Письма в ЖЭТФ, том 24, вып. 2, стр. 78 – 81 *20 июля 1976 г.*

К ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕОРИИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСТВА

В.Ф.Елесин, Ю.В.Копаев

Показано, что в системе двухуровневых молекул (модель Дике), в полупроводниках и полуметаллах имеет место фазовый переход в сегнетоэлектрическое состояние, обусловленный электрон-фононным взаимодействием.

1. В работе [1] (см. также [2]) было обнаружено, что в системе двухуровневых молекул, взаимодействующих с электромагнитным полем (так называемая модель Дике), возможен фазовый переход в состояние с бозе-конденсатом фотонов, если константа взаимодействия с полем превосходит расстояние между уровнями. Как показано в работе ододного из авторов [3], аналогичный фазовый переход имеет место в полупроводниках и полуметаллах, причем в последних при сколь угодно малой константе взаимодействия. При этом в спектре электронов полуметалла возникает щель (пропорциональная плотности конденсата), приводящая к переходу полуметалла в диэлектрик. Уравнение для щели по виду совпадает с уравнениями в теории БКШ и экситонного изолятора [4].

Следует отметить, что вопрос о частоте и импульсе фотонов конденсата оставался невыясненным. В большинстве работ, посвященных этой проблеме, он не обсуждался, а в некоторых высказывались утверждения о конденсации фотонов с частотой, равной расстоянию между уровнями молекулы.

В настоящей работе показано, что в упомянутых выше системах частота и импульс фотонов бозе-конденсата равны нулю (напомним, что речь идет о термодинамически равновесных системах). Это означает, что при фазовом переходе возникает спонтанное электрическое поле, постоянное во времени и пространстве, т. е. происходит переход в сегнетоэлектрическое состояние.

Мы обращаем внимание на то, что данный механизм возникновения спонтанного электрического поля, обусловленный электрон-фотонным взаимодействием, может играть существенную роль в образовании сегнетоэлектрического состояния в кристаллах. Что касается молекулярной системы, то этот механизм может быть ответственным за ориентационное упорядочение и сегнетоэлектрические свойства в ряде жидких кристаллов.

2. Уравнение движения для фотонного оператора c_k^+ с гамильтонианом Дике

$$H = \omega_{\mathbf{k}}^{\circ} c_{\mathbf{k}}^{+} c_{\mathbf{k}} + \frac{\epsilon}{2}\sigma^{z} + \frac{M_k}{2N^{1/2}}(c_{\mathbf{k}}^{+} + c_{-\mathbf{k}})(\sigma^{+} + \sigma^{-}), \quad \sigma^{\pm, z} = \sum_{j=1}^{N} \sigma_j^{\pm, z} \qquad (1)$$

имеет следующий вид

$$i\frac{\partial c_{\mathbf{k}}^{+}}{\partial t} = -\,\omega_{\mathbf{k}}^{\circ} c_{\mathbf{k}}^{+} - \frac{M_{\mathbf{k}}}{2N^{1/2}}(\sigma^{+} + \sigma^{-}), \quad M_{\mathbf{k}}^{2} = \frac{2\pi N}{V}\omega_{\mathbf{k}}^{\circ}(\mathrm{ed})^{2} = \gamma\omega_{\mathbf{k}}^{\circ}. \qquad (2)$$

Здесь $\omega^\circ_{\mathbf{k}} = ck$ – затравочная частота фотона с импульсом $\mathbf{k}$, $\sigma^{\pm, z}$ – операторы Паули, просуммированные по всем молекулам, ϵ – расстояние между уровнями молекулы, $\mathbf{e}$ – вектор поляризации поля, $\mathbf{d}$ – дипольный момент электрон-фотонного взаимодействия, V – объем.

Усредняя (2) и вычисляя $< \sigma^+ + \sigma^- >$ с помощью статистической суммы (см., например, [2]), получим

$$i\frac{\partial}{\partial t} < c_{-\mathbf{k}} - c^+_{\mathbf{k}} > = \Omega < c_{-\mathbf{k}} + c^+_{\mathbf{k}} > =$$

$$= < c_{-\mathbf{k}} + c^+_{\mathbf{k}} > \left[\omega^\circ_{\mathbf{k}} - \frac{2M^2_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\frac{\epsilon^2}{4} + \lambda^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\frac{\epsilon^2}{4} + \lambda^2}}{T} \right], \qquad (3)$$

$$\lambda^2 = 4M^2_{\mathbf{k}} < c^+_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} > / N .$$

Вследствие условия на плотность фотонов бозе-конденсата выражение в скобках (3) обращается в нуль. Следовательно, частота фотонов конденсата Ω равна нулю.

Исходя из соображения максимальной неустойчивости в неперестроеной фазе (энергетической выгодности) волновой вектор $\mathbf{k}$ также следует положить равным нулю. (Это утверждение поясняется ниже на примере полуметалла). Тогда число фотонов конденсата ($T = 0$)

$$< \frac{c^+_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}}{N} > = \frac{1}{16\gamma\omega^\circ_{\mathbf{k}}} (\gamma^2 - \epsilon^2) , \quad \gamma > \epsilon \qquad (4)$$

стремится к бесконечности при $\mathbf{k} \to 0$, а конечной величиной является однородное в пространстве и постоянное во времени электрическое поле

$$\mathbf{E} = \mathbf{e} \lim_{\mathbf{k} \to 0} (\omega^\circ_{\mathbf{k}} < c^+_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} >)^{1/2} , \quad \hbar = 1. \qquad (5)$$

3. Аналогичная ситуация имеет место в полупроводниках и полуметаллах. В этом случае система описывается гамильтонианом [3]

$$H = \omega^\circ_{\mathbf{k}} c^+_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} (a^+_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} + b^+_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}} - 1) +$$
$$(6)$$
$$+ \sum_{p} \frac{M_{\mathbf{k}}}{\sqrt{N}} (a^+_{\mathbf{p}} b^+_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + b_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}})(c^+_{\mathbf{k}} + c_{-\mathbf{k}}), \quad E_{\mathbf{p}} = p^2/2m + E_g/2.$$

Здесь $a^+_{\mathbf{p}}$, $b^+_{\mathbf{p}}$ – операторы рождения электронов и дырок, E_g – ширина запрещенной зоны полупроводника (в полуметалле $E_g < 0$). Подобно тому как это было сделано в пункте 2 можно показать, что частота фотонов конденсата равна нулю. Для отыскания импульса рассмотрим случай полуметалла, в котором фазовый переход идет при малой константе взаимодействия. Из уравнения Дайсона получим, что частота фотонов ω_k исходной системы чисто мнима

$$\omega_{\mathrm{k}} = i\lambda\left(1 - \frac{1}{6}\left(\frac{v_0 k}{\lambda}\right)^2\right), \qquad \lambda = 2\epsilon_0 \exp(-1/g),$$
$$g = \gamma\rho(v_0), \qquad \rho(v_0) = \frac{p_0 m V}{2\pi^2 N} \tag{7}$$

(ϵ_0, v_0 – энергия Ферми, скорость на поверхности Ферми, соответственно). Как видно из (7) максимальная неустойчивость достигается при $\mathrm{k} = 0$. Следовательно, так же, как и в теории сверхпроводимости, бозе-конденсат с нулевым импульсом соответствует наиболее выгодному энергетическому состоянию, причем уравнение для плотности конденсата λ принимает вид

$$1 = g\frac{N}{\rho(V_0)} \sum_{\mathrm{p}} \frac{\mathrm{th}\frac{1}{2T}(E_{\mathrm{p}}^2 + \lambda^2)^{1/2}}{2(E_{\mathrm{p}}^2 + \lambda^2)^{1/2}}. \tag{8}$$

При равной нулю температуре $T = 0$ решение (8) совпадает с λ в (7). Плотность конденсата определяет спонтанное электрическое поле (поляризацию)[1)]

$$\mathbf{E} = \mathrm{e}\frac{\lambda}{2\pi(\mathrm{e\,d})}. \tag{9}$$

4. Как показано выше, сегнетоэлектрический переход осуществляется, если учитывать только электрон-фотонное взаимодействие. Однако хорошо известно, что в рассматриваемых системах имеют место экситонная [4] и фононная [5] неустойчивости, приводящие к перестройке электроннюго спектра и кристаллической решетки. Поэтому в уравнении (8) константа g должна быть заменена на эффективную константу, зависящую от электрон-фотонной, электрон-фононной и кулоновской констант. Перечисленные эффекты дадут электронный вклад в поляризацию сегнетоэлектрика. Естественно, что полная поляризация будет определяться упомянутой электронной поляризацией и поляризацией, связанной со смещением дипольно активных ионов.

Авторы благодарны В.Л.Гинзбургу и Л.В.Келдышу за обсуждение работы и полезные замечания.

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

Поступила в редакцию
11 июня 1976 г.

1) Для систем конечных размеров вместо электрического поля должна входить электрическая индукция.

Литература

[1] K. Hepp, E. H. Lieb. Phys. Rev., 8A, 2577, 1973.

[2] Y. K. Wang, F. T. Hioe. Phys. Rev., 7A, 831, 1973.

[3] В.Ф.Елесин. ФТТ, 18, №8, 1976.

[4] Л.В.Келдыш, Ю.В.Копаев. ФТТ, 6, 2721, 1964.

[5] Ю.В.Копаев. ФТТ, 8, 2731, 1966.