Письма в ЖЭТФ, том 35, вып.3, стр. 106 – 108 *5 февраля 1982 г.*

К ТЕОРИИ ТЕРМОПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ЭФФЕКТА В ЦЕНТРОСИММЕТРИЧНЫХ ДИЭЛЕКТРИКАХ

В.Л.Гуревич, А.К.Таганцев

Рассмотрен фононный механизм формирования термополяризационного эффекта в центросимметричных кристаллах. Оценена величина термополяризационного коэффициента в обычном диэлектрике и сегнетоэлектрике.

Термополяризационный эффект состоит в появлении диэлектрической поляризации P при наличии в диэлектрике градиента температуры $\partial T / \partial x_i$. В линейном приближении эти величины связаны соотношением.

$$P_i = b_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} ,$$

где b – так называемый тензор термополяризационных коэффициентов[1)]. В работе одного из авторов[1] изучен термополяризационный эффект в нецентросимметричных кристаллах. Недавнее обнаружение этого эффекта в центросимметричном сегнетоэлектрике $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ [2] делает актуальным теоретическое исследование эффекта в центросимметричных кристаллах. Заметим, что наблюдать этот эффект удобно именно в центросимметричных кристаллах, где он не может быть замаскирован так называемым "третичным" пироэффектом[3].

Имеются два вклада в термополяризационный эффект – термодинамический и кинетический. Исследовать термодинамический вклад в настоящей статье не будем, приведем лишь его порядковую оценку, которая совпадает с полученой в[1]:

$$b^{(T)}_{ij} \cong \gamma_{ijmn}\, a_{mn} , \tag{1}$$

где a – тензор коэффициентов теплового расширения, а тензор γ связывает поляризацию с градиентом деформации $\partial U_{mn}/\partial x_j$:

$$P_i = \gamma_{ijmn} \frac{\partial U_{mn}}{\partial x_j} .$$

Чтобы описать механизм формирования кинетического вклада, рассмотрим простейший пример полярного диэлектрика. Вклад ветви j в поляризацию кристалла P пропорционален среднему значению нормальной координаты $\langle \xi^j_k \rangle$ при волновом векторе $k = 0$. Оно определяется из усредненного уравнения движения

$$\langle \xi^j_0 \rangle = - \frac{1}{\Omega_{0j}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{j'j''} V_0^{jj'j''}{}_{\mathbf{k}\,-\mathbf{k}} \langle \xi^{j'}_{\mathbf{k}}\, \xi^{j''*}_{\mathbf{k}} \rangle$$

---

1) В[1] был использован термин "электротермический" эффект. термин "терморполяризационный" сейчас нам кажется более удачным.

здесь $V^{jj'j''}_{\mathbf{kk'k''}}$ – тройной ангармонический матричный элемент, Ω_{0j} частота ветви j при $\mathbf{k} = 0$. Поскольку $V^{jj'j''}_{0\mathbf{k}-\mathbf{k}}$ отличен от нуля лишь при $j' \neq j''$, $\langle \xi^{j}_{0} \rangle$, а следовательно и P, появляется лишь в меру корреляции фононных состояний разных ветвей при одном $\mathbf{k}$. Интересующая нас корреляция возникает лишь в первом порядке по рассеянию фононов. В этом порядке мы получаем для связи P с неравновесной добавкой к фононной функции распределения $\Delta N_{\mathbf{k}j}$:

$$P_i = -2i \sum_{\mathbf{k},\, j \neq j',\, p} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho v\, \Omega^3_{0j}}}\; \frac{Q_p e^i_p\,(0, j\,)}{a^3}\; V^{jj'j''}_{0\,\mathbf{k}-\mathbf{k}}\; \frac{2\,\Omega_{\mathbf{k}j'}}{\Omega^2_{\mathbf{k}j''} - \Omega^2_{\mathbf{k}j'}}\; (\hat{I}\,\Delta N)_{jj'} \tag{2}$$

где $e^i_p\,(\mathbf{k}, j\,)$ и Q_p – вектор поляризации колебаний p-го атома элементарной ячейки и заряд этого атома, ρ – плотность, a – постоянная решетки, v – объем кристалла. Величину $(\hat{I}\Delta N)_{jj'}$ можно назвать недиагональным интегралом столкновений, при $j = j'$ это обыкновенный линеаризованный интеграл столкновений (см., например,[4]). При $j \neq j'$ (а только такие компоненты дают вклад в (2)) эта величина отличается от $(\hat{I}\Delta N)_{j'j'}$ заменой квадрата модуля матричного элемента на произведение соответствующих разных матричных элементов. Неравновесную добавку к функции распределения $\Delta N_{\mathbf{k}j}$ следует находить из кинетического уравнения:

$$N_{\mathbf{k}j}\,(N_{\mathbf{k}j} + 1)\, \frac{\hbar\,\Omega_{\mathbf{k}j}}{T^2}\, \frac{\partial \Omega_{\mathbf{k}j}}{\partial k_i}\, \frac{\partial T}{\partial x_i} = -\,(\hat{I}\Delta N)_{jj}\,, \tag{3}$$

где $N_{\mathbf{k}j}$ – равновесная функция распределения фононов.

Соотношение (2) совместно с (3) решают поставленную задачу. Пользуясь стандартной оценкой для $V^{jj'j''}_{\mathbf{kk'k''}}$ (см.[4]) из (2) и (3) нетрудно получить оценку кинетического вклада в термополяризационный коэффициент:

$$b^{(k)} \cong b \equiv \frac{\epsilon}{4\pi}\, \frac{k_Б}{a^2 \rho^{1/2} w} \quad \text{при } T \gtrsim \Theta \tag{4}$$

$k_Б$ – постоянная Больцмана, w – средняя скорость звука, ϵ – диэлектрическая проницаемость, Θ – дебаевская температура, и

$$b^{(k)} \cong b_0 \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \quad \text{при} \quad T \ll \Theta\,. \tag{5}$$

Эти оценки совпадают с оценкой (1) для термодинамического вклада $b^{(T)}$. Важно, однако, что эти вклады в принципе можно разделить на опыте, например измеряя независимо коэффициент теплового расширения и коэффициент в линейной связи между поляризацией и градиентом деформации.

Для сегнетоэлектриков типа смещения для $T \gtrsim \Theta$ остается справедливой оценка (4), для $T \ll T_0$ справедливо (5) (T_0 – температура "вымораживания" мягкой моды, определяемая из уравнения $k_Б T_0 = \hbar\,\Omega_0\,(T_0)$, Ω_0 – частота мягкой моды), для $T_0 \lesssim T \ll \Theta$

$$b^{(k)} \cong b_0\, \frac{T}{\Theta}\,.$$

Таким образом, в сегнетоэлектриках следует ожидать аномально большой величины эффекта. Действительно, экспериментальное значение термополяризационного коэффициента в $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ [2] находится в разумном согласии с грубой оценкой (4).

Авторы благодарны А.Л.Холкину, В.А.Трепакову, Г.А.Смоленскому за предоставление результатов эксперимента и полезную дискуссию.

Литература

1. *Гуревич В.Л.* ФТТ, 1981, **23**, 2357.
2. *Холкин А.Л., Трепаков В.А., Смоленский Г.А.* Письма в ЖЭТФ, 1982, **35**,
3. *Пельц С.А., Карпельсон А.Е.* ФТТ, 1971. **13**, 3104; *Jang S.B.* Source book of Pyroelectricity, 1974, N.Y.
4. *Гуревич В.Л.* "Кинетика фононных систем". М., Наука, 1980.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
17 декабря 1981 г.