

скоро энергии ионизации первых гораздо больше, нежели вторых. Таким образом, оказывается возможным рассматривать систему валентных электронов, движущихся в поле атомных ядер и среднем поле внутренних электронов. Иначе говоря, индекс i в уравнении (2.5а) нумерует теперь только валентные электроны, а величина U_2 есть потенциальная энергия электрона в поле атомного остова. Это приближение можно назвать валентным. Им обычно пользуются при изучении большинства полупроводников. Пример, когда валентное приближение может оказаться недостаточным, представляют вещества, содержащие ионы или атомы переходных или редкоземельных элементов: электроны незаполненных внутренних оболочек также надо рассматривать явно.

Подчеркнем, наконец, что разделение всех электронов на «входящие в атомные остовы» и «рассматриваемые явно» не носит абсолютного характера, а зависит от изучаемого явления. Если энергия какого-либо внешнего воздействия сравнима с энергией ионизации внутренних оболочек, то соответствующие электроны надо рассматривать явно. Так, например, обстоит дело в случае поглощения рентгеновских лучей кристаллами или при прохождении быстрых атомных частиц через вещество.

§ 4. Роль колебаний решетки. Полярон

Обратимся ко второму из вопросов, поставленных в § 1, — о роли неизбежной неидеальности решетки, связанной с ее колебаниями. В сущности, ответ на этот вопрос содержится уже в принятой в гл. XIV постановке задачи о рассеянии носителей заряда: в задаче об энергетическом спектре электронов неидеальностью решетки можно пренебречь, если она достаточно мало влияет на полную энергию электрона. Соответствующий количественный критерий не отличается от условий применимости кинетического уравнения (XIV. 2.22а, б).

Как показывают оценки, во всех исследованных до сих пор материалах взаимодействие носителей заряда с акустическими колебаниями оказывается слабым в указанном смысле. То же относится и к взаимодействию с оптическими колебаниями в неполярных кристаллах и в полупроводниках типа $A^{III}B^V$. Положение, однако, радикально меняется при переходе к ионным кристаллам — щелочно-галогидным и др. Взаимодействие электронов и дырок с продольными оптическими колебаниями в этих веществах оказывается столь сильным, что знак в неравенстве (XIV. 2.22а) может измениться на обратный.

Причину этого легко понять. В ионных кристаллах продольные оптические колебания решетки связаны с изменениями дипольных моментов элементарных ячеек. При этом меняется и вектор инер-

ционной поляризации среды *). По этой причине колебания указанного типа часто называют поляризационными. Энергия взаимодействия электрона с ними есть не что иное, как изменение энергии взаимодействия заряда с дипольными моментами элементарных ячеек при оптических колебаниях. В силу сравнительно медленного убывания напряженности поля диполя с расстоянием вклад в энергию в каждой точке пространства происходит от большого числа элементарных ячеек. Это приводит к сравнительно большому значению энергии взаимодействия и, соответственно, малому значению времени релаксации, формально вычисленному по обычной схеме кинетического уравнения. Отсюда следует, что в рассматриваемых материалах взаимодействие электронов с поляризационными колебаниями решетки надлежит явно принимать во внимание при определении энергетического спектра электронов и дырок. Представление о движении электрона в идеальной решетке здесь становится неоправданным, и мы приходим к задаче, выходящей за рамки зонной теории.

Характер энергетического спектра электрона, сильно взаимодействующего с поляризационными колебаниями решетки, можно представить себе с помощью наглядных соображений полуклассического характера. Рассмотрим поведение заряженной частицы в инерционно поляризующейся среде. Взаимодействие заряда с ионами среды приводит к появлению поляризации. Связанное с ней электрическое поле в свою очередь действует на заряд, понижая его потенциальную энергию. Возникает созданная самим зарядом поляризационная потенциальная яма, в которой он и находится **). Выйти из нее (т. е. деполаризовать решетку) заряду энергетически невыгодно. Перемещение заряда по решетке сопровождается и перемещением созданной им поляризации. При этом инерционность поляризации замедляет движение заряда, ибо для «рассасывания» потенциальной ямы в одном месте кристалла и возникновения ее в другом требуется конечное время. Таким образом, роль носителей заряда в инерционно поляризующейся среде играют не электроны (или дырки) обычного типа, а более сложные объекты — электроны (дырки) вместе с созданными ими поляризационными ямами. Эти объекты получили название *поляронов* ***).

*) Как известно, инерционная поляризация кристалла обусловлена смещениями ионов решетки из их положений равновесия, безынерционная — деформацией электронных оболочек ионов.

***) Об этом иногда говорят как об «автолокализации» электрона. Пользуясь этим термином, следует помнить о несколько условном его смысле: в отсутствие каких-либо структурных дефектов такая яма может быть с равной вероятностью обнаружена в любой точке кристалла.

***) Этот термин был предложен С. И. Пекаром [2], впервые подробно изучившим рассматриваемые состояния. Исходное представление об автолокализации электрона в инерционно поляризующейся среде восходит к работам Л. Д. Ландау и Я. И. Френкеля, выполненным в 30-х годах. Количественная теория

Размер полярона определяется размером поляризационной потенциальной ямы. Здесь выделяются два предельных случая.

1) Радиус ямы значительно превышает постоянную решетки. В этом случае говорят о поляронах большого радиуса. Такие поляроны возникают, видимо, в ряде ионных кристаллов — щелочно-галлоидных, закиси меди и др.

2) Радиус ямы близок к постоянной решетки. При этом говорят о поляронах малого радиуса. Подобные объекты, по-видимому, образуются в рутиле.

Движение полярона как целого можно охарактеризовать квазиимпульсом. Как и квазиимпульс свободного электрона в зонной теории, он описывает «почти стационарные» (стационарные в отсутствие рассеяния) состояния системы: энергию движения полярона как целого можно рассматривать как функцию квазиимпульса. Это позволяет ввести представления о поляронных энергетических зонах и об эффективной массе полярона. Очевидно, последняя превышает эффективную массу, которой в том же кристалле обладал бы свободный электрон в пренебрежении его взаимодействием с инерционной поляризацией. Соответственно поляронная зона оказывается более узкой.

Сложные свойства носителя заряда — полярона — особенно ярко проявляются в том, что полярон может иметь внутреннюю структуру: поляризационная потенциальная яма, созданная электроном (дыркой), содержит несколько дискретных уровней, отвечающих разным распределениям плотности заряда в яме и разным значениям ее радиуса *). Переходы между дискретными уровнями в поляроне могут быть вызваны, например, электромагнитным излучением. Связанное с ними поглощение света, по-видимому, наблюдалось в металл-аммиачных растворах; роль носителей заряда при этом играли не электроны, а ионы металла, движущиеся в полярном растворителе.

Другая особенность поляронных состояний состоит в том, что они исчезают в достаточно сильных электрических полях. Действительно, поляризационная яма, сопровождающая электрон, представляет собой не что иное, как набор продольных оптических фононов с разными длинами волн. По этой причине скорость ее перемещения не может превышать групповую скорость поляризационных фононов. Следовательно, при достаточно большой дрейфовой скорости электрон «отрывается» от поляризационной ямы, превращаясь в обычный зонный электрон: поляризационная яма при этом прекращает свое существование.

поляронов большого радиуса была развита в 40—50-х годах в работах Н. Н. Боголюбова, С. И. Пекара и С. В. Тябликова.

*) Термин «дискретный уровень» имеет смысл только при заданном значении квазиимпульса полярона. При учете движения полярона как целого каждый из уровней размывается в узкую зону.