

537.311.322

АВТОЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК*М. И. Клингер*

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	105
2. Автолокализованные состояния в регулярном кристалле	107
а) Гамильтониан электрон-фононной системы	107
б) Предельные случаи. Самосогласованные состояния	109
в) Дальнодействующие взаимодействия. Полярон	110
г) Короткодействующие и «смешанные» взаимодействия в 3D-системах. Поляроны малого радиуса	114
д) 1D- и 2D-системы. Эффекты зонной структуры в 3D-системах. Предельно узкие зоны	116
е) Двухэлектронное АЛ состояние. Биполярон	118
ж) АЛ электроны в антиферромагнетике	119
3. Автолокализованные состояния на дефектах кристаллической решетки	120
а) Одноэлектронное АЛ состояние на центре захвата	120
б) Одноэлектронные АЛ состояния на перестраивающихся дефектах	123
в) Двухэлектронные связанные АЛ состояния	124
4. Автолокализованные состояния электрона в неупорядоченной системе	125
а) Особенности поляронных АЛ состояний	125
б) Флуктуоны. Основные соотношения	126
в) Флуктуон в идеальной системе	129
г) Некоторые другие флуктуонные эффекты	130
5. Автолокализованные состояния в аморфных системах — двухэлектронные центры с отрицательной корреляционной энергией	131
а) АЛ состояния в щели по подвижности. Общие соотношения	131
б) Двухэлектронные АЛ состояния. Перестройка структуры	135
в) Основные эффекты АЛ электронных пар	137
6. Заключение	138
Список литературы	139

1. ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие носителя заряда (электрона, дырки) со средой часто оказывается сильным и существенно изменяет его «затравочное», например блоховское, состояние в недеформированной среде. Так, обусловленная полем электрона локальная деформация среды может создать потенциальную яму, в которой локализуется электрон; последний при этом адиабатически следует за медленными изменениями деформации и, следовательно, «ощущает» мгновенную потенциальную яму, поддерживая стационарность последней и соответствующей деформации среды своим полем. Такое, самосогласованное в указанном смысле, состояние электрона называют автолокализованным (АЛ)*; оно может быть значительно выгоднее энергетически, чем «затравочное» состояние. Во внешнем электрическом поле на АЛ электрон действует сила, которая передается среде и вызывает трансляционное движение

*) Сказанное далее об АЛ состояниях электронов при соответствующих эквивалентных условиях относится в равной мере к АЛ состояниям дырок, а в некоторых отношениях и к АЛ состояниям других квазичастиц (экситонов и т. п.).

электрона, сопровождаемое согласованным движением деформации среды. Подобные АЛ электроны могут быть носителями тока, определяющими проводимость и другие кинетические эффекты. Исследования явления автолокализации, АЛ состояний квазичастиц и связанных с ними эффектов в конденсированных средах (кристаллах, аморфных материалах и в некоторых жидкостях и даже плотных газах) составляют в настоящее время довольно значительную область теории твердого тела и других конденсированных систем; обзор ее основных идей и результатов является предметом этой статьи. Фактически АЛ состояния носителей тока могут быть существенными в неметаллических системах, прежде всего в полупроводниках, что и имеется в виду далее.

□ Явление автолокализации было предсказано Ландау пятьдесят лет тому назад (1933 г.)¹. В его пионерской работе было показано, что электрон, сильно деформирующий около себя кристаллическую решетку, приобретает в возникшей, мгновенной, локальной потенциальной яме дискретный энергетический уровень ниже дна блоховской зоны проводимости, и этот уровень соответствует АЛ состоянию. Фактически обсуждался случай короткодействующего «локального» потенциала деформированной (трехмерной) решетки, для которого качественно обосновывалось, что переход электрона в АЛ состояние происходит посредством преодоления энергетического барьера с соответствующей энергией активации. Качественное распространение концепции Ландау на случай далекодействующего локального потенциала деформированной решетки ионного кристалла было дано Моттом (1937 г.) и другими авторами^{2,3}. Пекар (1946 г.) впервые развил последовательную теорию АЛ состояний — поляронов большого радиуса, возникающих вследствие сильного далекодействующего взаимодействия электрона с поляризационными фононами в ионном кристалле^{4,5}. В этом случае переход в АЛ состояние происходит без преодоления барьера, а поляроны должны быть основными носителями тока⁵.

С другой стороны, Френкель (1936 г.)⁶ предсказал возможность автолокализации другого характера, которая происходит без преодоления энергетического барьера и в которой локальная деформация колеблющейся решетки, скорее, следует за положением квазичастицы, отождествленной с экситоном малого радиуса в кристалле (см. также⁷). В⁶ впервые было отмечено, что в регулярном кристалле АЛ квазичастица трансляционно движется, «как если бы она влчила за собой тяжелый груз атомных смещений», т. е. ее эффективная масса велика по сравнению с таковой для свободной квазичастицы за счет инерции сопровождающей деформации решетки.

Общий теоретический подход, развитый в⁸, позволил интерпретировать оба возможных типа АЛ состояний, предсказанных Ландау¹ и Френкелем², как предельные случаи АЛ для «легкой», широкозонной ($D \gg \hbar\omega_{ph}$), и «тяжелой», узкозонной ($D \lesssim \hbar\omega_{ph}$), квазичастицы в кристалле; D — ширина «затравочной» блоховской зоны в идеальном кристалле, $\hbar\omega_{ph}$ — характерная энергия фононов, взаимодействующих с электроном (квазичастицей).

Формулировка теории полярона как проблемы спектра нерелятивистской частицы, взаимодействующей с бозонным (фононным) полем, способствовала развитию ряда общих методов в теории АЛ состояний (см. ⁹⁻¹³). В этой связи термин «полярон» стал использоваться как синоним АЛ состояния электрона в гармонической кристаллической решетке при линейной реакции среды (см. гл. 2 и отчасти 3). Особенности АЛ состояний на дефектах кристаллической решетки обсуждаются в гл. 3 (см., например, ¹⁴). АЛ состояния большого радиуса, флуктуоны, возникающие в неупорядоченной среде при ее нелинейной реакции, рассмотрены в гл. 4^{15,16}. Другой тип АЛ, преимущественно двухэлектронных, состояний, возникающих в аморфной системе, обсуждаются в гл. 5^{17,18}. Во всех этих главах и, как правило, вообще в теории АЛ состояний многоэлектронные корреляции считаются несущественными и явным образом не учитываются; по-видимому, это адекватно реаль-

ной ситуации в рассматриваемых неметаллических системах. Наконец, о некоторых итогах, нерешенных проблемах и перспективах теории АЛ состояний идет речь в заключительной главе.

Проблемы теории поляронов в кристаллах обсуждались в обзорных работах ^{5,13} 19-22, а теории флукуонов — в ²³; см. также ²⁴⁻²⁸. В настоящей статье представлен обзор современного состояния теории основных моделей и типов АЛ состояний электронов и дырок в твердых телах — их общих черт и различий. Главное внимание уделено общим аспектам теории АЛ носителей тока, их проводимости и родственным эффектам *). В этой связи при сопоставлении теории с экспериментом в соответствующих разделах для основных типов АЛ состояний лишь кратко отмечены опытные данные, более или менее надежно свидетельствующие о их реализуемости в твердых телах. Литература к обзору неизбежным образом не является исчерпывающей, имея лишь репрезентативный характер.

2. АВТОЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В РЕГУЛЯРНОМ КРИСТАЛЛЕ

Поляронные АЛ состояния в кристалле, о которых в основном идет речь в этой главе, фактически определяются линейной реакцией среды (линейной связью между деформацией и полем электрона) в гармонической решетке. С другой стороны, АЛ состояния в антиферромагнитном кристалле могут определяться нелинейной реакцией среды (см. раздел ж) гл. 2).

а) Гамильтониан электрон-фононной системы

Обычно при анализе общих свойств поляронных АЛ состояний в кристаллах используется простейшая модель: 1) «затравочная» блоховская зона носителя тока не вырождена и изотропна, с законом дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k}) \approx k^2/2m$ в приближении эффективной массы (m), или

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx -\frac{1}{2}D + J \sum_{\mathbf{g}} \cos(\mathbf{k}\mathbf{g})$$

при $D \approx 2zJ$ в приближении (z) ближайших соседей с амплитудой туннелирования $J(\mathbf{g}) \equiv J$, $|\mathbf{g}| \approx a$ (дно зоны ($\varepsilon(\mathbf{k}))_{\min} = 0$ — нуль отсчета энергии, a — межатомное расстояние); 2) взаимодействие (электронные переходы) между блоховскими состояниями электронов проводимости и дырок не существенны, при достаточно большой ширине E_g щели между истинными, или эффективными, краями зон; 3) электрон-фононная связь линейна по атомным смещениям (q). (Об эффектах вырождения и анизотропии зон см. в разделе д) гл. 2, а межзонного взаимодействия — в разделе а) гл. 5.) Для рассматриваемой модели гамильтониан электрон-фононной системы включает операторы кинетической энергии электронов \hat{K}_e , межэлектронных взаимодействий \hat{U}_e , энергии фононов $\hat{\mathcal{H}}_{ph}$ и электрон-фононного взаимодействия $\hat{\mathcal{H}}_{int}$ (см., например, ^{5,13,21,21} **):

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{K}_e + \hat{U}_e + \hat{\mathcal{H}}_{ph} + \hat{\mathcal{H}}_{int}, \quad (2.1)$$

где $\hat{\mathcal{H}}_{ph} = \sum_{\lambda} \omega_{\lambda} \hat{N}_{\lambda}$, $\hat{N}_{\lambda} \equiv b_{\lambda}^{\dagger} b_{\lambda}$ ($\lambda \equiv \mathbf{f}, j$), \mathbf{f} — квазиимпульс, j — номер ветви фононов, $j = 1, 2, 3, \dots$ Для типичных полупроводников (Ge, A_3B_5 и т. п.) и ионных кристаллов (NaCl и т. п.) с достаточно большой D (> 1 эВ)

*) Существенные специфические аспекты теории АЛ экситонов (структура спектра, сосуществование свободных и АЛ экситонов и др.) во многом отличны; наряду с общими аспектами теории АЛ состояний в кристаллах, они рассмотрены в прекрасном обзоре ²² и здесь не обсуждаются.

***) Здесь и далее в основном принято, что $\hbar \equiv 1$.

обычно применимо одноэлектронное приближение, в котором ^{5,9,13,19,21}

$$\hat{K}_e = \varepsilon(\mathbf{k}), \quad \varepsilon(\mathbf{k}) \approx \frac{k^2}{2m} \quad \text{при} \quad |\mathbf{k}| a \ll \pi, \quad \varepsilon(\mathbf{k}) \ll D, \quad (2.2)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = N^{-1/2} \sum_{\lambda} w_{\lambda} q_{\lambda} \exp(i\mathbf{f}\mathbf{R}) \quad \text{при} \quad \mathbf{R} \equiv \{\mathbf{r} \text{ или } \mathbf{l}\}, \quad q_{\lambda} = b_{\lambda} + b_{\lambda}^{\dagger}; \quad (2.3)$$

в приближении изотропного континуума (при $|\mathbf{k}| a \ll \pi$, $|\mathbf{f}| a \ll \pi$)

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \int d\mathbf{r}' Z(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta_0(\mathbf{r}'), \quad (2.4)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{ph}} = K_{\text{ph}} + \frac{1}{2} S_0 \int d\mathbf{r} \Delta_0^2(\mathbf{r}); \quad (2.5)$$

здесь N — число ячеек в нормировочном объеме $V_0 \equiv Nv_0$, $v_0 \equiv |\mathbf{g}|^3 \approx a^3$ (или $v_0 \approx a^d$, $d = 3, 2, 1$). \hat{K}_{ph} — оператор кинетической энергии колебаний, $\Delta_0(\mathbf{r})$ — поле деформации, S_0 — деформационная постоянная и $Z(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ описывает связь электронов (\mathbf{r}) с континуумом (\mathbf{r}'). В (2.3) мы, как обычно, положим, что коэффициенты w_{λ} электрон-фононной связи не зависят от квазиимпульса электрона (\mathbf{k}), т. е. в узельном ($\mathbf{l}, \mathbf{R} \equiv \mathbf{l} - \mathbf{l}' \approx \mathbf{g}$) или координатном ($\mathbf{r}, \mathbf{R} \equiv \mathbf{r} - \mathbf{r}'$) представлениях $w_{\lambda}(\mathbf{r}) \approx w_{\lambda}\delta(\mathbf{r})$ или $w_{\lambda}(\mathbf{l}) \approx w_{\lambda}\delta_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}$. Это приближение является адекватным при оценке интегралов теории, содержащих, кроме $w_{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, плавные функции $f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, ибо $w_{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, как и $J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, экспоненциально убывает с ростом $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ (см. ^{21,22}).

Однозонный гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ инвариантен относительно совместной трансляции \hat{Q} электронов и центров колебаний, так что спектр имеет зонную структуру $\{\mathcal{E}_{\nu}(\mathbf{K})\}$, определяемую квантовыми числами ν ($\dots, N_{\lambda}, \dots$) и полным квазиимпульсом \mathbf{K} (N_{λ} — число фононов, $N_{\lambda} = 0, 1, 2, \dots$). Групповая скорость в подобной зоне $\mathbf{V}_{\nu}(\mathbf{K}) = \partial \mathcal{E}_{\nu}(\mathbf{K}) / \partial \mathbf{K} = 0$ при надлежащих $\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 \equiv \mathbf{K}_0^{(\nu)}$ ($\mathbf{K}_0 = 0$ для изотропной зоны $\mathcal{E}_{\nu}(\mathbf{K})$). †

Тип взаимодействия $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ определяется конкретными зависимостями ω_{λ} и w_{λ} от \mathbf{f} (см., например, ^{5,21,22,24}). Так, для случая поляризационных (р) фононов (по крайней мере, в трехмерных системах) при $|\mathbf{f}| a \ll \pi$

$$\omega_{\mathbf{f}}^{(\text{p})} \approx \omega_{\text{p}} = \text{const}, \quad w_{\mathbf{f}}^{(\text{p})} \approx \sqrt{4\pi\alpha\lambda_{\text{p}}} \omega_{\text{p}} (|\mathbf{f}| v_0)^{-1}, \quad (2.6)$$

$$Z^{(\text{p})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx E_{\text{L}}^{(\text{p})} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-2}, \quad E_{\text{L}}^{(\text{p})} = \text{const},$$

где безразмерный параметр связи $\alpha \equiv e^2/2\kappa\lambda_{\text{p}}\omega_{\text{p}}$, $\lambda_{\text{p}} \equiv (2m\omega_{\text{p}})^{-1/2}$, $\kappa^{-1} \equiv \kappa_{\infty}^{-1} - \kappa_0^{-1}$; κ_0 и κ_{∞} — статическая и высокочастотная диэлектрические константы. Для случая неполяризованных оптических (о) фононов, акустических продольных (ас) или пьезоакустических (рас) фононов при $|\mathbf{f}| a \ll \pi$ соответственно

$$\omega_{\mathbf{f}}^{(\text{o})} \approx \omega_0 \equiv \text{const}, \quad w_{\mathbf{f}}^{(\text{o})} \approx w_0 = \text{const}, \quad Z^{(\text{o})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx E_{\text{S}}^{(\text{o})} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.7)$$

$$\omega_{\mathbf{f}}^{(\text{ac})} = s |\mathbf{f}| \ll \omega_{\text{D}},$$

$$w_{\mathbf{f}}^{(\text{ac})} = C |\mathbf{f}| (2M_{\text{a}}\omega_{\mathbf{f}}^{(\text{ac})})^{-1/2},$$

$$Z^{(\text{ac})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx E_{\text{S}}^{(\text{ac})} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.8)$$

$$\omega_{\mathbf{f}}^{(\text{pac})} = s |\mathbf{f}| \ll \omega_{\text{D}}, \quad w_{\mathbf{f}}^{(\text{pac})} \sim |\mathbf{f}|^{-1/2}, \quad Z^{(\text{pac})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx E_{\text{L}}^{(\text{pac})} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-2}, \quad (2.9)$$

где $E_{\text{S}} = \text{const}$, $E_{\text{L}}^{(\text{pac})} = \text{const}$, $M_{\text{a}} \equiv \rho_0 v_0$, ρ_0 — плотность, s — скорость звука и C — константа деформационного потенциала; обычно $C \ll D$.

Таким образом, взаимодействия (2.6) и (2.9) являются дальнедействующими (L), тогда как (2.7) и (2.8) — короткодействующими (S), относительно масштаба длины a .

В дальнейшем везде, где не оговорено иное (см. разделы: е) гл. 2, в) гл. 3 и гл. 5), имеются в виду одноэлектронные АЛ состояния, в том числе поляронные АЛ состояния одноэлектронной системы (2.4).

б) П р е д е л ь н ы е с л у ч а и . С а м о с о г л а с о в а н н ы е
с о с т о я н и я

Можно различать предельные случаи поляронных АЛ состояний, соответствующие широкой или очень узкой блоховской электронной зоне:

$$\omega_{ph}\tau_t \equiv 2\omega_{ph}D^{-1} \ll 1 \text{ или } \omega_{ph}\tau_t \gg 1, \quad (2.10)$$

где τ_t — время электронного туннелирования; $\omega_{ph} \equiv \{\omega_p, \omega_0 \text{ или } \omega_D\}$. В предельном случае очень узких зон основное АЛ состояние подобно сильно локализованному состоянию Ванье как при слабой, так и в основном при сильной электрон-фононной связи (см. раздел д) гл. 2).

В наиболее актуальном для электронов (дырок) в полупроводниках случае при $\omega_{ph}\tau_t \ll 1$, главным образом обсуждаемом далее и рассмотренном в большинстве работ по теории поляронов^{1-5,9-13}, «неподвижное» АЛ состояние со скоростью $V(K) = 0$ и конечным радиусом r_p является основным состоянием системы, коль скоро соответствующие энергии системы (2.4) E_1 и АЛ электрона ε_1 таковы, что

$$E_1 < (\varepsilon(k))_{\min} \equiv 0, \quad \varepsilon_1 < 0, \quad |\varepsilon_1| \gg \omega_{ph}. \quad (2.11)$$

Последнее неравенство, соответствующее сильной электрон-фононной связи, означает, что движение электрона в локальной потенциальной яме, созданной в деформированной им решетке, адиабатически следует за изменениями деформации, в состоянии с дискретным уровнем $\varepsilon_1 (< 0)$, поддерживая своим полем существование этой деформации, в согласии с концепцией Ландау. Величина энергии $|\varepsilon_1|$, характеризующей такое самосогласованное основное АЛ состояние, и энергия $\delta_0^{(0)}$ деформации решетки АЛ электроном являются величинами одного порядка, $|\varepsilon_1| \sim \delta_0^{(0)}$ (см. (2.16)). Общее исследование структуры поляронных самосогласованных АЛ состояний при

$$\omega_{ph}\tau_t \ll 1, \quad |\varepsilon_1| \sim |E_1| \sim \delta_0^{(0)} \gg \omega_{ph} \quad (2.12)$$

может быть осуществлено в рамках подхода, развитого Пекаром^{4,5} и другими авторами (см. ²²). Этот подход основан на адиабатическом приближении при $|\varepsilon_1| \gg \omega_{ph}$ и квазиклассическом описании колебаний при $\delta_0^{(0)} \gg \omega_{ph}$ (b_λ, b_λ^+ и $q_\lambda \equiv b_\lambda + b_\lambda^+ - c$ -числа). Проблема сводится к решению задачи о минимуме энергии системы с заданным квазиимпульсом K , т. е. функционала $J[\psi, q_\lambda] \equiv \langle \psi | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle_0$:

$$\min_{(\psi, q_\lambda)} J[\psi, q_\lambda] = J_0^{(K)} \text{ или } \min_{(\psi)} J[\psi] = J_0^{(K)}, \quad (2.13)$$

при $\psi = \psi_0^{(K)}$ и $q_\lambda \equiv q_\lambda[\psi] = q_\lambda[\psi_0^{(K)}] \equiv q_\lambda^{(K)}$; здесь $J[\psi] = \min_{(q_\lambda)} J[\psi, q_\lambda]$; $\langle \dots \rangle_0$ — нулевое приближение по малому во: щению \hat{K}_{ph} (в адиабатическом приближении), а ψ и q_λ — варьируемые электронная волновая функция и нормальные координаты колебаний решетки; $J_0^{(K)}$ — низшая энергия системы в состоянии $(\psi_0^{(K)}, q_\lambda^{(K)})$ с заданным K . В частности, $E_1 = J[\psi_0^{(0)}] \equiv J_0^{(0)}$ — энергия основного состояния $(\psi_0^{(0)}, q_\lambda^{(0)})$ при $V(K) = 0$.
Согласованные вариации $J[\psi, q_\lambda]$ по ψ и q_λ соответствуют также условию Пекара для самосогласованного АЛ состояния $\psi_0^{(0)}$. Для последнего уравнение Шрёдингера является нелинейным. Это следует из соотношений, описывающих энергию системы $J[\psi]$ и электрона $E_e[\psi]$, а также изменение энергии системы $\delta[\psi]$ и смещение центров колебаний $q_\lambda[\psi] = b_\lambda[\psi] + b_\lambda^+[\psi]$ в деформированной решетке, при линейной реакции среды ($q_\lambda[\psi] \propto$

$\infty Q_f[\psi] \equiv \langle \psi | w_\lambda \exp(i\mathbf{r}\mathbf{r}) | \psi \rangle$ для заданного электронного состояния ψ :

$$J[\psi] = K_e[\psi] - \delta[\psi] = E_e[\psi] + \delta[\psi], \quad (2.14)$$

$$K_e[\psi] \equiv \langle \psi | \hat{K}_e | \psi \rangle, \quad \delta[\psi] = -\frac{1}{2} \langle \psi | \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} | \psi \rangle \equiv -\frac{1}{2} W[\psi] > 0. \quad (2.15)$$

Последовательный, фактически эквивалентный, подход в теории поляронных АЛ состояний был предложен Боголюбовым⁹, Тябликовым¹⁰ и другими авторами (см. ¹³) в рамках развитого ими метода адиабатической теории возмущений, в которой кинетическая энергия колебаний решетки играет роль малого возмущения. Этот метод, как и подход Пекара, адекватен при рассмотрении поляронных АЛ состояний, по крайней мере с малыми скоростями $|V(\mathbf{K})| \ll s$.

Анализ АЛ состояний большого ($\rho_p \gg a$) или малого ($\rho_p < a$) радиуса в (2.13)—(2.15) удобно производить соответственно в \mathbf{r} - или \mathbf{l} -представлении. В общем случае для поляронного основного АЛ состояния характерны соотношения

$$\varepsilon_{\text{opt}} - \varepsilon_{\text{th}} \equiv \varepsilon_R \approx \delta_0^{(0)} \equiv \delta[\psi_0^{(0)}] = -\frac{1}{2} W_0^{(0)} > 0, \quad (2.16)$$

$$\varepsilon_{\text{opt}} = |E_1| \equiv |E_e[\psi_0^{(0)}]|, \quad \varepsilon_{\text{th}} = |J_0^{(0)}| \equiv |E_1|, \quad W_0^{(0)} \equiv W[\psi_0^{(0)}],$$

т. е. энергия оптического франк-кондоновского перехода ε_{opt} электрона из АЛ состояния в блоховское (фотодиссоциации полярона) превышает энергию теплового перехода ε_{th} ; ε_R — соответствующая энергия релаксации решетки. Структура поляронных АЛ состояний определяется характером взаимодействия (2.3), дальнедействующего (2.6), (2.9) или короткодействующего (2.7), (2.8), а в последнем случае также размерностью d электронной подсистемы $d = 3, 2, 1$, обычно при трехмерном спектре фононов (в этом смысле далее обычно d именуется размерностью системы). Как правило, при условиях (2.12) имеются в виду АЛ состояния, соответствующие низким энергиям электрона $\varepsilon(\mathbf{k}) \ll D$.

Заметим, что рассматриваемую электрон-фононную систему можно аппроксимировать однозонной (в смысле (2.1)—(2.4)) моделью, по крайней мере, при условии

$$\delta_0^{(0)} \ll E_g, \quad (2.17)$$

которое обычно выполнено в кристаллах, в которых АЛ состояния носителей заряда являются определяющими (см. раздел г) гл. 2).

Энергия системы (2.1)—(2.3) при малых скоростях АЛ состояния

$$J_0^{(\mathbf{K})} = J_0^{(0)} + \frac{1}{2} M_{\alpha\beta}^{-1} (\mathbf{K} - \mathbf{K}_0)_\alpha (\mathbf{K} - \mathbf{K}_0)_\beta, \quad \alpha, \beta \equiv x, y, z, \quad (2.18)$$

определяется тензором $M_{\alpha\beta}$ эффективной массы трансляционного движения полярона (электрона и сопровождающей деформации), т. е. скаляром M в случае изотропной зоны, который для простоты мы и будем далее в основном иметь в виду. †

в) Д а л ь н о д е й с т в у ю щ и е в з а и м о д е й с т в и я . П о л я р о н

В простейшей модели (2.2)—(2.5) в (\mathbf{r} -представлении), пригодной для рассмотрения АЛ состояний большого радиуса $\rho \gg a$, как в трехмерной (3D), так и в 2D - и 1D-системах, в согласии с (2.14)—(2.15)^{4,5},

$$\left. \begin{aligned} J[\psi] &\equiv J_L[\psi] = K_e[\psi] - \delta_L[\psi], & K_e[\psi] &\approx \int d\mathbf{r} |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 (2m)^{-1}, \\ \delta[\psi] &\equiv \delta_L[\psi] = -\frac{e}{2} \int d\mathbf{r} \varphi_L(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r})|^2, \\ \varphi_L(\mathbf{r}) &= -\frac{e}{\kappa} \int d\mathbf{r}' |\psi(\mathbf{r}')|^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \propto r^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (2.19)$$

при $|\mathbf{r}| \equiv r \gg \rho$.

В основном АЛ состоянии ($\psi = \psi_0^{(0)}$, $\rho = \rho_p$) энергия системы ^{4,5} и эффективная масса полярона (при $K^2 \ll 2M\omega_p$) ²⁹ описываются соотношениями

$$J_0^{(0)} \equiv J_{0L}^{(0)} = -0,109\alpha^2\omega_p, \quad M = 0,02\alpha^4 m \quad (\gg m) \quad (2.20)$$

Изменение состояния ($\psi_0^{(0)} \rightarrow \psi$) неизбежно увеличивает энергию $J[\psi]$ системы. Как следствие, при масштабном преобразовании $r \rightarrow \gamma r$ и $\psi_0^{(0)}(r) \equiv \gamma^{-d/2}\psi_0^{(0)}(\gamma r) \rightarrow \psi(r) \equiv \psi_0^{(0)}(\gamma r)$ ($d = 3, 2$ или 1) функционал $J[\psi] \equiv \tilde{J}_L(\gamma)$ вообще должен иметь абсолютный минимум при $\gamma = 1$, если при этом модель континуума адекватна. Так, при (2.19) ^{5,25}

$$J_L[\psi] \equiv \tilde{J}_L(\gamma) = \gamma^2 K_e^{(0)} - \gamma \delta_{0L}^{(0)} \quad (2.21)$$

при $\gamma = 2K_e^{(0)}/\delta_{0L}^{(0)} = 1$ имеет единственный, конечный минимум. Соответствующее состояние $\psi_0^{(0)}$, имеющее конечный радиус в модели континуума (в которой расстояние a отождествляется с точкой), фактически отвечает плавной волновой функцией ($\sim \exp(-r/\rho)$) с радиусом $\rho \equiv a\beta^{-1}$, причем радиус основного поляронного состояния $\psi_0^{(0)}$ (полярона) ρ_p велик, $\rho_p \gg a$ (см. ^{5,25}):

$$\left. \begin{aligned} J_L[\psi_0^{(0)}] &\equiv \tilde{J}_L(\beta) = \beta^2 D - \beta \delta_{0L}^*, \\ \rho_p &\equiv a\beta^{-1} \approx \alpha\alpha^{-1} (ma^2\omega_p)^{-1/2} \sim \frac{\alpha\kappa m_0}{m} \gg a, \\ \tilde{J}_{0L}^{(0)} &\equiv \tilde{J}_L(\beta_0), \end{aligned} \right\} \quad (2.22)$$

где $D \equiv 1/ma^2$, $\beta = \beta_0 \approx 2\delta_{0L}^* D^{-1} (\ll 1)$ и $\delta_{0L}^* \equiv p_0 e^2 / 2\kappa a \gg \delta_{0L}^{(0)}$, $p_0 \sim 1$.

Как видно, уже при сколь угодно малых β (т. е. и деформациях) $\tilde{E}_{eL}(\beta) < \tilde{J}_L(\beta) < 0$, следовательно, блоховское состояние ($\beta \rightarrow 0$) нестабильно относительно перехода в поляронное состояние, и переход не связан с преодолением энергетического барьера. Причина, очевидно, в том, что поляронная (сферически симметричная) потенциальная яма $\psi_L(r)$ для электрона имеет при $r \gg \rho$ ($\geq \rho_p$) кулоновский характер; по этой же причине такой АЛ электрон — полярон большого радиуса характеризуется, помимо основного ($\psi_0^{(0)}$, $n = 0$), также серией возбужденных, водородоподобных АЛ состояний $\psi_n^{(0)}$ большого радиуса $\rho_p^{(n)} > \rho_p \equiv \rho_p^{(0)} \gg a$ ($n = 1, 2, \dots$) ^{4,5,13,21}. При учете (2.21) и (2.22) АЛ состояние $\psi_0^{(0)}$, энергетически выгоднее относительно блоховских, характеризуется соотношениями ^{4,57}

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{opt} &= -\varepsilon_1 = 2\delta_{0L}^{(0)} - K_e^{(0)} = \frac{3}{2} \delta_{0L}^{(0)} > 0, \\ \varepsilon_{th} &= -E_1 = -(\varepsilon_1 + \delta_{0L}^{(0)}) = \frac{1}{2} \delta_{0L}^{(0)}, \end{aligned} \right\} \quad (2.23)$$

$\varepsilon_{th} : K_e^{(0)} : \delta_{0L}^{(0)} : \varepsilon_{opt} : |W_0^{(0)}| = 1 : 1 : 2 : 3 : 4$. Из формул (2.20), (2.22) и (2.23) следует, в согласии с (2.12) и (2.16), что для полярона большого радиуса характерна адиабатическая сильная связь в том смысле, что

$$D \gg \delta_{0L}^* \gg \delta_{0L}^{(0)} = 2|E_1| \gg \omega_p \quad \text{и} \quad D\omega_p^{-1} \gg \alpha^2 \gg \alpha_0^2 \approx 10. \quad (2.24)$$

Следовательно, такие поляроны (поляроны Пекара) могут существовать лишь в ограниченной области значений α ^{5,21,22}, т. е. их распространенность в реальных веществах ограничена; по-видимому, наличие поляронов большого радиуса в ионных кристаллах (см. (2.6)) действительно еще однозначно не установлено ^{19,21,22}. Эффективная масса M полярона велика, $M \gg m$, являясь фактически мерой инерции поляризации решетки, сопровождающей движение АЛ электрона ^{12,29}. Характерные значения ρ_p , $\delta_{0L}^{(0)}$ и M при типичных $\alpha^2 \approx 30$, $\kappa \approx 10$, $m_0/m \sim 1$ и $\omega_p \leq 0,1$ эВ можно оценить так: $\rho_p \sim 10a$, $\delta_{0L}^{(0)} \leq 0,3$ эВ, $M \sim 10^2 m$ (см. ⁵). Для поляронов большого радиуса, порожденных пьезоакустическим взаимодействием (2.9), функционал $J[\psi]$ совпадает с (2.19) ³⁰.

С другой стороны, коль скоро

$$\rho_p < a, \text{ т е } \Lambda_L^* \equiv 2\delta_{0L}^* D^{-1} > 1, \quad (2.25)$$

существует полярон малого радиуса (малый полярон)^{31,32,19,21}, для которого роль параметра электрон-фононной связи играет величина

$$\Phi_0^* \equiv \delta_{0L}^* \omega_p^{-1} \approx \alpha \sqrt{\frac{D}{\omega_p}} \gg 1, \quad \Phi_0^* \gg \alpha_j^* \gg 1, \quad \text{при } \delta_{0L}^* \sim \delta_{0L}^{(0)}; \quad (2.26)$$

характерные $\delta \rho_{0L}^* \lesssim 0,3$ эВ и $\Phi_0^* \lesssim 10$, в согласии с условием (2.17) однозонности модели (при $E_g \gtrsim 1$ эВ).

Наиболее простым и характерным здесь является случай неадиабатического малого полярона^{19,21,31,32}, для которого, по определению, время электронного туннелирования τ_t заметно превышает время τ_{ad} взаимной подстройки электронного состояния и деформации решетки: $\tau_{ad} \sim (\delta_{0L}^* \theta)^{-1/2}$, при характерной энергии $\theta \equiv \max \{T; T_0 \equiv \frac{1}{2} \omega_{ph}\}$ (см. 21). (В 31 $\theta \sim \sim T_0 \sqrt{T/\delta_{0L}^*} < T$ при $T_0 \lesssim T \ll \delta_{0L}^*$.) Фактически при существенных $\Phi_0 \gg 1$ $\tau_{ad}^{-1} \gg \omega_{ph}$ ($= \omega_p$ для модели (2.19)), в согласии с (2.12); T — температура. В этом случае, при $\omega_{ph} \ll D/2 \ll \tau_{ad}^{-1}$, заведомо $\rho_p a^{-1} \ll 1$ и, следовательно, $\psi_0^{(0)}$ хорошо аппроксимируется электронным состоянием Ванье, $\psi_0^{(0)}(1) = \delta_{11_0}$. При этом оператор \hat{K}_e электронной кинетической энергии — малое возмущение в гамильтониане системы. Основной же вторично-квантованный гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\mathcal{H}}_{ph} + \hat{\mathcal{H}}_{int} + \hat{U}_c$ в I-представлении посредством известного канонического преобразования $\exp(-\hat{S}) \equiv \exp(\hat{S}^+)$ при $\hat{S} = \sum_{1\sigma} \hat{S}_1 \hat{n}_{1\sigma}$ и

$$\hat{S}_1 = N^{-1/2} \sum_{\lambda} X_{\lambda} (b_{\lambda} - b_{-\lambda}^+) \exp(i\mathbf{fl}), \quad (2.27)$$

приводится к гамильтониану $\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{\mathcal{H}}_{ph} + \tilde{\mathcal{H}}_p + \tilde{U}_p$ ($\hat{n}_{1\sigma}^{\pm}$ — операторы электронных чисел). Оператор $\tilde{\mathcal{H}}_{ph} = \sum_{\lambda} \omega_{\lambda} \hat{N}_{\lambda}$ описывает фононы со смещенными центрами ($X_{\lambda} = -\langle 1=0 | \exp(i\mathbf{fr}) \omega_{\lambda} | 1=0 \rangle \omega_{\lambda}^{-1}$) и $\tilde{\mathcal{H}}_p = \sum_{1\sigma} E_1 \hat{n}_{1\sigma}$, соответствует малым поляронам с энергией E_1 (отсчитанной от электронного уровня) на узле и энергией автолокализации W_1 , характеризующей выигрыш энергии при автолокализации, $E_1 = W_1 < 0$ (в модели (2.6), $|W_1| \sim \delta_{0L}^*$). Межполяронное взаимодействие $\tilde{U}_p = \hat{U}_c + \hat{U}_a$ включает, помимо хаббардовского отталкивания \hat{U}_c , также притяжение \hat{U}_a за счет обмена фононами (см. 19,21).

Оператор поляронной кинетической энергии $\tilde{K}_p = \exp(\hat{S}) \hat{K}_e \exp(-\hat{S})$ и оператор (в пространстве фононных чисел \hat{N}_{λ}) амплитуды поляронного туннелирования между ближайшими соседями \mathbf{g} , $\Delta_{\mathbf{g}} = J \exp(\hat{S}_0 - \hat{S}_{\mathbf{g}})$ определяют два существенно различных типа туннелирования малого полярона: когерентное и некогерентное (см. 19,21,31,32). Когерентное туннелирование, без изменения чисел фононов, описывается макроскопически конечной (при $N \rightarrow \infty$) амплитудой

$$\Delta = J \exp(-\Phi), \quad \Phi = N^{-1} \sum_{\lambda} |X_{\lambda}|^2 \sin^2 \frac{\mathbf{fg}}{2} \cdot \text{cth} \frac{\omega_{\lambda}}{2T} \geq \Phi_0 \equiv \Phi \quad (2.28)$$

($T = 0$),

определяющей зону малого полярона с шириной $D_p \approx 2z\Delta \ll D \approx 2zJ$ при актуальных здесь больших значениях параметра связи $\Phi_0 \gg 1$ ($\Phi_0 \sim \Phi_0^* \gg$

$\gg 1$); Φ растет и Δ убывает с ростом T , причем $\Phi \sim \Phi_0 T/T_0$ и Δ экспоненциально быстро спадает при $T \gg T_0$. Фактически, $D_p \ll \omega_{ph}$ и $D_p < T$ при не очень низких T , а эффективная масса такого малого полярона $M \approx 1/D_p a^2$ экспоненциально велика (по сравнению с m) за счет большой инерции сильной околоэлектронной деформации решетки при трансляции.

Некогерентное туннелирование (перескок) происходит при испускании и/или поглощении фонона и описывается средней вероятностью (в 1 с) W_h , растущей с ростом T ($W_h \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$). В этом смысле, перескоки термически активированы, в частности, при достаточно высоких $T > T_1$ соответствуют многофононному процессу; $T_1 < T_0$ при $\Phi_0 \gg 1$, в частности, $T_1 \approx T_0/\ln(4\Phi_0)$ в случае (2.6). Так, при $T \gg T_0$

$$W_h \simeq \frac{J^2 \sqrt{\pi} \exp(-\mathcal{E}/T)}{2 \sqrt{2\mathcal{E}T}}, \quad (2.29)$$

$$\mathcal{E} = N^{-1} \sum_{\lambda} 2|X_{\lambda}|^2 \sin^2 \frac{fg}{2} \cdot \omega_{\lambda} \equiv \gamma_1 \Phi_0 T_0 \gg T_0, \quad (2.30)$$

$$\gamma_1 \sim 1; \quad \gamma_1 = 1 \quad \text{при} \quad \omega_{ph} = \omega_p.$$

Как видно из (2.28)—(2.29), движение неадиабатического малого полярона определяется перескоками при высоких $T > T_{\Gamma}$ или когерентным туннелированием при $T < T_{\Gamma}$, так что динамические и кинетические характеристики изменяются немонотонно с T , имея минимум (или максимум) при $T \approx T_{\Gamma}$; характерные для конкретных явлений температуры T_{Γ} имеют общий масштаб величины, $T_{\Gamma} \sim T_1$ (см. 21).

Ситуация для адиабатического малого полярона, для которого $\tau_{ad} \geq \tau_t$, была исследована в ряде работ (см., например, 33,34). Такой полярон описывается самосогласованным состоянием $\psi_0^{(0)}$, структура и свойства которого определяются конкретной структурой электрон-фононной связи в дискретной решетке. В качественном аспекте, свойства подобных поляронов являются промежуточными между свойствами неадиабатического малого полярона и полярона большого радиуса.

Особенности эффектов, обусловленных поляронами большого радиуса, определяются тем, что для них эффективная масса велика ($M \gg m$), дискретный спектр включает возбужденные состояния $\psi_n^{(0)}$ с энергиями $J_n^{(0)} > J_0^{(0)}$ и поляронный потенциал $\varphi_L(r) \propto r^{-1}$ при $r \geq \rho_p \gg a$. Так, в сильном статическом однородном электрическом поле F полярон автоионизуется с вероятностью $p_{AI} \propto \exp(-F_1/F)$ (и термически ионизируется с вероятностью $p_{TI} \propto \exp(-\varepsilon_I T)$, $d\varepsilon_I/dF < 0$) при $F_1 \ll F \ll F_2 \sim \delta_{0L}^{(0)}/|e|\rho_p$, $F_1 \sim \sim F_2(\delta_{0L}^{(0)}m\rho_p^2)^{-1/2} \ll F_2$, и заведомо превращается в блоховский электрон с гораздо большей подвижностью при $F \geq F_2$ (см. 35,21). При этом проводимость с ростом F может резко возрасти при $F \approx F_{cr}$, $F_1 < F_{cr} \ll F_2$; характерные $F_1 \sim 0,1F_2$ и $F_2 \geq 10^6$ В/см при типичных $\delta_{0L}^{(0)} \leq 0,1$ эВ. Эти и другие особенности кинетики поляронов большого радиуса 12,19–22, в частности, полюсы резонансного инфракрасного поглощения при переходах $\psi_0^{(0)} \rightarrow \psi_n$ ($n = 1, 2, \dots$), $\omega \geq \omega_{21} \approx 0,14 \alpha^2 \omega_p$, по-видимому, еще не обнаружены.

Для малых поляронов основные особенности проводимости $\sigma'(\omega, T) = \text{Re } \sigma(\omega, T)$ и других кинетических коэффициентов определяются экспоненциальной малостью амплитуды туннелирования и конкуренцией когерентного туннелирования (σ_c) и перескоков (σ_h), $\sigma'(\omega) \approx \sigma_c(\omega) + \sigma_h(\omega)$. При этом (см. 21,17)

$$\sigma_c(\omega) \sim \sigma_c(1 + \omega^2\tau^2)^{-1} \quad \text{при} \quad \omega < T,$$

$$\sigma_c \equiv \sigma_c(\omega = 0) \sim N_p \frac{e^2\tau}{M} \min \left\{ \frac{\Delta}{T}; 1 \right\}, \quad (2.31)$$

$$\sigma_h \sim N_p |e|\mu_0 \frac{2W_h}{T} \quad \text{и, при} \quad \omega > T, \quad \sigma_h(\omega) \propto \omega^{-1} \exp \left[-\frac{(\omega - \omega_m)^2}{2\Gamma^2} \right]; \quad (2.32)$$

здесь $\mu_0 \equiv |e| a^2 / \hbar$ (~ 1 см²/В·с), $\omega_m \equiv 4\epsilon$, $\Gamma \approx \sqrt{4\epsilon\theta}$; $N_p a^3$ — равновесная концентрация поляронов, τ — не возрастающее с ростом T транспортное время релаксации (формула $\sigma_c \sim N_p e^2 \tau \Delta / MT$ верна при $\Delta < \theta \equiv \min\{T; T_0\}$, т. е. не только при слабом рассеянии, $\tau \Delta \gg 1$, поскольку рассеяние определяется при $\Delta < T$ сохранением энергии фононов). Из (2.31) и аналогичных формул следует, что зависимости $\sigma'(\omega, T)$ немонотонны, с минимумами при $T = T_{\min}$ и $\omega = \omega_{\min}$ и максимумами при $T = T_{\max}$, $\omega = \omega_{\max}$, причем $T_{\min} \sim T_\Gamma < T_0$, $\omega_{\min} < \omega_{ph}$, а также $T_{\max} \sim \epsilon \gg \omega_{ph}$, $\omega_{\max} = \omega_m \gg \omega_{ph}$ (так, $\sigma'(\omega) \approx \sigma_c(\omega)$ при $T < T_{\min}$, $\omega < \omega_{\min}$, но $\sigma'(\omega) \approx \sigma_h(\omega)$ при $T > T_{\min}$ или $\omega > \omega_{\min}$). Такие немонотонные зависимости, в частности, широкий гауссов пик поглощения при $\omega \approx \omega_m$ при франк-кондоновском переходе в блоховское состояние, и аналогичные зависимости $\tilde{\sigma}(F; T) \approx \sigma'(\omega_F, T)$ при $\omega_F \equiv |e| Fa > T$ в сильном поле F , характерные для малых поляронов и отчасти обнаруженные на опыте, обсуждаются более подробно, например, в ^{17,21}.

В целом, многие необычные свойства поляронных АЛ состояний определяются многофононными переходами благодаря значительному различию локальных деформаций решетки в начальном и конечном состояниях системы при $\Phi_0 \gg 1$ (см. ^{5,13,19,22}).

Рассмотрению проблем теории поляронных АЛ состояний в кристаллах посвящено большое число работ, включая ряд обзоров (см. например, ^{5,13,19-22}). Так, в ^{38,39} существенно развит метод адиабатической теории возмущений ^{9,10} в теории полярона большого радиуса, а в ⁴⁰ содержится дальнейшее развитие теории малого полярона.

Г) Короткодействующие и «смешанные» взаимодействия в 3D-системах. Поляроны малого радиуса

Функционалы $J_S[\psi]$ и $E_{eS}^{\infty}[\psi]$ в простейшей модели (2.5) изотропного континуума при учете (2.7) или (2.8) и (2.14), (2.15) имеют тот же вид (2.14), но ^{41,8,25,42,22}

$$\begin{aligned} \delta_S[\psi] &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 \varphi_S(\mathbf{r}), \\ \varphi_S(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r}' Z_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}')|^2 \approx E_S |\psi(\mathbf{r})|^2. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Масштабное преобразование $\mathbf{r} \rightarrow \gamma \mathbf{r}$ приводит для рассматриваемых здесь 3D-систем, взамен (2.21), к соотношению

$$J_S[\psi] = \tilde{J}_S(\gamma) = \gamma^2 K_e^{(0)} - \gamma^3 \delta_{0S}^{(0)}, \quad (2.34)$$

так что $\tilde{J}_S(\gamma)$ не ограничена снизу. Эта функция имеет два минимума, $\tilde{J}_S(\gamma) = 0$ при $\gamma = 0$, т. е. $\rho = \infty$, и $\tilde{J}_S(\gamma) \rightarrow -\infty$ при $\gamma \rightarrow \infty$, т. е. $\rho \rightarrow 0$, которым в модели континуума соответствуют блоховские состояния у дна зоны проводимости и АЛ состояния малого радиуса ($\rho_p < a$) ⁴¹. Последнее, по существу, имеет такие же свойства и характеризуется такими же соотношениями, в частности, (2.25)–(2.32), что и малый полярон, о котором шла речь в разделе 2.3. В этой связи, вообще, АЛ состояние малого радиуса в электрон-фононной системе (2.1)–(2.5) называют поляроном малого радиуса или малым поляроном, в частности, неадиабатическим малым поляроном ($\rho_p < a$). Подобное АЛ состояние реализуется при

$$\Lambda > \Lambda_c, \quad \Lambda = 2|W_1|D^{-1} \approx \delta_{0S}^{(0)} D^{-1}, \quad (2.35)$$

где критическое значение Λ_c , грубо говоря, лежит между 1 и 10 (см. ²⁵). Вместе с тем, в отличие от случая (2.21), в случае (2.34), вообще говоря, АЛ

состояние конечного радиуса в модели континуума, т. е. фактически поляронное АЛ состояние большого радиуса ($\rho_p \gg a$), не реализуется.

Дальнодействующее взаимодействие (2.6) (или (2.9)), существующее в ионных кристаллах наряду с короткодействующим, может заметно изменить характер и условия образования АЛ состояния электрона²⁵. Так, когда оба типа взаимодействия связаны с одной ветвью фононов (например (2.8) и (2.9) для акустических фононов), то, помимо вклада $\delta_L[\psi] + \delta_S[\psi]$ в $\delta[\psi]$ возникает также смешанный член^{25,22}:

$$\delta_{см}[\psi] = 2E_S E_L S_0^{-1} \iint dr dr' |\psi(r)|^2 |\psi(r')|^2 |r-r'|^{-2}, \quad (2.36)$$

который при масштабном преобразовании вносит дополнительный вклад $-\gamma^2 \delta_{см}[\psi_0^{(0)}]$ в (2.34). При $\Lambda_S < 1$, когда малый полярон при короткодействующей связи не существовал бы, вклады $\delta_L[\psi]$ и $\delta_{см}[\psi]$ в $\delta[\psi]$ могут привести к образованию полярного АЛ состояния большого радиуса в области достаточно больших $\alpha^2 > \alpha_1^2$, включающей также меньшие α^2 , чем в случае (2.21) (при $E_S = 0$), поскольку $\alpha_1^2 < \alpha_0^2 \approx 10$ (см. ²⁵).

В рассматриваемой ситуации, соответствующей широким электронным зонам ($D \gg \omega_{ph}$) и описываемой, в частности, соотношениями (2.27), заведомо должно быть $|W_1| \omega_{ph}^{-1} \gg 1$ при $\Lambda > \Lambda_c$, так что малый полярон соответствует очень сильной электрон-фононной связи, $\Phi_0 \gg 1$. Выражение, аналогичное (2.33) в I-представлении, позволяет оценить $\delta_0^{(0)} = c_1 E_S a^{-3}$, $c_1 \sim 1$ при $\sum_1 |\psi(1)|^4 \sim a^{-3}$, так что $\Lambda_S^{(ac)} = c_2 C^2 / M_a s^2 D$, $c_2 \sim 1$ и $\Lambda_S^{(opt)} \sim w_0^2 / D \omega_0$

при $D = 1/ma^2$; если оценить $C = c_3 D$, $D = c_4 E_{ат}$, $s/a = c_5 \sqrt{m_0/M_a} E_{ат}$ при $E_{ат} = m_0 e^4 / \hbar^2$, приняв, что $c_3 \sim c_4 \sim c_5 \sim 1$, то $\Lambda_S^{(ac)} \sim 1$ (см. ²²). При этом можно полагать, что в (неметаллических) кристаллах именно короткодействующая связь с акустическими фононами определяет возникновение АЛ состояний, качественно отличающихся от блоховских состояний в зоне, и что основным состоянием электрона является, главным образом, малый полярон с присущими ему характерными свойствами. Некоторые из таких эффектов действительно обнаружены для дырок в широкощелевых кристаллах — щелочно-галогидных (ШГК)⁴³ и криокристаллах⁴⁴, а также в некоторых соединениях переходных металлов (см., например, ^{19-21,45}). Эффекты АЛ состояний носителей тока, однако, не наблюдались в алмазоподобных полупроводниках (Ge, A_3B_5 и т. п.), в которых, грубо говоря, значение $\Lambda_S^{(ac)}$ лежит между 0,1 и 1. Этот факт, в согласии с ^{46,22}, можно связать с малостью ширины E_g щели в таких веществах, $E_g \ll D$ (фактически, $E_g \leq 1$ эВ), поскольку при $\Lambda_S > \Lambda_c$, т. е. $|W_1| > E_g$, кристалл стал бы нестабильным относительно спонтанного рождения электронно-дырочных пар и фазового перехода в широкощелевую диэлектрическую фазу.

В случае (2.34) анализ критических точек (минимумов, седловых точек и т. п.) адиабатического анализа локального потенциала $\Psi_0(q)$ в конфигурационном пространстве (q) в основном АЛ состоянии,

$$\Psi_0(q) = \varphi_0(\Delta) = \frac{1}{2} S_0 \int dr \Delta_0^2(r) + \iint dr dr' |\psi_0'(r')|^2 Z_S(r, r') \Delta_0(r'), \quad (2.37)$$

приводит к уточнению отмеченных особенностей электронных состояний по сравнению с таковыми в случае (2.21) (см. ^{22,25}). Именно, малые поляроны соответствуют локальному ($\Lambda_S < 1$) или абсолютному ($\Lambda_S > 1$) минимуму $\Psi_0(q)$ при конечной деформации ($q = q_0 \neq 0$), т. е. метастабильному или стабильному (основному) состоянию системы, и характеризуются $\Phi_0 \sim |W_1| \omega_{ph}^{-1} \gg \Lambda_S$, т. е. очень сильной связью, $\Phi_0 \gg 1$ при $\Lambda_S > 1$. С другой стороны, блоховские состояния около дна зоны оказываются также самосогласованными, соответствуя локальному (при $\Lambda_S > 1$) или абсолютному (при $\Lambda_S < 1$) минимуму $\Psi_0(q)$ при $q = 0$, и характеризуются параметром

связи $\alpha_{ac} \sim \Lambda_S^{(ac)} \sqrt{m/M_a}$ и временем жизни $\tau(\varepsilon)$ электрона с энергией ε , $(\varepsilon\tau(\varepsilon))^{-1} \sim \alpha_{ac}$, причем $\alpha_{ac} \ll \Lambda_S^{(ac)}$ и α_{ac} мала ($\alpha_{ac} < 1$) при реальных, не очень больших $\Lambda_S^{(ac)}$ ($\ll 10$). Переход от стабильного АЛ состояния к стабильному блоховскому состоянию при уменьшении Λ_S оказывается разрывным при критическом значении $\Lambda_S = \Lambda_c$, как и можно было ожидать из физических соображений (см. ^{22,25,42}, а также ⁴⁷).

В целом, описанная ситуация соответствует существованию в q -пространстве энергетического барьера между минимумами $\Psi_0(0)$ и $\Psi_0(q_0)$ адиабатического потенциала $\Psi_0(q)$ — автолокализационного барьера, в согласии с первоначальной идеей Ландау (см. ²²). Этот барьер существует, когда его высота $H_b \gg \omega_b/2$, где ω_b — характерная частота фононов, определяющих барьер, например, $\omega_b^{(opt)} \sim \omega_0$ или $\omega_b^{(ac)} \sim s/r_b$, где r_b — пространственный размер барьера. Оценки H_b и r_b из размерных соображений имеют в модели континуума следующий вид ^{8,48,22}:

$$H_b = c'_1 \left(\frac{E_S}{2} \right)^{-2} m^{-3} \sim E_S r_b^{-3} \sim D \Lambda_S^{-2}, \quad r_b \sim m E_S \sim a \Lambda_S, \quad c'_1 \sim 1 \quad (2.38)$$

(точнее, $c'_1 = 1,11$ ^{49,22}). Эти оценки справедливы, по крайней мере, при $r_b \gg a$, т. е. $\Lambda_S \gg 1$, последнее условие, согласно ^{50,48}, выполнено в легких кристаллах, например, Ne. При нарушении этого условия оценки H_b зависят от конкретной структуры решетки и, следовательно, затруднены. Однако в общем случае можно полагать, что H_b растет с ростом m и убывает с ростом Λ_S , так что АЛ барьер определяется не только чисто решеточными свойствами, но и характером образования (распада) узельного волнового пакета, АЛ состояния в узле. Заметим, что дальнедействующее $\delta_L[\psi]$ и «смешанное» $\delta_{cm}[\psi]$ взаимодействия обуславливают с ростом E_L понижение АЛ барьера вплоть до его исчезновения ^{22,25,42}.

Наличие АЛ барьера может обеспечить при $\Lambda_S^{(ac)} > 1$ сосуществование основного АЛ и метастабильных блоховских состояний, поскольку последние все еще могут рассеиваться слабо, $(\tau(\varepsilon)\varepsilon)^{-1} \sim \alpha_{ac} \ll 1$ при $\alpha_{ac} \ll \Lambda_S^{(ac)}$ (см., например, ^{8,22,45,50}). Это явление, как и вообще наличие АЛ барьера, может приводить к существенным особенностям кинетических явлений (например, проводимости, поскольку подвижность блоховского электрона много больше подвижности малого полярона) и оптических эффектов (см. выше ^{22,48,51}). Теоретический анализ времени автолокализации τ_{AL} при наличии АЛ барьера был дан в ряде работ ^{22,48,51-54}, в частности, при низких температурах последовательная теория была развита в ⁵³. (Теоретический анализ имеет кое-что общее с анализом времени квантовой диффузии τ_D ; см., например, ^{17,55}.) Вопросы теории сосуществования блоховских и АЛ состояний в кристаллах обсуждались и в других работах (см., например, ⁵³). С другой стороны, наличие малых поляронов и характерных для них эффектов, в том числе, эффектов сосуществования, в кристаллах со значительной долей короткодействующих электрон-фононных взаимодействий было экспериментально обнаружено в ряде соединений переходных и редкоземельных металлов (LaCoO_3 , V_2O_5 , SrTiO_3 и др.), в которых $D/2 \ll 0,1$ эВ и $\{|W_1|, \xi\} \ll 0,3$ эВ (см. ^{45,20}) и, наиболее надежно, для дырок в ЦГК ⁴³ и кристаллах Ag ⁴⁴.

д) 1D- и 2D-системы.

Э ф ф е к т ы з о н н о й с т р у к т у р ы в 3D-с и с т е м а х.
П р е д е л ь н о у з к и е з о н ы

Свойства и условия существования АЛ состояний электрона в 1D-системах с определяющей короткодействующей электрон-фононной связью могут значительно отличаться от таковых в 3D-системах. Для таких систем масштабное преобразование $\mathbf{r} \rightarrow \gamma \mathbf{r}$ в модели изотропного континуума приводит, вза-

мен (2.34), к формуле

$$J_S[\psi] \equiv \tilde{J}_S(\gamma) = \gamma^2 K_e^{(0)} - \gamma^d \delta_{0S}^{(0)}, \quad d = 1, 2. \quad (2.40)$$

Так, при $d = 2$ (в слоистых, сильно анизотропных 3D-кристаллах или на их поверхности, и т. п.) отношение обоих членов $\delta_{0S}^{(0)}/K_e^{(0)}$ не зависит от γ и, согласно (2.33), определяется величиной параметра $mE_S/2$, критическое значение которого $(mE_S/2)_{cr} = 2,88$ ^{49,48,22}. При $mE_S/2 < 2,88$ АЛ состояние не существует, тогда как при $mE_S/2 > 2,88$ существует АЛ состояние малого размера ($\rho_p \ll a$) и АЛ барьер отсутствует (эффект анизотропии фононного спектра исследовался в⁵⁷). Отсутствие АЛ барьера в 2D- и 1D-системах следует из (2.38), при замене $m^3 \rightarrow m_1 m_2 m_3$, $m_3 \rightarrow \infty$ (2D) или $m_2 \rightarrow \infty$, $m_3 \rightarrow \infty$ (1D) ($m_{1,2,3}$ — эффективные массы анизотропной зоны)⁴⁸. В 1D-системе основное АЛ состояние является поляроном малого ($\rho_p \ll a$) или даже большого ($\rho_p \gg a$) размера, поскольку $J_S[\psi]$ подобен $J_L[\psi]$ в 3D-системе (см. (2.21)). Теория АЛ состояний в 1D-системах (на дислокациях или полимерных цепях и т. п.) была разработана детально в ряде работ^{8,31,58-60}.

Специфические электронные АЛ состояния с размером $\rho_p \gtrsim a$, подобные полярону сильной связи с константой $\alpha_*^2 \sim \sqrt{M_a/m_0} \sim 10$ и эффективной массой $M \sim \alpha_*^4 m$, могут существовать в 1D диэлектриках Пайерлса — Фрёллиха: основным АЛ возбуждением является солитон, который может иметь заряд $e^* = e$ при нулевом спине или быть нейтральным ($e^* = 0$) со спином $1/2$, и автолокализация происходит безбарьерно за время $\sim 10^{-13}$ с^{61,62}. Подобные замечательные АЛ состояния обнаружены в цепях полиацетилена^{61,62}. Взаимодействие между цепями может исказить или уничтожить такие состояния⁶¹.

Вырождение электронной зоны, которое обычно учитывается заменой операторов K_e из (2.2) и $\hat{\mathcal{H}}_{int}$ из (2.3) матричными выражениями с рангом, равным кратности вырождения (см., например,⁶³), может качественно изменить некоторые характеристики поляронных АЛ состояний и привести к возникновению новых типов таких состояний. Как показано в⁶⁴, вырождение зоны приводит к спонтанному нарушению симметрии АЛ барьера, приобретающего вытянутую или сплюснутую форму, и, следовательно, играет существенную роль в кинетике автолокализации. В этой же связи вырождение зоны может приводить к низкосимметричным (при нарушении симметрии решетки) поляронным состояниям малого радиуса, в частности, двухцентровым (квазимолекулярным), например V_K -центр в ШГК⁴³ или R_2^+ -центр в криокристалле Ag⁴⁴. Подобные низкосимметричные АЛ состояния могут быть существенными в процессах образования и преобразования дефектов (см. ^{42-44,22,51}). Вырождение зоны приводит также к понижению симметрии пекаровского полярона большого радиуса (2.19)–(2.24), у которого при этом появляются вращательные степени свободы⁶⁴. Сферическая симметрия полярона большого радиуса теряется также в случае многоэллипсоидной анизотропной (невыврожденной) зоны⁶⁵.

АЛ состояние малого размера ($\rho_p > a$) может быть основным состоянием широкозонного электрона ($D \gg \omega_{ph}$) даже в случаях электронно-фононной связи более слабой, чем требуется критериями (2.25) и (2.35). Это может иметь место, в частности, для высокоэнергетического блоховского электрона в определенных областях k -пространства, например, в области, где эффективная масса отрицательна (или велика и положительна); подобные АЛ состояния и эффект сосуществования их и блоховских состояний могут проявиться в неравновесных электронных явлениях²⁸.

В случае предельно узких электронных зон ($D/2\omega_{ph} < 1$) основное состояние электрона подобно малому полярону ($\psi_0^{(0)}(I) = \delta_{1,1c}$) при произвольной связи с фононами, а АЛ барьер фактически отсутствует (см. ^{21,22}). Однако зависимость вероятности туннелирования $\Delta(T)$, $W_p(T)$ от T может значительно отличаться от таковой для малых поляронов. Это различие

возникает при сильной зависимости электронной амплитуды туннелирования $J(q)$ от атомных смещений q . При этом туннелирование фактически происходит при атомных конфигурациях, близких к экстремальной ($q = q^*(T)$), возникающей вследствие конкуренции сильного роста $J(q)$ и спада вероятности $P(q)$ атомных смещений с их ростом⁶⁶. Этот эффект «флуктуационного приготвления» пониженных барьеров приводит к росту $\Delta(T)$ с ростом T в противоположность спаду для малых поляронов,

$$\Delta \approx J(q^*) \exp[-\Phi(T) - \varphi(T)], \quad \varphi(0) \gg \{\Phi(0), 1\}, \quad (2.42)$$

поскольку $\varphi(T)$ убывает с T . С другой стороны, W_n/Δ^2 растет с ростом T , и область T , в которой преобладают перескоки, может заметно возрасти по сравнению с характерной для малого полярона. Для электрона экстремальная конфигурация может соответствовать приближенной паре атомов^{67,17} (ср. движение R_2^+ -центров в Ag)⁴⁴.

е) Двухэлектронное АЛ состояние. Биполярон

Поляронное двухэлектронное АЛ состояние с энергией E_2 может стать энергетически выгоднее одноэлектронного с энергией E_1 , когда эффективная корреляционная энергия пары отрицательна⁶⁸:

$$U = E_2 - 2E_1 = U_c + W_2 - 2W_1 < 0, \quad W_n < 0 \quad (n = 1, 2) \quad (2.43)$$

(W_2 — энергия автолокализации пары). При этом имеет место эффективное притяжение в такой паре, поскольку притяжение за счет обмена фононами преобладает над межэлектронным отталкиванием с характерной энергией $U_c > 0$. Свойства и фактические условия существования таких АЛ пар, синглетное ($\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 = 0$) основное состояние которых обычно имеется в виду и часто называют биполяронным, исследованы в ряде работ (см., например, ^{13,68-72}).

В⁶⁹ исследовались свойства и критерии реализации биполярона большого радиуса ρ_{2p} ($\sim \rho_p \gg a$), с эффективной массой $M_2 \sim M$ в 3D-системе — ионном кристалле за счет дальнегодействующего взаимодействия (2.6), и считалось, что помимо (2.24) должно выполняться весьма жесткое ограничение $\kappa_\infty \kappa_\infty^{-1} < 0,05$ (т. е. $\kappa_0 \gg 10^2$ при $\kappa_\infty \gg 5$). При этом были бы малы как U_c ($\sim e^2/\kappa_0 \rho_p$), так и $|U|$ (если $U < 0$), $|U| \leq 0,1$, $|E_1| \leq 0,01$ эВ при $|E_1| \leq 0,1$ эВ). Однако наличие самосогласованного основного состояния синглетного биполярона большого радиуса в 3D-системе вряд ли можно считать строго установленным. По-видимому, экспериментальных свидетельств существования биполяронов большого радиуса в 3D-системах также нет (см., например, ¹³). Как фактически отмечалось (см. ⁴²⁶), дальнегодействующее взаимодействие (2.6) (или (2.9)), экранирующее межэлектронное отталкивание, может приводить в 3D-системах к образованию биполяронов «слабой связи» (биполяронов большого радиуса и т. п.), $|U| \ll |W_1|$, лишь за счет квантовых свойств взаимодействующих частиц; наиболее же существенны здесь, скорее, короткодействующие взаимодействия типа (2.7) или (2.8), приводящие к существованию стабильных биполяронов малого радиуса (малых биполяронов).

Для малых биполяронов и поляронов в системе (2.27), как легко видеть, $W_2 = 4W_1$, так что $U < 0$ при $U_c < 2|W_1|$ (см. ⁶⁷⁻⁷²). Типичные оценки $|W_1| \sim 0,1 C^2/M_a s^2 \leq 0,1 - 0,3$ эВ¹⁹⁻²¹ и $U_c \leq 0,3$ эВ⁷³ позволяют полагать, что может быть как $U < 0$, так и $U > 0$ при $U \leq 0,1 - 0,3$ эВ. В этой связи можно ожидать существования малых биполяронов в соединениях переходных металлов, имеющих большие κ_0 ($\gg \kappa_\infty$) или/и $\omega_D \omega_{ph} \gg 1$. В согласии с этим, в⁷⁴ экспериментально найдено, что носители тока в WO_3 — одноцентровые биполяроны, а в⁷⁰⁻⁷¹ полагают, что двухцентровые биполяроны

($Ti^{3+} - Ti^{3+}$) определяют основное состояние кристалла Ti_4O_7 . Подвижность такого биполярона должна быть значительно меньше, чем подвижность малого полярона (см. ⁷⁰⁻⁷²); малые биполярны и поляроны могут сосуществовать в системе *).

Из изложенного нетрудно видеть также, что при достаточно малой $U_c (< 2 |W_1|)$ малые биполярны могут существовать, даже когда электрон-фононная связь недостаточно сильна для реализации малого полярона (см. (2.35)). Более того, двухэлектронные состояния с $U < 0$, напоминающие куперовскую пару ⁷⁵, могут образоваться и при слабой электрон-фононной связи: 1) в областях k -пространства, которых эффективная масса зонного электрона $m(k) (> 0)$ велика или $m(k) < 0$ (см., например, ^{28,60,76}); 2) в 1D- и отчасти в 2D-системах с электрон-фононным взаимодействием (2.3) ⁷⁷. В диэлектриках Пайерлса — Фрелиха могут существовать бесспиновые заряженные пары связанных солитонов ^{61,62}.

ж) АЛ электроны в антиферромагнетике

В антиферромагнитном широкозонном полупроводнике основное состояние электрона проводимости может быть АЛ состоянием большого радиуса ($\rho_M \gg a$), которое часто называют спиновым поляроном ^{26,27}. Последний возникает вследствие обменной $s - d$ ($s - f$)-связи электрона со спинами S_a , окружающими магнитных атомов, когда $D \gg |A_0| S_a \gg T_N$; A_0 — параметр связи, T_N — точка Нееля. В процессе АЛ, в определенной области большого радиуса $\rho_M \gg a$ около электрона спины атомов (S_a) ориентируются по спину ($A_0 > 0$) или против спина ($A_0 < 0$) электрона (σ); вдали от границы внутри этой области угол θ_0 между спинами (S_a, σ) практически не зависит от электронного поля. В этом смысле имеет место нелинейная реакция среды, в отличие от линейной реакции для поляронных АЛ состояний. Как и в (2.13), энергия E_{1M} и радиус ρ_M спинового полярона определяется при минимизации энергии системы $J_M^{(0)}[\psi]$ (в модели континуума):

$$J_M^{(0)}[\psi] \equiv J_M[\psi]_{V(k)=0} \approx -\frac{1}{2} |A_0| S_a + K_e(\rho) + U_M(\rho), \quad (2.44)$$

где $K_e(\rho) \approx 1/2 m \rho^2$; $U_M(\rho) \approx \beta_d T_N (\rho/a)^d$, $\beta_d \sim 1$ ($d = 3, 2, 1$). При этом, при $d = 3$

$$\rho_M \approx a \left(\frac{D}{T_N} \right)^{1/5} \text{ и } J_M[\psi_0^{(0)}] = E_{1M} \approx -\frac{1}{2} |A_0| S_a + c_1 D^{3/5} T_N^{2/5} < 0, \quad (2.45)$$

при $T_N \leq c_2 |A_0| S_a |^{5/2} D^{-3/2}$; $c_1 \sim 1$, $c_2 \sim 0,1$. Спиновый полярон является самосогласованным АЛ состоянием большого радиуса для электрона в области созданной им другой, почти ферромагнитной, фазы; с ростом T такое АЛ состояние разрушается ^{26,27,78,79} **). Подобные АЛ состояния могут возникать и в антиферромагнитной фазе хаббардовского полупроводника

*) Конечная подвижность малого биполярона в кристалле определяется малой эффективной амплитудой туннелирования, которая для низкотемпературного когерентного переноса характеризуется величиной $\sim \Delta^2 |U|^{-1} \ll \Delta$ при $\Delta \ll U$ (см. (2.28)); см. ^{72, 150}, а также ⁷¹. Ранее в ¹⁵¹ была отмечена возможность подобного биполяронного переноса в рамках феноменологического гамильтониана Хаббарда с отрицательной корреляционной энергией $U < 0$. В ¹⁵¹ и еще раньше в ^{152a} (см. также ^{152b}) было заключено, что в кристаллах возможно зарядовое упорядочение локализованных на узлах электронных пар с $U < 0$ (см. также ⁷⁰⁻⁷²). В ряде недавних работ (см. ^{72a, 150, 153, 154}) была развита теория сверхпроводимости в узкозонных сверхпроводниках, которая определяется конденсатом малых биполяронов и подобна рассмотренной давно ¹⁵⁵ сверхпроводимости в системе с пространственно неперекрывающимися электронными «квазимолекулами». Заметим также, что при достаточно сильной электрон-фононной связи система многих малых поляронов способна перейти в диэлектрическое состояние (см. ^{72, 150-154}).

**) При $D \ll |A_0| S_a$ и $T_N \ll |A_0| S_a$ такое АЛ состояние не возникает ни при $T = 0$ ^{27, 81}, ни при конечных T ⁸².

(см. ^{80,78}). Взаимодействие электрона с фононами повышает стабильность спинового полярона (см., например, ⁷⁹). Однако при достаточно сильной электрон-фононной связи носитель тока, скорее, есть малый полярон в антиферромагнитном кристалле, движение которого имеет особенности. Так, согласно ⁸³, перескоки малого полярона при $T < T_N$ между различными магнитными подрешетками сопровождаются изменением окружающей спиновой конфигурации, причем энергия активации перескоковой подвижности $\mu_h \sim \mu_0 z W_h / T$ (см. (2.32)) возрастает на величину $\sim T_N$; такой эффект, по-видимому, обнаружен в NiO *).

3. АВТОЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ НА ДЕФЕКТАХ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Дефект кристаллической решетки, в том числе примесный центр, притягивающий электрон, может способствовать образованию основного АЛ состояния электрона, когда такое состояние не существует в регулярном кристалле. Подобное явление называют «несобственной» (extrinsic) автолокализацией. Целесообразно различать ситуацию, в которой дефект является центром захвата в том смысле, что в отсутствие АЛ ему соответствует хотя бы одно связанное состояние и дискретный уровень электрона в межзонной щели, и альтернативную ситуацию, в которой дефект не имеет такого дискретного уровня в щели.

а) Одноэлектронное АЛ состояние на центре захвата

Простейшим является центр захвата с дальнедействующим полем притяжения $\varphi_d(r) = -\varepsilon_d a_B r^{-1}$ при $\varepsilon_d = Z_0 e^2 / \kappa_0 a_B$. Основное электронное состояние такого центра, в отсутствие автолокализации, имеет радиус $a_B = \kappa_0 / m e^2$ и дискретный уровень $\varepsilon_B = -m e^4 Z_0^2 / 2 \kappa^2$ в щели; в полупроводниках $a_B \gg a$ и $|\varepsilon_B| \ll E_g$ (мелкий уровень) при типичных значениях $\kappa_0^2 \gg 1$ и $m \lesssim m_0$. Для системы с дальнедействующей электрон-фононной связью (2.6) или (2.9), в рамках подхода Пекара, основное АЛ состояние центра захвата соответствует единственному, конечному, минимуму функционала системы (аналога функционала (2.21) в модели континуума)

$$J_L^{(d)}[\psi] \equiv \tilde{J}_L^{(d)}(\gamma) = \gamma^2 K_e^{(0)} - \gamma \delta_{0L}^{(0)}, \quad (3.1)$$

при $\gamma = 2K_e^{(0)} / \delta_{0L}^{(d)} = 1$, $\delta_{0L}^{(d)} = \delta_{0L}^{(0)} + \bar{\varphi}_d^{(L)}$. Поляронная энергия связи на центре захвата для связанного полярона большого радиуса ($\rho_p^{(d)} \gg a$) ^{84, 25}

$$E_{1p}^{(d)} = E_1 + |\varepsilon_B| = -\frac{1}{2} \delta_{0L}^{(d)} = -\frac{1}{2} \delta_{0L}^{(0)} \left[1 + \frac{4Z_0 \kappa}{\kappa_0} \left(1 + \frac{3}{4} \frac{Z_0 \kappa}{\kappa_0} \right) \right], \quad (3.2)$$

при $\bar{\varphi}_d \equiv - \int dr \varphi_d(r) |\psi_0^{(0)}(r)|^2 > 0$, $E_1 \equiv J^{(d)}[\psi_0^{(0)}]$.

Критерий несобственной АЛ, $0,109\alpha^2 (1 + \varphi_d / 0,109\alpha^2 \omega_p) \gg 1$, выполнен при меньших α^2 , чем в (2.24), так что связанный полярон может существовать, когда в регулярной решетке поляронное состояние не реализуется (например, при $\alpha^2 < 10$ и $\bar{\varphi}_d \gg \omega_p$). Поляронная АЛ может заметно увеличить (на $\sim \bar{\varphi}_d$) ширину примесной щели и преобразовать центр с «мелким» электронным уровнем в щели ($|\varepsilon_B| \ll E_g$) в глубокий центр. Как и для

*) Этот эффект ранее не учитывался и отсутствует в ферро- или парамагнетиках, в которых изменение подвижности за счет наличия магнитной структуры определяется лишь слабо зависящим от T средним равновесным значением $\langle \cos^2(\theta_0/2) \rangle$, где θ_0 — угол между спинами электрона и магнитных атомов (см., например, ²¹).

поляронных АЛ состояний в кристалле (см. (2.23) и (2.31)) $\varepsilon_{\text{opt}} - \varepsilon_{\text{th}} \approx \approx \delta_{0L}^{(0)} \gg \omega_{\text{ph}}$, и спектр поглощения содержит широкие полосы и, по крайней мере, одну бесфононную линию резонансного перехода между состояниями $\psi_0^{(0)}$ и первым возбужденным самосогласованным (см. ^{5,85}).

Ситуация качественно изменяется в 3D-системе с короткодействующей электронфононной связью (2.7) или (2.8). Соответствующий функционал

$$J_S^{(d)}[\psi] \equiv \tilde{J}_S^{(d)}(\gamma) = \gamma^2 K_e^{(0)} - \gamma^3 \delta_{0S}^{(0)} - \gamma \bar{\varphi}_d^{(S)}, \quad (3.3)$$

помимо минимумов, соответствующих исходному «мелкому» электронному уровню ε_B и (при $\gamma \rightarrow \infty$) связанному малому полярону, имеет или не имеет минимум (при конечном γ) для связанного полярона большого радиуса, когда $(K_e^{(0)})^2 \geq 3\delta_{0S}^{(0)} \bar{\varphi}_d^{(S)}$. При этом, в отличие от случая (3.2), состояния с «мелким» и глубокими (поляронными) уровнями сосуществуют (разделены барьерами в q -пространстве), и переход от одного типа стабильного состояния к другому с ростом Λ (при $\Lambda = \Lambda_c^{(d)} \sim 1$) разрывен, как и при $\bar{\varphi}_d = 0$ (см. раздел г) гл. 2). Для 1D-систем при $\gamma^3 \delta_{0S}^{(0)} \rightarrow \gamma \delta_{0S}^{(0)}$ в (3.3) ситуация подобна описанной в случае (3.2).

Структура поляронного АЛ состояния на короткодействующем центре захвата зависит от конкретных конфигураций дефекта и типа электрон-фононной связи. В случаях (2.7) и (2.8) роль энергии связи АЛ состояния, взаимен $|W_1|$, играет величина $|W_1^{(d)}| = |W_1| + \bar{\varphi}_d$ и основное состояние на дефекте автолокализовано при $|W_1^{(d)}| > D/2$, даже когда критерий (2.35) не выполнен, коль скоро $\bar{\varphi}_d$ достаточно велика. Это, по-видимому, реализуется для некоторых доноров в кристалле InSb, в регулярной решетке которого АЛ отсутствует (см. ⁸⁶). В случаях (2.6) и (2.9) ситуация аналогична, при замене $\delta_{0L}^{(0)} \rightarrow \delta_{0L}^{(d)}$ в (2.24) или $W_1 \rightarrow W_1^{(d)}$ в (2.25) (см. ^{25,51,87}).

АЛ состояние может реализоваться на перестраиваемом центре захвата (короткодействующем дефекте с перестраиваемой конфигурацией) даже в отсутствие электрон-фононной связи. Роль такого дефекта может играть ян-теллеровский дефект ^{88-90,93} или офф-центр (нецентральный ион, см. ^{17,91}). Так, взаимодействие электрона с локальной модой смещений q атомов в ян-теллеровском дефекте, снимающее частично или полностью вырождение заселяемого термина ⁸⁹, может привести к АЛ состоянию малого радиуса с энергией $E_1 < 0$, когда энергия взаимодействия $V_{e-ЯТ}(q) = \varepsilon_1(q) - \varepsilon_1(0)$ достаточно велика; $\varepsilon_1(q)$ — электронный терм дефекта. В простейшей модели ⁸⁹, в которой существенные смещения являются гармоническими, $E_0(q) \approx (1/2) kq^2$ и $V_{e-ЯТ}(q) \approx -\lambda_{ЯТ} q$, одноэлектронное состояние малого радиуса соответствует терму

$$E_1 = E_1(q_1) \equiv \min E_1(q) \simeq \min \left[\varepsilon_1(q) + \frac{1}{2} kq^2 \right] = \\ = \varepsilon_1(0) + W_1^{(ЯТ)} < \varepsilon_1(0), \quad (3.4)$$

где $q = q_1 \simeq \lambda_{ЯТ} k^{-1} \ll a$ и, для центра захвата, $\varepsilon_1(0) \equiv \varepsilon_1^0 < 0$. Энергия связи $|W_1^{(ЯТ)}|$ и равновесное смещение q_1 могут быть значительными, $\omega_D \ll \ll |W^{(ЯТ)}| \lesssim 0,3$ эВ, $q_0 \ll q_1 \lesssim 0,4$ Å ($\ll a$), при типичных значениях квазиупругой константы $k \approx k^{(0)} \approx 10-30$ эВ/Å² и параметра $\lambda_{ЯТ} a$ (~ 3 эВ) сильной в этом смысле связи (q_0 — типичное значение амплитуды нулевых колебаний, $q_0 \ll 0,4$ Å). Такое АЛ состояние является стабильным (основным), будучи заселенным в равновесных условиях при $E_1 < \zeta$, коль скоро для двухэлектронного состояния дефекта корреляционная энергия $U > 0$ (ζ — электрический химический потенциал).

Примером таких ян-теллеровских дефектов, на которых реализуются АЛ состояния, является вакансия V в кристалле p-Si ⁹⁰, для которой, согласно ⁸⁹, отчетное состояние есть V^{2+} , а также $\varepsilon_1^0 - E_V \simeq 0,32$ эВ, $\lambda_{ЯТ} a \simeq 2,25$ эВ,

$q_1 \simeq 0,15 \text{ \AA}$, $k \simeq 15 \text{ эВ}/(\text{\AA})^2$, и при этом $|W_1^{\text{JT}}| \simeq 0,17-0,19 \text{ эВ} \ll E_g \simeq \simeq 1,2 \text{ эВ}$ (и $\rho_p \approx a$). Однако одноэлектронное АЛ состояние на вакансии V^+ лишь метастабильно, стабильным же оказывается либо состояние V^{2+} , либо двухэлектронное АЛ состояние V^0 , для которого $U < 0$ (см. в гл. 3) ^{89,90}.

Для офф-центра, имеющего $z_0 (\geq 2)$ близких ($\Delta r \ll a$) положений равновесия атома (иона) в кристалле, характерна малая $k \ll k^{(0)}$, т. е. значительная ангармоничность колебаний (ион Li^+ вместо K^+ в KCl и т. п.; см. ⁹¹). Для такого перестраивающегося дефекта (см. ^{92,17,93}) одноэлектронному АЛ состоянию соответствует терм

$$E_1 \equiv E_1(q_1) \equiv \min E_1(q) \simeq \min \left[\varepsilon_1(q) + \frac{1}{2} k q^2 + C_0 q^4 \right] \equiv \equiv \varepsilon_1^0 + W_1^{\text{off}} < \varepsilon_1^0, \quad (3.5)$$

при $\varepsilon_1(q) - \varepsilon_1^0 \equiv V_{\text{e-off}}(q) \simeq -\lambda_1 q + \lambda_2 q^2 + \lambda_4 q^4$, $\lambda_1 > 0$, $C_0 > 0$, $\lambda_2 < 0$ и $\lambda_4 > 0$, где $C a_0^2 \ll k^{(0)}$, $C a_0^4 \gg \lambda_4 a_0^4 \sim \lambda_1 a_0 \sim |\lambda_2| a_0^2$ при характерном атомном (ионном) радиусе $a_0 \sim 1 \text{ \AA}$. Возникающее при достаточно сильной связи электрона со смещением q иона в офф-центре одноэлектронное АЛ состояние в качественном аспекте подобно таковому на ян-теллеровском дефекте, но, конечно, количественные характеристики могут сильно отличаться. Так, q_1 и энергия связи $|W_1^{\text{off}}|$ могут быть заметно большими, например, $0,1 \text{ эВ} \ll |W_1^{\text{off}}| \ll 1 \text{ эВ}$ ($|W_1^{\text{off}}| < E_g/2$) и $a_0 \geq q_1 \geq 0,1 \text{ \AA}$ при $\lambda_1 a \sim 3 \text{ эВ}$, $0,01 k^{(0)} \ll k \ll 0,1 k^{(0)}$ (подробнее см. ниже, раздел б) гл. 5,

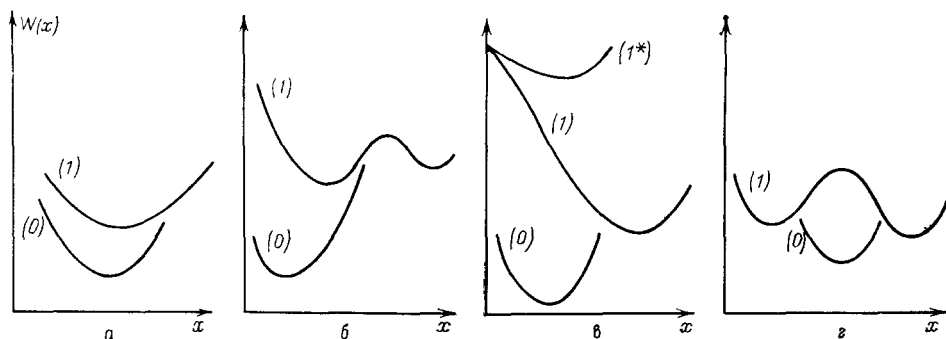


Рис. 1. Типичные примеры возможных зависимостей адиабатического потенциала основного (0) и возбужденных (1), (1*) состояний от конфигурации переменной (q или x)

а также ^{17,18}). Возможным примером такого дефекта является примесный ион In^{3+} замещающий ион Cd^{2+} в кристалле CdF_2 — одноэлектронное стабильное АЛ состояние малого радиуса в модели (3.5) могло бы соответствовать детально изученному иону замещения In^{2+} в CdF_2 при $U > 0$ (см., например, ⁸⁷).

Как и для электрона проводимости, для электрона на центре захвата в 3D-системе, вообще говоря, существует АЛ барьер, так что могут сосуществовать АЛ состояние малого радиуса и слабо связанное состояние большого радиуса. В моделях центра захвата, подобных модели (2.33) — (2.38), в которых q_1 не очень велико, $q_0 \ll q_1 \ll a_0$, как правило, зависимости адиабатических потенциалов $\Psi_0(q)$ для основного АЛ состояния и $\Psi_1(q)$ для метастабильного слабо связанного состояния имеют схематически вид кривых на рис. 1, а с присущими им оптическими и безызлучательными переходами, включая люминесценцию (излучательный, «вертикальный» переход $I \rightarrow 0$). С другой стороны, в модели (3.5) и ей подобных, в которых q_1 велико, $q_1 \ll a_0$, схематический вид $\Psi_0(q)$ и $\Psi_1(q)$, скорее, подобен кривым на рис. 1, б. При этом люминесценция фактически подавлена, а времена жизни заселен-

ных метастабильных «слабо связанного» ($\tau_{\text{АЛ}}^*$) и зонных ($\tau_{\text{АЛ}}^{**}$) состояний могут быть велики, $\tau_{\text{АЛ}} \gg \omega_D^{-1}$, т. е. они могут обусловить наличие инерционных фототоков и других подобных эффектов при низких T (см. ^{14,87, 93-95}).

б) Одноэлектронные АЛ состояния на перестраивающихся дефектах

Одноэлектронные АЛ состояния в несовершенных кристаллах могут образовываться за счет перестройки электронного спектра при соответствующей деформации локальной атомной конфигурации и в системах, не имеющих заполненных локальных уровней в недеформированной решетке. При этом, как показано в развитой в работе ¹⁴ теории, автолокализованные состояния могут возникать не только в виде дискретных уровней в запрещенной области спектра, но и в виде резонансных уровней практически нулевой ширины в разрешенных зонах. Потенциал дефекта в работе ¹⁴ для простоты аппроксимируется прямоугольной ямой (V_d) с уровнем $\varepsilon_1(q)$, располагающимся выше уровня Ферми при нулевой деформации, $\varepsilon_1(0) > \zeta$. Этот уровень углубляется в щель с ростом деформации, фактически амплитуды $q (> 0)$ «дыхательной» моды смещений при симметричном расширении координатной сферы около дефекта. При этом, коль скоро уровень $\varepsilon_1(q)$ практически не отталкивается от края валентной зоны, он может уйти в нее с дальнейшим ростом q (ср. в) гл. 5).

Реальное локализованное состояние появляется, когда энергия $\varepsilon_1(q) < \zeta$, т. е. уровень заселяется электроном. Этот эффект был назван в ¹⁴ примесной автолокализацией. Соответствующее АЛ состояние возникает при конечной деформации решетки ($q = q_1 > q_c$), при которой минимальная энергия системы

$$E_1(q) \simeq \varepsilon_1(q) + \frac{1}{2} kq^2 \quad (3.6)$$

при $\varepsilon_1(q) \simeq \tilde{\varepsilon} - \lambda_0 V_d \delta^2(q) + \lambda_0^2 V_d \delta^3(q)$, $\tilde{\varepsilon} = \text{const} > \zeta \equiv \varepsilon_1(q_c) > \varepsilon_1(q_1)$, $\delta(q) \equiv (d(q) - d_a) d_a^{-1}$, $d_a = \text{const}$, $d(q) = d_0 + \gamma_0 q$, $\gamma_0 = \text{const}$, $\lambda_0 = \pi^2/4$. Энергия стабильного АЛ состояния электрона $E_1 = E_1(q_1) \equiv \min E_1(q)$ и высота АЛ барьера, H_b^* , соответствующие минимуму ($q = q_1$) и максимуму ($q = q_2$) изменения энергии $\Delta E(q)$ при деформации решетки, найдены в виде

$$E_1 = E_1(q_1) \simeq \tilde{\varepsilon} - \frac{16}{27\pi^2} V_d (1 - \xi)^3 + \frac{4}{3} V_d \xi (1 - \xi) \delta_0 (> \varepsilon_1(q_1)),$$

$$H_b^* = \Delta E_1(q_2) = \frac{1}{4} \pi^2 \xi \left(\delta_0 + \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon} - \zeta}{V_d}} \right), \quad (3.7)$$

где $\xi \equiv k/4\gamma_0^2 m V_d^2$, $k \equiv M_a \omega_0^2$ и $\delta_0 \equiv |\delta(0)|$. При этом может быть как $E_1 > 0$, так и $E_1 < 0$ относительно другого минимума $\Delta E(q)$, дна зоны проводимости, $\Delta E(q) = 0$ при $q = 0$. Условия существования АЛ состояния, $\xi \sim \sim (M_a/m\gamma_0^2) (\omega_0/V_d) \ll 1$ и $\delta_0 \ll 1$, выполнимы при наличии в фононном спектре кристалла мягкой моды с частотой $\omega_0 \ll \omega_D$.

При $E_1 > 0$ уровень метастабильного квазилокального АЛ состояния электрона стабилизирует положение ζ , $\zeta = E_1$, если число электронов N_e меньше числа рассматриваемых дефектов N_d (и мало других дефектов). Нарушение условия равновесия $\zeta = E_1$ при $N_e = \text{const}$ приводит к переходам электронов из метастабильных АЛ состояний в блоховские при $\zeta < E_1$ (или наоборот при $\zeta > E_1$) с преодолением барьера (АЛ барьера — при $\zeta > E_1$). С другой стороны, при $E_1 < 0$ основное локализованное АЛ состояние имеет энергию термической активации $|E_1|$ и отделено от метастабильных блоховских состояний АЛ барьером с высотой $H_b^* = H_b^* + |E_1|$. Ситуация для

такого перестраивающегося дефекта, скорее, соответствует схематической диаграмме на рис. 1, *b* (в отсутствие «слабо связанного» состояния электрона). Времена туннельных переходов при низких $T \ll \omega_0$, $\tau_0 \equiv \tau (T = 0)$, и термически активированных переходов, $\tau \propto \exp(-H_b/T)$, $H_b = \{H_b^* \text{ или } H_b^{**}\}$, экспоненциально велики, $\tau \gg \omega_0^{-1} (\gg \omega_D^{-1})$. Оптические переходы из АЛ состояния в блоховское имеют пороговую энергию $\varepsilon_{opt} = \zeta - \varepsilon_1(q_1)$ при $E_1 > 0$ или $\varepsilon_{opt} = |\varepsilon_1(q_1)|$ при $E_1 < 0$. При этом ожидаются долговременные неравновесные эффекты (фототоки и т. п.), которые могут быстро исчезать с ростом T . В¹⁴ полагается, что эта модель (3.6)–(3.7) адекватно описывает наблюдаемую в узкощелевом ($E_g \simeq 0,32$ эВ) полупроводнике $Pb_{1-\bar{c}}Sn_{\bar{c}}Te$ (In) ($\bar{c} \lesssim 0,2$) необычную картину неравновесных процессов при низких T ($\lesssim 20$ К) и стабилизацию ζ . При этом ион In^{3+} , замещающий основной ион $Pb^{4+94,95}$, соответствует, по-видимому, перестраивающемуся дефекту, автолокализирующему электрон.

Теория АЛ состояний электрона на перестраивающемся дефекте, представленная в⁹³, развита применительно к предложенной в этой работе модели, связанной скорее с эффектом Яна-Теллера или в определенной мере похожим эффектом. В этой модели перестройка локальной атомной конфигурации дефекта сопровождается появлением и сдвигом в щель дискретного уровня электрона $\varepsilon_1(q)$, причем энергия дефекта с локализованным электроном ($\Lambda_i = \text{const}$, $\Lambda_1 \geq 0$, $\Lambda_2 \geq 0$, $\Lambda_4 > 0$, $C_1 = \text{const} > 0$)

$$E_1(q) = \varepsilon_1(q) + \frac{1}{2} kq^2 + C_1q^4, \quad q > 0, \quad k \ll k^{(0)}, \quad (3.8)$$

$$\varepsilon_1(q) \simeq \tilde{\varepsilon}_0 - \Lambda_1q + \Lambda_2q^2 + \Lambda_4q^4, \quad \tilde{\varepsilon}_0 > \zeta;$$

здесь линейный член $-\Lambda_1q$ при $\Lambda_2 > 0$ может характеризовать связь с ян-теллеровским смещением, тогда как член Λ_2q^2 при $\Lambda_2 < 0$ может соответствовать связи с мягкой фононной модой. При типичных $\Lambda_1a_0 \sim 1$ эВ и малых $\omega_0 \ll \omega_D$ для случая однократного заселенного терма $\varepsilon_1(q) < \zeta$, энергия системы $E_1(q)$ здесь также имеет два минимума, соответствующие блоховскому (у дна зоны) и АЛ состоянию электрона при конечной $q = q_1$. Эти состояния разделены максимумом (барьером), тогда как энергия системы $E_0(q) = (1/2)kq^2 + C_1q^4$ при незаселенном терме имеет единственный минимум, соответствующий блоховскому состоянию у дна зоны (при $q = 0$). Такая модель может описать дефект с АЛ барьером и метастабильным состоянием электрона, блоховским (при основном АЛ состоянии) или АЛ состоянием (рис. 1, *e*). В модели (3.8), примененной, в частности, для интерпретации электронных свойств $Pb_{1-\bar{c}}Sn_{\bar{c}}Te$ (In) ($\bar{c} \lesssim 0,2$) при низких T , перестраивающийся дефект в этом кристалле может определяться, в согласии с^{94,95}, как вакансией, так и ионом замещения In^{3+} .

Общим для моделей (3.6), (3.8) и (3.5), которые могут описать возникновение связанного стабильного АЛ состояния на перестраивающемся дефекте, является наличие нелинейных электрон-атомных взаимодействий и/или ангармонизмов локальной атомной конфигурации. Этим определяются характерные для перестраивающихся дефектов АЛ барьеры, метастабильные связанные электронные состояния и, следовательно, специфические длительные неравновесные эффекты. Наконец, во всех рассмотренных моделях (3.1), (3.3) — (3.6) и (3.8) речь идет об одноэлектронных связанных АЛ состояниях, несущих спин $\sigma = 1/2$.

в) Двухэлектронные связанные АЛ состояния

При выполнении неравенства (2.43) основное состояние перестраивающегося дефекта может быть только двухэлектронным синглетным АЛ состоянием с отрицательной корреляционной энергией $U < 0$. Так, в модели (3.4)

энергия двухэлектронного АЛ состояния $E_2(q) \simeq (1/2)kq^2 + 2\varepsilon_1(q) + U_c^*(q)$ минимальна, $E_2 = E_2(q_2) \equiv \min E_2(q) \simeq 2\varepsilon_1^* + W_2^{(\text{ЯТ})} + U_c$ при $q_2 \approx 2q_1 \approx 2\lambda_{\text{ЯТ}}/k$ и $W_2^{(\text{ЯТ})} \approx 4W_1^{(\text{ЯТ})} \approx -2\lambda_{\text{ЯТ}}^2/k$, и такое состояние является основным, когда $E_2 < 2E_1 < 0$, т. е.

$$U = E_2 - 2E_1 \simeq U_c - \frac{\lambda_{\text{ЯТ}}^2}{k} < 0. \quad (3.9)$$

($|U| < 0,3$ эВ при типичных значениях $|W_1^{(\text{ЯТ})}| \lesssim 0,3$ эВ и $U_c \lesssim 0,3$ эВ)^{89,90}. Основное связанное двухэлектронное состояние дефекта является бесспиновым (по крайней мере, когда заселенный терм орбитально не вырожден) и, вообще говоря, отделено АЛ барьером от метастабильных одноэлектронных связанных и блоховских состояний; поэтому и здесь сосуществование таких разнотипных состояний и длительные неравновесные эффекты возможны, особенно при низких T . В равновесных условиях двухэлектронные АЛ состояния стабильны лишь при $E_2 < 2\xi$, тогда как при $E_2 > 2\xi$ такие состояния не заселены.

Примером дефекта с синглетным основным двухэлектронным состоянием (V^0) при $E_2/2 < \xi$ или состоянием V^{2+} при $E_2/2 > \xi$, является вакансия в р-Si (см. выше). Для этого дефекта $U < 0$ и $|U| \simeq 0,1$ эВ при $U_c \simeq 0,25$ эВ и $q_2 \simeq 2q_1 \simeq 0,3 \text{ \AA}$ ^{89,90}. При этом одноэлектронное состояние V^+ метастабильно, как и показано в экспериментах по фотоиндуцированному ЭПР⁹⁰. Эти опыты и исследования электронной структуры вакансии в р-Si в рамках метода диэлектрической емкостной спектроскопии показали практически однозначно, что такой дефект есть центр с $U < 0$, описываемый модель (3.4) и (3.9).

Подобные синглетные двухэлектронные АЛ состояния с $U < 0$ могут быть характерными и для моделей (3.5), (3.6) и (см. ^{93б}) (3.8), при реалистичных $|U| \lesssim 0,3$ эВ или даже (в этих же моделях) $2|U| \lesssim E_g \lesssim 1 - 2$ эВ (см. гл. 5). С этой точки зрения, такое состояние может быть основным и для перестраивающегося диамагнитного дефекта в $\text{Pb}_{1-\tilde{c}}\text{Sn}_c\text{-Te}$ (In, Ga), в согласии с недавней гипотезой⁹⁵.

Мы полагаем также, что межузельный атом бора B_i в кристалле р-Si, имеющий в зависимости от положения ξ одно из двух стабильных состояний, B_i^- или B_i^+ ⁹⁰, т. е. являющийся центром с $U < 0$, может быть описан как перестраивающийся дефект типа офф-центра в модели (3.5), стабильное состояние которого B_i^- соответствует заполненному основному синглетному двухэлектронному состоянию (на отчетном ионе B_i^+) при $U < 0$ (см. гл. 5).

4. АВТОЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЕ

В неупорядоченных системах могут существовать как поляронные АЛ состояния, так и новые типы АЛ состояний, отсутствующие в регулярных системах и определяемые нелинейной реакцией среды. К последним относятся флуктоны, о которых речь идет в этом разделе, и двухэлектронные состояния с отрицательной корреляционной энергией, рассматриваемые в разделе 5.

а) Особенности поляронных АЛ состояний

Эти особенности определяются особенностями «затравочного» (в отсутствие деформации структуры электронами) одноэлектронного спектра энергии E ⁹⁶⁻¹⁰⁰. Так, в 1D- и (в отсутствие магнитных полей) в 2D-системах все состояния локализованы в том смысле, что проводимость $\sigma = 0$ при $T = \omega = 0$ ^{96,97,103}. В 3D-системе вблизи порога подвижности $E_1^* \equiv E_c^*$ ($E_2^* \equiv E_v^*$), отделяющего щель по подвижности (область локализованных состояний) от «зоны» проводимости (валентной), амплитуды нелокализованных состоя-

ний при $E_c^* < E < E_{uv}^*$ ($E_{uv}^* < E < E_v^*$) и слабо локализованных состояний при $E_{ic}^* < E < E_c^*$ ($E_v^* < E < E_v^*$) существенно неоднородны, флуктуируя на расстояниях ρ масштаба $\rho_1(E) \gg \rho_1(E_u^*) \approx a$, $\rho_2(E) \gg \rho_2(E_v^*) \approx a$ (они почти однородны при $\rho \gg a$ для $E > E_{uc}^*$ или $E < E_{uv}^*$, или имеют размер $\approx a$ для $E < E_{ic}^*$ или $E > E_{iv}^*$).

Недавно показано¹⁰¹, что в 3D-системе даже не сильная электрон-фононная (короткодействующая) связь ($\Lambda < 1$) преобразует упомянутые неоднородные (метастабильные) состояния в стабильные поляронные АЛ состояния. Последние имеют большой радиус ρ_p , $\rho_\alpha(E) \leq \rho_p \approx \rho_p^{(c)} \sim a\Lambda^{-1} \gg a$ при $\Lambda < 1$ ($\alpha = 1, 2$), поскольку $\rho_\alpha(E) \geq \rho_0(\Lambda) \sim 3a\Lambda^{-1}$ ¹⁰⁰. При этом порог подвижности смещается, $E_1^* \equiv E_c(\Lambda = 0) \rightarrow E_c \equiv E_c(\Lambda)$ при $\rho_1(E_c) = \rho_0(\Lambda)$ и $E_c^* < E_c < E_{uc}^*$, а проводимость $\sigma(E) \equiv \sigma(E | T = \omega = 0)$ при $E \rightarrow E_c \pm 0$ испытывает скачок $\Delta\sigma = A_c \Lambda^\delta$ с $A_c = 0,05e^2/\pi^2 \hbar a$ и $\delta = 2/3$. С ростом Λ непрерывно уменьшается ρ_p и растет $\Delta\sigma$. При сильной связи, $\Lambda \geq \Lambda_c$ ($1 < \Lambda_c < 10$; см. раздел г) гл. 2), все такие АЛ состояния — малые поляроны и $E_c \simeq E_{uc}^*$ (ср. феноменологическую модель¹⁰², в соответствии с которой существенные носители тока в стеклообразном полупроводнике — малые поляроны), а $\Delta\sigma$ близок к мотовской минимальной металлической проводимости $\sigma_M \approx 0,25e^2/\pi^2 \hbar a$ (см. ^{96,97}). Такая ситуация существенно отличается от описанной в разделе г) гл. 2 для АЛ в кристалле (об андерсоновской локализации малых поляронов в 3D-системе см., например, ^{103, 21, 96}). Согласно¹⁰¹, рассматриваемые эффекты имеют место, по крайней мере, коль скоро межэлектронные корреляции не существенны и при достаточно низких T (и эти эффекты пренебрежимы при достаточно малых $\Lambda \ll 1$).

Движение локализованных поляронов (в щели) определяется термически активированными перескоками. Эффективная энергия активации таких перескоков $\xi_a(T, \Lambda)$ практически не зависит от T , $\xi_a(T, \Lambda) \simeq \xi_a(\Lambda) \geq \xi_a(0)$, при высоких $T \geq T_0$, но $\xi_a(T, \Lambda) \propto T^\kappa$ при более низких T . В последней области $\kappa \equiv \kappa(\Lambda) \simeq \kappa(0)$ при достаточно малых $T (\rightarrow 0)$ или $\Lambda \ll 1$ (например, $\kappa(0) = 4^{-1}$ ⁹⁶ или $\kappa(0) = 1/2$ при $d = 3$ ⁹⁸), но $\kappa < \kappa(0)$ при $\Lambda > 1$ и промежуточных T ($\kappa = 1/7$ вместо $\kappa = 1/4$ при $d = 3$ или $\kappa < 1/2$ взамен $\kappa = 1/2$), благодаря вкладу поляронного эффекта и многофононных процессов^{21, 104}.

б) Ф л у к т у о н ы. О с н о в н ы е с о о т н о ш е н и я

В системе, в которой существенное взаимодействие со средой является короткодействующим, возникают АЛ состояния большого радиуса ($\rho_f \gg a$), флуктуоны^{15, 16, 23}; в отличие от поляронов, они определяются нелинейной реакцией среды и могут существовать в системе любой размерности, в том числе в 3D-системах. В последних флуктуонные состояния могут быть как нелокализованными, так и (в щели по подвижности) локализованными, тогда как в 2D-системах (в отсутствие магнитных полей, см. выше) и 1D-системах — локализованными в указанном выше смысле.

Пусть в системе реализуется пространственная флуктуация — отклонение $\delta\eta \equiv \eta - \bar{\eta}$ макроскопического параметра $\eta(\mathbf{r})$ от среднего значения $\bar{\eta}$, которое в отсутствие электрона затухает за характерное время τ_R . Такая флуктуация при надлежащих знаке и величине $\delta\eta$ может привести к образованию достаточно широкой и глубокой потенциальной ямы для электрона, необходимой (по крайней мере, в 3D-системах) для существования его связанного состояния радиуса $\rho_f \gg a$ с достаточно глубоким дискретным уровнем $\epsilon_1 < 0$, $|\epsilon_1| \gg T$. Такой связанный электрон своим полем поддерживает стационарность флуктуации. Возникающее самосогласованное АЛ состояние, флуктуон, можно рассматривать как термодинамически стабильное связанное состояние электрона и флуктуации. Примерами таких систем являются твердые и жидкие растворы типа $X_c Y_{1-c}$ ($0 \leq c \leq 1$) и магнетики,

в которых роль атомов X и Y играют спины \uparrow и \downarrow : в первых $\eta(\mathbf{r}) \equiv c(\mathbf{r}) \equiv c(\leq 1)$ — локальная концентрация атомов X, а в последних $\eta(\mathbf{r}) \equiv M_z(\mathbf{r})/M^0$, $|\eta(\mathbf{r})| \leq 1$ ($M_z(\mathbf{r})$ — локальная намагниченность; $M^0 \equiv M^0(0)$, $M^0(T)$ — равновесное ее значение). В отличие от поляронов, флуктуон существует в ограниченной области температур, которая может не включать низкие T и должен соответствовать минимуму термодинамического потенциала системы Φ .

Возможны два подхода к исследованию подобных состояний электрона. В одном из них рассматриваются состояния электрона в случайном поле фиксированных, случайно распределенных атомов ¹⁶. Фактически существенны флуктуационные уровни E электрона (по крайней мере, ниже порога подвижности E_c в щели по подвижности), основные уровни в потенциальных ямах, созданных подходящими, оптимальными, локальными флуктуациями атомной (спиновой) конфигурации. Такая оптимальная флуктуация радиуса $R_f(E)$ макроскопична, $R_f(E) \gg a$, в часто встречающемся случае широкозонных электронов при

$$D \gg |A_0| \gg T, \tag{4.1}$$

в котором у отдельного атома (спина) локализация электрона в 3D-системе не реализуется; $A_0 (\geq 0)$ — константа связи электрона с атомом (спином). В случае (4.1), который в основном имеется в виду далее, в макроскопическом приближении уровню E отвечает вероятность $p_f(E) \equiv \exp\{-\Delta S[R_f(E)]\}$ реализации оптимальной флуктуации; ее радиус $R_f(E)$, в свою очередь, определяется радиусом $\rho_f(E)$ основного состояния электрона во флуктуационной потенциальной яме ($a \ll \rho_f(E) \ll R_f(E)$, $\rho_f(E) \ll 1$). Для заданной температуры T можно найти энергию E , при которой величина

$$\Delta F(E) = -T \ln p(E) = E - T \ln p_f(E) \tag{4.2}$$

минимальна, коль скоро распределение электронов на флуктуационных уровнях определяется функцией $p(E) = p_f(E) \exp(-E/T)$. Состояние $\psi_T^{(0)}(E)$ с энергией E , при данной температуре, наиболее вероятно, как и соответствующая ему стационарная флуктуация состава $\delta c_T^{(0)}(E)$ ($\delta \eta_T^{(0)}(E)$), и в этом смысле является самосогласованным стабильным АЛ состоянием. По смыслу этой модели, необходимое условие реализации АЛ состояний

$$\tau_R \gg \tau_e \tag{4.3}$$

означает, что электрон за время жизни τ_e во флуктуационной потенциальной яме не успевает вызвать согласованное перераспределение атомов.

Другой подход ^{15, 23}, широко использованный для исследования флуктуонов в том же случае (4.1), представляет собой существенное обобщение подхода Пекара (2.13)–(2.14). В этом подходе проблема нахождения термодинамически стабильных флуктуонных АЛ состояний $\psi_T^{(0)}$ сводится к решению задачи о минимуме термодинамического потенциала системы, содержащей «неподвижный» АЛ электрон (с фиксированным центром инерции). т. е. соответствующего функционала $\Phi[\psi, \eta]$:

$$\min_{\{\psi, \eta\}} \Phi[\psi, \eta] = \min_{\{\psi\}} \Phi[\psi] = \Phi_T^{(0)} \text{ при } \psi = \psi_T^{(0)} \text{ и } \eta = \eta_T^{(0)} \equiv \eta[\psi_T^{(0)}], \tag{4.4}$$

где $\Phi[\psi, \eta] = E_e[\psi, \eta] + R(\eta)$, $E_e[\psi, \eta] = K_e[\psi] + V[\psi, \eta]$,

$$V[\psi, \eta] = \int d\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 V(\mathbf{r}, \eta), \quad \Phi[\psi] \equiv \min_{\{\eta\}} \Phi[\psi, \eta].$$

Выражение для $V(\mathbf{r}, \eta)$, потенциальной энергии электрона в области флуктуации $\eta(\mathbf{r})$, обычно аппроксимируется в виде ²³

$$V(\mathbf{r}, \eta) = -A_0 \delta \eta(\mathbf{r}) \equiv -A_0 (\eta(\mathbf{r}) - \bar{\eta}), \quad A_0 < 0, \tag{4.5}$$

а соотношение для минимальной работы, необходимой для обратимого создания флуктуации $\eta(\mathbf{r})$, имеет вид

$$R(\eta) = \int d\mathbf{r} \left[\varphi(\eta(\mathbf{r})) - \varphi(\eta_0) + \frac{1}{2} P_0 (\nabla \eta)^2 \right] \equiv R_1 > 0, \tag{4.6}$$

или

$$R = R_1 + R_2, \quad R_2 = \int dr (c(\mathbf{r}) - \bar{c}) \left(-\frac{\partial \Phi(c(\mathbf{r}))}{\partial c} \right); \quad (4.7)$$

здесь $\Phi(\eta)$ — плотность термодинамического потенциала, а R_2 учитывает сохранение полного числа атомов. Флуктуон существует, когда

$$\Phi_T^{(0)} < 0, \quad |\Phi_T^{(0)}| \gg T. \quad (4.8)$$

Условие минимума $\Phi[\psi, \eta]$ по η , при заданном состоянии ψ , определяет распределение $\eta[\psi]$ в эффективном поле $(-A_0 |\psi|^2)$ АЛ электрона. В итоге, функционал $\Phi[\psi]$, определяющий основное флуктуонное состояние $\psi_T^{(0)}$, имеет вид

$$\Phi[\psi] = K_e[\psi] - A_0 \int dr |\psi(\mathbf{r})|^2 \delta\eta[\psi(\mathbf{r})] + R\{\eta[\psi(\mathbf{r})]\}. \quad (4.9)$$

В обсуждаемом подходе¹⁵ самосогласованное АЛ состояние образуется при адиабатическом следовании АЛ электрона за медленными изменениями флуктуации, когда за время своей жизни τ_e АЛ электрон успевает вызвать согласованное перераспределение атомов (спинов),

$$\tau_R \ll \tau_e. \quad (4.10)$$

Однако уравнение Эйлера экстремальной задачи для функционалов (4.2) и (4.9), определяющие АЛ состояние, энергию электрона ε_1 и соответствующий термодинамический потенциал системы, в обоих подходах совпадают, поскольку стационарные характеристики АЛ состояния не должны зависеть от кинетики его возникновения, т. е. от значения τ_R/τ_e . Основному состоянию флуктуона (как и полярона большого радиуса) соответствует сферически симметричная волновая функция (*s*-состояние) $\psi_T^{(0)}(\mathbf{r})$.

В случае (4.10) движение флуктуона, по крайней мере, отвечающего не локализованному «затравочному» одноэлектронному состоянию в 3D-системе, по существу связано со специфическим механизмом, определяемым диффузией атомов (спинов) и согласованными с ней перемещением электрона и сопровождающей стационарной флуктуацией²³. Подобный механизм (взамен непосредственных электронных перескоков) может быть существенным и для флуктуонов, отвечающих локализованным состояниям 3D-системы, как и состояниям 2D- и 1D-систем. При этом подвижность флуктуона, ассоциированная с термически активированными переходами атомов (спинов) в их диффузии, определяется оценкой вида^{15, 105}

$$\mu_f \approx |e| D_T (T n_f)^{-1} \ll |e| D_T T^{-1}$$

$$\text{при } n_f \equiv \beta_d \rho_f^{\bar{d}} v_0^{-1} \approx \left(\frac{\rho_f}{a} \right)^d \gg 1 \quad (\mu_f \rightarrow 0 \text{ при } T \rightarrow 0); \quad (4.11)$$

здесь n_f — число атомов (спинов) в макроскопической флуктуации, сопровождающей электрон, D_T — коэффициент атомной ($D_T^{(a)}$) или спиновой ($D_T^{(s)}$) диффузии ($D_T \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$); $\beta_d = \text{const} \sim 1$. В любом случае длина перемещения в элементарном акте мала, $L_f \lesssim L_D n_f^{-1/2} \ll \rho_f$, где характерная диффузионная длина $L_D < \rho_f$. При этом, поскольку вклад трансляционного движения N_f флуктуонов в термодинамический потенциал $\Phi(N_f)$ невырожденного газа определяется числом перестановок по N_0 возможным положениям, имеет место общее соотношение между N_f и числом N_e неавтолокализованных (зонных) электронов в¹⁵:

$$N_f N_e^{-1} = \frac{\alpha_f}{v_0} \left(\frac{2\pi \hbar^2}{mT} \right)^{d/2} \exp\left(-\frac{\Phi_T^{(0)}}{T}\right) \gg 1 \quad \text{при } |\Phi_T^{(0)}| \gg T, \quad \alpha_f \sim 1. \quad (4.12)$$

С другой стороны, в случае (4.3), скорее соответствующем локализованным электронным состояниям системы любой размерности, формула (4.12) адекватна только при $N_e N_0^{-1} < p_0$ (p_0 — концентрация вовлеченных

оптимальных флуктуаций), а движение флуктуона может определяться скорее перескоками электрона, не обязательно связанными с диффузией атомов (спинов), $\mu_f \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$.

Образование флуктуонов должно быть более эффективным в системе, в которой флуктуации $\delta\eta$ приводят к относительно малой величине $R(\eta)$. Прежде всего, это имеет место вблизи точек фазовых переходов II рода и критических точек системы^{15, 106}. В общем случае флуктуон образуется при нелинейной реакции среды — стационарное распределение $\eta_f^{(0)}(r)$ в области флуктуонного АЛ состояния связано нелинейным образом с полем электрона — $A_0 |\psi|^2$. Это обнаруживается в наиболее явном виде для флуктуона в идеальной системе, в которой, по определению, прямые связи между атомами (спинами) отсутствуют, так что в области флуктуона существуют лишь косвенные связи, определяемые АЛ электроном.

в) Ф л у к т у о н в и д е а л ь н о й с и с т е м е

Для идеального раствора $X_{\bar{c}}Y_{1-\bar{c}}$ при $A_0 > 0$ существенно нелинейная связь между $\eta_f^{(0)}(r)$ и $|\psi(r)|^2$ имеет вид¹⁵

$$\eta_f^{(0)}(r) = \bar{\eta} \left\{ \alpha_1 + \alpha_2 \exp \left[-A_0 \frac{v_0}{T} |\psi(r)|^2 \right] \right\} \equiv \eta_f^{(0)}[\psi(r)], \quad (4.13)$$

где

$$\varphi(\eta) \equiv \varphi(c) = (T/v_0) [c \ln c + (1-c) \ln(1-c)] \quad \text{и} \quad \alpha_1 = \bar{\eta} \equiv \bar{c},$$

тогда как при $A_0 < 0$ следует осуществить замену $\bar{c} \rightleftharpoons 1 - \bar{c}$ в (4.13). Это же соотношение справедливо и для идеальных парамагнетиков со спином атома $S_a = 1/2$ при замене

$$\bar{c} \rightarrow S_a = \frac{1}{2}, \quad A_0 \rightarrow 2A_0 \quad \text{и} \quad \eta \equiv \frac{M_z}{M_0} \quad (4.14)$$

(ц_г для оценок в общем случае идеального парамагнетика — при $\bar{c} \rightarrow S_a \geq \geq 1/2$ и $A_0 \rightarrow A_0 S_a^{-1}$).

Анализ экстремальной задачи для функционала $\Phi[\psi, \eta]$ в 3D-системе показал, что флуктуон в идеальной системе существует при всех достаточно низких температурах $0 < T < \theta^*$ ^{15, 23}. При этом, согласно²³

$$n_f \equiv \frac{4\pi}{3} \rho_f^3 v_0^{-1} = \gamma_1 \left(\frac{D}{T} \right)^{3/5} \gg 1 \quad \text{при} \quad T \ll \theta^* \quad \left(\text{и} \quad \bar{c} \approx \frac{1}{2} \right), \quad (4.15)$$

$$\theta^* = \gamma_2 |A_0| \left| \frac{A_0}{D} \right|^{3/2} \ll |A_0|, \quad n_f(\theta^*) = \gamma_3 \left| \frac{D}{A_0} \right|^{3/2} \gg 1, \quad (4.16)$$

где $\gamma_i = \text{const}$ (точнее, $\gamma_1 \simeq 1/3$, $\gamma_2 \simeq 1/20$ и $\gamma_3 \simeq 3$). В рассматриваемых идеальных системах $\varepsilon_1 \simeq -0,12 |A_0|$ при $T = \theta^*$, $\bar{c} \simeq 1/2$, так что при (4.1) и при $T \ll \theta^*$ автоматически выполнены неравенства $D \gg |A_0| \gg 20T$, $|\varepsilon_1| \gg T$, а также $|\Phi_T^{(0)}| \gg T$, в согласии с критерием (4.8). Особенностью флуктуона в идеальной системе является резкое изменение $c_f^{(0)}(r)$ в области АЛ электрона (см. (4.14)): в центре при $A_0 < 0$ $c_f^{(0)}(0) \ll \bar{c}$, а потенциальная энергия имеет наименьшее возможное значение ($A_0 \bar{c}$), к которому стремятся ε_1 и $\Phi_T^{(0)}$ ¹⁵. Именно нелинейная реакция среды, т. е. нелинейная зависимость величины $\delta c_f^{(0)}(r) \equiv c_f^{(0)}(r) - \bar{c}$ от поля электрона — $A_0 |\psi|^2$, приводящая к ее насыщению, при $\delta c_f^{(0)} \approx -\bar{c}$ для $r \ll \rho_f$, обуславливает при (4.1) макроскопические размеры флуктуона. Этим флуктуон существенно отличается от малого полярона, который при короткодействующей электрон-фононной связи возникает при линейной реакции среды лишь за счет углубления (но не расширения) потенциальной ямы при достаточно сильной связи. Однако, как и малый полярон, в 3D-системе флуктуон отделен от блоховских состояний электрона в зоне АЛ барьером, высота которого $H_b^{(f)} \sim$

$\sim 5 |D/A_0|^{3/2} T^2 / A_0 | (T \ll \theta^* \text{ и } \bar{c} \approx 1/2)$ может быть при $D \gg |A_0| \gg 20T$ значительной, уменьшаясь с понижением T . Для флуктуона в 1D- и 2D-системах наличие АЛ барьера не характерно. Это в явной форме следует из результатов работы¹⁶, в которой подробно были рассмотрены электронные состояния, подобные состояниям флуктуонного типа в растворе $X_c^- Y_{1-c}$ при $\bar{c} \ll 1$ (или $1 - \bar{c} \ll 1$) как в 3D- так и в 1D- и 2D-системах.

В ферромагнетике флуктуоны существуют лишь при достаточно высоких $T > \theta_1^*$, причем $0 < \theta_1^* < T_c$ (T_c — точка Кюри, см.²³ и ниже). Флуктуонные АЛ состояния могут существовать как стабильные состояния электрона и в антиферромагнитном кристалле не только при $T \geq T_N$, но и при $T \ll T_N$, когда система упорядочена; при этом АЛ состояние электрона идентично обусужденному в разделе ж) гл. 2 спиновому полярону (2.44)^{26, 27}.

Переход электронов во флуктуонное состояние происходит при $T = \theta_0^* \approx \theta^*$ в узком интервале $\delta T \approx 2\theta^* n_f^{-1} \ll \theta^*$, напоминающая размытый фазовый переход 1-го рода^{15, 16, 23}. При этом должны сильно изменяться электронные свойства системы, в частности, электронная теплоемкость должна иметь пик при $T \approx \theta^*$, $C_f N_f^{-1} \sim n_f^2 \gg 1$ (см.²³). Влияние образовавшихся флуктуонов на свойства полупроводника было исследовано в ряде работ (см., например,^{15, 23, 107}). Так, магнитные свойства (магнитная восприимчивость и т. п.) полупроводника в области существования стабильных флуктуонов существенно отличаются от свойств в альтернативной области, поскольку момент флуктуона аномально велик $m_f \approx n_f \mu_B \gg \mu_B$.

В¹⁰⁵ исследованы подвижность μ_f и эффективная масса M_f флуктуона в 3D-системах и показано, что M_f велика, $M_f \gg m$, и μ_f мала, $\mu_f \ll \mu_0 \sim 1 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, а непосредственная связь между ними отсутствует, причем $\mu_f \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$ ($\mu_f \propto \exp(-E_a/T)$) в растворах $X_c^- Y_{1-c}$ или $\mu_f \propto T^{1/10}$ при $T \lesssim \theta^*$ в парамагнетиках. Сосуществование стабильных флуктуонов и метастабильных зонных электронов с $\mu_e \gg \mu_f$ могло бы проявиться в сильном росте подвижности с ростом T ($\lesssim \theta^*$).

г) Некоторые другие флуктуонные эффекты

В парамагнитной фазе хаббардовского полупроводника также возникают АЛ состояния электронов, напоминающие флуктуоны. При этом эффективная обменная связь электрона проводимости с электронами остова возникает благодаря хаббардовскому межэлектронному взаимодействию и известным свойствам симметрии многоэлектронных состояний. Подобные АЛ состояния (в частности, для магнитных атомов ^3He в кристалле ^4He ¹¹⁰) и их свойства были исследованы в ряде работ (см., например,^{17, 110-113}). Влияние прямого взаимодействия между атомами (спинами) на свойства флуктуонов, прежде всего, приводит к появлению конечной нижней границы θ_1^* области их существования (см., например,¹¹⁴⁻¹¹⁶). Так, в парамагнетике эта область охватывает точку T_c магнитного фазового перехода, $\theta_1^* < T < \theta^*$ при $\theta^* > T_c$ и $0 < \theta_1^* < T_c$. (Обычно во флуктуонной группе косвенное взаимодействие между атомами или спинами, обусловленное АЛ электроном, более существенно, чем их прямое взаимодействие; см., например,^{114, 23}.) Флуктуонные состояния могут образовываться и на дефектах, примесных центрах¹¹⁷. Особенности АЛ состояний при произвольной величине $D/|A_0|$ свойства флуктуона при многоэллипсоидной анизотропной (не вырожденной) электронной зоне и другие вопросы теории флуктуонных АЛ состояний рассматривались в ряде недавних работ (см., например,¹¹⁸).

С ростом концентрации $N_f a^3$ носителей тока возникают термодинамические стабильные комплексы из ν электронов ($\nu \geq 2$) в общей флуктуонной потенциальной яме^{15, 23} и, при не слишком высоких N_f , равновесная гетерогенная структура, содержащая малые ($\sim 10^2 - 10^3 \text{ \AA}$) металлические частицы ($\nu \geq 10^2 - 10^3$) и имеющая специфические свойства^{119, 23}. Гетерогенная равно-

весная структура сегнетоэлектрического кристалла может возникать вблизи точки фазового перехода¹²⁰. Подобная структура может также существовать в магнитных полупроводниках^{121, 122}.

5. АВТОЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В АМОРФНЫХ СИСТЕМАХ —
 ДВУХЭЛЕКТРОННЫЕ ЦЕНТРЫ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ
 КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ЭНЕРГИЕЙ

Специфические черты электронных состояний в щели по подвижности (не очень близко к электронным порогам подвижности; см. раздел а) гл. 4) в 3D-аморфных, фактически стеклообразных полупроводниках (СП) проявляются в сосуществовании таких различных свойств, как стабилизация (пиннинг) электронного уровня Ферми ζ вблизи середины щели и, с другой стороны, практическое отсутствие парамагнетизма, которые в рамках теории одноэлектронных локализованных состояний фактически несовместимы⁹⁶. В этой связи в⁶⁸ было постулировано, что состояния в щели — двухэлектронные состояния с полным спином $\sigma = 0$ и отрицательной корреляционной энергией $U < 0$ при очень большой величине $|U| \approx E_g \cdot 2 \sim 1$ эВ (E_g — ширина щели). В двух существенно различных моделях такие состояния фактически ассоциировались, по-видимому, с аномально слабыми собственными валентными связями «идеального» (идеальной непрерывной случайной сети атомов) ковалентного стекла^{68, 123} или основными состояниями пар противоположно заряженных дефектов структуры стекла^{124, 96}. Типичными СП, аморфными системами с преимущественно ковалентной связью и низким средним координационным числом \bar{z} , $2 \leq \bar{z} < 3$ (см. ⁹⁶), являются халькогенидные стекла — аморфные сплавы $a\text{-As}_c\text{C}_{1-c}$, $a\text{-Ge}_c\text{C}_{1-c}$ при $0 \leq c \leq 1/2$ и т. п. (С — атом халькогена: S, Se, Te), в которых энергетическая щель не велика, $E_g \approx 2 \div 1$ эВ.

а) АЛ состояния в щели по подвижности.
 Общие соотношения

Согласно недавно развитой теории^{17, 125, 126}, существенными электронными состояниями щели по подвижности в СП являются АЛ состояния носителей заряда («лишних» электронов, дырок) с аномально большой величиной энергии автолокализации $|W|$ порядка атомной энергии $\epsilon_0 \equiv \hbar^2/2m_0a^2$ (~ 1 эВ), причем автолокализация происходит, в основном, в исходной идеальной непрерывной случайной сети атомов собственной структуры такой аморфной системы (т. е. не обязательно связана с каким-то дефектом структуры, когда последний может быть однозначно выделен). Другая особенность этой автолокализации состоит в том, что фактически стабильны двухэлектронные и/или двухдырочные синглетные АЛ состояния с отрицательной корреляционной энергией $U < 0$ при аномально большой величине $|U| \sim \epsilon_0$ и с зарядом (относительно среды) $e_{\pm}^* = \mp 2|e|$, характеризующим пару одноименных носителей заряда; одночастичные же АЛ состояния могут лишь быть метастабильными. В рассматриваемой теории столь большие величины $|W|$ и $|U|$ обусловлены следующим обстоятельством.

В аморфной системе флуктуации «ближнего порядка» порождают конечную концентрацию $c_a \ll 1$ «атомов» (отдельных атомов и/или групп из небольшого числа атомов) в относительно легко перестраиваемых, «мягких» локальных атомных конфигурациях, на которых и осуществляется рассматриваемая электронная автолокализация^{17, 126}. Локальный потенциал такого «атома», хотя бы по одной из мод движения (x) существенно ангармоничен: большие смещения «атома» $\delta u \equiv u - u^{(0)} \equiv a_0(x - x^{(0)})$ вызывают аномально малые изменения потенциальной энергии системы,

$$|V(x)| \ll A \equiv \frac{1}{2} k^{(0)} a_0^2 \approx \frac{1}{2} M_a \omega_D^2 a_0^2 \approx 10 - 30 \text{ эВ} \quad \text{при} \quad |x| \leq 1. \quad (5.1)$$

В (5.1) принято, что $V(x^{(0)}) \equiv 0 \equiv x^{(0)}$; M_a — масса «атома»; a_0 — типичный атомный радиус ($a_0 \sim 1 \text{ \AA}$); A и $k^{(0)}$ — обычные масштабы атомной (упругой) энергии связи и квазиупругих констант k в твердых телах, исключая, по видимому, молекулярные кристаллы и т. п. Подобные ангармонические атомные потенциалы с аномально малыми квазиупругими константами $k \ll k^{(0)}$ (большой локальной восприимчивостью «мягкой» конфигурации относительно деформации, $\chi \simeq k^{-1} \gg (k^{(0)})^{-1}$), названные в этой связи критическими, в общем случае можно аппроксимировать для существенных $|x| \lesssim 1$ одномоновым потенциалом вида ^{17, 126}

$$V(x) \approx A(\eta x^2 + tx^3 + x^4), \quad (5.2)$$

где $|\eta| \ll 1$, $t^2 \ll 1$ и $\partial V/\partial x = 0$ при $x = x^{(0)} = 0$. Действительно, согласно ¹²⁷, типичные (т. е. наиболее вероятные) критические потенциалы являются

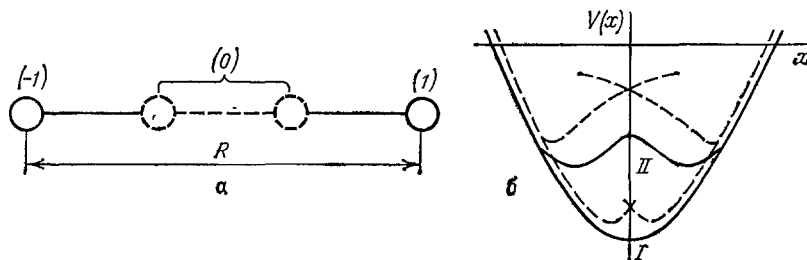


Рис. 2. Простейшая модель атомной подсистемы, имеющей критический потенциал: одно-ымный при $\eta > 9t^2/32$ (I) или двухъямный при $\eta < 9t^2/32$ (II)

именно одномоновыми. Явный смысл моды x и параметров флуктуаций «ближнего порядка» и асимметрии окружения (η , t) (в этой теории, в этом смысле микроскопической) определяется конкретной структурой аморфной системы. Так, может быть $\eta \equiv (\Omega_c - \Omega) a_0^{-3}$ или, в простейшей модели (рис. 2, а),

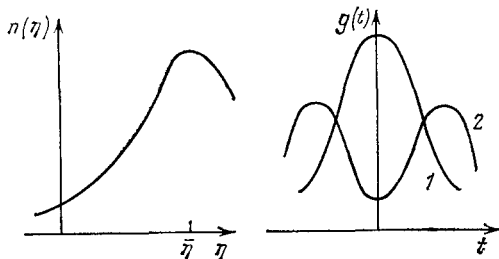


Рис. 3. Характерный вид плотностей распределения $N(\eta)$ и $g(t) = g(-t)$ (два возможных типа $g(t)$)

ной параметр теории $c_a \ll 1$, правдоподобно принять, что вид определяющей его плотности распределения $F(\eta, t) = F(\eta, -t) \equiv N(\eta)g(t|\eta)$ отвечает $N(\eta)$ и $g(t) \equiv g(t|0)$, подобным схематически изображенным на рис. 3. При этом потенциалам (5.2) отвечает малая область быстроспадающего хвоста $N(\eta)$, а обычным одноямным потенциалам ($k \approx k^{(0)}$) для подавляющей части атомов — максимум с шириной $\Delta\eta < 1$ около $\eta = \eta \sim 1$, и $F(\eta, t) \approx \text{const}$ при $|\eta| \lesssim \eta_c$ и $|t| \lesssim t_c$ и типичных масштабах спада $\eta_c \lesssim 0,1$, $t_c \lesssim 0,1$ ¹⁷.

* Формула (5.2) подобна выражению для термодинамического потенциала в теории критических явлений Ландау ¹²⁸. Связь между нарушением дальнего порядка в кристалле с ростом объема (при $T = \text{const}$) и возникновением в нем неоднородных (двухъямных и т. п.) атомных потенциалов была указана Френкелем при обсуждении природы плавления ¹²⁹.

С этой точки зрения стекла выделены из аморфных веществ тем, что в них c_a наиболее велика, $c_a \ll 0,1$, являясь в этом смысле системами со значительной ангармоничностью¹⁷. Уже этот факт определяет фундаментальное отличие стекол от соответствующих кристаллов, проявляющееся в универсальных аномалиях теплоемкости C_T и других свойств при $T \ll \omega_D$ (см. ¹³⁰⁻¹³¹). Последние определяются специфическими низкоэнергетическими возбуждениями с энергией $\xi \ll \omega_D$, соответствующими в рассматриваемой теории возбужденным состояниям ангармонических осцилляторов (5.2) (см.¹⁷). К ним относятся двухуровневые системы в двухъямных атомных потенциалах (туннельные состояния в потенциалах с малой асимметрией и т. п.) с почти равномерной плотностью состояний $\rho(\xi) \approx \text{const}$ (при $\xi \ll w \leq 0,1 \omega_D \approx 10-30$ К)^{17, 127}, существование которых ранее постулировалось в¹³⁰ и которые определяют аномалии свойств стекол ($C_T \propto T$ и др.) при очень низких $T \ll 1 \text{ К} \ll w$. Другая ветвь возбуждений системы осцилляторов (5.2) соответствует атомным квазилокальным колебаниям с характерной энергией

$$w \approx A \eta_L^2 \ll \omega_D \left(\eta_L \equiv \left(\frac{\hbar^2}{2M_a a_{q,1}^2} \right)^{1/3} \right)$$

и узкой полосой, «пиком», плотности состояний $\rho(\xi)$, определяемой логарифмической особенностью при $\xi \approx w$ (см. ^{17, 132}, а также ¹³³). Согласно ^{17, 132}, такие колебательные возбуждения способны определять аномалии свойств стекол («горб» для $C_T(T)$, плато теплопроводности и др.) при умеренно низких T , $5 \text{ К} \leq T \leq 20-30 \text{ К}$.

Рассматриваемое АЛ состояние возникает благодаря взаимодействию электронов, имеющих «затравочное» (в отсутствие деформации среды, при $x = 0$) одноэлектронное локализованное состояние ψ_q в основном малого размера $\rho_q \approx a$ и терм $E \equiv E_q \equiv E_q(x=0)$, с «атомом» в исходном критическом потенциале (5.2) в области локализации ψ_q ; в трехмерной системе E_q должны лежать не слишком близко к порогу подвижности, например, при $E_q \leq E_{1c}^* < E_c^*$; см. раздел а) гл. 4. Иначе говоря, автолокализация осуществляется на затравочной «мягкой» атомной конфигурации в основном малого размера ($\approx a$), что и подразумевается далее. При этом константа электрон-атомного взаимодействия $Q_q \approx Q_0 \equiv Q_q(a)$, как обычно, значительна, $Q_0 \sim \varepsilon_0$ ($Q_0 \sim 1-3$ эВ и т. п.). При n -кратном ($n = 1, 2$) заселении терма E_q это взаимодействие может вызвать большие смещения «атома» (деформацию среды) $|x| \leq 1$ и сильное понижение терма, $|\delta E_q(x)| \equiv |E_q(x) - E_q| \leq \leq Q_0$. При этом может возникнуть АЛ состояние со значительными равновесным смещением x_n и энергией автолокализации $W_n < 0$. Общее изменение энергии системы описывается соотношением вида (см. ^{17, 126})

$$\varepsilon_n \equiv \min \varepsilon_n(x) \equiv \varepsilon_n(x_n) \equiv W_n(x_n) + U_c(x_n) \delta_{n,2}, \quad (5.3)$$

при $\varepsilon_n(x) = V(x) + n \delta E_q(x) + U_c(x) \delta_{n,2} \equiv W_n(x) + U_c(x) \delta_{n,2}$; $V(x) \equiv \equiv W_0(x)$. В (5.3): $\varepsilon_n(x)$ — минимизируемый энергетический функционал системы (аналог (2.13) в проблеме Пекара), $U_c(x)$ — энергия эффективного хаббардовского межэлектронного отталкивания, а $W_n(x)$ — адиабатический потенциал системы. Здесь адиабатическое приближение действительно применимо для состояний ψ_q в щели, при реально выполняющихся неравенствах

$$\omega_D \ll Q_0 \ll A. \quad (5.4)$$

Двухэлектронное АЛ состояние ($n = 2$) с зарядом $e^* = -2|e|$ является стабильным (основным), коль скоро корреляционная энергия электронной пары отрицательна *)

$$U = \varepsilon_2 - 2\varepsilon_1 = W_2 - 2W_1 + U_c < 0, \quad (5.5)$$

*) В дальнейшем сказанное об электронных АЛ состояниях может быть отнесено, при очевидной модификации, к дырочным АЛ состояниям (для последних, очевидно, $U = 2\varepsilon_1 - \varepsilon_2$).

т. е. имеет место межэлектронное притяжение (при этом, очевидно, между электроном и дыркой имеет место отталкивание).

Как видно из дальнейшего, при типичных $U_c \leq 0,3$ эВ (см. ⁷³) и $Q_0 \approx \approx 1-3$ эВ в полупроводниках неравенство (5.5) выполнено в СП, причем $|U|$ велика, $|U| \sim \varepsilon_0 \sim 1$ эВ *). Столь сильное межэлектронное притяжение фактически обеспечено благодаря сильной перестройке «мягкой» локальной конфигурации при наибольших возможных (для заданной $Q_q \approx Q_0$) значениях $|x_2| \approx x_{\max} \equiv \max |x_2| \sim 1$, $|W_2| \approx W_{\max} \equiv \max |W_2| \sim Q_0$ и $|U| \approx U_{\max} \equiv \max |U| \sim Q_0$. Из изложенного видно также, что между проявлениями таких АЛ состояний и универсальными низкотемпературными аномалиями свойств (C_T и т. п.) в СП должна существовать связь, некоторые аспекты которой отмечены ниже.

При столь больших W_{\max} межзонное взаимодействие, т. е. примешивание состояний ψ_p «чуждой» зоны (валентной — для электрона) к заданному состоянию ψ_q хвоста «своей» зоны здесь становится существенным, в отличие от обычной ситуации для поляронов и флуктуонов (см. гл. 2—4)¹⁷. Изменение терма $E_q(x)$ и состояния $\psi_q(x)$ при деформации среды ($x \neq 0$) определяется обычным в такой двухзонной системе уравнением Шрёдингера (см. ¹³⁴)

$$\{E_q(x) - [E_q + J_{qq}(x)]\} \psi_q(x) = \hat{I} \psi_q(x) \equiv \sum_p I_{qp}(x) \psi_p; \quad (5.6)$$

здесь $J_{qq}(x)$ определяет смещение терма в отсутствие других состояний, $|J_{qq}(x)| \leq Q_q \approx Q_0$, $I_{qp}(0) \equiv I_{qq}(x) \equiv J_{qq}(0) \equiv 0$; матричные элементы $I_{qp}(x)$ переходов между ψ_q и «чужжими» состояниями ψ_p описывают возмущающие межзонные взаимодействия, $|I_{qp}(x)| \ll Q_0$. Вклад последних, как обычно, существенен лишь, когда $E_q(x)$ приближается к термам E_p , $|E_q(x) - E_p| \leq |I_{qp}(x)|$. Теория возмущений для близких уровней, описывающая их отталкивание, приводит к результирующим термам $E_q(x)$ (и $E_p(x)$), соответствующим «двухзонным» состояниям — суперпозициям вида $\psi_q(x) = c_q(x) \psi_q + \sum_p c_{qp}(x) \psi_p$ при $|c_{qp}(x)|^2 \leq 1$ (см. ^{134, 135}). Это общее квантовое явление отталкивания взаимодействующих близких уровней, которые сдвигаются друг другу навстречу с изменением внешнего параметра x и могли бы пересечься ($E_q(x) \equiv E_p(x)$ при $x = x_0$), исследовалось для многих систем, в частности, для молекулярных термов и для дискретного терма в межзонной щели (см. ^{136, 137}). В рассматриваемой ситуации явление существенно, поскольку в аморфной системе со значительной вероятностью величина

$$\Delta_q^2 \equiv \Delta_q^2(x_0) \equiv \sum_p |I_{qp}(x_0)|^2 \approx \int dE_p g_0(E_p) |I_{qp}(x_0)|^2, \quad (5.7)$$

определяющая расщепление термов при их отталкивании, конечна (не экспоненциально мала), как и большая часть матричных элементов $I_{qp}(x)$ и $\Delta_q(x)$, благодаря вкладу случайных полей **). В (5.7) $g_0(E)$ — одноэлектрон-

) Вообще говоря, в рамках рассматриваемой теории состояний щели по подвижности можно аналогично получить основные характеристики и соотношения для электронных (дырочных) пар, величина заряда которых $|e_{\mp}^|$ отличается от рассмотренной выше $|e_{\mp}^*| = 2|e|$, соответствующей автолокализации на нейтральной (с зарядом $q^* = 0$) затравочной «мягкой» атомной конфигурации идеального стекла (см. ^{17, 126}). Так, если полагать, что $q^* = 2|e|$ («опустошенная ковалентная связь») или $q^* = -|e|$ («заряженная оборванная связь»), то АЛ пара электронов или дырок могла бы соответствовать $e_{\pm}^* = 0$ (возможно, собственной слабой ковалентной связи; ср. ⁶⁸) или $e_{\pm}^* = |e|$ (возможно, центру, подобному дефекту D^+ в модели Стрита — Мотта — Кастнера — Адлера — Фришсе; см. ⁶⁶). Учет опытных данных, по-видимому, имеет решающее значение для определения типа доминирующих АЛ пар и их заряда (см. ниже).

**) Для дискретного терма E_q дефекта в кристалле, очевидно, может быть $I_{qp}(x) \equiv 0$ при подходящей симметрии состояний ψ_q и зонных ψ_p .

ная плотность «затравочных» состояний двухзонного спектра системы. Фактически энергетическое расщепление, характеризующее отталкивание терма $E_q(x)$, определяется вкладом слабо локализованных ($\rho_p \gg a$) состояний ψ_p около порога подвижности «чужой» зоны E_S^* ; их перекрытия с ψ_q , как и $g_0(E_p)$ в щели, значительны, а термы $E_p(x) \approx E_S^*$. (Количественная теория этого эффекта в аморфной системе, учитывающая надлежащее проявление вероятностного распределения случайных полей и аналитически описывающая поведение терма $E_q(x)$ в области расщепления, представляется еще отсутствующей.)

б) Двухэлектронные АЛ состояния.
Перестройки структуры

Энергия системы E_n , содержащей n ($=1, 2$) АЛ электронов, полученная минимизацией $\epsilon_n(x)$ из (5.3), описывается выражением

$$E_n = nE_q + W_n + U_c \delta_{n,2} + \text{const}; \quad (5.8)$$

учет эффекта (5.7) обуславливает ограничение сверху величины $|W_n|$ и равновесного смещения $|x_n|$ (см. (5.13)). Здесь $W_n \equiv W_n(x_n)$, а выражение для $W_n(x)$ можно представить в виде (5.2) при перенормировке η и t :

$$\begin{aligned} \eta &\rightarrow \eta_n \equiv (\eta + nq^{(2)}) [1 + 3\lambda_n^{-1}(\kappa_n^2 + 2\kappa_n)], \\ t &\rightarrow t_n \equiv (t - nq^{(3)})(1 + \kappa_n), \end{aligned} \quad (5.9)$$

причем, вообще говоря, $W_n(0) \equiv P_n(\eta, t) \neq 0$ для $n = 1, 2$, при $W_0(0) \equiv V(0) \equiv 0$. Здесь $|q^{(2)}| \equiv A^{-1} |d^2 J_{qq}(x)/dx^2|_{x=0} \ll Q_0 A^{-1} \ll 1$, а κ_n — обращающийся в нуль при $n = 0$ корень уравнения $\kappa^3 + 3\kappa^2 + \lambda_n \kappa + \rho_n = 0$; $\lambda_n \equiv 8(\eta + nq^{(2)})(t + nq^{(3)})^{-2}$, $\rho_n \equiv 16nq^{(1)}(t + nq^{(3)})^{-3}$. Как следствие, $W_n(x)$ — критический потенциал и при $n = 1, 2$ (т. е. $|\eta_n| \ll 1$ и $t_n^2 \ll 1$).

Рассматриваемые АЛ состояния имеют следующие особенности (в частности, по сравнению с малыми поляронами и биполаронами в кристаллах) ¹⁷: (1) АЛ состояния определяются, вообще говоря, нелинейной связью электрона с «критической» модой (x) атомных смещений (не с фононами, туннельными состояниями или другими возбуждениями среды); (2) почти гармоническим атомным смещениям отвечает спектр значений

$$W_n = W_n^{(\Gamma)}(K) = -\frac{Q_0^2 n^2}{2R_0 |K|}, \quad U = U^{(\Gamma)}(K) = U_c - \frac{Q_0^2}{R_0 |K|}, \quad (5.10)$$

при $A \gg |K| > K^* = p_1 Q_0^{2/3} A^{1/3} R_0^{-1}$, $2p_1 \approx 1$, $R_0 = 2-3$, тогда как при $|K| < K^*$ эти величины «насыщаются», принимая наибольшие (при данном Q_0) значения по модулю, отвечающие ангармоническим смещениям, которые могут быть существенными при $E_g \gtrsim W_{\max} \equiv \max |W_n^{(\Gamma)}|$:

$$\begin{aligned} W_n &= W_n^{(\text{A}\Gamma)} \equiv -\max |W_n| \approx W_n^{(\Gamma)}(K^*), \\ |W_2^{(\text{A}\Gamma)}| &\simeq \epsilon_g(Q_0) \equiv 2p_1 Q_0 \left(\frac{Q_0}{A}\right)^{1/3}, \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$U = U^{(\text{A}\Gamma)} \equiv -\max |U| \equiv -U_{\max} \approx U_c - \frac{1}{2} |W_2^{(\text{A}\Gamma)}|.$$

Такое «насыщение» характерно для АЛ при нелинейной реакции среды (ср. раздел б) гл. 4).

Общие совместные критерии стабильности двухэлектронного состояния (как основного, при $U < 0$) имеют вид ^{17, 18, 134}:

$$2U_c < \epsilon_g(Q_0), \quad |K| < K^{**} \approx \frac{Q_0^2}{R_0 U_c} \quad \text{при} \quad 1 \gg Q_0 A^{-1} > f(\eta, t), \quad (5.12)$$

где $K \equiv A(\eta - 3t^2/8)$, например, $f \approx |t| |K|$. Для СП, при типичных значениях $U_c \lesssim 0,3$ эВ, $Q_0 \approx 1-3$ эВ, $A \approx 10-30$ эВ, критерии (5.12)

заведомо выполнены (в соответствующей области плоскости (η, t)). Более того, при типичных для СП значениях E_g , $2 \text{ эВ} \geq E_g > 1 \text{ эВ}$, и Q_0 скорее $\varepsilon_g(Q_0) \geq E_g$. При этом эффект (5.7) существенен; им определяется характерная (наибольшая при заданном Q_0) величина энергии автолокализации W_{\max} , так что в рассматриваемой теории, при $U < 0$, должно выполняться соотношение¹⁷

$$W_{\max} = \max |W_2| \simeq E_g, \text{ т. е. } 2U_{\max} \simeq E_g \quad (5.13)$$

(с точностью до слагаемых $\ll 0,1 E_g$), характерное для СП при $W_{\max}/2 \simeq U_{\max} \gg U_c$ (эффект (5.7) не существен и $E_g \gg W_{\max} \simeq 2U_{\max}$ при $E_g \gg \varepsilon_g(Q_0)$), как это, скорее, должно иметь место в оксидных и других стеклах типа $\alpha\text{-SiO}_2$ при $E_g \approx 5\text{--}10 \text{ эВ} \gg Q_0 \approx 1\text{--}3 \text{ эВ}$). Соотношение (5.13) характеризует АЛ в собственной структуре стекла, поскольку E_g — существенный ее параметр*).

Стабильные парные АЛ состояния соответствуют основному состоянию системы, и существенная доля их (~ 1) имеет большие энергии связи порядка атомной ε_0 , $U_{\max} \leq E_g/2$. Эти парные АЛ состояния, описываемые формулами (5.8)—(5.13), синглетны; орбитальные состояния обоих электронов в паре одинаковы, $\Psi_{\uparrow\downarrow}(1, 2) = \psi_q(1)\psi_q(2) (\varphi_{\uparrow}(1)\varphi_{\downarrow}(2) - \varphi_{\uparrow}(2)\varphi_{\downarrow}(1))$ (аналогично куперовской паре⁷⁵ и слабой ковалентной связи — электронной паре с $U < 0$ в щели по подвижности в модели⁶⁸). Соответствующий корреляционный эффект (при данных Q_0 , U_c и A) характеризуется наибольшим выигрышем энергии $|W_2(\uparrow\downarrow)| \approx W_{\max} \leq E_g$ (этому способствует в СП, что $W_{\max} \gg 2U_c$ и что локализованный в заданной малой области «затравочный» терм с наибольшей вероятностью орбитально не вырождены). При этом триплетные парные АЛ состояния соответствуют возбуждениям со значительной энергией создания на одну частицу $\varepsilon_{\text{ex}} \leq U_{\max}/2$.

В этой связи отметим одну из наиболее важных особенностей рассматриваемой системы. Вообще говоря, высокоэнергетические ($\varepsilon_{\text{ex}} \geq U_{\max}/2$) возбужденные состояния АЛ пар в щели метастабильны, с временами жизни $\tau \gg \omega_D^{-1}$, в том смысле, что они существенно включают значительные метастабильные структурные изменения (большие атомные смещения, $\Delta x \lesssim 1$, в критическом потенциале) по сравнению с конфигурацией основного состояния, неустойчивой при таких возбуждениях. Реализация таких структурных изменений имеет место, когда локальная релаксация отвечает к появлению надлежащих барьеров адиабатического потенциала, отделяющих конфигурации основного и возбужденного состояний (см. ниже; ср. модель⁶⁸). Так, адиабатический потенциал $W_n(x)$, оставаясь критическим (см. (5.9)), может существенно изменить форму, вместе с числом ν_n ям потенциала, и приобрести или утратить барьер при изменении числа электронов n ($= 2, 1, 0$), в зависимости от величины и знака $q^{(j)}$ ($j = 1, 2, 3$), иначе говоря, от типа электронной орбитали $\psi_q^{(e)}$ — несвязывающей, антисвязывающей и т. п. (или $\psi_q^{(h)}$ — типа связывающей, несвязывающей и т. п. для дырок), т. е. от типа «затравочной» локальной химической связи. Например, одноямный потенциал $W_{n=2}(x)$ может превратиться в двухъямный $W_{n=0}(x) \equiv V(x)$ (см. (5.2)) при удалении электронной пары, с возможным появлением туннельных состояний (при как бы растянутой связи), коль скоро в (5.9) η_2 достаточно велика, $(9/32)t_2^2 < \eta_2 \ll 1$ при $\eta < 9t^2/32$.

) Соотношение (5.13) и вытекающие из него соотношения (5.14) и (5.15), адекватные экспериментальным данным для СП, явным образом получены в рассматриваемой теории для АЛ состояний пар одновалентных носителей заряда — как «лишних» электронов, так и дырок с зарядом $e_{\mp}^ = \mp 2|e|$ (в исходной идеальной непрерывной случайной сети атомов; см. выше). В этой связи можно полагать, что такие АЛ состояния являются для щели по подвижности в СП существенными, если не определяющими; см. справку на стр. 134 (концентрация АЛ пар с зарядом $\mp|e|$, с рассматриваемой точки зрения, относительно мала, поскольку концентрация оборванных связей $c_{\text{oc}} \ll c_a$ ¹⁷).

в) Основные эффекты АЛ электронных пар

Для основных АЛ пар в собственной структуре стекла — электронных ($\alpha = 1$) и дырочных ($\alpha = 2$) — в щели по подвижности плотность состояний $g_2(E_2/2) = \sum_{\alpha=1,2} g_2^{(\alpha)}(E_2/2)$ (на 1 носитель), формально определенная в ^{17, 134} сверткой плотностей распределения $g_0^{(\alpha)} \{ (1/2) [E_2 + (-)^{\alpha} (W_2^{(\alpha)}(\eta, t) + U_c^{(\alpha)})] \}$ и $F(\eta, t)$, может быть аппроксимирована структурой двух почти плоских полос с ширинами $\lesssim E_g/2$ (и, вообще говоря, возможных двух более узких «пиков») с большой $g_2(E_2/2) \lesssim 10^{20}/\text{см}^3 \cdot \text{эВ}$ и степенным спадом к области перекрытия вокруг уровня Ферми (на 1 частицу) ζ . Фактически происходит перераспределение зарядов с «перетеканием» их из полосы, рожденной в щели валентной зоной, в другую полосу, возникшую от зоны проводимости, с образованием реальных электронных $(2e)_0$ (и дырочных) пар в основном состоянии системы, ниже и выше ζ соответственно; для таких реальных пар характерны высокая концентрация $c_2 \lesssim 10^{-3} - 10^{-2}$ и эффективные «пики» плотности состояний большой величины $\lesssim 10^{19} - 10^{20} \text{ см}^3 \text{эВ}$ и ширины $\sim w_0 < E_g/4$; w_0 — масштаб спада $g_0(E)$. (Изложенное и имелось в виду в ^{17, 134}.) Такое поведение $g_2(E_2/2)$ в целом определяет при характерной для СП «симметрии» электронных и дырочных АЛ пар ($U_{\text{max}}^{(1)} \simeq U_{\text{max}}^{(2)}$) электронную структуру щели по подвижности с почти симметричными «пиками» плотности состояний реальных синглетных пар и стабилизацию ζ этими состояниями около середины щели¹⁷,

$$\zeta - E_2^* \simeq E_1^* - \zeta \approx \frac{E_g}{2}. \quad (5.14)$$

При этом концентрация c_1 одночастичных носителей заряда («лишних» электронов, дырок), соответствующих однократно заполненным состояниям с $U > 0$ очень мала, $c_1 \ll c_2$. Практически такие системы (СП) диамагнитны и, для света с $\hbar\omega < E_g$, прозрачны, поскольку спектр одночастичных возбуждений $(1_{\text{ex}}$, например, $(1e)_{\text{ex}}$) имеет щели: тепловую с шириной $\epsilon_{\text{th}} \simeq E_g/2$, определяющую соответствующую энергию активации проводимости, и оптическую $\epsilon_{\text{opt}} \simeq E_g$ соответственно, для теплового и франк-кондоновского распада АЛ пар. Спектр двухчастичных возбуждений $(2_{\text{ex}}$, например, $(2e_{\text{ex}})$) щели не имеет (как и в модели БКШ ⁷⁵ и в модели электронного спектра СП в ⁶⁸). В нем можно выделить, по крайней мере, возбуждения с высокой ($\epsilon_{\text{ex}}^{(2)} \gtrsim U_{\text{max}}/2$) и низкой ($\epsilon_{\text{ex}}^{(2)} \ll U_{\text{max}}/2$) энергией; последние могли бы внести вклад в аномалии теплоемкости и других свойств СП при $T \lesssim 1 \text{ К}$ (см., однако, ^{17, 68} и раздел 6).

Высокоэнергетические двухчастичные и одночастичные возбуждения, включающие метастабильные структурные изменения (см. выше) и характеризующиеся широкими, не обязательно монотонными, спектрами времен жизни τ , играют, с этой точки зрения, роль собственных метастабильных центров таких неравновесных (фотоиндуцированных и т. п.) явлений ^{17, 134}, как люминесценция ((2_{ex}) , при адиабатическом потенциале типа кривых (0) и (I) на рис. 1, а и б) и безызлучательные процессы — рекомбинации ((1_{ex}) и т. п.) и захвата носителей тока (1_{ex} , 2_{ex} и, например, $(2e)_0$), долгоживущих структурных изменений (при адиабатических потенциалах, подобных кривым (0) и (I) на рис. 1, в, г).

Для аморфных систем, для которых выполнено (5.13), в рассматриваемой теории получены следующие соотношения¹⁷:

$$E_{\text{opt}} \simeq \epsilon_{\text{opt}} \simeq 2\epsilon_{\text{opt}}^* \simeq 2\epsilon_{\text{th}} \simeq 2E_L \simeq E_X(L) \simeq E_g, \quad (5.14)$$

причем также $E_X(L) \lesssim E_g$, $2W_\sigma \simeq E_X(PC) \simeq E_g$; эти соотношения действительно найдены экспериментально для СП. В (5.14): E_{opt} и W_σ — ши-

рина основной оптической щели и энергия активации проводимости (с учетом распада АЛ пар и генерации обычных электронно-дырочных пар), ϵ_{opt}^* и E_L — характерные энергии слабого фотоиндуцированного поглощения и люминесценции, $E_X(L)$ и $E_X(PC)$ — пороговые энергии возбуждения люминесценции и фотопроводимости (для оксидных и подобных им стекол, при $E_g \gg \{Q_0, W_{\text{max}}\}$, соотношения (5.14), вообще говоря, не выполняются, и роль АЛ пар гораздо менее существенна, чем в СП). В рамках этой теории можно интерпретировать и предсказать некоторые новые электронные эффекты и их корреляции с низкотемпературными аномалиями свойств стекол, определяемые наличием общей причины — критических атомных потенциалов. К числу таких эффектов можно отнести (см. ^{17, 134, 138-142}), наблюдаемые в СП: сужение оптической щели при фотоструктурных изменениях, за счет новых электронных переходов с меньшей энергией ($< E_g$); огромный стоков сдвиг ($\approx E_g/2$), долговременные релаксации электронных распределений, проявляющиеся, в частности, в фотопроводимости; «усталость» (ослабление) люминесценции при непрерывном длительном освещении, за счет конкурирующих безызлучательных процессов структурных изменений, а также аномальный закон зависимости параметра интенсивности люминесценции от T , $I_L(T) \propto \exp(-T/T_A)$ с $T_A \approx w \approx 10-30$ К при $T_A \leq T < \omega_D/2$. Можно также ожидать, что $dI_L/dT \approx 0$ при $T \ll w$ и что возможен вклад в урбаховский хвост поглощения — при адиабатических потенциалах типа кривых (0) и (I) на рис. 1, 2, в согласии с моделями ^{143, 144}. Здесь следует также ожидать ^{17, 134} ослабления (или усиления) аномалий свойств СП (при $T \leq 1$ К) при фотовозбуждении АЛ пар (ср. экспериментальные результаты ¹⁴⁵), а также подавления эффектов АЛ пар и аномалий свойств в СП и a-Si : H или их усиления в a-Si соответственно, с ростом или уменьшением плотности вещества (ср. эксперимент в ¹⁴⁶).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленный обзор может свидетельствовать, что явление автолокализации электронов и дырок является довольно общим и существенным, по крайней мере, в неметаллических, особенно аморфных, твердых телах (и некоторых жидкостях, см. ^{147, 148}). Это явление определяет многие типы реальных носителей тока и связано с индуцированными электронами метастабильными состояниями и неустойчивостями атомных конфигураций, в том числе приводящими к нарушению симметрии и к дефектообразованию (структурным изменениям) *).

В теории АЛ состояний электронов и дырок можно указать ряд существенных проблем, которые касаются, в частности, особенностей андерсоновской локализации и моттовской проводимости, роли многоэлектронных эффектов и нелинейных связей электронов со средой, структуры возбужденных состояний электронных АЛ пар, АЛ в металлах. Представляется существенной также дальнейшая разработка проблем общей корреляции между возбуждениями электронных и дырочных АЛ пар и перестройкой химических связей (в согласии с идеей об общности между ковалентной связью и АЛ электронных пар ⁶⁸), и роли АЛ пар в аномалиях свойств СП при низких T и ω (см. ¹⁴⁹).

Можно надеяться, что исследования этих и других проблем теории АЛ состояний, в сопоставлении с экспериментальными исследованиями кинетических, оптических и индуцированных светом и другими облучениями эф-

* Связь между автолокализацией носителей заряда (и экситонов) и возникновением неустойчивостей атомных конфигураций, приводящих к созданию и преобразованию дефектов структуры твердых тел, обсуждалась недавно в ^{22, 426, 43, 44, 156, 157} для диэлектриков, в ^{141, 157, 158} для кристаллических полупроводников и (см. выше раздел в) гл. 5) в ^{134, 141, 157} для стеклообразных полупроводников.

фектов, приведут к новым результатам в физике полупроводников и ионных кристаллов (и, возможно, узкозонных металлов)*).

Автор имел неоценимую возможность обсудить ряд проблем теории автолокализации с И. М. Лифшицем, и эти обсуждения сыграли стимулирующую роль при написании этого обзора. Автор благодарен также Ю. М. Кагану, М. И. Каганову, М. А. Кривоглазу, Л. П. Питаевскому и В. Я. Френкелю за весьма полезные обсуждения.

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе
АН СССР, Ленинград

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д.— Phys. Zs. Sowjetunion, 1933, Bd. 3, S. 664.
2. Mott N. F.— Nature, 1937, v. 139, p. 951.
3. Мотт Н. Ф., Герни Р. У. Электронные процессы в ионных кристаллах/Пер. с англ. под ред. А. Ф. Иоффе.— М.: ИЛ, 1950.
4. Пекар С. И.— ЖЭТФ, 1946, т. 16, с. 335, 341.
5. Пекар С. И. Исследования по электронной теории кристаллов.— М.; Л.: Гостехиздат, 1951; УФН, 1956, т. 44, с. 156.
6. Frenkel J. I.— Phys. Zs. Sowjetunion, 1936, Bd. 9, S. 158.
7. Давыдов А. С. Теория поглощения света в молекулярных кристаллах.— Киев: Изд-во АН УССР, 1951.
8. Рашба Э. И.— Опт. и спектр., 1957, т. 2, с. 75, 88; т. 3, с. 568; Изв. АН СССР. Сер. физ., 1957, т. 21, с. 37.
9. Боголюбов Н. Н.— Укр. мат. ж., 1950, т. 2, с. 3.
10. Тябликов С. В.— ЖЭТФ, 1952, т. 23, с. 381.
11. Fröhlich H.— Adv. Phys., 1954, v. 3, p. 325.
12. Feynman R. P.— Phys. Rev., 1955, v. 97, p. 660.
13. Polarons and Excitons/Eds C. Kuper, G. Whitfield.— Edinburgh; London: Oliver and Boyd, 1963.
14. Каган Ю., Киркоин К. А.— Письма ЖЭТФ, 1980, т. 31, с. 367.
15. Кривоглаз М. А.— ФТТ, 1969, т. 11, с. 2230.
16. Лифшиц И. М., Гредескул С. А.— ЖЭТФ, 1969, т. 57, с. 2209.
17. Klinger M. I.— Phys. Rept., 1983, v. 94, p. 183.
18. Клингер М. И., Карпов В. Г.— ЖЭТФ, 1982, т. 82, с. 1687.
19. Appel J.— In: Solid State Physics Ed. F. Seitz, D. Turnbull, H. Ehrenreich — N. Y.; Lnd.: Academic Press, 1968, v. 21, p. 193.
20. Austin I. G., Mott N. F.— Adv. Phys., 1969, v. 18, p. 41.
21. Klinger M. I. Problems of Electron (Polaron) Transport Theory in Semiconductors.— Oxford; Pergamon Press, 1979.— (Intern. Series on Natural Philosophy).
22. Rashba N. I.— In: Excitons Eds E. I. Rashba, M. D. Sturge.— Amsterdam: North-Holland, 1982, p. 543.
23. Кривоглаз М. А.— УФН, 1973, т. III, с. 617.
24. Anderson P. W. Concepts in Solids.— N. Y.: Benjamin, 1964.
25. Emin D., Holstein T.— Phys. Rev. Lett., 1976, v. 36, p. 323.
26. De Gennes P. G.— Phys. Rev., 1960, v. 118, p. 141.
27. Нагаев Э. Л.— Письма ЖЭТФ, 1967, т. 6, с. 484; ЖЭТФ, 1968, т. 54, с. 228.
28. Антоныук В. Р.— Sol. State Comm., 1983, v. 45, p. 1031.
29. Ландау Л. Д., Пекар С. И.— ЖЭТФ, 1948, т. 18, с. 419.
30. Покатилов Е. П.— ФТП, 1964, т. 6, с. 2809.
31. Holstein T.— Ann. Phys. (N. Y.), 1959, v. 8, p. 325, 343.
32. Клингер М. И.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1961, т. 25, с. 1342.
33. Emin D., Holstein T.— Ann. phys. (N. Y.), 1969, v. 53, p. 439.
- Emin D.— Ibidem, 1971, v. 64, p. 336.

*) После сдачи статьи в редакцию появились новые публикации. В недавней работе¹⁵⁹, в рамках теории поляронов, использующей масштабные преобразования (см. (2.21))^{5, 25, 22}, анализируются условия существования малых биполяронов в кристаллах. В статье¹⁶⁰, обобщающей¹⁰¹, подобный анализ дан для неупорядоченных систем.

В только что опубликованной работе¹⁶¹ рассмотрены сверхпроводящие свойства систем, основным состоянием которых является бозеконденсат малых биполяронов сильной связи ($|U| \gg \Delta$, $U < 0$). Показано, что магнитные и критические свойства такой модели радикально отличаются от таковых для обычных сверхпроводников, описываемых моделью БКШ. Обсуждаются возможности реализации биполярной модели сверхпроводимости (см. ^{71, 72} и примечание на стр. 119).

Недавно появился также ряд работ, продолжающих экспериментальное и теоретическое исследование свойств сплавов $Pb_{1-c}Sn_cTe$ (In) (см. разделы б) и в) гл. 3), в которых существенную роль играют электронная АЛ и метастабильные электронные состояния (см. статью³⁷ и цитированные в ней работы).

34. Ланг И. Г., Фирсов Ю. А.— ЖЭТФ, 1968, т. 54, с. 826.
35. Клингер М. И.— ЖЭТФ, 1954, т. 26, с. 159, 168.
36. Proc. of 16th Intern. Conference on Physics of Semiconductors/Ed. F. Averous.—Amsterdam: North-Holland, 1983, v. 1.
37. Акимов Б. А., Брандт Н. Б., Рябова Л. И., Соковишин В. В.— ЖЭТФ, 1984, т. 84, с. 1349.
38. Воловик Г. Е., Эдельштейн В. М.— ЖЭТФ, 1973, т. 65, с. 1946.
39. Мельников В. И.— ЖЭТФ, 1977, т. 72, с. 2445.
40. Gogolin A. A. Preprint Series in Theoretical Physics HU-TFT-81-26.— Univ. of Helsinki, 1981; Landau Institute Preprint, No. 14.— Chernogolovka, 1980.
41. Дейген М. Ф., Пекар С. И.— ЖЭТФ, 1951, т. 21, с. 803.
42. Тоузозава Y.— а) Progr. Theor. Phys., 1961, v. 26, p. 24; б) Technical Report of ISSP 1983. Ser. A, No. 1367.— Tokyo, 1983. (Lecture held at Intern. School of Physics «Enrico Fermi» for Course «Highlights of Condensed Matter Theory». Varenna, 1983.)
43. Luschchik Ch. B., Kuusmann J., Plekhanov V.— J. Luminescence, 1979, v. 18, p. 11.
Luschchik Ch. B.— Цит. в ²² сб., p. 507.
44. Fugol' I. Ya.— Adv. Phys., 1978, v. 27, p. 1.
Фуголь И. Я., Савченко Е. В.— В кн. Кристаллы/Под ред. Б. И. Веркина, А. Ф. Прихотьюко.— Киев: Наукова думка, 1983, с. 360.
45. Vosman A. J., van Daal H. J.— Adv. Phys., 1970, v. 19, p. 1.
Ioffe A. V., Patrino I. B.— Phys. Stat. Sol., 1970, v. 41, p. 389.
46. Рашба Э. И.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1976, т. 40, с. 1793.
47. Sumi H. Technical Report of ISSP Ser. A, No. 496.— Tokyo, 1971.
48. Рашба Э. И.— ФНТ, 1977, т. 3, с. 524.
49. Захаров В. Е., Соболев В. В., Синах В. С.— Ж. прикл. мех. и техн. физ., 1972, т. 1, с. 9.
50. Фуголь И. Я., Тарасова Е. И.— ФНТ, 1977, т. 3, с. 336.
51. Тоузозава Y.— In: Proc. of Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics/Eds K. Koch, R. Haenjel, C. Kunz.— Pergamon; Vieweg, 1974, p. 317.
52. Emin D.— Adv. Phys., 1973, v. 22, p. 57.
53. Иорданский С. В., Рашба Э. И.— ЖЭТФ, 1978, т. 74, с. 1872.
54. Mott N. F., Stoneham A. M.— J. Phys. Ser. C, 1977, т. 10, p. 3391.
55. Каган Yu., Klingner M. I.— Ibidem, 1974, v. 7, p. 2791.
56. Тоузозава Т.— Цит. в ³⁵ сб., p. 23.
57. Агранович В. М., Антонюк В. П., Иванова Е. Н., Мальшук-ов А. Г.— ЖЭТФ, 1977, т. 72, с. 614.
58. Давыдов Н. С., Кислуха Н. И.— ЖЭТФ, 1976, т. 71, с. 1090.
59. Давыдов А. С.— УФН, 1982, т. 138, с. 603.
60. Levinson Y. B., Rashba E. I.— Rept. Progr. Phys., 1973, v. 36, p. 1499.
61. Бразовский С. А.— Письма ЖЭТФ, 1978, т. 28, с. 656; ЖЭТФ, 1980, т. 78, с. 677.
Бразовский С. А., Кирова Н. Н.— В кн. Труды международной конференции по низкотемпературным синтетическим материалам.— 1981, т. 17, с. 171.
62. Su W. P., Schrieffer J. R., Heeger A. J.— Phys. Rev. Lett., 1979, v. 42, p. 1698.
Schrieffer J. R., Kivelson S.— In: Physics in One Dimension.— Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1981.
63. Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках.— М.: Наука, 1972.
64. Кусмарцев Ф. В., Рашба Э. И.— Письма ЖЭТФ, 1981, т. 33, с. 164; ЖЭТФ, 1984, т. 86, с. 1142.
65. Пекар С. И., Хазан Л. С., Шека В. И.— ЖЭТФ, 1978, т. 65, с. 1999.
66. Каган Ю., Клингер М. И.— ЖЭТФ, 1976, т. 70, с. 255.
67. Клингер М. И.— Письма ЖЭТФ, 1978, т. 27, с. 366.
68. Anderson P. W.— Phys. Rev. Lett., 1975, v. 34, 953.
69. Винецкий В. Л.— ЖЭТФ, 1961, т. 40, с. 1459.
70. Lakkis S., Schlenker C., Chakraverty B. K., Buder R., Marezio M.— Phys. Rev. Ser. B, 1976, v. 14, p. 1429.
Schlenker C., Ahmed S., Buder R., Gourmala M.— J. Phys. Ser. C, 1979, v. 12, p. 3503.
Rice T. M., Sneddon L.— Phys. Rev. Lett., 1981, v. 47, p. 589.
71. Mott N. F.— Phil. Mag. B, 1980, v. 42, p. 3273.
Chakraverty B. K.— Ibidem, p. 473.
72. а) Alexandrov A., Ranninger J.— Phys. Rev. Ser. B, 1981, v. 23, p. 1796; 1981, v. 24, p. 1164.
б) Chakraverty B. K.— J. de Phys., 1981, v. 42, p. 1351.
73. Милнс А. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках/Пер. с англ. под ред. М. К. Шейнмана.— М.: Мир, 1977.
74. Gehlig R., Salje E.— Phil. Mag. Ser. B, 1983, v. 47, p. 229.

75. Шрифффер Дж. Теория сверхпроводимости/Пер. с англ. под ред. Д. А. Киржница — М.: Наука, 1970.
76. Pitaevsky L. P.— In: Theory of Light Scattering in Condensed Matter/Eds. B. Bendow, J. Birman, V. Agranovich.— N. Y.: Plenum Press, 1976.
77. Takeda Y.— Phys. Rev. Ser. B, 1982, v. 26, p. 1223.
78. Мотт Н. Ф. Переходы металл-изолятор/Пер. с англ. под ред. С. В. Вонсовского.— М.: Наука, 1979.
79. Лахно В. Д., Нагаев Э. Л.— ФТТ, 1976, т. 18, с. 3429.
80. Brinkman W. P., Rice T. M.— Phys. Rev. Ser. B, 1970, v. 2, p. 4342, 4302.
81. Изюмов Ю. А., Медведев М. В.— ЖЭТФ, 1970, т. 59, с. 553.
82. Klama S., Klinger M. I.— Acta Phys. Polon. Ser. A, 1970, v. 37, p. 783.
83. Emin D., Liu N. H.— Phys. Rev. Ser. B, 1983, v. 27, p. 4788.
84. Пекар С. И., Дейген М. Ф.— ЖЭТФ, 1948, т. 18, с. 481.
85. Кривоглаз М. А., Пекар С. И.— Тр. ИФАН УССР, 1953, вып. 4, с. 37.
86. Rogowski S. M., Kopczukowski M., Chroboczek J.— Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1974, v. 63, p. 291.
87. Langer T. M.— Rad. Effects, 1983, v. 72, p. 55.
88. Стоунхэм А. М. Теория дефектов в твердых телах/Пер. с англ. под ред. И. Е. Дзялошинского.— М.: Мир, 1978.
89. Baraff G. A., Kane E. O., Schluter M.— Phys. Rev. Lett., 1979, v. 43, p. 956; Phys. Rev. Ser. B, 1980, v. 21, p. 5622.
90. Watkins G. D.— In: Lattice Defects in Semiconductors/Ed. F. A. Hunley.— Inst. of Phys. Conf. Series (London — Bristol), 1974, No. 23, p. 1.
Newon J. L., Chatterjee A. P., Harris R. D., Watkins G. D.— Physics, 1983, v. 116.
91. Nagayanamurti V., Pohl R. O.— Rev. Mod. Phys., 1970, v. 42, p. 201.
92. Клингер М. И., Карпов В. Г.— Письма ЖЭТФ, 1980, т. 6, с. 1473.
93. а) Волков Б. А., Панкратов О. А.— ДАН СССР, 1980, т. 255, с. 98.
Волков Б. А., Осипов В. В., Панкратов О. А.— ФТП, 1980, т. 14, с. 1387.
б) Волков Б. А., Панкратов О. А.— В кн. Труды Всесоюзной конференции по физике полупроводников.— Баку, 1983, т. 2, с. 119.
94. Аверкин А. А., Кайданов В. И., Мельник Р. Б.— ФТП, 1971, т. 5, с. 91.
Вул Б. М., Воронова И. Д., Калужная Г. А., Мамедов Т. С., Рагимова Т. Ш.— Письма ЖЭТФ, 1979, т. 29, с. 21.
Акимов Б. А., Брандт Н. Б., Богославский С. А., Рябова Л. И., Чудинов С. М.— Ibidem, с. 41.
95. Андреев Я. В., Гейман К. И., Драбкин И. А., Матвеевко А. В., Можаяев Е. А., Мойжес Б. Я.— ФТП, 1975, т. 9, с. 1873.
Драбкин И. А., Мойжес Б. Я.— ФТП, 1981, т. 15, с. 625.
96. Мотт Н. Ф., Дэвис Э. А., Электронные процессы в некристаллических твердых телах/Пер. с англ. под ред. Б. Т. Коломийца.— М.: Мир, 1974.
97. Abrahams E., Anderson P. W., Licciardello D., Ramakrishnan T. V.— Phys. Rev. Lett., 1979, v. 42, p. 673.
Альтшулер В. Л., Аронов А. Г., Хмельницкий Д. Е., Ларкин А. И.— ЖЭТФ, 1981, т. 81, с. 768.
98. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников.— М.: Наука, 1979.
99. Kane E. O.— Phys. Rev., 1963, v. 191, p. 79.
Келдыш Л. В., Прошко Г. П.— ФТП, 1963, т. 5, с. 3378.
Бонч-Бруевич В. Л.— В сб. Физика твердого тела.— М.: ВИНТИ, 1965.
100. Лифшиц И. М.— ЖЭТФ, 1967, т. 53, с. 743.
101. Cohen M. E., Esomomou E. N., Soukoulis C. M.— Phys. Rev. Lett., 1983, v. 51, p. 1202.
102. Emin D.— Comm. Sol. State Phys., 1983, v. 11, p. 35, 59.
103. Anderson P. W.— Phys. Rev., 1958, v. 109, p. 1492; цит. в ³⁶ сб., p. 36.
104. Klinger M. I.— J. Phys. Ser. C, 1976, v. 9, p. 3955.
105. Кривоглаз М. А.— ФТТ, 1970, т. 12, с. 3496.
106. Дыхне А. М., Кривоглаз М. А.— ФТТ, 1970, т. 12, с. 1705.
107. Кривоглаз М. А.— ФТТ, 1972, т. 14, с. 2092.
108. Kasuya T.— In: Proc. of 10th Intern. Conference on Physics of Semiconductors.— Cambridge, Mass, 1970, p. 243.
109. Kasuya T., Yanase A., Takeda T.— Sol. State Comm., 1970, v. 8, p. 1551.
110. Андреев А. Ф.— Письма ЖЭТФ, 1976, т. 24, с. 607.
111. Иорданский С. В.— Ibidem, 1977, т. 26, с. 133.
112. Heritier M., Lederer P.— J. de Phys. Lett., 1977, t. 38, p. 1209.
113. Klinger M. I.— J. Phys. Ser. C, 1978, v. 11, p. 915.
114. Кривоглаз М. А., Грущенко А. А.— ФТТ, 1969, т. 11, с. 3119.
115. Кривоглаз М. А.— ФТТ, 1973, т. 15, с. 1141.
116. Kasuya T., Yanase A., Takeda T.— Sol. State Comm., 1970, v. 8, p. 1543.

117. Кривоглаз М. А., Левенсон Г. Ф.— ФТТ, 1970, т. 12, с. 362.
118. Егоров Б. В., Кривоглаз М. А.— ФТТ, 1979, т. 21, с. 1416; ЖЭТФ, 1980, т. 78, с. 2274.
119. Кривоглаз М. А.— ЖЭТФ, 1972, т. 62, с. 670.
120. Ларкин А. И., Хмельницкий Д. Е.— ЖЭТФ, 1968, т. 18, с. 3429.
121. Кривоглаз М. А., Карасевский А. И.— ФТТ, 1974, т. 16, с. 1458; 1975, т. 17, с. 2565.
122. Кашин В. А., Нагаев Э. Л.— ЖЭТФ, 1974, т. 66, с. 2105.
Нагаев Э. Л.— Письма ЖЭТФ, 1972, т. 16, с. 558.
123. Anderson P. W.— J. de Phys., 1976, t. 37, coll 4, p. 339.
124. Street R. A., Mott N. F.— Phys. Rev. Lett., 1975, v. 35, p. 1293.
125. Клингер М. И., Карпов В. Г.— Письма ЖЭТФ, 1980, т. 6, с. 1973.
126. Клингер М. И., Карпов В. Г.— ЖЭТФ, 1982, т. 82, с. 1687.
127. Карпов В. Г., Клингер М. И., Игнатъев Ф. Н.— ЖЭТФ, 1983, т. 84, с. 760.
128. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 1.— М. Наука, 1976.
129. Frenkel J. I.— Acta Physicochim USSR, 1935, v. 3, p. 633.
130. Anderson P. W., Halperin B. I., Varma C. M.— Phil. Mag., 1972, v. 25, p. 1.
Phillips W. A.— J. Low Temp. Phys., 1972, v. 7, p. 351.
131. Amorphous Solids/Ed. W. A. Phillips.— Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1981.
132. Klingler M. I.— Sol. State Comm., 1984, v. 51, p. 503.
133. Карпов В. Г., Паршин Д. А.— Письма ЖЭТФ, 1983, т. 38, с. 536.
134. Клингер М. И.— ДАН СССР, 1984, т. 279, № 1, с. 91; Sol. State Comm., 1984, v. 50, p. 13.
135. Карпов В. Г.— ЖЭТФ, 1983, т. 85, с. 883.
136. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая Механика.— М.: Физматгиз, 1963.
137. Hjalmarson H. J., Volgl P., Wolford D., Dow J. D.— Phys. Rev. Lett., 1980, v. 44, p. 810.
138. Licciardello D. et al.— Phil. Mag., 1981, v. 43, p. 189.
139. Kolomiets B. T., Lyubin V. M.— Mat. Res. Bull., 1978, v. 13, p. 1343.
140. Kosa Somogyi I. Structure and Photoluminescence of a Ge_xSe_{1-x} : Preprint.— Budapest: Central Institute of Physics, 1982.
141. Клингер М. И., Машовец Т. В.— В кн. Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Физика радиационных повреждений», Вып. 4.— Харьков, ХФТИ, 1984.
142. Любин В. М.— В кн. Несеребряные фотографические процессы.— Л.: Химия, 1984, с. 193.
143. Kolobov A. V., Konstantinov O. V.— Phil. Mag., 1979, v. 4, p. 475; 1983, v. 47, p. 1.
144. Гельмонт Б. Л., Перель В. И., Ясневич И. Н.— ФТП, 1983, т. 25, с. 727.
145. Fox B. et al.— Phys. Rev. Lett., 1982, v. 49, p. 1356.
146. Graebner J. E., Allen L. C.— Ibidem, 1983, v. 51, p. 1566.
147. Careri G., Fasoli O., Gaeta F.— Nuovo Cimento, 1960, v. 15, p. 774.
148. Ogg R. A.— Phys. Rev., 1946, v. 69, p. 668.
149. Phillips W. A.— Phil. Mag., 1976, v. 34, p. 983.
Sethna J. P.— Phys. Rev. Ser. B, 1982, v. 25, p. 5050.
150. Кулик И. О., Педан А. Г.— ЖЭТФ 1980, т. 79, с. 1469; Sol. State Comm., 1983, v. 45, p. 971.
151. Ионов С. П., Любимов В. С., Макаров Е. Ф., Ионова Г. В., Уимин Г. В.— Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1975, v. 72, p. 515.
152. а) Ионов С. П., Ионова Г. В., Любимов В. С.— Письма ЖЭТФ, 1970, т. 12, с. 1544.
б) Макаров Е. Ф., Амелин И. И., Ионов С. П.— Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1975, v. 71, p. 135.
153. Александров А. С., Елесин В. Ф.— ФТТ, 1983, т. 25, с. 456.
154. Kubo K., Takada S.— J. Phys. Soc. Japan, 1983, v. 52, p. 2108.
155. Гинзбург В. Л.— УФН, 1952, т. 48, с. 25.
Schafroth M. R. et al.— Helv. Phys. Acta, 1957, v. 30, p. 93.
156. Тоуоэава Y.— Semicond. and Insulators, 1983, v. 5, p. 175.
157. Клингер М. И., Лушик Ч. Б., Машовец Т. В., Холодарь Г. А., Шейнкман М. К., Эланго М. А.— УФН, 1985.
158. Тележкин В. А., Толпыго К. Б.— ФТТ, 1982, т. 16, с. 1337.
159. Cohen M. H. et al.— Phys. Rev. Ser. B, 1984, v. 29, p. 4496.
160. Cohen M. H., Esomomou E. N., Sonkolis C. M.— Ibidem, p. 4500.
161. Булаевский Л. Н., Собянин А. А., Хомский Д. И.— ЖЭТФ, 1984, т. 84, с. 1490.