

МОДЕЛЬ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В НЕЛИНЕЙНЫХ КРИСТАЛЛАХ ТИПА ПРУСТИТА (Ag_3AsS_3)

А.Н.Мелешко, А.С.Шумовский

Предложена модель, основанная на предположении о существовании сильной связи между дипольной, фононной и электронной подсистемами вблизи точки сегнетоэлектрического фазового перехода, позволяющая описать основные экспериментально наблюдаемые особенности фазового перехода в прустите при воздействии света.

В недавних экспериментальных работах (см. [1, 2] и приведенные в них ссылки) было обнаружено, что свойства сегнетоэлектрической фазы в прустите резко меняются при воздействии на кристалл света в области температур вблизи точки фазового перехода ($T_c = 26,7$ К). Это проявляется в значительном усилении диэлектрических свойств сегнетоэлектрической фазы по сравнению со случаем, когда световое воздействие на кристалл вблизи точки перехода отсутствует. Характерно то, что кристалл "запоминает" результат светового воздействия: однажды облученный светом вблизи точки перехода кристалл после длительного пребывания при комнатной температуре проявляет те же аномалии диэлектрических свойств при переходе в сегнетоэлектрическую фазу в отсутствии нового светового воздействия. Вместе с тем, нагревание кристалла до некоторой достаточно высокой температуры разрушает указанные аномальные свойства. Подчеркнем, что в настоящее время подобное поведение обнаружено только у прустита.

Представляет несомненный интерес изучение микроскопических механизмов, приводящих к подобным эффектам. В частности, правильное понимание таких механизмов должно способствовать отысканию других объектов, обладающих теми же свойствами, что и прустит.

Для построения микроскопической модели заметим, прежде всего, что при температуре $T \gtrsim T_c$ концентрация электронов в зоне проводимости должна быть мала. Воздействие света приводит к появлению дополнительных свободных носителей, что проявляется, в частности, в заметном усилении проводимости [1, 2]. Подчеркнем, что генерация светом свободных носителей в прустите наблюдается также и при комнатных температурах [3].

Следует особо отметить, что для правильного понимания механизмов низкотемпературной генерации свободных носителей необходимо исследовать зависимость интенсивности такой генерации от интенсивности освещения и длин волн падающего света. К сожалению, указанные вопросы в эксперименте не исследовались.

Упорядочение диполей при переходе в сегнетоэлектрическую фазу сопровождается искажением решетки, возникающим за счет диполь-фононного взаимодействия. В свою очередь, конденсация мягкой фононной моды при указанном переходе за счет электрон-фононного взаимо-

действия приводит к перестройке электронного спектра системы. Таким образом, естественно предположить что электронная и дипольная подсистемы связаны между собой через посредство решетки.

Учитывая сказанное, выберем модельный гамильтониан рассматриваемой системы в виде

$$H = H_{ph} + H_e + H_{e-ph} + H_d + H_{d-ph} \quad (1)$$

Здесь первый член описывает энергию свободных фононов, второй — энергию свободных электронов, третий — электрон-фононное взаимодействие фреilihовского типа [4]. Оператор энергии дипольной подсистемы имеет вид

$$H_d = - \sum_{m,n} \Lambda_{mn} \sigma_m^+ \sigma_n^-, \quad \sigma_m^\pm \equiv \frac{1}{2} (\sigma_m^x \pm i \sigma_m^y) \quad (2)$$

где суммирование ведется по всем N_d диполям. Предполагается, что число электронов сравнимо с числом диполей: $N_d = \alpha N_e$. Для простоты будем считать диполь-дипольное взаимодействие дальнедействующим: $\Lambda_{mn} = \lambda_{mn} / N_d$, где λ_{mn} — ограниченная функция.

Оператор диполь-фононного взаимодействия в линейном по смещению диполей приближении имеет вид [5]:

$$H_{d-ph} = - \frac{1}{\sqrt{N_d}} \sum_{m,n} A_{mn}(q) \sigma_m^+ \sigma_n^- (b_q + b_{-q}^+) \quad (3)$$

где $b_q (b_q^+)$ — оператор фонона q -й моды, вызывающей нестабильность решетки.

Совокупность двух последних членов в (1) описывает фазовый переход в состояние, характеризуемое упорядочением диполей. Дипольный параметр порядка (удельная поляризация) определяется уравнением

$$P = \frac{1}{2} \text{th} \frac{(\lambda_0 + A_0(q) P^2) P}{kT}, \quad \lambda_0 \equiv \frac{1}{N^2} \sum_{n,m} \lambda_{nm}$$

решения которого приведены на рис. 1. Как нетрудно видеть, в зависимости от соотношения между параметрами диполь-дипольного λ_0 и диполь-фононного $A_0(q)$ взаимодействия фазовый переход может быть переходом как второго, так и первого рода, что согласуется с экспериментом [1, 2] причем температура перехода первого рода выше, чем температура перехода второго рода.

При переходе в состояние с упорядочением диполей в дипольной подсистеме; в фононной подсистеме происходит макроскопическая конденсация мягкой фононной моды q [5]. В свою очередь, в электронной подсистеме также возможен фазовый переход, характеризуемый макроскопическим заполнением фононной моды (рассматривается га-

мильтониан фреelixовского типа с одной резонансной модой фононного поля). Будем для простоты считать, что конденсирующаяся при этом мода также является модой q . Фазовый переход в электронной подсистеме характеризуется перестройкой электронного спектра и появлением запрещенной щели, что может быть описано в рамках модификации метода аппроксимирующих гамильтонианов [6]. Это определяет диэлектрические свойства системы. Индуцированная щель определяется уравнением вида

$$E = \frac{J^2}{\omega_q} \sqrt{\xi}, \quad \xi \equiv \frac{\langle b_q^+ b_q \rangle}{N_d},$$

где J — константа связи в гамильтониане $H_e - p\hbar$

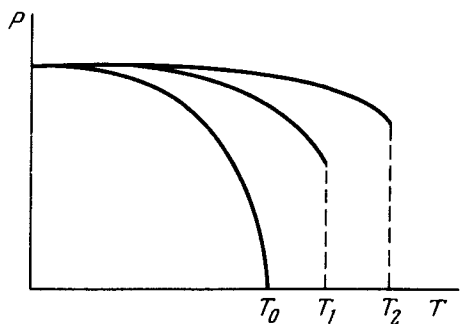


Рис.1. Температурная зависимость удельной поляризации P . Точки T_0 и T_1, T_2 соответствуют случаям переходов второго и первого рода

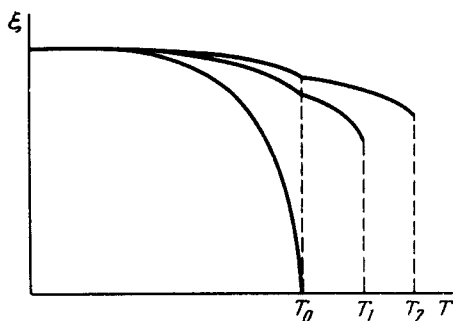


Рис.2. Температурная зависимость когерентного искажения решетки

Когерентное искажение решетки определяется соотношением

$$\xi = A_0(q) P^2 + \left(\frac{J^2}{\omega_q} c \right)^2, \quad c = \frac{1}{2N_e} \sum_p \text{th} \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \frac{J^4}{\omega_q^2} c^2}}{2kT}.$$

Его температурная зависимость приведена на рис.2.

Таким образом, рассматриваемая модель позволяет описать сегнетоэлектрическое упорядочение диполей и одновременное изменение диэлектрических свойств, как это происходит в прустите при воздействии света. Модель не включает явно члена, описывающего световую

генерацию свободных носителей, так как для правильного выбора такого члена необходимо найти указанные выше зависимости генерации от параметров падающего света.

Московский
Государственный университет
им. М.В.Ломоносова

Поступила в редакцию
14 марта 1979 г.

Литература

- [1] Н.Д.Гаврилова, В.А.Копчик и др. Кристаллография, **23**, 1067, 1978.
 - [2] Т.В. Попова, Н.Д.Гаврилова и др. ФТТ, **20**, 2505, 1978.
 - [3] В.И.Бредихин, В. К.Генкин, Л.В. Соустов. Квантовая электроника, **3**, 751, 1975.
 - [4] H.Frolich. Phys. Rev., **79**, 845, 1950.
 - [5] И.К.Кудрявцев, А.Н.Мелешко, А.С.Шумовский. ДАН СССР (в печати).
 - [6] N.N.Bogolubov Jr., A.N.Plechko. Physica, **82**, 163, 1976.
-