ЖЭТФ, 1997, том 112, вып. 1(7), стр. 278–283

МАССА ПОЛЯРОНА БОЛЬШОГО РАДИУСА

А. Э. Мясникова, Э. Н. Мясников

Ростовский педагогический университет
344092, Ростов-на-Дону, Россия

Поступила в редакцию 1 октября 1996 г.

Показано, что работы по определению эффективной массы полярона большого радиуса, начиная с работы Ландау и Пекара, содержат принципиальную ошибку. Поскольку они выполнены в пренебрежении пространственной дисперсией решеточной поляризуемости, максимальная групповая скорость фононов оказывается равной нулю, что означает неспособность фононной «шубы» полярона следовать за его движением. В настоящей работе при учете пространственной дисперсии решеточной поляризуемости получено выражение для эффективной массы полярона, справедливое во всем интервале скоростей, в котором может существовать полярон: от нуля до максимальной групповой скорости фононов. В соответствии с полученным выражением масса полярона зависит не только от частоты фононов, обратной эффективной диэлектрической проницаемости и массы носителя, но и от максимальной групповой скорости фононов, взаимодействующих с носителем, и скорости полярона.

1. ВВЕДЕНИЕ

Движение полярона представляет собой согласованное перемещение волнового пакета носителя заряда и пакета волн решеточной поляризации. Естественно, это возможно, если групповые скорости обоих этих волновых пакетов могут совпадать и ни одна из них не равна нулю. Однако, если использовать приближение, при котором частота волн решеточной поляризации считается не зависящей от их волнового вектора, как это принято в теории поляронов со времен основополагающей работы Ландау и Пекара [1, 2], то в таком случае групповая скорость поляризационных волн оказывается равной нулю, что, в принципе, не позволяет рассматривать в этом приближении движущийся полярон. Если в приближении $\Omega = \mathrm{const}$ рассчитать поляризацию, возбуждаемую в среде движущимся локализованным зарядом, то, как показано ранее [3], можно убедиться, что она не будет локализована, а будет соответствовать излучаемым зарядом реальным поляризационным волнам типа черенковского излучения. Это вполне соответствует теории квантовой бозе-жидкости Ландау [4, 5], в которой движение бозевского вакуума со скоростью выше минимальной фазовой скорости относительно подсистемы, с которой связана система координат, сопровождается спонтанным излучением. Разрушение поляризационной «шубы» полярона в результате превышения им минимальной фазовой скорости фононов, образующих эту «шубу», продемонстрировано в [6] на модели среды с двумя фононными ветвями, взаимодействующими с носителем и имеющими различные минимальные фазовые скорости фононов. В такой среде покоящийся полярон имеет две поляризационные «шубы», образованные фононами двух типов. Если ветвь с большей минимальной фазовой скоростью фононов способна обеспечить локализацию носителя, то при достижении «двухшубным» поляроном меньшей из этих двух скоростей он, как показано в [6], теряет «шубу», образованную более «низкоскоростными» фононами. При этом, хотя носитель остается в автолокализованном состоянии, энергия полярона, его масса, общий поляризационный заряд изменяются. Превышение же поляроном большей минимальной фазовой скорости фононов приводит к делокализации носителя, так как уравнения движения носителя и поляризации не имеют автолокализованных стационарных решений при таких скоростях. Таким образом, полярон может существовать только в ограниченном интервале скоростей, $v < u$, где u — минимальная фазовая скорость фононов, участвующих в локализации носителя (или наибольшая из минимальных фазовых скоростей фононов, если рассматривается среда с несколькими ветвями фононов, способных обеспечивать автолокализацию носителя).

В теории движущегося полярона важнейшим вопросом является вопрос о его эффективной массе. На основании изложенного выше ясно, что правильно рассчитать эффективную массу полярона можно только при учете зависимости частоты поляризационных волн от волнового вектора или пространственной дисперсии решеточной поляризуемости. Формула Ландау и Пекара для эффективной массы полярона [1] была получена без учета этой зависимости, т.е. в предположении, что групповая скорость поляризационных волн равна нулю. В таком случае движение полярона как целого невозможно, но авторы [1] не могли этого заметить, так как они использовали недопустимое разложение полюсной функции $c(\omega) = \mathrm{const}/(\omega^2 - \Omega^2)$ в ряд Тейлора по ω^2/Ω^2 (Ω — частота продольных оптических фононов).

Первая попытка рассмотреть вопрос об эффективной массе полярона при учете пространственной дисперсии решеточной поляризуемости была предпринята Давыдовым и Энольским [7]. Однако использованное приближение позволило им получить формулу для расчета эффективной массы полярона только в случае малых фононной дисперсии (характеризуемой максимальной групповой скоростью фононов u) и скорости полярона v: $u, v \ll a\Omega$ (a — постоянная решетки) или $u, v \ll 25 \cdot 10^4$ см/с [7]. Тем не менее эта теория уже не была внутренне противоречивой, поскольку в ней рассматривалась область скоростей полярона $v < u$.

Ниже путем строгого учета зависимости частоты поляризационных волн от волнового вектора будут получены формулы для вычисления эффективной массы полярона, справедливые для любой величины фононной дисперсии (любого u) и для любой скорости полярона $v < u$.

2. ЭНЕРГИЯ ПОЛЯРОНА ПРИ УЧЕТЕ ФОНОННОЙ ДИСПЕРСИИ И ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ПОЛЯРОНА

Функция Гамильтона системы среда + носитель имеет вид [6, 7]

$$H_0 + H_{pol} + H_{int} = \int d^3\mathbf{r} \left\{ \nabla_\mathbf{r}\psi^2 + \frac{2\pi}{c\Omega^2}\left[\Omega^2 P^2 + \left(\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}\right)^2 - u^2 \mathbf{P}\nabla_r^2 \mathbf{P}\right] - \mathbf{PD}\right\}, \quad (1)$$

$$\mathbf{D} = -e\nabla_\mathbf{r} \int \psi^2(\mathbf{r}, t)\frac{d^3\mathbf{r}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

где $\psi(\mathbf{r}, t)$ — волновая функция носителя, которая предполагается действительной, $\mathbf{P}$ — вектор поляризации, Ω — частота продольных оптических фононов в центре зоны Бриллюэна, c — обратная эффективная диэлектрическая проницаемость: $c = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0$, и u — величина, к которой асимптотически сходятся фазовая и групповая скорости фононов, участвующих в локализации носителя. Рассмотрим изменение собственной энергии поляризации и энергии взаимодействия носителя с поляризационным полем $H_{pol} + H_{int}$ при изменении скорости полярона. При учете уравнения движения для **P** соответствующая часть функции Гамильтона (1) приобретает вид

$$H_{pol} + H_{int} = -\frac{1}{2}\int \mathbf{P}\mathbf{D}d^3\mathbf{r} + \frac{2\pi}{c\Omega^2}\int d^3\mathbf{r}\left[\left(\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}\right)^2 - \mathbf{P}\frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}\right]. \tag{2}$$

Плотность поляризационного заряда может быть выражена через плотность «свободного» заряда в начальный момент времени $\psi^2(r)$ при помощи функции Грина $G(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t)$ [6]:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = ec\Omega^2\int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t)\psi^2(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}',$$

так что вектор поляризации будет иметь вид

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \frac{ec\Omega^2}{4\pi}\nabla_{\mathbf{r}}\int \frac{G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, t)\psi^2(\mathbf{r}_2)d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}. \tag{3}$$

Выберем цилиндрическую систему координат с осью z, параллельной скорости полярона v. Тогда функция Грина $G(r,t)$, полученная в [3], имеет следующий вид:

$$\begin{matrix} G_i(\mathbf{r},t) = \\ i = 1,2 \end{matrix} \begin{cases} \dfrac{\exp\left(-\Omega_i\left[(z-vt)^2/\beta_{1i}^2+r^2\right]^{1/2}/u_i\right)}{4\pi u_i^2\beta_{1i}\left[(z-vt)^2/\beta_{1i}^2+r^2\right]^{1/2}}, & v < u_i, \qquad \beta_{1i}^2 = 1-v^2/u_i^2 \\ \dfrac{\cos\left(\Omega_i\left[(z-vt)^2/\beta_{2i}^2-r^2\right]^{1/2}/u_i\right)}{2\pi u_i^2\beta_{2i}\left[(z-vt)^2/\beta_{2i}^2-r^2\right]^{1/2}}, & v > u_i, \qquad \begin{cases} z-vt<0, \\ r<|z-vt|/\beta_{2i} \end{cases} \\ 0, \quad v > u_i, \quad \begin{cases} |z-vt|<0 \\ r>|z-vt|/\beta_{2i} \end{cases}, & |z-vt|>0, \qquad \beta_{2i}^2 = v^2/u_i^2-1 \end{cases} \tag{4}$$

Подставив (3), а также выражение для $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ через $\psi^2(\mathbf{r}, t)$ в выражение (2) и преобразовав его, можно получить следующую формулу:

$$H_{pol} + H_{int} = \frac{e^2c\Omega^2}{2}\int \frac{d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}_1d^3\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}\left\{\psi^2(\mathbf{r}_2)\psi^2(\mathbf{r})G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, t) + \right.$$
$$\left. + \int d^3\mathbf{r}_3\psi^2(\mathbf{r}_2)\psi^2(\mathbf{r}_3)\left[\frac{\partial}{\partial t}G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, t)\frac{\partial}{\partial t}G(\mathbf{r}-\mathbf{r}_3, t) - G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, t)\frac{\partial^2}{\partial t^2}G(\mathbf{r}-\mathbf{r}_3, t)\right]\right\}. \tag{5}$$

Будем искать эффективную массу полярона вида $m^{**} = 2\left(E(v) - E(0)\right)/v^2$ [7], где E — энергия полярона. Учитывая, что в выражении (5) от скорости полярона v зависит лишь функция Грина $G(\mathbf{r}, t)$, легко получить следующее выражение для m^{**}:

$$m^{**} = \frac{e^2c\Omega^2}{v^2}\int \frac{d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}_1d^3\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}\left\{\psi^2(\mathbf{r}_2)\psi^2(\mathbf{r})\left[G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, v, t) - G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, 0, t)\right] + \right.$$
$$+ \int d^3\mathbf{r}_3\psi^2(\mathbf{r}_2)\psi^2(\mathbf{r}_3)\left[\frac{\partial}{\partial t}G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, v, t)\frac{\partial}{\partial t}G(\mathbf{r}-\mathbf{r}_3, v, t) - \frac{\partial}{\partial t}G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, 0, t) \times \right.$$
$$\left.\left. \times \frac{\partial}{\partial t}G(\mathbf{r}-\mathbf{r}_3, 0, t) - G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, v, t)\frac{\partial^2}{\partial t^2}G(\mathbf{r}-\mathbf{r}_3, v, t) + G(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2, 0, t)\frac{\partial^2}{\partial t^2}G(\mathbf{r}-\mathbf{r}_3, 0, t)\right]\right\}. \tag{6}$$

Видно, что рассчитать численные значения эффективной массы полярона по (6) сложно. Однако легко заметить, что интеграл в (6) является интегралом типа свертки, который, как обычно, упрощается при переходе к фурье-компонентам. Удобнее, однако, перейти к фурье-компонентам уже в выражении (2). Подынтегральные выражения в обоих интегралах в правой части (2) представляют собой произведения двух функций радиус-вектора. Разложив каждую из них в ряд Фурье и затем проведя интегрирование по радиус-вектору, можно преобразовать выражение (2) к виду

$$H_{pol} + H_{int} = \frac{1}{2}\int \mathbf{P}_k \mathbf{D}_k \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} + \frac{4\pi}{c\Omega^2}\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} k_z^2 v^2 P_k^2, \tag{7}$$

где $\mathbf{P}_k$ — фурье-компонента вектора поляризации; учитывается также, что $\mathbf{D}_{-k} = -\mathbf{D}_k$, $\mathbf{P}_{-k} = -\mathbf{P}_k$. Легко видеть, что выражение (3) представляет собой свертку по переменным $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$. Воспользовавшись (3) и свойством фурье-образов сверток, фурье-компоненту вектора поляризации $\mathbf{P}_k$ можно записать в виде произведения фурье-образов функций $\nabla_{\mathbf{r}}(1/|\mathbf{r}|')G(\mathbf{r},t)$ и $\psi^2(\mathbf{r},t)$:

$$\mathbf{P}_k = \frac{ec\Omega^2}{4\pi}\,\frac{4\pi i\mathbf{k}}{k^2+k_z^2}\,\frac{1}{k_z^2(v^2-u^2) - k^2u^2 - \Omega^2}\psi_k^2, \tag{8}$$

где ψ_k^2 — фурье-образ квадрата волновой функции носителя. Подставляя $\mathbf{P}_k$, определяемую выражением (8), и $\mathbf{D}_k$, найденную аналогичным образом, в (7), получим формулу, выражающую зависимость рассматриваемой энергии от скорости движения полярона:

$$\begin{aligned} H_{pol} + H_{int} = \frac{e^2c\Omega^2}{\pi u^2}\int\limits_0^\infty \frac{k\,dk\,dk_z}{k^2+k_z^2}\,\frac{(\psi_k^2)^2}{k_z^2(1-v^2/u^2)+k^2\Omega^2/u^2}\times \\ \times\left(1 - \frac{2k_z^2v^2/u^2}{k_z^2(1-v^2/u^2)+k^2+\Omega^2/u^2}\right). \end{aligned} \tag{9}$$

Выражение для эффективной массы полярона, полученное обычным образом при использовании (9), имеет вид

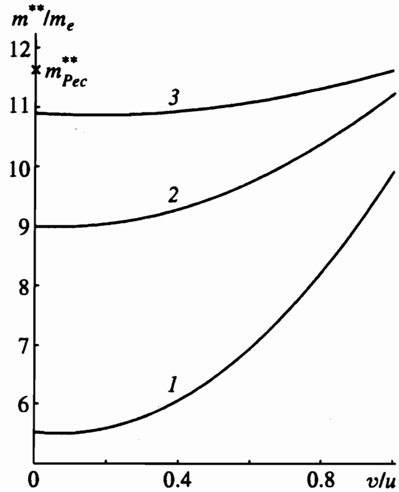
$$\begin{aligned} m^{**} = \frac{2e^2c\Omega^2}{\pi u^2v^2}\int\limits_0^\infty \frac{k\,dk\,dk_z}{k^2+k_z^2}(\psi_k^2)^2\times \\ \times\left\{\frac{1}{k_z^2+k^2+\Omega^2/u^2} - \frac{k_z^2(1-3v^2/u^2)+k^2+\Omega^2/u^2}{\left(k_z^2(1-v^2/u^2)+k^2+\Omega^2/u^2\right)^2}\right\}. \end{aligned} \tag{10}$$

При скоростях полярона малых по сравнению с минимальной фазовой скоростью фононов u ($v \ll u$) выражение для массы полярона имеет более простой вид:

$$m^{**}_{v\ll u} = \frac{2e^2c\Omega^2}{\pi u^4}\int\limits_0^\infty \frac{k\,dk\,k_z^2dk_z}{k^2+k_z^2}\,\frac{(\psi_k^2)^2}{k_z^2+k^2+\Omega^2/u^2}. \tag{11}$$

3. ОБСУЖДЕНИЕ

Как видно из выражения (10), эффективная масса полярона большого радиуса зависит не только от таких параметров среды, как частота оптических фононов Ω, обратная



Зависимость эффективной массы полярона от его скорости, рассчитанная по формуле (10) для набора параметров среды: $\Omega = 360$ см$^{-1}$, $c = 0.27$, $m^*/m_e = 1$. Кривые *1, 2* и *3* соответствуют значениям минимальной фазовой скорости фононов $u_1 = 2 \cdot 10^6$ см/с, $u_2 = = 10^6$ см/с, $u_3 = 5 \cdot 10^5$ см/с. Точкой на оси $v = 0$ с обозначением m^{**}_{Pec} показано значение эффективной массы, полученное по формуле Ландау и Пекара [1, 2] для данных параметров среды

эффективная диэлектрическая проницаемость c и величина m^*/m_e, как это следует из формулы Ландау и Пекара [1], или константа связи (которая определяется теми же параметрами), как, например, в [8, 9], но и от величины минимальной фазовой скорости u оптических фононов, участвующих в локализации носителя, а также и от скорости полярона. Более того, энергия покоящегося полярона оказывается зависящей также от величины минимальной фазовой скорости фононов, что вполне естественно (см.(9)), поскольку, как следует из выражения для функции Грина (4), величина «размазки» распределения поляризационного заряда пропорциональна u/Ω.

На рисунке изображены графики зависимости эффективной массы полярона от его скорости v для различных значений минимальной фазовой скорости фононов u (по оси абсцисс откладывается отношение v/u) в ограниченном интервале скоростей $v < u$, в котором может существовать полярон. Масса полярона рассчитана по формуле (10) для следующих значений параметров среды: $\Omega = 360$ см$^{-1}$, $c = 0.27$, $m^*/m_e = 1$. В качестве волновой функции при расчете использовалась пекаровская волновая функция [1, 2]

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{\alpha^{3/2}}{\sqrt{7\pi}}(1 + \alpha r)\exp(-\alpha r),$$

где значения параметра локализации α получались минимизацией функционала энергии полярона. Кривые *1, 2* и *3* соответствуют значениям минимальной фазовой скорости фононов $u_1 = 2 \cdot 10^6$ см/с, $u_2 = 10^6$ см/с, $u_3 = 5 \cdot 10^5$ см/с. Видно, что эффективная масса полярона растет по мере приближения его скорости к критической, равной минимальной фазовой скорости фононов. Это возрастание, очевидно, связано с деформацией поляризационного облака полярона, как это следует из вида функции Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ (4). Убывание «фононной» части эффективной массы полярона с увеличением минимальной фазовой скорости фононов u легко объясняется ростом способности поляризации самостоятельно перемещаться.

Такой характер зависимости эффективной массы полярона от u и v согласуется с результатами, полученными ранее [7] для области малых дисперсий фононов. Приближенное выражение для m^{**} вида

$$m^{**} \approx m^* + \frac{4e^2\gamma^2}{(9\pi)^2 a^3 \Omega^2}\left(1 + \frac{\gamma^2}{5\pi}\left[\frac{181}{21}\frac{v^2}{a^2\Omega^2} - 18\frac{u^2}{a^2\Omega^2}\right]\right), \quad \gamma = \frac{e^2 c}{a}\frac{m^* a^3}{\hbar^2} \tag{12}$$

было получено в работе [7] на основе замены точного выражения для функции Грина $G(\mathbf{r}, t)$ (4) приближенным в предположении $u, v \ll a\Omega$. Полученные таким путем результаты в области $v, u \ll a\Omega$ (что для типичных ионных кристаллов соответствует $v, u \ll 2.5 \cdot 10^5$ см/с [7], а для параметров, использованных при построении рисунка, это область $v, u \ll 5 \cdot 10^5$ см/с) близки к полученным в настоящей статье: выражение (12) наглядно демонстрирует убывание эффективной массы полярона с увеличением u и рост ее с ростом v. Однако при выходе за пределы области $u \ll a\Omega$ формула (12) может давать отрицательные m^{**} при v близких к 0.

Точкой на оси $v = 0$ с обозначением m^{**}_{Pec} показано значение эффективной массы, полученное по формуле Ландау и Пекара [1, 2] для данных параметров среды. Легко показать, что предел выражения (10) при $u, v \to 0$, который имеет вид

$$\lim_{u\to 0, v<u} m^{**} = \frac{2e^2 c}{\pi\Omega^2}\int \frac{k\,dk\,k_z^2 dk_z}{k^2 + k_z^2}(\psi_k^2)^2, \tag{13}$$

совпадает, как и для любой физической задачи, с пределом $u = 0$, $v \to 0$, который был получен Ландау и Пекаром [1, 2].

Литература

1. Л. Д. Ландау, С. И. Пекар, ЖЭТФ **18**, 419 (1948).
2. С. И. Пекар, *Исследования по электронной теории кристаллов*, Гостехиздат, Москва (1951).
3. Э. Н. Мясников, А. П. Попов, ДАН УССР **А5**, 73 (1980).
4. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **11**, 592 (1941).
5. L. D. Landau, J. of Phys. **11**, 91 (1947).
6. A. E. Myasnikova, Phys. Rev. B **52**, 10457 (1995).
7. A. S. Davydov and V. Z. Enolskii, Phys. Stat. Sol. B **143**, 167 (1987); А. С. Давыдов, В. З. Энольский, ЖЭТФ **94**, В. 2, 177 (1988).
8. R. P. Feynman, Phys. Rev. **97**, 660 (1955).
9. *Поляроны*, сб. под ред. Ю. А. Фирсова, Наука, Москва (1975), с. 20.