УДК 621.315.592

КОНТИНУАЛЬНЫЙ ПОЛЯРОН СИЛЬНОЙ СВЯЗИ ВБЛИЗИ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ФАЗ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ И МАГНИТНОМ ПОЛЯХ

В. К. Мухоморов

В рамках метода канонического преобразования переменных Боголюбова—Тябликова произведено отделение в поляронном гамильтониане координат электрона от координат центра инерции полярона. Показано, что во внешних параллельных электрическом и магнитном полях вблизи границы раздела диэлектрических фаз движение полярона полностью квантовано. Установлены условия, накладываемые на диэлектрические свойства смежных фаз, когда силы кулоновского межполяронного отталкивания полностью компенсируются. Показано, что во внешних полях возникающие осцилляции полярона как целого приводят к появлению эффективных дальнодействующих межполяронных сил притяжения.

1. Как известно [1], на заряд, помещенный в однородную и изотропную диэлектрическую среду (в дальнейшем все величины, относящиеся к ней, будем обозначать индексом 1) вблизи плоской границы раздела с другой диэлектрической фазой 2, действуют электростатические силы изображения. Считаем, что фаза 1 занимает полупространство $z>0$, а фаза 2 — полупространство $z<0$. В зависимости от соотношения между статическими диэлектрическими проницаемостями смежных фаз ($\varepsilon_1>\varepsilon_2$ или $\varepsilon_1<\varepsilon_2$) заряд будет либо отталкиваться от границы раздела, либо притягиваться к ней. Приложив перпендикулярно плоскости раздела внешнее однородное электрическое поле $\mathbf{E}=(0,\ 0,\ E_z)$, можно компенсировать силы электростатического изображения и тем самым зафиксировать заряд на некотором равновесном расстоянии от границы фаз.

В настоящей работе анализируются осцилляции континуального полярона сильной связи около положения равновесия, а также взаимодействие между поляронами при учете влияния однородного магнитного поля, направление которого совпадает с направлением приложенного электрического поля. Ограничиваемся моделью резкой границы раздела фаз, поэтому микроскопическая структура границы раздела не учитывается и предполагается справедливым приближение эффективной массы.

2. Гамильтониан электрона, взаимодействующего с продольными оптическими фононами, в континуальном приближении метода эффективной массы во внешних однородных электрическом и магнитном полях запишем следующим образом:

$$\mathscr{H}=\frac{1}{2m^*}\left(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+\sum_{\mathbf{f}}\left(V_{\mathbf{f}}e^{i\mathbf{fr}}b_{\mathbf{f}}+V_{\mathbf{f}}^*e^{-i\mathbf{fr}}b_{\mathbf{f}}^+\right)+$$
$$+\sum_{\mathbf{f}}\hbar\omega_{\mathbf{f}}b_{\mathbf{f}}^+b_{\mathbf{f}}+eE_zz+\frac{e^2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)}{4\varepsilon_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2)z}. \tag{1}$$

Здесь Фурье-коэффициенты $V_{\mathbf{f}}=(i/f)\hbar\omega_{\mathbf{f}}(4\pi\alpha_c/V)^{1/2}(\hbar/2m^*\omega_{\mathbf{f}})^{1/4}$ удовлетворяют условию действительности $V_{-\mathbf{f}}=V_{\mathbf{f}}^*$; V — нормировочный объем; безразмерная константа электрон-фононной связи $\alpha_c = (e^2/2\varepsilon^* \hbar\omega_f)(2m^*\omega_f/\hbar)^{1/2}$; $\varepsilon^{*-1} = \varepsilon_{1,\infty}^{-1} - \varepsilon_1^{-1}$ — эффективная диэлектрическая проницаемость фазы 1; m^* — эффективная масса зонного электрона; ω_f — частоты свободного фононного поля. Квантовые амплитуды b_f^+ и b_f рождения и уничтожения оптического фонона с квазиимпульсом $\hbar \mathbf{f}$ удовлетворяют перестановочным соотношениям $[b_f, b_{f'}^+] = \delta_{ff'}$, $[b_f, b_{f'}] = [b_f^+, b_{f'}^+] = 0$. Считаем, что эффективная масса m^*, высокочастотная (соответствующая ближней инфракрасной области спектра) $\varepsilon_{1,\infty}$ и статические ε_1, ε_2 диэлектрические проницаемости не зависят от внешних полей.

Постоянное однородное магнитное поле $\mathbf{H}$ $(0, 0, H_z)$ задается в симметричной калибровке векторным потенциалом $\mathbf{A}$ $(-H_z y/2, H_z x/2, 0)$. Последнее слагаемое в (1) учитывает действие сил электростатического изображения на заряд. Учитывая кулоновскую калибровку векторного потенциала $\mathbf{A}$, перепишем гамильтониан (1) в следующем виде:

$$\mathscr{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla_{\mathbf{r}}^2 + \frac{e^2 H_z^2}{8m^* c^2}(x^2 + y^2) - \frac{ie\hbar H_z}{2m^* c}\left(-y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}\right) +$$
$$+ \sum_{\mathbf{f}} [V_f e^{i\mathbf{f}\mathbf{r}} b_f + V_f^* e^{-i\mathbf{f}\mathbf{r}} b_f^+] + \sum_{\mathbf{f}} \hbar\omega_f b_f^+ b_f + eE_z z + \frac{e^2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{4\varepsilon_1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) z}. \qquad (2)$$

Удобно для дальнейшего изложения ввести следующие безразмерные параметры:

$$g = \alpha_c^{1/2}, \quad \varkappa^2 = g/\varepsilon. \qquad (3)$$

Примем, что частоты фононного поля пропорциональны некоторому параметру ε^2: $\omega_f = \varepsilon^2 \nu_f$. В зависимости от значений величин g и ε гамильтониан (2) будет соответствовать либо случаю сильной связи, когда $g > 1$ и $\varepsilon^2 = 1$, либо случаю адиабатической связи, если $g = \varepsilon$ и $\varepsilon^2 \ll 1$.

В соответствии с представлениями [2–4] о каноническом преобразовании координат к коллективным переменным движение электрона, взаимодействующего с продольными оптическими фононами, складывается из трансляционного перемещения (радиус-вектор $\mathbf{R}$) центра инерции системы и трансляционно-инвариантных степеней свободы, характеризующих быстрые осцилляции электрона (радиус-вектор $\boldsymbol{\rho}$) относительно этого центра в достаточно глубокой поляризационной потенциальной яме. Таким образом, вместо одной переменной $\mathbf{r}$ вводятся две независимые переменные $\mathbf{R}$ и $\boldsymbol{\rho}$.

Для дальнейшего анализа гамильтониана (2) воспользуемся методами теории возмущений. Введем малый параметр разложения $\gamma = \varepsilon^2/g \ll 1$. Преобразуем гамильтониан к новым переменным, для чего представим радиус-вектор $\mathbf{r}$ в следующем виде:

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} + \frac{1}{\varkappa}\boldsymbol{\rho}. \qquad (4)$$

Это позволит учесть кинетическую энергию быстрых осцилляций электрона уже в нулевом порядке разложения ряда теории возмущений. Перейдем также от операторов b_f и b_f^+ к комплексным переменным координат и импульсов фононного поля

$$q_f = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}(b_f + b_{-f}^+), \quad p_f = \frac{i}{\gamma\sqrt{2}}(b_f^+ - b_{-f}). \qquad (5)$$

В новых переменных гамильтониан (2) примет вид

$$\mathscr{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla_{\mathbf{r}}^2 + \frac{e^2H_z^2}{8m^*c^2}(x^2+y^2) - \frac{ieH_z}{2m^*c}\left(-y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}\right) + $$
$$+ eE_z z + \frac{e^2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)}{4\varepsilon_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2)z} + \frac{\sqrt{2}\,g}{\gamma}\sum_{\mathbf{f}} U_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{fr}} q_{\mathbf{f}} +$$
$$+ \frac{\varepsilon^2}{2\gamma^2}\sum_{\mathbf{f}} \hbar\nu_{\mathbf{f}} q_{-\mathbf{f}} q_{\mathbf{f}} + \frac{\varepsilon^2\gamma^2}{2}\sum_{\mathbf{f}} \hbar\nu_{\mathbf{f}} p_{\mathbf{f}} p_{-\mathbf{f}}, \tag{6}$$

где

$$U_{\mathbf{f}} = V_{\mathbf{f}}/g, \quad p_{\mathbf{f}} = -i\partial/\partial q_f.$$

В гамильтониане (6) кинетическая энергия поля является слабым возмущением, и поэтому можно считать, что основное состояние фононного поля определяется некоторым набором c-чисел $u_{\mathbf{f}}$. Влияние кинетической энергии сводится теперь к малым отклонениям q_f от $u_{\mathbf{f}}$; c-числа $u_{\mathbf{f}}$ определяются из условия минимума полной энергии и оказываются пропорциональны $1/\gamma$. Это позволяет наряду с (4) ввести соответствующее преобразование для амплитуд

$$q_{\mathbf{f}} = (u_{\mathbf{f}} + \gamma Q_{\mathbf{f}}) \exp(-i\mathbf{fR}), \tag{7}$$

где новые трансляционно-инвариантные независимые переменные $Q_{\mathbf{f}}$ описывают квантовые флуктуации поля вблизи его классического значения $u_{\mathbf{f}}$. В отсутствие внешних полей гамильтониан (6) трансляционно-инвариантен относительно преобразований (4) и (7).

Поскольку $\boldsymbol{\rho}$ и $\mathbf{R}$ являются независимыми переменными и новых переменных на три больше, чем исходных, то необходимо для устранения трех лишних степеней свободы наложить на $Q_{\mathbf{f}}$ три условия связи, которые выберем в следующем виде:

$$\sum_{\mathbf{f}} \mathbf{f} w_{\mathbf{f}}^* Q_{\mathbf{f}} = 0. \tag{8}$$

Без ограничения общности можно допустить, что c-числа $w_{\mathbf{f}}$ удовлетворяют условию ортогональности

$$\sum_{\mathbf{f}} f_\alpha f_\beta w_{\mathbf{f}}^* u_{\mathbf{f}} = \delta_{\alpha\beta}, \tag{9}$$

причем $w_{\mathbf{f}}$ связаны с $v_{\mathbf{f}}$ [2–4] соотношением $w_{\mathbf{f}} = v_{\mathbf{f}}/\gamma^2$. Все введенные c-числа удовлетворяют требованиям вещественности

$$u_{\mathbf{f}}^* = u_{-\mathbf{f}}, \quad w_{\mathbf{f}}^* = w_{-\mathbf{f}}, \quad Q_{\mathbf{f}}^+ = Q_{-\mathbf{f}}. \tag{10}$$

Если подставить (7) в дополнительное условие (8), то нетрудно видеть, что радиус-вектор $\mathbf{R}$ зависит только от старых фононных переменных $q_{\mathbf{f}}$ и не зависит от $\mathbf{r}$. Учитывая, что $\partial Q_{\mathbf{f}}/\partial\mathbf{r} = 0$, оператор кинетической энергии в (6) можно записать

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{r}^2} = -\varkappa^2\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\rho}^2}. \tag{11}$$

Производную по старым фононным переменным $\partial/\partial q_{\mathbf{f}}$ преобразуем к новым по обычной формуле дифференцирования

$$\frac{\partial}{\partial q_{\mathbf{f}}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial Q_{\mathbf{k}}}{\partial q_{\mathbf{f}}}\frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{k}}} + \frac{\partial\mathbf{R}}{\partial q_{\mathbf{f}}}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}} =$$

$$= \frac{e^{i\mathbf{fR}}}{\gamma} \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{f}}} - \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{kf} w_{\mathbf{f}}^* u_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{k}}} - \gamma \left(\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{kf} w_{\mathbf{f}}^* Q_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{k}}} - \right. \right. \right.$$
$$\left. - \left(\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{kf} w_{\mathbf{f}}^* u_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{k}}} \right) \left(\sum_{\mathbf{m}} \mathbf{mm} w_{\mathbf{m}}^* Q_{\mathbf{m}} \right) \right] +$$
$$\left. + \frac{i\mathbf{f} v_{\mathbf{f}}^*}{\gamma} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - i\gamma^2 \mathbf{f} w_{\mathbf{f}}^* \sum_{\mathbf{m}} \mathbf{mm} w_{\mathbf{m}}^* Q_{\mathbf{m}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \ldots \right\}. \tag{12}$$

Или, используя определение

$$P_{\mathbf{f}}' = -i \frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{f}}} + i \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{kf} w_{\mathbf{f}}^* u_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{k}}}, \tag{13}$$

производную $\partial / \partial_{q\mathbf{f}}$ можно записать так

$$\frac{\partial}{\partial q_{\mathbf{f}}} = \frac{e^{i\mathbf{fR}}}{\gamma} \left\{ \left(\frac{i\mathbf{f} v_{\mathbf{f}}^*}{\gamma} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + iP_{\mathbf{f}}' \right) - \gamma \left[\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{kf} w_{\mathbf{f}}^* Q_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{k}}} - \left(\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{kf} w_{\mathbf{f}}^* u_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{k}}} \right) \times \right. \right.$$
$$\left. \times \left(\sum_{\mathbf{m}} \mathbf{mm} w_{\mathbf{m}}^* Q_{\mathbf{m}} \right) + \gamma^2 \left[\left(\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{kf} w_{\mathbf{f}}^* Q_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{k}}} \right) \left(\sum_{\mathbf{m}} \mathbf{mm} w_{\mathbf{m}}^* Q_{\mathbf{m}} \right) - \right. \right.$$
$$\left. \left. - i\mathbf{f} w_{\mathbf{f}}^* \sum_{\mathbf{m}} \mathbf{mm} w_{\mathbf{m}}^* Q_{\mathbf{m}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right] + \ldots \right\}. \tag{14}$$

При выводе (12)—(14) учитывались условие ортогональности (9), а также итерационное значение производной $\partial \mathbf{R} / \partial_{q\mathbf{k}}$

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial q_{\mathbf{k}}} = i w_{\mathbf{k}}^* e^{i\mathbf{kR}} \left[\mathbf{k} - \gamma \sum_{\mathbf{f}} (\mathbf{fk})\, v_{\mathbf{f}}^* Q_{\mathbf{f}} \mathbf{f} + \ldots \right]. \tag{15}$$

Подставляя формулы (4), (7), (11), (14) в (6) и собирая члены при одинаковых степенях γ, представим гамильтониан $\mathscr{H}$ в виде ряда разложения по степеням параметра γ

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \gamma \mathscr{H}_1 + \gamma^2 \mathscr{H}_2 \ldots,$$
$$\mathscr{H}_0 = \mathscr{H}_0(\boldsymbol{\rho}) + \mathscr{H}_0(\mathbf{R}) + \mathscr{H}_0(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{R}), \tag{16}$$

где

$$\mathscr{H}_0(\boldsymbol{\rho}) = -\varkappa^2 \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\rho}^2} + \frac{1}{\varkappa^2} (\rho_x^2 + \rho_y^2) \frac{e^2 H_z^2}{8m^* c^2} + i \frac{e H_z \hbar}{2m^* c} \left(\rho_y \frac{\partial}{\partial \rho_x} - \rho_x \frac{\partial}{\partial \rho_y} \right) +$$
$$+ \frac{e^2 (\varepsilon_1 - e_2) \rho_z^2}{4\varepsilon_1 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) Z_0^3 \varkappa^2} - \frac{e^2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \rho_z}{2\varepsilon_1 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) Z_0^2 \varkappa} +$$
$$+ \varkappa^4 \sum_{\mathbf{f}} A_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{f}\boldsymbol{\rho}/\varkappa} u_{\mathbf{f}} + \frac{\varkappa^4}{2} \sum_{\mathbf{f}} \hbar\nu_{\mathbf{f}} u_{-\mathbf{f}} u_{\mathbf{f}} + W(Z_0), \tag{17}$$

$$\mathscr{H}_0(\mathbf{R}) = -\frac{\varkappa^2}{2} \sum_{\mathbf{f}} \hbar\nu_{\mathbf{f}} v_{\mathbf{f}}^* v_{\mathbf{f}} (\mathbf{ff}) \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} +$$
$$+ \frac{e^2 H_z^2}{8m^* c^2} (R_x^2 + R_y^2) + \frac{e^2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{4\varepsilon_1 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) Z_0^3} (R_z - Z_0)^2, \tag{18}$$

$$\mathcal{H}_0(\boldsymbol{\rho},\ \mathbf{R}) = \frac{e^2H_z^2}{4m^*c^2\varkappa}(R_x\rho_x + R_y\rho_y) +$$
$$+ i\frac{eH_z\hbar\varkappa}{2m^*c}\left(R_y\frac{\partial}{\partial\rho_x} - R_x\frac{\partial}{\partial\rho_y}\right) + \frac{e^2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\rho_zR_z}{2\varepsilon_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2)Z_0^3\varkappa}, \tag{19}$$

$$\mathcal{H}_1 = \varkappa^4\sum_{\mathfrak{f}} A_{\mathfrak{f}}e^{i\mathfrak{f}\rho/\varkappa}Q_{\mathfrak{f}} + \frac{\varkappa^4}{2}\sum_{\mathfrak{f}}\hbar\nu_{\mathfrak{f}}(Q_{-\mathfrak{f}}u_{\mathfrak{f}} + Q_{\mathfrak{f}}u_{-\mathfrak{f}}) +$$
$$+ \frac{\varkappa^2}{2}\sum_{\mathfrak{f}}\hbar\nu_{\mathfrak{f}}\left(\nu_{\mathfrak{f}}^*\mathfrak{f}P'_{-\mathfrak{f}}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}} - \nu_{-\mathfrak{f}}^*\mathfrak{f}P'_{\mathfrak{f}}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}}\right), \tag{20}$$

$$\mathcal{H}_2 = \frac{\varkappa^2}{2}\sum_{\mathfrak{f}}\hbar\nu_{\mathfrak{f}}Q_{-\mathfrak{f}}Q_{\mathfrak{f}} + \frac{\varkappa^2}{2}\sum_{\mathfrak{f}}\hbar\nu_{\mathfrak{f}}P'_{\mathfrak{f}}P'_{-\mathfrak{f}}, \tag{21}$$

$$A_{\mathfrak{f}} = \sqrt{2}\,U_{\mathfrak{f}},\quad W(Z_0) = eE_zZ_0 + \frac{e^2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)}{4\varepsilon_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2)Z_0}. \tag{22}$$

В формулах (17)—(19) выполнено разложение электростатической составляющей гамильтониана в ряд около положения равновесия Z_0

$$Z_0^2 = \frac{e(\varepsilon_1-\varepsilon_2)}{4E_z\varepsilon_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2)}, \tag{23}$$

при этом в ряду разложения ограничились квадратичными членами разложения.

Полную волновую функцию и энергию системы также разложим в ряд по степеням малого параметра γ

$$\Psi = \Psi_0 + \gamma\Psi_1 + \gamma^2\Psi_2 + \ldots,$$
$$E = E_0 + \gamma E_1 + \gamma^2E_2 + \ldots. \tag{24}$$

Гамильтониан $\mathcal{H}_0$ (17) не действует на полевые переменные $Q_{\mathfrak{f}}$, и поэтому волновая функция нулевого приближения может быть записана в виде произведения $\Psi_0 = \Psi(\boldsymbol{\rho},\ \mathbf{R})\ \Phi(\ldots Q_{\mathfrak{f}}\ldots)$. Далее, поскольку оператор $\mathcal{H}_0(\boldsymbol{\rho},\ \mathbf{R})$ является нечетным, для основного невырожденного состояния системы его диагональные элементы исчезают, так как собственные функции характеризуются определенной четностью. Следовательно, функцию $\Psi(\boldsymbol{\rho},\ \mathbf{R})$ также можно представить в виде произведения функций, каждая из которых зависит только от радиусов-векторов $\boldsymbol{\rho}$ и $\mathbf{R}$. Тогда полная волновая функция нулевого приближения может быть записана в следующей мультипликативной форме:

$$\Psi_0 = \chi_0(\boldsymbol{\rho})\,\varphi_0(\mathbf{R})\,\Phi(\ldots Q_{\mathfrak{f}}\ldots). \tag{25}$$

Таким образом, в приближении сильной электрон-фононной связи осуществляется разделение координат частицы и поля.

Теперь можно найти классическую составляющую скалярного поля $u_{\mathfrak{f}}$. В первом порядке теории возмущений имеем

$$E_1 = \langle\Psi_1|\mathcal{H}_1|\Psi_1\rangle. \tag{26}$$

Приравнивая к нулю первую вариацию δE_1 по параметру $u_{\mathfrak{f}}$, получаем из (26)

$$u_{\mathfrak{f}} = -\frac{A_{\mathfrak{f}}}{\hbar\nu_{\mathfrak{f}}}\left\langle\chi_0(\boldsymbol{\rho})\middle|\exp\left(i\mathfrak{f}\frac{\boldsymbol{\rho}}{\varkappa}\right)\middle|\chi_0(\boldsymbol{\rho})\right\rangle. \tag{27}$$

Учитывая результат (27), гамильтониан $\mathcal{H}_0(\boldsymbol{\rho})$ можно записать следующим образом:

$$\mathcal{H}_0(\boldsymbol{\rho}) = -\varkappa^2 \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\rho}^2} - \frac{\varkappa^4}{2}\sum_{\mathbf{f}} \frac{|A_{\mathbf{f}}|^2}{\hbar\nu_{\mathbf{f}}} e^{\frac{i\mathbf{f}\boldsymbol{\rho}}{\varkappa}} \left\langle \chi_0(\boldsymbol{\rho}) \middle| e^{\frac{i\mathbf{f}\boldsymbol{\rho}}{\varkappa}} \middle| \chi_0(\boldsymbol{\rho}) \right\rangle +$$
$$+ \frac{e^2H_z^2}{\varkappa^2 8m^*c^2}(\rho_x^2+\rho_y^2) + \frac{ieH_z\hbar}{2m^*c}\left(\rho_y\frac{\partial}{\partial\rho_x} - \rho_x\frac{\partial}{\partial\rho_y}\right) +$$
$$+ \frac{e^2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\rho_z^2}{4\varepsilon_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2)Z_0^3\varkappa^2} - \frac{e^2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\rho_z}{2\varepsilon_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2)Z_0^2\varkappa} + W(Z_0). \tag{28}$$

Гамильтониан (28) позволяет определить волновые функции, описывающие электронные состояния в поляризационной потенциальной яме. В случае сильной электрон-фононной связи $\alpha_c > 10$ частота осцилляций электрона в глубокой поляризационной яме много больше ω_0, поэтому в двух последних слагаемых (28) диэлектрические проницаемости соответствуют их высокочастотным значениям.

Для определения неизвестных величин $w_{\mathbf{f}}$ вернемся к гамильтониану (16) и запишем $\mathcal{H}_2$ в следующем виде:

$$\mathcal{H}_2 = \frac{\varkappa^4}{2}\sum_{\mathbf{f}} \hbar\nu_{\mathbf{f}} Q_{-\mathbf{f}} Q_{\mathbf{f}} - \frac{\varkappa^2}{2}\sum_{\mathbf{f}} \hbar\nu_{\mathbf{f}}\left[-P'_{\mathbf{f}}P'_{-\mathbf{f}} - w_{\mathbf{f}}^*\mathbf{f}P'_{-\mathbf{f}}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}} + \right.$$
$$\left. + w_{-\mathbf{f}}^*\mathbf{f}P'_{\mathbf{f}}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}} + w_{-\mathbf{f}}^* w_{-\mathbf{f}}^*(\mathbf{f}\mathbf{f})\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{R}^2}\right]. \tag{29}$$

Выберем неопределенные комплексные величины $w_{\mathbf{f}}$ в (29) так, чтобы исчезли линейные по импульсам $P_{\mathbf{f}}$ члены. Подставим в (29) формулу (12) и положим в соответствии с [3], что

$$P_{\mathbf{f}} = \pi_{\mathbf{f}} + \tau_{\mathbf{f}}. \tag{30}$$

Условие равенства нулю коэффициентов при $\pi_{\mathbf{f}}$ принимает вид

$$-\nu_{\mathbf{f}}\left(\tau'_{-\mathbf{f}} - \hbar w_{-\mathbf{f}}^*\mathbf{f}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}}\right) + \sum_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}\mathbf{k}\mathbf{f}u_{\mathbf{f}}w_{\mathbf{k}}\left(\tau'_{-\mathbf{k}} - \mathbf{k}\hbar w_{\mathbf{k}}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}}\right) = 0, \tag{31}$$

где

$$\tau'_{\mathbf{f}} = \tau_{-\mathbf{f}} - \mathbf{f}w_{-\mathbf{f}}\sum_{\mathbf{l}} \mathbf{l}u_{\mathbf{l}}\tau_{\mathbf{l}}. \tag{32}$$

Пользуясь свободой выбора $\tau_{\mathbf{f}}$, потребуем, чтобы $\tau'_{\mathbf{f}} = 0$. Тогда из (31) получаем

$$\nu_{\mathbf{f}}w_{\mathbf{f}}\mathbf{f}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}\mathbf{k}\mathbf{f}u_{\mathbf{f}}w_{\mathbf{k}}w_{\mathbf{k}}^*\mathbf{k}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}}. \tag{33}$$

Равенство (33) будет удовлетворяться, если положить

$$-i\hbar\nu_{\mathbf{k}}w_{\mathbf{k}}\mathbf{k}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}} = (\mathbf{k}\mathbf{V})\,u_{\mathbf{k}}, \tag{34}$$

где $\mathbf{V}$ — вектор скорости центра инерции полярона. Учитывая определение оператора импульса $\mathbf{P}_{\mathbf{R}} = -i\hbar\partial/\partial\mathbf{R}$ и умножая слева и справа (34) на $\mathbf{k}u_{\mathbf{k}}^*$ и затем выполняя суммирование по $\mathbf{k}$, получим для импульса полярона как целого следующую формулу:

$$\mathbf{P_R} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar(\mathbf{kk})\, u_{\mathbf{k}} u^*_{\mathbf{k}} \mathbf{V}}{\nu_{\mathbf{k}}} = \sum_{\alpha = x, y, z} m^{**}_{\alpha\alpha} V_\alpha \mathbf{n}_\alpha, \tag{35}$$

где $\mathbf{n}_\alpha$ — единичный вектор, направленный вдоль оси α. При выводе (35) учтено условие ортогональности (9).

Из формулы (35) получаем выражение для диагональных компонент тензора эффективной массы полярона

$$m^{**}_{\alpha\alpha} = \sum_{\mathfrak{f}} \frac{\hbar f^2_\alpha |u_{\mathfrak{f}}|^2}{\nu_{\mathfrak{f}}}. \tag{36}$$

Учитывая определение (35) и результат (36), из уравнения (34) нетрудно определить комплексные величины $w_{\mathfrak{f}}$

$$w_{\mathfrak{f}} = \frac{\hbar u_{\mathfrak{f}}}{\nu_{\mathfrak{f}} m^{**}_{\alpha\beta}} \delta_{\alpha\beta}. \tag{37}$$

Используя определение (37), а также учитывая, что переменные R_x, R_y и R_z разделяются, гамильтониан (18) можно разбить на три независимые консервативные части

$$\mathscr{H}_0(R_x) = -\frac{\hbar^2}{2m^{**}_{xx}} \frac{d^2}{dR_x^2} + \frac{e^2 H_z^2}{8m^* c^2} R_x^2, \tag{38}$$

$$\mathscr{H}_0(R_y) = -\frac{\hbar^2}{2m^{**}_{yy}} \frac{d^2}{dR_y^2} + \frac{e^2 H_z^2}{8m^* c^2} R_y^2, \tag{39}$$

$$\mathscr{H}_0(R_z) = -\frac{\hbar^2}{2m^{**}_{zz}} \frac{d^2}{dR_z^2} + \frac{e^2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{4\varepsilon_1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) Z_0^3} (R_z - Z_0)^2, \tag{40}$$

которые описывают осцилляции центра инерции полярона, причем первые два гамильтониана определяют циклотронные частоты, поляризованные в x- и y-направлениях

$$\Omega_x^2 = \Omega_y^2 = \frac{e^2 H_z^2}{4m^* m^{**}_{xx} c^2}. \tag{41}$$

Гамильтониан (40) соответствует осцилляциям полярона вдоль оси z около положения равновесия z_0 с частотой нормальных колебаний

$$\Omega_z^2 = \frac{e^2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{2\varepsilon_1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) m^{**}_{zz} Z_0^3}. \tag{42}$$

Таким образом, во внешних электрическом и магнитном полях, параллельных друг другу и нормальных границе раздела фаз, движение полярона полностью квантовано: вдоль оси z — электрическим полем, а в плоскости, параллельной границе, — магнитным полем.

Диэлектрические проницаемости в (40) и (42) должны определяться на частоте осцилляций Ω_z. Для оценки вещественной части диэлектрической проницаемости можно воспользоваться формулой Дебая

$$\varepsilon(\Omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon - \varepsilon_\infty}{1 + (\tau_0 \Omega)^2}, \tag{43}$$

где эффективное макроскопическое время диэлектрической релаксации для молекулярных диэлектриков $\tau_0 \simeq 10^{-12} \div 10^{-13}$ с.

Используемое континуальное приближение накладывает ограничения на величину равновесного расстояния Z_0. Оно должно превышать эффективный размер полярона по меньшей мере на порядок: $Z_0 >> R_p = 10a_0^*$, где $a_0^* = h^2\varepsilon^*/m^*e^2$, т. е. считаем, что волновая функция $\chi_0(\boldsymbol{\rho})$ не проникает через границу раздела фаз. Принимая для $Z_0 = 100a_0^*$ и $m^{**} \simeq 0.021\alpha_c^4 m^*$, получаем оценку частоты осцилляций полярона, поляризованной в z-направлении $\Omega_z \simeq 10^{-2}\alpha_c^{-1/2}\omega_0$. В области таких частот диэлектрические проницаемости в (42) соответствуют их статическим значениям. Поэтому в дальнейшем будем $\varepsilon_1(\Omega)$ и $\varepsilon_2(\Omega)$ записывать просто как ε_1 и ε_2, понимая под ними их статические значения.

Учитывая принятое значение Z_0, из уравнения (23) можно найти верхнюю границу удерживающего электрического поля

$$E_z \leqslant \frac{e(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{4Z_0^2\varepsilon_1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \simeq 10^{-4}\left(\frac{m^*}{m\varepsilon^*}\right)^2 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}\left(\frac{m^*e^5}{\varepsilon^{*2}h^4}\right). \tag{44}$$

В этом случае автолокализация электрона может рассматриваться как трехмерная. Величина электрического поля (44) позволяет также указать область допустимых температур, при которых не происходит спонтанного разрушения осцилляций полярона около его положения равновесия

$$T_{\text{кр}} \leqslant \frac{e^2|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|}{2Z_0k_{\text{Б}}\varepsilon_1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \simeq 1.6\cdot 10^3\left(\frac{m^*}{m\varepsilon^*}\right)\frac{|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|}{\varepsilon_1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}. \tag{45}$$

Приравнивая друг другу частоты осцилляций (41) и (42) и учитывая условие (44), можно дать оценку нижней границы величины магнитного поля

$$H_z \geqslant \left[\frac{2m^*c^2\,|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|}{\varepsilon_1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)Z_0^3}\right]^{1/2} \simeq 10^{-3}\sqrt{\varepsilon^*}\left[\frac{2|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|}{\varepsilon_1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}\right]^{1/2}\frac{ce^3m^{*2}}{h^3\varepsilon^{*2}}. \tag{46}$$

Если частоты $\Omega_\alpha > 2k_{\text{Б}}T/h$, то осцилляторы (38)—(40) ведут себя как квантовые, и если $\Omega_\alpha < 2k_{\text{Б}}T/h$, — как классические.

3. Поскольку эффективная масса полярона (36) является функцией электронного состояния $\chi_0(\boldsymbol{\rho})$, удовлетворяющего (28), то необходимо проверить, насколько существенно влияние электрического и магнитного полей на величины диагональных компонент тензора массы полярона. Воспользуемся для этого прямым вариационным методом и выберем функцию $\chi_0(\boldsymbol{\rho})$ в виде линейной комбинации функции

$$\chi_0(\boldsymbol{\rho}) = N\,[\chi_s(\boldsymbol{\rho}) + C\chi_{p_z}(\boldsymbol{\rho})],\quad N = (1 + C^2)^{-1/2}, \tag{47}$$

где

$$\chi_s(\boldsymbol{\rho}) = (\pi^3\alpha^2\beta^4)^{-1/4}\exp\left(-\frac{\rho_z^2}{2\alpha^2} - \frac{\rho_x^2 + \rho_y^2}{2\beta^2}\right), \tag{48}$$

$$\chi_{p_z}(\boldsymbol{\rho}) = \left(\frac{2}{\pi^{3/2}\gamma^2\mu^2}\right)^{1/2}\rho_z\exp\left(-\frac{\rho_z^2}{2\gamma^2} - \frac{\rho_x^2 + \rho_y^2}{2\mu^2}\right). \tag{49}$$

Здесь C, $\alpha \geqslant \beta$ и $\gamma \geqslant \mu$ — вариационные параметры, по которым происходит минимизация функционала полной энергии

$$F = T + U_H + U_{2E} - U_{1E} - U_p, \tag{50}$$

при дополнительном условии $\langle \chi_0(\boldsymbol{\rho}) \mid \chi_0(\boldsymbol{\rho}) \rangle = 1$.

В функционале (50) приняты обозначения

$$T = \frac{h^2 N^2}{2m^*}\left[\left(\frac{1}{\beta^2} + \frac{1}{2\alpha^2}\right) + C^2\left(\frac{1}{\mu^2} + \frac{3}{2\gamma^2}\right)\right],$$

$$U_{1E} = \frac{4e^2(\varepsilon_{1,\infty} - \varepsilon_{2,\infty}) N^2 C \alpha^{5/2}\gamma^{3/2}}{\varepsilon_{1,\infty}(\varepsilon_{1,\infty} + \varepsilon_{2,\infty}) Z_0^2 (\alpha^2 + \gamma^2)^{3/2}(\beta^2 + \mu^2)},$$

$$U_H = \frac{(eH_z N)^2}{8m^* c^2}(\beta^2 + C^2\mu^2),$$

$$U_{2E} = \frac{e^2(\varepsilon_{1,\infty} - \varepsilon_{2,\infty}) N^2 (\alpha^2 + C^2\gamma^2)}{8\varepsilon_{1,\infty}(\varepsilon_{1,\infty} + \varepsilon_{2,\infty}) Z_0^3},$$

$$U_p = e^2 N^4 \varepsilon^{*^{-1}} (I_1 + 4C^2 I_2 + C^4 I_3 + 2C^2 I_4), \tag{51}$$

где использованы обозначения

$$I_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\alpha^2 - \beta^2)}} \ln\left(\sqrt{\frac{\alpha^2}{\beta^2} - 1} + \frac{\alpha}{\beta}\right),$$

$$I_2 = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{5/2} \frac{1}{\alpha}\left(\frac{\lambda\tau}{\beta\gamma\mu}\right)^2 (J_2 + J_1/\tau),$$

$$J_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{4\lambda^3},$$

$$\lambda = \alpha\beta/\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \quad \tau = \beta\mu/\sqrt{\beta^2 + \mu^2}, \quad \xi = 1 - (\tau/\lambda)^2,$$

$$J_2 = \frac{3\sqrt{\pi}}{8\lambda^5}\left(\frac{2}{3\xi} + \frac{2}{\xi^2} - \frac{1}{\xi^{5/2}} \ln\left|\frac{1 + \sqrt{\xi}}{1 - \sqrt{\xi}}\right|\right),$$

$$I_3 = \pi^{-1}(J_3 - \gamma^2 I_4 + \gamma^4 J_5/4),$$

$$J_3 = -\frac{\pi^{1/2}}{2^{3/2}\gamma s} \ln\left(\frac{1 - s}{1 + s}\right),$$

$$s = \sqrt{1 - (\mu/\gamma)^2},$$

$$J_4 = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left\{\frac{1}{\mu^2} - \frac{1}{\gamma^2}\left[\frac{1}{2s^2}\ln\left(\frac{1 - s}{1 + s}\right) + \left(\frac{\gamma}{\mu s}\right)^2\right]\right\},$$

$$J_5 = \frac{\sqrt{2\pi}}{\gamma^5}\left\{-\frac{3}{4s^5}\ln\left(\frac{1 - s}{1 + s}\right) - \gamma^2 \times\right.$$
$$\left.\times\left[\frac{1}{\mu^2 + \beta^2} - \frac{1}{\alpha^2 + \gamma^2}\left(\frac{1}{t^2(1 - t^2)} + \frac{1}{2t^3}\ln\left(\frac{1 - t}{1 + t}\right)\right)\right]\right\},$$

$$t = \sqrt{1 - \frac{\mu^2 + \beta^2}{\alpha^2 + \gamma^2}}.$$

Здесь представлены формулы соответственно для кинетической энергии электрона (T), диамагнитной энергии (U_H), энергии (U_{1E}), линейной по координате ρ_z и квадратичной по ρ_z (U_{2E}); U_p определяет энергию взаимодействия электрона с поляризующимся диэлектрическим континуумом. В точке экстремума функционала (50) должно выполняться вириальное соотношение

$$2T + U_{2E} = 2U_H + 2U_{1E} + U_p. \tag{52}$$

Для граничных электрического (44) и магнитного (46) полей были получены следующие значения вариационных параметров: $\alpha = 3.7609a_0^*$, $\beta = 3.7593a_0^*$, $\gamma = 7.6735a_0^*$, $\mu = 7.8729a_0^*$ и $C = -10^{-4}$. Для определенности полагали $\varepsilon_1 = 22.7$, $\varepsilon_2 = 1$ и $\varepsilon^* = 1.905$. Используя найденные значения вариационных параметров, с помощью формулы (36) мы вычислили компоненты тензора эффективной массы полярона $m_{xx}^{**} = m_{yy}^{**} = m_{zz}^{**} = 0.0208\alpha_c^4 m^*$, которые практически не отличаются от эффективной массы свободного полярона [2–4].

Однако с увеличением магнитного поля анизотропия массы может стать существенной. Так, в магнитном поле $H_z = 10^{-1} m^{*2} c e^3 / \hbar^3 \varepsilon^{*2}$ значения вариационных параметров будут следующими: $\alpha = 3.3567a_0^*$, $\beta = 3.085a_0^*$, $\gamma = 6.7855a_0^*$, $\mu = 3.795a_0^*$, $C = -10^{-4}$; им соответствуют компоненты тензора эффективной массы: $m_{xx}^{**} = m_{yy}^{**} = 4.87 \cdot 10^{-2}\ \alpha_c^4 m^*$, $m_{zz}^{**} = 3.11 \cdot 10^{-2}\ \alpha_c^4 m^*$.

Измерение частот $\Omega_x = \Omega_y$ и Ω_z позволит непосредственно определить из (41) и (42) диагональные компоненты тензора эффективной массы полярона. Действие внешнего периодического поля напряженности $\mathscr{E}_0$ и частоты $\overline{\omega}$ осуществляет переходы между состояниями осцилляторов. В дипольном приближении вероятность заселения возбужденного уровня, близкого к резонансному, можно записать

$$W = \frac{\Omega_0^2}{2(\Delta^2 + \Omega_0^2)} [1 - \cos(2\omega_{01} t)],$$

$$\omega_{01} = \frac{1}{2} (\Delta^2 + \Omega_0^2)^{1/2}, \tag{53}$$

где $\Omega_0 = \mu_{21} \mathscr{E}_0 / \hbar$ — частота Раби, $\mu_{21} = e^* (\hbar / 2m_{\alpha\alpha}^{**} \Omega_0)^{1/2}$ — матричный элемент дипольного перехода, $\Delta = \Omega_\alpha - \overline{\omega}$ — величина отстройки от точного резонанса. С увеличением Δ вероятность заселения верхнего уровня уменьшается. Кроме того, измерения могут усложняться из-за уширения уровней, превращающих спектр в непрерывную бесструктурную полосу, и релаксационных процессов. Поэтому внешнее воздействие должно быть импульсным, причем длительность импульса короче всех возможных времен релаксации. В свою очередь магнитное поле необходимо выбирать таким, чтобы расщепление циклотронных уровней превышало их уширение.

Эффективно преодолеть влияние отстройки можно, увеличивая напряженность поля $\mathscr{E}_0$. Однако увеличение интенсивности внешнего источника может привести к нарушению условий применимости континуального приближения. Действительно, если к временно́му уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(Z,t)}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{2m_{zz}^{**}} \left[p_z + \frac{e}{c} A(t) \right]^2 + V(Z) \right\} \varphi(Z,t),$$

$$V(Z) = eE_z Z + \frac{e^2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{4Z\varepsilon_1 (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)},$$

$$p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Z} \tag{54}$$

применить унитарное преобразование [5]

$$U = \exp\left[\left(-\frac{ie}{cm_{zz}^{**}}\int^{(t)} d\tau \mathbf{A}(\tau)\right)\frac{p_z}{\hbar}\right]\exp\left[-\frac{ie^2}{2c^2 m_{zz}^{**}}\int^{(t)} d\tau \mathbf{A}^2(\tau)\right], \tag{55}$$

где вектор-потенциал плоской монохроматической волны имеет компоненты $A_z = A_0 \cos(\bar{\omega} t)$, $A_x = A_y = 0$, то получим эквивалентное уравнение

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(Z,t)}{\partial t} = \left\{\frac{p_z^2}{2m_{zz}^{**}} + V\left[R_z + \frac{e}{cm_{zz}^{**}}\int^{(t)} d\tau A_z(\tau)\right]\right\}\varphi(Z,t). \tag{56}$$

При выводе (56) использовалось свойство оператора смещения

$$\exp(-i\xi p_z/\hbar) f(Z) \exp(i\xi p_z/\hbar) = f(Z-\xi). \tag{57}$$

Из уравнения (56) видно, что действие интенсивного внешнего поля приводит к смещению аргумента в потенциальной функции. Определяя положение минимума в потенциале уравнения (56) и затем выполняя усреднение за период $t = 2\pi/\bar{\omega}$, получаем для нового равновесного расстояния фиксации полярона

$$Z_0^2 = \frac{e(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{4E_z\varepsilon_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2)} - \frac{1}{2}\left(\frac{eA_0}{c\bar{\omega} m_{zz}^{**}}\right)^2. \tag{58}$$

Для оценки величины смещения положения равновесия примем: $A_0 = c\mathscr{E}_0/\bar{\omega}$, электрическое поле $\mathscr{E}_0 = 10^{-3}e/a_0^2$ (a_0 — боровский радиус), частота внешнего источника $\bar{\omega} = 50\Omega_z$ и $E_z = 10^{-6}m^{*2}e^5/\varepsilon^{*2}\hbar^4$, соответствующее невозмущенному расстоянию $Z_0 = 100a_0^*$. Используя эти значения, находим из (58) новое равновесное расстояние $Z_0 = 83a_0^*$.

Из соотношения (58) следует, что имеются два положения устойчивости

$$Z_0^{(\pm)} = \frac{1}{2}\left[\frac{e|\varepsilon_1-\varepsilon_2|}{E_z\varepsilon_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2)}\right]^{1/2} \pm \frac{eA_0}{\sqrt{2}\,c\bar{\omega} m_{zz}^{**}}, \tag{59}$$

меньшее из которых соответствует нижайшему состоянию, большее — возбужденному. Этим состояниям отвечают частоты осцилляций в гармоническом приближении, равные

$$\Omega_z^{(\pm)} = \sqrt{\frac{e^2|\varepsilon_1-\varepsilon_2|}{2\varepsilon_1(\varepsilon_1+\varepsilon_2)\, m_{zz}^{**} Z_0^{(\pm)^3}}}. \tag{60}$$

4. Предположим теперь, что на некотором расстоянии от первого полярона находится второй полярон. Считаем для определенности, что ось, соединяющая центры инерции поляронов, совпадает с осью x. Межполяронный (биполяронный) потенциал на больших расстояниях определяется кулоновской асимптотикой, на расстояниях $X \simeq 20a_0^*$ имеет максимум, а при $X \simeq 6a_0^*$ минимум. Глубина ямы и высота барьера существенно зависят от величины отношения $\varepsilon^*/\varepsilon_{1,\infty}$. Влияние обменных сил и динамических короткодействующих межэлектронных корреляций на величину энергии связи биполярона подробно обсуждалась в [6]. Наличие границы раздела диэлектрических фаз приводит к появлению в биполяронном потенциале дополнительного слагаемого, обусловленного взаимодействием одного электрона с потенциалом электростатического изображения другого

$$W_{12} = \frac{e^2(\varepsilon_{1,\infty} - \varepsilon_{2,\infty})}{\varepsilon_{1,\infty}(\varepsilon_{1,\infty}+\varepsilon_{2,\infty})(X^2+4Z_0^2)^{1/2}}. \tag{61}$$

В зависимости от того, будет ли $\varepsilon_{1,\infty} < \varepsilon_{2,\infty}$ или $\varepsilon_{1,\infty} > \varepsilon_{2,\infty}$, между поляронами появляются дополнительные силы либо притяжения, либо отталкивания.

В дальнейшем для определенности будем рассматривать электроны, автолокализованные в аммиаке. Применение методов теории сильной связи для описания состояний электрона в металл-аммиачных системах неоднократно обсуждалось [7, 8]. Модель сильной связи применима, если удовлетворяется неравенство $\hbar\omega_0 << \hbar\omega_1 << \hbar\omega_2$, где $\hbar\omega_1 \simeq 0.85$ эВ [7, 8] — энергия первого разрешенного в дипольном приближении оптического перехода автолокализованного электрона, $\hbar\omega_2 \simeq 6$ эВ — энергия возбуждения электронов основного вещества. Предельные частоты ω_0 длинноволновых продольных оптических фононов, отвечающих фундаментальным либрационным колебаниям молекул аммиака, лежат в области значений $(5.1—6.3) \cdot 10^{13}$ c^{-1} [9]. Низкочастотная и высокочастотная диэлектрические проницаемости аммиака равны соответственно $\varepsilon_1 = 22.7$ и $\varepsilon_{2,\infty} = 1.756$. Эффективная масса электрона $m^* = 1.73m$ является параметром теории и определяется из сопоставления экспериментального и теоретического положений максимумов полосы оптического поглощения автолокализованного электрона. Для принятых параметров получаем диапазон, в котором находится константа электрон-фононной связи $\alpha_c = 13 \div 14.5$. Граница раздела несколько искажает фононные моды, однако в рассматриваемом случае эти изменения не столь велики [10] и вполне можно пользоваться представлением объемных фононов.

Далее будем считать, что в качестве фазы 2 используется стекло. Такая постановка задачи качественно близка к той, которая рассматривалась в [11], где проводились измерения проводимости металл-аммиачных систем. Для большинства покровных стекол среднее значение высокочастотной и статической диэлектрических проницаемостей группируются около значений $\varepsilon_{2,\infty} \simeq 1.6$ и $\varepsilon_2 \simeq 4.54$ [12]. Поскольку $\varepsilon_{2,\infty} < \varepsilon_{1,\infty}$, то можно подобрать такие расстояния X и Z_0, для которых барьер отталкивания между поляронами будет полностью компенсирован за счет взаимодействия (61). Эти расстояния должны быть такими, чтобы, с одной стороны, перекрыванием электронных оболочек поляронов можно было пренебречь, а с другой — чтобы расстояние от границы раздела было много больше эффективного размера полярона. Эти требования удовлетворяются, если выбрать $X = 100a_0^*$ и $Z_0 = 110a_0^*$. В этом случае взаимодействие (61) полностью компенсирует потенциальный барьер, который при выбранном X отвечает кулоновской асимптотике [6]. Для принятых расстояний из формулы (45) получаем ограничение на температуру $T < 40$ K.

Возвращаясь к уравнениям (38)—(40), учтем, что они описывают осцилляции индуцированного заряда $e^* = -e/\varepsilon^*$ [13], связанного с центром инерции полярона. Тогда между двумя осциллирующими зарядами возникает взаимодействие, которое на больших расстояниях $X > R_p$ в дипольном приближении определяется при пренебрежении запаздыванием и затуханием оператором

$$V[\mathbf{R}(1), \mathbf{R}(2)] = \frac{1}{\varepsilon_1(\Omega) X^3} [\mathbf{D}_1\mathbf{D}_2 - 3(\mathbf{D}_1\mathbf{n})(\mathbf{D}_2\mathbf{n})] \left(\frac{\varepsilon_1(\Omega) + 2}{3}\right)^2, \tag{62}$$

где $\mathbf{D}_1 = e^* \mathbf{R}(1)$, $\mathbf{D}_2 = e^* \mathbf{R}(2)$ — операторы дипольного момента первого и второго осцилляторов; $\mathbf{n}$ — единичный вектор, направленный вдоль оси x. Последний множитель в (62) учитывает поправки, обусловленные существованием внутреннего поля поляризующегося диэлектрика [14].

Гамильтониан двух гармонических осцилляторов, связанных взаимодействием (62)

$$\mathscr{H}_{\text{осц}} = -\frac{\hbar^2}{2m^{**}_{\alpha\alpha}} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2_\alpha(1)} + \frac{\partial^2}{\partial R^2_\alpha(2)}\right) + \\ + \frac{m^{**}_{\alpha\alpha}\Omega^2_\alpha}{2} [R^2_\alpha(1) + R^2_\alpha(2)] + V[\mathbf{R}(1), \mathbf{R}(2)], \quad \alpha = x, y, z, \tag{63}$$

можно представить в виде суммы двух гамильтонианов несвязанных гармонических осцилляторов. Для этого необходимо ввести линейные преобразования координат $R_+ = R_\alpha(1) + R_\alpha(2)$ и $R_- = R_\alpha(1) - R_\alpha(2)$, причем под проекцией R_z понимается $R_z - Z_0$. Применяя это преобразование к гамильтониану (63), получаем для каждой компоненты α два уравнения

$$\mathscr{H}^{\pm}_{\text{осц}}\varphi_\alpha(\pm) = -\frac{\hbar^2}{2m^{**}_{\alpha\alpha}}\frac{d^2\varphi_\alpha(\pm)}{dR^2_\pm} + \frac{m^{**}_{\alpha\alpha}\Omega_\alpha(\pm)R^2_\pm}{4}\varphi_\alpha(\pm) = E_\alpha(\pm)\varphi_\alpha(\pm), \tag{64}$$

где частоты $\Omega_a(\mp)$ нормальных колебаний, поляризованных в α-направлении, равны

$$\Omega_\alpha(\pm) = \Omega_\alpha(1 \pm \delta_\alpha)^{1/2}, \tag{65}$$

$$\delta_x = \frac{2e^{*2}}{\varepsilon_1(\Omega_x)X^3 m^{**}_{xx}\Omega^2_x}\left[\frac{\varepsilon_1(\Omega_x)+2}{3}\right]^2, \tag{66}$$

$$\delta_y = \frac{e^{*2}}{\varepsilon_1(\Omega_y)X^3 m^{**}_{yy}\Omega^2_y}\left[\frac{\varepsilon_1(\Omega_y)+2}{3}\right]^2, \tag{67}$$

$$\delta_z = \frac{e^{*2}}{\varepsilon_1(\Omega_z)X^3 m^{**}_{zz}\Omega^2_z}\left[\frac{\varepsilon_1(\Omega_z)+2}{3}\right]^2. \tag{68}$$

Из соотношений (66)—(68) следует, что частоты нормальных колебаний в x-, y- и z-направлениях отличаются друг от друга, причем δ_y зависит от внешнего магнитного поля, а δ_z — от электрического поля.

Изменение энергии осцилляторов в результате взаимодействия можно записать так

$$\Delta F = \sum_{\alpha = x,y,z}[\langle E_\alpha(+)\rangle + \langle E_\alpha(-)\rangle - 2\langle E_\alpha\rangle], \tag{69}$$

где $\langle E\rangle = \mathrm{Sp}(\rho E)/\mathrm{Sp}\rho = (\hbar\Omega/2)\,\mathrm{cth}\,(\hbar\Omega/2k_БT)$ — статистически усредненная энергия гармонического осциллятора, находящегося в термодинамическом равновесии с термостатом при абсолютной температуре T; $\rho = \exp(-H_{\text{осц.}}/k_БT)$ — оператор матрицы плотности.

Непосредственной проверкой можно показать, что при всех допустимых значениях параметра δ_α изменение энергии $\Delta F < 0$, т. е. дальнодействующее диполь-дипольное взаимодействие (62), приводит к возникновению эффективного притяжения между поляронами. Фактически (69) представляет собой резонансную энергию двух коррелированных систем, обусловленную снятием вырождения под влиянием взаимодействия. В том случае, когда $\hbar\Omega_\alpha/k_БT \ll 1$ и $\delta_\alpha \ll 1$, формулу (69) можно разложить в ряд и, ограничиваясь квадратичными членами разложения, получить оценку энергии взаимодействия

$$\Delta F \simeq -\sum_{\alpha = x,y,z}(\delta^2_\alpha/16k_БT)(\hbar\Omega_\alpha)^2 < 0. \tag{70}$$

Таким образом, анализ в рамках макроскопической электродинамики взаимодействия поляронов вблизи межфазной границы показывает, что учет эффектов электростатического изображения приводит, с одной стороны, к понижению кулоновского потенциального барьера, а с другой — к возникновению флуктуационных сил притяжения между поляронами.

Список литературы

[1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982 620 с.
[2] Боголюбов Н. Н. // Укр. мат. журн. 1950. Т. 2. № 2. С. 2—24.
[3] Тябликов С. В. // ЖЭТФ. 1951. Т. 21. № 3. С 377—388.
[4] Солодовникова Е. П., Тавхелидзе А. Н., Хрусталев О. А. // Теор. мат. физика 1972. Т. 10 В. 2. С. 163—181.
[5] Henneberger W. C. // Phys. Rev. Lett. 1968. V. 21. N 12. P. 838—841.
[6] Мухоморов В. К. // Опт. и спектр. 1983. Т. 55. № 2. С. 246—254; 1990. Т 69 № 1. С 71—76.
[7] Томпсон Дж. Электроны в жидком аммиаке. М.: Мир, 1979. 324 с.
[8] Мотт Н. Ф. Переходы металл—изолятор. М.: Наука, 1979. 342 с.
[9] Anderson A., Walmsley S. // Mol. Phys. 1965. V. 9. N 1. P. 1—17.
[10] Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. М.. Мир, 1985 94 с.
[11] Дмитренко И. М., Щеткин И. С. // Письма в ЖЭТФ. 1973. Т. 18. № 8. С. 497—501.
[12] Таблицы физических величин. Справочник / Под ред. И. К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1006 с.
[13] Pines D. // Polarons and Excitons / Ed. C. C. Kuper, C. D. Whitefield. Plenum Press, N. Y, 1962. P. 33—44.
[14] Агранович В. М., Галанин М. Д. Перенос энергии электронного возбуждения в конденсированных средах. М.: Наука, 1978. 33 с.

Агрофизический научно-исследовательский институт
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
4 марта 1992 г.