Письма в ЖЭТФ, том 29, вып.7, стр. 381 – 384 *5 апреля 1979 г.*

К ВОПРОСУ О ВОЗМОЖНОСТИ ТОКОВОГО СОСТОЯНИЯ ЭКСИТОННОГО ДИЭЛЕКТРИКА

Э.Г.Батыев

Показано, что для модели экситонного диэлектрика необходимо переопределить выражение для тока, иначе возникает противоречие. В результате оказывается, что токового состояния экситонного диэлектрика быть не может.

В работе Волкова и Копаева [1] было показано, что в экситонном диэлектрике при определенных условиях возможно состояние с недиссипативным током.

В данной статье показывается, что при последовательном рассмотрении вопроса в рамках простой модели эффект исчезает.

Фактически рассуждения авторов работы [1] сводятся к следующему. Собственные состояния электрона в экситонном диэлектрике имеют вид

$$\psi_k = u_k \psi_{1k} + v_k \psi_{2k}, \tag{1}$$

где ψ_{1k}, ψ_{2k} – собственные функции электрона с квазимпульсом $\mathbf{k}$ в исходных, неперестроенных зонах (проводимости и валентной). Подразумевается, что $\psi_{1,2}$ удовлетворяют уравнению Шредингера с периодическим потенциалом:

$$H_o \psi_{nk} = \xi_{nk} \psi_{nk}, \quad H_o = \frac{-1}{2m} \nabla^2 + U(r). \tag{2}$$

При вычислении тока по известной формуле

$$\mathbf{j}_o = \frac{1}{2m} (\psi^* \hat{\mathbf{p}} \psi + \text{к.с.}) \tag{3}$$

($\hat{\mathbf{p}} \equiv -i\nabla$) возникает, помимо прочего, вклад из-за интерференции ψ_1 и ψ_2 в состоянии с волновой функцией (1); только он и будет нас интересовать; его величина:

$$\mathbf{j}_{12} = \frac{1}{2m}\{(\overset{*}{u}v\psi_1^*\hat{\mathbf{p}}\psi_2 + u\overset{*}{v}\psi_2^*\hat{\mathbf{p}}\psi_1) + \text{к.с.}\} \qquad (4)$$

(здесь и далее для простоты опускается индекс $\mathbf{k}$). Недиссипативный ток [1] это есть усредненный по координате ток $\mathbf{j}_{12}$.

Здесь возникает противоречие: для состояния (1) не выполняется уравнение непрерывности, если в качестве тока брать величину (3). В этом можно убедиться следующим образом. Величину $\operatorname{div}\mathbf{j}_{12}$ можно вычислить, воспользовавшись тем, что функция

$$\phi = u\psi_1 e^{-i\xi_1 t} + v\psi_2 e^{-i\xi_2 t}$$

есть решение временного уравнения Шредингера с гамильтонианом H_0; запишем уравнение непрерывности для этого состояния (естественно, с током (3)) и приравняем нулю коэффициенты при $\exp\{\pm i(\xi_1 - \xi_2)t\}$. Складывая получившиеся выражения, имеем

$$\operatorname{div}\mathbf{j}_{12} + i(\xi_1 - \xi_2)[\overset{*}{u}v\psi_1^*\psi_2 - \text{к.с.}] = 0. \qquad (5)$$

Нетрудно убедиться, что второй член в (5), вообще говоря, не обращается в нуль. Подчеркнем, что полученное соотношение (5) есть просто свойство решений уравнения Шредингера.

Для стационарного состояния (1) $\partial|\psi|^2/\partial t = 0$, в то время как $\operatorname{div}\mathbf{j} \neq 0$ (см. (5)), так что налицо противоречие – уравнение непрерывности не удовлетворяется.

Для того чтобы понять, в чем дело, рассмотрим простейшую модель экситонного диэлектрика с эффективным гамильтонианом (для синглетного спаривания):

$$H = \sum_{k;\, n=1,2} \xi_{nk} a_{nk}^+ a_{nk} + \sum_k \{\Delta a_{1k}^+ a_{2k} + \overset{*}{\Delta} a_{2k}^+ a_{1k}\}, \qquad (6)$$

где операторы a_{1k} и a_{2k} относятся к зоне проводимости и валентной зоне, Δ – параметр порядка, а энергии в изотропном случае

$$\xi_{1k} = \frac{k^2 - k_0^2}{2m_1}, \quad \xi_{2k} = -\frac{k^2 - k_0^2}{2m_2}.$$

Известно, что модель такого типа (если учесть еще опущенный в (6) несущественный для дальнейшего постоянный член) после самосогласованного определения Δ эквивалентна модели БКШ; во всяком случае, равновесные свойства упорядоченной фазы описываются ею правильно.

Можно обращаться с таким гамильтонианом как с обычным, т.е. считать Δ заданной величиной и не интересоваться ее происхождением и способом ее определения (в частности, не важно, есть фиксация фазы или ее нет). Пока мы имеем дело с равновесными свойствами, нет сомнений в правильности получаемых при этом результатов.

Одноэлектронные собственные функции гамильтониана (6) есть функции типа (1), для которых u и v можно записать в виде

$$|u|^2 = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}\right); \; |v|^2 = \frac{1}{2}\left(1 \mp \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}\right); \tag{7}$$

$$u\, v = \pm \frac{|\Delta|}{2\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}\,; \quad v = |v|\, e^{-i\phi}, \quad \phi = \arg \Delta, \quad \xi \equiv \frac{1}{2}(\xi_1 - \xi_2).$$

Здесь верхний (нижний) знак относится к верхней (нижней) перестроенной зоне, а соответствующие энергии $E = \dfrac{\xi_1 + \xi_2}{2} \pm \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}$.

Для получения уравнения непрерывности запишем соответствующее гамильтониану (6) одноэлектронное волновое уравнение:

$$i\,\frac{\partial \psi}{\partial t} = H_0\,\psi + \hat{K}\,\psi, \tag{8}$$

где по определению $\hat{K}\,\psi(r) = \int d\mathbf{r}' K(r, r')\,\psi(r')$,

$$K(r, r') = \Delta \sum_k \psi_{1k}(r)\,\psi^*_{2k}(r') + \Delta^* \sum_k \psi_{2k}(r)\,\psi^*_{1k}(r'). \tag{9}$$

С помощью уравнения (8) получим следующее уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_0 + i\,(\psi^* \hat{K}\psi - \psi \hat{K}^* \psi^*) = 0. \tag{10}$$

Для стационарного состояния (1), (7) отсюда получается (5) – противоречие устранено.

Таким образом, как только мы принимаем, что состояние электрона в экситонном диэлектрике описывается волновой функцией (1) (что есть следствие приближения среднего поля), мы приходим к волновому уравнению (8) и уравнению непрерывности (10), т.е. к другому, отличному от (3), выражению для тока. Именно, плотность тока

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_0 + \mathbf{j}_1\,, \; \operatorname{div} \mathbf{j}_1 = i\,(\psi^* \hat{K}\psi - \psi \hat{K}^* \psi^*)\,, \tag{11}$$

где $\mathbf{j}_0$ задается формулой (3). Что касается уравнения для $\mathbf{j}_1$, то его можно проанализировать по аналогии с соответствующим уравнением электростатики. Выражение для усредненной величины $<\mathbf{j}_1>$ получается просто. Для состояния (1), (7) средний "заряд" в (11) равен нулю, а средний "дипольный момент" единицы объема ("поляризация") $\mathscr{P} \neq 0$ (если выполнено соответствующее условие, как предполагается в [1]). "Электрическое поле" $<\mathbf{j}_1> = -4\pi\mathscr{P}$; при этом для состояния (1), (7) получается:

$$<\mathbf{j}_1> = \frac{i}{V}(|u|^2 - |v|^2)\{\Delta \int d\mathbf{r}\, \psi_2^* \,\mathbf{r}\, \psi_1 - \text{к. с.}\} \qquad (12)$$

(V – объем). Сравнивая с усредненной величиной $<\mathbf{j}_{12}>$, убеждаемся, что $<\mathbf{j}_1> + <\mathbf{j}_{12}> = 0$ (здесь надо воспользоваться известным соотношением между матричными элементами импульса и координаты $\frac{\hat{\mathbf{p}}_{12}}{m} = i(\xi_1 - \xi_2)\mathbf{r}_{12}$).

Можно поступить иначе и вместо тока рассмотреть скорость. Для оператора скорости имеем:

$$\dot{\mathbf{r}} = i(H\mathbf{r} - \mathbf{r}H) = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} + i(\hat{K}\mathbf{r} - \mathbf{r}\hat{K}). \qquad (13)$$

Вычисляя среднее значение $<\dot{\mathbf{r}}>$ в состоянии (1), (7), опять-таки найдем, что интерференционная часть величины $\left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \right\rangle$ и среднее второго слагаемого в (13) взаимно уничтожаются.

Таким образом, интерференционная часть тока в среднем обращается в нуль, а для $<\dot{\mathbf{r}}>$ имеем просто

$$<\dot{\mathbf{r}}> = \frac{\mathbf{k}}{m_1}|u|^2 - \frac{\mathbf{k}}{m_2}|v|^2,$$

что совпадает, как нетрудно убедиться, с $\partial E/\partial \mathbf{k}$, как и должно было быть.

Благодарю за обсуждение С.К.Саввиных, А.В.Чаплика и М.В.Энтина.

Институт физики полупроводников
Академии наук СССР
Сибирское отделение

Поступила в редакцию
20 января 1979 г.

Литература

[1] Б.А. Волков, Ю.В.Копаев. Письма в ЖЭТФ, 27, 10, 1978.