Письма в ЖЭТФ, том 32, вып. 6, стр. 419 – 422 *20 сентября 1980 г.*

ЭКСИТОННЫЙ ИЗОЛЯТОР КАК СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК

Э.Г.Батыев, В.А.Борисюк

Показано, что экситонный диэлектрик с разрешенным дипольным переходом является сегнетоэлектриком.

Цель настоящей статьи – обратить внимание на то, что экситонный диэлектрик с разрешенным дипольным переходом обладает поляризацией. Известные механизмы сегнетоэлектричества так или иначе связаны с решеткой; здесь же мы по сути имеем новый, чисто электронный механизм: поляризация возникает при переходе в состояние экситонного диэлектрика, которое обусловлено притяжением между электронами и дырками.

Эффективный гамильтониан экситонного диэлектрика с разрешенным дипольным переходом в двухзонном приближении имеет вид [1]:

$$H = \begin{pmatrix} \xi & \Delta \\ \Delta^* & -\xi \end{pmatrix}, \qquad \Delta = \Delta_o + \mathbf{p}\mathbf{v}_{12}. \tag{1}$$

Здесь $\xi = \frac{p^2}{2m} - \mu$ (m — эффективная масса, которая предполагается одинаковой для электрона и дырки; μ характеризует степень перекрытия зон, $\mu > 0$ для полуметалла); $\mathbf{v}_{12}$ — матричный элемент оператора $-i\nabla/m_o$, вычисленный с помощью блоховских функций, соответствующих экстремумам рассматриваемых зон; Δ_o — параметр порядка (Δ_o = const в модели типа модели БКШ). Фаза Δ_o отличается от фазы $\mathbf{v}_{12}$ на $\pm\pi/2$; можно считать $\mathbf{v}_{12}$ чисто мнимым вектором, $\mathbf{v}_{12} = i\mathbf{v}_o$, тогда Δ_o вещественно. Гамильтониан (1) не зависит от спиновых индексов — предполагается синглетное спаривание.

Собственная функция гамильтониана (1) есть столбец $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$; для u, v, в частности, имеем:

$$u\overset{*}{v} = \pm\frac{\Delta}{2E}, \qquad E = \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}; \tag{2}$$

верхний знак относится к верхней (пустой при $T = 0$) зоне экситонного диэлектрика с энергией E, а нижний знак — к нижней (заполненной) зоне с энергией $-E$.

Для вычисления поляризации необходимо учесть явно, что собственные функции в координатном представлении есть функции Блоха:

$$\psi = u\psi_1 + v\psi_2, \qquad \psi_n \approx U_{no}\, e^{i\mathbf{pr}} \quad (n = 1, 2) \tag{3}$$

(модуляции U_n функций Блоха приближенно можно брать в экстремумах зон). Функции ψ, ψ_n предполагаются нормированными в объеме V. Упомянутая выше величина v_{12} есть:

$$\mathbf{v}_{12} = \int d^3r\, \overset{*}{U}_{10}\left(\frac{-i\nabla}{m_o}\right)U_{20}. \tag{4}$$

Несколько слов о свойствах функций U_{no}. Будем считать, что кристалл имеет выделенную ось и плоскость симметрии перпендикулярно этой оси. В этом случае собственные функции U_{no} можно классифицировать по четности относительно отражения в плоскости, и $\mathbf{v}_{12}$ отлично от нуля для состояний разной четности, что и предполагается для U_{10}, U_{20}. Для системы с такими свойствами поляризации нет, но она появляется при переходе в состояние экситонного диэлектрика. Перейдем к вычислению этой величины.

Необходимо найти среднее значение координаты по состояниям (3):

$$\langle \mathbf{r} \rangle = |u|^2\mathbf{r}_{11} + |v|^2\mathbf{r}_{22} + \overset{*}{u}v\,\mathbf{r}_{12} + u\overset{*}{v}\,\mathbf{r}_{21},$$
$$\mathbf{r}_{nm} = \int d^3r\, \overset{*}{U}_{no}\,\mathbf{r}\,U_{mo}. \tag{5}$$

Первые два члена справа в (5) — это расходящиеся выражения, расходимость которых частично устраняется, если учесть вклад соответствующего одному электрону компенсирующего положительного заряда ядер. После этого мы имеем выражение для дипольного момента (в расчете на одну частицу) некоторого симметричного кристалла типа, например, вытянутого вдоль одного из ребер куба кристалла NaCl; дипольный момент такого кристалла равен нулю. Таким образом, вклад первых двух членов справа в (5) надо считать также равным нулю, т.е.

$$< \mathbf{r} > = \overset{*}{u}\, v\, \mathbf{r}_{12} + u\, \overset{*}{v}\, \mathbf{r}_{21} \qquad (6)$$

(вывод о нулевом вкладе членов $\mathbf{r}_{nn}$ не зависит от упрощения $U_{np} \to U_{no}$; в общем случае надо было бы проводить рассуждение для пар состояний, переходящих друг в друга при отражении в плоскости). Матричный элемент $\mathbf{r}_{12}$ связан с $\mathbf{v}_{12}$ известным соотношением:

$$i(E_1 - E_2)\mathbf{r}_{12} = \mathbf{v}_{12}, \qquad E_1 - E_2 = 2\mu\,. \qquad (7)$$

Подставляя в (6) выражения (2), (7), получим:

$$< \mathbf{r} > = \mp \frac{i}{4\mu E}\, (\Delta^* \mathbf{v}_{12} - \text{к.с.}) \qquad (8)$$

Наконец, суммируя по всем состояниям с функцией распределения квазичастиц, получим поляризацию при произвольной температуре:

$$\mathcal{P} = \frac{ie}{4\mu} \frac{1}{V} \sum_p \frac{\operatorname{th}\frac{E}{2T}}{E} (\Delta^* \mathbf{v}_{12} - \text{к.с.}) = -\frac{e\Delta_o(T)}{g\mu} \mathbf{v}_o \qquad (9)$$

где было учтено уравнение для параметра порядка:

$$1 = \frac{g}{V} \sum_p \frac{\operatorname{th}\frac{E}{2T}}{2E}\,.$$

Итак, в системе появляется выделенное направление — дипольный момент, в то время как выше точки перехода была только выделенная ось. Вектор $\mathbf{v}_o$ изменяет направление при изменении знака одной из функций U_{no}, а потому сам по себе не имеет физического смысла. Направление дипольного момента может быть как параллельно, так и антипараллельно $\mathbf{v}_o$ в зависимости от знака Δ_o. Такого рода произвол в направлении $\vec{\mathcal{P}}$ — обычное дело в сегнетоэлектриках. Но в данном случае направление $\vec{\mathcal{P}}$ определяется не смещением подрешеток, которого в рассматриваемой модели нет, а знаком параметра порядка, если уж вектор $\mathbf{v}_o$ выбран.

Формула (9) дает поляризацию в расчете на одну проекцию спина. Если учесть обе проекции, то этот результат или удвоится, или обратится в нуль в зависимости от знаков двух параметров порядка. Это вырождение может сняться, например, из-за взаимодействия диполей (которое, как известно, само по себе может привести к сегнетоэлектрическому переходу), так что результат (9) удвоится.

Отметим в заключение, что в приближении эффективной массы поляризации нет, в чем можно убедиться, посчитав энергию системы в электрическом поле с помощью результатов, полученных в нашей работе [2].

Институт физики полупроводников
Академии наук СССР
Сибирское отделение

Институт физики им. Л.В.Киренского
Академии наук СССР
Сибирское отделение

Поступила редакцию
16 июля 1980г.

Литература

[1] Б.А. Волков, Ю.В.Копаев, В.В.Тугушев. Письма в ЖЭТФ, 27, 615, 1978. 1978.

[2] Э.Г.Батыев, В.А.Борисюк. ЖЭТФ, 79, вып. 12, 1980.