ЖЭТФ, 1999, том 115, вып. 1, стр. 180–186

ТЕНЗОР ИНЕРТНОЙ МАССЫ ПОЛЯРОНА В ИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ

А. Э. Мясникова, Э. Н. Мясников*

Ростовский педагогический университет
344082, Ростов-на-Дону, Россия

Поступила в редакцию 21 мая 1998 г.

Вследствие принципиально неправильного подхода к расчету эффективной массы полярона (расчет ее в модели без пространственной дисперсии решеточной поляризуемости) ранее не различались инертная масса полярона и масса как мера кинетической энергии. В настоящей работе получен тензор инертной массы полярона большого радиуса. Он полностью определяется двумя компонентами: продольной, соответствующей случаю, когда действующая на полярон сила направлена параллельно его скорости, и поперечной, соответствующей случаю, когда ускорение перпендикулярно скорости полярона. Компоненты тензора инертной массы полярона квазирелятивистски зависят от его скорости, что обусловлено квазирелятивистским сжатием поляризационного поля в направлении движения, которое является эффектом пространственной дисперсии решеточной поляризуемости. Получена формула, аппроксимирующая зависимость компонент тензора массы полярона от всех параметров: частоты и дисперсии фононов, скорости полярона и эффективной диэлектрической проницаемости.

1. ВВЕДЕНИЕ

Вопрос об эффективной массе автолокализованного носителя заряда (полярона большого радиуса) рассматривается с момента, когда впервые была продемонстрирована возможность его существования [1], и до настоящего времени [2–7]. Этот вопрос представляет интерес как с точки зрения экспериментального наблюдения эффектов, связанных с поляронами, и рассмотрения возможностей поляронной электроники, так и в связи с возможностью реализации биполяронной высокотемпературной сверхпроводимости. Нами были недавно получены выражения для «энергетической» эффективной массы полярона (которая традиционно называется эффективной массой полярона) [6] и продольной инертной массы полярона [7] в модели с пространственной дисперсией решеточной поляризуемости. Как было показано в [8], только в такой модели полярон является подвижным, т. е. не разрушается при движении по кристаллу, если его скорость v не превышает минимальной фазовой скорости u фононов, ответственных за автолокализацию носителя (а автолокализованные состояния с $v > u$ не существуют). Результаты, полученные ранее без учета пространственной дисперсии решеточной поляризуемости [2–4], приводили к выводу, что инертная и энергетическая массы полярона совпадают и не зависят ни от скорости полярона, ни от дисперсии фононов, участвующих в его образовании. Только в работе [5] было получено приближенное выражение для энергетической массы полярона в случае слабой дисперсии фононной ветви (малой величины u).

---

*E-mail: rochal@phys.rnd.runnet.ru

Рассмотрение, проведенное в работах [6, 7], показало, что в отличие от использовавшихся обычно представлений, инертная и энергетическая массы полярона различны при отличной от нуля скорости полярона v (причем различие их тем больше, чем выше значения v и u) и сильно зависят от скорости полярона v и от величины минимальной фазовой скорости u фононов, участвующих в формировании полярона.

Однако не во всех системах при движении полярона в среде действующая на него сила является продольной, как это предполагалось в [7]. Примером обратной ситуации является эффект Холла. Для решения проблем поляронной электроники в общем случае необходимо знать тензор инертной массы полярона. То есть результаты работы [7] должны быть дополнены рассмотрением «поперечной» эффективной массы полярона. Действительно, еще в работе [9], где впервые была продемонстрирована необходимость учета пространственной дисперсии решеточной поляризуемости для описания перемещения облака поляризационного заряда вместе с порождающей его заряженной частицей, было показано, что поляризационное поле движущегося точечного заряда претерпевает квазирелятивистское сжатие и имеет дискообразный вид. При движении полярона такое сжатие ведет к эффектам, подобным релятивистским — изменению энергетической [6] и инертной [7] масс полярона в зависимости от скорости вследствие изменения степени сжатия поляризационного поля в направлении движения. Если при этом на полярон действует непродольная сила, ось диска поворачивается. Этот эффект отличается от случая действия продольной силы, и естественно ожидать, что поперечная инертная масса полярона будет отличаться от продольной. Поэтому настоящая статья посвящена исследованию зависимости от скорости движения полярона его поперечной инертной массы и построению на этой основе тензора инертной массы полярона в изотропной среде.

2. ПОПЕРЕЧНАЯ ИНЕРТНАЯ МАССА ПОЛЯРОНА

Инертную массу полярона можно найти, основываясь на производной по времени от импульса полярона P, в предположении, что скорость является функцией времени: $v = v(t)$. Если выбрать ось z вдоль направления скорости полярона, то компоненту тензора эффективной массы m_{zz} можно получить, полагая, что действующая на полярон сила направлена также вдоль оси z, тогда

$$m_{zz}^{**} = \frac{dP}{dt}\left(\frac{dv}{dt}\right)^{-1}. \qquad (1)$$

Выражение для этой (продольной) компоненты тензора инертной массы полярона было получено в [7]. В локальной системе координат, которая в каждый момент времени связана с мгновенными направлениями скорости и ускорения, тензор инертной массы полярона всегда диагонален. Его компоненты $m_{xx} = m_{yy}$ (чисто поперечную инертную массу) можно рассчитать, полагая силу направленной по оси x (или y) при оси z, направленной вдоль скорости полярона.

Как указывалось в [7], полный импульс полярона может быть представлен в виде суммы среднего значения импульса носителя заряда, которое может считаться равным m^*v, где m^* — эффективная масса носителя заряда в кристалле, и среднего импульса фононов, участвующих в формировании полярона. Последний в соответствии с [7] может быть выражен как

$$\mathbf{p}_{ph} = \int \hbar\mathbf{k} \left[\frac{\Omega(k)\beta}{2\hbar}\mathbf{P}_k\mathbf{P}_{-k} + \frac{1}{2\hbar\Omega(k)\beta}\mathbf{T}_k\mathbf{T}_{-k} + \frac{i}{2\hbar}\mathbf{P}_k\mathbf{T}_{-k} - \frac{i}{2\hbar}\mathbf{P}_{-k}\mathbf{T}_k \right] \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (2)$$

где $\mathbf{P}_k$ — фурье-компонента вектора поляризации, $\mathbf{T}_k = \beta\dot{\mathbf{P}}_k$, $\beta = 4\pi\varepsilon^*/\Omega^2$, Ω — частота продольных оптических колебаний в центре зоны Бриллюэна, $\Omega(k)$ — закон их дисперсии, $1/\varepsilon^* = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0$ — обратная эффективная диэлектрическая проницаемость [2].

Будем считать, что сила, действующая на полярон, направлена перпендикулярно его скорости и такова, что радиус кривизны траектории полярона много больше радиуса полярона, так что на участке траектории порядка размера полярона ее можно заменить прямой. Тогда

$$\mathbf{T}_k = i(\mathbf{kv})\beta\mathbf{P}_k.$$

Учитывая также, что $\mathbf{P}_{-k} = -\mathbf{P}_k$, средний импульс фононов можно записать в виде

$$\mathbf{p}_{ph} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{k}\beta\Omega(k)}{2} P_k^2 \left[-1 - 2\frac{(\mathbf{kv})}{\Omega(k)} - \left(\frac{(\mathbf{kv})}{\Omega(k)} \right)^2 \right]. \quad (3)$$

Фурье-компонента вектора поляризации, создаваемой носителем, движущимся по участку прямой со скоростью v, меньшей минимальной фазовой скорости u фононов, участвующих в формировании полярона (только в этом случае волновая функция носителя $\psi(\mathbf{r}, t)$ будет локализована в пространстве), имеет вид [7]

$$\mathbf{P}_k = \frac{e}{\varepsilon^*}\Omega^2 \frac{i\mathbf{k}}{|k|^2} \frac{1}{(\mathbf{kv})^2 + \Omega^2(k)} \psi_k^2, \quad (4)$$

где ψ_k^2 — фурье-компонента квадрата волновой функции носителя заряда в поляроне. Волновая функция носителя заряда $\psi(\mathbf{r}, t)$ в поляроне может быть получена путем минимизации функционала энергии носителя, в котором плотность поляризационного заряда $\rho(\mathbf{r}, t)$ выражена через $\psi(\mathbf{r}, t)$ в виде [8]

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{\varepsilon^*}\Omega^2 \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t)\psi^2(\mathbf{r}')d\mathbf{r}', \quad (5)$$

где $G(\mathbf{r}, t)$ — функция Грина уравнения движения для плотности поляризационного заряда в поляроне. Как видно из (5), физический смысл функции $G(\mathbf{r}, t)$ — плотность поляризационного заряда, порождаемого точечной заряженной частицей, движущейся со скоростью v, именно так она и была получена в [9]. Для закона дисперсии фононной ветви вида

$$\Omega^2(k) = \Omega^2 + u^2k^2$$

в цилиндрической системе координат, ось z которой направлена вдоль скорости частицы, функция $G(\mathbf{r},t)$ имеет следующий вид [9]:

$$G(\mathbf{r},t)=\begin{cases}\dfrac{\exp\left\{-\Omega\left[(z-vt)^2/\beta_1^2+r^2\right]^{1/2}/u\right\}}{4\pi u^2\beta_1\left[(z-vt)^2/\beta_1^2+r^2\right]^{1/2}}, & v<u, \quad \beta_1^2=1-v^2/u^2,\\[2ex] \dfrac{\cos\left\{\Omega\left[(z-vt)^2/\beta_2^2-r^2\right]^{1/2}/u\right\}}{2\pi u^2\beta_2\left[(z-vt)^2/\beta_2^2-r^2\right]^{1/2}}, & v>u, \quad \begin{matrix}z-vt<0,\\ r<|z-vt|/\beta_2,\end{matrix}\\[2ex] 0, \quad v>u, \quad \begin{matrix}z-vt<0,\\ r>|z-vt|/\beta_2,\end{matrix} & z-vt>0, \quad \beta_2^2=v^2/u^2-1.\end{cases} \tag{6}$$

Физический смысл величины u — минимальная фазовая скорость фононов, участвующих в формировании полярона. Как видно из выражения (6), только при $v<u$ поляризационный заряд, порождаемый движущейся точечной заряженной частицей, является локализованным и характерный размер области локализации вдоль направления движения равен $(\sqrt{u^2-v^2})/\Omega$, а в перпендикулярном скорости направлении — u/Ω. Типичные значения величины u/Ω много меньше радиуса полярона в отсутствие пространственной дисперсии (так, для $\Omega=100$ см$^{-1}$ и $u=2\cdot10^5$ см·с$^{-1}$ значение $u/\Omega<1$ Å), т. е. «размазанность» волновой функции носителя в поляроне вследствие пространственной дисперсии много меньше, чем «размазанность», обусловленная волновыми свойствами носителя. Поэтому для упрощения расчета массы полярона мы сочли возможным пренебречь изменением волновой функции носителя в поляроне вследствие пространственной дисперсии, учитывая только влияние этого фактора на поляризационный заряд, и использовать в (4) фурье-образ пекаровской волновой функции, приведенный в [7]. После подстановки выражения (4) в (3) и дифференцирования $\mathbf{p}_{ph}$ по времени получим

$$\frac{d\mathbf{p}_{ph}}{dt}=\frac{e^2\Omega^4\beta}{\varepsilon^{*2}(2\pi)^3}\int\frac{\mathbf{k}d\mathbf{k}}{|k|^2}\frac{\Omega(k)(\psi_k^2)^2}{\left[\Omega^2(k)-(\mathbf{kv})^2\right]^3}\frac{d(\mathbf{kv})}{dt}\times$$
$$\times\left[(\mathbf{kv})\left(3+\frac{(\mathbf{kv})^2}{\Omega^2(k)}\right)+\Omega(k)\left(1+3\frac{(\mathbf{kv})^2}{\Omega^2(k)}\right)\right]. \tag{7}$$

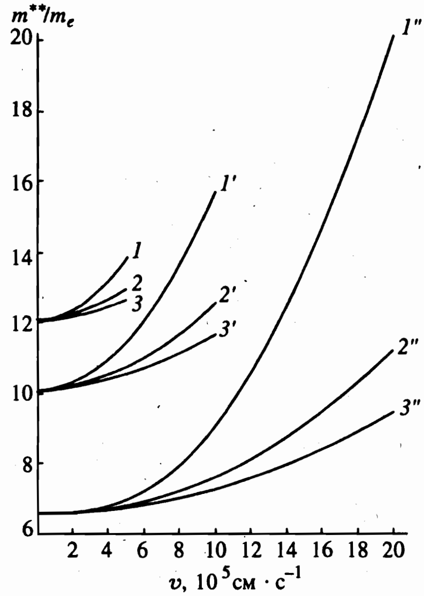
В соответствии со сказанным выше выберем систему координат таким образом, чтобы ось z была направлена вдоль скорости полярона, а ось x — вдоль действующей на него силы. Тогда

$$(\mathbf{kv})=k_zv, \qquad \frac{d(\mathbf{kv})}{dt}=k_xv\frac{ds}{dt}, \tag{8}$$

где ds/dt — производная единичного вектора направления скорости. В соответствии с (1) «поперечная» эффективная масса может быть получена следующим образом:

$$m_{xx}=\frac{dP}{dt}\left(v\frac{ds}{dt}\right)^{-1}. \tag{9}$$

Подставляя в (9) выражение (7) для $d\mathbf{p}_{ph}/dt$ с учетом (8) и принимая во внимание, что вследствие нечетности первого слагаемого в выражении (7) по k_z оно исчезает при



Зависимость продольной инертной массы полярона m^{**}_{zz} (кривые *1, 1′, 1″*), энергетической массы полярона m^{**}_{en} (кривые *2, 2′, 2″*) и поперечной инертной массы полярона $m^{**}_{xx} = m^{**}_{yy}$ (кривые *3, 3′, 3″*) от скорости полярона для трех значений минимальной фазовой скорости u фононов, участвующих в формировании полярона. Кривые *1, 2, 3* соответствуют $u = 5 \cdot 10^5$ см·с$^{-1}$, кривые *1′, 2′, 3′* — $u = 10^6$ см·с$^{-1}$, кривые *1″, 2″, 3″* — $u = 2 \cdot 10^6$ см·с$^{-1}$; остальные параметры: $1/\varepsilon^* = 0.27$, $\Omega = 6.78 \cdot 10^{13}$ с$^{-1}$, $m^* = m_e$

интегрировании, получаем для поперечной инертной массы полярона следующее выражение:

$$m^{**}_{xx} = m^* + \frac{4e^2\Omega^2}{\varepsilon^*\pi^2 u^4}\int\limits_0^\infty \frac{k_x^2 dk_x dk_y dk_z}{k_x^2+k_y^2+k_z^2}\,\frac{k_z^2(1+3v^2/u^2)+k_x^2+k_y^2+\Omega^2/u^2}{\left(k_z^2(1-v^2/u^2)+k_x^2+k_y^2+\Omega^2/u^2\right)^3}(\psi_k^2)^2, \qquad (10)$$

где закон дисперсии фононной ветви взят в виде $\Omega^2(k) = \Omega^2 + u^2k^2$. Полученное в [7] выражение для продольной инертной массы полярона имеет несколько отличный от (10) вид:

$$m^{**}_{zz} = m^* + \frac{4e^2\Omega^2}{\varepsilon^*\pi^2 u^4}\int\limits_0^\infty \frac{dk_x dk_y k_z^2 dk_z}{k_x^2+k_y^2+k_z^2}\,\frac{k_z^2(1+3v^2/u^2)+k_x^2+k_y^2+\Omega^2/u^2}{\left(k_z^2(1-v^2/u^2)+k_x^2+k_y^2+\Omega^2/u^2\right)^3}(\psi_k^2)^2. \qquad (11)$$

Как указывалось, компоненты $m_{xx} = m_{yy}$ и m_{zz} являются единственными отличными от нуля компонентами тензора эффективной инертной массы полярона в локальной системе координат, связанной с мгновенными направлениями скорости и ускорения, так что выражения (10), (11) полностью определяют тензор эффективной инертной массы полярона.

3. ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке изображена зависимость продольной инертной массы полярона m^{**}_{zz} (кривые *1, 1′, 1″*), энергетической массы полярона m^{**}_{en} [6] (кривые *2, 2′, 2″*) и поперечной инертной массы полярона $m^{**}_{xx} = m^{**}_{yy}$ (кривые *3, 3′, 3″*) от скорости полярона для трех значений минимальной фазовой скорости u фононов, участвующих в формировании полярона. Кривые *1, 2, 3* соответствуют $u = 5 \cdot 10^5$ см·с$^{-1}$, кривые *1′, 2′, 3′* — $u = 10^6$ см·с$^{-1}$, кривые *1″, 2″, 3″* — $u = 2 \cdot 10^6$ см·с$^{-1}$. Остальные параметры среды в случае, изображенном на рисунке, имеют значения $1/\varepsilon^* = 0.27$, $\Omega = 6.78 \cdot 10^{13}$ с$^{-1}$, $m^* = m_e$. Как видно из рисунка, продольная инертная масса растет со скоростью полярона гораздо быстрее энергетической и поперечной инертной масс, как это имеет место и в релятивистском случае. Поперечная инертная масса почти совпадает с энергетической массой, однако они, в отличие от релятивистского полного совпадения, не равны. Еще одним отличием массы полярона от массы релятивистской частицы является рост массы полярона при $v \to u$ не до бесконечности, а до конечного, зависящего от u значения.

Характер особенностей поведения продольной и поперечной инертной, а также энергетической масс полярона легко понять, рассматривая вид (6) функции Грина $G(\mathbf{r}, t)$ уравнения движения для плотности поляризационного заряда в поляроне. Как уже упоминалось, функция $G(\mathbf{r}, t)$ представляет собой плотность поляризационного заряда, порождаемого точечной заряженной частицей, движущейся со скоростью v. При $v < u$ этот поляризационный заряд, как следует из (6), локализован в области, размер которой вдоль направления движения порядка $(\sqrt{u^2 - v^2})/\Omega$, а в перпендикулярном скорости направлении — u/Ω. Таким образом, по мере приближения скорости полярона к критической ($v = u$) поляризационный заряд, порождаемый каждым точечным участком распределения заряда носителя в поляроне, претерпевает квазирелятивистское сжатие в направлении движения. В результате все массы полярона растут при приближении v к u, очевидно, как некоторые отрицательные степени выражения $1 - v^2/u^2$, которое можно представить как отношение квадратов «размазок» поляризационного заряда, обусловленных пространственной дисперсией, вдоль и перпендикулярно направлению движения:

$$1 - \frac{v^2}{u^2} = \frac{u^2 - v^2}{u^2} = \frac{u^2 - v^2}{\Omega^2} \frac{\Omega^2}{u^2}. \tag{12}$$

Параметр размазки вдоль направления движения стремится к нулю при $v \to u$. Однако масса полярона при $v \to u$ стремится к конечному значению вследствие наличия у полярона помимо размазки, связанной с пространственной дисперсией, размазки R, обусловленной волновыми свойствами носителя. Добавка параметра R, который характеризует размер полярона в отсутствие пространственной дисперсии, в числитель и знаменатель выражения (12):

$$\frac{u^2 - v^2 + R^2\Omega^2}{\Omega^2} \frac{\Omega^2}{u^2 + R^2\Omega^2} = 1 - \frac{v^2}{u^2 + R^2\Omega^2}, \tag{13}$$

позволяет получить конечное значение для массы полярона при $v = u$, в то время как при $v = 0$ выражение (13) сохраняет единичное значение. Как показывает расчет, зависимость массы полярона от его скорости может быть аппроксимирована следующими выражениями

$$m_{zz} = m_0(u) \left(1 - \frac{v^2}{u^2 + R^2\Omega^2}\right)^{-3/2}, \quad m_{xx} = m_0(u) \left(1 - \frac{v^2}{u^2 + R^2\Omega^2}\right)^{-1/2},$$

$$m_{en} = m_0(u) \left(1 - \frac{v^2}{u^2 + R^2\Omega^2}\right)^{-1.3/2}, \tag{14}$$

где R является параметром, зависящим от эффективной диэлектрической проницаемости ε^*. Из сравнения значений массы, рассчитанных по формулам (14) и по (10), (11) и [6], параметр R можно определить как $R = 0.751/b$, где $b = m^* e^2/2\hbar^2\varepsilon^*$ — параметр [2], при котором достигается минимум функционала энергии полярона с пробной волновой функцией вида

$$\psi(r) = \frac{b^{2/3}}{\sqrt{7\pi}}(1 + br)e^{-br}. \tag{15}$$

Зависимость массы полярона от величины минимальной фазовой скорости фононов u, очевидно, должна содержать отношение u к единственному оставшемуся при $v = 0$ скоростному параметру $R\Omega$, т. е. $m_0(u)$ должно зависеть от $u/R\Omega$. Как показывает расчет, выражения

$$\begin{aligned}
m_{zz}^{**} &= \frac{m^*}{192\varepsilon^{*4}}\left(\frac{m^*c^2}{\hbar\Omega}\right)^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4\left(1 + \left[\frac{u}{R\Omega}\right]^2\right)^{-1}\left(1 - \frac{v^2}{u^2 + R^2\Omega^2}\right)^{-3/2}, \\
m_{xx}^{**} &= \frac{m^*}{192\varepsilon^{*4}}\left(\frac{m^*c^2}{\hbar\Omega}\right)^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4\left(1 + \left[\frac{u}{R\Omega}\right]^2\right)^{-1}\left(1 - \frac{v^2}{u^2 + R^2\Omega^2}\right)^{-1/2}, \\
m_{en}^{**} &= \frac{m^*}{192\varepsilon^{*4}}\left(\frac{m^*c^2}{\hbar\Omega}\right)^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4\left(1 + \left[\frac{u}{R\Omega}\right]^2\right)^{-1}\left(1 - \frac{v^2}{u^2 + R^2\Omega^2}\right)^{-1.3/2},
\end{aligned} \tag{16}$$

где числитель представляет собой пекаровскую массу полярона [2, 4], аппроксимируют значения соответствующих масс полярона с погрешностью менее 10%.

Таким образом, зависимость массы полярона от его скорости может быть описана релятивистскими формулами, если учесть тот факт, что размер полярона в направлении движения при $v \to u$ стремится не к нулю, а к конечному значению, которое мы характеризуем параметром R. Отношение размазки за счет пространственной дисперсии u/Ω к параметру квантовой «размазки» R определяет отличие массы полярона при $v \to 0$ от пекаровской массы: с увеличением этого отношения масса полярона при $v \to 0$ уменьшается.

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. R. P. Feynman, Phys. Rev. **97**, 660 (1955).
4. *Поляроны*, сб. под ред. Ю. А. Фирсова, Наука, Москва (1975), с. 20.
5. A. S. Davydov and V. Z. Enolskii, Phys. Status Solidi B **143**, 167 (1987); А. С. Давыдов, В. З. Энольский, ЖЭТФ **94**(2), 177 (1988).
6. А. Э. Мясникова, Э. Н. Мясников, ЖЭТФ **112**, 278 (1997).
7. A. E. Myasnikova and E. N. Myasnikov, Phys. Rev. B **56**, 5316 (1997).
8. Э. Н. Мясников, А. П. Попов, ДАН УССР А **5**, 73 (1980).
9. A. E. Myasnikova, Phys. Rev. B **52**, 10457 (1995).
10. В. М. Фридкин, *Сегнетоэлектрики-полупроводники*, Наука, Москва (1976).