

УДК 538.9; 548.4; 538.956

В.А. Лыках<sup>1</sup>, Е.С. Сыркин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный Технический Университет "Харьковский политехнический институт"  
61002, Харьков, ул. Фрунзе, 21

<sup>2</sup>Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины  
61103, Харьков, пр. Ленина, 47

## ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИОКРИСТАЛЛАХ

Теоретически исследованы свойства поляронных состояний (заряженных центров) в молекулярных крио кристаллах. Получены условия локализации носителя на примеси или автолокализации в полярон малого радиуса в зависимости от массы и знака заряда. Энергия полярона аналитически описана при произвольном соотношении между молекулярным полем и полем носителя. Оценены параметры полярона, получено качественное согласие с экспериментом.

**Ключевые слова:** крио кристалл, полярон, свободное вращение и опрокидывание молекул.

### Введение

В работе [1] нами показано, что большие повороты молекулы в крио кристаллах приводят не просто к смещению уровней энергии, а к изменению их систематики вследствие изменения топологии потенциала. Она была посвящена теоретическому исследованию взаимодействия одиночного носителя (электрона, дырки или мюона) с ближайшим окружением в молекулярном крио кристалле. Основное внимание в этой работе уделялось вкладу в образовании полярона малого радиуса ротационных степеней свободы, дополнительных к трансляционным степеням свободы молекул [2-5]. Напомним, что молекулярные крио кристаллы отличаются относительно легким вращением молекул, их полной переориентацией в поляроне малого радиуса [6, 7]. Этот вклад выделен при исследовании органических кристаллов [8], но из-за больших размеров их молекулы совершают лишь небольшие повороты. (Более подробно актуальность и постановка проблемы изложена в работе [1]).

В настоящей работе дополнительно к работе [1] определены энергия полярона  $W_p$  и проверяется условие существования малого полярона [5, 9]: Энергия полярона (выигрыш при взаимодействии носитель-решетка) превышает полуширину зоны  $J$

(выигрыш при зонном движении). Для заряженных примесных центров (молекула с другим сродством к электрону) область существования локализованных состояний носителя гораздо шире. Отметим, что в экспериментальных исследованиях [6, 7] обнаружено падение проводимости на порядки и предположено образование поляронов малого радиуса, обусловленных вращательными степенями свободы.

Согласно модели [5, 9] носитель движется путем редких перескоков или тунелирования с экспоненциальным сужением зоны:  $J=J_0\exp(-\lambda)$ ;  $\lambda= W_p/\hbar\omega$ , где  $J_0$  – полуширина зоны жесткой решетки,  $\lambda$  – эффективная константа электрон-фононного взаимодействия,  $\omega$  - характерная частота фонона. Эффективная масса полярона  $m_p=m_{eff}\exp(+\lambda)$  растет экспоненциально. Ниже показано, что  $\lambda \gg 1$ .

### 1. Гамильтониан системы

Гамильтониан системы имеет вид [1, 2]:

$$H = H_e + H_l + H_{el}. \quad (1)$$

здесь  $H_e$  - кинетическая энергия носителя,  $H_l$  - энергия взаимодействия молекул в кристалле,  $H_{el}$  - энергия взаимодействия заряд-решетка. Энергия  $H_{el}=W_{el}+W_q$  определяется при поляронном искажении решетки энергией  $W_{el}$  взаимодействия

молекул окружения заряда с его электрическим полем и энергией квантового уровня носителя над дном ямы  $W_q$  в потенциале автолокализации, и дает  $W_p$  энергию полярона, т.е. сдвиг уровня носителя относительно однородного кристалла [3]. Энергия взаимодействия молекул в кристалле  $H_l$  включает в себя составляющие электростатического взаимодействия, и наибольшие слагаемые во втором порядке теории возмущений взаимодействия [1, 10, 11].

Для связности изложения кратко приведем результаты работы [1]. Молекулярные кристаллы  $N_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$  имеют гранцентрированную кубическую решетку, которая при  $T=0$  имеет равновесное упорядочение осей молекул  $\Omega$  вдоль четырех пространственных диагоналей куба [1, 10, 11]. Разориентацию молекул описывают единичным вектором  $\omega$  в локальных сферических координатах  $(r, \varphi, \theta)$  с полярной осью  $Oz_{loc}$ , совпадающей с равновесной осью молекулы.

В однородном случае при  $T=0$  самосогласованная потенциальная энергия молекул в кристалле имеет вид:

$$W_l(\theta) = U_{is} - U_a \cos^2 \theta; \quad (2)$$

здесь  $U_{is}$  - изотропная часть и  $U_a$  - амплитуда анизотропной части.

Энергию взаимодействия молекулы с электрическим полем заряда, помещенного на соседе можно записать как

$$W_E(\Theta) = V_{is} - V_a \cos^2 \Theta = V_{is} - V_a (\vec{\omega}_0 \vec{n}_i)^2; \quad (3)$$

где  $V_{is}$  - изотропная часть и  $V_a$  - амплитуда анизотропной части взаимодействия носителя с молекулой,  $\Theta$  - угол между осью молекулы и напряженностью поля заряда носителя. Введен параметр  $G$ :

$$G \equiv \frac{1}{g} = \frac{V_a}{U_a}; \quad (4)$$

как отношение амплитуд анизотропных частей энергий для взаимодействия молекулы с электрическим полем  $V_a$  и с молекулярным полем  $U_a$ . Параметр  $G$

описывает конкуренцию взаимодействий со стороны заряда и решетки, определяет поведение молекул-соседей, условия их ориентации или свободного вращения.

В малом поляроне в кластере из 13 молекул наличие центра инверсии и оси третьего порядка, совпадающей с осью центральной молекулы, позволяет разбить молекулы окружения на три группы (классификацию групп молекул в кластере см. в [1]). В группе молекул 2 в поле носителя минимизация энергии по углам дает:

$$W_{2min}(g) = U_{is} + V_{is} - \frac{1}{2g} U_a (1 + g \pm \sqrt{1 + \frac{2}{3}g + g^2}). \quad (5)$$

Знак минус перед корнем соответствует отрицательному носителю  $g < 0$ . Ориентация плавно зависит от параметра  $g$ : молекула поворачивается вдоль поля положительного или перпендикулярно полю отрицательного заряда носителя. В группе молекул 1, 3 относительное изменение величины поля приводит к качественным изменениям в поведении. Минимум энергии молекул групп 1, 3:

$$W_{1,3min} = U_{is} + V_{is} - U_a; \quad (G < 1) \quad (6)$$

$$W_{1,3min} = U_{is} + V_{is} - V_a; \quad (G > 1) \quad (7)$$

В случае  $G < 1$  ориентация молекул не меняется. В сильных ( $G > 1$ ) электрических полях происходит опрокидывание оси молекулы на  $\pi/2$  вдоль электрического поля. Особо интересен случай равенства амплитуд анизотропных вкладов со стороны молекулярного поля и поля носителя  $G=1$ , когда молекула находится в состоянии безразличного равновесия в плоскости свободного вращения (рис. 2 в [1]).

## 2. Энергия полярона

Энергия полярона  $W_p$  определяется как разность между полной энергией носителя, взаимодействующего с решеткой с учетом ориентационного искажения  $(H_e + H_{el} + H_{linh})$ , и энергией  $(H_e + H_{lh})$  невза-

имодельствующих носителя и решетки. Для статического полярона  $W_p = H_{el} + H_{linh} - H_{lh}$ , где  $H_{linh}$  – энергия ориентационно искаженной решетки и  $H_{lh}$  – энергия однородной решетки. Энергия взаимодействия носителя и решетки  $H_{el} = W_{el} + W_q$  определяется при поляронном искажении энергией молекул в поле носителя  $W_{el}$  и энергией  $W_q$  основного квантового состояния частицы (электрон, дырка, мюон) над дном ямы глубиной  $W_a$  потенциала автолокализации. Для молекул-соседей вклад  $W_a = W_{el} + H_{linh} - H_{lh}$  в энергию полярона определяется суммой по всем молекулам разности между минимальной полной энергией молекулы в поле носителя ( $W_{1,3min}$  для первой и третьей или  $W_{2min}$  для второй группы соседей) и минимальной полной энергии той же молекулы без носителя. Суммируя вклады  $Z=12$  ближайших соседей, получим энергию полярона:

$$\begin{aligned} W_p &= W_a + W_q \\ &= 6W_{2min} + 6W_{1,3min} - 12W_{min} + W_q. \end{aligned} \quad (8)$$

Используя (5, 6, 7), получим энергию полярона как функцию параметра  $g$ :

$$W_p(g) = ZV_{is} - Z'(g)V_a + W_q; \quad (9)$$

$$Z'(g) = 3 \left[ \xi(1-g) + \sqrt{1 + \frac{2}{3}g + g^2} \right]; \quad (g > 0) \quad (10)$$

$$Z'(g) = 3 \left[ (1-g) - \sqrt{1 + \frac{2}{3}g + g^2} \right]; \quad (g < 0) \quad (11)$$

Здесь  $Z'(g)$  эффективное число полностью ориентированных вдоль поля молекул-соседей заряда. Параметр  $\xi=1$  для  $g \geq 1$  и  $\xi=3$  для  $0 < g < 1$ , что связано с опрокидыванием осей шести молекул групп 1, 3 при  $g=1$  [1]. Зависимость  $Z'(g)$  представлена на рис. 1, виден излом при  $g=1$ . В пределе слабого молекулярного поля  $g \ll 1$  (рис. 1a) молекулы направлены вдоль поля, энергия полярона определяется взаимодействием с положительным носителем:

$$\begin{aligned} W_p(E) &= Z(V_{is} - V_a) + 8U_a + W_q; \\ (Z' &= Z, G \gg 1); \end{aligned} \quad (12)$$

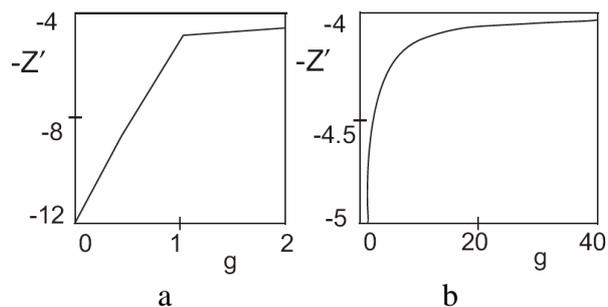


Рис. 1. Эффективное число  $Z'$  ближайших к носителю молекул, ориентированных вдоль электрического поля в зависимости от параметра  $g > 0$ . Для сравнения с энергией полярона  $W_p(g)$  (9) приведен график  $-Z'(g)$ . Относительно слабая зависимость при  $g \gg 1$  (b) сменяется гораздо более сильной при  $1 \geq g \geq 0$  (a), когда происходит опрокидывание молекул полем.

В пределе сильных молекулярных полей  $g \gg 1$  (рис. 1b) получим энергию полярона:

$$\begin{aligned} W_p(E) &= ZV_{is} - 4V_a + W_q; \\ (Z' &= 4, G \rightarrow 0) \end{aligned} \quad (14)$$

Эти соотношения справедливы для локализованного заряда. С учетом межъямного туннелирования необходимое условие

$$|W_{el}| > W_q + J. \quad (15)$$

В поляроне малого радиуса основной вклад дает полуширина зоны  $J$ , пропорциональная вероятности туннелирования:

$$J \sim D = D_0 \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int dx \sqrt{m(U(x) - W_0)}\right]; \quad (16)$$

где  $D_0 \approx 1$  – множитель,  $m$  – масса частицы,  $U(x)$  – высота межъямного барьера,  $x$  – координата,  $W_0$  – энергия основного состояния частицы на узле. Барьер для дырки порядка энергии ионизации  $W_i$  [12], а для электрона – порядка энергии сродства молекулы к электрону  $W_s$  [13,14] (см. табл. 1).

Используя экспериментальные значения параметров кристалла и молекулы [10], оценим значения параметров и энергию полярона. В табл. 1 введены обозначения:  $R_0$  – расстояние до ближайшего соседа,  $U_0$  – барьер для вращательного

движения молекулы (из эксперимента). Расчеты для N<sub>2</sub>O, CO проведены без учета собственного дипольного момента; по оценкам его учет примерно вдвое увеличивает  $W_{el}$  и улучшает условия образования полярона малого радиуса. Для больших молекул, N<sub>2</sub>O и CO<sub>2</sub> молекулярное поле очень сильное ( $g \gg 1$ ) и поворот молекул невозможен.

Оценим энергию деформации решетки при сдвиге соседа. Минимизируем  $W(R)$  - энергию, состоящую из потенциала Леннарда-Джонса и взаимодействия молекула-носитель  $V(R) = W_{el}(R, g)$ , разложением

по  $\Delta R = R - R_0$  и оценим главный вклад  $\Delta W(g) = W(R) - W(R_0)$  двух молекул-соседей вдоль направления сдвига:

$$\Delta W(g) = \frac{1}{2} V_0^{(1)} \Delta R; \Delta R = \frac{-V_0^{(1)}}{2U_{LJ0}^{(2)} + V_0^{(2)}}. \quad (17)$$

где индекс 0 соответствует состоянию в однородном кристалле, верхние индексы соответствуют первой (1) и второй (2) производной. Оценка дает  $\Delta W(g) \sim \Delta V_0(g)$ , т.е. с учетом сдвига энергия автолокализации может быть вдвое больше.

Таблица 1

**Константы межмолекулярного взаимодействия и вычисленные для положительных и отрицательных носителей значения параметров полярона малого радиуса**

Параметр	Источник	N <sub>2</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> O
$R_0$ (А)	[10]	3.994	3.982	3.927	3.988
$(\alpha_1 - \alpha_2) 10^{24}$ (А <sup>3</sup> )	[10]	0.696	0.532	2.100	2.96
$\alpha_2 10^{24}$ (А <sup>3</sup> )	[10]	1.535	1.8	1.930	2.01
$U_0$ , (К)	[10]	325.6	688.2	7298.8	5844.5
$U_a$ (эВ)		0.042	0.089	0.944	0.756
$Q 10^{26}$ (CGS)	[10]	-1.4	-2.5	-4.3	-3.0
$g$ ( $q > 0$ )	настоящая	0.609	0.853	4.225	5.641
$g$ ( $q < 0$ )	работа	-1.416	-1.205	-9.815	-21.807
$Z'$ ( $q > 0$ )	настоящая	7.518	5.869	4.289	4.222
$Z'$ ( $q < 0$ )	работа	2.941	2.763	3.86	4.06
$W_{el}$ (эВ) ( $q > 0$ )	настоящая	-0.844	-0.876	-1.021	-1.068
$W_{el}$ (эВ) ( $q < 0$ )	работа	-0.632	-0.772	-0.97	-1.054
$W_{ion}$ (эВ)	[12]	15.5	14.1	14.4	12.9
$W_s$ (эВ)	[13]	0	0	≈1.0	2.3-3.1

### 3. Сравнение с экспериментом

В [6, 7] методом спинового резонанса для кристаллов N<sub>2</sub> были исследованы подвижности мюонов и электронов в электрических полях разных знаков. Обнаружено, что заряженный мюон и нейтральный мюоний фактически неподвижны, а подвижность электронов в  $\beta$ -фазе на два-три порядка меньше, чем в  $\alpha$ -фазе. Это объясняется свободным поворотом молекул в  $\beta$ -фазе (по нашей классификации  $g \ll 1$ ). При бомбардировке мюонами вдоль трека образуется электрон-дырочное облако; мюон останавливается на некотором расстоянии от него. Подвижность электронов вычисляется по времени изменения

сигнала спинового резонанса от частоты мюона до частоты мюония. В [6, 7] предположили, что сильная локализация мюонов или электронов связана с образованием поляронов малого радиуса, вследствие поворота ближайших молекул.

Для мюония ширина зоны в кристалле N<sub>2</sub> составляет  $0.01K \approx 9 \cdot 10^{-7}$  эВ [15]. Ширина зоны мюона неизвестна, однако, если предположить, что она даже на 3-4 порядка выше, чем для мюония, то все равно окажется на порядки меньше энергии автолокализации  $W_{el} \sim 1$  эВ (см. табл. 1) всех кристаллов, зонное движение мюона невозможно. Итак, учет только вращательных степеней свободы приводит к возможности автолокализации

мюона в полярноподобное состояние малого радиуса, что соответствует [6, 7]. Следовательно, предложенная нами модель хорошо описывает автолокализацию мюона в  $\alpha$ -фазе  $N_2$ . В работах [6, 7] сделан вывод о делокализации электрона и предположено образование полярона большого радиуса. Вычисленная энергия автолокализации  $W_{el} \sim 1 \text{ эВ}$  в табл. 1 гораздо меньше ширины электронной зоны проводимости  $J \sim 10 \text{ эВ}$ , автолокализация электрона в малый полярон невозможна.

Масса мюона  $m_{\mu} \approx 200 m_e$ , поэтому его основное состояние  $W_0$  гораздо глубже, чем у электрона или дырки (высота барьера для мюона выше), ширина зоны мюона на много порядков меньше. Масса дырки  $m_p$  обычно на порядок больше массы электрона  $m_e$ , и ширина зоны для дырки в зависимости от величины массы может быть на несколько порядков меньше, чем у электрона, но много больше мюонной. Для более легких частиц условия локализации хуже по параметру  $W_p$  и по ширине зоны. Для положительных частиц энергия взаимодействия с решеткой может быть в 1,5 раза больше, чем для отрицательных (см. табл. 1). Следовательно, из легких частиц условия локализации дырки в полярон малого радиуса в  $\alpha$ -фазе азота вблизи  $T=0$  гораздо лучше, чем у электрона. Для решения вопроса о локализации необходимо учесть энергию связи на молекуле и рассмотреть энергию деформации решетки (по нашим оценкам она пропорциональна  $W_{el}$  и того же порядка). При локализации электрона в  $\beta$ -фазе [6, 7] дырка локализуется тем более.

В [16] наблюдалась вращательная структура спектров, характерная для свободных молекул  $N_2$  слабо взаимодействующих с решеткой. Это невозможно в потенциале (2) с сильной модуляцией угловой зависимости энергии в однородном кристалле. В эксперименте проводилось облучение  $\alpha$ -фазы кристалла  $N_2$  медленными (400 эВ) электронами. Т.е. кристалл был насыщен избыточными носителями вблизи фазового перехода, когда молекулярное поле сильно ослаблено. В [16] отмечалось уменьшение размеров молекулы  $N_2$  в возбужденном вращатель-

ном состоянии. Из полученных нами результатов следует, что свободное вращение молекулы в кристалле  $N_2$  возможно при  $g \rightarrow +1$  (равенство энергии воздействия молекулярного поля и электрического поля положительного носителя) или при  $g \rightarrow -0$  (очень сильное поле отрицательного носителя, что невозможно, т.к. электрон в  $\alpha$ -фазе  $N_2$  не образует малый полярон). Для положительных носителей в табл. 1 значение  $G$  близко к 1, а квантовое туннелирование обеспечивает свободное вращение, его наблюдение в кристалле облегчено при локализации дырки. Энергии электронов 400 эВ в эксперименте [16] вполне достаточно для образования дырок. Из проведенного анализа можно сделать вывод: в низкотемпературной  $\alpha$ -фазе  $N_2$  локализация электрона в полярон малого радиуса практически невозможна.

### Заключение

Показано, что в зависимости от исходной ориентации соседей, параметров молекулярных кристаллов и знака заряда может реализоваться поворот осей молекул окружения в очень широких пределах, вплоть до опрокидывания (угол поворота  $90^\circ$ ). Так, в молекулярных кристаллах  $N_2$ ,  $CO$  под действием поля положительного заряда для одного типа ближайших соседей реализуется лишь переориентация молекул (хотя и заметная), а для другого типа соседей вращательный барьер уменьшается в несколько раз, что может способствовать реализации практически свободного вращения молекулы или вместо барьера возникает минимум энергии и происходит опрокидывание молекул. В кристаллах  $N_2O$ ,  $CO_2$ , состоящих из более крупных молекул, вращательные энергетические барьеры очень большие, поэтому молекулы окружения переориентируются слабо.

Исследованы условия образования поляронов малого радиуса в молекулярных кристаллах, для которых характерно наличие ротационных степеней свободы. Показано, что в малом поляроне поведение молекул окружения качественно различно для положительных и отрицательных но-

сителей: молекулы ориентируются вдоль электрического поля положительного и перпендикулярно к полю отрицательного заряда. Найдено равновесное положение молекул окружения локализованного в малом поляроне и его энергия при произвольном соотношении между полями электрического заряда и молекул решетки. Наличие симметрии позволяет выделить из 12 ближайших соседей два типа молекул, по-разному реагирующих на поле носителя (группы 1, 3 и 2, см. табл. 1). Молекулы группы 2 в зависимости от соотношения между полями плавно изменяют свою ориентацию, а молекулы групп 1, 3 сохраняют ориентацию в случаях отрицательных носителей и сравнительно слабых полях положительного носителя ( $G < 1$ ), но опрокидываются в сильных полях положительного носителя ( $G > 1$ ). При равенстве полей ( $G = 1$ ) возможно свободное вращение молекул (излом на зависимости энергии полярона от  $g$ ).

Для более полного теоретического анализа необходимо привлечь самосогласованную теорию полярона. Изложенный в работе анализ может рассматриваться как исходное приближение построения такой

теории. Учет искажения молекулярного поля при повороте соседних молекул, безусловно, усложнит описание разворота молекул, но, на наш взгляд, наиболее характерные особенности (наличие двух типов поведения молекул ближайшего окружения - опрокидывание или поворот) сохранятся. К тому же можно количественно оценить верхний предел искажения молекулярного поля при самосогласованном учете поворота соседей: в окружении молекулы-соседа заряда поворачиваются четыре молекулы из двенадцати соседей, т.е. треть. Таким образом, для симметричных молекул в самом неблагоприятном случае величины параметров также изменятся на треть, а реально углы поворота молекул не достигают предельных значений, и изменение параметров будет примерно вдвое меньшим. Более того, экспериментальное наблюдение свободного вращения молекул  $N_2$  (мы полагаем, вблизи дырки) и локализация мюонов может свидетельствовать о том, что искажение молекулярного поля при повороте соседей не очень сильно меняет полученные результаты и количественно.

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лыках В.А., Сыркин Е.С. Взаимодействие локализованных зарядов с решеткой молекулярных кристаллов // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія фізика, 2010. – №28. – С.29-36
2. Поляроны. Ред. Фирсов Ю.А. – М.: Наука, 1975. – 424 с.
3. Мотт Н.Ф. Переходы металл-изолятор. – М.: Наука, 1979. – 342 с.
4. Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов. – М.: Гостехиздат, 1951. – 256 с.
5. Зырянов П.С., Клиндер М.И. Квантовая теория явлений переноса в кристаллических полупроводниках. – М.: Наука, 1974. – 480 с.
6. Storchak V.G., Brewer J.H., Eshchenko D.G. Electron transport in solids and liquids // Appl. Magn. Resonans, 1997. – V.13. – №1-2. – P. 15-24.
7. Storchak V., Brewer J.H., Morris G.D. Electron Delocalization in  $\alpha$ -Nitrogen // Phys. Rev. Lett. 1995. – V.75. – №12. – P. 2384–2387
8. Силиньш Э.А., Курик М.В., Чапек В. Электронные явления в органических молекулярных кристаллах. Явления локализации и поляризации. – Рига: Зинатние. 1978. – 241 с.
9. Александров С.А., Кребс А.Б. Поляроны в высокотемпературных сверхпроводниках // УФН, 1992. – Т.162. – №5. – С.1-85/
10. Кристаллы. Ред. Веркин Б.И., Прихотько А.Ф. – Киев: Наукова думка, 1983. – 528 с.

11. Freiman Yu.A., Manzhelii V.G. Physics of Cryocrystals. Ed. \ Maradudin A.A. – NY: Woodbury, 1996. – 691 p.
12. Френсис Г. Ионизационные явления в газах. – М.: Атомиздат. 1964. – 303 с.
13. Татевский В.М. Строение молекул. – М.: Наука, 1979. – 512 с.
14. Месси Г. Отрицательные ионы. – М.: Мир. 1979. – 754 с.
15. Storchak V.G., Prokof'ev N.V. Quantum diffusion of muons and muonium atoms in solids. Rev. Mod. Phys. 1998. - V.70. – №3. – P. 929-978.
16. Фуголь И.Я., Полторацкий Ю.В., Рыбалко Ю.В. Автолокализация высокочастотных триплетных возбуждений в кристаллическом азоте // ФНТ, 1978. – Т.4. – №8, – С. 1048-1052.

Стаття надійшла до редакції 15.04.2011

V.A. Lykah<sup>1</sup>, E.S. Syrkin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>National Technical University 'Kharkiv Polytechnic Institute', 61002, Kharkiv, Frunze, 21

<sup>2</sup>Institute for Low Temperature Physics and Engineering NASU, 61103, Kharkiv, Lenin ave., 47

## LOCALIZED CARRIER STATES IN MOLECULAR CRYOCRYSTALS

In molecular cryocrystals the interaction of the charged center and the molecules with the rotational degrees of freedom is theoretically investigated. The conditions of the localization of a carrier on a doping center (or autolocalization into the small polaron) in dependence on the mass and the sign of the charge are considered. The polaron energy is analytically described in dependence on the parameter  $G$  (the ratio of the amplitudes of the anisotropic parts of the molecule interaction energy with the carrier electric field and the molecular field). The polaron parameters are evaluated, the results correlate qualitatively to the experimental data.

**Key words:** cryocrystal, polaron, free rotation and kicking of molecules.

В.О. Ликах<sup>1</sup>, Є.С. Сиркін<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Національний Технічний Університет "Харківський політехнічний інститут"

61002, Харків, вул. Фрунзе, 21

<sup>2</sup>Фізико-технічний інститут низьких температур НАН України, 61103, Харків, пр. Леніна, 47

## ЛОКАЛІЗОВАНІ СТАНИ НОСІВ У МОЛЕКУЛЯРНИХ КРІОКРИСТАЛАХ

У молекулярних кріокристалах теоретично досліджена взаємодія зарядженого центра з молекулами, що мають ротаційні ступені волі. Отримано умови локалізації носія на доміщі або автолокалізації в полярон малого радіуса залежно від маси й знака заряду. Енергія полярона аналітично описано у всьому діапазоні зміни параметра  $G$  (відношення амплітуд анізотропних частин енергій взаємодії молекули з електричним полем носія й з молекулярним полем). Оцінені параметри полярону, отримано якісне узгодження з експериментом.

**Ключові слова:** кріокристал, автолокалізація, полярон, вільне обертання й перекидання молекул.