

УДК 621.315.592

© 1992

КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ КОНТИНУАЛЬНОГО ПОЛЯРОНА СИЛЬНОЙ СВЯЗИ ВБЛИЗИ РАЗДЕЛА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ФАЗ

B. K. Мухоморов

Установлены условия, при которых электростатические силы изображения на границе раздела диэлектрических фаз приводят к фиксации полярона в пространстве. Используя метод коллоктивных координат Боголюбова—Тябликова выведены уравнения, описывающие осцилляции центра инерции полярона около положения равновесия. Приведены ограничения сверху и снизу, накладываемые на ширину щели фазы нахождения полярона, при которой осцилляции не разрушаются. Рассмотрено дальнодействующее резонансное взаимодействие двух осцилляторов, приводящее к появлению эффективного притяжения поляронов. Приведены численные оценки на примере расчета состояний полярона в аммиаке.

1. Известно [1, 2], что на заряд, помещенный вблизи границы раздела диэлектрических фаз, действуют электростатические силы изображения, направленные по нормали к плоскости раздела. В зависимости от величины отношения диэлектрических проницаемостей смежных фаз заряд будет либо отталкиваться от границы, либо притягиваться. В настоящей работе обсуждается ситуация, когда электрон помещен в макроскопический слой¹ толщиной $2h$ конденсированной фазы с диэлектрической проницаемостью ϵ_0 между двумя плоскопараллельными бесконечно протяженными однородными диэлектриками (статические диэлектрические проницаемости которых ϵ_1 и ϵ_2) толщиной $H \gg 2h$.

Для дальнейшего понадобится электростатический потенциал, создаваемый единичным зарядом в смежных фазах 1 и 2. Воспользуемся для этого методом изображений. Зная значения потенциалов в различных точках пространства, занятого диэлектрическими средами, можно определить условия, при которых заряд фиксируется на некотором равновесном расстоянии от границ раздела.

Выберем начало системы координат на равном расстоянии h от поверхностей массивных диэлектриков, направив ось z перпендикулярно плоскостям границ раздела. Электростатические потенциалы Φ , во всех трех средах можно найти, решая уравнение Пуассона для однородных изотропных диэлектриков со следующими граничными условиями на поверхностях раздела сред с разными диэлектрическими проницаемостями:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= \Phi_0 |_{z=-h}, \quad \Phi_2 = \Phi_0 |_{z=h}, \\ \epsilon_1 \frac{\partial \Phi_1}{\partial z} &= \epsilon_0 \frac{\partial \Phi_0}{\partial z} \Bigg|_{z=-h}, \quad \epsilon_2 \frac{\partial \Phi_2}{\partial z} = \epsilon_0 \frac{\partial \Phi_0}{\partial z} \Bigg|_{z=h}. \end{aligned} \quad (1)$$

¹ Слой считается макроскопическим в том смысле, что его толщина $2h \gg R_p - 10 a_0^*$ — характерного размера континуального полярона; $a_0^* = h^2 e^*/e^2 m^*$ — эффективный боровский радиус.

Индексы 1 и 2 относятся к смежным фазам, 0 — к фазе нахождения электрона. Пользуясь методом изображений [1, 2], находим в общем виде для электростатического потенциала Φ_0 следующее выражение:

$$\begin{aligned} \Phi_0 = & -\frac{q}{\epsilon_0 [x^2 + y^2 + (z + a)^2]^{1/2}} - \\ & -\frac{q_1^{(1)}}{\epsilon_0} \sum_{j=0}^n \left\{ \frac{1}{[x^2 + y^2 + (z - a + 2h + 4jh)^2]^{1/2}} - \right. \\ & - \frac{1}{[x^2 + y^2 + (z + a + 4h + 4jh)^2]^{1/2}} \Big\} - \\ & -\frac{q_2^{(1)}}{\epsilon_0} \sum_{j=0}^n \left\{ \frac{1}{[x^2 + y^2 + (z - a - 2h - 4jh)^2]^{1/2}} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{[x^2 + y^2 + (z + a - 4h - 4jh)^2]^{1/2}} \right\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $q \equiv |e|$, $q_1^{(1)}$ и $q_2^{(1)}$ — заряды изображений на фазах 1 и 2 соответственно, a — координата электрона по оси z . Выполняя суммирование в (2) и полагая, что $n \rightarrow \infty$, окончательно находим для потенциала в фазе 0

$$\begin{aligned} \Phi_0 = & -\frac{q}{\epsilon_0 [x^2 + y^2 + (z + a)^2]^{1/2}} + \Phi_0^{(1)} + \Phi_0^{(2)}, \\ \Phi_0^{(1)} = & -\frac{q_1^{(1)}}{\epsilon_0} \left\{ \frac{2}{[x^2 + y^2 + (z - a + 2h)^2]^{1/2}} - \right. \\ & - \frac{[x^2 + y^2 + (z - a + 2h)^2]^{1/2}}{8h^2} + \\ & + \frac{[x^2 + y^2 + (z + a + 4h)^2]^{1/2}}{8h^2} - \\ & \left. - \frac{2}{[x^2 + y^2 + (z + a + 4h)^2]^{1/2}} \right\}, \\ \Phi_0^{(2)} = & -\frac{q_2^{(1)}}{\epsilon_0} \left\{ \frac{[x^2 + y^2 + (z + a - 4h)^2]^{1/2}}{8h^2} - \right. \\ & - \frac{2}{[x^2 + y^2 + (z + a - 4h)^2]^{1/2}} + \\ & + \frac{2}{[x^2 + y^2 + (z - a - 2h)^2]^{1/2}} - \frac{[x^2 + y^2 + (z - a - 2h)^2]^{1/2}}{8h^2} \Big\}. \end{aligned} \quad (3)$$

В соответствии с методом изображений запишем также электростатические потенциалы Φ_1 и Φ_2 в бесконечно протяженных средах 1 и 2 следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi_1 = & \frac{q_1^{(2)}}{\epsilon_1 [x^2 + y^2 + (z + a)^2]^{1/2}}, \\ \Phi_2 = & \frac{q_2^{(2)}}{\epsilon_2 [x^2 + y^2 + (z + a)^2]^{1/2}}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь необходимо сделать замечание. В том случае, если волновая функция электрона распространяется через границу раздела фаз, то потенциалы (2) — (4)

не могут быть использованы из-за возникающей сингулярности на границах раздела. Однако в рассматриваемом случае $h \gg R_p$ эти потенциалы являются достаточно хорошим приближением.

Фиктивные заряды изображения $q_1^{(1)}$, $q_2^{(1)}$, $q_1^{(2)}$ и $q_2^{(2)}$ определяются из граничных условий (1). В дальнейшем понадобятся только заряды $q_1^{(1)}$ и $q_2^{(1)}$, которые можно записать следующим образом:

$$q_1^{(1)} = -q \frac{\left[\left(1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}\right) \left(\delta_2 + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} \gamma_2\right) - \left(1 - \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0}\right) \left(\beta_2 + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \alpha_2\right) \right]}{\left[\left(\beta_2 + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \alpha_2\right) \left(\delta_1 + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} \gamma_1\right) - \left(\beta_1 + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \alpha_1\right) \left(\delta_2 + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} \gamma_2\right) \right]},$$

$$q_2^{(1)} = -q \frac{\left[\left(1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}\right) \left(\delta_1 + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} \gamma_1\right) - \left(1 - \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0}\right) \left(\beta_1 + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \alpha_1\right) \right]}{\left[\left(\delta_2 + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} \gamma_2\right) \left(\beta_1 + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \alpha_1\right) - \left(\beta_2 + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \alpha_2\right) \left(\delta_1 + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_0} \gamma_1\right) \right]}, \quad (5)$$

где использованы обозначения

$$\alpha_1 = (a - h) \left[\frac{2}{h - a} + \frac{a + h}{4h^2} - \frac{2}{3h - a} \right],$$

$$\alpha_2 = (a - h) \left[\frac{a - h}{4h^2} - \frac{2}{a - 5h} - \frac{2}{a + 3h} \right],$$

$$\beta_1 = (a - h)^2 \left[\frac{2}{(a + 3h)^2} - \frac{2}{(h - a)^2} \right],$$

$$\beta_2 = (a - h)^2 \left[\frac{2}{(a - 5h)^2} - \frac{2}{(a + 3h)^2} \right],$$

$$\gamma_1 = (a + h) \left[\frac{2}{3h - a} + \frac{h + a}{4h^2} - \frac{2}{a + 5h} \right],$$

$$\gamma_2 = (a + h) \left[-\frac{2}{a - 3h} + \frac{a - h}{4h^2} - \frac{2}{a + h} \right],$$

$$\delta_1 = (a + h)^2 \left[-\frac{2}{(3h - a)^2} + \frac{2}{(5h + a)^2} \right],$$

$$\delta_2 = (a + h)^2 \left[\frac{2}{(a - 3h)^2} - \frac{2}{(a + h)^2} \right]. \quad (6)$$

В зависимости от величины отношений $\varepsilon_1/\varepsilon_0$ и $\varepsilon_2/\varepsilon_0$ заряды изображений $q_1^{(1)}$ и $q_2^{(1)}$ будут либо отрицательными, либо положительными. В том случае, когда $q_1^{(1)} < 0$ и $q_2^{(1)} < 0$, электростатические силы, действующие на электрон, будут направлены в глубь фазы 0, т. е. электрон отталкивается от границ раздела диэлектрических фаз 1—0 и 2—0 и тем самым становится возможна его фиксация в области фазы 0 на некотором равновесном расстоянии a по оси z , которое может быть определено из экстремальных свойств электростатической энергии взаимодействия электрона с зарядами $q_1^{(1)}$ и $q_2^{(1)}$.

2. Перейдем к рассмотрению движения электрона в поляризующейся среде с учетом действия сил изображения. Для описания состояний дополнительного

электрона воспользуемся изотропной континуальной моделью автолокализации, учитывающей взаимодействие электрона с бездисперсионными продольными оптическими фононами в приближении сильной связи. Запишем гамильтониан электрона, связанного со скалярным полем фононов в приближении эффективной массы, следующим образом:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \sum_t [V_t b_t \exp(i\mathbf{fr}) + V_t^* b_t^* \exp(-i\mathbf{fr})] + \\ + \sum_t \hbar\omega_0 b_t^* b_t + \sum_{j=1,2} e\Phi_0^{(j)}(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Здесь \mathbf{r} — радиус-вектор электрона; p — его импульс; $e = -|e|$; m^* — изотропная эффективная масса электрона; ω_0 — предельная ($f=0$) частота продольной ветви оптических фононов; $V_t = -(i\hbar\omega_0/f)(\hbar/2m^*\omega_0)^{1/4}(4\pi\alpha_c/V_0)^{1/2}$ — Фурье-коэффициенты взаимодействия электрона с длинноволновыми фононами; $\alpha_c = (e^2/2\epsilon^*\hbar\omega_0)(2m^*\omega_0/\hbar)^{1/2}$ — безразмерная константа связи; $\epsilon^* = \epsilon_0^\infty - \epsilon_0^{-1}$ — эффективная диэлектрическая проницаемость среды; ϵ_0^∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость фазы 0; V_0 — объем однородного и изотропного диэлектрического континуума. Квантовые амплитуды скалярного поля b_t и b_t^* удовлетворяют соотношениям коммутации для Бозе-амплитуд $[b_t, b_t^*] = \delta_{tt}$, $[b_t, b_{t'}] = [b_t^*, b_{t'}^*] = 0$.

В дальнейшем при анализе гамильтониана (7) воспользуемся адиабатической теорией возмущений Боголюбова—Тяблкова [3, 4], в которой за малую величину принимают кинетическую энергию фононного поля. Следуя [3, 4], с помощью соотношения $\hbar\omega_0 = \xi\nu_0$ введем безразмерный малый параметр $\xi \ll 1$. Этот подход позволяет последовательно разложить в ряд гамильтониан (7) по степеням параметра ξ .

Перейдем от бозевских операторов b_t и b_t^* к комплексным операторам координат f -го осциллятора поля и канонически сопряженным импульсам согласно соотношениям

$$q_t = \frac{\xi}{\sqrt{2}} (b_t + b_{-t}^*), \\ p_t = -i \frac{\partial}{\partial q_t} = \frac{i}{\xi\sqrt{2}} (b_t^* - b_{-t}), \quad (8)$$

удовлетворяющим перестановочным соотношениям $[q_t, p_t] = i\delta_{tt}$. В обозначениях (8) энергия свободного фононного поля разделяется на кинетическую и потенциальную энергию осцилляторов поля. Используя (8), перепишем гамильтониан (7) следующим образом:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_t q_t (W_t + W_{-t}^*) \exp(i\mathbf{fr}) + \frac{1}{2} \sum_t \nu_0 q_t q_{-t} + \\ + \sum_{j=1,2} e\Phi_0^{(j)}(\mathbf{r}) + \frac{\xi^4}{2} \sum_t \nu_0 p_t p_{-t}, \\ W_t = -\frac{ie}{f}\xi \sqrt{\frac{4\pi\nu_0}{\epsilon^*V_0}}. \quad (9)$$

Воспользуемся каноническим преобразованием координат [3, 4], которое позволяет представить радиус-вектор \mathbf{r} электрона в виде двух составляющих: внутренней трансляционно-инвариантной переменной ρ и переменной \mathbf{R} , отвечающей за движение системы как целое

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} + \rho, \quad q_t = (u_t + \xi Q_t) \exp(i f \mathbf{R}). \quad (10)$$

Здесь Q_t — новые операторы координаты f -го осциллятора поля, описывающие его малые квантовые флуктуации вблизи классического значения u_t . Чтобы полное число независимых динамических переменных в системе сохранилось, на новые координаты фононного поля Q_t накладываются три дополнительных условия связи

$$\sum_t f v_t^* Q_t = 0. \quad (11)$$

Преобразование координат (10) позволяет развить теорию возмущений по параметру ξ .

Вспомогательные функции u_t и v_t выбираются таким образом, чтобы удовлетворялись условия ортогональности и вещественности

$$\sum_t f_\alpha f_\beta u_t v_t^* = \delta_{\alpha\beta},$$

$$v_t^* = v_{-t}, \quad u_t^* = u_{-t}. \quad (12)$$

Учитывая определение (10), а также соотношения для производных

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \rho} \equiv \frac{\partial}{\partial \rho},$$

$$\frac{\partial}{\partial q_t} = \sum_k \frac{\partial Q_k}{\partial q_t} \frac{\partial}{\partial Q_k} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_t} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}, \quad (13)$$

гамильтониан (9) в новых переменных представим в виде ряда по степеням ξ

$$H = \frac{p_\rho^2}{2m^*} + \sum_t \frac{1}{\sqrt{2}} (W_t + W_{-t}^*) u_t \exp(if\rho) + \frac{1}{2} \sum_t \nu_0 u_t u_{-t} -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_t \nu_0 v_t^* v_{-t} f f \frac{\partial^2}{\partial I^2} + U(z=0) + \frac{1}{2} U''(z=o) z^2 + \dots +$$

$$+ \xi \left\{ \sum_t \frac{1}{\sqrt{2}} (W_t + W_{-t}^*) Q_t \exp(if\rho) + \frac{1}{2} \sum_t (Q_t u_{-t} + u_t Q_{-t}) \nu_0 + \right.$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_t \nu_0 [v_t^* p'_{-t} \frac{\partial}{\partial I} - v_{-t}^* p_t f \frac{\partial}{\partial I}] \} + \frac{\xi^2}{2} \sum_t \nu_0 (Q_t Q_{-t} + p_t p'_{-t}) + \dots =$$

$$= H_0 + \xi H_1 + \xi^2 H_2 + \dots \quad (14)$$

Здесь использовано обозначение: $\partial / \partial I = \xi^2 \partial / \partial \mathbf{R}$ и $p_t' = -i \partial / \partial Q_t -$

$-\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_l \mathbf{f} (-i\partial/\partial Q_{\mathbf{k}})$, а также учтено, что для принятой толщины слоя h энергия взаимодействия $U = \sum_{l=1,2} e\Phi_0^{(l)}$ электрона с электростатическими силами изображения является величиной малой и может быть разложена в ряд Тейлора около $z = 0$. Условие $U'(z = 0) = 0$ позволяет найти величину параметра смещения a .

Следуя [4], неопределенные комплексные величины v_l найдем, представив p_l в виде суммы $p_l = \pi_l + a_l$. Потребуем, чтобы входящие в H_1 члены линейные по π_l исчезли. Тогда условие равенства нулю коэффициентов при π_l принимает следующий вид:

$$v_0 \left[a'_l - i v_l \left(f \frac{\partial}{\partial I} \right) \right] - u_l \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* k f v_0 \left[a'_{-\mathbf{k}} - i v_{\mathbf{k}} \left(f \frac{\partial}{\partial I} \right) \right] = 0, \quad (15)$$

где

$$a'_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \sum_l (k f) u_l a_l.$$

Пользуясь свободой выбора $a_{\mathbf{k}}$, потребуем, чтобы $a_{\mathbf{k}} = 0$. Тогда (15) принимает вид

$$v_0 v_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{h} k \frac{\partial}{\partial I} \right) - u_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}} v_l^*(k f) v_0 v_l \left(f \frac{\partial}{\partial I} \right) = 0. \quad (16)$$

При учете условия ортогональности (12) уравнение (16) удовлетворится, если положить

$$v_0 v_{\mathbf{k}} \left(k \frac{\partial}{\partial I} \right) = h^2 (k V) u_{\mathbf{k}}, \quad (17)$$

где V — оператор вектора скорости. Отсюда находим $v_{\mathbf{k}}$

$$v_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} = \frac{1}{m_{\alpha}^{**}} \frac{u_{\mathbf{k}}}{v_0}, \quad \alpha = x, y, z, \quad (18)$$

где

$$m_{\alpha}^{**} = \sum_l h^2 |f_{\alpha}|^2 + |u_l|^2 / v_0^2 \xi^2$$

— компонента эффективной массы полярона в α -м направлении.

Волновое уравнение с гамильтонианом (14) можно решать методом теории возмущений. Для этого запишем полную волновую функцию в виде ряда

$$\Psi = \Psi_0 + \xi \Psi_1 + \xi^2 \Psi_2 + \dots \quad (19)$$

и соответственно полную энергию

$$E = E_0 + \xi E_1 + \xi^2 E_2 + \dots \quad (20)$$

Тогда уравнение $(H - E) \Psi = 0$ сводится к бесконечной системе уравнений

$$(H_0 - E_0) \Psi_0 = 0, \quad (21)$$

$$(H_0 - E_0) \Psi_1 = (E_1 - H_1) \Psi_0, \quad (22)$$

$$(H_0 - E_0) \Psi_2 = (E_2 - H_2) \Psi_0 + (E_1 - H_1) \Psi_1 \dots \quad (23)$$

Главным членом разложения (14), несущим нетривиальную информацию о системе, является H_0 . Поскольку оператор H_0 действует только на переменные ρ и R и не включает в себя полевых переменных Q_t , то полную волновую функцию нулевого приближения аппроксимируем мультиплексивной формой (адиабатическое приближение)

$$\Psi_0 = \psi(\rho, R) \Phi_0(\dots Q_t \dots). \quad (24)$$

Здесь $\Phi_0(\dots Q_t \dots)$ — некоторая функция переменных Q_t , а $\psi(\rho, R)$ удовлетворяет уравнению

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_\rho^2 + \sum_t \frac{1}{\sqrt{2}} (W_t + W_{-t}^*) u_t \exp(it\rho) - \frac{1}{2} \sum_t v_0 v_t^* v_{-t} \frac{\partial^2}{\partial I^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} U''(z=0) (R_z + \rho_z)^2 - W_0 \right\} \psi(\rho, R) = 0, \\ W_0 = E_0 - \frac{1}{2} \sum_t v_0 u_t u_{-t} - U(z=0). \quad (25)$$

Принимая во внимание определение функции v_t (18), перепишем уравнение (25) следующим образом:

$$[H(\rho) + H(R) + V(\rho, R)] \psi(\rho, R) = w_0 \psi(\rho, R) = w_0 \psi(\rho, R), \\ H(\rho) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_\rho^2 + \sum_t \frac{1}{\sqrt{2}} (W_t + W_{-t}^*) u_t \exp(it\rho) + \frac{1}{2} U''(z=0) \rho_z^2, \\ H(R) = -\sum_{\alpha=x, y, z} \frac{\hbar^2}{2m_\alpha^*} \frac{\partial^2}{\partial R_\alpha^2} + \frac{1}{2} U''(z=0) R_z^2, \\ V(\rho, R) = U''(z=0) R_z \rho_z. \quad (26)$$

3. Ниже будет показано, что действие электростатических сил изображения является слабым возмущением и для основного невырожденного электронного состояния оператором $V(\rho, R)$, описывающим взаимодействие двух подсистем, можно пренебречь. В этом случае полную систему, зависящую от координат ρ и R , можно разделить на две консервативные подсистемы, одна из которых зависит от переменной ρ , а другая — от R . Тогда полная волновая функция нулевого приближения аппроксимируется произведением волновых функций

$$\Psi_0 = \varphi_0(\rho) \chi(R) \Phi_0(\dots Q_r \dots). \quad (27)$$

Дискретный спектр собственных значений и волновые функции $\varphi_n(\rho)$ при $n > 0$ оператора $H(\rho)$ без учета сил изображения подробно описан в [5].

Учитывая, что $H(R)$ в (26) коммутируют с компонентами импульса P_{R_x} и P_{R_y} , собственные функции гамильтонiana $H(R)$ можно представить в виде произведения

$$\chi(R) = \chi(R_z) \chi(R_x, R_y), \quad (28)$$

где $\chi(R_x, R_y)$ описывает свободное движение полярона в плоскости xy .

Пусть E_0 и $\varphi_0(\rho)$ — энергия и волновая функция основного невырожденного дискретного уровня уравнения (22), при этом, очевидно, выполняется равенство

$$(H_0 - E_0) \Psi_1 = 0. \quad (29)$$

Принимая во внимание это равенство, из (22) следует, что

$$\langle \varphi_0 | H_1 - E_1 | \varphi_0 \rangle = 0. \quad (30)$$

Усредненный по волновой функции φ_0 оператор H_1 является линейной формой по Q_t и p'_t , поэтому уравнение $\langle \varphi_0 | H_1 | \varphi_0 \rangle - E_1 \Phi_0(\dots Q_t \dots) = 0$ не может иметь регулярного решения, если этот оператор не является тождественно нулем. Выберем функции u_k , входящие в оператор H_1 так, чтобы выполнялось равенство

$$\langle \varphi_0 | H_1 | \varphi_0 \rangle = 0. \quad (31)$$

Учитывая в (14) определение H_1 , находим неизвестные функции u_t

$$u_{-t} = u_t^* = -\frac{\sqrt{2}}{\nu_0} (W_t + W_{-t}^*) \langle \varphi_0(\rho) | \exp(i\rho) | \varphi_0(\rho) \rangle. \quad (32)$$

Уравнение (32) также можно получить варьированием функционала $F = \langle \varphi_0(\rho) | H_0 | \varphi_0(\rho) \rangle$ по u_t при дополнительном условии $\langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = 1$. Представляя (32) в (26) и выписывая явно выражения для $U(z=0)$ и ее второй производной, представим гамильтониан нулевого приближения в следующем виде:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\rho^2 - \sum_t \frac{|W_t + W_{-t}|^2}{\nu_0} \langle \varphi_0 | \exp(i\rho) | \varphi_0 \rangle \exp(i\rho) - \right. \\ \left. - \frac{7q_1^{(1)} e}{16\epsilon_0 h^3} \rho_z^2 - W_0 \right\} \varphi_0(\rho) = 0, \quad (33)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{d^2}{dR_z^2} - \frac{7eq_1^{(1)}}{16\epsilon_0 h^3} R_z^2 \right\} \chi_n(R_z) = \epsilon_n \chi_n(R_z). \quad (34)$$

Уравнение Шредингера для свободного движения в плоскости xy не представляет интереса и поэтому не приводится. Таким образом, если говорить о системе электронов, то они образуют двумерную энергетическую зону с континуумом трансляционных состояний в плоскости, параллельной поверхности.

В дальнейшем ограничимся рассмотрением симметричного случая, когда диэлектрические проницаемости обкладок $\epsilon_1 = \epsilon_2$, что, очевидно, приводит к значению $a = 0$. Именно этому случаю соответствует потенциальная энергия в (33) и (34).

Заряды изображений $q_1^{(1)}$ и $q_2^{(1)}$ определяются из (5) и (6), и в симметричном случае имеем

$$q_1^{(1)} = q_2^{(1)} = -\frac{75q}{16} \frac{(1 - \epsilon_1/\epsilon_0)}{(9 + 5\epsilon_1/\epsilon_0)}. \quad (35)$$

Отсюда нетрудно видеть, что $q_1^{(1)} < 0$, если $\epsilon_0 > \epsilon_1, \epsilon_2$, и тем самым возникает отталкивание электрона от границ поверхностей раздела.

Гамильтониан (33) анализировался в случае двумерных 2D-электронных систем, взаимодействующих с поверхностными фононами для континуальных поляронов в [6, 7] и для малых поляронов сильной связи в [8], где было отмечено, что автолокализация приводит к возникновению связанных состояний.

Проверим, насколько существенно влияние сил изображения на электронные состояния в поляризационной потенциальной яме. Выберем полуширину зазора между диэлектрическими обкладками $h = 150a_0^* \gg R_p$, что не противоречит объемному континуальному приближению. Учитывая существование выделенного направления вдоль оси z , запишем одноэлектронную волновую функцию основного состояния $\varphi_0(\rho)$ в виде суперпозиции s и p_z волновых функций

$$\varphi_0(\rho) \sim \varphi_s(\rho) + C\varphi_{p_z}(\rho),$$

$$\varphi_s \sim (1 + \alpha\rho) \exp(-\alpha\rho), \quad \varphi_{p_z} \sim \rho_z \exp(-\beta\rho), \quad (36)$$

где аппроксимирующие параметры C , α и β определяются из экстремальных свойств функционала

$$F = -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \varphi_0 | \nabla_\rho^2 | \varphi_0 \rangle - \frac{7q_1^{(1)}e}{16\epsilon_0^\infty h^3} \langle \varphi_0 | \rho_z^2 | \varphi_0 \rangle - \sum_i \frac{|W_i + W_{-i}|^2}{\nu_0} |\langle \varphi_0 | \exp(i\rho) | \varphi_i \rangle|^2 = T - U_2 - U_1, \quad (37)$$

причем в точке минимума должна выполняться теорема вириала

$$2T = U_1 + 2U_2. \quad (38)$$

Принимая во внимание, что в пределе сильной связи $|F| \sim \alpha_c^2 \hbar \omega_0 \gg \hbar \omega_0$ и осцилляции электрона на основном электронном уровне в поляризационной потенциальной яме являются быстрыми по сравнению с инерционным движением ионной подсистемы конденсированной фазы, диэлектрические постоянные, которые входят во второе слагаемое (37), а также в определение $q_1^{(1)}$, должны быть заменены их высокочастотными значениями $\epsilon_0^{(\infty)}$ и $\epsilon_1^{(\infty)}$. Ниже в оценочных расчетах полагаем для определенности $\epsilon_0^{(\infty)} \approx \epsilon_1^{(\infty)} = 2.0$. Минимизируя функционал (37) по φ_0 при дополнительном условии $\langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = 1$, находим оптимальные значения вариационных параметров: $\alpha = 0.501/a_0^*$, $\beta = 0.196/a_0^*$ и $C = -10^{-4}$. Таким образом, значение параметра α практически не отличается [9] от его значения для полярона сильной связи в отсутствие действия сил изображения. Малость

параметра $|C| \ll 1$ позволяет рассматривать действие электростатических сил как слабое возмущение и тем самым оправдывает принятые приближения в гамильтониане (26).

Уравнение (34), описывающее движение центра инерции полярона в z -направлении, удобно переписать в следующем виде:

$$\frac{\hbar^2}{2m_z^{**}} \frac{d^2\chi_n}{dR_z^2} + \frac{m_z^{**}\Omega^2}{2} R_z^2 \chi_n = \varepsilon_n \chi_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (39)$$

где собственная частота нормальных колебаний равна

$$\Omega^2 = -\frac{7eq_1^{(1)}}{8m_z^{**}\epsilon_0 h^3}. \quad (40)$$

Тот факт, что m_z^{**} прямо входит в формулу, определяющую частоту осцилляций Ω , позволяет в принципе использовать (40) для прямого экспериментального определения резонансными методами продольной эффективной массы полярона.

Используя волновую функцию (36) с рассчитанными аппроксимирующими параметрами из (18), найдем численное значение эффективной массы полярона в z -направлении

$$m_z^{**} = 5.8 \cdot 10^{-3} (m^* e^2 / \epsilon^* \hbar^2)^3 (e^2 / \epsilon^* \omega_0^2) = 0.023 \alpha_c^4 m^*, \quad (41)$$

которое практически совпадает со значением m^{**} для свободного полярона [3, 4]. Учитывая неравенство $m_z^{**} \gg m^*$ из (40), для принятых значений h следует, что $\Omega \ll \omega_0$. В этом случае в (40) для $q_1^{(1)}$ необходимо использовать значения диэлектрических проницаемостей, соответствующих их статическим значениям.

4. Предположим теперь, что в той же плоскости xy на большом расстоянии $R_o > R_p$ (для определенности считаем, что направление оси, соединяющей поляроны, совпадает с осью x) от выбранного электрона находится еще один полярон в основном невырожденном состоянии. Функционал самосогласованной полной энергии двухэлектронного образования, в котором уже проведено разделение переменных ρ и R , можно записать следующим образом [10, 11]:

$$\begin{aligned} F[\varphi_0(1, 2)] = & -\frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_{k=1, 2} \langle \varphi_0(1, 2) | \nabla_{\rho_k}^2 | \varphi_0(1, 2) \rangle - \sum_{f, k=1, 2} \frac{|V_f \rho_0^{(k)}(f)|^2}{\hbar \omega_0} + \\ & + \frac{e^2}{\epsilon_0^{(\infty)}} \langle \varphi_0(1, 2) | \left| \frac{1}{|\rho_1 - \rho_2|} \right| | \varphi_0(1, 2) \rangle - \\ & - \frac{3eq_i^{(1)}}{\epsilon_0^{(\infty)} h} - \frac{7eq_1^{(1)}}{16\epsilon_0^{(\infty)} h^3} \langle \varphi_0(1, 2) | \sum_{k=1, 2} \rho_z^2(k) | \varphi_0(1, 2) \rangle + \\ & + e_1 [\Phi_0^{(1)}(2) + \Phi_0^{(2)}(2)] + e_2 [\Phi_0^{(1)}(1) + \Phi_0^{(2)}(1)], \end{aligned} \quad (42)$$

где $\varphi_0(1, 2)$ — симметризованная двухэлектронная волновая функция, $\rho_0^{(k)}(f)$ — Фурье-преобразование электронного распределения. Третье слагаемое в (42) отвечает прямому межэлектронному взаимодействию, два последних слагаемых в гамильтониане учитывают перекрестное взаимодействие первого электрона e_1 с зарядом изображения второго и второго электрона e_2 с зарядом изображения первого.

Функционал относительного движения двух электронов (42) (первые две строчки) был подробно проанализирован с учетом влияния динамических меж-

электронных корреляций в [10, 11], где установлено, что полная самосогласованная энергия связанных синглетного двухэлектронного автолокализованного образования имеет минимум на конечном равновесном расстоянии между поляронами $R \approx 6a_0^*$ (аксиально-симметричный квазимолекулярный димер), максимум (потенциальный барьер) при $R_{\max} \approx 20a_0^*$ и обладает кулоновской асимптотикой при $R > R_{\max}$. Высота барьера отталкивания поляронов является функцией отношения $\epsilon^*/\epsilon_0^{(\infty)}$ и стремится к нулю при $\epsilon^*/\epsilon_0^{(\infty)} \rightarrow 1$ (т. е. при $\epsilon_0 \gg \epsilon_0^{(\infty)}$).

В том случае, если $\epsilon_0^{(\infty)} < \epsilon_1^{(\infty)}$, $\epsilon_2^{(\infty)}$, как нетрудно видеть из (35), заряды $q_1^{(1)} > 0$ и $q_2^{(1)} > 0$ и два предпоследних слагаемых в (42) дают дополнительное слабое притяжение в полную энергию, приводящее к некоторому снижению высоты барьера. В предельном случае $\epsilon^*/\epsilon_0^{(\infty)} \rightarrow 1$ даже такое слабое притяжение может привести к увеличению энергии связи двухэлектронного образования.

Значительно больший эффект притяжения поляронов возникает за счет резонансного взаимодействия между двумя осцилляторами (39). В рамках макроскопической электродинамики оператор дальнодействующего взаимодействия в дипольном приближении для двух осцилляторов, помещенных в изостропную однородную диэлектрическую среду, можно записать [12]

$$M = \frac{1}{\epsilon_0(\Omega) R_0^3} [D_1 D_2 - 3(D_1 n)(D_2 n)] \left(\frac{\epsilon_0(\Omega) + 2}{3} \right)^2, \quad (43)$$

где $D_1 = eR$ (1) и $D_2 = eR$ (2) — операторы дипольного момента первого и второго осцилляторов; n — единичный вектор, направленный вдоль оси x ; $\epsilon_0(\Omega)$ — диэлектрическая проницаемость фазы 0 на частоте колебаний осцилляторов, при этом предполагается, что частота не совпадает с резонансами $\epsilon_0(\Omega)$. Последний множитель в (43) учитывает поправки к эффективному значению D за счет внутреннего поля среды.

Уравнение, описывающее два одномерных гармонических осциллятора (39), связанных взаимодействием (43), относится к классу точно решаемых задач. Используя линейные преобразования $R_+ = R_z(1) + R_z(2)$ и $R_- = R_z(1) - R_z(2)$, одно уравнение связанных осцилляторов можно свести к двум уравнениям несвязанных гармонических осцилляторов, но с новыми собственными частотами

$$H_{\text{осц}} \chi_n^\pm = \frac{1}{4m_z^{**}} \frac{d^2 \chi_n^\pm}{dR_\pm^2} + \frac{1}{4} m_z^{**} \Omega_\pm^2 R_\pm^2 \chi_n^\pm = \epsilon_n^\pm \chi_n^\pm, \quad (44)$$

где поляризованные вдоль вектора n собственные частоты колебаний равны

$$\Omega_\pm = \Omega (1 \pm \delta)^{1/2},$$

$$\delta = \frac{e^2}{m_z^{**} \Omega^2 \epsilon_0(\Omega) R_0^3} \left(\frac{\epsilon_0(\Omega) + 2}{3} \right)^2.$$

Изменение полной энергии в результате взаимодействия двух осцилляторов равно

$$\Delta F = \langle \epsilon^+ \rangle + \langle \epsilon^- \rangle - 2 \langle \epsilon_0 \rangle. \quad (45)$$

Здесь $\langle \epsilon \rangle = \text{Sp}(\rho \epsilon) = (\hbar \Omega / 2) \text{ctn}(\hbar \Omega / 2kT)$ — статистическое среднее энергии осциллятора; $\rho = \exp(-H_{\text{осц}}/kT)/Z$ — матрица плотности гармонического осциллятора, находящегося в термодинамическом равновесии с тепловым резервуаром при температуре T ; $Z = \text{Sp}[\exp(-H_{\text{осц}}/kT)]$ — статистическая сумма.

Пороговая температура, при которой осцилляции полярона около фиксированного положения в пространстве фазы 0 не разрушаются, определяется из условия выполнения требования $T \leq \sum_{i=1,2} e\Phi_0^{(i)}/k$. Принимая для определенности отношение

$\varepsilon_0/\varepsilon_1 = 5$, находим $T \leq 50$ К. Для этой температуры удовлетворяется неравенство $k\Omega/kT < 1$. Выполняя разложение (45) по параметру δ и ограничиваясь при этом в ряду только квадратичными членами, получим оценку энергии резонансного взаимодействия двух осцилляторов

$$\Delta F = -(\delta^2/16kT)(k\Omega)^2. \quad (46)$$

Таким образом, ΔF оказывается величиной отрицательной, что означает существование эффективной силы притяжения между поляронами.

В качестве численного примера рассмотрим состояния автолокализованного электрона в аммиаке, где вполне допустимо применение методов теории континуального полярона сильной связи [13–15]. Эффективная масса электрона на дне зоны проводимости $m^* = 1.73$ м [9] и определяется из сопоставления теоретического и экспериментального положений максимума полосы оптического поглощения автолокализованного электрона. Предельную частоту ω_0 можно оценить из ширины $W_{1/2}$ оптического спектра поглощения на его полувысоте. Для достаточно низких температур воспользуемся формулой [9]

$$W_{1/2} = 2(A_s^p k\omega_0 \ln 2)^{1/2}. \quad (47)$$

Энергия реорганизации A_s^p полярной среды относится к наиболее интенсивному фотопереходу $s \rightarrow p$ [9]. По экспериментальному значению полуширины $W_{1/2} = 0.46$ эВ [16] получаем из (47) оценку предельной частоты $\omega_0 = 5.5 \cdot 10^{13}$ с⁻¹, которая попадает в экспериментально определенную область длинноволновых либрационных колебаний $(5.1 \text{--} 6.3) \cdot 10^{13}$ с⁻¹ молекул аммиака [17]. Учитывая значения диэлектрических проницаемостей аммиака $\varepsilon_0 = 22.8$ и $\varepsilon_0^{(\infty)} = 1.756$, находим константу электрон-фононной связи $\alpha_c = 13.4$.

Ограничиваюсь рассмотрением классического предела, когда $\hbar^2/2m_z^{**}R_0^2 < kT < e^2/\varepsilon_0 R_0$, выберем расстояние $R_0 = 50a_0^*$, на котором межполярное взаимодействие практически совпадает с его кулоновской асимптотикой $\sim e^2/\varepsilon_0 R_0$ [10, 11]. Сравнивая последнюю формулу с величиной (46), можно найти условия, когда произойдет полная компенсация сил кулоновского отталкивания поляронов на расстоянии R_0

$$-\frac{7\delta^2}{128kT} \frac{\hbar^2 e q_1^{(1)}}{m_z^{**} \varepsilon_0 h^3} > \frac{e^2}{\varepsilon_0 R_0}. \quad (48)$$

Выбирая опять отношение $\varepsilon_0/\varepsilon_1 = 5$ и принимая для температуры $T = 50$ К, а также используя значение (41) для продольной эффективной массы, находим, что толщина щели фазы 0 удовлетворяет неравенству

$$2h > \left[\frac{525kT m_z^{**} R_0^5 (1 - \varepsilon_1/\varepsilon_0)}{(9 + 5\varepsilon_1/\varepsilon_0)} \left(\frac{3}{\varepsilon_0 + 2} \right)^4 \right]^{1/3} \approx 60 \text{ \AA}. \quad (49)$$

Теоретические оценки [18] и экспериментальные исследования [19] показывают, что пленки сохраняют свои макроскопические диэлектрические свойства вплоть до толщин h в несколько атомных слоев (~ 25 \AA).

С другой стороны, h должно быть таким, чтобы

$$\sum_{i=1,2} e\Phi_0^{(i)} < kT.$$

Отсюда получаем ограничение на величину h сверху

$$2h < \frac{75e^2}{4\epsilon_0 kT} \frac{(1 - \epsilon_1/\epsilon_0)}{(9 + 5\epsilon_1/\epsilon_0)} \approx 600 \text{ \AA}. \quad (50)$$

По существу к аналогичным эффектам можно прийти, заменяя действие уравновешивающих электростатических сил изображения, например фазы 2, действием внешнего однородного электрического поля. Не исключено, что именно с подобными осцилляциями электронов связаны изменения температуры сверхпроводящего перехода пленок при наложении внешнего поперечного электрического поля, обнаруженных в экспериментах [20, 21].

Укажем также верхнюю границу концентрации электронов N , когда применима модель парного взаимодействия. Для этого необходимо, чтобы длина R_0 была много меньше среднего расстояния между поляронами $l \approx (3/4\pi N)^{1/3}$. Отсюда следует оценка средней плотности поляронов $N \ll 3/4\pi R_0^3 \approx 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

Список литературы

- [1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. С. 620.
- [2] Пановский В., Филипс М. Классическая электродинамика. М.: ИЛ, 1963. С. 432.
- [3] Боголюбов Н. Н. // Укр. мат. журн. 1950. Т. 2. № 2. С. 3.
- [4] Тябликов С. В. // ЖЭТФ. 1951. Т. 21. № 3. С. 377.
- [5] Мухоморов В. К. // Оптр. и спектр. 1991. Т. 71. № 6. С. 728—731.
- [6] Sak J. // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. N 10. P. 3981.
- [7] Evans E., Mills D. // Solid St. Comm. 1972. V. 11. P. 1093.
- [8] Богомолов В. Н., Брыксин В. В., Ситникова А. А., Толмачева В. Д., Эм Л. Х. // ФТП. 1973. Т. 15. С. 2347—2351.
- [9] Пекар С. И. Исследования по электронной теории кристаллов. М.; Л: ГИТГЛ, 1951. С. 256.
- [10] Мухоморов В. К. // ФТП. 1982. Т. 16. № 6. С. 1095.
- [11] Мухоморов В. К. // Оптр. и спектр. 1983. Т. 55. № 2. С. 246.
- [12] Агранович В. М., Галанин М. Д. Перенос энергии электронного возбуждения в конденсированных средах. М.: Наука, 1978. С. 384.
- [13] Мотт Н. Ф. Переходы металл—изолятор. М.: Наука, 1979. С. 342.
- [14] Томпсон Дж. Электроны в жидком аммиаке. М.: Мир, 1979. С. 450.
- [15] Cohen M., Jorther J. // Amorphous and Liquid Semiconductors / Ed. J. Shuke, W. Brenig. Academ. Press (Lond.), 1974. V. 1. P. 167.
- [16] Харт Э., Анбар М. Гидратированный электрон. М.: Атомиздат, 1973. С. 346.
- [17] Anderson A., Walmsley S. // Mol. Phys. 1965. V. 9. N 1. P. 1.
- [18] Kohn W. // Phys. Rev. 1958. V. 110. P. 857.
- [19] Чопра К. Л. Электрические явления в тонких пленках. М.: Мир, 1972. С. 436.
- [20] Glover R. E., Sherill M. D. // Phys. Rev. Lett. 1960. V. 5. P. 248.
- [21] Rühl W. // Z. Physik. 1965. V. B. 186. P. 190.

Агрофизический
научно-исследовательский институт
ВАСХНИЛ
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
1 октября 1991 г.
В окончательной редакции
14 февраля 1992 г.