

В зависимости от величины α различают случаи слабой ($\alpha \ll 1$), промежуточной ($\alpha \sim 1$) и сильной ($\alpha \gg 1$) электрон-фононных связей.

Полярон сильной связи. При $\alpha \gg 1$ поляризация решётки является статической, она создаёт потенциал, захватывающий электрон на локальный уровень, а электрон своим электрич. полем поддерживает поляризацию, т.е. возникающее состояние является самосогласованным. Ур-ние Шрёдингера для П. имеет вид [1-3]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - \frac{e^2}{\epsilon} \int dr' \frac{|\Psi(r')|^2}{|r-r'|} \Psi(r) = \epsilon_0 \Psi(r), \quad (3)$$

где ϵ_0 — энергия электрона в поле решётки.

Поляризация решётки выражается через $\psi(r): P(r) = D(r)/4\pi\epsilon$, где $D(r)$ — электростатич. индукция, создаваемая электрич. зарядом с плотностью $-e|\psi(r)|^2$. Энергия электрона в поле решётки $\epsilon_0 < 0$, а полная энергия П., включающая энергию поляризации решётки, равна $\epsilon = \epsilon_0/3$. Ур-ние (3) описывает автолокализ. состояние электрона с радиусом локализации $r_{\text{л}} \sim \hbar^2 \epsilon / m e^2$ (см. Автолокализация).

Ур-ние (3) справедливо, если $r_{\text{л}}$ значительно больше постоянной решётки (П. большого радиуса). Энергия $|\epsilon_0| \sim m e^4 / \hbar^2 \epsilon^2 \sim \alpha^2 \omega_0$, и условие применимости адиабатич. приближения, когда электрон движется в поле неподвижной решётки, $|\epsilon_0| \gg \hbar \omega_0$. При этом применима теория сильной связи, в к-рой параметром разложения является $\alpha^{-2} \ll 1$.

Из-за взаимодействия фононов с автолокализ. электроном вблизи П. изменяется фононный спектр, т.е. образуются локальные фононные моды с частотами $\omega < \omega_0$. Их возбуждение соответствует образованию связанных состояний П. с фононами [4]. Три частоты фононов обращаются в нуль, что означает возникновение 3 трансляционных степеней свободы П. Энергия П.

$$\epsilon \approx - (0,1085\alpha^2 + 2,836)\hbar\omega_0, \quad (4)$$

его эфф. масса

$$m^* \approx 0,023\alpha^4 m. \quad (5)$$

Быстрый рост m^* с увеличением α объясняется тем, что движение П. сопровождается перемещением его поляризац. «шубы». Ур-ние (3) кроме осн. состояния П. описывает также возбуждённое автолокализ. состояние. Оптич. переходы между ними являются причиной поглощения света на частотах $\omega \sim \epsilon_0/\hbar$.

Полярон слабой связи. При $\alpha \ll 1$ свойства П. описываются с помощью теории возмущений, что приводит к ф-лам

$$\epsilon \approx -\alpha \hbar \omega_0, \quad m^* \approx m / (1 - \alpha/6). \quad (6)$$

Ф-лы для энергии (4), (6) «сшиваются» при $\alpha \sim 5$ (рис. 1). При промежуточной связи теория основывается на вариц. методах [5].

Подвижность П. μ при $\alpha \lesssim 1$ определяется их однофононным рассеянием: $\mu \propto \alpha^1$. При $\alpha \gg 1$ рассеяние П. становится двухфононным и при низких темп-рах $\mu \propto \alpha^2$.

При $\alpha \ll 1$ поляронный эффект проявляется в т.н. магнетофононном резонансе [6]. Причина явления — резонансное усиление влияния электрон-фононного взаимодействия на энергетич. спектр П. в магн. поле H при циклотронной частоте электрона $\omega_c = eH/mc \approx \omega_0$. Вблизи $\omega_c = \omega_0$ электронный спектр расщепляется на 2 ветви (рис. 2); величина расщепления $\sim \alpha^2/\omega_0$. Нижняя ветвь (1) является стационарной — «затухание» $\Gamma = 0$. Состояния, соответствующие верх. ветви (1'), являются затухающими (распадными), для них $\Gamma \sim \alpha^2/\omega_0$ при $\omega_c \approx \omega_0$ и быстро убывает с ростом ω_c . Вблизи $\omega_c \approx \omega_0$ изменяется волновая ф-ция П.: вдали от резонанса число виртуальных фононов в «шубе» электрона $N \propto \alpha$, а в резонансе $N \approx 1/2$. Магнетофононный резонанс наблюдается по расщеплению линий

циклотронного резонанса и комбинированного резонанса, а также по межзональному поглощению света в магн. поле. Он позволяет измерить α . Др. проявление поляронного эффекта — плавная зависимость $m^*(H)$, определяемая из циклотронного резонанса: $m^* = eH/\hbar\omega_c$. С ростом H масса П. m^* растёт тем быстрее, чем больше α .

Величина α при $m \approx m_0$ и $\bar{\epsilon} \approx 1$ (m_0 — масса электрона в вакууме) велика: $\alpha \approx (\epsilon_0/\hbar\omega_0) \approx 10$ ($|\epsilon_0| \approx 10$ эВ — энергия электрона в атоме). Но т.к. в кристаллах часто $m \ll m_0$, $\bar{\epsilon} \gg 1$, то $\alpha \gtrsim 1$ либо $\alpha \ll 1$. Поэтому П. слабой связи возникают во мн. веществах (табл.).

Значения константы связи α и эффективной массы полярона m^* (в единицах m_0) для некоторых кристаллов

Кристалл	α	m^*
InSb	0,02	0,01
GaAs	0,06	0,07
CdTe	0,4	0,1
CdS	0,6	0,2
AgBr	1,5	0,3
AgCl	1,8	0,4
KBr	3,7	0,5
RbCl	4,1	1,0

Полярон малого радиуса. Если $m^* \sim m_0$ и связь сильная, то П. сосредоточен на 1-2 узлах кристаллич. решётки (П. малого радиуса). Такой П. (дырочный или электронный) взаимодействует преим. с КВ-фононами (акустическими и оптическими). Его энергия $|\epsilon| \gg \epsilon_0$, где ϵ_0 — ширина разрешённой электронной зоны в кристалле с недеформиров. решёткой. Спектр П. имеет зонную структуру. Ширина поляронной зоны $\epsilon_{\text{п}} = \epsilon_0 \exp(-S_0)$, где $S_0 \sim |\epsilon|/\hbar\omega_0 \gg 1$, т.е. она крайне узка, а m^* столь же велика.

В совершенном кристалле при низких темп-рах поляронная проводимость (носители заряда — П.) является зонной, но примеси и дефекты легко разрушают поляронную зону. С ростом T она быстро сужается, т.к. $S(T) = S_0 \text{cth}(\hbar\omega_0/2kT)$, и зонный механизм проводимости сменяется прыжковым (см. Прыжковая проводимость). В классич. области коэф. диффузии П. $D \propto \exp(-\epsilon_{\text{акт}}/kT)$, где $\epsilon_{\text{акт}} \approx |\epsilon_{\text{п}}|$ — энергия активации. Дырочные П. в щёлочно-галогидных кристаллах и отвердевших благородных газах являются молекулярными ионами типа Cl_2^- и Ar_2^+ [6].

Неполяризованное электрон-фононное взаимодействие. В трёхмерном случае электрон, взаимодействующий с акустич. фононами, либо не автолокализуется, либо образует П. малого радиуса (это энергетич. состояние отделено от зонного состояния электрона автолокализ. барьером). Напротив, в одномерной системе возможно существование П. большого радиуса, причём он образуется из зонного состояния электрона «безбарьерно» [7]. Ур-ние Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} - d\Psi^2(x) = \epsilon_0 \Psi(x) \quad (7)$$

в этом случае имеет точное решение (см. Шрёдингера уравнение нелинейное). В случае взаимодействия с оптич. фононами $g = 2\hbar\alpha(2\hbar\omega_0/m)^{1/2}$ и $\psi(x) = (b/2)^{1/2} \text{sech}(bx)$, $b = \alpha(2m\omega_0/\hbar)^{1/2}$, $\epsilon_0 = -\alpha^2\omega_0$, где $\alpha \gg 1$ — константа связи. Ф-лы, аналогичные (4) и (5), имеют вид:

$$\epsilon \approx -\left(\frac{1}{3}\alpha^2 + 0,955\right)\hbar\omega_0, \quad m^* = \frac{32}{15}\alpha^4 m. \quad (8)$$

Константа α выбрана так, что при слабой связи $\epsilon \approx -\alpha\hbar\omega_0$, как и в (6). Переход к сильной связи происходит при $\alpha \approx 1,5$, т.е. раньше, чем для трёхмерного П.

Наиб. изучены проводящие полимеры типа полнацетилен (СН)_x с сопряжёнными связями (см. Квазиодномерные соединения). В нек-рых из них осн. диэлектрич. состояние системы возникает вследствие Пайерлса перехода, создающего чередующуюся последовательность одинарных и двойных связей, а в других равноценность связей нарушается также и периодич.