1988 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 30, в. 2
1988 SOLID STATE PHYSICS Vol. 30, № 2

УДК 537.521

РАВНОВЕСНАЯ СКОРОСТЬ ПОЛЯРОНА БОЛЬШОГО РАДИУСА В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В. В. Брыксин, В. В. Онучин, А. В. Проказников, Г. Ю. Яшин

Для полярона большого радиуса при сильной связи с бездисперсионными оптическими фононами найдена зависимость равновесной скорости от приложенного электрического поля. Эта зависимость оказывается существенно неомической и обусловлена необычным, существующим лишь для автолокализованных состояний, механизмом передачи энергии в решетку.

1. Концепция о существовании полярона большого радиуса (ПБР) в виде автолокализованного состояния (АС) впервые была выдвинута Пекаром и Ландау ([1] и приведенные там ссылки). Почти сразу же после своего появления она подверглась критике: в работе [2] авторы настаивали на том, что по крайней мере при малых константах электрон-фононной связи α энергия делокализованного состояния (ДС) лежит ниже вычисленной Пекаром для АС. Дискуссия о том, какое же состояние — АС или ДС — является основным в задаче о ПБР, возобновлялась в литературе по мере совершенствования методов рассмотрения проблемы. На настоящий момент имеются, как представляется авторам, две точки зрения. Первая состоит в том, что основное состояние ПБР при любых α делокализовано (см. отчетливое высказывание по этому поводу в [3]). Представители второй точки зрения [4] считают, что при увеличении α происходит переход от ДС к АС. Так как точно решаемых моделей ПБР нет, аргументы обеих сторон базируются в основном на приближенных рассмотрениях. Единственным строгим аргументом сторонников ДС является следующий: в силу трансляционной инвариантности гамильтониана Фрёлиха

$$H=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+\sum_{\mathbf{k}}\left(V_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{kr}}a_{\mathbf{k}}+h.\ c.\right)+\sum_{\mathbf{k}}\hbar\Omega_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}},$$

$$V_{\mathbf{k}}=i\hbar\omega_0\left(\frac{\hbar}{2m\omega_0}\right)^{1/4}\left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2}\gamma_{\mathbf{k}}/k;\quad \gamma_{\mathbf{k}}=(\omega_0/\Omega_{\mathbf{k}})^{1/2};\quad \mathbf{p}=-i\hbar\nabla,$$

его собственные функции могут быть выбраны как собственные функции оператора полного импульса

$$\mathbf{P}=\mathbf{p}+\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{k}a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}}. \tag{1}$$

В силу очевидных свойств собственных функций **P** АС ими быть не могут. Ли, Лоу и Пайнс [5] впервые заметили, что преобразование $S^{-1}HS$ при

$$S=\exp\left\{i\left(\mathbf{P}-\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{k}a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}}\right)(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\right\} \tag{2}$$

исключает из гамильтониана электронные координаты (в (2) **P** есть c-число). Этим строго доказывается существование собственных функций H (и одновременно **P**) вида

$$\exp\left\{i\left(\mathbf{P}-\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{k}a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}}\right)(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\right\}\Phi_{\mathbf{P},\mathbf{r}_0}, \tag{3}$$

где $\Phi_{\mathbf{P},\mathbf{r}_0}$ зависит лишь от фононных переменных.

До сих пор, насколько нам известно, никто не обращал внимания на вырождение состояния (3). Возможность произвольного выбора $\mathbf{r}_0$ в (2), (3) указывает на то, что это вырождение бесконечно кратно. Это означает, что в рамках приближения слабой и промежуточной силы связи, развитого в [5], можно построить бесконечное множество функций с одной и той же энергией. Аналогичное вырождение обнаруживается и в адиабатической теории Боголюбова и Тябликова [6, 7] уже в нулевом ее приближении: если $\psi(\mathbf{r})$ есть решение нулевого приближения, то $\psi(\mathbf{r}+\mathbf{r}_0)$ также есть решение с той же энергией при любом $\mathbf{r}_0$. Существование вырождения позволяет утверждать, что имеется множество базисов собственных функций H, среди которых могут быть и локализованные. Здесь уместно указать на аналогию с двумерной задачей об электроне в магнитном поле, где наличие бесконечнократного вырождения позволяет выбрать для работы либо базис ДС Ландау, либо иной, к примеру базис локализованных собственных функций оператора момента [8].

Приведенные замечания позволяют по-новому взглянуть на постановку вопроса о локализации или делокализации электрона при взаимодействии с решеткой: видимо, как АС, так и ДС могут быть собственными, с одной и той же энергией. Далее мы продемонстрируем этот факт по крайней мере для функций основного состояния при больших константах связи α. Мы покажем также, что при не слишком сильных электрических полях $\mathbf{E}$ эти состояния начинают двигаться, приобретая конечную скорость $\mathbf{v}$. На начальных участках вольт-амперной характеристики (ВАХ), обусловленной движением АС,

$$v/v_0 \approx [\ln(E_0/E)]^{-1/2},$$

где $v_0 \sim \omega_0 l/\alpha$, $E_0 \sim \alpha^3\hbar\omega_0/le$, l есть оптическая длина, $l=(\hbar/2m\omega_0)^{1/2}$. Установление равновесной скорости происходит вследствие того, что энергия, получаемая АС в единицу времени от поля $\mathbf{E}$, передается в решетку. Запасенная в ней энергия растет линейно со временем — АС движется, рождая за собой «шлейф» решеточных колебаний.

2. Движущееся в поле АС будем искать как решение уравнения

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\mathscr{H}\psi \tag{4}$$

с гамильтонианом

$$\mathscr{H}=H-e\mathbf{E}\mathbf{r}.$$

Рассчитывая произвести разложение по степеням α^{-1}, обезразмерим длину в единицах l/α, а время — в единицах ω_0^{-1} (ω_0 — предельная частота оптической фононной моды); при этом (4) принимает вид

$$\frac{i}{\alpha^2}\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left\{-\nabla^2+\frac{1}{\alpha}\sum_{\mathbf{k}}\left(v_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}+h.\ c.\right)+\frac{1}{\alpha^2}\sum_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}}-\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r}\right\}\psi, \tag{5}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{E}le/\alpha^3\hbar\omega_0,\quad \omega_{\mathbf{k}}=\Omega_{\mathbf{k}}/\omega_0,\quad v_{\mathbf{k}}=i\gamma_{\mathbf{k}}\left(\frac{4\pi l}{\alpha^3 V}\right)^{1/2}\Big/k. \tag{6}$$

Множитель $(l/\alpha)^{3/2}$ в v_k в (5), (6) в дальнейшем выпадает при произведении суммирования по $\mathbf{k}$; он введен для компенсации изменения фазового объема при обезразмеривании $\mathbf{k}$ в единицах α/l, и реальная малость членов гамильтониана по α выделена в (5) в явном виде. Над волновой функцией Ψ удобно произвести ряд преобразований. Во-первых, введем

$$\bar{\psi}=e^{-S}\psi,\quad S=\alpha\sum_{\mathbf{k}}\left[\beta_{\mathbf{k}}(t)\,a_{\mathbf{k}}^{+}-\beta_{\mathbf{k}}^{*}(t)\,a_{\mathbf{k}}\right]-i\alpha^2\int^{t}\Phi(t')\,dt'.$$

Здесь $\beta_{\mathbf{k}}(t)$, $\beta_{\mathbf{k}}^*(t)$ и $\Phi(t)$ есть c-числовые функции, которые будут определены позже; β и β^* имеют смысл классических смещений, т. е. «полярронного облака» АС. Легко убедиться в том, что [9]

$$e^{-S}a_{\mathbf{k}}^{+}e^{S}=a_{\mathbf{k}}^{+}+\alpha\beta_{\mathbf{k}}^{*}(t),\quad e^{-S}a_{\mathbf{k}}e^{S}=a_{\mathbf{k}}+\alpha\beta_{\mathbf{k}}(t),$$

$$e^{-S}\frac{d}{dt}e^{S}=\alpha^2\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}[\dot\beta_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}^{*}-\beta_{\mathbf{k}}\dot\beta_{\mathbf{k}}^{*}]+\alpha\sum_{\mathbf{k}}[\dot\beta_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}^{+}-\dot\beta_{\mathbf{k}}^{*}a_{\mathbf{k}}]-i\alpha^2\Phi(t)+\frac{d}{dt},$$

и таким образом для $\bar\psi$ уравнение (5) преобразуется к виду

$$\frac{i}{\alpha^2}\frac{\partial\bar\psi}{\partial t}=\left\{\left[-\nabla^2+\sum_{\mathbf{k}}\left(v_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{kr}}+h.\ c.\right)-\varepsilon\mathbf{r}\right]+\right.$$

$$+\frac{1}{\alpha}\sum_{\mathbf{k}}\left[a_{\mathbf{k}}^{+}\left(v_{\mathbf{k}}^{*}e^{-i\mathbf{kr}}+\omega_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}-i\dot\beta_{\mathbf{k}}\right)+\text{h. c.}\right]+\left.\frac{1}{\alpha^2}\sum_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}}\right\}\bar\psi+$$

$$+\left\{-\frac{i}{2}\sum_{\mathbf{k}}(\dot\beta_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}^{*}-\beta_{\mathbf{k}}\dot\beta_{\mathbf{k}}^{*})+\sum_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}^{*}-\Phi(t)\right\}\bar\psi.$$

Во-вторых, переведем все фононные операторы в движущуюся со скоростью $\mathbf{v}$ систему отсчета, представив $\bar\psi$ в виде

$$\bar\psi=e^{S_1}\tilde\psi,\quad S_1=-i\mathbf{v}t\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{k}a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}}.$$

Наконец, перейдем в движущуюся систему отсчета и для электронной переменной еще раз введя новое обозначение $\mathbf{z}\mathbf{r}-\mathbf{v}t$ и функцию

$$\tilde\psi(\mathbf{z},\ t)=e^{-i\mathbf{vz}/2}\psi(\mathbf{r},\ t).$$

Уравнение для $\tilde\psi$ выглядит так

$$\frac{i}{\alpha^2}\frac{\partial\tilde\psi}{\partial t}=\left\{\left[-\nabla_{\mathbf{z}}^2+\sum_{\mathbf{k}}\left(v_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}(\mathbf{z}+\mathbf{v}t)}+h.\ c.\right)-\varepsilon\mathbf{z}\right]+\right.$$

$$+\frac{1}{\alpha}\sum_{\mathbf{k}}\left[a_{\mathbf{k}}^{+}e^{i\mathbf{kv}t}\left(v_{\mathbf{k}}^{*}e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{z}+\mathbf{v}t)}+\omega_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}-i\dot\beta_{\mathbf{k}}\right)+h.\ c.\right]+\left.\frac{1}{\alpha^2}\sum_{\mathbf{k}}(\omega_{\mathbf{k}}+\mathbf{kv})\,a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}}\right\}\tilde\psi+$$

$$+\left\{-\frac{i}{2}\sum_{\mathbf{k}}(\dot\beta_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}^{*}-\beta_{\mathbf{k}}\dot\beta_{\mathbf{k}}^{*})+\sum_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}^{*}-\varepsilon\mathbf{v}t-\frac{\mathbf{v}^2}{4\alpha^2}-\Phi(t)\right\}\tilde\psi. \tag{7}$$

Наконец, произведем выбор $\Phi(t)$ таким образом, чтобы обратить в нуль последний член в (7), и будем искать $\tilde\psi$ как собственную функцию в движущейся системе отсчета

$$\tilde\psi\left(\mathbf{z},\ t,\ \{a_{\mathbf{k}}^{+};\ a_{\mathbf{k}}\}\right)=e^{-i\alpha^2Et}Q\left(\mathbf{z},\ \{a_{\mathbf{k}}^{+};\ a_{\mathbf{k}}\}\right).$$

Функция Q удовлетворяет уравнению

$$EQ=\left[H_0+\frac{1}{\alpha}H_1+\frac{1}{\alpha^2}H_2\right]. \tag{8}$$

Вид H_i очевиден из (7).

3. Уравнение (8) будем решать по теории возмущений, разлагая E и Q в ряды по α^{-1}; эта процедура полностью повторяет метод Боголюбова-Тябликова [6, 7]. Выпишем уравнения теории возмущений

$$(H_0-E_0)\,Q_0=0, \tag{9а}$$

$$(H_0-E_0)\,Q_1=(E_1-H_1)\,Q_0, \tag{9б}$$

$$(H_0-E_0)\,Q_2=(E_1-H_1)\,Q_1+(E_2-H_2)\,Q_0, \tag{9в}$$

$$(H_0-E_0)\,Q_3=(E_1-H_1)\,Q_2+(E_2-H_2)\,Q_1+E_3Q_0 \tag{9г}$$

и т. д. Как и в [6, 7], уравнение нулевого приближения не определено, так как $\beta_{\mathbf{k}}$ и $\beta_{\mathbf{k}}^*$ пока неизвестны. Так как в H_0 нет фононных операторов, решения (9а) имеют вид

$$Q_0^\nu = \varphi_\nu(\mathbf{z})\,\Phi_0,$$

где Φ_0 — пока произвольная функция решеточных переменных. Сделаем допущение (оправдывающееся последующим расчетом) о том, что $\varphi_0(\mathbf{z})$ представляет собой лакализованную функцию типа связанного состояния; поправки будем искать к основному состоянию Q_0^0.

Условие разрешимости первого приближения получим, умножив (9б) слева на $\varphi_0(\mathbf{z})$ и проинтегрировав по $\mathbf{z}$

$$\left\{E_1 - \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ e^{i\mathbf{k}\mathbf{v}t}\left(v_{\mathbf{k}}^*\chi_{00}(-\mathbf{k})\,e^{-i\mathbf{k}\mathbf{v}t} + \omega_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}} - i\dot{\beta}_{\mathbf{k}}\right) + \text{h. c.}\right]\Big\}\,\Phi_0 = 0. \qquad (10)$$

Здесь введено обозначение

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{k}) = \int d^3z\,\varphi_\mu^*(\mathbf{z})\,e^{i\mathbf{k}\mathbf{z}}\varphi_\nu(\mathbf{z}).$$

Следуя известным аргументам [6, 7], из (10) имеем $E_1 = 0$ и уравнения для β, β^*

$$\left.\begin{aligned}\dot{\beta}_{\mathbf{k}} &= -i\omega_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}} - iv_{\mathbf{k}}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{v}t}\chi_{00}(-\mathbf{k}),\\ \dot{\beta}_{\mathbf{k}}^* &= i\omega_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}^* + iv_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{v}t}\chi_{00}^*(-\mathbf{k}).\end{aligned}\right\}$$

Эти уравнения легко решаются; результат решения имеет вид

$$\left.\begin{aligned}\beta_{\mathbf{k}} &= \beta_{\mathbf{k}}^0 e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} - iv_{\mathbf{k}}^*\chi_{00}(-\mathbf{k})\int\limits_{-\infty}^{t} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-\tau)-i\mathbf{k}\mathbf{v}\tau}\,d\tau,\\ \beta_{\mathbf{k}}^* &= \beta_{\mathbf{k}}^{0*} e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} + iv_{\mathbf{k}}\chi_{00}^* -\mathbf{k})\int\limits_{-\infty}^{t} e^{i\omega_{\mathbf{k}}(t-\tau)+i\mathbf{k}\mathbf{v}\tau}\,d\tau.\end{aligned}\right\} \qquad (11)$$

Следует отметить, что ход последующего рассмотрения и его результаты существенно зависят от выбора решений однородной системы, т. е. величин $\beta_{\mathbf{k}}^0$ и $\beta_{\mathbf{k}}^{0*}$ в (11). Мы выберем их равными нулю, что соответствует невозмущенной при $t \to -\infty$ решетке. В принципе возможен и иной выбор; можно подобрать $\beta_{\mathbf{k}}^0$, $\beta_{\mathbf{k}}^{0*}$ таким образом, чтобы полярон имел конечную скорость $\mathbf{v}$ при $\varepsilon = 0$ — этот выбор позволил бы найти решения, исследованные в [10].

Определив $\beta_{\mathbf{k}}$, $\beta_{\mathbf{k}}^*$, мы тем самым определили также уравнение нулевого приближения (9а)

$$\left\{-\nabla_{\mathbf{z}}^2 - U(\mathbf{z}, t) - \varepsilon\mathbf{z}\right\}\varphi_\nu(\mathbf{z}) = E_0^\nu\varphi_\nu(\mathbf{z}), \qquad (12)$$

$$U(\mathbf{z}, t) = \sum_{\mathbf{k}}\left[-iv_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^*\chi_{00}(-\mathbf{k})\int\limits_{-\infty}^{t} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}(t-\tau)-i\mathbf{k}\mathbf{v}\tau+i\mathbf{k}(\mathbf{z}+\mathbf{v}t)}\,d\tau + h.\ c.\right]. \qquad (13)$$

На этом этапе вычислений убеждаемся в том, что время полностью выпадает из системы уравнений (9). Для этого преобразуем (13) следующим образом

$$U(\mathbf{z}, t) = -i\sum_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}}^*\frac{4\pi}{k^2}\frac{l^3}{a^3V}\int d^3z_1\varphi_0^*(\mathbf{z}_1)\,\varphi_0(\mathbf{z}_1)\times$$
$$\times\int\limits_{-\infty}^{t} d\tau\left[e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{z}-\mathbf{z}_1)-i(\tau-t)(\mathbf{k}\mathbf{v}-\omega_{\mathbf{k}})} - \text{c. c.}\right] \to -i\int\limits_{-\infty}^{0} d\tau\int d^3z_1\int d^3z_2\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\times$$
$$\times\left(e^{-i\mathbf{k}\mathbf{z}_2+i\omega_{\mathbf{k}}\tau} - \text{c. c}\right)\frac{\varphi_0^*(\mathbf{z}_1)\,\varphi_0(\mathbf{z}_1)}{|\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2 + \mathbf{v}\tau - \mathbf{z}|} = \int d^3z_1\varphi_0^*\varphi_0(\mathbf{z}_1)\,V_{\mathbf{v}}(\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}). \qquad (14)$$

Здесь

$$V_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}_1 \int\limits_{-\infty}^{0} d\tau \, \frac{\Theta(\mathbf{r}_1, \tau)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{v}\tau|},$$

$$\Theta(\mathbf{r}, \tau) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} \sin(\omega_k \tau - \mathbf{kr}).$$

Из (14) следует, что временная переменная не входит в (12), так как $U(\mathbf{z}, t) \equiv U(\mathbf{z})$. Далее запишем H_1 в базисе функций φ_ν

$$H_1 = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ e^{i\mathbf{k}\mathbf{v}t} \, |\mu\rangle \left\{\delta_{\mu\nu} (-i\dot{\beta}_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}) + v_{\mathbf{k}}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{v}t} \varkappa_{\mu\nu}(-\mathbf{k})\right\} \langle\nu| + \text{h. c}$$

или, используя уравнения для $\beta_{\mathbf{k}}$, $\beta_{\mathbf{k}}^*$,

$$H_1 = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ v_{\mathbf{k}}^* \, |\mu\rangle \left\{\varkappa_{\mu\nu}(-\mathbf{k}) - \delta_{\mu\nu}\varkappa_{00}(-\mathbf{k})\right\} \langle\nu| + \text{h. c.}$$

Наконец, так как

$$H_2 = |\mu\rangle\langle\nu| \, \delta_{\mu\nu} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} + \mathbf{kv}) \, a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}},$$

убеждаемся в том, что t выпало из всех H_i.

Схема работы с системой уравнений (9) после решения уравнения нулевого приближения (12) полностью повторяет изложенную в [6, 7].

4. При ε, $\mathbf{v}=0$ система (9) полностью совпадает с полученной в [6, 7] при отыскании волновых функций с нулевым импульсом. Это означает, что ряды теории возмущений для соответствующих функций совпадают, и лишь их аргументы имеют разный смысл. Таким образом, ряды для AC и DC в технике Боголюбова сходятся или расходятся одновременно. Как мы указывали выше, одновременное существование локализованных и распространенных функций основного состояния является следствием бесконечнократного вырождения. Отметим, что впервые этот факт в неявной форме был использован в [11] при анализе зависимости от α энергии основного состояния; расчеты, проведенные в [10], также предполагают наличие локализованных решений при $\varepsilon=0$.

Решения уравнения (12) при ε, $\mathbf{v}=0$ не раз исследовались вариационными методами и могут считаться известными. При ε, $\mathbf{v} \neq 0$ можно развить итерационную процедуру решения уравнения (12), разлагая его решения в ряд по ε и δU, где

$$\delta U = U(\mathbf{v}, \mathbf{z}) - U(0, \mathbf{z}).$$

Прежде чем делать это, остановимся на общих свойствах решений (12). При построении схемы теории возмущений по α^{-1} мы предположили, что (12) имеет дискретный уровень. Как известно, волновую функцию дискретного уровня можно выбрать вещественной. При этом с необходимостью выполняется равенство

$$\int d^3\mathbf{r} \, [\varphi_0(\mathbf{r}) \, \nabla\varphi_0^*(\mathbf{r}) - \varphi_0^*(\mathbf{r}) \, \nabla\varphi_0(\mathbf{r})] = 0$$

или, используя (12),

$$\int d^3\mathbf{r} \varphi_0^*(\mathbf{r}) \, \varphi_0(\mathbf{r}) \nabla U(\mathbf{r}) = \varepsilon. \qquad (15)$$

При разложении φ_0 в ряд по ε, δU равенство (15) будет накладывать связь между $\mathbf{v}$ и ε, при которой (12) имеет решением автолокализованную волновую функцию. При учете связи (15) в ряду теории возмущений по ε и δU для φ_0 исчезают расходимости. Покажем это для членов первого порядка малости. Представим φ_0 в виде суммы $f_0+\Delta$, где f_0 есть решение (12) при ε, $v=0$, а Δ — малая добавка. Тогда, отбирая в (12) члены первого порядка малости, имеем для Δ уравнение

$$L\Delta = \varepsilon z f_0 - \delta U f_0, \tag{16}$$

$$L\Delta \equiv [-\nabla^2 + U - \delta U]\,\Delta + 2f_0 \int d^3r f_0(\mathbf{r})\, V_0(\mathbf{r}-\mathbf{z})\,\Delta(\mathbf{r}) - E_0\Delta. \tag{16a}$$

Для отыскания Δ из (16) следует разложить правую часть по собственным функциям χ_n линейного оператора L (16a)

$$\varepsilon z f_0 - \delta U f_0 = \sum_n I_n \chi_n(\mathbf{z}),$$

$$I_n \equiv \int d^3z\, [\varepsilon z f_0(\mathbf{z}) - \delta U(\mathbf{z}) f_0(\mathbf{z})]$$

и тогда

$$\Delta = \sum_n C_n \chi_n, \quad C_n = I_n/\lambda_n,$$

где λ_n — собственные значения, соответствующие χ_n. Однако легко показать, что функции вида

$$\frac{\partial f_0}{\partial z_i}, \quad i = 1, 2, 3$$

являются собственными функциями оператора L с $\lambda=0$. Существование таких функций (так называемых «нулевых трансляционных мод»), как это хорошо известно, связано с трансляционной инвариантностью уравнений нулевого приближения. Так как I_0, вообще говоря, отлично от нуля, то прямая итерация уравнения (12) по степеням ε, δU невозможна. Методы построения теории возмущений в такой ситуации, однако, хорошо известны [12]. Смысл их заключается в том, что следует переопределить решение нулевого приближения, выбрав его параметры (в данном случае скорость v) таким образом, чтобы ряд теории возмущений не содержал бесконечностей. В нашем случае это означает, что на f_0 должно быть наложено требование

$$I_0(\varepsilon, v) = 0,$$

которое определяет связь между v и ε. Рассмотрим эту связь более подробно, выписав ее в полном виде

$$\int d^3r f_0(\mathbf{r})\, [\varepsilon r - \delta U(\mathbf{r})]\, \frac{\partial f_0}{\partial r_i} = 0.$$

Проинтегрировав по частям, имеем

$$\int d^3r f_0^2(\mathbf{r})\, \nabla\delta U(\mathbf{r}) = \varepsilon. \tag{17}$$

Так как

$$\int d^3r f_0^2(\mathbf{r})\, \nabla U(\mathbf{r})\,|_{v=0} = 0,$$

то условие (17) совпадает с условием (15), записанным для функций нулевого приближения. Дальнейшие шаги теории возмущений могут быть проделаны в соответствии со стандартными рецептами, изложенными, например, в [12], и устранение расходимостей в более высоких порядках теории возмущений приведет к уточнению связи между ε и v, но мы не будем этого делать, ограничившись нулевым приближением (17).

5. Выпишем связь между v и ε для гауссовской модели полярона, когда

$$f_0^2(\mathbf{r}) = \frac{1}{\pi^{3/2} R_p^3} \exp\{-(r/R_p)^2\}. \tag{18}$$

В такой записи величина $lR_p\sqrt{2}/\alpha$ имеет смысл радиуса полярона; в гауссовской модели $R_p = 3\sqrt{\pi/2}$. Фононы будем считать бездисперсионными, $\omega_{\mathbf{k}} = 1$. Так как вполне очевидно, что $\mathbf{v}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}$ параллельны, то для упрощения расчетов умножим (17) на $\mathbf{v}$ скалярно. Для удобства вычислений преобразуем левую часть (17)

$$\mathbf{v}\int d^3\mathbf{r}\varphi_0^2(\mathbf{r})\,\nabla U(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}\int d^3\mathbf{r}_1\int d^3\mathbf{r}_2\int\limits_{-\infty}^{0} d\tau\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,2f_0^2(\mathbf{r})\,f_0^2(\mathbf{r}_1)\times$$

$$\times\,\mathbf{v}\nabla\frac{\sin(\tau-\mathbf{k}\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}-\mathbf{r}_2+\mathbf{v}\tau|} = 2\int d^3\mathbf{r}\int d^3\mathbf{r}_1\int\limits_{-\infty}^{0} d\tau f_0^2(\mathbf{r})\,f_0^2(\mathbf{r}_1)\times$$

$$\times\sin\tau\frac{d}{d\tau}\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}+\mathbf{v}\tau|} = -2\int\limits_{0}^{\infty} d\tau\int d^3\mathbf{r}_1\int d^3\mathbf{r}_2\,\frac{\cos\tau f_0^2(\mathbf{r}_1)\,f_0^2(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2-\mathbf{v}\tau|}.$$

Таким образом,

$$\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{v} = 2\int\limits_{0}^{\infty} d\tau\cos\tau\int d^3\mathbf{r}_1\int d^3\mathbf{r}_2\,\frac{f_0^2(\mathbf{r}_1)\,f_0^2(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2-\mathbf{v}\tau|}. \tag{19}$$

Хотя связь (19) получена довольно замысловатым образом, смысл ее весьма прост: (19) представляет собой баланс энергии, получаемой движущимся *АС* в единицу времени от поля (левая часть) и передаваемой в решетку (правая часть). В этом довольно просто убедиться, продифференцировав по времени среднее от H_{ph} на исследуемых состояниях.

Интегралы в (19) с волновыми функциями (18) берутся точно; вычислив их, получаем связь между v и E (в размерных единицах)

$$\frac{E}{E_0} = -\left(\frac{v_0}{v}\right)^2\mathrm{Ei}\left[-\left(\frac{v_0}{v}\right)^2\right], \tag{20}$$

$$E_0 = \alpha^3\hbar\omega_0\sqrt{2}/leR_p^2,$$

$$v_0 = l\omega_0 R_p/\alpha\sqrt{2}.$$

Связь (20) схематически приведена на рис. 1. При малых v/v_0 имеет место асимптотическое равенство

$$\frac{E}{E_0}\approx\exp\left\{-\left(\frac{v_0}{v}\right)^2\right\}.$$

6. Кривая на рис. 1 отражает ход ВАХ для полярона в случае низких температур. Естественно, мы не можем претендовать на правильность всей зависимости в силу ограничений на параметры, принятых при расчете. Во-первых, мы полностью пренебрегали процессами ионизации полярона в возбужденные состояния, т. е. полагали малым отношение

$$EelR_p/\alpha\Delta E_p,$$

где ΔE_p — разница энергий основного и возбужденного состояния полярона. Так как $\Delta E_p\sim\alpha^3\hbar\omega_0$, то это ограничение имеет вид

$$Eel/\alpha^3\hbar\omega_0\ll 1.$$

Во-вторых, малость поправок к φ_0 по δU приводит к ограничению

$$\exp\{-(v_0/v)^2\}\ll 1.$$

Таким образом, мы можем считать, что нашей теорией правильно описывается начальный участок ВАХ (он отграничен на рисунке пунктиром). Оценки величин для характерных полярных диэлектриков дают $E_0\sim$ $\sim 10^6$ В/см и $v_0\sim 10^6$ см/с. В зависимости от параметров материала v_0

и E_0 могут отличаться от приведенных величин примерно на порядок в ту или иную сторону.

7. При экспериментальных измерениях подвижности температурно-независящий участок ВАХ, похожий на изображенную на рис. 1 кривую, неоднократно наблюдался для веществ как со слабой, так и с сильной связью. При его интерпретации имелись сложности, связанные с тем, что имеющиеся к настоящему времени расчеты зависимости v от E дают скачок при $T=0$ [13] (рис. 2). Наличие скачка интерпретируется как невозможность испускания фононов при скоростях, меньших пороговой скорости v_p, такой, что

$$mv_p^2/2=\hbar\omega_0. \tag{21}$$

Кроме скачка, предсказывается также выход $v\,(E)$ на насыщение при сравнительно малых полях. Между тем экспериментально наблюдается отсутствие как скачка, так и (для веществ с сильной связью) насыщения зави-

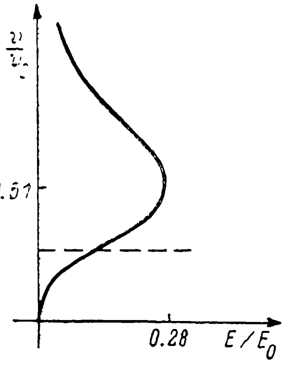

Рис. 1. Связь величин v и E (см. (20)).

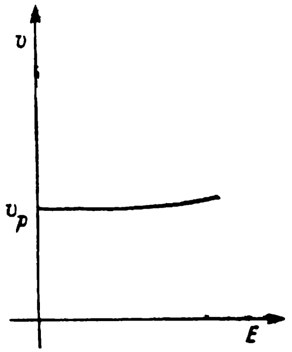

Рис. 2. Расчетная зависимость $v\,(E)$ при $T=0$.

симости $v\,(E)$ [14–18]. Эти особенности переноса для веществ со слабой связью принято объяснять примесным рассеянием и наличием ловушек [18], однако объяснение требует весьма сложной зависимости поведения времени захвата на ловушки не только от электрического поля, но и от установившегося характера движения электронов. Представленная в настоящей работе схема показывает, что существует простой альтернативный способ объяснения ВАХ, наблюдавшейся в эксперименте. Этот способ основан на ином механизме рассеяния, чем стандартно рассматриваемый сброс одного или нескольких фононов. При стандартном рассмотрении предполагается, что имеется некое время взаимодействия, причем как до, так и после взаимодействия система находится в «чистых» квантовых состояниях. При этом естественно требовать закона сохранения в каждом акте рассеяния, что приводит к ограничению (21) и связанному с ним скачку на ВАХ. Однако движущееся AC не есть собственное состояние гамильтониана; соответственно состояние решетки после прохождения AC также не является собственным, а есть суперпозиция состояний с разным числом фононов. При таком типе движения не выделяются отдельные акты испускания, и ограничение (21) отпадает. В заключение следует отметить что в ситуации, когда возможны оба типа режимов переноса — описанный нами выше (назовем его адиабатическим) и стриммерный, приводящий к ВАХ, изображенной на рис. 2, устойчивым будет (в силу минимума производства энтропии) тот, который при данном Е дает меньшую скорость, — очевидно, в области малых Е это будет адиабатический режим.

Авторы приносят благодарность В. И. Мельникову, Э. И. Рашба и К. Б. Толпыго за полезные обсуждения.

Литература

[1] *Пекар С. И.* Исследования по электронной теории кристаллов. М.: Гостехиздат, 1951. 256 с.
[2] *Fröhlich H.*, *Pelzer H.*, *Zienau S.* Phil. Mag., 1950, vol. 41, N 314, p. 221—242.
[3] *Devreese J. T.* In: Polarons and Excitons in Polar Semiconductors and Ionic Crystals. Ed. by J. T. Devreese and F. Peerers, NATO ASI Series, Series B: Physics, vol. 108. Plenum Press, N. Y.—London, 1984, p. 165—183.
[4] *Mańka R.* Phys. St. Sol. (b), 1979, vol. 93, p. 53—58.
[5] *Lee T. D.*, *Low F.*, *Pines D.* Phys. Rev., 1953, vol. 90, N 2, p. 297—302.
[6] *Боголюбов Н. Н.* УМЖ, 1950, т. 2, № 2, с. 3—24.
[7] *Тябликов С. В.* ЖЭТФ, 1951, т. 21, № 3, с. 377—388.
[8] *Jonson H. H.*, *Lippman B. A.* Phys. Rev., 1949, vol. 76, N 6, p. 828—832.
[9] *Базь А. И.*, *Зельдович Я. Б.*, *Переломов А. М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971. 544 с.
[10] *Давыдов А. С.*, *Энольский В. З.* ЖЭТФ, 1981, т. 81, № 3 (9), с. 1088—1098.
[11] *Whitefield G.*, *Platzman P. M.* Phys. Rev. B, 1972, vol. 6, N 10, p. 3987—3992.
[12] *Лонгрен К.*, *Скотт Э.* Солитоны в действии. М.: Мир, 1981. 312 с.
[13] *Peeters F.*, *Devreese J. T.* In: Solid State Physics, 1984, vol. 38, p. 82—135.
[14] *Nakazawa F.*, *Kanzaki H.* J. Phys. Soc. Japan, 1965, vol. 20, N 3, p. 468—469.
[15] *Bottle S. B.*, *Brown F. C.* 3d Int. Conf. Photocond., N. Y.: Pergamon, 1971. 139 p.
[16] *Mikkor H.*, *Brown F. C.* Phys. Rev., 1967, vol. 162, N 3, p. 841—847.
[17] *Kawai T.*, *Kobayashi K.*, *Fujita H.* J. Phys. Soc. Japan, 1966, vol. 21, N 3, p. 453—463.
[18] *Komijama S.* In: Polarons and Excitons in Polar Semiconductors and Ionic Crystals. Ed. by J. T. Devreese and F. Peeters, NATO ASI Series, Series B: Physics, vol. 108. N. Y.—London: Plenum Press, *1984*, p. 41—97.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
11 августа 1987 г.