

УДК 537.226.4

О ВКЛАДЕ РЕШЕТОЧНОГО АНГАРМОНИЗМА В ТЕМПЕРАТУРУ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ СО СВОБОДНЫМИ НОСИТЕЛЯМИ ЗАРЯДА

Г. Л. МАИЛЯН

Кироваканский филиал Ереванского политехнического института

(Поступила в редакцию 14 мая 1983 г.)

Рассмотрена вибронная модель сегнетоэлектрика—полупроводника, содержащего свободные носители заряда. Вычислена температура фазового перехода с учетом вклада в свободную энергию флуктуаций параметра порядка, обусловленных электрон-фононным и ангармоническим взаимодействиями.

Зависимость температуры T_c структурного фазового перехода (ФП) от концентрации n свободных носителей в сегнетоэлектриках-полупроводниках была теоретически исследована нами в работе [1] в рамках вибронной модели сегнетоэлектриков [2]. При этом были получены более низкие по сравнению с приближением среднего поля (ПСП) значения T_c благодаря учету флуктуаций параметра порядка при вычислении свободной энергии модели [3]. Однако в работе [1] в гамильтониане модели мы не учитывали ангармонического взаимодействия, исследованного нами ранее [4] в случае модели без свободных носителей. В настоящей работе исследуется более общая модель сегнетоэлектрика—полупроводника, содержащего свободные носители, в которой наряду с электрон-фононным взаимодействием учитывается также решеточное ангармоническое взаимодействие. Ниже будет показано, что эти взаимодействия (ангармоническое — в первом порядке, электрон-фононное — в четвертом порядке по константам связи) дают аддитивный вклад в T_c , который необходимо учитывать при сравнении теории с экспериментом.

Рассмотрим вибронную модель [2] сегнетоэлектрика с гамильтонианом

$$H = H_e + H_{ph} + H_{eph} + H_4,$$

$$H_e = \sum_{\sigma k} a_{\sigma k}^+ a_{\sigma k}, \quad H_4 = \frac{1}{4N} \sum_{q_1 q_2 q_3} B(q_1 q_2 q_3) Q_{q_1} Q_{q_2} Q_{q_3} Q_{q_1+q_2+q_3}, \quad (1)$$

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_q (P_q^+ P_q + \omega_q^2 Q_q^+ Q_q), \quad H_{eph} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\sigma k q} V(q) a_{\sigma k}^+ a_{\sigma k-q} Q_q,$$

где $a_{\sigma k}^+$ и $a_{\sigma k}$ — операторы рождения и уничтожения электрона с импульсом k и энергией $\epsilon_{\sigma k}$ в зоне $\sigma = 1, 2$, Q_q и P_q — нормальная координата и сопряженный ей импульс фонов с частотой ω_q , H_4 описы-

нает ангармоническое фононное взаимодействие, $V(q)$ — матричный элемент межзонного электрон-фононного (вибронного) взаимодействия. При $\tau=1, 2$ $\bar{\sigma}=2, 1$. $V(q)$ максимален при $q=0$. Если $V(0)$ достаточно велико, то благодаря смешиванию зон статистическое среднее $y = \langle Q_{q=0} \rangle$ может быть отличным от нуля. Параметр порядка y зависит от температуры T , и при $T > T_c$ $y = 0$, что соответствует структурному ФП.

Подставляя $Q_q \rightarrow \sqrt{N}y + Q_q$ в (1), приведем (1) к виду

$$H = H_0 + H_{eph} + H_3 + H_4,$$

где H_0 — гамильтониан ПСП, учитывающий взаимодействие электронов лишь со статическим смещением подрешеток y , H_3 и H_4 описывают взаимодействие фононов. В работе [5] учтено влияние членов H_3 и H_4 на T_c и найдены условия, при которых обусловленные ими поправки к T_c (корреляционные поправки) малы. Считая эти условия выполненными, H_3 и H_4 рассматривать здесь мы не будем.

Свободная энергия для гамильтониана $H_0 + H_{eph}$ вычисляется как в работе [1] и имеет вид

$$F = T \sum_q \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\Omega_q}{2T} \right) + \frac{N}{2} \left(\omega_0^2 + \frac{B}{2} y^2 \right) y^2 - \\ - T \sum_{\sigma k} \ln \left[1 + \exp \left(- \frac{\bar{\varepsilon}_{\sigma k} - \mu}{T} \right) \right] + \mu (N + n), \quad (2)$$

где $\bar{\varepsilon}_{\sigma k}$ — перенормированная в ПСП энергия электронов,

$$\bar{\varepsilon}_{1,2k} = \frac{1}{2} [\varepsilon_{1k} + \varepsilon_{2k} \mp \sqrt{(\varepsilon_{2k} - \varepsilon_{1k})^2 + 4 V^2(0) y^2}],$$

$N + n$ — полное число электронов в единице объема (если $n < 0$, то $|n|$ есть концентрация дырок в валентной зоне). Частота Ω_q мягкой моды определяется из уравнения

$$\Omega_q^2 = \omega_q^2 + 3 B(q) y^2 + \Pi_q(\Omega_q),$$

где $\Pi_q(\omega)$ — поляризационный оператор. Энергия Ферми μ и параметр порядка y определяются из уравнений $\partial F / \partial \mu = 0$ и $\partial F / \partial y = 0$. Следуя работе [1], находим

$$\sum_{\sigma k} f(\bar{\varepsilon}_{\sigma k}) = N + n, \quad (3)$$

$$y \left[\omega_0^2 + B y^2 + \frac{3}{2N} \sum_q \frac{1}{\Omega_q} \operatorname{cth} \frac{\Omega_q}{2T} + \frac{2}{N} \sum_{\sigma k} f(\bar{\varepsilon}_{\sigma k}) \frac{\partial \bar{\varepsilon}_{\sigma k}}{\partial y^2} \right] = 0, \quad (4)$$

где

$$\bar{\varepsilon}_{\sigma k} = \varepsilon_{\sigma k} + \delta \varepsilon_{\sigma k}, \quad \delta \varepsilon_{2k} \approx \frac{V^2(0) \Delta_k^2}{2 N \Delta_k^2} \sum_q \frac{1}{\Omega_q} \operatorname{cth} \frac{\Omega_q}{2T},$$

$$\delta \varepsilon_{1k} = -\delta \varepsilon_{2k}, \quad f(x) = \left[\exp \left(\frac{x - \mu}{T} \right) + 1 \right]^{-1}$$

$$\Delta_k = \varepsilon_{2k} - \varepsilon_{1k}, \quad \Delta_k = \bar{\varepsilon}_{2k} - \bar{\varepsilon}_{1k}.$$

При $B = 0$ и $B(q) = 0$ (3) и (4) переходят в соответствующие формулы работы [1].

Решая уравнения (3) и (4) в сегнетофазе, можно найти зависимость величин μ и y от T и других параметров модели. Температура T_c ФП определяется из (3) и (4) при значении $y = 0$. После дифференцирования в (4) сохраним члены до первого порядка по B и до четвертого по $V(0)$ [4]. Полагая $\Omega_q \approx \omega_0$ и $B(q) \approx B$, находим

$$T_c = \omega_0 / \ln \left[\frac{3(\beta + I_2)}{I_1 - 1 + 1,5(\beta + I_2)} + 1 \right], \quad (5)$$

где введены безразмерные величины

$$\beta = \frac{B}{\omega_0^3}, \quad I_1 = \frac{1}{N} \sum_k \frac{2 V^2(0)}{\omega_0^3 \Delta_k} [f(\tilde{\varepsilon}_{1k}) - f(\tilde{\varepsilon}_{2k})],$$

$$I_2 = \frac{1}{N} \sum_k \frac{4 V^4(0)}{\omega_0^3 \Delta_k^3} [f(\tilde{\varepsilon}_{1k}) - f(\tilde{\varepsilon}_{2k})].$$

Поскольку $T_c \sim \omega_0$ и $\omega_0 \ll \Delta_k$ [1, 3], то в (3) и (5) в функциях Ферми $f(\tilde{\varepsilon})$ можно положить $T = 0$. При соответствующем выборе закона дисперсии зон и величины малых параметров β и ω_0/Δ с помощью формул (3) и (5) легко найти зависимость T_c от n для конкретного полупроводника, как это было сделано нами для $SnTe$ в частном случае $\beta = 0$ [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. Mailyan G. L. Sol. St. Com., 24 611 (1977).
2. Kristoffel N., Kohn P. Ferroelectrics, 6, 3 (1973).
3. Плакида Н. М., Маилян Г. А. ФТТ, 19, 121 (1977).
4. Mailyan G. L., Plakida N. M. Phys. Stat. Sol. (b), 80, 543 (1977).
5. Маилян Г. А. Ученые записки ЕрГУ, № 3 (151), 164 (1982).

ԱՋԱՏ ԼԻՑԻԱԿԻՐՆԵՐՈՎ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻԶՆԵՐՈՒՄ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԱՅԻՆ
ՑԱՋԱՅԻՆ ԱՆՑՄԱՆ ԶԵՐՄԱՍՏԻՃԱՆԻ ՄԵՋ ՑԱՆՑԱՅԻՆ ԱՆՀԱՐՄՈՆԻԶՄԻ
ՆԵՐԴՐՄԱՆ ՄԱՍԻՆ

Գ. Լ. ՄԱՅԻԼՅԱՆ

Դիտարկված է ազատ լիցքակիրներ պարունակող սեգնետիկ կիսահաղորդիչի վիբրոնային մոդելը: Հաշված է ֆազային անցման ջերմաստիճանը, հաշվի առնելով էլեկտրոն-ֆոնոն և անհարմոնիկ փոխազդեցություններով պայմանավորված կարգի պարամետրի ֆլուկտուացիաների ներդրումը ազատ էներգիայի մեջ:

ON THE CONTRIBUTION OF LATTICE ANHARMONICITY TO THE TEMPERATURE OF STRUCTURAL PHASE TRANSITION IN SEMICONDUCTORS WITH FREE CARRIERS

G. L. MAILYAN

The vibronic model of a ferroelectric semiconductor containing free charge carriers is considered. The temperature of phase transition has been calculated taking into account the contribution to the free energy of fluctuations of the order parameter defined by electron-phonon and anharmonic interactions.