

О ВОЗМОЖНОСТИ ПЕРЕХОДА ПАЙЕРЛСОВСКОГО ДИЭЛЕКТРИКА В МЕТАЛЛИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

И. О. Кулик

Показано, что как следствие влияния внешнего электрического поля на щель, пайерлсовский диэлектрик должен обнаруживать существенную зависимость диэлектрической постоянной от величины поля и при достаточно сильных полях испытывать переход в металлическую фазу. Обсуждаются исходные посылки для рассмотрения неоднородных состояний, существующих в области сильных полей и конечных температур.

Известно, что одномерный металл при $T = 0$ является неустойчивым относительно перестройки решетки, связанной с образованием диэлектрической щели (переход Пайерлса [1]). Вероятно, по этой причине многие известные квазиодномерные соединения являются изоляторами (полупроводниками) [2]. В настоящей статье мы хотим обратить внимание на то обстоятельство, что сильное электрическое поле, параллельное оси легкой проводимости, может способствовать стабилизации металлической фазы. Это заключение является следствием термодинамики металла в электрическом поле. Большая величина диэлектрической постоянной квазиодномерных соединений [3, 4] усложняет картину, но сама по себе является источником интересных явлений, которые будут рассмотрены ниже.

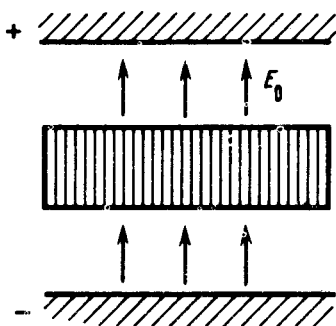


Рис. 1

Рассмотрим плоскопараллельный слой пайерлсовского диэлектрика с поверхностью, перпендикулярной одномерным цепочкам, помещенный в конденсатор, создающий напряженность поля E_0 (рис. 1). Термодинамическое соотношение для свободной энергии единицы объема имеет вид

$$dF = E dD / 4\pi. \quad (1)$$

В диэлектрической (d) фазе $E = D/\epsilon$, где $\epsilon = \epsilon_{11}$ — диэлектрическая постоянная, а в силу геометрии опыта электрическая индукция $D = E_0$. Интегрируя, находим

$$F_d(E_0) = F_d(0) + E_0^2/8\pi\epsilon. \quad (2)$$

В металлической (m) фазе поле выталкивается из образца за счет образования поверхностных зарядов ($E = 0$), поэтому

$$F_m(E_0) = F_m(0). \quad (3)$$

Разность $F_d(0) - F_m(0)$ отрицательна вследствие выгодности пайерлсовской фазы по сравнению с фазой металла (для простоты рассматривается случай $T = 0$). Приравнявая (2) и (3), находим поле перехода E_c . Считая $F_m(0) - F_d(0) \sim \frac{1}{2}N(\epsilon_F) \Delta^2$ (Δ — щель), получаем характерное значение $E_c \sim 10^6$ в/см. Поле в диэлектрике при этом ниже, поскольку оно ослаблено в ϵ раз ($\epsilon \sim 10^3$). Поэтому обычные механизмы пробоя (см. [5]) могут оказаться менее эффективными.

В модели Линдхарда, пользуясь приближением сильной связи [2], находим значение статической диэлектрической постоянной одномерного диэлектрика (при $T = 0$)

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi e^2 \pi/2a}{S} \int_{-\pi/2a}^{2dk} \frac{2dk}{2\pi} \frac{(\partial\phi_k/\partial k)^2}{2\epsilon_k}, \quad (4)$$

$$\epsilon_k = \sqrt{\Delta^2 + 4b^2 \cos^2 ka}, \quad \phi_k = \arctg\left(\frac{\Delta}{2b} \operatorname{tg} ka\right).$$

b — резонансный интеграл перехода электрона между соседними узлами, a — межатомное расстояние, ϵ_k — закон дисперсии. Диэлектрическая постоянная (4) обусловлена межзонными переходами и в пределе слабой электрон-фононной связи имеет вид

$$\epsilon = \epsilon_0 \left(\frac{4b}{\Delta}\right)^2, \quad \epsilon_0 = \frac{e^2 a}{12Sb}. \quad (5)$$

Здесь $4b$ — полная ширина зоны, S — площадь сечения, поперечного нитям, в расчете на одну нить. Энергия с учетом электростатического слагаемого $E_0^2/8\pi\epsilon$ принимает вид (ср. с [2])

$$E = -\frac{\Delta^2}{8\pi b} \ln \frac{e(8b)^2}{\Delta^2} + \frac{\Delta^2}{4\pi b g^2} + S a \frac{E_0^2}{8\pi\epsilon_0} \left(\frac{\Delta}{4b}\right)^2. \quad (6)$$

Минимизируя (6) относительно Δ , получаем $\Delta = \Delta(E_0)$. Вследствие этого, сама становится функцией поля. В области слабых полей имеем оценку

$$\Delta\epsilon/\epsilon \sim (E_0/E_c)^2, \quad E_c \sim e/S. \quad (7)$$

Переход Пайерлса может рассматриваться как бозе-конденсация фононов с $q = 2k_F$. Обозначая операторы рождения последних a_0^+ и оставляя в электрон-фононном гамильтониане только их, получим

$$H_{int} = \lambda (a_0 + a_0^+) \sum_m (a_{2m}^+ a_{2m-1} - a_{2m}^+ a_{2m+1} + \text{э. с.}). \quad (8)$$

В силу бозе-конденсации, a_0 может быть заменено c -числом,

$$a_0 \approx \sqrt{N} e^{i\chi}, \quad (9)$$

где $N \gg 1$. Существенно наличие фазы χ в (9), что приводит к двум качественным эффектам. Выражая энергию (6) в функции N и χ , получим замкнутые изоэнергетические кривые в фазовом пространстве (N и χ — канонически сопряженные переменные). По правилу квазиклассического квантования $\oint N d\chi = 2\pi(n + \gamma)$ находим дискретный спектр возбужденных состояний и частоты коллективных колебаний $\hbar\omega = E_{n+1} - E_n$. При этом воспроизводятся результаты Ли, Райса и Андерсона [6] для порога коллективной моды, которую мы можем рассматривать как явление, аналогичное джозефсоновским плазменным колебаниям в сверхпроводниках [7]. Другой аспект введения фазы связан с существованием статических решений (солитонов), в которых фаза меняется от 0 до 2π , отвечающих квантованным дефектам однородной структуры.

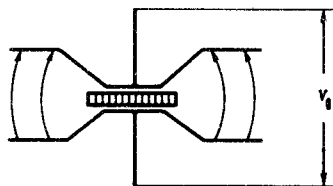


Рис. 2

Возможная схема наблюдения указанных эффектов может заключаться в включении пластинки пайерлсовского диэлектрика (КСР, ТСNQ и др.) в объемный резонатор открытого типа Фабри — Перо (рис. 2) и измерении изменения собственной частоты колебаний при подаче на металлические электроды постоянного напряжения V_0 . Масштаб величины обсуждаемого эффекта был указан выше (формула (7)).

Сделаем несколько заключительных замечаний. Мы не касаемся здесь вопроса о переходе металл — диэлектрик в окислах ванадия (трехмерных структурах), наблюдавшихся в [8] (см. [9]), а также возможных нестационарных свойствах одномерных систем в сильном поле [10, 11]. Изменения, связанные с конечностью температуры (обусловленные эффектом экранирования, т. е. конечным числом носителей в верхней зоне) и ролью "несоизмеримости" периодов пайерлсовской структуры и основной решетки ("скольжение" фазы Пайерлса) будут обсуждены в другой работе. Автор выражает благодарность И.М.Лифшицу, а также участникам Всесоюзного Совещания по проблеме строения и физических свойств квазиодномерных веществ с металлической прово-

димостью (г. Харьков), на котором была доложена настоящая работа, в том числе И.К.Янсон, Л.Н.Булаевскому, М.В.Садовскому, Д.И.Хомскому и Е.Г.Максимову, за полезные обсуждения.

Физико-технический институт
низких температур
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
26 мая 1975 г.

Литература

- [1] Р.Пайерлс. Квантовая теория твердых тел. ИЛ, М., 1956.
 - [2] Л.Н.Булаевский. УФН, 115, 263, 1975.
 - [3] I.F.Shchegolev. Phys. Stat. Sol., a, 12, 9, 1972; Я.И.Буравов, М.Л.Хидекель, И.Ф.Шеголев, Э.Б.Ягубский. Письма в ЖЭТФ, 12, 142, 1970.
 - [4] S.K.Khanna, E.Ehrenfreund, A.F.Garito, A.J.Heeger. Phys. Rev., 10B, 2205, 1974.
 - [5] В.Франц. Пробой диэлектриков. ИЛ, М., 1961.
 - [6] P.A.Lee, T.M.Rice, P.W.Anderson. Sol. St. Comm., 14, 703, 1974.
 - [7] И.О.Кулик, И.К.Янсон. Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах. М., изд. Наука, 1970.
 - [8] К.А.Валиев, Ю.В.Копяев, В.Г.Мокеров, А.В.Раков. ЖЭТФ, 60, 2175, 1971.
 - [9] А.А.Кокин. ФТТ, 17, 1317, 1975.
 - [10] J.J.Hopfield. Sol. St. Comm., 14, 727, 1974.
 - [11] J.B.Sokoloff. Sol. St. Comm., 16, 375, 1975.
-