

Пространственная дисперсия решеточной поляризуемости и свойства полярона большого радиуса

© А.Ю. Селютин

Южный федеральный университет,
344082 Ростов-на-Дону, Россия

(Поступила в Редакцию 12 февраля 2007 г.
В окончательной редакции 31 мая 2007 г.)

Изучены поляронные состояния в кристаллах с дисперсией оптических фононных мод вида $\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_0^2 + u^2\mathbf{k}^2$. Возникновение и распространение локальной поляризации в такой среде естественно рассматривать как эволюцию волнового пакета, имеющего ненулевую групповую скорость. Указанный подход позволяет построить внутренне непротиворечивую теорию движущегося автолокализованного электрона. Получены выражения для полной энергии и эффективной массы медленно движущегося полярона, которые демонстрируют значительную зависимость этих величин от параметра дисперсии $\sigma = u/\omega_0$.

PACS: 71.38-k, 63.20.Kr

1. Введение

Экспериментальные поиски автолокализованных электронов в ионных кристаллах выявили существенные различия между сценарием Пекара–Ландау и картиной наблюдаемой в действительности. В щелочно-галогидных кристаллах поляроны так и не были обнаружены, а в ряде полупроводниковых соединений наблюдались лишь при низких температурах с энергиями, значительно меньшими ожидаемых значений. Традиционная теория также оказалась не в состоянии объяснить экспериментальные данные по температурной зависимости поляронной проводимости [1].

Преодоление указанных трудностей стало возможным после осознания влияния пространственной дисперсии решеточной поляризуемости на свойства автолокализованного носителя [2]. В дальнейшем эта идея получила плодотворное развитие в работах [3,4]. Однако учет пространственной дисперсии (иначе — ненулевой групповой скорости продольных оптических мод) сопряжен с громоздкими расчетами. По этой причине многие результаты усовершенствованной теории были получены численным путем для заданных значений параметров среды. Последнее обстоятельство несколько усложняет их восприятие и практическое применение. Формулы, пусть даже приближенные, представляют собой наиболее емкий и удобный способ отражения установленных закономерностей. Поэтому целью данной работы является получение аналитических выражений для полной энергии и эффективной массы полярона при наличии пространственной дисперсии поляризуемости, что позволит оценить влияние этого фактора на динамические свойства квазичастицы.

Полярон представляет собой электрон, находящийся в локализованном состоянии $\psi(\mathbf{r}, t)$, которое поддерживается самосогласованной поляризацией $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$. В свою очередь $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ также имеет локальный характер, а ее появление связано со смещением ионов из равновесных положений под действием поля, создава-

емого электронной плотностью $-|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Если эти смещения малы по сравнению с пространственными неоднородностями внутрикристаллических полей, то для описания динамики решетки применимо гармоническое приближение. В этом подходе особое место занимают нормальные волны и закон их дисперсии $\omega^2 = \omega^2(\mathbf{k})$. Любое собственное движение решетки можно представить в виде суперпозиции нормальных волн. Ее реакция на внешнее воздействие также во многом определяется колебательными свойствами, которые характеризуются дисперсионным соотношением $\omega^2 = \omega^2(\mathbf{k})$. Например, если ионный кристалл помещен в электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, представляющее собой суперпозицию плоских волн

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} d^3\mathbf{k} \cdot d\omega, \quad (1)$$

то инерционная поляризация $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$, обусловленная смещением ионов из равновесных положений, будет иметь вид

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \chi_0 \int \frac{\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, \omega)}{\omega^2 - \omega_{\text{opt}}^2(\mathbf{k})} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} d^3\mathbf{k} \cdot d\omega, \quad (2)$$

где χ_0 — статическая диэлектрическая восприимчивость. Поле, которое создает автолокализованный электрон и индуцированная им поляризация, также связаны между собой соотношениями вида (1), (2), где $\omega^2 = \omega_{\text{opt}}^2(\mathbf{k})$ — закон дисперсии продольных оптических колебаний. Таким образом, для подробного исследования поляронных состояний необходима по возможности более полная информация о спектрах оптических мод.

Естественно, что универсальное соотношение $\omega^2 = \omega_{\text{opt}}^2(\mathbf{k})$, справедливое для всех ионных кристаллов во всей первой зоне Бриллюэна, записать невозможно. Однако при изучении длинноволновых колебаний допустимо пользоваться разложением $\omega_{\text{opt}}^2(\mathbf{k})$ в степенной ряд вблизи дна зоны

$$\omega_{\text{opt}}^2(\mathbf{k}) = \sum_{n!} \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n \omega_{\text{opt}}^2(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}^n} \right|_{\mathbf{k}=0} (\mathbf{k})^n. \quad (3)$$

В теории полярона Пекара–Ландау дисперсия оптических мод аппроксимировалась нулевым слагаемым раложения (3):

$$\omega^2 = \omega_{\text{opt}}^2(0). \quad (4)$$

Из (2) и (4) следует, что облако поляризационного заряда в этом случае представляет собой волновой пакет, составленный из стоячих волн. Такая модель вполне пригодна для описания свойств покоящегося полярона. Однако ее прикладная ценность довольно ограничена и сводится главным образом к демонстрации принципиальной возможности автолокализации электрона в ионном кристалле. Поскольку в реальных экспериментах температура кристалла отлична от абсолютного нуля, поляроны должны участвовать в тепловом движении. В силу того что электронное состояние $\psi(\mathbf{r}, t)$ и локальная поляризация взаимообусловлены, скорость движения автолокализованного электрона не может превышать групповую скорость $v_{\text{gr}} = \partial\omega_{\text{opt}}(\mathbf{k})/\partial\mathbf{k}$ волнового пакета (2). В противном случае инерционная поляризация не успеет отследить движение электрона и самосогласованное состояние разрушится. Следовательно, для корректного описания движущегося полярона необходим учет пространственной дисперсии оптических колебаний. Теория же, основанная на (4), для этих целей непригодна ввиду равенства нулю скорости пакета (2), (4) [5].

Следуя (3), дисперсионное соотношение для длинноволновых мод можно представить с заданной точностью в виде полинома по компонентам волнового вектора \mathbf{k} . При этом необходимо учитывать симметрию кристалла, так как полученное соотношение должно быть инвариантно относительно преобразований, переводящих решетку саму в себя.

Далее для определенности будем рассматривать кристаллы кубической симметрии. Тогда в (3) производные нечетного порядка, а также смешанные производные от $\omega_{\text{opt}}^2(\mathbf{k})$ по различным компонентам \mathbf{k} обратятся в нуль, и дисперсионное соотношение для бегущих волн с точностью до членов второго порядка примет вид

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_0^2 \pm u^2 \mathbf{k}^2. \quad (5)$$

Оба варианта (5), т. е. ветви как с положительной, так и с отрицательной групповой скоростью, наблюдаются экспериментально. Далее ограничимся рассмотрением веществ, в которых имеет место положительная пространственная дисперсия

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_0^2 + u^2 \mathbf{k}^2. \quad (6)$$

К ним, в частности, относятся сегнетоэлектрики со структурой перовскита [6], а также целый ряд ВТСП-соединений на основе сложных оксидов.

2. Полярон большого радиуса в среде с положительной пространственной дисперсией

Структура теории Пекара–Ландау [7] с учетом сделанных выше замечаний может быть приспособлена к описанию медленно движущегося полярона в среде с дисперсией (6). Как и в теории покоящегося полярона, основное состояние системы устанавливается путем минимизации функционала полной энергии $E(\psi(\mathbf{r}, t), \mathbf{P}(\mathbf{r}, t))$. При этом колебания решетки описываются методами классической механики. В качестве обобщенных координат и импульсов выбраны компоненты вектора $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ и его временных производных $\partial\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)/\partial t$. Электрон же рассматривается как квантовая частица с эффективной массой m^* , состояние которой задается волновой функцией $\psi(\mathbf{r}, t)$. В то же время движение электрона на расстояниях, превышающих характерный размер облака $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$, вполне поддается классическому описанию. В частности, можно говорить о координатах центра облака, его скорости \mathbf{v} и траектории.

В адиабатическом приближении функционал $E(\psi(\mathbf{r}, t), \mathbf{P}(\mathbf{r}, t))$ полярона, движущегося прямолинейно со скоростью \mathbf{v} , выглядит как

$$\begin{aligned} E(\psi(\mathbf{r}, t), \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)) = & \frac{m^* \mathbf{v}^2}{2} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \\ & + \frac{2\pi\tilde{\epsilon}}{\omega_0^2} \int \left\{ \left[(\partial\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)/\partial t)^2 - u^2 (\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla^2 \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)) \right. \right. \\ & \left. \left. + \omega_0^2 \mathbf{P}^2(\mathbf{r}, t) \right] - (\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)) \right\} d^3\mathbf{r}, \quad (7) \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\tilde{\epsilon}} = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}.$$

Здесь $\tilde{\epsilon}$ — решеточный вклад в диэлектрическую проницаемость кристалла, вносимый смещением ионов из равновесных положений. Первое слагаемое в (7) представляет собой кинетическую энергию классического движения электронного облака. Второе слагаемое соответствует энергии осцилляций квантовой частицы в самосогласованной потенциальной яме. В фигурных скобках в (7) стоит сумма плотностей энергии колебаний решетки и энергии электрон-решеточного взаимодействия. Поляризация $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ и индукция $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ определяются соотношениями

$$\left. \begin{aligned} \text{div } \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= -4\pi e |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \\ \text{rot } \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (8)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{div } \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) &= -\rho(\mathbf{r}, t) \\ \text{rot } \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (9)$$

где $\rho(\mathbf{r}, t)$ — плотность решеточного поляризационного заряда. При равномерном поступательном движении

электронного облака эта плотность вычисляется с помощью специализированной функции Грина $G(\mathbf{r}, t)$ [8]

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{\varepsilon} \omega_0^2 \int |\psi(\mathbf{r}')|^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) d^3\mathbf{r}', \quad (10)$$

которая является решением уравнения

$$\frac{\partial^2 G(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} - u^2 \nabla^2 G(\mathbf{r}, t) + \omega_0^2 G(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}t). \quad (11)$$

Использование векторов $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ придает физическую наглядность составным частям функционала $E(\Psi(\mathbf{r}, t), \mathbf{P}(\mathbf{r}, t))$. Но для дальнейших расчетов соотношение (7) оказывается слишком громоздким из-за промежуточных выкладок, связанных с вычислением $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$. Положение существенно облегчится, если входящие в (8)–(11) функции разложить в пространственные интегралы Фурье. В результате получится простая система алгебраических уравнений для нахождения Фурье-образов индукции и поляризации. Записав $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ в виде интегралов по обратному пространству и подставив их в (7), получим

$$\begin{aligned} E(\psi(\mathbf{r})) &= \frac{m^* \mathbf{v}^2}{2} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \int \psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ &+ e^2 (2\pi)^4 \frac{\omega_0^2}{\varepsilon} \int \frac{f(\mathbf{k}) f(-\mathbf{k})}{k^2} \\ &\times \left\{ \frac{2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v})^2}{[\omega_0^2 + u^2 k^2 - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v})^2]^2} - \frac{1}{\omega_0^2 + u^2 k^2 - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v})^2} \right\} d^3\mathbf{k}, \end{aligned} \quad (12)$$

где $f(\mathbf{k})$ Фурье-образ квадрата волновой функции

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int |\psi(\mathbf{r})|^2 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} d^3\mathbf{r}. \quad (13)$$

Считая движение полярона медленным, т.е. $|\mathbf{v}|/u \ll 1$, разложим (12) в ряд по степеням $|\mathbf{v}|/u$. Ограничиваясь квадратичными членами этого разложения, представим $E(\psi(\mathbf{r}))$ для медленно движущегося полярона в виде

$$\begin{aligned} E(\psi(\mathbf{r})) \Big|_{|\mathbf{v}|/u \ll 1} &= \frac{m^* \mathbf{v}^2}{2} + e^2 (2\pi)^4 \frac{\omega_0^2}{\varepsilon} \\ &\times \int \frac{f(\mathbf{k}) f(-\mathbf{k})}{k^2} \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v})^2}{(k^2 u^2 + \omega_0^2)^2} d^3\mathbf{k} \\ &- \frac{\hbar^2}{2m^*} \int \psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} - e^2 (2\pi)^4 \frac{\omega_0^2}{\varepsilon} \\ &\times \int \frac{f(\mathbf{k}) f(-\mathbf{k})}{k^2 (k^2 u^2 + \omega_0^2)} d^3\mathbf{k}. \end{aligned} \quad (14)$$

Первые два слагаемых в (14) пропорциональны \mathbf{v}^2 . Поэтому их можно отождествить с кинетической энергией полярона $E_v(f(\mathbf{k}))$. Ту часть $E(\psi(\mathbf{r}))$, которая не зависит от \mathbf{v} , следует рассматривать как функционал

полной энергии электрона в сопутствующей системе отсчета $E_0(\psi(\mathbf{r}))$.

Согласно (11) и (10), при произвольном значении $|\mathbf{v}|/u$ облако поляризационного заряда $\rho(\mathbf{r}, t)$, а вслед за ним и $\psi(\mathbf{r})$, должны испытывать квазирелятивистское сжатие в направлении \mathbf{v} . Но в силу сделанных предположений ($|\mathbf{v}|/u \ll 1$) этим эффектом в (14) можно пренебречь и считать $\psi(\mathbf{r})$ и $f(\mathbf{k})$ сферически-симметричными. Переходя в (12) и (13) к сферическим координатам, получим

$$f(k) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{k} \int_0^\infty r |\psi(r, t)|^2 \sin(kr) dr, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} E_0(\psi(r)) &= -\frac{2\pi}{m^*} \hbar^2 \int_0^\infty \psi(r) \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi(r)}{\partial r} \right) dr \\ &- 2e^2 (2\pi)^5 \frac{\omega_0^2}{\varepsilon} \int_0^\infty \frac{f^2(k)}{\omega_0^2 + u^2 k^2} dk. \end{aligned} \quad (16)$$

Так как между кинетической энергией частицы $E_v(f(\mathbf{k}))$ и ее эффективной массой M должна существовать связь $E_v(f(\mathbf{k})) = M\mathbf{v}^2/2$, из первых двух слагаемых в (14) можно получить выражение для эффективной массы полярона

$$M(f(k)) = m^* + \frac{4}{3} e^2 (2\pi)^5 \frac{\omega_0^2}{\varepsilon} \int_0^\infty \frac{f^2(k) k^2}{(k^2 u^2 + \omega_0^2)^2} dk. \quad (17)$$

Таким образом, расчет полярона в среде с дисперсией (6) производится по следующей схеме.

1) Выбирается пробная волновая функция локализованного состояния $\psi(r, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ с варьируемыми параметрами $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$. С помощью (15) устанавливается ее Фурье-образ $f(k, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$.

2) Подстановка $\psi(r, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ и $f(k, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ в (16), (17) с последующей минимизацией $E_0(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ по $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ позволяет выразить варьируемые параметры через характеристики кристалла $\tilde{\varepsilon}, \omega_0, u, m^*$

$$\left. \begin{aligned} \xi_1 &= \xi_1(\tilde{\varepsilon}, \omega_0, u, m^*) \\ \xi_n &= \xi_n(\tilde{\varepsilon}, \omega_0, u, m^*) \end{aligned} \right\}. \quad (18)$$

3) С помощью (18) и $\psi(r, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ устанавливается вид функции $\psi(r, \tilde{\varepsilon}, \omega_0, u, m^*)$, которая среди всех функций $\psi(r, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ наилучшим образом описывает локализованное состояние электрона. Подстановка (18) в $E_0(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ и $M(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ приводит к выражениям, связывающим энергию покоя $E_0(\tilde{\varepsilon}, \omega_0, u, m^*)$ и эффективную массу $M(\tilde{\varepsilon}, \omega_0, u, m^*)$ полярона с наблюдаемыми величинами $\tilde{\varepsilon}, \omega_0, u, m^*$.

3. Обсуждение результатов

Проиллюстрируем работу изложенной схемы на примере пекаровской пробной функции

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{1}{7\pi r_0^3}} \left(1 + \frac{r}{r_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \quad (19)$$

с единственным варьируемым параметром r_0 . Согласно (15),

$$f(x) = \frac{8}{7\pi^3} \frac{(x^2 + 28)}{(x^2 + 4)^4}, \quad (20)$$

где для сокращения записи введена безразмерная величина $x = kr_0$. В (16), (17) удобно перейти к новым единицам измерения, составленным из фундаментальных постоянных и характеристик кристалла m^* , $\tilde{\varepsilon}$, ω_0 . По аналогии с атомными назовем их поляронными единицами длины r_p , энергии E_p и массы M_p соответственно:

$$\left. \begin{aligned} r_p &= \frac{\hbar^2 \tilde{\varepsilon}}{m^* e^2} \approx \frac{m_e}{m^*} \tilde{\varepsilon} \cdot 5.3 \cdot 10^{-9} \text{ (cm)} \\ E_p &= \frac{e^4 m^*}{\hbar^2 \tilde{\varepsilon}^2} \approx \frac{m^*}{m_e \tilde{\varepsilon}^2} \cdot 5.96 \text{ (eV)} \\ M_p &= \frac{e^8 m^{*3}}{\hbar^6 \omega_0^2 \tilde{\varepsilon}^4} \approx \left(\frac{m^*}{m_e}\right)^3 \frac{1}{\omega_0^2 \tilde{\varepsilon}^4} \cdot 1.54 \cdot 10^6 \text{ (g)} \end{aligned} \right\}, \quad (21)$$

m_e — масса электрона в вакууме.

Из-за пространственной дисперсии происходит размывание облака поляризационного заряда по сравнению с $|\psi(r)|^2$. Степень размытия определяется величиной $\sigma = u/\omega_0$.

С учетом (20) и (21) формулы (16) и (17) принимают вид

$$E_0(f(x)) = E_p \left(\frac{3}{14r_0^2} - \frac{2(2\pi)^5}{\sigma^2} r_0 \int_0^\infty \frac{f^2(x)}{x^2 + \frac{r_0^2}{\sigma^2}} dx \right), \quad (22)$$

$$M(f(x)) = \frac{\hbar^2}{E_p r_p^2} + \frac{4}{3} (2\pi)^5 M_p \frac{r_0}{\sigma^4} \int_0^\infty \frac{f^2(x) x^2}{\left(x^2 + \frac{r_0^2}{\sigma^2}\right)^2} dx, \quad (23)$$

где $\sigma = u/\omega_0$. Квадрат (20) представим в виде

$$f^2(x) = \frac{1}{(7 \cdot 4)^2 \pi^6 5!} \times \lim_{b \rightarrow 1} \left\{ -\frac{d^5}{db^5} + 2 \frac{d^6}{db^6} - \frac{6}{7} \frac{d^7}{db^7} \right\} \frac{1}{x^2 + 4b}. \quad (24)$$

В (24) дифференцирование ведется по вспомогательному параметру b , который затем обращается в единицу. Формальное выражение (24) позволяет свести (22) и (23) к вычислению табличных интегралов ([9], формула 3.191.3). После дифференцирования по b и предельного перехода $b \rightarrow 1$ получим

$$E_0 = E_p \left[\frac{3}{14r_0^2} - \frac{1}{7^2 \cdot 2^9} \left(\frac{3^3 \cdot 199 \cdot r_0^7 + 3^3 \cdot 2^4 \cdot 199 \cdot \sigma \cdot r_0^6 + 2^2 \cdot 150007 \cdot \sigma^2 \cdot r_0^5 + 2^7 \cdot 18587 \cdot \sigma^3 \cdot r_0^4 + 2^4 \cdot 364003 \cdot \sigma^4 \cdot r_0^3 + 2^8 \cdot 34681 \cdot \sigma^5 \cdot r_0^2 + 2^6 \cdot 5 \cdot 24677 \cdot \sigma^6 \cdot r_0 + 2^{16} \cdot 7^2 \cdot \sigma^7}{r_0^8 + 2^4 \cdot \sigma \cdot r_0^7 + 2^4 \cdot 7 \cdot \sigma^2 \cdot r_0^6 + 2^6 \cdot 7 \cdot \sigma^3 \cdot r_0^5 + 2^5 \cdot 7 \cdot 5 \cdot \sigma^4 \cdot r_0^4 + 2^8 \cdot 7 \cdot \sigma^5 \cdot r_0^3 + 2^8 \cdot 7 \cdot \sigma^6 \cdot r_0^2 + 2^{10} \cdot \sigma^7 \cdot r_0 + 2^8 \cdot \sigma^8} \right) \right], \quad (25)$$

$$M = \frac{\hbar^2}{E_p r_p^2} + \frac{M_p}{3 \cdot 2^6 \cdot 7^2} \left[\frac{19 \cdot 23 \cdot r_0^6 + 2 \cdot 3^2 \cdot 19 \cdot 23 \cdot \sigma \cdot r_0^5 + 2^3 \cdot 3 \cdot 2579 \cdot \sigma^2 \cdot r_0^4 + 2^4 \cdot 3 \cdot 11 \cdot 521 \cdot \sigma^3 \cdot r_0^3 + 2^4 \cdot 3^2 \cdot 5113 \cdot \sigma^4 \cdot r_0^2 + 2^5 \cdot 3^2 \cdot 59 \cdot 67 \cdot \sigma^5 \cdot r_0 + 2^{14} \cdot 7^2 \cdot \sigma^6}{r_0^9 + 2 \cdot 3^2 \cdot \sigma \cdot r_0^8 + 2^4 \cdot 3^2 \cdot \sigma^2 \cdot r_0^7 + 2^5 \cdot 3 \cdot 7 \cdot \sigma^3 \cdot r_0^6 + 2^5 \cdot 3^2 \cdot 7 \cdot \sigma^4 \cdot r_0^5 + 2^6 \cdot 3^2 \cdot 7 \cdot \sigma^5 \cdot r_0^4 + 2^8 \cdot 3 \cdot 7 \cdot \sigma^6 \cdot r_0^3 + 2^9 \cdot 3^2 \cdot \sigma^7 \cdot r_0^2 + 2^8 \cdot 3^2 \cdot \sigma^8 \cdot r_0 + 2^9 \cdot \sigma^9} \right]. \quad (26)$$

Минимизируя (25) по r_0 , получим уравнение для нахождения равновесного значения этого параметра

$$\begin{aligned} &3^2 \cdot 199 \cdot r_0^{10} + 2 \cdot (3^4 \cdot 199 \cdot \sigma - 2^8 \cdot 7) r_0^9 + 2^2 (17 \cdot 3767 \cdot \sigma - 2^8 \cdot 3^2 \cdot 7) \sigma \cdot r_0^8 \\ &+ 3^2 \cdot 2^3 (73 \cdot 223 \cdot \sigma - 2^{10} \cdot 7) \sigma^2 \cdot r_0^7 + 2^4 (31 \cdot 6779 \cdot \sigma - 2^{10} \cdot 3 \cdot 7^2) \sigma^3 \cdot r_0^6 \\ &+ 3 \cdot 2^5 (17 \cdot 19 \cdot 197 \cdot \sigma - 2^9 \cdot 3 \cdot 7^2) \sigma^4 \cdot r_0^5 + 3^2 \cdot 2^6 (11437 \cdot \sigma - 2^9 \cdot 7^2) \sigma^5 \cdot r_0^4 \\ &+ 3 \cdot 2^7 (11^2 \cdot 71 \cdot \sigma - 2^{10} \cdot 7^2) \sigma^6 r_0^3 - 2^{18} \cdot 3^2 \cdot 7 \cdot \sigma^7 \cdot r_0^2 - 2^{17} \cdot 3^2 \cdot 7 \cdot \sigma^8 \cdot r_0 - 2^{18} \cdot 7 \cdot \sigma^9 = 0, \end{aligned} \quad (27)$$

где r_0 и σ выражены в поляронных единицах длины r_p (21).

Характеристики поляронного состояния

u , cm/s	$\frac{\sigma}{r_p}$	$\frac{r_0}{r_p}$	$\frac{E_0}{E_p}$	$\frac{M-m^*}{M_p}$	$\frac{M}{m_e}$ [3,4]
$5 \cdot 10^5$	0.376	2.064	$-5.24 \cdot 10^{-2}$	$4.91 \cdot 10^{-3}$	10.88
$1 \cdot 10^6$	0.752	2.209	$-4.98 \cdot 10^{-2}$	$3.45 \cdot 10^{-3}$	9.0
$2 \cdot 10^6$	1.504	2.559	$-4.39 \cdot 10^{-2}$	$1.65 \cdot 10^{-3}$	5.5

Точное решение (27) относительно r_0 при произвольном значении σ получить невозможно, так как общих методов решения алгебраических уравнений выше четвертой степени не существует. Однако в реальных соединениях σ изменяется лишь от 0 до 5, а на этом отрезке зависимости $r_0(\sigma)$ с точностью $\sim 0.8\%$ можно аппроксимировать полиномом

$$r_0(0 < \sigma < 5) = 2.0 - 3.63 \cdot 10^{-2} \sigma + 7.39 \cdot 10^{-1} \sigma^2 - 6.24 \cdot 10^{-1} \sigma^3 + 3.537 \cdot 10^{-1} \sigma^4 - 1.4396 \cdot 10^{-1} \sigma^5 + 4.2265 \cdot 10^{-2} \sigma^6 - 8.765 \cdot 10^{-3} \sigma^7 + 1.221 \cdot 10^{-3} \sigma^8 - 1.027 \cdot 10^{-4} \sigma^9 + 3.943 \cdot 10^{-6} \sigma^{10}.$$

Если пространственная дисперсия отсутствует ($\sigma = 0$), то из (25)–(27) получим

$$r \Big|_{\sigma=0} = \frac{2^9 \cdot 7}{3^2 \cdot 199} \approx 2.001,$$

$$E_0 \Big|_{\sigma=0} = -\frac{3^5 \cdot 199^2}{7^3 \cdot 2^{19}} E_p \approx -0.0535 \cdot E_p,$$

$$M \Big|_{\sigma=0} = \frac{\hbar^2}{E_p r_p^2} + \frac{19 \cdot 23 \cdot 3^5 \cdot 199^3}{7^5 \cdot 2^{33}} M_p \approx 5.79 \cdot 10^{-3} M_p.$$

Эти формулы совпадают с аналогичными выражениями теории Пекара–Ландау [1]. При $\sigma \ll 1$ (слабая дисперсия) в (25), (26) можно ограничиться квадратичными по σ слагаемыми. Тогда

$$E_0(\sigma) \Big|_{\sigma \ll 1} = E_p \left(-\frac{3^5 \cdot 199^2}{2^{19} \cdot 7^3} + \frac{3^6 \cdot 19 \cdot 23 \cdot 199^3}{2^{34} \cdot 7^5} \sigma^2 \right),$$

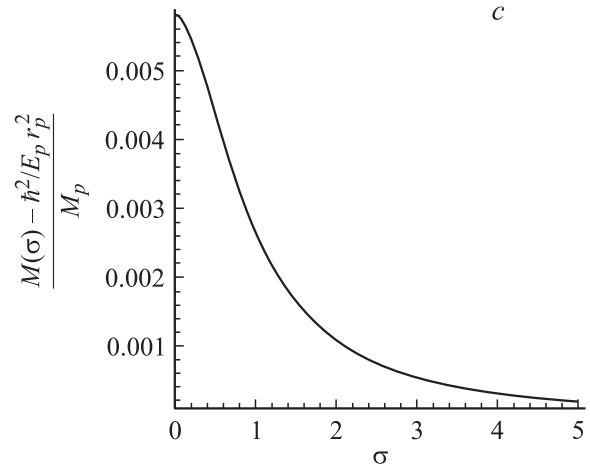
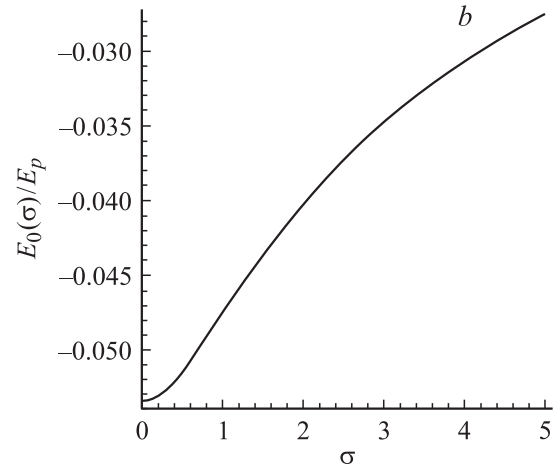
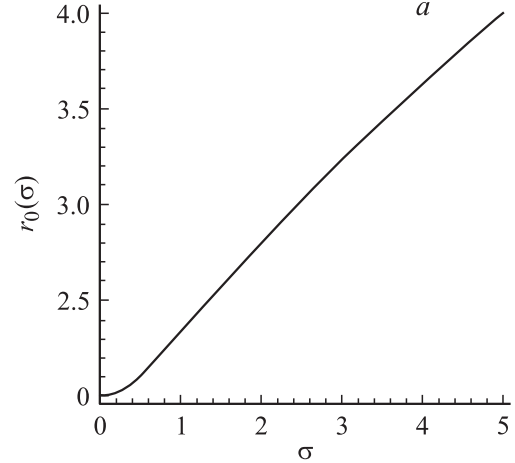
$$M(\sigma) \Big|_{\sigma \ll 1} = \frac{\hbar^2}{E_p r_p^2} + M_p \left(\frac{3^5 \cdot 19 \cdot 23 \cdot 199^3}{2^{33} \cdot 7^6} - \frac{3^8 \cdot 5 \cdot 199^4 \cdot 9857}{2^{49} \cdot 7^6} \sigma^2 \right).$$

В [3,4] проводился численный расчет эффективной массы движущегося полярона ($0 \leq |\mathbf{v}|/u < 1$) при следующих значениях параметров среды: $\omega_0 = 6.78 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $1/\tilde{\epsilon} = 0.27$, $m^* = m_e$. Минимальная фазовая скорость фононов u последовательно полагалась равной $5 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$, $1 \cdot 10^6 \text{ cm/s}$ и $2 \cdot 10^6 \text{ cm/s}$. Для сопоставления результатов [3,4] при $|\mathbf{v}| = 0$ с выводами данной работы укажем,

что величины поляронных единиц (21) при этих ω_0 , $\tilde{\epsilon}$, m^* таковы:

$$r_p = 1.96 \cdot 10^{-8} \text{ cm/s}, \quad E_p = 1.982 \text{ eV}, \\ M_p = 1970.74 m_e.$$

Характеристики полярона, которые рассчитывались по формулам (25)–(27), представлены в таблице. По-



Радиус локализации (a), энергия (b) и масса (c) поляронного состояния как функции параметра пространственной дисперсии σ .

следний столбец содержит результаты [3,4] для эффективной массы при $|\mathbf{v}| = 0$. Имеющиеся небольшие расхождения в значениях M связаны, скорее всего, со слишком грубыми округлениями при вычислениях в цитированных работах.

На рисунке представлены графики $r_0(\sigma)$, $E_0(\sigma)$ и $M(\sigma)$, согласно (25)–(27). Полученные зависимости имеют вполне наглядное физическое объяснение. Облако $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$, составленное из бегущих ($\sigma \neq 0$) мод, расплывается, приобретая большие размеры по сравнению со случаем, когда пространственная дисперсия отсутствует ($\sigma = 0$). Размывание локализуемого заряда приводит к уменьшению глубины самосогласованной потенциальной ямы. Поэтому с ростом параметра дисперсии σ увеличиваются область локализации электрона r_0 и энергия полярона E_0 . Что же касается эффективной массы, то она тем меньше, чем подвижнее облако поляризационного заряда (2). Степень подвижности такого волнового пакета логично характеризовать его максимальной групповой скоростью, которая для (6) пропорциональна σ . Поэтому усиление пространственной дисперсии приводит к падению эффективной массы M_0 .

Список литературы

- [1] C.A. Kuntcher et al. Phys. Rev. B **67**, 035 105 (2003).
- [2] A.S. Davydov, V.Z. Enolskii. Phys. Stat. Sol. (b) **143**, 167 (1987).
- [3] А.Е. Мыасникова, Е.М. Мыасников. Phys. Rev. B **56**, 5316 (1997).
- [4] Э.Н. Мясникова, А.Э. Мясникова. ЖЭТФ **116**, 1386 (1999).
- [5] А.С. Давыдов, В.З. Энольский. ЖЭТФ **94**, 177 (1988).
- [6] Г.А. Смоленский, В.А. Боков, В.А. Исупов, Н.Н. Крайник, Р.Е. Пасынков, М.С. Шур. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Наука, Л. (1971). С. 150.
- [7] С.И. Пекар. Исследования по электронной теории кристаллов. Гостехиздат, М. (1951).
- [8] Э.Н. Мясников, А.П. Попов. ДАН УССР А **5**, 73 (1980).
- [9] И.М. Рьжик, И.С. Градштейн. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Гос. изд-во технико-теорет. лит. М. (1951). С. 161.