г. [47] в рамках теории ПМР. Впервые он был обнаружен экспериментально в том же году Маекавой [56] на ZnS, в котором имеет место промежуточная связь электронов с фононами ($\alpha \simeq 1 \div 2$). Вообще говоря, ЭФР может иметь место при произвольной силе связи α.

Брыксин и Фирсов [50,57] построили последовательную теорию ЭФР в случае $\alpha < 1$, исходя из общего выражения (113) и обрывая ряд (114), т.е. предполагая, что $\tau\Omega_E \gg 1$. Богомолов с сотрудниками [58] обнаружили сильный ЭФР в сравнительно слабых полях, $E < 10^3$ В/см, в цеолитных матрицах Na–X, заполненных теллуром (Te_{16}). Период сверхрешетки в них в 10 раз превышает обычные значения. Детальная теория ЭФР для этого случая развита в работах [59–61].

8. Эффект Холла

Теория эффекта Холла — это один из наиболее сложных вопросов в теории ПМР. В общем случае связь между коэффициентом Холла R, холловской подвижностью μ_H, дрейфовой подвижностью $\mu_D = \mu$ и недиагональными компонентами антисимметричного тензора $\mu_{ij}^{(a)}$ ($i, j = x, y, z$) для кубического кристалла в слабом магнитном поле $\mathbf{H}$ при $\mathbf{H} \parallel \mathbf{z}$ описывается соотношениями

$$\mu_H = cR\sigma = \frac{c}{H}\frac{\mu_{xy}}{\mu}; \qquad R = \frac{1}{H}\frac{\mu_{xy}}{\mu\sigma} = \frac{1}{enc}\frac{\mu_H}{\mu_D}. \tag{125}$$

Для тетрагональных и гексагональных кристаллов существуют два холловских коэффициента и две холловские подвижности. Привычные соотношения

$$R \simeq \frac{1}{enc}, \qquad \mu_H \simeq \mu_D \tag{126}$$

являются следствием лоренцовой корреляции между x- и y-компонентами скорости электрона, движущегося в широкой разрешенной зоне. В этом случае из кинетического уравнения следует

$$\mu_{xy} \simeq \mu \Omega \tau, \tag{127}$$

где τ — время релаксации, $\Omega = eH/m^*c$ — ларморова частота. Подставляя (127) в (125), приходим к (126). Однако в общем случае не следует ожидать выполнения (126), т.е. по температурной зависимости холловской подвижности нельзя судить о температурном поведении μ_D. Так, например, даже в случае слабой связи, $\alpha \ll 1$, для узких зон ($\Delta\varepsilon < kT$) получается, что $\mu_H/\mu_D \simeq kT/\Delta\varepsilon$ [62,63]. Первые нетривиальные результаты были получены для ПМР в прыжковом режиме. Для гексагональных кристаллов (при $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}_3$) в пределе малых J Фридман и Холстейн [64] нашли

$$\mu_{xy} \sim \frac{J^2}{T^2} \exp\left(-\frac{4}{3}\,\frac{E_a}{kT}\right); \qquad \mu_H \sim \frac{J}{T^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{3}\,\frac{E_a}{kT}\right); \tag{128}$$

$$\frac{\mu_H}{\mu_D} \simeq \frac{kT}{J} \exp\left(\frac{2}{3}\,\frac{E_a}{kT}\right).$$

Такие же результаты получаются из формулы Кубо [65].

Для кубических кристаллов Брыксин и Фирсов [66] получили

$$\mu_{xy} \sim \frac{J^4}{T^2} \exp\left(-\delta\,\frac{E_a}{kT}\right); \qquad \mu_H \sim \frac{J^2}{T^{1/2}} \exp\left[-(\delta - 1)\,\frac{E_a}{kT}\right]; \tag{129}$$

$$\frac{\mu_H}{\mu_D} \sim \frac{kT}{E_a} \exp\left[(2-\delta)\,\frac{E_a}{kT}\right].$$

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 [66], что $4/3 < \delta < 2$. Формулы (129) справедливы при условии $kT < E_a(2-\delta)(1-1/\delta)$. Результаты, справедливые вплоть до $kT \simeq E_a$, приведены в [67].

Итак, для ПМР в области высоких температур, где дрейфовая подвижность с ростом T растет как $\exp(-E_a/kT)$, холловская подвижность растет гораздо медленнее и численно она гораздо больше, чем μ_D. Туннельный вклад $\mu_{xy}^{(t)}$ тоже ведет себя весьма нетривиально. Его вычисление стало возможным лишь после построения общей теории гальвономагнитных явлений, развитой в работах [68,69] Брыксина и Фирсова. Основные результаты для $\mu_{xy}^{(t)}$ приведены в работах [70,71].

Далее я постараюсь дать только самое общее представление о подходе и методах расчета и приведу лишь окончательные результаты для μ_{xy} и μ_H в рамках теории ПМР.

В присутствии магнитного поля H резонансный интеграл $J(\mathbf{g})$, содержащийся в гамильтониане (27), приобретает дополнительный фазовый множитель

$$J(\mathbf{g}) \to J(\mathbf{m}+\mathbf{g}, \mathbf{m}) = J(\mathbf{g}) \exp[i\alpha(\mathbf{m}+\mathbf{g}, \mathbf{m})], \tag{130}$$

где

$$\alpha(\mathbf{m}+\mathbf{g},\mathbf{m}) = \mathbf{A}(\mathbf{m})\mathbf{g} = \frac{e}{2\hbar c}\,\mathbf{H}[\mathbf{m}\mathbf{g}]. \tag{131}$$

Поэтому эффективный гамильтониан взаимодействия для ПМР принимает вид (ср. с третьим членом в (27))

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{mg}} J(\mathbf{g}) a^{+}_{\mathbf{m}+\mathbf{g}} a_{\mathbf{m}} \exp\Big[S(\mathbf{m}+\mathbf{g}) - S(\mathbf{m})\Big] \exp\Big[i\alpha(\mathbf{m}+\mathbf{g},\mathbf{m})\Big]. \tag{132}$$

При вычислении вероятности прыжка на соседний узел во 2-м порядке по J возникает произведение $J(\mathbf{m}+\mathbf{g},\mathbf{m})J(\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{g}) = J(\mathbf{g}) \times J(-\mathbf{g})$, в котором фазовые множители α, содержащие магнитное поле, сокращаются, и для двухузельной совокупности так будет в любом порядке по J. Поэтому Фридман и Холстейн [64] предложили при $H \neq 0$ учитывать «трехузельную» вероятность. Например, для гексагональных кристаллов при $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}_3$ три соседних узла, лежащих в плоскости, перпендикулярной $\mathbf{H}$, образуют равнобедренный треугольник, $\mathbf{m}_1$, $\mathbf{m}_2 = \mathbf{m}_1 + \mathbf{g}_1$, $\mathbf{m}_3 = \mathbf{m}_2 + \mathbf{g}_2 = \mathbf{m}_1 + \mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2$, причем $\mathbf{m}_3 + \mathbf{g}_3 = \mathbf{m}_1$, т.е. $\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_3 = 0$. Легко видеть, что в этом случае для произведения трех фазовых множителей в показателе экспоненты будет стоять

$$-i\,\frac{e}{\hbar c}\,\mathbf{H}\mathbf{S}_{321}, \tag{133}$$

где $\mathbf{S}_{321}$ — вектор (параллельный $\mathbf{c}_3$), который численно равен площади треугольника, образованного этими тремя узлами $\mathbf{m}_1$, $\mathbf{m}_2$, $\mathbf{m}_3$,

$$\mathbf{S}_{321} = \frac{1}{2}\Big\{[\mathbf{m}_1\mathbf{m}_2] + [\mathbf{m}_2\mathbf{m}_3] + [\mathbf{m}_3\mathbf{m}_1]\Big\} = \frac{1}{2}[\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2] = \frac{\sqrt{3}}{4}a^2\mathbf{k}_0, \tag{134}$$

где $\mathbf{k}_0$ — единичный орт в направлении оси $\mathbf{c}_3 \parallel \mathbf{z}$.

Итак, показатель (133) равен отношению $-i2\pi\Phi/\Phi_0$, где Φ есть магнитный поток через площадь треугольника, $\Phi_0 = 2\pi(\hbar c/e)$ — квант потока. Итак, в прыжковом режиме зависимость $\sigma_h(H)$ от H определяется не параметром $\Omega\tau$ (как это имеет место при зонном переносе), а отношением $2\pi\Phi/\Phi_0 \sim u_0 H/c$. Это утверждение оказывается верным и для туннельного вклада.

В работах [68,69] показано, что в общем случае ток можно представить в виде

$$\mathbf{j} = en\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}^{\text{eff}}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}). \tag{135}$$

Здесь

$$\mathbf{v}^{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \mathbf{v}(\mathbf{k}) - i\sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{W}_1(\mathbf{k},\mathbf{k}'), \tag{136}$$

где W_1 определена так же, как и в разд. 5 (см. (88)), но зависит от H. Функция $f(\mathbf{k})$ нормирована на единицу и определяется из уравнения переноса

$$\frac{eE}{\hbar}\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \frac{i}{\hbar}\Big\{\varepsilon[\mathbf{k} + \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}})] - \varepsilon[\mathbf{k} - \mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}})]\Big\} = \sum_{\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}') W(\mathbf{k}',\mathbf{k};\mathbf{E},\mathbf{H}). \tag{137}$$

Здесь $\varepsilon(k)$ — перенормированная энергия (квазичастицы), $\nabla_{\mathbf{k}} = \partial/\partial\mathbf{k}$,

$$\mathbf{A}(i\nabla_{\mathbf{k}}) = i\,\frac{e}{2\hbar c}[\mathbf{H}\nabla_{\mathbf{k}}]. \tag{138}$$

Вероятности W в (137) зависят от H и определяются графической техникой. Если линеаризовать по H оператор в левой части уравнения (137), то получим слева обычное выражение

$$\frac{1}{\hbar}\left(e\mathbf{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{vH}]\right)\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}}\,f(\mathbf{k}),$$

в котором действие магнитного поля описывается силой Лоренца, но не следует забывать, что W само зависит от H (для ПМР через отношение Φ/Φ_0, см. выше). Линеаризуя f и W в (137) по E и по H, получим прыжковый $j_y^{(h)}$ и туннельный $j_y^{(t)}$ вклады в ток (подробнее см. в [69,70] и в книге [24], гл. 5, ч. 2, § 5). Для ПМР получим

$$j_y^{(h)} = cn\sum_{\mathbf{m}} Y_{\mathbf{m}}\tilde{W}_{0\mathbf{m}}^{0\mathbf{m}}(\mathbf{H},\mathbf{E}). \tag{139}$$

Здесь $\tilde{W}$ зависит от E (как это объяснялось в разд. 7) и должна быть линеаризована по E. Это выражение Фридман и Холстейн использовали в своей первой работе [64]. Оно имеет простой физический смысл и было ими написано на основании чисто интуитивных соображений.

Формально вклад (139) получается, если в формуле (135) вместо $f(\mathbf{k})$ подставить $f^{(0)}(\mathbf{k}) = n(\mathbf{k})$. Вклад, связанный с 1-м членом $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = (1/\hbar)\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon(\mathbf{k})$, в выражении для $\mathbf{v}^{\text{eff}}(\mathbf{k})$ пропадает, ибо $n(-\mathbf{k}) = n(\mathbf{k})$, $\mathbf{v}(-\mathbf{k}) = -\mathbf{v}(\mathbf{k})$. Остается лишь вклад, содержащий $i\mathbf{W}_1(\mathbf{k},\mathbf{k}')$. Полагая $n(\mathbf{k}) = \text{const}$ (для ПМР при $T > T_2$) и переходя от $\mathbf{k}$-представления к узельному, получим (139), которое отлично от нуля лишь благодаря тому, что W_1 зависит от E и H.

В отличие от $j_y^{(h)}$ туннельный вклад $j_y^{(t)}$ целиком обусловлен отличием $f(\mathbf{k})$ от $n(\mathbf{k})$. Поскольку мы будем искать линейный по H вклад, разложим в уравнении (137) все фигурирующие в нем функции Ψ в ряд по H, обозначив линейные по H поправки как $\delta\Psi$. Чтобы избежать непринципиальных трудностей математического свойства и в целях большей наглядности, решим (137) в приближении времени релаксации. На общность полученных выводов это не влияет. К тому же для ПМР при $T > T_0$ функцию τ можно определить с хорошей точностью (см. разд. 2).

В принятом приближении линейную по E часть $f(\mathbf{k})$ удается представить в виде

$$f_I(\mathbf{k},\mathbf{H}) = f_I(\mathbf{k}) + \delta f_I^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{H}) + \delta f_I^{(2)}(\mathbf{k},\mathbf{H}), \tag{140}$$

где

$$f_I(\mathbf{k}) = -e\beta n(\mathbf{k})\tau(\mathbf{k})\mathbf{E}\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{k}), \tag{141}$$

$$\delta f_I^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{H}) = -e\beta n(\mathbf{k})\tau(\mathbf{k})\mathbf{E}\delta\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{k},\mathbf{H}), \tag{142}$$

$$\delta f_I^{(2)}(\mathbf{k},\mathbf{H}) = -e\beta E_x \tau(\mathbf{k}) \frac{e\mathbf{H}}{c\hbar} \left\{ [\mathbf{v}(\mathbf{k}) + \Delta\mathbf{v}(\mathbf{k})] \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right\} n(\mathbf{k}) \tilde{v}_x(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}). \quad (143)$$

Выражение для $f_I(\mathbf{k})$ напоминает обычный для кинетического уравнения результат, однако $\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{k})$ определяется из соотношения

$$n(\mathbf{k})\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{k},\mathbf{H}) = n(\mathbf{k})\mathbf{v}(\mathbf{k}) - i \sum_{\mathbf{k}'} n(\mathbf{k}')\mathbf{W}_1(\mathbf{k}',\mathbf{k};\mathbf{H}) \quad (144)$$

при $H = 0$. Выражение для $\delta\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{k},\mathbf{H})$ получается из (144) за счет линейной по H поправки $\delta\mathbf{W}_1$, содержащейся справа в (144). Поправка к скорости $\Delta\mathbf{v}(\mathbf{k})$, фигурирующая в (143), определяется из соотношения

$$\frac{e}{\hbar c} \Delta v(\mathbf{k}) \left[\mathbf{H} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right] f_I(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} f_I \mathbf{k}' \delta W(\mathbf{k}',\mathbf{k};\mathbf{H}). \quad (145)$$

Надстрочные индексы (1) и (2) в (142) и (143) показывают, что эти вклады в δf_I пропорциональны соответственно τ и τ^2.

Поправка $\delta f_I^{(2)}$ внешне похожа не линейную по H поправку в кинетическом уравнении, обусловленную силой Лоренца (они совпадают, если в (143) положить $\Delta\mathbf{v} = 0$, $\tilde{v}_x \to v_x$). При подстановке (143) в (135) получим вклад в $\mu_{xy}^{(t)}$, который мы назовем квазилоренцовским,

$$\mu_{xy,ql}^{(t)} = e\beta \left\langle v_x^{\text{eff}}(\mathbf{k})\tau(\mathbf{k}) \frac{eH_z}{\hbar c} \left[[\mathbf{v}(\mathbf{k}) + \Delta\mathbf{v}(\mathbf{k})] \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right]_z n(\mathbf{k}) \tilde{v}_y(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) \right\rangle. \quad (146)$$

Знак усреднения по $\mathbf{k}$ $\langle\rangle$ означает интегрирование по $\mathbf{k}$ в пределах 1-й зоны Бриллюэна. От обычного лоренцовского вклада (146) отличается тем, что все три скорости, фигурирующие в (146), разные, и все это различие связано с учетом линейных по H и по E поправок к вероятностям перехода.

Кроме вклада $\sim \tau^2$, возникает и необычный линейный по τ вклад в μ_{xy}, который Брыксин и Фирсов [69,70] предложили назвать нелоренцовским. Он получается при усреднении по $\mathbf{k}$ комбинации членов

$$\mathbf{v}^{\text{eff}}(\mathbf{k})\delta f_I^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{H}) + \delta\mathbf{v}^{\text{eff}}(\mathbf{k},\mathbf{H}) f_I(\mathbf{k}) \quad (147)$$

и имеет вид

$$\mu_{xy,nl}^{(t)} = \frac{e\beta}{2} \left\langle n(\mathbf{k})\tau(\mathbf{k}) \left[\mathbf{v}^{\text{eff}}(\mathbf{k},\mathbf{H}) \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{k},\mathbf{H}) \right]_z^{(1)} \right\rangle. \quad (148)$$

Надстрочный индекс (1) у квадратной скобки означает, что надо взять ее часть, линейную по H. Из (136) и (144) видно, что без учета поправок, связанных с $\mathbf{W}_1$, квадратные скобки в (148) обращаются в нуль. В случае слабой связи, $\lambda \ll 1$, вклад (146) пропорционален λ^{-4}, а вклад

(148) пропорционален λ^2 и им можно пренебречь. В случае ПМР вклады (146) и (148) могут быть сравнимыми. Перепишем нелоренцовский вклад (148) в узельном представлении применительно к ПМР [70]:

$$\mu_{xy,nl}^{(t)} = \frac{e}{2kT} \sum_{\mathbf{m},\mathbf{m}'} [\mathbf{m}\mathbf{m}']_z \operatorname{Re} i \sum_{\mathbf{m}_1,\mathbf{m}_2} n(\mathbf{m}_1) \exp[i\mathbf{A}(\mathbf{m}_1)\mathbf{m}] \times$$
$$\times W^{\mathbf{m},0}_{\mathbf{m}_1+\mathbf{m},\mathbf{m}_2} \tau(\mathbf{m}_2) W^{0,\mathbf{m}'}_{\mathbf{m}_2,\mathbf{m}'}. \tag{149}$$

В этом выражении следует произвести линеаризацию по H с учетом зависимости недиагональных вероятностей W_{nd} от H при $E = 0$. Величины $n(\mathbf{m})$ и $n(\mathbf{k})$ связаны посредством фурье-преобразования. Например, для гексагональных кристаллов при $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}_3$ в низшем по $\exp(-S_T)$ приближении (полагая в (149) $\mathbf{m}_1 = 0$, т.е. $n(\mathbf{m}_1) \to 1$) и в низшем порядке по J, взяв комбинацию блоков типа $\overset{(1)}{W}_{nd}\overset{(2)}{W}_{nd}$, получим вклад $\sim \tau J^2$, который при $T > T_0$ имеет вид

$$\mu_{xy,nl}^{(t)} = u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{9}{2}\sqrt{\pi} \frac{J^3}{(E_a \hbar\omega_0)^{1/2} kT (\hbar/\tau)} \operatorname{sh}^{1/2}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) \exp\left(-2S_T - \frac{E_a}{2kT}\right). \tag{150}$$

Выражения для $\mu_{xy,l}^{(t)}$ (лоренцовский вклад) и для $\mu_{xy,ql}^{(t)}$ в узельном представлении (аналогично (149)) можно найти в [70] и в [24], гл. 5, ч. 2, § 6. Здесь для них будет приведено лишь окончательное выражение для гексагональных кристаллов в низшем порядке по J ($\sim J^3$):

$$\mu_{xy,l}^{(t)} = u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{9}{2} \frac{J^3}{kT (\hbar/\tau)^2} \mathrm{e}^{-3S_T}; \qquad \mu_{xy,ql}^{(t)} \simeq 0. \tag{151}$$

В зависимости от соотношения между параметрами теории отношение обоих вкладов может быть либо больше, либо меньше 1.

Однако при достаточно высоких темепературах оба они меньше прыжкового вклада [64,65]

$$\mu_{xy}^{(h)} = u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \frac{J^3}{E_a (kT)^2} \exp\left(-\frac{4}{3}\frac{E_a}{kT}\right). \tag{152}$$

Эмин и Холстейн в [72] получили выражение для прыжкового вклада в гексагональных кристаллах при $\eta_1 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$, но $\eta_2 > 1$ и при произвольных J/kT

$$\mu_{xy}^{(h)} = u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{4}{3(2\pi)^2} f_1(J/kT) \exp\left[-\frac{(4/3)E_a - 2J}{kT}\right], \tag{152a}$$

где $f_1(J/kT)$ — безразмерная функция от J/kT. При $J/kT > 1$ она равна 1.

Похожие выражения в низшем порядке по J ($\sim J^4$) получены и для кубических кристаллов. Они приведены в [67,70,71] и в [24], гл. 5, ч. 2,

§ 7. Здесь будет приведено лишь выражение для $\mu_{xy}^{(h)}$, справедливое в интервале температур $\hbar\omega_0/2 < kT \leqslant E_a$,

$$\mu_{xy}^{(h)} = u_0 \frac{u_0 H}{c} \frac{\pi}{8} \frac{\delta^{3/2}}{(\delta-1)(2-\delta)^{3/2}} \frac{J^4}{E_a^{3/2}(kT)^{5/2}} \times$$
$$\times \exp\left[-\left(3-\frac{2}{\delta}\right)\frac{E_a}{kT}\right] f_2\left[\frac{(\delta-1)(2-\delta)}{\delta}\frac{E_a}{kT}\right], \qquad (153)$$

где $f_2(y) = \int_0^{\sqrt{y}} \exp(x^2)dx$, $\delta = (1 - E_a'/4E_a)^{-1}$, $E_a = E_a(\mathbf{g}_1)$, $E_a' = E_a(\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2)$ — энергии активации для прыжка вдоль ребра и вдоль диагонали куба. В общем случае можно показать, что $4/3 < \delta < 2$. Поэтому число, стоящее в показателе экспоненты перед $-E_a/kT$, меняется от $4/3$ (как в гексагональных кристаллах) до 2 в зависимости от значения параметра δ. Поэтому и выводы относительно температурного поведения μ_H для гексагональных и кубических кристаллов могут быть различными.

В области высоких температур для гексагональных кристаллов при $\eta_1 \ll 1$, $\eta_2 \ll 1$, $J/kT \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$ имеем

$$\mu_H^{(h)} = \frac{c}{H}\frac{\mu_{xy}^{(h)}}{\mu_h} = u_0 \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{3}\right)^{1/2} \eta_1 \left(\frac{E_a}{kT}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_a}{3kT}\right). \qquad (154)$$

Однако при $\eta_2 > 1$, $J/kT > 1$, но $\eta_1 \ll 1$, $\eta_3 \ll 1$ с учетом того, что в этом случае [72]

$$\mu_D^{(h)} = u_0 \frac{3}{4\pi}\frac{\hbar\omega_0}{kT} \exp\left(-\frac{E_a - J}{kT}\right), \qquad (155)$$

получим [72]

$$\mu_H^{(h)} = u_0 \frac{\hbar\omega_0}{kT} \exp\left[-\frac{(1/3)E_a - J}{kT}\right]. \qquad (156)$$

Поскольку при не очень малых $\eta_1 = J/E_a$ величина $(1/3)E_a - J$ в показателе экспоненты в (156) может быть не очень большой по сравнению с kT, рост μ_H с температурой может быть очень слабым.

В пределе малых J для кубических кристаллов в [66,67] с использованием выражения (153) получено при $\hbar\omega_0/2 < kT \leqslant E_a$

$$\mu_H^{(h)} = u_0 \frac{\sqrt{\pi}}{4}\eta_1^2 \left(\frac{E_a}{kT}\right) \frac{\delta^{3/2}}{(\delta-1)(2-\delta)^{1/2}} \exp\left(-\frac{E_a'}{2kT}\right) f_2\left[\frac{(\delta-1)(2-\delta)}{\delta}\frac{E_a}{kT}\right]. \qquad (157)$$

Функция f_2 определена в (153). Когда ее аргумент велик, итоговая экспоненциальная зависимость для холловской подвижности будет $\exp[-(\delta-1)(E_a/kT)]$. Лишь в модели короткодействия ($\delta = 4/3$) показатель этой экспоненты будет равен $-E_a/3kT$, как в случае гексагональных кристаллов. При $\delta \to 2$ $E_a' \to 2E_a$, итоговый показатель в

(157) стремится к $-E_a/kT$ и температурные зависимости холловской и дрейфовой подвижностей будут не очень сильно различаться.

Учет вкладов $\sim J$ в энергию активации в случае короткодействия ($\delta = 4/3$) при $\eta_2 > 1$ для кубических кристаллов [72] дает для дрейфовой и холловской подвижностей:

$$E_a^{(D)} = E_a - J, \qquad E_a^{(H)} = \frac{1}{3}E_a - (\sqrt{2}-1)J.$$

В случае коррелированных прыжков (при $\Delta\omega/\omega_0 \ll 1$) даже при $\eta_2 < 1$ отношение μ_H/μ_D может оказаться гораздо ближе к единице, чем в обычном марковском случае (ср. с (128) и (129)),

$$\frac{\mu_H}{\mu_D} \simeq \begin{cases} \exp(E_a/6kT) & \text{для гексагональных кристаллов,} \\ \exp(E_a/12kT) & \text{для кубических кристаллов (при } \delta = 4/3). \end{cases}$$

Для адиабатических ($\eta_2 > 1$) коррелированных (немарковских) прыжков отношение μ_H/μ_D вообще может стать меньше единицы [72,73]. Однако, помимо области высоких температур, где можно считать, что $\mu_H = (c/H)(\mu_{xy}^{(h)}/\mu_h)$, существует широкий температурный интервал, где существенны оба вклада в μ_{xy} и в μ_{xx}, прыжковый и туннельный, а для μ_H надо использовать общую формулу

$$\mu_H = \frac{c}{H}\,\frac{\mu_{xy,l}^{(t)} + \mu_{xy,ql}^{(t)} + \mu_{xy,nl}^{(t)} + \mu_{xy}^{(h)}}{\mu_h + \mu_t}. \tag{158}$$

В (158) имеется в виду, что из квазилоренцовского вклада выделен чисто лоренцовский (подробнее см. в [24]). Поскольку температурное поведение каждой из функций, входящих в (158), различно, а их абсолютные значения зависят от численных значений основных безразмерных параметров теории, температурное поведение μ_H в промежуточной области может быть весьма сложным. Различные варианты такого поведения обсуждаются в [24,71]. В принципе μ_H может убывать там, где μ_D растет с ростом T и наоборот. Поэтому измерения только μ_H недостаточны для определения механизма переноса. К тому же по знаку эффекта Холла нельзя судить о знаке носителей тока (электронный или дырочный ПМР). Поэтому хотелось бы знать, какие сведения можно извлечь из измерений других кинетических коэффициентов, например, из данных по термоэдс.

9. Термоэдс

В прыжковом режиме для ПМР Морин [74] предложил использовать для коэффициента Зеебека S формулу вида

$$S = \frac{k}{e}\ln\frac{n}{N-n}, \tag{159}$$

где n означает концентрацию носителей тока, N — концентрацию узлов решетки. В принципе, измеряя $S(T)$, можно найти зависимость

$n(T)$ и, зная $\sigma(T)$, определить температурную зависимость дрейфовой подвижности μ_D. Однако формула (159) нуждается в строгом обосновании. Аргументация Катлера и Мотта [75] в пользу (159) выглядит достаточно убедительной лишь в случае низких температур, где может реализоваться зонный перенос по узкой поляронной зоне ($\Delta E_p > kT$). Пытаясь обосновать (159) в прыжковой области, Шотте [76], Эфрос [77] и Эмин [78] явно или неявно приписывали определенную температуру каждой элементарной ячейке, что с термодинамической точки зрения выглядит неубедительно. Использование общей формулы для S типа формулы Кубо для σ наталкивается на принципиальные трудности, связанные с неоднозначностью определения оператора потока энергии в области сильного электрон-фононного взаимодействия. Совершенно иной подход для описания линейной теории реакции системы на термические возмущения предложил Кудинов [79] и привел некоторые аргументы в пользу формулы (159) Морина в прыжковой области. И все же некоторая неудовлетворенность степенью обоснованности (159) остается. Возможность применимости (159) в случае туннельного механизма переноса вообще не обсуждалась.

10. Магнитосопротивление

При рассмотрении эффекта Холла в разд. 8 мы видели, что в прыжковом и туннельном режимах основным безразмерным параметром, определяющим силу магнитного поля, является отношение

$$\frac{u_0 H}{c} \sim 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{a^2}{a_L^2}. \tag{160}$$

Здесь $u_0 = ea^2/\hbar$, $a_L = (c\hbar/eH)^{1/2}$ — «длина Ландау», $\Phi_0 = 2\pi(\hbar c/e)$ — квант потока, $\Phi = HS$ — поток через площадь, ограниченную траекторией (замкнутой) многоступенчатого перехода. В разд. 8 речь шла о треугольниках и четырехугольниках, образованных соседними узлами.

Поскольку параметр (160) очень мал (даже в полях, достигающих нескольких десятков тесла), магнитосопротивление, пропорциональное $(u_0 H/c)^2$, еще труднее измерить, чем эффект Холла. Однако рассмотрение этого эффекта представляет принципиальный интерес. Для гексагональных кристаллов при $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}_3$ для прыжкового вклада Брыксин и др. [80] получили

$$\sigma_{xx}^{(h)}(H) = en_i f(1-f)\left[\mu_h^{(2)} + (2f-1)\mu_H^{(3)} \cos\left(2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right]. \tag{161}$$

Здесь n_i — концентрация узлов, по которым происходят прыжки, $f = [1+\exp(-\zeta\beta)]^{-1}$ — вероятность заполнения узла поляроном, ζ — химический потенциал. При выводе (161) предполагалось, что взаимодействием между ПМР можно пренебречь. Индексы (2) и (3) означают двухузельный и трехузельный прыжковые вклады. Первый вклад подробно обсуждался в разд. 2–4. Согласно [80], при малых J имеем

$$\mu_h^{(3)} = 2\eta_1\mu_h^{(2)}. \tag{162}$$

Интересно, что в (161) имеется множитель $2f-1$, который меняет знак при половинном заполнении ($\zeta = 0$, $f = 1/2$). Авторы назвали это явление p—n-аномалией.

Выражение для антисимметричной по H части σ_{xy} таково [80]:

$$\sigma_{xy}^{(h)} = en_i f(1-f)\mu_{xy}^{(h)}, \tag{163}$$

$$\mu_{xy}^{(h)} = \mu_{xy,1}^{(h)} \frac{\sin[2\pi(\Phi/\Phi_0)]}{2\pi(\Phi/\Phi_0)}. \tag{164}$$

Подстрочный индекс 1 означает, что соответствующая величина вычислена в 1-м порядке по H. Различные выражения для нее приведены в разд. 8. Дополнительный множитель справа в (164) при $H \to 0$ обращается в единицу.

Выражение для «коэффициента Холла» формально имеет вид

$$R = \rho_{xy} H^{-1} = \frac{\sigma_{xy}}{(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2)H}. \tag{165}$$

При обычном зонном переносе эта величина для одного сорта носителей тока слабо изменяется при переходе от слабых ($\Omega\tau < 1$) к сильным ($\Omega\tau > 1$) магнитным полям (здесь Ω — Ларморова частота) и ее значение близко к $(enc)^{-1}$. Для ПМР в прыжковом и туннельном режимах при слабых полях ($u_0 H/c \ll 1$) в выражении для R возникает дополнительный множитель μ_H/μ_D, который сильно отличается от 1 и имеет сложную температурную зависимость (см. разд. 8). В сильный полях ($\Phi/\Phi_0 \simeq 1$) R перестает быть константой и начинает сильно зависеть от магнитного поля.

Поскольку для ПМР всегда $\sigma_{xx} > \sigma_{xy}$, получим

$$R \simeq \frac{1}{enc} \frac{\mu_H}{\mu_D} \frac{\sin[2\pi(\Phi/\Phi_0)]}{[2\pi(\Phi/\Phi_0)]}, \tag{166}$$

где значение холловской подвижности μ_H берется для слабого магнитного поля (см. разд. 8). Конечно, для обычных значений постоянной решетки, a, добиться выполнения условия $\Phi \simeq \Phi_0$, т.е. $a_L \simeq a$, трудно. Однако в случае сверхрешеток с большим периодом такого рода эффекты могут наблюдаться не только при туннельном или прыжковом механизмах переноса и не обязательно в том случае, когда носителями тока являются ПМР. Например, для двумерных сверхрешеток, образованных из металлических квантовых проволочек, теория предсказывает немонотонную зависимость от Φ/Φ_0 для магнитосопротивления и эффекта Холла [81].

Примером трехмерных сверхрешеток могут служить опалы, полости в которых заполнены полупроводниками групп $\mathrm{A^{III}B^{V}}$ или $\mathrm{A^{II}B^{VI}}$ [82]. Постоянная сверхрешетки в этих кластерных решетках достигает значений $3 \cdot 10^3$ Å. В этом случае условие $\Phi/\Phi_0 \simeq 1$ достигается уже при $\Omega\tau \ll 1$.

11. ПМР в неупорядоченных системах

Так же как это было в случае кристаллических полупроводников, для ПМР в неупорядоченных системах реализуются туннельный и прыжковый механизмы переноса [54,83], и описание удобно вести в конфигурационном пространстве. Система уравнений пишется для одночастичной матрицы плотности. Для вычисления фигурирующих в них вероятностей перехода используется графическая техника, разработанная в [18,24,26]. Основная специфика заключается в методах усреднения, которые зависят от конкретного типа беспорядка. Далее будут перечислены лишь некоторые из важных результатов, полученных Брыксиным и Беттгером.

А. *Ток в переменном поле*

В [84,85] сформулирован метод эффективной среды, позволяющий вывести самосогласованные уравнения для определения частотной зависимости электропроводности в неупорядоченных системах при слабой и сильной электрон-фононной связи. Эти результаты согласуются с недавними компьютерными расчетами [86] и со многими экспериментальными данными.

Б. *Перенос в сильных электрических полях*

Упомянем здесь лишь основной результат: падающая дифференциальная проводимость в умеренных полях, возникающая за счет явления направленного протекания и захвата электронов на «мертвых концах» [87]. Такую «падающую» характеристику наблюдали экспериментально в окислах переходных металлов и в легированных полупроводниках.

В. *Эффект Холла и магнитосопротивление*

В работах [88,89] сформулирована эквивалентная схема случайных сопротивлений и конденсаторов для исследования эффекта Холла и магнитосопротивления в неупорядоченных системах (в прыжковом режиме). Используется метод усреднения типа «эффективной среды». Холловская подвижность сильно отличается от дрейфовой (даже в случае слабой связи). В результате усреднения по площадям треугольников (см. разд. 10) $\sigma_{xx}(H)$ в прыжковом режиме ведет себя плавно как функция отношения Φ/Φ_0 и при $\Phi/\Phi_0 > 1$ выходит на насыщение.

Более подробное обсуждение всех этих вопросов выходит за рамки настоящего обзора.

12. ПМР в условиях фермиевского вырождения

Этот вопрос становится актуальным в области достаточно низких температур, $kT < (1/z)\Delta E_p$. Как объяснялось в разд. 2, 3, в этой области температур реализуется зонный перенос, ибо $\hbar/\tau < (1/z)\Delta E_p$. Реально фермиевское вырождение наступает при достаточно большой концентрации носителей тока, и в этом случае возникает вопрос о том, можно ли пренебречь их взаимодействием, как прямым кулоновским, так и за счет виртуального обмена фононами (см. член ΔH в (29)).

Александров и Раннингер [90] (см. также [91]) обратили внимание на то, что полезную информацию можно получить, используя методику фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES). Они воспользовались выражением для одночастичной функции Грина ПМР в виде

$$G(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{\mathrm{e}^{-\gamma}}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}} + \frac{\mathrm{e}^{-\gamma}}{N} \sum_p \frac{\gamma^p}{p!} \sum_{\mathbf{k}'} \left[\frac{n(\xi_{\mathbf{k}'})}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}'} + p\omega_0} + \frac{1 - n(\xi_{\mathbf{k}'})}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}'} - p\omega_0} \right]. \tag{167}$$

Здесь ω_n — мацубаровские частоты, $\xi_{\mathbf{k}}$ — энергия ПМР, отсчитанная от уровня химического потенциала. Предполагается, что фононы бездисперсионные ($\Delta\omega = 0$). Фактор $\mathrm{e}^{-\gamma}$ в 1-м члене (167) определяет величину скачка функции распределения $n(\xi_{\mathbf{k}})$ на поверхности Ферми. Корреляционые эффекты в (167) не учтены.

С использованием (167) в [90] получено следующее выражение для интенсивности, $I(\mathbf{k}, \omega)$, фотоэмиссионного спектра:

$$I(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\delta\sqrt{2\pi}} n(\xi_{\mathbf{k}}) \mathrm{e}^{-\gamma} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}}}{\delta} \right)^2 \right] +$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' F(\varepsilon - \varepsilon') \mathrm{e}^{-\gamma} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\gamma^p}{p!} N_p(\varepsilon' + p\omega_0) n(\varepsilon' + p\omega_0). \tag{168}$$

Здесь $N_p(\varepsilon)$ — плотность состояний ПМР, $\hbar\mathbf{k}$ и ε соответствуют импульсу и энергии испускаемого электрона. Приборное разрешение анализатора описывается гауссовой функцией $F(\varepsilon - \varepsilon')$ с полушириной δ. Как и в случае межзонных оптических переходов (см. разд. 6), кривая будет иметь вид широкого колокола с острым пиком слева от него. В пренебрежении дисперсией фононов ($\Delta\omega = 0$) колокол состоит из набора узких полос с расстоянием $\hbar\omega_0$ между ними. При учете конечной дисперсии ($\Delta\omega \neq 0$) эти немонотонности сглаживаются.

В адиабатическом пределе величина $I(\mathbf{k}, \omega)$ была найдена с помощью численных расчетов в рамках двух- и четырехузельной моделей [35].

Наиболее интересным, конечно, является вопрос об устойчивости ферми-жидкости при наличии сильного электрон-фононного взаимодействия и узких зон квазичастиц. Справедлива ли в этом случае теорема Мигдала [92]? Этот вопрос представляет принципиальный интерес для понимания механизма сверхпроводимости в узкозонных сверхпроводниках с сильной электрон-фононной связью, когда размер куперовской пары становится порядка постоянной решетки. Что представляет из себя в этом случае сверхпроводящий конденсат? Может ли он быть описан, хотя бы качественно, в рамках теории типа теории БКШ (Бардин–Купер–Шриффер) или следует говорить о плотном заряженном бозе-газе из биполяронов малого радиуса [93–95]? Дискуссии на эту тему не прекращаются до сих пор.

13. Биполяроны малого радиуса

Проблема теоретического описания биполяронов возникла давно (см., например, [96–98]). Активные экспериментальные исследования биполяронных свойств некоторых окислов переходных металлов начались в 1976 г. Однако серьезные теоретические исследования биполяронов малого радиуса (БПМР) начались после обнаружения того факта, что в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) размер куперовских пар в направлении, перпендикулярном к сверхпроводящим плоскостям, может быть порядка (или меньше!) постоянной решетки. Возникла идея возродить шафротовскую модель сверхпроводящего заряженного бозе-газа [99], в котором размер бозе-пары (с зарядом 2) предполагается меньше, чем среднее расстояние между парами. Математическое описание биполяронной модели ВТСП, основанное на каноническом преобразовании, используемом в теории ПМР (см. разд. 1), было предложено в работах Александрова и Раннингера [90,100]. Рассмотрение этого вопроса выходит за рамки данного обзора. Интересное обсуждение биполяронной модели сверхпроводимости и ее применимости к реальным ВТСП можно найти в обзоре Александрова и Мотта [101], где приведена довольно полная библиография. В данном параграфе мы кратко затронем лишь вопрос о БПМР в нормальных проводниках [100,102–104].

Канонически преобразованный гамильтониан (27) содержит член ΔH (см. (29)), описывающий притяжение между ПМР за счет виртуального обмена фононами. Конечно, в (27) следует дополнительно включить член, описывающий кулоновское отталкивание между ПМР. Александров и Раннингер [100,102] показали, что при определенных условиях может возникнуть притяжение между двумя ПМР в пределах одной или между двумя соседними элементарными ячейками, что приведет к образованию БПМР. Зоны для БПМР гораздо уже, чем для ПМР,

$$\Delta E_{bp} \simeq \Delta E_p \mathrm{e}^{-\gamma} \frac{J}{E_{bp}}. \tag{169}$$

Здесь E_{bp} — энергия связи БПМР. Оба дополнительных фактора в (169) малы. Поэтому вопрос об участии БПМР в явлениях переноса весьма непростой. Главный результат, полученный Брыксиным [103,104], таков. В системе из монополяронов и биполяронов (концентрация монополяронов экспоненциально мала по сравнению с биполяронами) основной вклад в электропроводность дают монополяроны из-за их большей подвижности, однако наличие БПМР отражается на величине энергии активации [103]. Биполяронный перенос (посредством туннельного просачивания) проявляется только в области низких температур [104]. Однако биполяронные переходы играют основную роль в поглощении света даже в области высоких температур (в прыжковой области).

Заключение

Описанные выше результаты можно условно отнести к двум категориям.

1. К первой категории принадлежат выводы, не зависящие от конкретных ограничений на величины безразмерных параметров теории за исключением, может быть, параметра $\eta_1 = J/E_a$ (ограничение $\eta_1 < 1$ есть условие существования ПМР). Сюда относятся: метод описания движения в конфигурационном пространстве с помощью функций условной вероятности (разд. 2) и основные формулы (42), (43) и (55) (последняя ограничена лишь условием (56)); важный вывод о наличии прыжкового и туннельного механизмов переноса; все результаты в разд. 5; многие общие формулы в разд. 7 и 8 и, конечно, вывод о существовании квазилоренцовского и нелоренцовского вкладов в μ_{xy}, а следовательно, и в μ_H. Большая часть этих результатов ограничена лишь условием узости перенормированных зон для квазичастиц.

2. Ко второй категории относятся конкретные результаты для μ_h, μ_t, μ_{xy}, μ_H и т.д., полученные при определенных ограничениях на величины безразмерных параметров теории (см., (68) и (76)).

Физический смысл этих ограничений подробно обсуждался в разд. 4. Некоторые из результатов, приведенные в разд. 3, 4, 8 для $kT > \hbar\omega_0/2$, были ограничены лишь условием $\eta_1 < 1$. В области низких температур, $kT < \hbar\omega_0/2\ln 2\gamma$, результаты были ограничены условием $\eta_2'' = (J/\hbar\omega_0)^2(\ln\gamma/\gamma)$, что отвечает неадиабатическому пределу (подробнее см. в конце разд. 4).

Как правильно определить основное состояние адиабатического ПМР при $\eta_2'' > 1$? Это позволило бы более удачно выделить член H_{int}, ответственный за переходы с узла на узел, и построить соответствующую графическую технику для нахождения вероятности перехода. Упомянем здесь лишь некоторые теоретические подходы к задаче об адиабатическом ПМР:

1) использование канонического преобразования Ланг–Фирсова и разложение по степеням [105];

2) разложение по степеням [96,98];

3) использование вариационных принципов [106–109];

4) численные расчеты, основанные на использовании этих принципов [110,111];

5) метод функционального интегрирования [112];

6) точные (численные) расчеты для двухузельной [91] и многоузельной [35,113] моделей.

Конкретные результаты для кинетических коэффициентов в адиабатическом пределе для ПМР автору неизвестны.

Случай полярона промежуточного радиуса ($\eta_1 \simeq 1$) практически не исследовался.

Список литературы

[1] A.I. Ioffe. Canad. Phys., **26**, 582 (1957).
[2] L.D. Landau. Sow. Phys., **3**, 664 (1933).
[3] С.И. Пекар. *Исследования по электронной теории кристаллов* (Гостехниздат, 1951).
[4] Н.Н. Боголюбов. Укр. мат. журн., **2**, 3 (1950).
[5] С.В. Тябликов. ЖЭТФ, **21**, 377 (1951); **23**, 381 (1952).
[6] H. Fröhlich. Adv. Phys., **3**, 325 (1954).
[7] R.P. Feynman. Phys. Rev., **97**, 660 (1955).
[8] R.P. Feynman, R.W. Hellwarth, C.K. Iddings, R.M. Platzman. Phys. Rev., **127**, 1004 (1962).
[9] R.Heiks, W. Johnston. J. Chem. Phys., **26**, 582 (1957).
[10] J. Yamashita, T.Kurosawa. J. Phys. Chem. Sol., **5**, 34 (1958).
[11] G.L. Sewell. Phil. Mag., **3**, 1361 (1958).
[12] T. Holstein. Ann. Phys., **8**, 325, 343 (1959).
[13] R. Kubo. J. Phys. Soc. Japan, **12**, 570 (1957).
[14] О.В. Константинов, В.И. Перель. ЖЭТФ, **39**, 197, 861 (1960).
[15] В.Л. Гуревич, Ю.А. Фирсов. ЖЭТФ, **40**, 199 (1961).
[16] С.С. Шалыт, Р.В. Парфеньев, Муждаба. ФТТ, **6**, 647 (1964).
[17] Yu.A. Firsov, V.L. Gurevich, R.V. Parfen'ev, I.M. Tsidil'kovskii. In: *Landau Levels Spectroscopy*, ed. by E.I.Rashba, G.Landhwer (Elsevier Science Publishers, 1991) p. 1183.
[18] И.Г. Ланг, Ю.А. Фирсов. ЖЭТФ, **43**, 1843 (1962).
[19] И.Г. Ланг, Ю.А. Фирсов. ЖЭТФ, **45**, 378 (1963).
[20] И.Г. Ланг, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **5**, 2799 (1963).
[21] М.И. Клингер. ДАН СССР, **142**, 1065 (1962).
[22] М.И. Клингер. ФТТ, **4**, 3075, 3086 (1962).
[23] L.Van Hove. Physica, **21**, 517, 901 (1955); **22**, 342 (1956).
[24] *Поляроны*, под ред. Ю.А.Фирсова (М., Наука, 1975).
[25] В.В. Брыксин. ЖЭТФ, **100**, 1556 (1991).
[26] Е.К. Кудинов, Ю.А. Фирсов. ЖЭТФ, **49**, 867 (1965).
[27] Е.К. Кудинов, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **8**, 666 (1966).
[28] И.Г. Ланг, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **9**, 3422 (1967).
[29] И.Г. Ланг, Ю.А. Фирсов. ЖЭТФ, **54**, 826 (1968).
[30] D. Emin. Phys. Rev. Lett., **25**, 1751 (1970).
[31] D. Emin. Phys. Rev. B, **3**, 1321 (1971); **4**, 3639 (1971).
[32] G.B. Arnold, T.Holstein. Ann. Phys., **132**, 163 (1981).
[33] T.Holstein. Ann. Phys., **132**, 212 (1981).
[34] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **10**, 2600 (1968).
[35] A.S. Alexandrov, V.V. Kabanov, D.K.Ray. Phys. Rev. B, **49**, 9915 (1994).
[36] Е.К. Кудинов, Ю.А. Фирсов. ЖЭТФ, **47**, 601 (1964).
[37] Е.К. Кудинов, Ю.А. Фирсов. ЖЭТФ, **7**, 546 (1965).
[38] В.Н. Богомолов, Е.К. Кудинов, Д.Н. Мирлин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **9**, 2077 (1967).
[39] D.M.Eagles. Phys. Rev., **130**, 1381 (1963); In: *Polarons and Exitons*, ed. by C.G.Kuper, G.S.Whitefield (Edinburg and London, 1963) p. 255.
[40] H.G. Reik. Sol. St. Commun., **1**, 67 (1963).
[41] M.I. Klinger. Phys. Lett., **7**, 102 (1963).
[42] H.G. Reik, D. Heese. J. Phys. Chem. Sol., **28**, 581 (1967).
[43] Ю.А. Фирсов. ФТТ, **10**, 1950 (1968).
[44] В.Н. Богомолов, Е.К. Кудинов, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **9**, 3175 (1967).
[45] G.B.Arnold, T. Holstein. Phys. Rev. Lett., **33**, 1547 (1974).
[46] I.G. Austin. J. Phys. C, **5**, 1687 (1972).
[47] V.V. Bryksin, Yu.A. Firsov. *Proc.* X^{th} *Int. Conf. on the Physics of Semiconductors* (1970) p. 767.
[48] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **13**, 3246 (1971).
[49] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **14**, 1857 (1972).

[50] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **61**, 2373 (1971).
[51] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **14**, 3599 (1972).
[52] В.В. Брыксин. ФТТ, **14**, 2902 (1972).
[53] А.Л. Эфрос. ФТТ, **9**, 1152 (1967).
[54] H. Böttger, V.V. Bryksin. *Hopping Conduction in Solids* (Akademie–Verlag, Berlin, 1985).
[55] W.V. Houston. Phys. Rev., **57**, 184 (1940).
[56] S. Maekawa. Phys. Rev. Lett., **24**, 1175 (1970).
[57] V.V. Bryksin, Yu.A. Firsov. Sol. St. Commun., **10**, 471 (1972).
[58] В.Н. Богомолов, А.И. Задорожный, Т.М. Павлова. ФТП, **15**, 2029 (1981).
[59] V.V. Bryksin, Yu.A. Firsov, S.A. Ktitorov. Sol. St. Commun., **39**, 385 (1981).
[60] В.В. Брыксин, Р. де Диос, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **29**, 1141 (1987).
[61] В.В. Брыксин. ФТТ, **29**, 2027 (1987).
[62] Ю.А. Фирсов. ФТТ, **5**, 2149 (1963).
[63] L. Friedman. Phys. Rev., **131**, 2455 (1963).
[64] L. Friedman, T. Holstein. Ann. Phys., **21**, 494 (1963).
[65] Ю.А. Фирсов. ФТТ, **10**, 1950 (1968).
[66] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **12**, 627 (1970).
[67] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **14**, 463 (1972).
[68] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **15**, 3235 (1973).
[69] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **15**, 3344 (1973).
[70] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **16**, 811 (1974).
[71] В.В. Брыксин, Ю.А. Фирсов. ФТТ, **16**, 1941 (1974).
[72] D. Emin, T. Holstein. Ann. Phys., **53**, 439 (1969).
[73] I.G. Austin, N.F. Mott. Adv. Phys., **18**, 41 (1969).
[74] F.J. Morin. Bell Syst. Techn. J., **37**, 1047 (1958).
[75] M. Cutler, N.F. Mott. Phys. Rev., **181**, 1336 (1969).
[76] K. Schotte. Zs. Phys., **196**, 393 (1966).
[77] А.Л. Эфрос. ФТТ, **9**, 1152 (1967).
[78] D. Emin. Phys. Rev. Lett., **35**, 882 (1975).
[79] Е.К. Кудинов. ФТТ, **18**, 1775 (1975).
[80] H. Böttger, V.V. Bryksin, F. Schulz. Phys. Rev. B, **48**, 161 (1993).
[81] F. Gagel, K. Maschke. Phys. Rev. B, **49**, 11170 (1994).
[82] В.Н. Богомолов, Т.М. Павлова. ФТП, **29**, вып. 5 (1995).
[83] В.В. Брыксин. ФТТ, **28**, 1731, 2981 (1986).
[84] В.В. Брыксин. ФТТ, **22**, 2048, 2441 (1980).
[85] В.В. Брыксин. ФТТ, **26**, 1362 (1984).
[86] Mc. Donald. Phys. Rev. B, **49**, 9428 (1994).
[87] H. Böttger, V.V. Bryksin. Phil. Mag. B, **42**, 297 (1980).
[88] H. Böttger, V.V. Bryksin. Phys. St. Sol (*b*), **81**, 97, 433 (1977).
[89] H. Böttger, V.V. Bryksin, F. Schulz. Phys. Rev. B, **49**, 2447 (1994).
[90] A.S. Alexandrov, J. Ranninger. Phys. Rev. B, **45**, 13109 (1992).
[91] J. Ranninger, V. Thibblin. Phys. Rev. B, **45**, 7730 (1992).
[92] А.Б. Мигдал. ЖЭТФ, **34**, 1438 (1958).
[93] B.K. Chakraverty. J. de Phys. Lett., **40**, L-99 (1979).
[94] B.K. Chakraverty. J. de Physique, **42**, 1351 (1981).
[95] A.S. Alexandrov, J. Ranninger. Phys. Rev. B, **24**, 1164 (1981).
[96] Э.И. Рашба. Опт. и спектр., **2**, 78 (1957).
[97] В.Л. Винецкий. ЖЭТФ, **40**, 1459 (1961).
[98] E.I. Rashba. In: *Exitons*, ed by E.I.Rashba, D.M.Struge (M., Nauka, 1985).
[99] M.R. Schafroth. Phys. Rev., **100**, 463 (1955).
[100] A.S. Alexandrov, J. Ranninger. Phys. Rev. B, **23**, 1796 (1981).
[101] A.S. Alexandrov, N.F. Mott. Int. J. Mod. Phys. B, **8**, 2075 (1994).
[102] А.С. Александров. Журн. физ. химии, **VII**, 273 (1983).
[103] В.В. Брыксин. ФТТ, **31**, 6 (1989).
[104] В.В. Брыксин. ФТТ, **32**, 343 (1990).
[105] A.A.Gogolin. Phys. St. Sol., **109**, 95 (1982).

[106] D. Emin. Adv. Phys., **22**, 57 (1973).
[107] D. Emin, T. Holstein. Phys. Rev. Lett., **36**, 323 (1976).
[108] H. Zheng, D. Feinberg, M. Avignon. Phys. Rev. B, **41**, 11557 (1990).
[109] D. Feinberg, S. Ciuchi, F. de Pasquale. J. Mod. Phys., **4**, 1317 (1990).
[110] H. de Ruedt, Ad. Lagendijk. Phys. Rev. B, **27**, 6097 (1983).
[111] P. Marsiglio. Phys. Rev. B, **42**, 2416 (1990).
[112] V.V. Kabanov, O.Yu. Mashtakov. Phys. Rev. B, **47**, 6060 (1993).
[113] F. Marsiglio. Phys. Lett. A, **180**, 280 (1993).

Редактор Л.В. Шаронова