Письма в ЖЭТФ, том 33, вып. 3, стр. 164 – 167 *5 февраля 1981 г.*

ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЕ НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ АВТОЛОКАЛИЗАЦИОННОГО БАРЬЕРА

Ф.В.Кусмарцев, Э.И.Рашба

Показано, что в кристаллах с вырожденным энергетическим спектром в состояниях, отвечающих автолокализационному барьеру, развивается сильная ян-теллеровская деформация, и что высота барьера всегда имеет масштаб, определяемый тяжелой массой.

Автолокализация (АЛ) экситонов связана с преодолением АЛ барьера. Он возникает вследствие возрастания кинетической энергии экситона в ходе его АЛ, и обнаружен экспериментально в иодидах щелочных металлов, в твердых благородных газах и др. АЛ барьер возникает также для носителей тока при неполярном взаимодействии с фононами. Ранее высота АЛ барьера вычислялась [1 – 4] только для моделей, в которых состояние на барьере сохраняет полную симметрию точечной группы кристалла. Между тем, симметрия барьерных состояний может нарушаться вследствие эффекта Яна – Теллера (ЯТ), который должен приводить к понижению барьера.

Нарушение симметрии удобно исследовать исходя из континуальной модели, в рамках которой ЯТ-эффект должен возникать для частиц с вырожденным спектром. Континуальное приближение справедливо при достаточно сильной связи с фононами [4]; например, согласно [5], оно применимо к легким благородным газам. Что касается вырождения спектра, то оно имеет место, почти без исключения, во всех случаях, когда наблюдается АЛ [6]. Необходимо подчеркнуть, что нарушение симметрии уже на стадии преодоления АЛ барьера имеет принципиальное значение, так как в значительной мере предопределяет последующие этапы релаксации АЛ состояний и создает преимущественные условия для возникновения состояний с пониженной симметрией.

Ниже рассмотрены частицы с моментом $J = 1$ ("экситоны") и $J = 3/2$ ("дырки") в сферическом приближении. Для них существуют две ветви спектра – с легкой и тяжелой массой (m_l и m_h). Ограничимся моделью с одним деформационным потенциалом C и одним упругим модулем K.

Для экситонов (зона с $J = 1$) высота барьера W определяется стационарным значением функционала

$$J[\Psi] = \int\left\{\frac{1}{2m_l}(\mathrm{div}\,\Psi)^2 + \frac{1}{2m_h}(\mathrm{rot}\,\Psi)^2 - \frac{C^2}{2K}(\Psi^2)^2\right\}d\mathbf{r}, \qquad (1)$$

отвечающим его низшей седловой точке; $\Psi(\mathbf{r})$ – трехкомпонентная функция. При $m_l = m_h$ уравнения имеют такой же вид, как при невырожденном спектре, и ЯТ-эффект отсутствует. Ниже рассматривается предельный случай $m_l/m_h \to 0$. В этом случае следует положить $\mathrm{div}\,\Psi = 0$, т. е. $\Psi = \mathrm{rot}\,\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Тогда уравнение Шредингера, отвечающее (1), принимает вид

$$-\frac{1}{2m_h}\Delta\Psi - \frac{C^2}{K}\{\Psi^2\Psi\}_h = E\,\Psi. \qquad (2)$$

Индекс h во втором члене показывает, что в нем следует сохранить только вклад от тяжелых дырок; при $J = 1$ это соответствует исключению продольной части функции в соответствии с определением:

$$\Phi_h(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi}\nabla\otimes\nabla\int\frac{\Phi(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,d\mathbf{r}'. \qquad (3)$$

Естественно предположить, что низшее седло отвечает функции Ψ, преобразующейся по одной из строк векторного представления, например, как z; тогда $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \phi(\rho, z)[\mathbf{z}^\circ \times \mathbf{r}]$, где ϕ – произвольная аксиально симметричная функция, и деформация аксиально симметрична[1]. В этом случае убывание $\Psi(\mathbf{r})$ при $\mathbf{r} \to \infty$, согласно (2) и (3), определяется формулой $\Psi \backsim \nabla\partial(r^{-1})/\partial z$, т. е. происходит по степенному закону. С простейшей однопараметрической апроксимацией $\phi(\mathbf{r}) \backsim (r^2 + a^2)^{-3/2}$, обладающей правильным поведением при $\mathbf{r} \to 0$ и $\mathbf{r} \to \infty$, получаем из (1):

$$W = J[\Psi_{extr}] \approx 174\,K^2/C^4 m_h^3\,. \qquad (4)$$

Итак, W определяется тяжелой массой m_h. Численный коэффициент в (4) примерно вчетверо больше, чем для невырожденной зоны (где он равен ≈ 44 [2]; это же значение он имеет и при $m_l = m_h$). При высокой силе осциллятора экситонного перехода, когда продольно-поперечное расщепление в спектре Δ_o велико ($\Delta_o >> W$), формула (4) справедлива при произвольном m_l/m_h.

Величина анизотропии $\Psi^2(\mathbf{r})$ велика – функция вытянута вдоль оси $0z$ и мала в плоскости $z = 0$; например, при $r^2 = a^2$ отношение значений Ψ^2 на оси и в плоскости равно 16. Поэтому система должна иметь тенденцию после преодоления АЛ барьера "скатываться" в вытянутые (например, квазимолекулярные двухузельные) АЛ состояния. Роль ЯТ-эффекта можно также оценить, сопоставив (4) с барьером в классе функции $\Psi = \mathbf{r}\,g(r)$, принадлежащих полносимметричному представлению и обеспечивающих сферически симметричную деформацию. Так как здесь $\mathrm{div}\,\Psi \neq 0$ (в классе нормируемых функций), то $W \backsim m_l^{-3}$, т. е. высоты барьеров отличаются на параметр $(m_l/m_h)^3 << 1$.

---

[1] Это означает, что сохраняется максимальная симметрия (ось + центр симметрии), совместимая со снятием трехкратного вырождения зоны.

Для дырок (зона с $J = 3/2$) функция $\Psi(\mathbf{r})$ является четырехкомпонентной и

$$J[\Psi] = \int \left\{ \left(\Psi, \left[-\frac{1}{4m_l}\left(\frac{9}{4}\Delta - (\mathbf{J}\nabla)^2\right) - \right.\right.\right.$$

$$\left.\left.\left. - \frac{1}{4m_h}\left((\mathbf{J}\nabla)^2 - \frac{1}{4}\Delta\right)\right]\Psi\right) - \frac{C^2}{2K}(\Psi^2)^2 \right\} d\mathbf{r}. \qquad (5)$$

В пределе $m_l/m_h \to 0$ снова приходим к уравнению (2), но с заменой (3) на

$$\Phi_h(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi}\left\{\frac{1}{4}\Delta - (\mathbf{J}\nabla)^2\right\}\int \frac{\Phi(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, d\mathbf{r}'. \qquad (6)$$

Эта функция автоматически удовлетворяет условию $\left\{\frac{9}{4}\Delta - (\mathbf{J}\nabla)^2\right\}\Phi_h = 0$. Предполагаем снова, что деформация аксиально симметрична, и что низшее седло отвечает состояниям с исходной симметрией, совпадающей с симметрией зоны, т. е. с моментом 3/2. Тогда возникают два крамерсовских дублета состояний Ψ: с проекциями момента $M = \pm 1/2$ и $\pm 3/2$. Функции $\Psi_{1/2}$ и $\Psi_{3/2}$, которые мы здесь не выписываем, зависят от двух аксиально симметричных функций ϕ_1 и ϕ_2, которые определяются из условия $\delta J[\Psi] = 0$. Ограничиваясь однопараметрической апроксимацией, аналогичной использованной выше, получаем

$$W_{1/2} \approx W_{3/2} \approx 473K^2/C^4 m_h^3\,. \qquad (7)$$

Следовательно, W и в этом случае определяется массой m_h, но численное значение коэффициента дополнительно возрастает.

Хотя в принятом приближении высота барьера для $\Psi_{1/2}$ и $\Psi_{3/2}$ одинакова, форма Ψ^2-облака (а, следовательно, и пространственное распределение деформации $\epsilon(\mathbf{r}) \backsim \Psi^2(\mathbf{r})$) для них существенно различна: в состояниях с $M = \pm 1/2$ облако вытянуто вдоль оси z, а в состояниях с $M = \pm 3/2$ сплющено и сконцентрировано вблизи плоскости $z = 0$. Очевидно, что при использовании более гибких вариационных функций обе величины $W_{1/2}$ и $W_{3/2}$ уменьшатся и равенство между ними нарушится, однако при этом они по-видимому останутся близкими. Это означает, что при температурах $T \gtrsim |W_{1/2} - W_{3/2}|$ релаксация будет идти по двум каналам в различные АЛ состояния, которые могут одновременно наблюдаться (например, в спектрах горячей флуоресценции).

Отметим в заключение, что туннельная АЛ также будет идти через состояния с нарушенной симметрией.

Итак, по мере уменьшения m_l высота барьера W возрастает, хотя и сохраняет порядок величины, определяемый массой m_h; одновременно возрастает ЯТ деформация решетки.

Мы благодарны Г.Е.Пикусу за ценное обсуждение.

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

Поступила в редакцию
8 января 1981 г.

Литература

[1] В.В.Хижняков, А.В.Шерман. Труды Ин-та физики АН Эст. ССР, Тарту, №46, 1976, стр. 120.

[2] Э.И.Рашба. ФНТ, 3, 524, 1977.

[3] С.И.Пекар, Э.И.Рашба, В.И.Шека. ЖЭТФ, 76, 251, 1979.

[4] K.Nasu, Y.Toyozawa. Techn. Rep. of ISSP, Ser. A, No. 1059, June 1980.

[5] И.Я.Фуголь. Adv. Phys., 27, 1, 1978.

[6] Ч.Лущик, И.Куусманн, В.Плеханов. J.Luminescence, 18/19, 11, 1979.