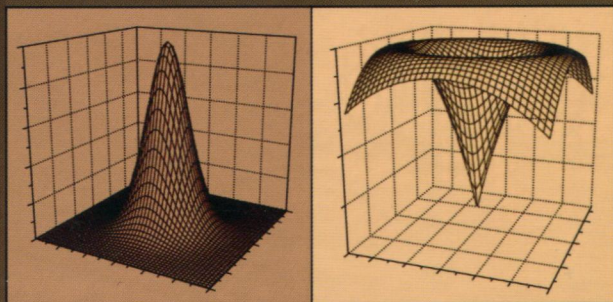
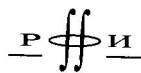


**Н.И. Каширина
В.Д. Лахно**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ
АВТОЛОКАЛИЗОВАННЫХ
СОСТОЯНИЙ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СРЕДАХ**



УДК 538.9
ББК 22.379, 34.2
К 31



*Издание осуществлено при поддержке
Российского фонда фундаментальных
исследований по проекту 13-01-07004,
не подлежит продаже*

Каширина Н.И., Лахно В.Д. **Математическое моделирование автолокализованных состояний в конденсированных средах.** — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. — 292 с. — ISBN 978-5-9221-1530-8.

Монография посвящена изучению поляронных эффектов в двухэлектронных системах: теории биполяронов большого радиуса, D^- -центров, обменно-связанных пар и косвенных взаимодействий парамагнитных центров через поля элементарных возмущений кристаллической решетки. Обсуждается возможность возникновения высокотемпературной сверхпроводимости, вызванной сверхтекучестью биполяронов, и вигнеровской кристаллизации в системе поляронов. Рассмотрены эффекты, связанные с влиянием носителей тока в зоне проводимости или дырок в валентной зоне на энергию локализованных и автолокализованных состояний, эффекты автолокализации заряженных частиц в плазме твердого тела и электролитах, косвенные взаимодействия парамагнитных центров, обусловленные плазменными колебаниями носителей тока в твердых телах. Приведены многочисленные примеры расчетов энергии двухэлектронных состояний вариационными методами с использованием минимизации многопараметрических функционалов. Пробная функция выбиралась с учетом электронных корреляций, связанных с прямой зависимостью волновой функции системы от расстояния между электронами. Рассмотрены пределы сильной связи, а также методы нахождения энергии с учетом поляронных эффектов при произвольной величине электрон-фононных взаимодействий.

Монография рекомендована для опубликования Ученым советом Института математических проблем биологии РАН и Института физики полупроводников НАН Украины.

Рецензенты:

член-корреспондент НАН Украины, д.ф.-м.н., профессор *В.А. Кочелап*;
д.ф.-м.н., профессор *А.В. Тулуб*

ISBN 978-5-9221-1530-8

© ФИЗМАТЛИТ, 2013

© Н.И. Каширина, В.Д. Лахно, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие авторов	8
Глава 1. Биполярон большого радиуса и взаимодействие поляронов	10
§ 1.1. Введение	10
§ 1.2. Две модели биполярона большого радиуса	17
1.2.1. Общие соотношения (17). 1.2.2. Каноническое преобразование гамильтониана Фрелиха для сильного электрон-фононного взаимодействия (18). 1.2.3. Одноцентровый биполярон — аналог атома гелия (20). 1.2.4. Биполярон Пекара (сильная связь) (21). 1.2.5. Двухцентровый биполярон — аналог молекулы водорода (24).	
§ 1.3. Проблема учета электронных корреляций и пространственная конфигурация БП.	25
1.3.1. Биполярон сильной связи (25). 1.3.2. Межэлектронные корреляции и пространственное распределение двухэлектронной волновой функции (26). 1.3.3. Получение аналитических выражений для функционала двухэлектронных систем в полярных кристаллах с использованием гауссова базиса ВФ (28). 1.3.4. Зависимость полной энергии взаимодействия двух поляронов и различных вкладов в нее от расстояния между центрами поляризационных ям (31). 1.3.5. Сравнение величины энергетических минимумов для одноцентрового и двухцентрового биполярона (35). 1.3.6. Взаимодействие между поляронами на больших расстояниях (43). 1.3.7. Континуальный биполярон в анизотропных кристаллах (44).	
§ 1.4. Масштабное преобразование и теорема вириала для полярона и биполярона сильной связи	53
1.4.1. Двухцентровая конфигурация биполярона и теорема вириала (54).	
Глава 2. Двухэлектронные системы (биполяроны большого радиуса, D^--центры, обменно-связанные пары мелких парамагнитных центров) в кристаллах при произвольной силе электрон-фононного взаимодействия	61
§ 2.1. Одноцентровые двухэлектронные системы (биполярон, F' и D^- -центры) при произвольной величине электрон-фононного взаимодействия	61
§ 2.2. Метод интегрирования по траекториям в применении к биполяронной задаче	66

§ 2.3. Метод канонических преобразований в применении к системам с промежуточными значениями электрон-фононного взаимодействия	68
2.3.1. Исходные уравнения (68). 2.3.2. Каноническое преобразование гамильтониана Фрелиха для произвольного электрон-фононного взаимодействия (70).	
§ 2.4. Биполярны и D^- -центры в кристаллах с произвольной величиной электрон-фононного взаимодействия	75
2.4.1. Одноцентровый биполярон (75). 2.4.2. D^- -центры (76). 2.4.3. Взаимодействие поляронов и неустойчивость двухцентрового биполярона в ионных кристаллах с произвольной величиной электрон-фононного взаимодействия (80).	
§ 2.5. Обменно-связанные пары парамагнитных центров большого радиуса в ионных кристаллах	81
2.5.1. Основные соотношения (83). 2.5.2. Полезные предельные переходы (86). 2.5.3. Применение метода Буймистрова–Пекара для вычисления энергии двухэлектронных систем в кристаллах с произвольной величиной электрон-фононного взаимодействия (87). 2.5.4. Вычисление энергии синглетного и триплетного состояния обменно-связанных пар мелких парамагнитных центров в ионных кристаллах (AgBr и AgCl) (90). 2.5.5. Обсуждение (90).	
§ 2.6. Диффузия одноэлектронных и двухэлектронных вакансионных центров в полярных кристаллах	95
2.6.1. Постановка задачи и основные соотношения (96). 2.6.2. Влияние поляронных эффектов на диффузионный барьер вакансионных центров (98).	
§ 2.7. Теорема вириала и межполяронное взаимодействие	104
2.7.1. Теорема Пекара 1:2:3:4 для полярона (106). 2.7.2. Теорема 1:3:4 для электронных систем при произвольной величине электрон-фононного взаимодействия (107). 2.7.3. Численная иллюстрация выполнения теоремы вириала ($\tilde{1}$, $\tilde{2}$, $\tilde{3}$, $\tilde{4}$ и $\tilde{1}$, $\tilde{3}$, $\tilde{4}$) для биполярона (метод Буймистрова–Пекара для произвольного электрон-фононного взаимодействия) (109).	
§ 2.8. Взаимодействие поляронов	112
2.8.1. Межполяронное взаимодействие в области отрицательной энергии связи биполярона (112). 2.8.2. Поляронный газ с учетом взаимодействия поляронов (118). 2.8.3. Эффекты статического и динамического экранирования межэлектронных взаимодействий в поляронном газе (121).	
§ 2.9. Заключение	123
Глава 3. Автолокализованные состояния носителей заряда в проводящих средах	129
§ 3.1. Автолокализованные состояния в плазме конденсированных сред	129
3.1.1. Функционал полной энергии для электрона в среде с подвижными зарядами (132). 3.1.2. Анализ выражения для энергии поля в среде с подвижными зарядами (134). 3.1.3. Квантовый гамильтониан (135).	

§ 3.2. Термодинамическая теория сольватированного электрона в электролитах	137
3.2.1. Введение (137). 3.2.2. Полярная теория в применении к описанию сольватированного электрона в электролите (139). 3.2.3. Функционал основного состояния и вириальные соотношения (143). 3.2.4. Термодинамические соотношения (144). 3.2.5. Раствор с сольватированными электронами (146). 3.2.6. Предельные случаи (147). 3.2.7. Приближение линеаризации (149). 3.2.8. Аппроксимация волновой функции для приближения линеаризации (151). 3.2.9. Ионон (154). 3.2.10. Сравнение с экспериментом (155). 3.2.11. Расширения модели (157). 3.2.12. Заключительные замечания (159).	
§ 3.3. Экранировка сольватированного электрона в электролите	159
§ 3.4. Численное исследование нелинейной самосогласованной задачи на собственные значения в обобщенной модели сольватированного электрона	164
3.4.1. Методика численных расчетов (164). 3.4.2. Обсуждение результатов численных расчетов (166).	
§ 3.5. Континуальный экситон в полупроводниках (полуклассическое рассмотрение)	168
3.5.1. Уравнения континуального экситона (169). 3.5.2. Термодинамические корреляции (169). 3.5.3. Решение уравнения континуального экситона (171). 3.5.4. Вириальные соотношения и вариационный подход (173). 3.5.5. Эффективная масса континуального экситона (177). 3.5.6. Электрон, локализованный на примесном центре (178). 3.5.7. Континуальный экситон и сужение ширины запрещенной зоны в полупроводниках (179). 3.5.8. Биелектронные экситоны и сверхпроводимость (180). 3.5.9. Проблема континуального экситона в металлах (182).	
Глава 4. Квантовая теория электронной автолокализации в плазме полупроводников и металлов	185
§ 4.1. Автолокализация носителей заряда в полупроводниковой плазме	185
4.1.1. Введение (185). 4.1.2. Гидродинамическая модель плазменных колебаний в твердом теле (186). 4.1.3. Обобщенный квантово-механический подход (188). 4.1.4. Взаимодействие с пробной частицей (188). 4.1.5. Область применения континуальной модели (189). 4.1.6. Случай слабого взаимодействия с плазмонами (191). 4.1.7. Перераспределение зарядовой плотности в пределе слабой связи (193). 4.1.8. Случай сильного взаимодействия с плазмонами (193). 4.1.9. Континуальный экситон и электронный полярон (196). 4.1.10. Безызлучательные переходы в легированных полупроводниках (197). 4.1.11. Потери энергии пробного заряда в предельных случаях слабой и сильной связи (199). 4.1.12. Двухэлектронные состояния в полупроводниковой плазме в пределе сильной связи (200). 4.1.13. Биелектронные состояния в полупроводниковой плазме в пределе слабой связи (202).	

§ 4.2. Взаимодействие парамагнитных центров с плазменными колебаниями в проводящей среде	204
4.2.1. Введение (204). 4.2.2. Оператор взаимодействия парамагнитного центра с плазменными колебаниями носителей заряда (205). 4.2.3. Косвенное взаимодействие мелких примесных центров в полупроводниках, обусловленное плазмонами (207). 4.2.4. Функция Грина оператора косвенного взаимодействия парамагнитных центров (208). 4.2.5. Адиабатическое приближение (209). 4.2.6. Случай предельной неадиабатичности (210). 4.2.7. Численные оценки (212).	
§ 4.3. Вычисление энергии и эффективной массы автолокализованного состояния пробной частицы в плазме твердого тела методом интегралов по траекториям в системах с кулоновским взаимодействием	214
4.3.1. Введение (214). 4.3.2. Энергия собственного состояния заряженной частицы в поле плазменных колебаний (215). 4.3.3. Численные расчеты энергии автолокализованного состояния (218). 4.3.4. Эффективная масса плазморона (219). 4.3.5. Численные расчеты эффективной массы плазморона (221). 4.3.6. Сравнение с экспериментальными данными (222). 4.3.7. Обсуждение (222).	
§ 4.4. Применение обобщенного метода интегрирования по траекториям для изучения взаимодействия заряженной частицы с плазмонами в металлах	223
4.4.1. Введение (223). 4.4.2. Оператор электрон-плазмонного взаимодействия в диэлектриках, полупроводниках и металлах (224). 4.4.3. Фейнмановский метод интегрирования по траекториям (225). 4.4.4. Энергия основного состояния в фейнмановском подходе (227). 4.4.5. Предел слабой связи (228). 4.4.6. Предел сильной связи (228). 4.4.7. Обобщение метода интегрирования по траекториям (229). 4.4.8. Предел сильной связи (232). 4.4.9. Обсуждение (233).	
Глава 5. Программный комплекс для расчета энергии автолокализованных одно- и двухэлектронных состояний	234
§ 5.1. Введение	234
§ 5.2. Методы минимизации функций многих переменных	237
5.2.1. Метод покоординатного спуска и метод Хука–Дживса (237). 5.2.2. Градиентный метод и метод Флетчера–Ривса (239). 5.2.3. Метод случайного поиска (240).	
§ 5.3. Аналитические формулы	241
5.3.1. F -центр (241). 5.3.2. Одноцентровая конфигурация, D^- -центр (связанный биполярон) (242). 5.3.3. Двухцентровые конфигурации. F_2 -центр (связанный двухцентровый биполярон) (243). 5.3.4. Произвольная величина электрон-фононного взаимодействия (246).	
Приложение 3.4.	248
Приложение 3.5.	263

Приложение 3.5.9. Обобщенный функциональный подход в теории континуального экситона	265
П.3.5.9.1. Применение обобщенного функционального подхода к проблеме взаимодействия пробной частицы с плазмонами (265).	
П.3.5.9.2. Неравенство для энергии (266). П.3.5.9.3. Вычисле- ние $\varepsilon_0 - \lim_{\beta \rightarrow \infty} (1/\beta) \langle V_0 \rangle_{S_0}$ для континуального экситона (267).	
П.3.5.9.4. Вычисление $\lim_{\beta \rightarrow \infty} (1/\beta) \langle V \rangle_{S_0}$ для континуального эксито- на (268). П.3.5.9.5. Функционал полной энергии для континуаль- ного экситона при произвольной константе связи (269).	
Приложение 5.2. Вычисление аналитических выражений, входящих в функционалы одноэлектронных и двухэлектронных состояний, ис- пользовавшихся в программном комплексе «Экстреман»	271
П.5.2.1. Интеграл нормировки (271). П.5.2.2. Матричные элемен- ты, входящие в потенциальную энергию пары примесных центров в кристалле (273). П.5.2.3. Кинетическая энергия (275).	
Список литературы	276