Письма в ЖЭТФ, том 10, стр. 95 – 98 *20 июля 1969г.*

СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ПОЛЯРОНА И ФОНОНА

В.И.Мельников, Э.И.Рашба

В настоящее время наряду с основным состоянием полярона известны возбужденные состояния, соответствующие возбуждению электрона в поляризационной яме [1,2]. Что касается фононных возбуждений системы, то предполагалось, что их спектр начинается с фононной колебательной частоты ω.

Ниже показано, что в действительности в условиях адиабатической связи низшими возбужденными состояниями полярона являются состояния полярон-фононных комплексов, соответствующих связанным состояниям этих двух квазичастиц; естественно, что энергия возбуждения комплексов $\Omega < \omega$. Оказывается, что существуют комплексы со всеми значениями вращательного момента, причем относительная энергия связи $(\omega - \Omega)/\omega$ не зависит от величины фрелиховской константы связи a (при $a >> 1$). Оценка показывает, что для низших значений момента $(\omega-\Omega)/\omega \approx 0,10 \div 0,15$, что должно быть вполне доступно для экспериментального наблюдения. Мы надеемся, что эти комплексы смогут быть наблюдены в экспериментах по поглощению и рассеянию света свободными поляронами, по структуре собственного поглощения вблизи его края и т.д.

Особенность задачи состоит в том, что главный член в энергии полярона согласно Пекару [3] близок к $0,1a^2\omega >> \omega$, а энергия связи комплекса $(\omega - \Omega)$, очевидно, меньше ω. Поэтому нужно вычислять $(\omega - \Omega)$ непосредственно, а не как разность больших энергий. Решение этой задачи облегчается тем, что при вычислении колебательных частот ионы можно описывать классически. При этом образование комплексов проявится как появление локальных колебаний вблизи полярона.

Если ввести потенциал ϕ поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ как $\nabla\phi = 4\pi\mathbf{P}$, то лагранжиан полярона

$$L = \frac{1}{2\mu}\int|\nabla\psi|^2 d\mathbf{r} - e\int|\psi|^2\phi\, d\mathbf{r} + \frac{1}{8\pi c}\int\left[\frac{1}{\omega^2}\left(\frac{\partial}{\partial t}\nabla\phi\right)^2 - (\nabla\phi)^2\right]d\mathbf{r}, \quad (1)$$

где $c = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_o^{-1}$, $\hbar = 1$. Из (1) следуют уравнения движения

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2\mu}\Delta + e\phi\right)\psi, \quad (2а)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega^2\right)\Delta\phi = 4\pi e c\omega^2|\psi|^2 \quad (2б)$$

Для полярона, движущегося со скоростью $\mathbf{v}$, полагаем

$$\psi = \{\psi_o(\mathbf{R})\exp(-iE_o t) + \tilde{\psi}(\mathbf{R},t)\}\exp(i\mu\mathbf{v}\mathbf{r}), \quad \phi = \phi_o(\mathbf{R}) + \tilde{\phi}(\mathbf{R},t), \quad (3)$$

где $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{v}t$, а $\tilde{\psi}$ и $\tilde{\phi}$ малы. В нулевом приближении

$$H_o(\mathbf{R},\mathbf{v})\psi_o(\mathbf{R}) = E_o\psi_o(\mathbf{R}), \quad H_o(\mathbf{R},\mathbf{v}) = -\frac{1}{2\mu}\Delta_{\mathbf{R}} + e\phi_o(\mathbf{R}) + \frac{1}{2}\mu v^2 \quad (4а)$$

$$[\omega^2 + (\mathbf{v}\nabla_R)^2]\Delta_{\mathbf{R}}\phi_o(\mathbf{R}) = 4\pi e c\omega^2\psi_o^2(\mathbf{R}). \quad (4б)$$

Уравнение (4а) определяет волновую функцию ψ_o и энергию E_o основного состояния движущегося полярона. Выберем ψ_o вещественным, а другие собственные функции и собственные значения H_o обозначим ψ_n и $E_n (n > o)$.

Выпишем теперь уравнения первого приближения, определяющие колебания ионов при наличии движущегося полярона:

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - H_o(\mathbf{R},\mathbf{v})\right]\tilde{\psi}(\mathbf{R},t) = e\psi_o(\mathbf{R})\tilde{\phi}(\mathbf{R},t)\exp(-iE_o t), \quad (5а)$$

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{R}}\right)^2 + \omega^2\right]\Delta_{\mathbf{R}}\tilde{\phi}(\mathbf{R},t) = 4\pi e c\omega^2\psi_o(\mathbf{R})\{\tilde{\psi}(\mathbf{R},t)\exp(iE_o t) + \text{кс}\}. \quad (5б)$$

Полагая $\tilde{\phi}(\mathbf{R},t) = \tilde{\phi}(\mathbf{R})\exp(-i\Omega t) + \text{кс}$, решая (5а) в первом порядке возмущений и подставляя результат в (5б), с учетом $|E_o| >> \omega$ получим окончательно:

$$[\omega^2 - (\Omega - i\mathbf{v}\nabla_{\mathbf{R}})^2]\Delta_{\mathbf{R}}\tilde{\phi}(\mathbf{R}) =$$

$$= -8\pi c e^2\omega^2\sum_{n>o}\frac{\psi_o(\mathbf{R})\psi_n(\mathbf{R})\int\psi_n^*(\mathbf{R}_1)\psi_o(\mathbf{R}_1)\tilde{\phi}(\mathbf{R}_1)d\mathbf{R}_1}{E_n - E_o}. \quad (6)$$

Для приближенного определения Ω удобно перейти от (6) к эквивалентному вариационному принципу. Ограничимся случаем $v=o$ и перейдем к безразмерным величинам, выбрав в качестве единиц энергии и длины $\mu e^4c^2/\hbar^2$ и $\hbar^2/\mu e^2c$ – характерные масштабы в теории адиабатической связи. Тогда

$$\frac{\omega^2-\Omega^2}{8\pi\omega^2} = \max_{\tilde\phi}\{\sum_{n>o}\frac{|\int\psi_n^*(\mathbf{R})\psi_o(\mathbf{R})\tilde\phi(\mathbf{R})d\mathbf{R}|^2}{E_n-E_o}/\int|\nabla\tilde\phi|^2 d\mathbf{R}\}. \qquad (7)$$

Экстремум правой части (7) непосредственно не может быть найден, так как это требовало бы знания всех ψ_n и E_n. Произведем замену

$$\psi_o\tilde\phi=(H_o-E_o)\psi_o f; \qquad (8)$$

она допустима, так как $\tilde\phi$ согласно (6) определено с точностью до аддитивной постоянной. Тогда после простых преобразований с учетом (4а) формула (7) преобразуется к виду

$$\frac{\omega^2-\Omega^2}{8\pi\omega^2} = \max_f\{\int d\mathbf{R}\psi_o^2(\nabla f)^2/\int d\mathbf{R}[\nabla(\Delta f+2\nabla f\nabla\ln\psi_o)]\}. \qquad (9)$$

В правую часть (9) входит единственная величина, характеризующая полярон – электронная волновая функция основного состояния. Она может быть найдена вариационным методом [3] практически с произвольной точностью. После этого функция f и частота Ω могут быть определены из (9).

Поскольку из правой части (9) выпали все параметры гамильтониана (μ, ω и c), в пределе адиабатической связи относительные энергии связи комплексов $(\omega-\Omega)/\omega$ имеют универсальные значения.

Ядро в правой части (6) сферически симметрично, поэтому $\tilde\phi$ и будут соответствовать определенным значениям углового момента. Поскольку еще правая часть (9) является положительно определенной, при $\alpha\to\infty$ должны существовать связанные состояния со всеми значениями момента.

Если оценить правую часть (9), пользуясь однопараметрическими аппроксимациями с помощью функций трехмерного осциллятора (1s для ψ_o и 1s и 2p для f), то энергия связи оказывается равной $0{,}13\omega$ и $0{,}11\omega$ соответственно, для s- и p- состояний комплекса. Она должна быть доступна для экспериментального обнаружения; заметим, что близкие энергии связи экситон-фононных комплексов недавно были измерены экспериментально [4].

При слабой связи ($\alpha << 1$) основной вклад в собственно энергетическую часть при энергиях близких к ω вносит бесконечная совокупность диаграмм, представленная на рисунке. Анализ уравнения для вершинной части показывает, что в этом случае связанные состояния отсутствуют. Однако в сильном магнитном поле, когда циклотронная частота $\omega_c \sim \omega$, комплексы возникают. Именно такова природа "магнито-оптической аномалии" [5]. Механизм ее возникновения, обусловленный резонансной поляризуемостью, близок к рассмотренному в [6].

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

Поступила в редакцию
5 июня 1969 г.

Литература

[1]. С.И.Пекар, М.Ф.Дейген. ЖЭТФ, 18, 481, 1948.

[2]. *R.P.Feynman, R.W.Hellwarth, C.K.Iddings, P.M.Platzman. Phys.Rev.*, 127, *1004, 1962.*

[3]. С.И.Пекар. ЖЭТФ, 16, 335, 1946

[4]. *W.Y.Liang, A.D.Yoffe. Phys.Rev.Lett.*, 20, *59, 1958.*

[5]. *E.N.Johnson, D.M.Larsen, Phys.Rev.Lett.*, 16, *655, 1966*; Л.И.Коровин, С.Т.Павлов. ФТТ, 53, 1708, 1967.

[6]. Ш.М.Коган, Р.А.Сурис. ЖЭТФ, 50, 1279. 1966.