

ОБ УСЛОВИЯХ СУЩЕСТВОВАНИЯ ПОЛЯРОНОВ ЛАНДАУ—ПЕКАРА

Э. Н. Мясников, А. Э. Мясникова*

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

Поступила в редакцию 16 декабря 1998 г.

Построена функция распределения для системы, где сосуществуют автолокализованные и нелокализованные фермионы. На основе этого распределения рассматривается поведение химического потенциала носителей в такой системе, которое оказывается сильно отличающимся от его поведения в системе нелокализованных фермионов. Показано также, что с изменением температуры в системе автолокализованных и нелокализованных фермионов могут наблюдаться изоструктурные фазовые переходы первого рода, связанные с изменением состояния макроскопического числа частиц и проявляющиеся в электропроводности, вкладе носителей в теплопроводность и в оптических свойствах таких систем. Получена формула, аппроксимирующая зависимость температуры такого фазового перехода от энергии связи автолокализованных состояний носителей и от максимальной групповой скорости фононов, участвующих в их формировании. Показано, что особенности поведения химического потенциала носителей в системе с их автолокализацией приводят к возможности бозе-конденсации биполяронов в системе, где биполярные состояния являются метастабильными.

PACS: 71.38.+i, 05.30.-d

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема электропроводности в веществах с сильным фреilihовским взаимодействием носителей заряда с фононами была поставлена Ландау и Пекаром в их статье [1], где впервые было предсказано спонтанное нарушение пространственной однородности системы с образованием полярона большого радиуса. Это открытие положило начало новому направлению физики твердого тела — исследованиям поляронов в полупроводниках. Однако предсказания теории поляронов большого радиуса во многом отличались от экспериментальных результатов (например, поляроны большого радиуса не были обнаружены в щелочно-галогидных кристаллах, а в других веществах наблюдались только при низких температурах, много меньших энергии связи E_{pol}). Это часто приводило к скептическому отношению к работам по теории поляронов большого радиуса. Причины различий в предсказаниях теории и экспериментальных данных стали понятны только после развития теории поляронов при учете пространственной дисперсии решеточной поляризуемости [2].

В этой теории дисперсия фононов, взаимодействующих с носителем, учтена в виде $\Omega^2(k) = \Omega^2(0) + u^2k^2$, где u — минимальная фазовая и одновременно максимальная групповая скорость фононов, и показано, что зона автолокализованных состояний

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

носителей заряда сильно ограничена по импульсам, вследствие того что средняя скорость носителя в автолокализованных состояниях не может превышать максимальной групповой скорости u фононов, участвующих в формировании этого состояния. В результате энергетическая ширина ΔE этой зоны, согласно [3], значительно меньше E_{pol} . Поэтому у поляронов не может быть большой энергия теплового движения, и, следовательно, они не могут существовать при температурах, сравнимых по величине с их энергией связи E_{pol} .

Если вместе с пространственной дисперсией решеточной поляризуемости мы учтем ограниченность объема V_0 области локализации носителя в поляроне, то приходим к выводу о существовании предельной, максимально возможной плотности поляронов в системе. Ведь по объему V_0 можно определить максимальное значение p_0 импульса носителя в поляроне по соотношению $(4/3)\pi p_0^3 = (2\pi\hbar)^3/V_0$, причем во всех веществах с сильным электрон-фононным взаимодействием $p_0 \gg m^*u$, где m^* — эффективная масса носителя. Поэтому в области пространства, занятой одним поляроном, другой полярон по принципу Паули может оказаться только со средним импульсом носителя, большим p_0 . Но, согласно сказанному выше, средний импульс носителя в поляроне не может быть больше $m^*u \ll p_0$. Следовательно, с учетом спина носителя плотность поляронов в системе не может превышать величину $2V_0^{-1}$.

Возможность автолокализации накладывает ограничения и на заполнение нелокализованных состояний носителей. Нелокализованные носители с импульсами $p < m^*u$ не могут существовать даже в отсутствие поляронов в системе, так как они за время Ω^{-1} (где Ω — частота фононов, взаимодействие носителя с которыми приводит к его автолокализации) будут переходить в автолокализованные состояния. Иными словами, в системе с сильным электрон-фононным взаимодействием такие носители будут очень быстро затухать (время Ω^{-1} обычно порядка 10^{-13} с).

В системе с плотностью поляронов $2V_0^{-1}$ не могут по принципу Паули существовать и нелокализованные носители с импульсами $p < p_0$, так как вся область с $p < p_0$ одночастичного (для носителей) фазового пространства будет уже занята автолокализованными носителями. При стремлении же плотности поляронов в системе к нулю число возможных нелокализованных состояний носителя с $p < p_0$ будет стремиться к $2VV_0^{-1}$, где V — объем системы. Таким образом, мы здесь имеем дело с весьма необычной ситуацией, когда число доступных для частиц состояний одного сорта зависит от числа занятых такими частицами состояний другого сорта. Удобно называть носители с $p < p_0$ «холодными», а с $p > p_0$ — «горячими». Тогда концентрацию $n_0 = 2V_0^{-1}$ можно назвать максимальной концентрацией холодных носителей. Возможность же существования любого горячего носителя никак не ограничена занятостью других состояний.

Указанные выше свойства распределения носителей по состояниям должны быть адекватно отражены в функции распределения. Но такой функции распределения до сих пор не было известно. Ее построению и анализу и посвящена эта работа. Помимо этого, при использовании полученного ранее тензора инертной массы полярона [4] функция распределения позволит рассматривать кинетические свойства систем автолокализованных и нелокализованных фермионов.

2. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НОСИТЕЛЕЙ В СИСТЕМЕ С ИХ ОДНОФОНОННОЙ АВТОЛОКАЛИЗАЦИЕЙ

Пусть носители в системе автолокализируются за счет взаимодействия с одной ветвью оптических фононов. Поскольку $p_0 \gg m^*u$, любая скорость движения поляронов $v < u$ практически не влияет на область фазового пространства, занимаемую носителем этого полярона. Возможность же различной локализации полярона в кристалле объемом V является причиной существования $2VV_0^{-1}$ различных (вне-зависимости от среднего импульса носителя) поляронных состояний носителя в этом кристалле. Поэтому при анализе статистических свойств носителя со средними импульсами $p < m^*u$ в системе с автолокализацией следует в качестве базиса выбирать состояния с заданной локализацией. В таких состояниях импульс носителя, а следовательно, и энергия будут иметь неопределенность. Для построения функции распределения будем использовать метод Гиббса, ведь он, в частности, позволяет получить классические распределения Ферми—Дирака и Бозе—Эйнштейна [5]. Однако построение функции распределения Гиббса на основе базиса, включающего состояния с определенной локализацией, требует внесения изменений в этот метод, поскольку в обычной его реализации каждому состоянию приписывается определенная энергия.

Рассмотрим свойства систем, в которых могут сосуществовать автолокализованные и нелокализованные носители. Зависимость энергии носителя в такой системе от его среднего импульса [3, 6] представлена на рис. 1. В такой системе, как уже указывалось, если поляроны занимают все $2VV_0^{-1}$ состояний, то могут заполняться только нелокализованные состояния носителя с $p > p_0$. В промежуточном случае холодные носители с импульсами $p < p_0$ будут находиться частично в автолокализованном, частично в нелокализованном состояниях. То же самое можно сказать и о состояниях холодного фермиона в объеме V_0 . Этот объем в предельном случае может быть занят либо одним автолокализованным фермионом, либо одним нелокализованным или, в общем случае, может быть частично занят локализованным и частично нелокализованным фермионом. При этом возможны два варианта: либо холодные фермионы в объеме V_0 отсутствуют, либо этот объем занят одним холодным фермионом. Будем рассматривать объем V_0 ,

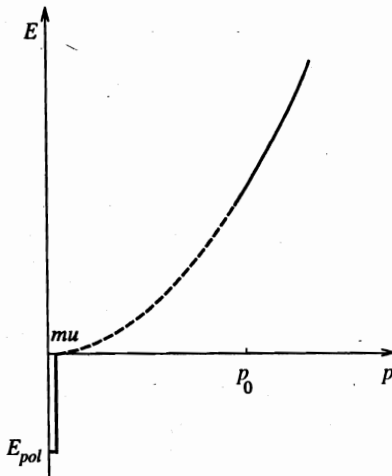


Рис. 1. Дисперсия носителей заряда в среде с их однофононной автолокализацией. Штрихами показана область состояний, которые заполняются, если концентрация автолокализованных носителей меньше их максимальной концентрации n_0

содержащий N холодных фермионов, как подсистему с переменным числом частиц по методу Гиббса. Тогда вклад первого варианта ($N = N_1 + N_2 = 0$) в условие нормировки будет иметь вид

$$\frac{\exp[(\Omega - \mu N)/T]}{4\pi p_0^3/3} \left[\int_0^{mu} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_1}{T} N_1\right) + \int_{mu}^{p_0} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_2}{T} N_2\right) \right], \quad (1)$$

где N_1 — число автолокализованных фермионов, $N_1 = 0$, а N_2 — число нелокализованных холодных фермионов, $N_2 = 0$; $E_1(p)$ — энергия автолокализованного состояния, в котором средний импульс носителя равен p (при этом выражение для $E_1(p)$ содержит эффективную «энергетическую» массу полярона, которая, в свою очередь, является функцией от p); $E_2(p)$ — энергия холодного делокализованного носителя с импульсом p : $E_2(p) = E_{pol} + p^2/2m$. Здесь E_{pol} — энергия связи полярона, и нулевой уровень химического потенциала совпадает с дном зоны автолокализованных фермионов.

Рассматривая случай $N = 1$, мы должны учесть, что если состояния одного типа полностью заполнены, то состояния другого типа недоступны. Тогда вклад случая $N = 1$ в условие нормировки будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{\exp[(\Omega - \mu N)/T]}{4\pi p_0^3/3} \int_0^1 dN_2 \times \\ \times \left[(1 - N_2) \int_0^{mu} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_1}{T}\right) + N_2 \int_{mu}^{p_0} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_2}{T}\right) \right], \quad (2)$$

где возможность двух предельных и всех промежуточных состояний холодных фермионов учитывается интегрированием по N_2 в интервале от нуля до единицы. Таким образом, условие нормировки будет иметь следующий вид:

$$\exp\left(\frac{\Omega}{T}\right) \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{\exp(\mu/T)}{4\pi p_0^3/3} \times \right. \\ \left. \times \left[\int_0^{mu} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_1}{T}\right) + \int_{mu}^{p_0} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_2}{T}\right) \right] \right\} = 1, \quad (3)$$

откуда среднее число холодных фермионов в объеме V_0 можно определить как

$$\bar{N}_{cold} = -2 \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \frac{A \exp(\mu/T)}{1 + (1/2)A \exp(\mu/T)}, \quad (4)$$

где

$$A = \frac{V_0}{(2\pi\hbar)^3} \left[\int_0^{mu} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_1}{T}\right) + \int_{mu}^{p_0} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_2}{T}\right) \right].$$

Для среднего числа горячих фермионов в объеме V_0 обычное использование распределения Ферми—Дирака дает

$$\bar{N}_{hot} = \frac{2V_0}{(2\pi\hbar)^3} \int_{p_0}^{\infty} \frac{4\pi p^2 dp}{\exp[(E_2(p) - \mu)/T] + 1}. \quad (5)$$

Очевидно, что полная концентрация фермионов в системе есть сумма концентраций холодных и горячих носителей:

$$n = \bar{N}_{cold}/V_0 + \bar{N}_{hot}/V_0, \quad (6)$$

откуда можно получить химический потенциал фермионов как функцию их плотности n и температуры T .

3. СВОЙСТВА ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НОСИТЕЛЕЙ В СИСТЕМАХ С ОДНОФОННОЙ АВТОЛОКАЛИЗАЦИЕЙ

На рис. 2 изображена полученная по формулам (4)–(6) зависимость химического потенциала μ системы фермионов от их плотности n для нескольких значений температуры. Концентрация на рисунке выражена в единицах максимальной концентрации холодных фермионов n_0 (она же является максимальной концентрацией поляронов), которая, как и объем полярона, слабо зависит от параметров среды. Типичным значением является $n_0 = 3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Оно получено для следующих использованных при построении рисунка параметров среды: обратная эффективная диэлектрическая проницаемость $c = 1/\epsilon_{\infty} - 1/\epsilon_0 = 0.27$, максимальная групповая скорость фононов $u = 10^5 \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}$, эффективная масса фермиона в кристалле $m^* = m_e$. Как видно из рис. 2, при концентрациях фермионов $n > n_0$ химические потенциалы систем свободных фермионов и систем, где свободные и автолокализованные фермионы могут сосуществовать, совпадают. Однако при концентрациях носителей $n < n_0$ химический

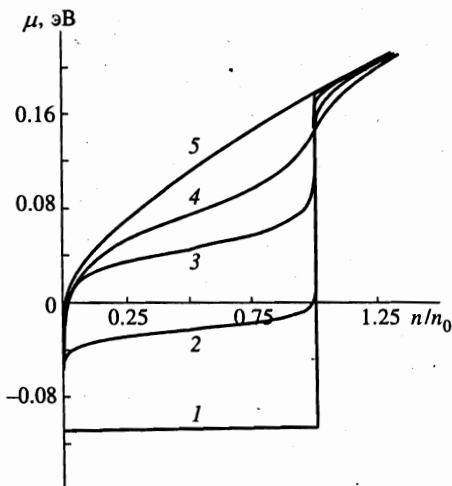


Рис. 2. Химический потенциал μ системы автолокализованных и нелокализованных фермионов как функция полной концентрации фермионов n/n_0 для различных значений температуры T : 1 — $T = 0.001$ эВ; 2 — $T = 0.005$ эВ; 3 — $T = 0.01$ эВ; 4 — $T = 0.02$ эВ. Кривая 5 демонстрирует концентрационную зависимость химического потенциала системы нелокализованных фермионов при $T = 0$ К

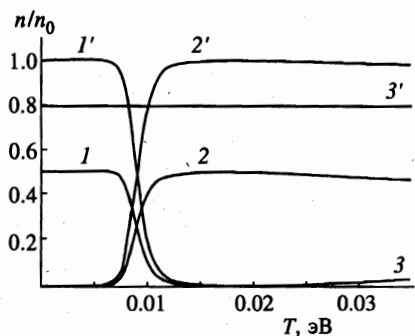


Рис. 3

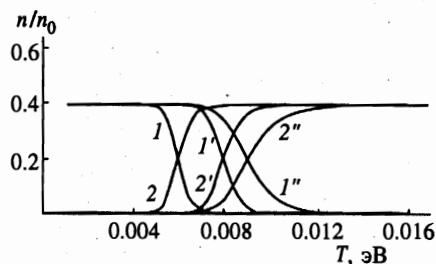


Рис. 4

Рис. 3. Температурная зависимость концентрации фермионов в каждом из доступных им состояний для двух различных значений полной концентрации n фермионов. Кривые 1 и 1' соответствуют концентрации поляронов при $n = 0.5n_0$ и $n = 1.8n_0$; кривые 2 и 2' демонстрируют концентрации холодных делокализованных носителей при $n = 0.5n_0$ и $n = 1.8n_0$; кривые 3 и 3' показывают концентрации горячих фермионов

Рис. 4. Изменение концентрации поляронов и холодных делокализованных фермионов с температурой при различных значениях энергии связи поляронов E_{pol} и максимальной групповой скорости фононов u . Кривые 1 и 2 соответствуют концентрации носителей в поляронном и холодном делокализованном состояниях при $u = 10^4 \text{ см}\cdot\text{с}^{-1}$, $E_{pol} = 0.11 \text{ эВ}$; кривые 1' и 2' — при $u = 10^4 \text{ см}\cdot\text{с}^{-1}$, $E_{pol} = 0.15 \text{ эВ}$; кривые 1'' и 2'' — при $u = 10^5 \text{ см}\cdot\text{с}^{-1}$, $E_{pol} = 0.11 \text{ эВ}$

потенциал системы, в которой возможна автолокализация носителей, увеличивается с температурой, тогда как в системе делокализованных фермионов он всегда уменьшается с ростом температуры.

Еще одной особенностью систем, где могут присутствовать автолокализованные фермионы, является стремление химического потенциала к нулю при $T \rightarrow 0 \text{ К}$ вне зависимости от концентрации n фермионов при $n < n_0$. Как видно из рис. 2, при концентрации носителей $n < n_0$ и рассматриваемых на рис. 2 температурах ниже комнатной химический потенциал системы определяется в основном температурой и практически не зависит от концентрации. Это связано, конечно, с тем, что при таких концентрациях ($n < n_0$) и температурах заполняется в основном поляронная зона, а количество поляронов в состоянии с одинаковым импульсом может быть макроскопическим. Наибольшим (равным $2VV_0^{-1}$) оно будет при температуре $T = 0 \text{ К}$, когда все поляроны оказываются в состояниях с нулевым импульсом и минимальной энергией. В силу макроскопического характера такого вырождения можно назвать его конденсацией автолокализованных фермионов в состоянии с наименьшей энергией.

Рисунок 3 демонстрирует перераспределение фермионов между автолокализованными и свободными состояниями при изменении температуры для плотностей носителей $n = 0.5n_0$ и $n = 1.8n_0$ (параметры среды те же, что для рис. 2) соответственно. Как видно из рис. 3, уже при температурах 50–100 К, что много меньше энергии связи полярона (при рассматриваемых параметрах она составляет $E_{pol} = 0.11 \text{ эВ}$), автолокализованные фермионы исчезают из системы, трансформируясь в делокализованные холодные состояния. При этом температура исчезновения поляронов не зависит от кон-

центрации носителей в системе, а определяется лишь энергией связи полярона и величиной максимальной групповой скорости фононов, участвующих в его формировании.

Рисунок 3 также показывает, что при температурах ниже комнатной горячие фермионы появляются в системе, только если концентрация носителей превышает максимальную концентрацию n_0 холодных фермионов. Значение этого результата связано с тем, что только горячие фермионы могут присутствовать в объеме, занятом поляроном, и, следовательно, только горячие фермионы могут участвовать в экранировании электрон-фононного взаимодействия носителями заряда. В частности, это означает, что влияние эффектов экранирования, которое, как указывается, например, в [7], сильно изменяет энергию связи автолокализованных состояний уже при концентрации 10^{20} см $^{-3}$, на самом деле может быть существенным только при концентрациях носителей порядка 10^{21} см $^{-3}$.

Рисунок 4 демонстрирует зависимость температуры T_c , при которой плотность поляронов уменьшается в два раза, от их энергии связи E_{pol} и величины максимальной групповой скорости фононов u . (Концентрация горячих фермионов при рассматриваемых на рис. 4 полной концентрации фермионов ($n = 0.4n_0$) и температурах оказывается пренебрежимо малой.) Температуру T_c можно называть температурой изоструктурного фазового перехода, так как при этой температуре происходит исчезновение одной фазы (макроскопического числа автолокализованных носителей), подобно исчезновению жидкости при кипении. Этот фазовый переход имеет отличную от нуля теплоту перехода, равную произведению числа поляронов на энергию связи полярона E_{pol} . Зависимость T_c от u и E_{pol} с точностью $\simeq 5\%$ аппроксимируется следующей формулой:

$$T_c(u, E_{pol}) = 0.185 E_{pol} 1.5^{\lg(muc/p_0)}, \quad (7)$$

где c — обратная эффективная диэлектрическая проницаемость. Ширина области перехода оказывается всегда величиной порядка T_c .

4. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФЕРМИОНОВ В СРЕДЕ С МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬЮ

Метод построения функции распределения в системе сосуществующих автолокализованных и свободных фермионов легко может быть распространен на случай среды с многокомпонентной поляризацией (несколькими фоннными ветвями, взаимодействующими с носителем заряда). Как было показано в [2], если минимальные фазовые скорости этих фоннных ветвей различны и большую имеет ветвь, взаимодействие которой с носителем удовлетворяет адиабатическому условию, то в такой среде могут существовать несколько различных поляронных состояний носителей заряда. Действительно, если взаимодействие носителя с одной из фоннных ветвей приводит к образованию автолокализованного состояния, то поляризация среды, возникающая за счет взаимодействия с поляроном остальных ветвей, присоединяется к полярону, изменяя его энергию связи, эффективную массу и радиус.

Рассмотрим наиболее простой случай среды с двукомпонентной поляризацией, где взаимодействие носителя с одной фоннной ветвью приводит к его автолокализации, и минимальная фазовая скорость фононов этой ветви, u_2 , больше, чем у второй взаимодействующей с носителем ветви ($u_2 > u_1$). В такой среде могут существовать два типа поляронов. Поляризационная шуба одного из них состоит из виртуальных фононов

обеих ветвей. Когда скорость движения такого полярона превышает значение меньшей из двух минимальных фазовых скоростей фононов (u_1), его движение приводит к излучению реальных фононов соответствующей ветви [2]. Это приводит к утрате поляроном поляризационной шубы, образованной фононами этой ветви. Таким образом, полярон, движущийся со скоростью v ($u_1 < v < u_2$), имеет только одну поляризационную шубу, состоящую из виртуальных фононов, имеющих минимальную фазовую скорость u_2 . Этот последний полярон будем называть обычным поляроном (ordinary polaron), тогда как полярон, существующий в интервале скоростей $v < u_1$, будем называть двойным поляроном (double polaron). Очевидно, что энергия связи E_{DP} и эффективная масса m_{DP} двойного полярона больше, чем у обычного полярона (E_{OP} и m_{OP}), тогда как объем $V_{DP} < V_{OP}$.

Рассмотрим условие нормировки распределения Гиббса в системе, где могут присутствовать поляроны двух типов и свободные носители. Вклад случая $N = 0$ (где, как и в предыдущем разделе, N — число холодных фермионов в объеме V_0), очевидно, не изменится. Если пренебречь разницей объемов обычного и двойного поляронов (полагая $V_{OP} = V_{DP} = V_0$), вклад случая $N = 1$ будет иметь следующий вид:

$$\frac{\exp[(\Omega - \mu N)/T]}{(4/3)\pi p_0^3} \left[\frac{1}{3} \int_0^{mu_1} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_1}{T}\right) + \frac{1}{3} \int_{mu_1}^{mu_2} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E'_1}{T}\right) + \frac{1}{3} \int_{mu_2}^{p_0} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_2}{T}\right) \right]. \quad (8)$$

Если нулевой уровень энергии и химического потенциала положить совпадающими с дном зоны обычного полярона, то

$$E'_1(p) = \frac{p_{OP}^2}{2m_{OP}} = \frac{p^2 m_{OP}}{2m^2}, \quad E_1(p) = \frac{p_{DP}^2}{2m_{DP}} - (E_{DP} - E_{OP}) = \frac{p^2 m_{DP}}{2m^2} - (E_{DP} - E_{OP}),$$

$$E_2(p) = E_{OP} + \frac{p^2}{2m},$$

где p — импульс носителя. Из условия нормировки плотность холодных фермионов в системе с двухкомпонентной поляризацией выражается в виде

$$n_{cold} = -\frac{2}{V_0} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \frac{(2/3)B \exp(\mu/T)}{1 + (1/3)B \exp(\mu/T)}, \quad (9)$$

где

$$B = \frac{V_0}{(2\pi\hbar)^3} \left[\int_0^{mu_1} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_1}{T}\right) + \int_{mu_1}^{mu_2} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E'_1}{T}\right) + \int_{mu_2}^{p_0} 4\pi p^2 dp \exp\left(-\frac{E_2}{T}\right) \right].$$

Как видно из выражения (9), плотность холодных фермионов в такой системе представляет собой сумму трех слагаемых, соответствующих плотностям обычного и двойного

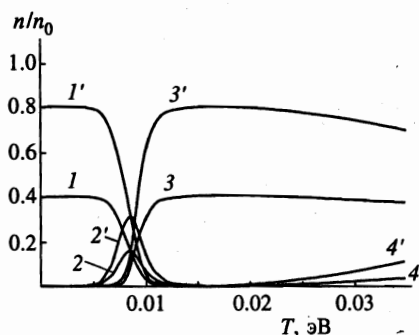


Рис. 5. Температурная зависимость концентрации фермионов в каждом из доступных им состояний в среде с двухкомпонентной поляризацией для двух значений полной концентрации n фермионов: 1 и 1' — двойной полярон; 2 и 2' — обычный полярон, 3 и 3' — холодные нелокализованные носители, кривые 4 и 4' — горячие фермионы соответственно при $n = 0.4n_0$ и $n = 0.8n_0$

поляронов и делокализованных холодных носителей. Добавляя плотность горячих носителей (5), получим полную плотность фермионов в системе. На рис. 5 представлена плотность фермионов в каждом из состояний, доступных в среде с двухкомпонентной поляризацией, при полных плотностях носителей $n = 0.4n_0$ и $n = 0.8n_0$. Параметры среды, использованные для получения рис. 5, имеют следующие значения: $E_{DP} = 0.17$ эВ, $E_{OP} = 0.11$ эВ, $m_{DP} = 18m_e$, $m_{OP} = 10m_e$, $u_1 = 10^4$ см·с⁻¹, $u_2 = 10^5$ см·с⁻¹ (мы не учитывали в этом расчете зависимость эффективной массы полярона от его скорости, поскольку энергетическая масса слабо зависит от скорости полярона при таких значениях u_1, u_2 [3]). Как видно из рис. 5, температура, при которой происходит перераспределение носителей из одного состояния в другое, не зависит от концентрации n носителей в системе. Как показывает расчет для других параметров среды, она, как и в случае среды с однокомпонентной поляризацией, определяется только величинами u_1, u_2 и шириной запрещенных зон, разделяющих зоны различных состояний носителей. Формула (7) дает верные (с точностью $\sim 10\%$) значения температуры T_c двукратного уменьшения концентрации поляронов какого-либо типа, если вместо энергии связи полярона понимать под E_{pol} ширину запрещенной зоны, отделяющей зону носителей, температура исчезновения которых рассчитывается от ближайшей к ней по энергии, но менее глубокой зоны. Мы не изображали случая $n > n_0$ в среде с двухкомпонентной поляризацией, поскольку, как и в случае среды с однокомпонентной поляризацией, при рассматриваемых температурах ниже комнатной он отличается лишь появлением горячих носителей с концентрацией $n - n_0$. Следовательно, в системе с любым количеством фоновых ветвей, взаимодействующих с носителем заряда, при температурах ниже комнатной (когда $p_0^2/2m \gg T$) горячие носители могут появляться, только если концентрация n носителей превышает максимальную концентрацию n_0 холодных фермионов.

Конечно, экспериментально наличие или отсутствие в системе горячих фермионов может проявиться только в наличии или отсутствии экранирования электрон-фонного взаимодействия, которое могут осуществлять, как обсуждалось в предыдущем разделе, только горячие носители. Однако обычный и двойной поляроны и делокализованное состояние носителей отличаются друг от друга энергией связи, эффективной массой, временем жизни и особенно подвижностью, которая для автолокализованных носителей коренным образом отличается от нелокализованных [6]. Поэтому переход макроскопической части носителей из одного такого состояния в другое, имеющий место при изменении температуры системы, будет проявляться в изменении кинетических коэффициентов и связанных с ними величин. Также этот переход должен проявляться

в оптических свойствах систем с автолокализацией носителей, в частности, в характерном изменении с температурой времени жизни состояний фотоиндуцированных носителей. (При этом необходимо учитывать, что различаются не только времена жизни носителей, возбужденных в одну из поляронных зон и в зону проводимости, но и времена релаксации обычного и двойного поляронов за счет различия частот фононных ветвей.) Подобную температурную зависимость времени жизни фотоиндуцированных носителей наблюдали, например, в [8].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ функции распределения фермионов в системе, где они могут присутствовать в автолокализованных и делокализованных состояниях, позволяет сделать ряд выводов об особенностях термодинамических характеристик и поведения таких систем.

1. Концентрация автолокализованных фермионов в системе ограничена величиной $n_0 = 2V_0^{-1}$, где V_0 — объем полярона.

2. Химический потенциал системы не зависит от концентрации фермионов n , если $n < n_0$ и температура $T \rightarrow 0$ К (вследствие способности автолокализованных фермионов к конденсации в состоянии с нулевым импульсом и минимальной энергией).

3. Химический потенциал системы автолокализованных и свободных фермионов с концентрацией фермионов $n < n_0$ увеличивается с температурой в отличие от химического потенциала системы свободных фермионов.

4. В системе с автолокализацией могут наблюдаться фазовые переходы первого рода, связанные с изменением состояния макроскопического числа носителей. Теплота перехода равна произведению числа поляронов на энергию связи полярона.

5. Температура, при которой поляроны некоторого типа исчезают из системы, зависит от максимальной групповой скорости фононов, участвующих в их образовании, и обычно значительно меньше энергии связи полярона.

6. Эти фазовые переходы будут проявляться в электропроводности и во вкладе носителей в теплопроводность, а также в зависимости времени жизни состояний фотоиндуцированных носителей от температуры.

Эти выводы заставляют существенно изменить подход к экспериментальному поиску и исследованию поляронов.

Учет особенностей систем, содержащих автолокализованные фермионы, приводит также к существенному изменению представления о роли биполяронов в электропроводности сред с сильным электрон-фононным взаимодействием. Пекар в монографии [1] отрицал возможность существования биполяронов. Даже в уточненной теории биполяронов [9] они оказываются энергетически выгоднее поляронов только при весьма редком наборе параметров электрон-фононной системы. В работе [2] было показано, что практически при таком же наборе параметров возможно существование двухцентровых резонансных биполяронов. Учет ограниченности зоны биполяронов по импульсам ведет к существенному повышению температуры T_0 их конденсации, так что она легко достигает 100 К при концентрации носителей 10^{20} – 10^{21} см⁻³ [2].

Проведенный выше анализ свойств систем автолокализованных и делокализованных фермионов позволяет утверждать, что и при более распространенном, например среди сложных оксидов, наборе параметров, при которых биполяроны являются метастабильными (энергия в расчете на один носитель в биполяроне выше, чем в поляроне),

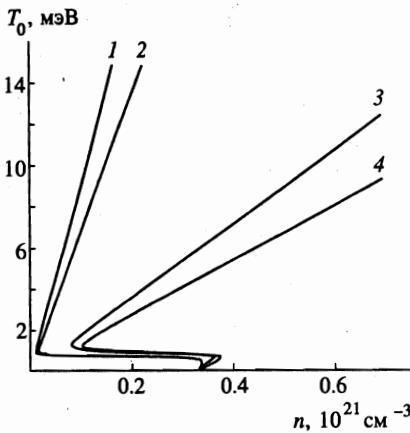


Рис. 6. Температура бозе-конденсации биполяронов как функция концентрации носителей в системе для случая, когда поляронная зона лежит глубже биполяронной. Кривая 1 соответствует $u = 2 \cdot 10^4 \text{ см}\cdot\text{с}^{-1}$ и $M = 30m_e$, 2 — $u = 2 \cdot 10^4 \text{ см}\cdot\text{с}^{-1}$ и $M = 40m_e$, 3 — $u = 10^5 \text{ см}\cdot\text{с}^{-1}$ и $M = 30m_e$, 4 — $u = 10^5 \text{ см}\cdot\text{с}^{-1}$ и $M = 40m_e$

биполяроны способны конденсироваться при температурах 100–150 К и плотностях носителей 10^{20} – 10^{21} см^{-3} . К этому ведет отмеченная выше способность химического потенциала системы автолокализованных и делокализованных носителей увеличиваться при повышении температуры. Действительно, бозевский характер биполяронов позволяет учесть наличие их в системе путем добавления в формулу (6) числа носителей в биполяронном состоянии N_{bip} , полученного из обычного бозевского распределения биполяронов с учетом ограниченности их зоны по импульсам [2]:

$$\bar{N}_{bip} = \frac{2V_0}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{Mu} \frac{4\pi p^2 dp}{\exp [(E_{bip}(p) - 2\mu) / T] - 1}, \tag{10}$$

где M — масса биполярона. Тогда оказывается, что химический потенциал носителей в системе, находящийся при $T \rightarrow 0 \text{ К}$ и $n < n_0$ в поляронной зоне, с повышением температуры может достигать величины $\mu = E_{bip}(0)/2$. Возникающий при этом конденсат биполяронов будет исчезать, переходя в бозе-газ и в делокализованные состояния носителей, только при высоких температурах. В случае же $n > n_0$ величина химического потенциала соответствует дну биполяронной зоны уже при $T = 0 \text{ К}$, так что температурной областью существования бозе-конденсата биполяронов будет интервал $0 \text{ К} < T < T_0$.

На рис. 6 в качестве примера представлена фазовая диаграмма (T_0, n) , где T_0 — температура бозе-конденсации, системы биполяронов при двух значениях параметра u ($u = 2 \cdot 10^4$ и $10^5 \text{ см}\cdot\text{с}^{-1}$) и массы биполярона $M = 30m_e$ и $M = 40m_e$ (величина M оценена в соответствии с [4, 5]). Из рис. 6 видно, что высокотемпературный участок кривой $T_0(n)$ достигает $T_0 = 100 \text{ К}$ при плотностях носителей даже ниже обычных для ВТСП. Возможность исчезновения конденсата при понижении температуры до очень низких значений связана с конденсацией носителей в энергетически более выгодных поляронных состояниях.

Литература

1. Л. Д. Ландау, С. И. Пекар, ЖЭТФ **18**, 419 (1948); С. И. Пекар, *Исследования по электронной теории кристаллов*, Гостехиздат, Москва (1951).
2. А. Е. Муасникова, Phys. Rev. B **52**, 10457 (1995).
3. А. Э. Мясникова, Э. Н. Мясников, ЖЭТФ **112**, 278 (1997).
4. А. Е. Муасникова and E. N. Myasnikov, Phys. Rev. B **56**, 5316 (1997); А. Э. Мясникова, Э. Н. Мясников, ЖЭТФ **115**, 180 (1999).
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).
6. А. Е. Муасникова, Ferroelectrics **133**, 247 (1992).
7. G. Iadonisi, G. Capone, V. Cataudella, and G. De Filippis, Phys. Rev. B **53**, 13497 (1996).
8. C. J. Stevens, D. C. Smith, B. Podobnik et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 2212 (1997); D. Mihailovic, C. Stevens, J. Demsar et al., J. Supercond. **10**, 337 (1997).
9. С. Г. Супрун, Б. Я. Мойжес, ФТТ **24**, 1571 (1982).