1990 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 32, в. 1
1990 SOLID STATE PHYSICS Vol. 32, N 1

УДК 621.315.592

НЕАДИАБАТИЧЕСКИЙ РЕЖИМ В ДВУХУЗЕЛЬНОЙ МОДЕЛИ БИПОЛЯРОНА МАЛОГО РАДИУСА

А. Г. Петухов

Получено выражение для вероятности прыжка биполярона малого радиуса при произвольных температурах. Рассмотрение проводилось в рамках двухузельной модели в неадиабатическом режиме, когда вероятность прыжка лимитируется электронными переходами. Рассчитаны показатели экспонент и предэкспоненциальные множители для двух типов решений — туннельного (низкие температуры) и термоактивационного (высокие температуры). Результаты могут быть использованы для анализа прыжковой проводимости в материалах с биполяронным спариванием носителей заряда.

В некоторых материалах, таких как халькогенидные стеклообразные полупроводники [1], α-SiO_2 [2], WO_{3-x} [3], наблюдалась прыжковая проводимость, обусловленная перескоками биполяронов малого радиуса (БМР). Хотя такой механизм проводимости обсуждался в литературе (см., например, [1, 4]), вероятность перескока БМР между различными узлами решетки при произвольных температурах до сих пор не вычислялась.

Отметим, что в теории поляронов малого радиуса (ПМР), в частности при анализе прыжковой проводимости, аналогичная задача о вычислении вероятности прыжка ПМР занимает центральное место [5]. Такая задача рассматривалась в ряде работ [5-7], где использовалась двухузельная модель ПМР и было показано, что вероятность прыжка ПМР может быть вычислена квазиклассически подобно тому, как это делается в теории многофононных безызлучательных переходов [8, 9].

Целью данной работы является вычисление вероятности прыжка БМР в рамках двухузельной модели, сформулированной в [10]. Мы будем рассматривать только неадиабатический режим, когда ядра успевают много раз пройти через точку «встречи» термов за время, пока пара электронов резонансно протуннелирует с узла на узел (см. подробнее [6]). Количественный критерий неадиабатичности режима будет сформулирован ниже.

Рассмотрим пару узлов, каждый из которых описывается моделью Андерсона [11]. Запишем гамильтониан этой пары в виде

$$H_{\mathrm{tot}} = \frac{P^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 Q^2 + \left(\frac{\Delta}{2} - \lambda Q\right)\sum_{\sigma}(n_{1\sigma} - n_{2\sigma}) + U\sum_{i=1}^{2} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} + $$
$$+ C\sum_{i\neq j,\,\sigma,\,\sigma'}^{2} n_{i\sigma}n_{j\sigma'} + J\sum_{i\neq j,\,\sigma}^{2} a_{i\sigma}^{+}a_{j\sigma} + H_{\mathrm{int}} + H_{\mathrm{ph}}. \qquad (1)$$

Здесь Q — локальная мода, отвечающая асимметричной деформации, т. е. разности локальных мод узлов [6]; P — импульс, сопряженный с координатой Q; μ — приведенная масса ядер; ω_0 — частота локального фонона; Δ — разность одноэлектронных уровней узлов; λ — константа электрон-фононного взаимодействия (деформационный потенциал); $n_{i\sigma}$ — число заполнения одноэлектронного состояния со спином σ на узле i;

$a_{i\sigma}^{+}$, $a_{i\sigma}$ — соответствующие операторы рождения и уничтожения; U — энергия кулоновского отталкивания электронов, локализованных на одном узле; C — межцентровый кулоновский интеграл; J — межцентровый интеграл электронного переноса (туннелирования); H_{int} описывает гармоническое взаимодействие моды Q с решеточными фононами (термостатом); H_{ph} — гамильтониан этих фононов.

Отметим сразу же, что учет двух последних слагаемых в гамильтониане (1) имеет принципиальное значение, поскольку именно эти слагаемые обеспечивают локализацию электронов на одном из центров и релаксационный характер межцентровых электронных переходов [7, 12–14].

Если на паре узлов локализованы два электрона $\left(N=\sum\limits_{i\sigma} n_{i\sigma}=2\right)$, то собственными состояниями гамильтониана (1) являются три синглетных и одно триплетное состояние. Рассмотрение триплетного состояния было проведено в [10] и не представляет интереса для целей данной работы. Для исследования синглетных состояний удобно ввести операторы псевдоспина

$$\hat{S}_x=\frac{1}{2}\sum_\sigma (a_{1\sigma}^{+}a_{2\sigma}+a_{2\sigma}^{+}a_{1\sigma}),\qquad \hat{S}_y=\frac{i}{2}\sum_\sigma (a_{1\sigma}^{+}a_{2\sigma}-a_{2\sigma}^{+}a_{1\sigma}),$$

$$\hat{S}_z=\frac{1}{2}\sum_\sigma (n_{1\sigma}-n_{2\sigma}). \tag{2}$$

Нетрудно видеть, что в пространстве трех синглетных состояний $|1\rangle=a_{1\uparrow}^{+}a_{1\downarrow}^{+}|0\rangle$, $|2\rangle=1/\sqrt{2}\cdot(a_{1\uparrow}^{+}a_{2\downarrow}^{+}-a_{2\uparrow}^{+}a_{1\downarrow}^{+})|0\rangle$ и $|3\rangle=a_{2\uparrow}^{+}a_{2\downarrow}^{+}|0\rangle$, где $|0\rangle$ — вакуумное состояние, не содержащее электронов, операторы (2) удовлетворяют соотношениям коммутации для спина $s=1$, а гамильтониан (1) преобразуется к виду [1]

$$H_{\text{tot}}=H+H_{\text{int}}+H_{\text{ph}}, \tag{3}$$

где

$$H=\frac{P^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2Q^2+\left(\frac{\Delta}{2}-\lambda Q\right)\hat{S}_z+\bar{U}\hat{S}_z^2+2J\hat{S}_x, \tag{4}$$

$\bar{U}=U-C$. Отметим, что в двухузельной модели ПМР используется аналогичный спин-бозонный гамильтониан, но для $s=1/2$ [15]. При $J=0$ гамильтониан (4) является диагональным по «спиновому» квантовому числу s_z

$$H_{s_z}=\frac{P^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2\left(Q-s_z\frac{\lambda}{\mu\omega_0^2}\right)^2-U_{\text{эфф}}(1-s_z^2), \tag{5}$$

где $s_z=-1,\ 0,\ +1$; $U_{\text{эфф}}=\bar{U}-2W$ — эффективная корреляционная энергия; $W=\lambda^2/4\mu\omega_0^2$ — поляронный сдвиг. В (5) мы для простоты ограничились рассмотрением симметричного случая $\Delta=0$ и сдвинули начало отсчета энергии к минимуму адиабатического потенциала при $s_z=-1$. На рис. 1 показаны адиабатические потенциалы, отвечающие различным значениям s_z для случая отрицательной андерсоновской корреляционной энергии $U_{\text{эфф}}<0$. Как легко видеть, при $U_{\text{эфф}}<0$ биполяронные состояния с $s_z=\pm1$ являются энергетически выгодными по отношению к состоянию с $s_z=0$, отвечающему двум поляронам, локализованным на разных узлах. Прыжок биполярона соответствует изменению квантового числа s_z на ±2, т. е. перевороту псевдоспина.

Мы рассматриваем гамильтониан (4) с $J=0$, отвечающий бесконечно удаленным узлам, как невозмущенный. Сближение узлов приводит к росту J и, следовательно, к возникновению переходов между состояниями с различным значением псевдоспина. Наша задача состоит в вычислении темпа

---

[1] Конечно же, истинный спин двухэлектронной системы в синглетном состоянии равен нулю, а операторы псевдоспина имеют совершенно иной физический смысл. Так, например, $\hat{S}_z$ является оператором дипольного момента и т. п.

(вероятности в единицу времени) перехода из состояния с $s_z=-1$ в состояние с $s_z=+1$ под действием малого возмущения $2J\hat{S}_x$ (неадиабатический режим). Как было показано в [7] (см. также [14]), понятие темпа перехода имеет смысл только при рассмотрении полного гамильтониана (3), в котором учитываются диссипативные процессы взаимодействия с решеточными фононами, приводящие к сбою фазы волновой функции и разрушению когерентных состояний. При этом выражение для темпа перехода можно записать в следующем виде [7–9]:

$$\nu_{-1,+1}=\frac{2\pi}{\hbar Z_{-1}}\sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{T}\right)\gamma_n\rho_{+1}(E_n), \tag{6}$$

где Z_{-1} — статистическая сумма, отвечающая начальному состоянию с $s_z=-1$; γ_n — неадиабатический коэффициент перехода из n-го состояния в левой яме с $s_z=-1$ в состояние n в правой яме с $s_z=+1$ (рис. 1); $\rho_{+1}(E_n)$ — плотность уровней с энергией E_n в правой яме.

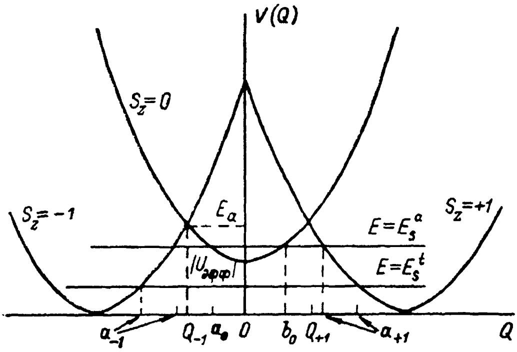

Рис. 1. Адиабатические потенциалы двухузельной модели БМР для $J=0$, $U_{эфф}<0$.

Горизонтальными линиями показаны оптимальные энергии, отвечающие прыжку БМР.

В неадиабатическом режиме коэффициент γ_n определяется квадратом модуля амплитуды перехода

$$\gamma_n=|\langle\hat{\psi}_{-1,n}|\hat{T}(E_n)|\hat{\psi}_{+1,n}\rangle|^2, \tag{7}$$

где $\hat{T}$-матрица может быть записана в виде борновского ряда, в котором оператор $2J\hat{S}_x$ рассматривается как возмущение

$$\hat{T}(E)=2J\hat{S}_x+2J\hat{S}_x\hat{G}(E)2J\hat{S}_x+\ldots \tag{8}$$

Здесь $\hat{G}(E)$ — матричная функция Грина невозмущенного гамильтониана (4) с $\Delta=J=0$

$$\hat{G}(E)=G_0\hat{I}+(G_+-G_0)\hat{S}_z^2+G_-\hat{S}_z, \tag{9}$$

где $\hat{I}$ — единичный оператор, а

$$G_0=(E-H_0)^{-1},\quad G_{+,-}=\frac{1}{2}[(E-H_{-1})^{-1}\pm(E-H_{+1})^{-1}]. \tag{10а), 10б}$$

Различные H_{s_z} даются формулой (5), а волновые функции $\hat{\psi}_{-1}$ и $\hat{\psi}_{+1}$ имеют вид

$$\hat{\psi}_{-1,n}=\varphi_{-1,n}(Q)\hat{\chi}_{-1},\quad \hat{\psi}_{+1,n}=\varphi_{+1,n}(Q)\hat{\chi}_{+1}, \tag{11}$$

где $\hat{\chi}_{\pm1}$ — собственные векторы оператора $\hat{S}_z$, отвечающие собственным значениям $s_z=\pm1$; $\varphi_{\pm1,n}$ — собственные функции операторов $H_{\pm1}$ (5). Подставляя (8)—(11) в (7), можно получить выражение для амплитуды перехода. Нетрудно видеть, что вклад первого порядка в амплитуду перехода обращается в нуль, а во втором порядке по J получим

$$\langle\hat{\psi}_{-1,n}|\hat{T}(E_n)|\hat{\psi}_{+1,n}\rangle=4J^2\langle\hat{\chi}_{-1}^{+}|\hat{S}_x^2|\hat{\chi}_{+1}\rangle\int\varphi_{-1,n}^*(Q)G_0(Q,Q',E_n)\times$$
$$\times\varphi_{+1,n}(Q')\,dQdQ', \tag{12}$$

где $G_0(Q,Q',E)$ — функция Грина (10а) в координатном представлении.

Интеграл в (12) удобнее всего вычислять в квазиклассическом приближении, используя метод комплексных траекторий Ландау [16, 17]. Запишем асимптотическое выражение для пропагатора $G_0(Q,Q',E)$ в приближении стационарной фазы [18, 19]

$$G_0(Q,\ Q',\ E) = \frac{\mu}{\hbar^2}\left[k_0(Q,\ E)\,k_0(Q',\ E)\right]^{-1/2}\exp\left(-2S_0(E)\right). \qquad (13)$$

Здесь

$$k_0(Q,\ E) = \hbar^{-1}\left[2\mu\left(V_0(Q) - E\right)\right]^{1/2} = \hbar^{-1}\left[2\mu\left(\frac{1}{2}\mu\omega_0^2 Q^2 + U_{\text{эфф}} - E\right)\right]^{1/2},$$

$$S_0(E) = \begin{cases} \dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_Q^{Q'} k_0(Q'',\ E)\,dQ'', & E < U_{\text{эфф}}, \\ \dfrac{1}{\hbar}\left[\displaystyle\int_Q^{a_0} k_0(Q'',\ E)\,dQ'' + \int_{b_0}^{Q'} k_0(Q'',\ E)\,dQ''\right], & E > U_{\text{эфф}}, \end{cases} \qquad (14)$$

a_0, b_0 — классические точки поворота для потенциала $V_0(Q)$. В формуле (13) опущены сингулярные члены, отвечающие многократному отражению от стенок потенциальной ямы в классически разрешенной области, поскольку в соответствии с выводами работы [7] не следует учитывать когерентные процессы.

При интегрировании по Q и Q' в (12) смещаем контур интегрирования в комплексную плоскость, что дает возможность использовать для квазиклассических функций $\varphi_{-1}(Q)$ и $\varphi_{+1}(Q)$ их асимптотические выражения вдали от классических точек поворота a_{-1} и a_{+1} (рис. 1). Вычисляя интеграл методом перевала, получим

$$\gamma(E) = \frac{4\omega_0^4\mu^2 J^4 \exp\left[-2\Psi(E)\right]}{(\hbar\omega_0)^2\,|F_{-1}F_{+1}|\,k_{-1}(Q_{-1})\,k_{+1}(Q_{+1})}, \qquad (15)$$

где

$$k_{\pm 1}(Q) = \hbar^{-1}\left[2\mu\left(V_{\pm 1}(Q) - E\right)\right]^{1/2} = \hbar^{-1}\left[\frac{1}{2}\mu\omega_0^2\left(Q \pm \frac{\lambda}{\mu\omega_0^2}\right)^2 - E\right]^{1/2},$$

$Q_{\pm 1}$ — точки пересечения термов (рис. 1),

$$F_{\pm 1} = \frac{d}{dQ}\left[V_{\pm 1}(Q) - V_0(Q)\right]\big|_{Q=Q_{\pm 1}}, \qquad (16)$$

$\Psi(E)$ дается выражением

$$\Psi(E) = \operatorname{Re}\left\{\int_{a_{-1}}^{Q_{-1}} k_{-1}(Q,\ E)\,dQ + \int_{Q_{-1}}^{Q_{+1}} k_0(Q,\ E)\,dQ + \int_{Q_{+1}}^{a_{+1}} k_{+1}(Q,\ E)\,dQ\right\}\frac{1}{\hbar}. \qquad (17)$$

Непосредственное вычисление по формуле (17) дает

$$\Psi(E) = \frac{2W}{\hbar\omega_0}\left[\sqrt{(1+u^2) - 4\varepsilon} + 2(u-\varepsilon)\ln\frac{1 - u + \sqrt{(1+u)^2 - 4\varepsilon}}{2\sqrt{|\varepsilon - u|}} - \right.$$
$$\left. - 2\varepsilon\ln\frac{1 + u + \sqrt{(1+u)^2 - 4\varepsilon}}{2\sqrt{\varepsilon}}\right], \qquad (18)$$

где $\varepsilon = E/2W$, $u = 1 - \bar{U}/2W > 0$, поскольку мы рассматриваем случай $U_{\text{эфф}} < 0$. Вычислим также

$$\tau(E) = -\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial E} = \begin{cases} \dfrac{2}{\omega_0}\operatorname{Arsh}\dfrac{1 + u - 2\varepsilon}{2\sqrt{\varepsilon(u - \varepsilon)}}, & \varepsilon < u, \\ \dfrac{2}{\omega_0}\operatorname{Arch}\dfrac{1 + u - 2\varepsilon}{2\sqrt{\varepsilon(\varepsilon - u)}}, & \varepsilon > u. \end{cases} \qquad (19)$$

Теперь можно перейти к расчету темпа перехода. Для достаточно высоких температур суммирование в (6) заменяем интегрированием

$$\nu_{-1,\ +1} = \frac{2\pi}{\hbar^3\omega_0^2 Z_{-1}}\int \exp\left(-\frac{E}{T}\right)\gamma(E)\,dE. \qquad (20)$$

Подставляя (15) в (20) и интегрируя по E методом перевала, получим

$$\nu_{-1,+1}=\frac{J^4\pi}{\hbar Z_{-1}(\hbar\omega_0)^2 W(E_a-E_s)}\left(\frac{2\pi}{\Phi''(E_s)}\right)^{1/2}\exp[-S(T)], \tag{21}$$

где $E_a=W/2\cdot(1+u)^2$ — энергия активации, отвечающая точкам пересечения термов $Q_{\pm1}$, $Z_{-1}=(2\mathrm{sh}(\hbar\omega_0/2T))^{-1}$, $S(T)=\Phi(E_s)$,

$$\Phi(E)=E/T+2\Psi(E), \tag{22}$$

а E_s определяется из уравнения

$$\left.\frac{d\Phi}{dE}\right|_{E=E_s}=\frac{1}{T}-\frac{2}{\hbar}\tau(E_s)=0. \tag{23}$$

Уравнение (23) имеет два решения, минимизирующих действие $\Phi(E)$. При низких температурах реализуется решение туннельного типа с $E_s=E_s^t<2W-\bar{U}$, а при высоких — «термоактивационного» типа с $E_s=E_s^a>2W-\bar{U}$

$$E_s^t=W[u+\mathrm{ch}^{-2}\xi_s-\mathrm{th}\,\xi_s(u^2-\mathrm{ch}^{-2}\xi_s)^{1/2}], \tag{24}$$

$$E_s^a=W[u-\mathrm{sh}^{-2}\xi_s+\mathrm{cth}\,\xi_s(u^2+\mathrm{sh}^{-2}\xi_s)^{1/2}], \tag{25}$$

где $\xi_s=(\omega_0/2)\tau_s=\hbar\omega_0/4T$. Соответствующие значения $S(T)$ даются выражениями

$$S_t(T)=(4W/\hbar\omega_0)[u\xi_s+\mathrm{th}\,\xi_s-u\,\mathrm{Arch}(u\,\mathrm{ch}\,\xi_s)+(u^2-\mathrm{ch}^{-2}\xi_s)^{1/2}], \tag{26}$$

$$S_a(T)=(4W/\hbar\omega_0)[u\xi_s+\mathrm{cth}\,\xi_s+u\,\mathrm{Arsh}(u\,\mathrm{sh}\,\xi_s)-(u^2+\mathrm{sh}^{-2}\xi_s)^{1/2}]. \tag{27}$$

Формулы (21)—(27) позволяют вычислить темп перехода при произвольных температурах.

На рис. 2 показана температурная зависимость действия $S(T)$ для различных решений уравнения (23). При низких температурах абсолютному минимуму действия отвечает туннельное решение с $S=S_t(T)$, которое существует только при $T<T_1=\hbar\omega_0(4\mathrm{Arch}(1/u))^{-1}$, а при высоких температурах конкуренцию выигрывает термоактивационное[2] решение с $S=S_a(T)\simeq(W/2T)(1+u)^2$. Температуру перехода T_a от туннельного режима к активационному можно грубо оценить, приравняв предельные значения $S_a(T)$ и $S_t(0)=(4W/\hbar\omega_0)(1+u-u\ln u)$

$$T_a\simeq(\hbar\omega_0/4)(1+u)^2/(1+u-u\ln u). \tag{28}$$

При высоких температурах ($\xi_s=\hbar\omega_0/4T\ll1$, $T\gg T_a$) температурная зависимость вероятности прыжка становится чисто активационной

$$\nu_{-1,+1}=\frac{\omega_0}{2\pi}\frac{16\pi^{5/2}(1+u)^2J^4}{(\hbar\omega_0)^3E_a(1-u)}\left(\frac{T}{E_a}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{E_a}{T}\right). \tag{29}$$

При достаточно больших значениях интеграла туннелирования J теория возмущений по этому параметру неприменима и для вычисления темпа перехода необходимо воспользоваться адиабатической теорией [5, 6, 8, 9]. Можно показать, что в адиабатическом режиме аналог формулы (21) при достаточно низких температурах имеет вид [6, 9]

$$\nu_{-1,+1}^{ad}=\frac{1}{2\pi\hbar Z_{-1}}\left(\frac{2\pi}{\Phi''(E_s)}\right)^{1/2}\exp(-S(T)). \tag{30}$$

Сравнивая (30) и (21), получим критерий неадиабатичности режима

$$\eta=2\pi^2J^4/(\hbar\omega_0)^2WE_a\ll1, \tag{31}$$

где η — так называемый параметр неадиабатичности [5, 6]. Критерий (31) справедлив при достаточно низких температурах, когда прыжки биполя-

[2] Решение с $S=S_a(T)$ мы называем термоактивационным условно, имея в виду, что соответствующая ему «энергия активации» $E_a(T)=TS_a(T)$ хотя и зависит от температуры, но лежит в узком интервале $|U_{эфф}|<E_a(T)<(W/2)(1+u)^2$.

рона осуществляются туннельным образом. Для того чтобы сформулировать критерий неадиабатичности при произвольных температурах, необходимо более детально исследовать адиабатический режим прыжков и процесс диссоциации БМР. Такое рассмотрение, однако, выходит за рамки данной работы.

Отметим, что в частном случае $u=0$ (нулевая эффективная корреляционная энергия) имеется только решение с $S=S_a(T)$, а формула (21) с точностью до множителя 4 совпадает с результатом Холстейна [20] для случая сильной дисперсии решеточных фононов, полученным для ПМР в четвертом порядке по J. Это неудивительно, поскольку при $u=0$ прыжок биполярона осуществляется за счет двух последовательных перескоков ПМР. Наличие множителя 4 связано с тождественностью частиц и неразличимостью процессов перехода электронов с различным направлением спина.

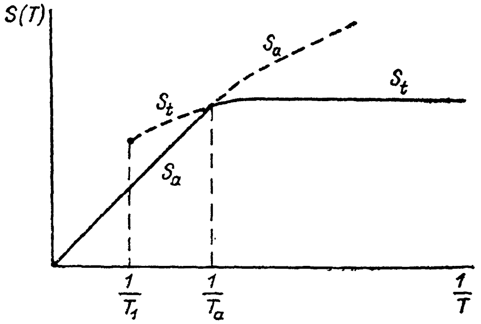

Рис. 2. Температурная зависимость оптимального действия, отвечающего прыжку БМР, $T_1=\hbar\omega_0(4\mathrm{Arch}(1/u))^{-1}$.

Величины $S_t(T)$, $S_a(T)$ и T_a даются формулами (26)—(28).

Интересно также сравнить полученные результаты с результатами работ [21, 22], где рассматривались термоактивационные прыжки БМР в рамках метода эффективного биполяронного гамильтониана. Отметим, что в пределе сильной связи, когда $u \leqslant 1$ и глубина центральной ямы $\delta=E_a-|U_{эфф}|$ (рис. 1) близка к энергии локального фонона $\hbar\omega_0$, выражение для предэкспоненциального множителя в формуле (29) не является корректным ввиду неприменимости квазиклассического подхода к описанию состояний с $S_z=0$ и энергией в интервале $|U_{эфф}|<E<E_a$. В этом случае, однако, туннельное решение существует вплоть до высоких температур $T<T_1$ (рис. 1) и в области $\hbar\omega_0/4<T<T_1$ температурная зависимость $S_t(T)$ плавно переходит в активационную. Нетрудно видеть, что в этой области при $\delta \ll E_a$

$$E_s^t=E_a(1-\xi_s^2+O(\delta/E_a)). \tag{32}$$

Подставляя (32) в (21), получим

$$\nu_{-1,+1}=\frac{8J^4\pi^{3/2}}{\hbar(\hbar\omega_0)^2W}\left(\frac{T}{E_a}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{E_a}{T}\right). \tag{33}$$

Если теперь провести замену обозначений, соответствующую обозначениям работы [22], а именно энергию активации прыжка ПМР $W/2$ заменить на E_a, энергию связи БМР $|U_{эфф}|=2W-\bar{U} \rightarrow U$ и соответственно $u \rightarrow U/4E_a$, а $E_a=(W/2)(1+u)^2 \rightarrow (U+4E_a)^2/16E_a$, то, как нетрудно видеть, формула (33) в точности совпадает с формулой (41) из работы [22].

Отметим, что по смыслу туннельное решение с $S=S_t(T)$ отвечает прыжку биполярона как целого, в то время как активационное решение соответствует двум последовательным прыжкам ПМР. Важно подчеркнуть, что в случае $u<1$, когда нельзя пренебречь энергией кулоновского отталкивания электронов $\bar{U}$, прыжок БМР как целого при температурах $T<T_1$ невозможен.

В заключение обсудим кратко экспериментальные данные, полученные в работе [3]. В [3] было показано, что в нестехиометрическом кристаллическом WO_{3-x} имеет место диамагнитное спаривание ПМР, приводящее к образованию автолокализованных БМР. Были найдены энергии оптической ионизации БМР $E_b^{\mathrm{opt}}=1.1$ эВ и ПМР $E_p^{\mathrm{opt}}=0.71$ эВ, а также энергия активации темновой проводимости $E_a=0.16$ эВ, отвечающей перескокам БМР. Проводимость измерялась в довольно узком интервале температур $\sim 90 \div 130$ К. С помощью элементарных вычислений легко показать [23], что $E_p^{\mathrm{opt}}-E_b^{\mathrm{opt}}=U_{\text{эфф}}=U-2W$. Таким образом, для WO_{3-x} величина $U_{\text{эфф}}$ составляет -0.4 эВ. В то же время энергия активации темновой проводимости E_a существенно меньше $|U_{\text{эфф}}|$, хотя из вышеприведенной теории (см. формулы (21), (29)), следует, что эта энергия $E_a=(W/2)(1+u)^2>|U_{\text{эфф}}|$. Указанное противоречие, по всей вероятности, связано с тем, что измеренная проводимость либо отвечает области температур, близких к температуре перехода от туннельных прыжков к активационным, где температурная зависимость темпа перехода не является экспоненциальной, либо соответствует адиабатическому режиму. В последнем случае происходит сильная редукция конфигурационного барьера за счет квантовомеханического расщепления термов [10].

Дальнейшее сравнение теории с экспериментом можно проводить, анализируя проводимость на переменном токе [24]. Такой анализ, однако, требует отдельного рассмотрения.

Список литературы

[1] Elliot S. R. // Phil. Mag. 1977. V. B36. N 9. P. 1291—1299.
[2] Meaudre M., Meaudre R. // Phys. Rev. 1984. V. B29. N 12. P. 7014—7019.
[3] Shirmer O. F., Salje E. // J. Phys. 1980. V. C13. P. L1067—L1071.
[4] Long A. R. // Adv. Phys. 1982. V. 31. N 5. P. 553—637.
[5] Сб. «Поляроны» / Под ред. Ю. А. Фирсова. М.: Наука, 1975. 424 с.
[6] Holstein T. // Phil. Mag. 1978. V. B37. N 1. P. 49—62.
[7] Holstein T. // Phil. Mag. 1978. V. B37. N 4. P. 499—526.
[8] Englman R. // Sol. St. Comm. 1983. V. 47. N 9. P. 723—726.
[9] Мешков С. В. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. № 11. С. 1734—1745.
[10] Петухов А. Г. // ФТП. 1988. Т. 22. № 3. С. 527—529.
[11] Anderson P. W. // Phys. Rev. Lett. 1975. V. 34. N 15. P. 953—955.
[12] Langer J. S. // Ann. Phys. (N. Y.). 1969. V. 54. P. 258—275.
[13] Caldeira A. O., Legget A. J. // Ann. Phys. (N. Y.). 1983. V. 149. P. 374—456.
[14] Ларкин А. И., Овчинников Ю. Н. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 2. С. 719—726.
[15] Feinberg D., Ranninger J. // Physica. 1984. V. D14. P. 29—48.
[16] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1975. 752 с.
[17] Гельмонт Б. Л., Перель В. И., Яссиевич И. Н. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 3. С. 727—733.
[18] McLaughlin D. W. // J. Math. Phys. 1972. V. 13. N 8. P. 1099—1108.
[19] Holstein B. R., Swift A. R. // Am. J. Phys. 1982. V. 50. N 9. P. 829—839.
[20] Holstein T. // Ann. Phys. (N. Y.). 1981. V. 132. P. 212—234.
[21] Брыксин В. В., Волошин В. С. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 8. С. 2357—2364.
[22] Брыксин В. В., Гольцев А. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 5. С. 1476—1486.
[23] Балагуров Л. А., Омельяновский Э. М., Петухов А. Г., Стариков М. Н., Фойгель М. Г. // ФТП. 1987. Т. 21. № 9. С. 1631—1636.
[24] Петухов А. Г., Фойгель М. Г. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 3. С. 1037—1048.

Одесский государственный университет
им. И. И. Мечникова
Одесса

Поступило в Редакцию
31 марта 1989 г.
В окончательной редакции
11 июля 1989 г.