два атома решетки, которые опишем (вместе с их окружением) конфигурационными координатами q_1 и q_2. Пусть малый полярон локализован возле одного из атомов. Переход электрона от атома 1 к атому 2 и, следовательно, образование малого полярона у атома 2 происходит тогда, когда энергии электрона одинаковы в обоих местах: $Bq_1 = Bq_2$. Энергия, необходимая для образования состояния $q_1 = q_2$, есть $A(q_1 - q_0)^2 + Aq_2^2 = A(q_1 - q_0)^2 + Aq_1^2$. Она имеет минимум при $q_1 = q_0/2$. Чтобы стала возможной смена места, колебания решетки должны передать по крайней мере энергию $W_н = Aq_0^2/2$ (т. е. половину энергии связи полярона). Вероятность прыжкового перехода w имеет, следовательно, температурную зависимость, пропорциональную $\exp(-W_н/k_BT)$. Вероятность w равна произведению этого экспоненциального фактора и характеристической частоты, по порядку величины близкой к фононной частоте. Эта вероятность перехода может быть использована для оценки постоянной диффузии, а из нее — прыжковой подвижности. Отсюда следуют максимальные значения прыжковой подвижности малого полярона порядка 0,1 см^2 В$^{-1}$с$^{-1}$.

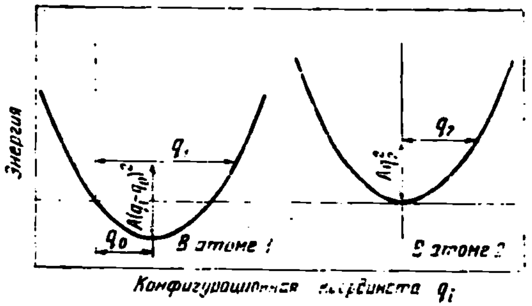

Рис. 16. Описание процессов перескока в полярных твердых телах посредством модели конфигурационной координаты

Мы вернемся к подобному рассмотрению в разделе Б гл. 3, когда будем говорить о механизмах перескока в неупорядоченных решетках. Здесь мы хотим уточнить эту грубую оценку с помощью количественного рассмотрения локализованных электронов в полярных и неполярных решетках, учитывая электрон-фононное взаимодействие. Мы близки здесь к работе Шнакенберга *), к которой и отсылаем за подробностями.

Гамильтониан состоит из электронного члена, фононного члена и электрон-фононного взаимодействия. Запишем электронный член в виде

$$H_{el} = \sum_n E_n c_n^+ c_n + \sum_{mn}' V_{mn} c_m^+ c_n, \tag{1.90}$$

где E_n могут быть одинаковыми или считаться распределенными по заданной области энергий; c_n^+, c_n — операторы рождения и уничтожения электрона, локализованного в узле решетки $\mathbf{R}_n$; V_{nm} —

*) *Schnakenberg J.*— Phys. stat. sol., 1968, v. 28, p. 623.