

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СКОРОСТИ АВТОЛОКАЛИЗАЦИИ

А. С. Иоселевич, Э. И. Рашба

Построена теория температурной зависимости скорости автолокализации (АЛ). При высоких температурах справедлив закон Аррениуса $w \propto \exp(-W/T)$, W – высота АЛ барьера. При низких преобладает туннелирование; в экспоненциальном приближении $\ln w \propto (a + b \exp(-\omega/T))$ для оптических фононов и $\ln w \propto (a + bT^4)$ для акустических.

В ряде кристаллов квазичастицы (экситоны, носители заряда) могут существовать как в свободном, так и АЛ состояниях. Эти состояния разделены автолокализационным барьером¹. Экситоны рождаются светом в свободном состоянии, но до высвечивания часть их успевает автолокализоваться, преодолевая АЛ барьер. Доля люминесценции, идущая из АЛ состояний, определяется скоростью АЛ w . Ниже предложен общий метод для вычисления w при произвольных температурах T . Показано, что механизм преодоления АЛ барьера совершенно различен в области высоких и низких температур. В первой он является активационным и справедлив закон Аррениуса. Во второй действует туннельный механизм, и температурная зависимость w определяется зависимостью оптимального пути туннелирования в конфигурационном пространстве (т. е. временной эволюции формы инстантона) от T .

Рассматриваемая проблема родственна ряду других актуальных задач: квантовому зародышеобразованию^{2,3}, распаду ложного вакуума в квантовой теории поля⁴ и туннелированию при наличии трения⁵⁻⁷. Для нашей задачи существенно, что АЛ барьер не задается извне, а создается самой туннелирующей решеткой; в результате его динамика зависит от T . Метод, предложенный ниже, основывается на работе⁸, в которой вычислено w при $T = 0$, и работе⁹, в которой построена теория краевого поглощения при $T \neq 0$ с учетом АЛ.

Скорость АЛ экситона w , определяемая через спектр вторичного свечения, выражается через фурье-образ двухчастичного коррелятора

$$F(t_1, t_2) = \text{Sp} \{ K_0(-i\beta, 0) K(0, t_2) K_0(t_2, t + t_1) K(t + t_1, t) K_0(t, 0) \} =$$

$$= \int d\{r\} \int \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}Q \Psi_1(t + t_1) \Psi_1^*(t) \Psi_2(0) \Psi_2^*(t_2) \exp\{iS\}. \quad (1)$$

Здесь $\beta = T^{-1}$, K_0 и K – точные пропагаторы свободной решетки и системы решетка + экситон. Они представлены в виде траекторного функционального интеграла по Q (с условием $Q(0) = Q(-i\beta)$) и полевого интеграла по волновым функциям экситона Ψ , $\{r\}$ – набор пространственных координат Ψ -функций. Действие S :

$$S = \sigma \int_{(\Gamma)} dt \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{i}{\sigma} \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi + \frac{1}{2} \Psi^* \nabla^2 \Psi + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial Q}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} Q^2 - Q \Psi^* \Psi \right\}. \quad (2)$$

Для конкретности оно записано для случая экситона, взаимодействующего с неполярными бездисперсионными оптическими фононами; использованы безразмерные единицы⁸. Параметр $\sigma = \frac{W}{W_0 \omega}$, где W – высота АЛ барьера, ω – частота фононов, а $W_0 \approx 44$. Контур интегрирования Γ показан на рис. 1, a . Его жирные участки соответствуют пропагаторам K , светлые – пропагаторам K_0 . На светлых участках надо опустить в (2) члены с Ψ . Стрелки показывают упорядочение времен.

После гауссова интегрирования по Q в (1):

$$S = \sigma \int d\tau \left\{ \sum_{\alpha} \int dt \Psi_{\alpha}^{*} \left(\frac{i}{\sigma} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \Psi_{\alpha} - \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta} \iint dt dt' D_{\alpha\beta}(t-t') |\Psi_{\alpha}(t) \Psi_{\beta}(t')|^2 \right\}, \quad (3)$$

где $\alpha, \beta = 1$ или 2 , причем 1 относится к верхней части контура, а 2 — к нижней. В (3) интегрирование распространяется только на жирные участки контура Γ (рис. 1, a) и проводится в направлении стрелок. Фононная функция Грина

$$D_{\alpha\beta}(t-t') = -i \{ (N+1) \exp(-i[t-t']_{\Gamma}) + N \exp(i[t-t']_{\Gamma}) \}, \quad (4)$$

где $[t-t']_{\Gamma}$ равно разности позднего и раннего времен (в смысле упорядочения на Γ), $N = (\exp \beta - 1)^{-1}$ — числа заполнения.

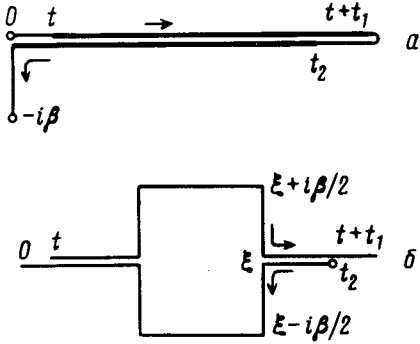


Рис. 1

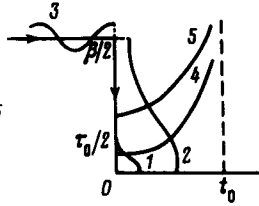


Рис. 2

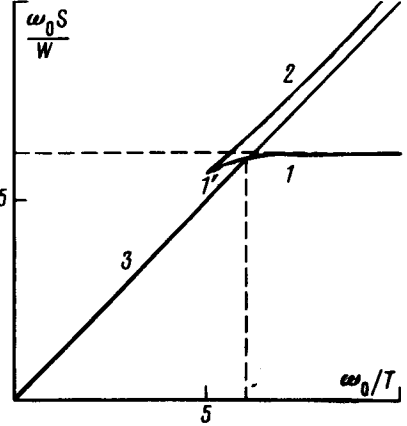


Рис. 3

Рис. 2. Структура "короткого" инстантона (при $\tau \geq 0$). Временная зависимость глубины экситонного уровня (1 и 4) и деформации в центре инстантона (2, 3 и 5). Кривые 1–3 отложены по вертикали от двух крайних участков временного контура, а кривые 4 и 5 — по горизонтали от его среднего участка

Рис. 3. Температурная зависимость действия для различных решений. Жирные линии — решения, обеспечивающие наименьшее действие

Интегрирование по Ψ в (1) может быть выполнено методом перевала, если деформировать контур Γ как показано на рис. 1, b . Точка ξ соответствует моменту автолокализации и может быть выбрана произвольно. Левее ξ экситон является свободным, а правее — автолокализованным. Вклад в S вносит только отрезок $(\xi - i\beta/2; \xi + i\beta/2)$, внутри которого заключен инстантон. После перехода к мнимому времени τ скорость $w \sim \exp(-S)$, где

$$S[\psi] = \sigma \int d\tau \left\{ \frac{1}{2} \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau |\nabla \psi(\mathbf{r}\tau)|^2 - \frac{1}{4} \iint_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau d\tau' \left\{ (N+1) e^{-|\tau-\tau'|} + N e^{|\tau-\tau'|} \right\} |\psi(\mathbf{r}\tau) \psi(\mathbf{r}\tau')|^2 \right\}. \quad (5)$$

Функция $\psi(\mathbf{r}\tau)$ определяется в классе нормированных функций из условия $\delta S[\psi] = 0$; справедливо $\psi(\tau) = \psi(-\tau)$.

В 9 показано, что существует три типа экстремалей функционала (5); все они отвечают седлам $S[\psi]$.

1. "Короткий" инстантон, схематически показанный на рис. 2. В нем $\psi(\mathbf{r}, \tau) \neq 0$ только на участке мнимой оси с шириной $\tau_0 \sim 1$ (в размерных единицах $-\omega^{-1}$; кривая 1), и на вещественной оси правее ξ . Однако деформация решетки $Q = \hat{D}|\psi|^2$ отлична от нуля всюду: она осциллирует на левом горизонтальном участке контура (кривая 3) и монотонно нарастает к центру инстантона на вертикальном участке (кривая 2). Физическая картина процесса такова. Решетка, совершающая тепловые колебания, в один из моментов, когда ее кинетическая энергия обращается в ноль, испытывает квантовую флуктуацию, т.е. начинает туннелировать. При этом деформация нарастает, и в момент $\tau_0/2$ в потенциальной яме, которую она создает, возникает дискретный уровень, на который захватывается экситон. Эта точка — начало инстантонного участка. Дальше и деформация, и глубина уровня продолжают нарастать, и в момент $\tau = 0$ система выходит из-под барьера и движение снова становится классическим (кривая 4 и 5). Для этого инстантона зависимость $S(\beta)$ показана на рис. 3 кривой 1 — 1'. При низких температурах ($\beta \gg 1$):

$$S \approx \frac{W}{\omega} (s_0 - s_1 \exp(-\beta)), \quad s_1 = \frac{1}{2W_0} \int_{-\tau_0}^{\tau_0} d\tau \left(\int_{-\tau_0}^{\tau_0} d\tau' \psi^2(\mathbf{r}, \tau') \right)^2, \quad (6)$$

s_0 и ψ определяются формулой (5) при $N=0$. Двухпараметрический вариационный расчет дает $\tau_0 \approx 2,15$; $s_0 \approx 6,2$; $s_1 \approx 64$.

2. "Длинный" инстантон. При $\beta \gg 1$ его продолжительность $\tau_0 \approx \beta - \ln 2$. Величина действия показана на рис. 3, кривая 2. Так как оно всегда больше, чем для "короткого" инстантона, это решение не дает вклада в туннелирование. При $\beta \approx 5$ оба инстантона сливаются и исчезают.

3. Статическое решение. На всем участке контура $(-i\beta/2, i\beta/2)$ функция $\psi = \psi(\mathbf{r})$, т.е. не зависит от τ . Для него $S = W/T$ — кривая 3 на рис. 3. Это решение соответствует классическому активационному преодолению барьера и дает закон Аррениуса. Оно существует при всех температурах, но является главным до точки пересечения с кривой 1 — 1'. При низких T конкуренцию выигрывает короткий инстантон.

По численным причинам переход смещен в область температур, низких в сравнении с ω : $T_{кр} \approx \omega/6$. Кроме того, относительное изменение S на участке 1 мало ($\approx 2,5\%$); оно хорошо описывается формулой (6).

После выхода системы из-под барьера глубина уровня и деформация быстро нарастают. В гармоническом приближении система коллапсирует за время $t_0 \sim \omega^{-1}$ (рис. 2). Кинетическая энергия решетки возрастает как $W/(t_0 - t)^4$ и достигает величины близкой к энергии АЛ. Она распределяется между небольшим числом атомов, поэтому коллапс может завершиться дефектообразованием.

Выше рассматривалась конкретная модель, но ряд выводов имеет общий характер. При высоких T всегда имеет место закон $w \propto \exp(-W/T)$. При низких T действует инстантонный механизм, но детальный вид температурной поправки к S зависит от типа фононов. Для акустических фононов она $\propto T^4$. Зависимость предэкспоненциального множителя от T , по-видимому, наиболее существенна в низкотемпературной области; этот вопрос будет рассмотрен отдельно.

Литература

1. *Rashba E.I.* In: "Excitons", eds. E.I. Rashba and M.D. Sturge (North Holland, Amsterdam — N.Y. — Oxford), 1982, p. 543.
2. *Langer J.S.* Ann. Phys., 1967, **41**, 108.
3. *Лифшиц И.М., Каган Ю.* ЖЭТФ, 1972, **62**, 385.
4. *Coleman S.* Phys. Rev., 1977, **D15**, 2929.
5. *Caldeira A.O., Leggett A.J.* Phys. Rev. Lett., 1982, **46**, 211.
6. *Ambegaokar V.A., Eckern V., Schön G.* Phys. Rev. Lett., 1982, **48**, 1745.

7. Ларкин А.И., Овчинников Ю.Н. Письма в ЖЭТФ, 1983, 37, 322.
8. Иорданский С.В., Рашба Э.И. ЖЭТФ, 1978, 74, 1872.
9. Иоселевич А.С. ЖЭТФ, 1982, 83, 743.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
14 сентября 1984 г.
