

ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН И ПРЫЖКОВАЯ ПОДВИЖНОСТЬ БИПОЛЯРОНОВ МАЛОГО РАДИУСА

В. В. Брыжсин, А. В. Гольцев

Для модели с сильным электрон-фононным взаимодействием получен эффективный гамильтониан биполяронов малого радиуса. При этом предполагается, что внутриузельное полярон-поляронное притяжение за счет виртуального обмена фононами сильнее кулоновского расталкивания. В рамках этого гамильтониана, усредненного по фононному полю, исследована зависимость ширины биполярной зоны от температуры и энергии связи, а также вычислена энергия биполярон-биполяронного взаимодействия. Произведен расчет прыжковой подвижности биполяронов в наименьшем порядке теории возмущений. Показано, что статическая подвижность биполяронов в прыжковой области настолько мала, что основной вклад в электропроводность, как правило, дает токоперенос монополяронных состояний. Связанные биполяронные состояния, однако, играют определяющую роль в поглощении света.

Наличие притяжения между частицами за счет виртуального обмена фононами в модели поляронов малого радиуса было отмечено еще в [1]. Однако в дальнейшем теория малых поляронов строилась в основном в однополяронном приближении, где тенденция к спариванию не играла роли. Предполагалось, что кулоновское расталкивание не дает возможности реализации связанных состояний. Можно указать лишь на работы по поглощению света, в которых принималось во внимание либо кулоновское расталкивание поляронов на узле [2-4], либо их притяжение [5].

С другой стороны, в [6, 7] было отмечено, что наличие притяжения в модели с сильной связью может привести к возникновению связанного на узле биполяронного (синглетного) состояния, что должно отразиться на сигнале ЭПР (в этих работах речь шла о стеклах). В [8] был проведен анализ характера токопереноса в биполяронных системах с помощью наглядных двухузельных адиабатических термов, а в [9] рассмотрен вопрос об эффективной массе малых биполяронов. Имеются также теоретические работы по биполяронам большого радиуса, на которых мы здесь не останавливаемся. В последнее время имеются указания на проявление биполяронных состояний на эксперименте в органических материалах [10], соединениях бора [11], ниобате лития [12], ванадиевых бронзах [13], Ti_4O_7 [14], n - $BaTiO_3$ [15], окислах вольфрама [16].

Актуальность проблемы малых биполяронов стала еще более очевидной, когда в [17] было показано, что в системе малых биполяронов возможен фазовый переход в сверхпроводящее состояние. Особенности сверхпроводимости в биполяронной системе обсуждались затем в [18-20].

Настоящая работа посвящена построению последовательной теории малых биполяронов. Следует сказать, что в принципе биполяронные состояния можно описать в рамках традиционной теории малых поляронов [21, 22] посредством учета многоэлектронных диаграмм и отбора из них графиков биполяронного типа. Однако эта программа громоздка и неконструктивна. Ниже предлагается эффективный биполяронный гамильтониан H_{ef} , который автоматически учитывает только биполяронные состояния и содержит в себе как взаимодействие биполяронов друг с дру-

гом, так и с фононным полем. Следует подчеркнуть следующую важную особенность полученного H_{ef} . В [17-20] в качестве биполяронного гамильтониана использовался гамильтониан, являющийся средним от H_{ef} по фононному полю ($\langle H_{ef} \rangle_{ph}$). Такой усредненный гамильтониан не позволяет в принципе исследовать кинетические явления в биполяронной системе. В то же время гамильтониан H_{ef} может служить отправной точкой для построения как переноса тока биполяронами в нормальном состоянии, так и для изучения сверхпроводимости в этой модели с более последовательным учетом многофононных корреляций. В качестве первого конкретного приложения полученного эффективного гамильтониана произведен расчет прыжкового переноса биполяронами в низшем порядке теории возмущений. В результате показано, что в высокотемпературной прыжковой области биполяронные состояния дают экспоненциально малый вклад в проводимость по сравнению с монополяронами, хотя число последних экспоненциально мало.

1. Эффективный биполяронный гамильтониан

В случае сильного электрон-фононного взаимодействия поляронный гамильтониан имеет вид [21] (учитывается межполяронное взаимодействие только на одном узле)

$$H = H_0 + V, \quad H_0 = H_{ph} + U_c \sum_m n_{m\uparrow} n_{m\downarrow} - E_p \sum_{m, \sigma, \sigma'} n_{m\sigma} n_{m\sigma'}, \quad (1)$$

$$\left. \begin{aligned} H_{ph} &= \sum_q \hbar \omega_q \left(b_q^+ b_q + \frac{1}{2} \right), \\ V &= \sum_{m, m', \sigma} \Phi_{mm'} a_{m'\sigma}^+ a_{m\sigma}, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{mm'} &= I_{mm'} \exp \left(\sum_q \Delta_{mm'}(q) b_q^+ - \text{h. c.} \right), \\ \Delta_{mm'}(q) &= u_{mq} - u_{m'q}, \quad u_{mq} = - \frac{\gamma_q^*}{\sqrt{2N}} e^{-iqR_m}, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

$$E_p = \sum_q \hbar \omega_q |\gamma_q|^2.$$

В формулах (1), (2) σ есть спиновый индекс, а m — номер узла решетки. Величины U_c и E_p в (1) являются соответственно одноузельной энергией кулоновского отталкивания электронов и поляронный сдвиг.

Если выигрыш в энергии за счет связывания двух поляронов в биполярон

$$U = 2E_p - U_c \quad (4)$$

достаточно велик, тогда можно предположить, что при низких температурах все поляроны связаны в биполяроны. Для вывода эффективного биполяронного гамильтониана воспользуемся методом, изложенным в [23]. В основе вывода лежит предположение о том, что все электроны связаны в пары. Это означает, что в каждом узле решетки имеется либо два электрона с противоположными спинами, либо ни одного. Таким образом, мы не учитываем как процессы диссоциации биполярона, так и процессы связывания поляронов в пары. В то же время эти два процесса могут происходить виртуально.

В том случае, когда энергия связи биполярона U много больше ширины поляронной зоны $\langle \Phi_{mm'} \rangle_{ph}$, для вывода эффективного биполяронного гамильтониана можно использовать теорию возмущений [23]. В качестве невозмущенного гамильтониана берем

$$H'_0 = -U \sum_m n_{m\uparrow} n_{m\downarrow}. \quad (5)$$

По причинам, обсуждавшимся выше, мы ограничиваемся только подпространством собственных состояний H'_0 , в которых каждый узел решетки либо пуст, либо занят двумя электронами с противоположными спинами. Параметром теории возмущений является величина

$$\lambda = \langle \Phi_{mm'} \rangle_{ph} / U \ll 1. \quad (6)$$

Построение эффективного гамильтониана сводится к нахождению такого унитарного преобразования

$$H_{ef} = e^{i\lambda S} H e^{-i\lambda S}, \quad (7)$$

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n S_n, \quad H_{ef} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n H^{(n)},$$

чтобы преобразованный гамильтониан H_{ef} не менял числа биполяронов. Ограничиваясь только порядком $O(\lambda^2)$, согласно [23], получим

$$\left. \begin{aligned} H^{(1)} &= \sum_{\nu, \nu'} P_{\nu\nu'} V P_{\nu\nu'}, \\ H^{(2)} &= \sum_{\nu, \nu'} P_{\nu\nu'} \left\{ i [S_0, V] - \frac{1}{2} [S, [S_0, H_0]] \right\} P_{\nu\nu'}, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

где $P_{\nu\nu'}$ — проектор на подпространство с ν биполяронами и ν' пустыми узлами. Оператор S_0 определяется уравнением

$$i [H_0, S_0] = V - H^{(1)}, \quad (9)$$

решение которого имеет вид [23]

$$S_0 = \frac{1}{2\hbar} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} dt e^{-\epsilon t} [V(-t) - V(t) - H^{(1)}(-t) + H^{(1)}(t)], \quad (10)$$

$$A(t) = e^{iH'_0 t}. \quad (11)$$

Подставляя (10) и (11) в (8) и выделяя затем квазидиагональную часть операторов в определенном выше подпространстве состояний, получим эффективный биполяронный гамильтониан

$$H_{ef} = \sum_{m, m'} \{ -J_{mm'} B_m^+ B_{m'} + v_{mm'} N_{m'} (N_{m'} - 1) \}, \quad (12)$$

где операторы

$$B_m^+ = a_{m\uparrow}^+ a_{m\downarrow}^+, \quad B_m = a_{m\downarrow} a_{m\uparrow}, \quad N_m = B_m^+ B_m$$

есть соответственно операторы рождения, уничтожения и числа биполяронов на узле m . Первое слагаемое в (12) описывает движение биполяронов, второе — взаимодействие биполяронов друг с другом и с фоновым полем. Параметры $J_{mm'}$ и $v_{mm'}$, являющиеся многофононными операторами, определяются соотношениями

$$\begin{aligned} J_{mm'} &= -\frac{i}{2\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{-\epsilon t} \{ e^{iUt/\hbar} [\Phi_{mm'} \Phi_{mm'}(t) + \Phi_{mm'}(-t) \Phi_{mm'}] - \\ &\quad - e^{-iUt/\hbar} [\Phi_{mm'}(t) \Phi_{mm'} + \Phi_{mm'} \Phi_{mm'}(-t)] \}, \end{aligned} \quad (13a)$$

$$\begin{aligned} v_{mm'} &= -\frac{i}{2\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{-\epsilon t} \{ e^{iUt/\hbar} [\Phi_{mm'} \Phi_{m'm}(t) + \Phi_{mm'}(-t) \Phi_{m'm}] - \\ &\quad - e^{-iUt/\hbar} [\Phi_{mm'}(t) \Phi_{m'm} + \Phi_{mm'} \Phi_{m'm}(-t)] \}. \end{aligned} \quad (13b)$$

Произведения двух операторов Φ в этих формулах удобно преобразовать с помощью операторного тождества

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\frac{1}{2} K} e^{\hat{A} + \hat{B}}, \quad (14)$$

где $K = [\hat{A}, \hat{B}]$ — с-число. Используя явный вид $\Phi_{mm'}$ (3), после несложных преобразований получим

$$\begin{aligned} \Phi_{mm'}(t) \Phi_{mm'}(t') &= I_{mm'}^2 \exp \left\{ i \sum_q |\Delta_{mm'}(q)|^2 \sin \omega_q (t - t') \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ \sum_q [\Delta_{mm'}(q) b_q^+ (e^{i\omega_q t} + e^{i\omega_q t'}) - \text{h. c.}] \right\}, \end{aligned} \quad (15a)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{mm'}(t) \Phi_{m'm}(t') &= I_{mm'} I_{m'm} \exp \left\{ -i \sum_q |\Delta_{mm'}(q)|^2 \sin \omega_q (t - t') \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ \sum_q [\Delta_{mm'}(q) b_q^+ (e^{i\omega_q t} - e^{i\omega_q t'}) - \text{h. c.}] \right\}. \end{aligned} \quad (15b)$$

Вводя обозначение

$$V_{mm'}(t) = \sum_q |\Delta_{mm'}(q)|^2 \sin \omega_q t, \quad (16)$$

получим окончательное выражение для параметров биполярного гамильтониана

$$\left. \begin{aligned} J_{mm'} &= \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{-st} \sin(Ut/\hbar - V_{mm'}(t)) (\psi_{mm'}(t) + \psi_{mm'}(-t)), \\ v_{mm'} &= \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{st} \sin(Ut/\hbar + V_{mm'}(t)) (\tilde{\psi}_{mm'}(t) + \tilde{\psi}_{m'm}(-t)), \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

где введены многофононные операторы

$$\begin{aligned} \psi_{mm'}(t) &= I_{mm'}^2 \exp \left\{ 2 \sum_q \cos\left(\frac{\omega_q t}{2}\right) [\Delta_{mm'}(q) b_q^+ e^{i\omega_q t/2} - \text{h. c.}] \right\}, \\ \tilde{\psi}_{mm'}(t) &= I_{mm'} I_{m'm} \exp \left\{ -2 \sum_q \sin\left(\frac{\omega_q t}{2}\right) [\Delta_{mm'}(q) b_q^+ e^{i\omega_q t/2} + \text{h. c.}] \right\}. \end{aligned}$$

Следует сделать несколько замечаний о тех существенных отличиях гамильтониана (12) от усредненного по фононам гамильтониана

$$\langle H_{\text{эф}} \rangle_{\text{ph}} = \sum_{m', m} \{ -\langle J_{mm'} \rangle_{\text{ph}} B_m^+ B_m + \langle v_{mm'} \rangle_{\text{ph}} N_{m'} (N_m - 1) \}. \quad (19)$$

Этот гамильтониан был получен в [19] и использовался для изучения биполярной сверхпроводимости. При этом по аналогии с теорией малых поляронов [21] величине $\langle J_{mm'} \rangle_{\text{ph}}$ можно придать смысл биполярной зоны. Величину $\langle v_{mm'} \rangle_{\text{ph}}$ можно интерпретировать как усредненное биполярон-биполяронное взаимодействие на разных узлах. Самое существенное отличие гамильтониана (12) от (19) состоит в том, что (12) позволяет исследовать кинетические свойства биполярной системы, а (19) — не позволяет. Второе отличие заключается в различной роли слагаемого, пропорционального $N_{m'}$. В (19) это слагаемое дает лишь несущественный сдвиг энергии биполяронов, тогда как в (12) оно описывает взаимодействие биполяронов с фононами и в некоторой степени подобно фреиховскому гамильтониану взаимодействия электронов с фононами. В области малых концентраций биполяронов, когда $\langle N_{m'} N_{m'} \rangle$ мало по сравнению с $\langle N_m \rangle$, именно это слагаемое, пропорциональное $N_{m'}$, описывает процессы рассеяния биполяронов на фононах.

Отметим, что для случая сильного кулоновского расталкивания $U_c > 2E_p$ эффективный гамильтониан системы с сильным электрон-фононным взаимодействием был рассмотрен в [23, 24].

2. Усредненный по фононам гамильтониан и биполярная зона

Перейдем теперь к расчету биполярной зоны. Согласно (18), для этого необходимо найти $\langle \psi_{mm'}(t) \rangle$, что можно сделать с помощью известного равенства (см., например, [21], стр. 368)

$$\left\langle \exp \left[\sum_q (\delta_q b_q^+ - \delta_q^* b_q) \right] \right\rangle = \exp \left\{ - \sum_q |\delta_q|^2 \left(N_q + \frac{1}{2} \right) \right\}. \quad (20)$$

Здесь N_q — фононные числа заполнения. При термодинамическом усреднении по N_q эта величина переходит в функцию Планка. Использование (20) дает следующее выражение для биполярной зоны

$$\begin{aligned} J_{mm'} = \langle J_{mm'} \rangle_{ph} = & -2 \bar{I}_{mm'}^2 \operatorname{Im} \int_0^\infty dt e^{-st - iUt/\hbar} \times \\ & \times \exp \left\{ - \sum_q \frac{|\Delta_{mm'}(q)|^2}{\operatorname{sh} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega_q \beta \right)} \cos \omega_q \left(t + \frac{1}{2} i \hbar \beta \right) \right\}, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\left. \begin{aligned} I_{mm'} &= I_{mm'} \exp(-S_{T, mm'}), \\ S_{T, mm'} &= \frac{1}{2} \sum_q |\Delta_{mm'}(q)|^2 \operatorname{cth} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega_q \beta \right). \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Величина $\bar{I}_{mm'}$ описывает зону одиночного малого полярона.

Интеграл в (21) существенно отличается от интегралов, обычно встречающихся в теории поляронов малого радиуса. Дело в том, что наибольшее уничтожение экспоненциальной малости происходит в плоскости комплексного t не при $\operatorname{Re} t = 0$, а при $\operatorname{Re} \omega_0 t = \pi$ (если заменить ω_q на ω_0 , т. е. пренебречь дисперсией оптических фононов).

В области не слишком низких температур, когда $\Delta^2 / \operatorname{sh} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \beta \right) \gg 1$, интеграл в (21) можно брать по методу перевала. Для бездисперсионного случая контур интегрирования (после подстановки $t' = t + i\hbar\beta/2$) можно выбрать, как показано на рис. 1. Тогда

$$\begin{aligned} J_{mm'} = & -\frac{2}{\hbar} \bar{I}_{mm'}^2 e^{-\frac{1}{2} U \beta} \operatorname{Im} \left\{ \int_{i\hbar\beta/2}^{-i\infty} dt e^{-iUt/\hbar - \gamma} \cos \omega_0 t + \right. \\ & \left. + \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(s+iU) 2\pi n/\omega_0 \hbar} \int_C dt e^{-iUt/\hbar - \gamma} \cos \omega_0 t \right\} = \\ = & \frac{2}{\hbar \omega_0} \bar{I}_{mm'}^2 e^{-\frac{1}{2} U \beta} \left\{ \int_{-\frac{1}{2} \hbar \beta \omega_0}^{\infty} dz e^{-\frac{Uz}{\hbar \omega_0} - \gamma \operatorname{ch} z} + \frac{\pi}{\operatorname{sh} \left(\frac{\pi U}{\hbar \omega_0} \right)} I \frac{U}{\hbar \omega_0} (\gamma) \right\}, \quad (23) \\ \gamma = & \sum_q |\Delta_{mm'}(q)|^2 / \operatorname{sh} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \beta \right) \equiv \gamma_0 / \operatorname{sh} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \beta \right), \end{aligned}$$

а $I_\nu(x)$ — модифицированная функция Бесселя.

Рассмотрим два предельных случая. При низких температурах основной вклад в $\bar{J}_{mm'}$ дает интегральный член. В пределе $T \rightarrow 0$ имеем

$$J_{mm'} = \frac{2}{\hbar\omega_0} I_{mm'}^2 \int_0^{\infty} dz \exp\left(-\frac{Uz}{\hbar\omega_0} - \gamma_0 e^{-z}\right).$$

При $U > \omega_0\gamma_0$ основной вклад дает окрестность точки $z=0$ и

$$J_{mm'} \approx \frac{2}{U} I_{mm'}^2 e^{-2\gamma_0}. \quad (24)$$

Заметим, что $\gamma_0 = 2S_T$ при $T=0$. Этот ответ имеет прозрачный физический смысл: биполяронная зона, как и поляронная, образуется посредством сужения затравочной зоны $2I^2/U$ за счет фактора Дебая—Уоллера e^{-4S_T} . При этом в показателе по сравнению с полярном появляется дополнительный множитель 4, так как константа связи биполярона с фононами увеличивается в два раза. Выражение для биполяронной зоны в форме (24) было получено в [9].

Однако следует отметить, что неравенство $U > \hbar\omega_0\gamma_0$ обычно не выполняется, так как $U = \hbar\omega_0\gamma_0 - U_c$ (см. (4), причем $2E_p \approx \hbar\omega_0\gamma_0$). Поэтому более реальным является случай $U < \hbar\omega_0\gamma_0$. Здесь уже основной вклад в интеграл дает окрестность точки $z_0 = \ln(\hbar\omega_0\gamma_0/U)$ и

$$J_{mm'} = 2I_{mm'}^2 \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_0 U}} \exp \times \\ \times \left\{ -\frac{U}{\hbar\omega_0} \ln\left(\frac{e\hbar\omega_0\gamma_0}{U}\right) - \gamma_0 \right\} \quad (25)$$

(e — основание натурального логарифма).

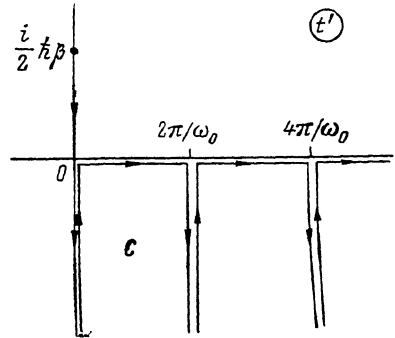


Рис. 1. Контур интегрирования для интеграла в уравнении (21).

Таким образом, если $U > \omega_0\gamma_0\hbar$ показатель экспоненты от U не зависит (см. (24)), а при уменьшении U ниже $\hbar\omega_0\gamma_0$, он уменьшается от $2\gamma_0$ до γ_0 .

Перейдем теперь к случаю высоких температур, когда основной вклад дает член с $I_{U/\hbar\omega_0}$ в (23). В области высоких температур $\gamma \approx 2\gamma_0/\hbar\omega_0\beta > U/\hbar\omega_0$. Поэтому для функции Бесселя можно использовать асимптотику для больших аргументов. Тогда

$$J_{mm'} = \frac{1}{\hbar\omega_0 \sin(\pi U/\hbar\omega_0)} I_{mm'}^2 \sqrt{\frac{2\pi}{\gamma}} \exp\left\{-\frac{U\beta}{2} - \gamma_0 \operatorname{th} \frac{1}{4} \hbar\omega_0\beta\right\}. \quad (26)$$

В наиболее интересном здесь пределе $\hbar\omega_0\beta < 1$ (температура выше дебаевской)

$$J_{mm'} = \sin^{-1}\left(\frac{\pi U}{\hbar\omega_0}\right) I_{mm'}^2 \sqrt{\frac{\pi\beta}{E_a}} \exp\left\{-\beta\left(E_a + \frac{U}{2}\right)\right\}, \quad (27)$$

где $E_a = \hbar\omega_0\gamma_0/4$ — энергия активации для прыжковой подвижности малых поляронов. Обращают на себя внимание две особенности в высокотемпературном поведении биполяронной зоны (27). Во-первых, в области высоких температур ширина биполяронной зоны растет по активационному закону, что контрастирует со случаем монополяронов, где зона с ростом температуры монотонно сужается вследствие роста фактора S_T . Во-вторых, ширина зоны (27) содержит резонансный множитель $\sin^{-1} \times (\pi U/\hbar\omega_0)$, обращающийся в бесконечность при $U = n\hbar\omega_0$. Это обстоятельство указывает на то, что (27) описывает межъямное туннелирование с участием оптических фононов. Разность энергий в ямах равна U , т. е. этот переход происходит между связанным и диссоциированным биполяронными состояниями. С этим же обстоятельством связан тот факт, что при взятии интеграла по времени основную роль играли времена с $\operatorname{Re}t =$

$=\pi n/\omega_0$, которые имеют смысл задержки между туннелированием двух электронов, входящих в биполярон. Иными словами, в области высоких температур важную роль при квантовомеханическом расплывании биполяронного волнового пакета играет его структура. В области же низких температур, когда основной вклад дает область $\text{Re } t=0$, туннелирование биполярона происходит как единое целое.

На расходимость теории возмущений при построении эффективного гамильтониана в атомном пределе в точках $U=n\omega_0$ указывалось в [9, 23]. Эти расходимости, в принципе, можно устранить посредством учета последующих членов ряда теории возмущений для эффективного гамильтониана. Однако, как мы сейчас увидим, устранить эти расходимости можно и в низшем порядке теории возмущений посредством учета дисперсии оптических фононов. В области низких температур учет слабой дисперсии фононов (когда $\Delta\omega \ll \omega_0$, $\Delta\omega$ — ширина дисперсии) никаких принципиальных изменений в результат (24) не вносит. Однако при высоких темпе-

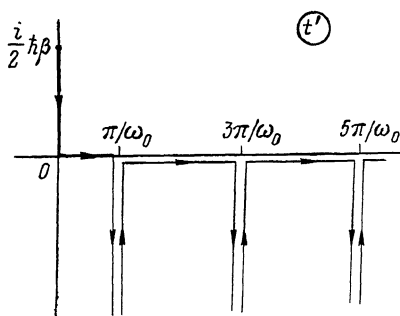


Рис. 2. Контур интегрирования для интеграла в уравнении (30).

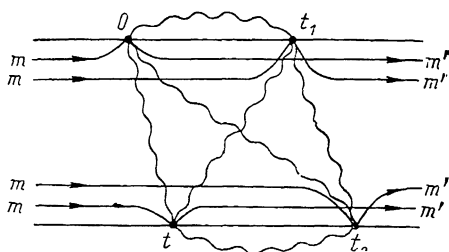


Рис. 3. Диаграмма, определяющая вероятность перескока биполярона и соответствующая уравнению (36).

ратурах дисперсия начинает играть существенную роль. Как показал Холстейн [25], при наличии дисперсии выражения типа $\sum_q \delta_q \cos \omega_q t$, входящие в показатель экспоненты в (21), с ростом t не только осциллируют, но и убывают как $t^{-3/2}$. В силу этого вклады в интеграл по контурам C на рис. 1 при движении вдоль оси $\text{Re } t'$ уже не одинаковы, а убывают, т. е. сумма по n в (23) содержит экспоненциально убывающий фактор. Конкретный вид этого фактора зависит от модели дисперсии, и в дальнейшем мы полуфеноменологически введем в эту сумму множитель $e^{-\alpha}$, где $\alpha = \Delta\omega \gamma_0/\omega_0$. В результате этого в формуле (27) нужно произвести замену

$$\sin^{-1} \left(\frac{\pi U}{\hbar \omega_0} \right) \rightarrow \frac{\text{ch } \alpha \sin \left(\frac{\pi U}{\hbar \omega_0} \right)}{\left(\text{ch } \alpha \sin \left(\frac{\pi U}{\hbar \omega_0} \right) \right)^2 + \left(\text{sh } \alpha \cos \left(\frac{\pi U}{\hbar \omega_0} \right) \right)^2}. \quad (28)$$

Отсюда видно, что фононная дисперсия «замывает» резонанс. При этом следует иметь в виду, что хотя дисперсия предполагалась слабой, параметр α произволен. В частности, при достаточно больших α радикально меняется фаза осциллирующей функции. Так, при $\alpha \gg 1$, согласно (28),

$$\sin^{-1} \left(\frac{\pi U}{\hbar \omega_0} \right) \rightarrow 2e^{-\alpha} \sin \left(\frac{\pi U}{\hbar \omega_0} \right), \quad (29)$$

что соответствует учету вклада в интеграл только от крайне левого из контуров (т. е. перевальной точки с наименьшим $\text{Re } t'$).

Перейдем теперь к исследованию усредненной по фононам константы взаимодействия между биполяронами. Согласно (17), (18) и (20),

$$\bar{v}_{mm'} = \langle v_{mm'} \rangle_{\text{ph}} = -\frac{2}{\hbar} I_{mm'} I_{m'm} \text{Im} \int_0^{\infty} dt e^{-st - iU t} \times \\ \times \exp \left\{ \sum_q \frac{|\Delta_{mm'}(q)|^2}{\text{sh} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega_q \beta \right)} \cos \omega_q \left(t + \frac{i}{2} \hbar \beta \right) \right\}. \quad (30)$$

Сравнивая выражения для \bar{v} (30) и \bar{J} (21), видим, что различие между ними заключается в изменении знака в экспоненте под интегралом. Это приводит к тому, что контур интегрирования для \bar{v} изменится по сравнению с рис. 1 так, как это изображено на рис. 2. Можно убедиться в том, что с точностью до экспоненциально малых вкладов достаточно учитывать лишь участок контура от $i\hbar\beta/2$ до 0. Тогда (ср. с (23))

$$\bar{v}_{mm'} = \frac{2}{\hbar \omega_0} I_{mm'} \bar{J}_{m'm} e^{-U\beta} \int_{-\frac{1}{2} \hbar \beta \omega_0}^0 dz e^{-\frac{Uz}{\hbar \omega_0} + \gamma \text{ch} z}. \quad (31)$$

Основной вклад в этот интеграл дает окрестность точки $z = -\frac{1}{2} \hbar \beta \omega_0$. Разлагая показатель экспоненты в ряд около этой точки с точностью до линейных членов и заменяя верхний предел интегрирования на бесконечность, имеем

$$\bar{v}_{mm'} \approx \frac{2 I_{mm'} I_{m'm}}{U + 4E_a}, \quad (32)$$

т. е. величина $\bar{v}_{mm'}$ не содержит экспоненциальной малости и практически не зависит от температуры (на языке диагональных по числам заполнения фононов матричных элементов — не зависит от N_q). При $U \gg 4E_a$ соотношение (32) переходит в найденное в [9, 24].

3. Прыжковая биполяронная проводимость

Прыжковый вклад в проводимость удобно рассматривать через коэффициент диффузии D ,

$$D = \sum_m X_m^2 W_{0m}, \quad (33)$$

где X_m — длина прыжка с узла 0 на узел m , а W_{0m} — вероятность его в единицу времени. В приближении прыжков только между ближайшими соседями это соотношение принимает вид

$$D = 2a^2 W, \quad (34)$$

где a — постоянная решетки, W — вероятность прыжка на узел ближайшего соседа. Выражение для прыжкового вклада в дрейфовую подвижность μ можно найти из соотношения Эйнштейна $\mu = 2eD/kT$. Множитель 2 здесь возникает из-за того, что заряд биполярона равен $2e$. Ниже рассматривается случай статистики Больцмана для биполяронов.

При расчете в низшем порядке по I (четвертом), согласно (12),

$$W = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-s|t|} \{ \langle J(t) J(0) \rangle_{\text{ph}} - \langle J(0) \rangle_{\text{ph}}^2 \} |_{s \rightarrow 0}. \quad (35)$$

Здесь и ниже индексы m и m' опущены ($\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'} = \mathbf{g}$ — вектор ближайшего соседа), $J(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_{\text{ph}} t\right) J \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_{\text{ph}} t\right)$. После довольно громоздких, но несложных, вычислений с помощью (14) и (20) получаем следующее выражение для вероятности перескока

$$W = \frac{4I^4}{\hbar^4} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} dt_1 dt_2 e^{-s|t|} \sin [Ut_1 - V(t_1)] \sin [Ut_2 - V(t_2)] \times \\ \times \exp \left\{ - \sum_q |\Delta(q)|^2 \operatorname{cth} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega_q \beta \right) (\cos \omega_q t_1 + \cos \omega_q t_2) \times \right. \\ \left. \times \left[\exp \left[4 \sum_q \frac{|\Delta(q)|^2}{\operatorname{sh} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega_q \beta \right)} \cos(\omega_q t) \cos \left(\frac{1}{2} \omega_q t_1 \right) \cos \left(\frac{1}{2} \omega_q t_2 \right) \right] - 1 \right\}. \quad (36)$$

Напомним, что вычитание $\langle J(0) \rangle^2$ в (35) есть следствие процедуры выделения расходящихся на больших t вкладов в интегралы (выделение диаграмм с оборванными фононными связками). Эта вычитательная процедура приводит к появлению последовательности графиков, расходящихся на больших временах, лестничное суммирование которых дает туннельный вклад в электропроводность в теории малой подвижности. В традиционной теории малых поляронов [21, 22, 25] туннельный вклад доминирует в области низких температур. В настоящей работе туннельный механизм токопереноса не рассматривается, а поэтому получаемые результаты несправедливы при достаточно низких температурах. Отметим также, что вероятность перескока биполярона в форме (36) можно получить и с помощью обычной в теории малых поляронов диаграммной техники посредством отбора биполяронных графиков (см. выше). При этом следует рассматривать диаграмму, изображенную на рис. 3 (относительно диаграммной техники см. [21, 22]).

Как показывает анализ, основной вклад в интеграл (36) дает окрестность точек $\omega_0 t_1 = \pi(2n_1 + 1)$, $\omega_0 t_2 = \pi(2n_2 + 1)$ подобно тому, как мы уже с этим встречались при расчете $J(21)$. Далее дисперсию фононов считаем достаточно сильной, так что можно ограничиться лишь первыми перевальными точками с $n_1 = n_2 = 0$ (т. е. случаем, рассмотренным при получении (29)). Разлагая показатель экспоненты в ряд по t_1 и t_2 около $t_1 = t_2 = \pi/\omega_0$ с точностью до квадратичных членов, получаем

$$W = \frac{4I^2}{\hbar^2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \left\{ \exp \left[\frac{i}{\hbar} (U + 4E_a)(t_1 - t_2) \right] - \exp \left[\frac{2\pi i U}{\hbar \omega_0} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{i}{\hbar} (U + 4E_a)(t_1 + t_2) \right] \right\} e^{-(t_1^2 + t_2^2)A} (e^{2B(t)t_1 t_2} - 1), \quad (37)$$

$$A = \frac{1}{2} \omega_0^2 \gamma_0 \operatorname{cth} \left(\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \beta \right), \quad B(t) = \frac{1}{2} \omega_0^2 \sum_q \frac{|\Delta(q)|^2 \cos \omega_q t}{\operatorname{sh} \left(\frac{1}{2} \hbar \Delta_0 \beta \right)}. \quad (38)$$

Заметим, что $A \geq B$ при любых действительных t . Проводя интегрирование по t_1 и t_2 , имеем

$$W = \frac{4\pi I^4}{\hbar^4} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\{ \exp \left[-\frac{(U + 4E_a)^2}{2(A + B(t))} \right] - \exp \left[-\frac{(U + 4E_a)^2}{2A} \right] - \cos \frac{2\pi U}{\hbar \omega_0} \times \right. \\ \left. \times \left(\exp \left[-\frac{(U + 4E_a)^2}{2(A - B(t))} \right] - \exp \left[-\frac{(U + 4E_a)^2}{2A} \right] \right) \right\} [A^2 - B^2(t)]^{-1/2}. \quad (39)$$

Из (39) видно, что в интеграле по t основной вклад дает точка $t = 0$ (вклады вблизи $t = 2\pi n/\omega_0 \neq 0$ не учитываем ввиду их малости вследствие дисперсий фононов). Разлагая показатели экспонент в ряд по t с точностью до квадратичных членов и учитывая из четырех слагаемых в фигурных скобках в (39) лишь первое (оно обладает наименьшей экспоненциальной малостью), получаем

$$W = \frac{8\pi^{3/2} I^4}{\hbar^4 \omega_0 (U + 4E_a)} \left[\frac{A + B(0)}{(A - B(0)) B(0)} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{(U + 4E_a)^2}{2(A + B(0))} \right]. \quad (40)$$

В наиболее интересном здесь случае высоких температур $\beta \hbar \omega_0 \gg 1$, когда прыжки принимают чисто классический характер, имеем

$$W \approx \frac{16\pi^{3/2} I^4 \sqrt{kT}}{\hbar^4 \omega_0^2 \sqrt{E_a} (U + 4E_a)} \exp \left[-\frac{(U + 4E_a)^2}{16E_a kT} \right]. \quad (41)$$

Отсюда дрейфовая прыжковая подвижность биполяронов имеет вид

$$\mu = \frac{ea^2}{\hbar^2} \frac{64\pi^{3/2} I^4}{(\hbar \omega_0)^2 \sqrt{kT E_a} \sqrt{kT E_a} (U + 4E_a)} \exp \left[-\frac{(U + 4E_a)^2}{16E_a kT} \right]. \quad (42)$$

Соотношение (42) является основным результатом этого раздела. Из него видно, что подвижность биполяронов очень мала по сравнению с подвижностью монополяронов, для которых $\mu \sim \exp(-E_a/kT)$. Тот факт, что вероятность биполярного прыжка имеет экспоненциальную малость $\exp[-(U+4E_a)^2/16E_a kT]$, был отмечен в [8] исходя из представлений о двухузельных адиабатических термов. Столь малая подвижность для биполяронов приводит к тому, что, хотя число монополяронов экспоненциально по сравнению с числом биполяронов (их отношение $\sim \exp \times \times (-U/2kT)$), вклад в электропроводность от биполярных прыжков мал по сравнению со вкладом от однополяронных перескоков, $\sigma_2/\sigma_1 \sim \exp \times \times [-U^2/16E_a kT]$, где σ_1 и σ_2 — поляронная и биполяронная проводимости соответственно. Отметим, что в условиях отсутствия кулоновского расталкивания на узле ($U_c=0$) энергия связи биполярона $U=2E_p \approx 4E_a$, а следовательно, подвижность биполяронов $\mu \sim \exp(-4E_a/kT)$, что имеет простой физический смысл, так как в данном случае можно говорить о прыжке полярона с удвоенной константой связи с фононами ($\gamma_0 \rightarrow 2\gamma_0$, $E_a \rightarrow 4E_a$).

Таким образом, в высокотемпературной области классических перескоков основной вклад в статическую электропроводность дают монополяроны. По мере роста частоты поля доминирующая роль постепенно переходит к биполяронам, так что в формировании поглощения света в расчет можно принимать только биполяронные переходы [5]. Именно такой переход от поляронных к биполяронным свойствам при изучении статической и высокочастотной электропроводности наблюдался в ниобате лития [12]. Монополяронный характер должна проявлять и высокотемпературная холловская подвижность. В связи с этим особый интерес должна представлять статическая биполяронная проводимость при низких температурах, так как по мере понижения температуры монополяронные состояния вымораживаются и в области переноса посредством туннельного просачивания она должна доминировать.

Л и т е р а т у р а

- [1] Ланг И. Г., Фирсов Ю. А. ЖЭТФ, 1962, т. 43, № 5, с. 1843—1860.
- [2] Bari R. A. Phys. Rev. B, 1974, vol. 9, N 10, p. 4329—4339.
- [3] Hinkelmann H., Reik H. G. Sol. St. Commun., 1975, vol. 16, N 5, p. 567—569.
- [4] Капустин В. А. ФТТ, 1977, т. 19, № 7, с. 2064—2069.
- [5] Брыксин В. В., Волошин В. С., Райцев А. В. ФТТ, 1983, т. 25, № 5, с. 1427—1434.
- [6] Anderson P. W. Phys. Rev. Lett., 1975, vol. 34, N 15, p. 953—955.
- [7] Street R. A., Mott N. F. Phys. Rev. Lett., 1975, vol. 35, N 19, p. 1293—1296.
- [8] Брыксин В. В., Волошин В. С. ФТТ, 1984, т. 26, № 8, с. 2357—2365.
- [9] Александров А. С., Кабанов В. В. ФТТ, 1986, т. 28, № 4, с. 1129—1135.
- [10] Kaufman J. H., Colaneri N., Scott J. C., Street G. B. Phys. Rev. Lett., 1984, vol. 53, N 10, p. 1005—1008.
- [11] Howard L. A., Beekel C. L., Emin D. Phys. Rev. B, 1987, vol. 35, N 17, p. 9265—9270.
- [12] Koppitz J., Schirmer O. F., Kuznetsov A. I., Preprint, 1987.
- [13] Chakraverty B. K., Sienko H. J., Bonnerot J. Phys. Rev. B, 1978, vol. 17, N 10, p. 3781—3789.
- [14] Lakkis S., Schlenker C., Chakraverty B. K., Buder R. Phys. Rev. B, 1976, vol. 14, N 4, p. 1429—1440.
- [15] Мойжес Б. И., Супрун С. Г. ФТТ, 1984, т. 26, № 3, с. 896—897.
- [16] Schirmer O. F., Salje E., J. Phys. C, 1980, vol. 13, N 36, p. L1067—L1072.

- [17] *Alexandrov A., Ranninger J.* Phys. Rev. B, 1981, vol. 23, N 4, p. 1796—1801; vol. 24, N 3, p. 1164—1169.
- [18] *Chakraverty B. K., Ranninger J.* Phil. Mag. B, 1985, vol. 52, N 3, p. 669—678.
- [19] *Alexandrov A., Ranninger J., Robaszkiewicz S.* Phys. Rev. B, 1986, vol. 33, N 7, p. 4526—4534.
- [20] *Александров А. С., Самарченко Д. А., Травень С. В.* ЖЭТФ, 1987, т. 93, № 3, с. 1007—1019.
- [21] Сб. Поляроны / Под ред. Ю. А. Фирсова. М.: Наука, 1975.
- [22] *Böttger H., Bryksin V. V.* Hopping conduction in solids. Berlin, Akademie—Verlag, 1985.
- [23] *Капустин В. А.* ФТТ, 1974, т. 16, № 3, с. 804—810; 1975, т. 17, № 5, с. 1372—1379.
- [24] *Кугель К. И., Хомский Д. И.* ЖЭТФ, 1980, т. 79, № 3, с. 987—1005.
- [25] *Holstein T.* Ann. Phys., 1959, vol. 8, N 2, p. 343—351.

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

Поступило в Редакцию
18 января 1988 г.