*Письма в ЖЭТФ, том 18, вып. 2, стр. 138 – 141 20 июля 1973 г.*

# ПОДВИЖНОСТЬ ПОЛЯРОНА С СИЛЬНОЙ СВЯЗЬЮ

*Г. Е. Воловик, В. И. Мельников, В. М. Эдельштейн*

Давно известно, что сильное взаимодействие электрона с фононами в полярном кристалле приводит к понижению энергии [1] и изменению массы [2]. В настоящей статье вычислена подвижность полярона, определяемая его взаимодействием с тепловыми оптическими фононами.

Выделение гамильтониана взаимодействия отвечающего рассеянию фонона на поляроне в пределе сильной связи можно произвести с помощью преобразования Боголюбова [3] и Тябликова [4] в сочетании с преобразованием Ли, Лоу и Пайнса [5], описывающим переход от системы центра тяжести в лабораторную систему отсчета. При этом в главном порядке по обратной константе связи $\epsilon = 1/a\sqrt{2} << 1$ основную роль в рассеянии играют двухфононные процессы. В системе единиц $\hbar = m = e^2(\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1}) = 1$ искомый гамильтониан имеет вид

$$H = E_0 - \frac{1}{2\overset{*}{M}} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon^2 a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} -$$

$$\frac{\epsilon^2}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} B_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^+)(a_{\mathbf{k}'} + a_{-\mathbf{k}'}^+) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{R}} \quad (1)$$

где $E_0$ – поляронный сдвиг [1], второй член – кинетическая энергия полярона с массой $\overset{*}{M}$ [2], третий член – энергия фононов с частотой $\omega_0 = \epsilon^2$ и последний член описывает фонон-поляронное рассеяние с борновской амплитудой

$$\epsilon^2 B_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{4\pi\epsilon^2}{\Omega k k'} \sum_{n \neq 0} \frac{I_{\mathbf{k}}^{on} I_{\mathbf{k}'}^{no}}{E_n - E_0} \; ; \quad I_{\mathbf{k}}^{mn} = \int d^3r\, \overset{*}{\phi}_m(r)\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \phi_n(\mathbf{r}) \, , \quad (2)$$

где $\phi_n$ и $E_n$ – собственные функции и энергии электрона в поляризационной яме, соответствующей основному состоянию (см. [4]). В этом приближении гамильтониан может быть получен также и методом Олкока [6].

При температурах $T$ меньше энергии фонона $\omega_0 = \epsilon^2$ в силу малости числа тепловых фононов справедливо кинетическое уравнение Больцмана. Так как энергия полярона при рассеянии на фононах без дисперсии не меняется, то для подвижности справедливо выражение

$$\mu = - \frac{e}{3\overset{*}{M}} \sum_{\mathbf{p}} p \frac{\partial f_0}{\partial p} \tau(\mathbf{p}), \quad (3)$$

$$\tau^{-1}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2p^2} e^{-(\omega_0/T)} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} |W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{p}}|^2 (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 \delta \left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2\overset{*}{M}} - \frac{(\mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{k}')^2}{2\overset{*}{M}} \right] 2\pi ,$$

где $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{p}}$ – амплитуда рассеяния фонона на поляроне с импульсом $p$, а $f_0(p)$ – максвелловская функция распределения.

В том случае, когда передача импульса при столкновении мала по сравнению с тепловым импульсом полярона можно считать, что фонон рассеивается на поляроне, движущемся с постоянной скоростью $\mathbf{v} = \mathbf{p}/\overset{*}{M}$. Амплитуда этого процесса связана с борновской амплитудой $\epsilon^2 B_{-\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ уравнением

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\mathbf{p}} = -\epsilon^2 B_{-\mathbf{k},\mathbf{k}'} + \epsilon^2 \sum_{\mathbf{k}''} B_{-\mathbf{k},\mathbf{k}''} \frac{1}{\mathbf{k}''\mathbf{v} - \mathbf{k}'\mathbf{v} + i\delta} W_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'}^{\mathbf{p}} . \quad (4)$$

Существенно, что из-за большой массы полярона $\overset{*}{M} \sim \epsilon^{-4} m$ интегральный член в (4) содержит большой параметр $\epsilon^2/v >> 1$. Переходя в этой формуле к фурье-образу по переменной $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$, получим

$$W^{\mathbf{p}}(\mathbf{r};\mathbf{k}') = -\epsilon^2 B(\mathbf{r};\mathbf{k}') - i\frac{\epsilon^2}{v} B\left(\mathbf{r};\mathbf{k}' - i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right) \int_z^\infty W^{\mathbf{p}}(\vec{\rho}, z'; \mathbf{k}')\, dz' ,$$

где $\mathbf{r} = (\vec{\rho}, z)$; координата $z$ направлена вдоль $\mathbf{v}$, а градиент в функции $B$ не действует на аргумент $\mathbf{r}$ этой функции.

Удобно ввести новую функцию $\tilde{g}$

$$-i \int_z^{\infty} W^p(\vec{\rho}, z'; \mathbf{k}') dz' = v[1 - \tilde{g}(\mathbf{r}; \mathbf{k}')],$$

удовлетворяющую однородному уравнению

$$-i \frac{\partial}{\partial z} \tilde{g}(\mathbf{r}; \mathbf{k}') = \frac{\epsilon^2}{v} B\left(\mathbf{r}; \mathbf{k}' - i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right) \tilde{g}(\mathbf{r}; \mathbf{k}'); \quad \tilde{g}(\vec{\rho}, +\infty; \mathbf{k}') = 1.$$

При этом

$$\tau^{-1}(p) = \frac{v}{2p^2} e^{-(\omega_0/T)} \sum_{\mathbf{k}'} \int d^2\rho \left| \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} \tilde{g}(\vec{\rho}, -\infty; \mathbf{k}') \right|^2. \tag{5}$$

Как будет видно, основной вклад в $\tau(p)$ дают импульсы $k' \sim (\epsilon^2/v)^{1/5} >> 1$. Поэтому естественно искать $\tilde{g}$ в квазиклассическом виде

$$\tilde{g} = a(\mathbf{r}; \mathbf{k}') \exp\{ i k' \chi(\mathbf{r}; \mathbf{k}') \}. \tag{6}$$

В этой области импульсов

$$B\left(\mathbf{r}; \mathbf{k}' - i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right) \approx \frac{8\pi \phi_0^2(r)}{\left(k' - i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right)^4} + 16\pi i \frac{\partial \phi_0^2(r)}{\partial \mathbf{r}} \frac{\left(\mathbf{k}' - i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right)}{\left(\mathbf{k}' - i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right)^6}.$$

Функции $a$ и $\chi$ из (6) зависят от $k'$ и $v/\epsilon^2$ лишь посредством комбинации $\xi = 8\pi\epsilon^2 / v(k')^5$:

$$\frac{\partial \chi}{\partial z} (\mathbf{n} + \vec{\nabla} \chi)^4 = \xi\, \phi_0^2(r), \tag{7}$$

$$\frac{\partial \ln a}{\partial z} = (\vec{\eta}\, \vec{\nabla}) \ln a + \frac{1}{2} \operatorname{div} \vec{\eta},$$

где

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}'}{|k'|}, \quad \vec{\eta} = -4\phi_0^2(r)\, \xi \frac{\mathbf{n} + \vec{\nabla}\chi}{(\mathbf{n} + \vec{\nabla}\chi)^6}.$$

Переходя в (5) к интегрированию по $\xi$ и углам, получим выражение для подвижности

$$\mu = \frac{\gamma}{m\omega_0 a^2} \frac{T}{\omega_0} e^{\omega_0/T}, \tag{8}$$

где числовой коэффициент $\gamma \sim 1$ дается формулой

$$\gamma^{-1} = \frac{1}{25\pi^2} \int do \frac{d\xi}{\xi^2} d^2\rho\, a^2_{\xi, \mathbf{n}}(\vec{\rho}, -\infty) \left[ \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} \chi_{\xi, \mathbf{n}}(\vec{\rho}, -\infty) \right]^2, \tag{9}$$

Из уравнений (7) с соответствующими граничными условиями видно, что $a_{\xi, n}(\vec{\rho}, -\infty) = 1$ и интеграл по $\xi$ сходится на верхнем и нижнем пределах. Отсюда следует, что эффективные $\xi$ порядка единицы, что подтверждает приведенную выше оценку существенных $k'$. Требование того, чтобы тепловой импульс полярона значительно превосходил $k'$ налагает на температуру условие $\epsilon^{10/3} << T$. Таким образом, температурный интервал, в котором справедлива формула (8), в размерных единицах

$$\frac{\omega^{o}}{a^{4/3}} << T << \omega_{o} .$$

Более детальное рассмотрение полярон-фононного взаимодействия будет опубликовано позднее.

Мы признательны С.В.Иорданскому и Э.И.Рашба за интерес к работе.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
7 июня 1973 г.

Литература

[1] С.И.Пекар. ЖЭТФ, 16, 335, 341, 1946.

[2] Л.Д.Ландау, С.И.Пекар. ЖЭТФ, 18, 419, 1948.

[3] Н.Н.Боголюбов. Укр. мат. журн., 2, 3, 1950.

[4] С.В.Тябликов. ЖЭТФ, 21, 377, 1951.

[5] T.D.Lee, F.F.Low, D.Pines. Phys. Rev., 90, 297, 1953.

[6] G.R.Allcock in "Polarons and Excitons" ed. by C.G.Kuper and G.D.Whitfield, p.45, 1963.