Письма в ЖЭТФ, том 27, вып. 1, стр. 10 – 13 *5 января 1978 г.*

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В ТОКОВОЕ СОСТОЯНИЕ

Б.А.Волков, Ю.В.Копаев

Исследовано диэлектрическое спаривание в двухзонной модели с совпадающими в импульсном пространстве экстремумами зон. Показано, что при мнимом параметре порядка и разрешенных дипольных межзонных переходах состояние системы характеризуется однородным током.

Известно, что при электрон-дырочном спаривание в зависимости от фазы параметра порядка и его спиновой структуры возможны четыре типа аномальных средних [1]. Целью настоящей работы является установление связи между этими аномальными средними и возникающими при фазовом переходе физически наблюдаемыми величинами в зависимости от симметрии спариваемых зон.

Известно, что при переходе системы в состояние экситонного изолятора возникают аномальные средние вида:

$$< a_1^+ a_2 > = < a_2^+ a_1 >^* = \Delta , \qquad (1)$$

где a_1, a_2 – операторы уничтожения электрона в зонах 1 и 2 соответственно. Если теперь существует такой оператор $\hat{A}$, межзонные матричные элементы которого $A_{12} = A_{21}^*$ отличны от нуля для переходов между зонами 1 и 2, то образование в системе аномальных средних (1) сопровождается появлением в ней среднего значения величины $< A >$:

$$< A > = A_{12}\Delta + A_{21}\Delta^* . \qquad (2)$$

Предположим, для простоты, что в неперестроенной фазе волновые функции ϕ_1 и ϕ_2 электронов в экстремумах обеих зон могут быть выбраны вещественными. В этом случае, как показано в работе [2], уравнения самосогласования для определения величины Δ оказываются совместными только для вещественного или чисто мнимого значения Δ.

Рассмотрим теперь (пока без учета спиновой переменной) возможность появления в системе при фазовом переходе изменения локальной плотности $n(\mathbf{r})$ электронов и появления локальных токов $\mathbf{j}(\mathbf{r})$. Соответствующие операторы имеют вид

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), \qquad \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{e}{m}\,\frac{\hbar}{i}\,\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\,\mathrm{grad}\,; \qquad (3)$$

а их межзонные матричные элементы:

$$n_{12}(\mathbf{r}) = \phi_1(\mathbf{r})\phi_2(\mathbf{r}),$$

$$\mathbf{j}_{12}(\mathbf{r}) = \frac{e}{m}\,\frac{\hbar}{i}\,\phi_1(\mathbf{r})\,\mathrm{grad}\,\phi_2(\mathbf{r}). \qquad (4)$$

С помощью соотношения (2) легко убедиться, что, если параметр Δ вещественен, то в системе возникает изменение локальной плотности электронов $< n(\mathbf{r}) > = 2\Delta n_{12}(\mathbf{r})$, а локальные токи из-за мнимости матричного элемента $\mathbf{j}_{12}(\mathbf{r})$ отсутствуют, и наоборот, если параметр Δ чисто мнимый, то появляется отличное от нуля среднее значение локальной плотности тока $< \mathbf{j}(\mathbf{r}) > = 2 j_{12}(\mathbf{r})\Delta$, а изменение локальной плотности заряда тождественно равно нулю. Разумеется, что в последнем случае из-за отсутствия накопления заряда ток $< \mathbf{j}(\mathbf{r}) >$ носит вихревой характер: $\mathrm{div} < \mathbf{j}(\mathbf{r}) > = 0$.

Таким образом можно заключить, что без учета спиновой степени свободы при вещественном значении параметра порядка система переходит в состояние с волной зарядовой плотности (ВЗП) $< n(\mathbf{r}) >$, а при мнимом – с волной плотности тока (ВПТ) $< \mathbf{j}(\mathbf{r}) >$. Если теперь учесть спин и связанную с ним возможность разного выбора знака Δ для противоположных направлений спина $\Delta_{\uparrow} = \pm \Delta_{\downarrow}$, то можно увидеть, что при:

1) $\Delta = \mathrm{Re}\,\Delta$, $\Delta_{\uparrow} = \Delta_{\downarrow}$ возникает волна локальной плотности заряда $< n(\mathbf{r}) > = 2(\Delta_{\uparrow} + \Delta_{\downarrow}) n_{12}(\mathbf{r})$, (ВЗП);

2) $\Delta = \mathrm{Re}\Delta$, $\Delta_{\uparrow} = -\Delta_{\downarrow}$ возникает волна спиновой плотности $< S(\mathbf{r}) > = 2(\Delta_{\uparrow} - \Delta_{\downarrow}) n_{12}(\mathbf{r})$, (ВСП);

3) $\Delta = \mathrm{Im}\Delta$, $\Delta_{\uparrow} = \Delta_{\downarrow}$ возникает волна плотности орбитального тока $< \mathbf{j}(\mathbf{r}) > = 2(\Delta_{\uparrow} + \Delta_{\downarrow})\, \mathbf{j}_{12}(\mathbf{r})$, (ВПТ);

4) $\Delta = \mathrm{Im}\Delta$, $\Delta_{\uparrow} = -\Delta_{\downarrow}$ возникает волна плотности потока спинового момента $< \mathrm{S}(\mathbf{r})\mathbf{j}(\mathbf{r}) > = 2(\Delta_{\uparrow} - \Delta_{\downarrow})\, \mathbf{j}_{12}(\mathbf{r})$,(ВПТС).

В предыдущей части статьи мы не конкретизировали симметрию и взаимное расположение зон в импульсном пространстве. Как сейчас будет показано особого внимания заслуживает случай совпадающих в импульсном пространстве экстремумах зон с разрешенными между ними дипольными переходами. Обозначим матричный элемент соответствующего дипольного перехода через $\mathbf{d} = < \phi_1 | \mathbf{r} | \phi_2 >$. Его легко связать с таричным элементом межзонной плотности тока:

$$\mathbf{j} = < \phi_1 | \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) | \phi_2 > = ie \frac{\epsilon_g}{\hbar} \mathbf{d}\,. \tag{5}$$

Здесь ϵ_g – ширина запрещенной зоны в неперестроенной фазе.

Теперь используя (2) и (5) можно получить следующий любопытный результат. Если параметр Δ чисто мнимый, то основное состояние системы с нарушенной симметрией характеризуется незатухающим макроскопически однородным током с плотностью $< \mathbf{j} > = 2\Delta\mathbf{j}$, пропорциональной Δ. Другой выбор фазы Δ (вещественное Δ) приводит к появлению в системе спонтанного электрического момента, т. е. к сегнетоэлектричеству.

Для реализации токового решения необходимо, чтобы ему отвечала максимальная константа связи. В работе [2] было показано, что в схеме изотропного полуметалла эффективная константа связи для решения с мнимым Δ равна:

$$g_{im} = g_1 - \tilde{g}_2\,; \tag{6}$$

в то время как константы, отвечающие решениям с ВЗП и ВСП соответственно есть:

$$g_s = g_1 + \widetilde{g}_2 + 4(g_ф^2 - g_2),$$
$$g_t = g_1 + \widetilde{g}_2 \ . \qquad (7)$$

Здесь g_1 – константа взаимодействия типа плотность – плотность, g_2 – затравочное взаимодействие, связанное с переходом пары из одной зоны в другую (типа $g_2 a_1^+ a_1^+ a_2 a_2$), $\widetilde{g}_2$ – это же перенормированное экранированием взаимодействие, $g_ф$ – величина электрон-фононного межзонного взаимодействия. Из (6) и (7) видно, что ситуация с током реализуется, если существует электрон-электронное притяжение в межзонном канале, т. е. тогда, когда

$$\widetilde{g}_2 < 0 \quad \text{и} \quad \widetilde{g}_2 < 2(g_2 - g_ф^2). \qquad (8)$$

Следует еще заметить, что в отличие от случая вещественных Δ, когда рассеяние на заряженных примесях подавляет эффект спаривания, при мнимом Δ существует частичная компенсация эффектов внутризонного рассеяния рассеянием, связанным с переходом электрона между зонами. Последнее связано с переменой знака у произведения двух аномальных функций Грина при мнимом Δ.

Из-за требования $\operatorname{div} \langle j \rangle = 0$ токовое состояние как однородное могло бы быть реализовано в геометрии, представляющей собой замкнутое кольцо. В случае образца произвольной формы следует ожидать, что он разобьется на систему макроскопических доменов.

Существует явная аналогия между рассмотренным выше случаем термодинамически равновесного токового состояния и ситуацией, возникающей в прямозонном полупроводнике с разрешенными межзонными дипольными переходами, в котором с помощью накачки получен бозе-конденсат реальных неравновесных экситонов. Так при вещественном Δ этот конденсат будет связан через электрические дипольные переходы с конденсатом фотонов в состоянии $E1$ (по терминологии [3]), а при мнимом Δ через магнитодипольные переходы с конденсатом фотонов в состоянии $M1$.

В заключение мы хотим отметить еще одно любопытное свойство, возникающее в равновесной системе с прямыми зонами при диэлектрическом спаривании в состояние с мнимым Δ. Если в системе разрешены только переходы с изменением полного момента J (как в HgTe), то упорядочение в таком случае будет сопровождаться появлением ферромагнитных свойств. Очевидно, что здесь весьма важную роль будет играть спин-орбитальное взаимодействие. Оно, кстати, должно сделать различными эффективные константы взаимодействия для переходов в состояния с ВПТ и ВПТС.

Таким образом в двузонной модели, в отличие от однозонной с плоскими участками поверхности Ферми, из-за дополнительной степени свободы, связанной с наличием двух зон разной симметрии, выбор фазы параметра порядка приводит к новым физическим эффектам (ток в основном состоянии или ферромагнетизм). В однозонной модели фаза Δ играет тривиальную роль, определяя лишь положение пучностей и узлов волн зарядовой или спиновой плотностей.

Вывод о наличии в системе с нарушенной симметрией однородных спонтанных токов вступает в противоречие с теоремой Блоха. Однако теорема Блоха доказана для нейтральных частиц. В действительности спонтанные токи создают магнитное поле, которое в свою очередь изменяет их. Это приводит к неоднородным решениям, для которых условия теоремы не выполняются [4].

В заключение авторы выражают глубокую благодарность В.Л.Гинзбургу и Л.В.Келдышу за полезное обсуждение настоящей работы.

Физический институт
им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
20 октября 1977 г.

Литература

[1] B.I. Halperin, T.M.Rice. Sol. State. Phys., **21**, 115, 1968.

[2] Б.А.Волков, Ю.В.Копаев, А.И.Русинов. ЖЭТФ, **68**, 1899, 1975.

[3] В.Б.Берестецкий, Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. Релятивистская квантовая теория, т. IV, ч. 1, стр. 33, М., изд. Наука, 1968.

[4] В.Л.Гинзбург. УФН, **48**, 25, 1952.