

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



П-312

18/viii-75

P4 - 8893

2994/2-75

З.К.Петру, Г.Л.Маилян

САМОСОГЛАСОВАННЫЙ ПОДХОД К ТЕОРИИ  
СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ-ПОЛУПРОВОДНИКОВ

**1975**

P4 - 8893

З.К.Петру,<sup>1</sup> Г.Л.Маилян<sup>2</sup>

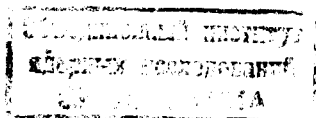
САМОСОГЛАСОВАННЫЙ ПОДХОД К ТЕОРИИ  
СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ-ПОЛУПРОВОДНИКОВ

*Направлено в ТМФ*

---

<sup>1</sup> Институт теоретической физики Вроцлавского университета, Вроцлав (ПНР).

<sup>2</sup> Ереванский государственный университет.



## Введение

Еще в 1964 году авторы работы /1/ обратили внимание на тот факт, что вибрионное взаимодействие в элементарных единицах типа  $Ti-O-Ti$  или  $TiO_6$  (октаэдр) приводит к их неустойчивости по отношению к оптическим колебаниям. Было показано, что при определенном условии на параметры задачи (немалое электрон-фононное взаимодействие) частота оптической фононной моды обращается в нуль (или становится мнимой) за счёт вибрионного взаимодействия, что и приводит к неустойчивости симметричной конфигурации упомянутых единиц. Эта неустойчивость может быть снята ангармоническим колебательным взаимодействием, как и в классическом подходе к сегнетоэлектрическим фазовым переходам /2/. Таким образом, в работе /1/ обосновано появление мнимой частоты, которая в работе /2/ была введена  $\alpha \rho i \omega_i$  как затравочная.

В работе /3/ было показано, что в диэлектрическом кристалле при  $T = 0^\circ K$  взаимодействие заполненной электронной зоны с ближайшей пустой обуславливает неустойчивость симметричной конфигурации решетки по отношению к смещениям ионов, приводящим к ее электрической поляризации. Критерий возникновения эффекта был сформулирован в виде требования, чтобы отношение квадрата матричного элемента взаимодействия заполненной и пустой зон на соответствующих "критических" смещениях ионов,  $|V|^2$ , к силовой константе этого смещения,  $M \omega_0^2$ , было величиной того же порядка

(или больше), что и эффективное расстояние между этими зонами,  $\Delta$ , т.е.  $2|V|^2/M\omega_0^2 \geq \Delta$ . При выполнении этого условия симметричная конфигурация решетки неустойчива, а устойчивые конфигурации соответствуют спонтанно-поляризованному состоянию кристалла.

Вопрос самого фазового перехода был рассмотрен в работах /4,6/ на примере узкощельных сегнетоэлектриков-полупроводников и в работах /5,6/ для широкощельных сегнетоэлектриков-диэлектриков. Расчеты были проведены в приближении молекулярного поля (MFA).

Целью настоящей работы является более последовательное исследование предложенной в работе /4/ модели фазового перехода в узкощельных сегнетоэлектриках-полупроводниках с помощью самосогласованного метода вычисления функций Грина, предложенного в работе /7/. Этот метод позволяет относительно просто рассмотреть поправки к приближению молекулярного поля и провести оценки точности последнего.

### 1. Гамильтониан и параметр порядка

Следуя работам /4/, предположим, что фазовый переход в сегнетоэлектриках-полупроводниках может быть объяснен вибранным взаимодействием в системе, описываемой следующим гамильтонианом ( $\hbar = 1$ ):

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\sigma k} \epsilon_{\sigma k} a_{\sigma k}^+ a_{\sigma k} + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}j} (P_{\vec{q}j}^+ P_{\vec{q}j} + \omega_{\vec{q}j}^2 Q_{\vec{q}j}^+ Q_{\vec{q}j}) + \\
 & + \sum_{\sigma\sigma'} \sum_k \sum_{\vec{q}j} C_{\sigma\sigma'}^j (\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}) a_{\sigma k}^+ a_{\sigma' \vec{k}-\vec{q}} Q_{\vec{q}j},
 \end{aligned} \quad (1.1)$$

где  $Q_{\vec{q}j}$ ,  $P_{\vec{q}j}$  - нормальные координата и импульс фонона с частотой  $\omega_{\vec{q}j}$ ;  $a_{\sigma k}^+$  и  $a_{\sigma k}$  - операторы рождения и уничтожения электрона в зоне  $\sigma$  с импульсом  $k$  и энергией  $\epsilon_{\sigma k}$ .

Будем считать, что  $a_{\sigma k}$  только одна "критическая" мода (низкочастотная поперечная оптическая мода) ответственна за смешивание зон: валентной ( $\sigma=1$ ) и зоны проводимости ( $\sigma=2$ ), что и приводит к фазовому переходу в низкосимметричную фазу. Для этого необходимо, чтобы в особой точке зоны Бриллюэна (в нашем случае в точке  $\vec{q}=0$ ) матричный элемент межзонного электрон-фононного взаимодействия был отличен от нуля. Если предположить /8/, что межзонное взаимодействие имеет максимум при  $q=0$ , то внутризонным взаимодействием,  $C_{\sigma\sigma}(\vec{q}) \sim q$ , дающим перенормировку химического потенциала и не связанным прямо с фазовым переходом, можно пренебречь.

Так как сегнетоэлектрический фазовый переход связан с конденсацией критических фононов в центре зоны Бриллюэна, то удобно с самого начала выделить фононный параметр порядка,  $\bar{Q}$ ,

$$Q_{\vec{q}} = \langle Q_{\vec{q}} \rangle + Q'_{\vec{q}} = \delta_{\vec{q},0} \bar{Q} + Q'_{\vec{q}}, \quad (1.2)$$

где  $\langle \dots \rangle$  означает статистическое усреднение с гамильтонианом (1.1). Введенный параметр порядка  $\bar{Q}(T)$  непосредственно связан с "критическим" смещением ионов, приводящим к возникновению спонтанной поляризации ниже критической точки  $T_c$ . В парафазе,  $T > T_c$ ,  $\bar{Q} \equiv 0$ .

Получим уравнение для параметра порядка  $\bar{Q}(T)$ . Легче всего его вывести, исходя из уравнения движения для оператора импульса /7/. Учитывая условие равновесия,  $\partial_t \langle P_{\vec{q}}(t) \rangle = 0$ , получаем

$$\bar{Q} \omega_0^2 = - \sum_{\sigma k} C_{\sigma\bar{\sigma}}(\vec{0}, \vec{k}, \vec{k}) \langle a_{\sigma k}^+ a_{\bar{\sigma} \vec{k}} \rangle, \quad (1.3)$$

где  $\bar{\sigma} = 2$  (или 1) при  $\sigma = 1$  (или 2).

Уравнение (1.3) является точным. Однако действительная точность вычисления  $\bar{Q}(T)$  зависит от приближения, в котором вычисляется корреляционная функция (или функция Грина).

## 2. Функции Грина

Введем двухвременные функции Грина (ФГ) <sup>/9/</sup> для электронных и фоновых операторов

$$G_{\sigma\vec{k},\sigma'\vec{k}'}(t-t') \equiv \langle\langle a_{\sigma\vec{k}}(t) | a_{\sigma'\vec{k}'}^+(t') \rangle\rangle = \quad (2.1)$$

$$= -i\theta(t-t') \langle [a_{\sigma\vec{k}}(t), a_{\sigma'\vec{k}'}^+(t')]_+ \rangle,$$

$$D_{\vec{q},\vec{q}'}(t-t') \equiv \langle\langle Q_{\vec{q}}'(t) | Q_{\vec{q}'}'(t') \rangle\rangle = \quad (2.2)$$

$$= -i\theta(t-t') \langle [Q_{\vec{q}}'(t), Q_{\vec{q}'}'(t')]_- \rangle.$$

Используя уравнения движения для электронных операторов, получаем следующее выражение для фурье-образа электронной ФГ:

$$(\omega - \epsilon_{\sigma\vec{k}}) G_{\sigma\vec{k},\sigma'\vec{k}'}(\omega) = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} +$$

$$+ \bar{Q} C_{\sigma\bar{\sigma}}^0(\vec{k}, \vec{k}') G_{\sigma\vec{k},\sigma'\vec{k}'}(\omega) + \sum_{\vec{q}} C_{\sigma\bar{\sigma}}^{\vec{q}}(\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}) \langle\langle a_{\sigma\vec{k}-\vec{q}} Q_{\vec{q}}' | a_{\sigma'\vec{k}'}^+ \rangle\rangle_{\omega}. \quad (2.3)$$

Для вычисления двухчастичной ФГ, стоящей в правой части (2.3), воспользуемся методом дифференцирования двухвременных ФГ по второму времени <sup>/10,7/</sup>:

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_{\sigma'\vec{k}'} - \epsilon_{\sigma\vec{k}-\vec{q}}) \langle\langle a_{\sigma\vec{k}-\vec{q}} Q_{\vec{q}}' | a_{\sigma'\vec{k}'}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \\ = \bar{Q} C_{\sigma'\bar{\sigma}'}^0(\vec{k}', \vec{k}') \langle\langle a_{\sigma\vec{k}-\vec{q}} Q_{\vec{q}}' | a_{\sigma'\vec{k}'}^+ \rangle\rangle_{\omega} + \\ + \sum_{\vec{q}'} C_{\sigma'\bar{\sigma}'}^{\vec{q}'}(\vec{k}', \vec{k}'-\vec{q}') \langle\langle a_{\sigma\vec{k}-\vec{q}} Q_{\vec{q}}' | Q_{\vec{q}'}' a_{\sigma'\vec{k}'-\vec{q}'}^+ \rangle\rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Систему уравнений (2.3), (2.4) удобно записать в матричном виде:

$$\hat{G}(\vec{k}, \omega) = \hat{G}^{\circ}(\vec{k}, \omega) + \hat{G}^{\circ}(\vec{k}, \omega) \hat{R}(\vec{k}, \omega) \hat{G}^{\circ}(\vec{k}, \omega), \quad (2.5)$$

где  $\hat{G}^{\circ} \equiv \{G_{\sigma\sigma}^{\circ}\}$ . Нулевая ФГ,  $\hat{G}^{\circ}$ , и матрица  $\hat{R}$  имеют вид:

$$\hat{G}^{\circ}_{\vec{k}\vec{k}'}(\omega) = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}, \quad \hat{G}^{\circ}(\vec{k}, \omega) =$$

$$= \frac{\delta_{\vec{k}\vec{k}'}}{(\omega - \bar{\epsilon}_{1\vec{k}})(\omega - \bar{\epsilon}_{2\vec{k}'})} \begin{pmatrix} \omega - \epsilon_{2\vec{k}}, \bar{Q}C_{12}(\vec{k}\vec{k}') \\ \bar{Q}C_{21}(\vec{k}\vec{k}'), \omega - \epsilon_{1\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

$$R_{\sigma\sigma'}(\vec{k}\omega) = \quad (2.7)$$

$$\equiv \sum_{\vec{q}} C_{\sigma\bar{\sigma}}(\vec{k}\vec{k}-\vec{q}) \ll a_{\vec{\sigma}\vec{k}-\vec{q}} | Q_{\vec{q}} | Q_{-\vec{q}}^+ | a_{\vec{\sigma}'\vec{k}-\vec{q}} \gg C_{\sigma'\bar{\sigma}'}^+(\vec{k}\vec{k}-\vec{q})$$

Полюса нулевой ФГ (2.6) дают перенормированный за счёт смешивания зон электронный спектр

$$\bar{\epsilon}_{1,2}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \{ \epsilon_{1\vec{k}} + \epsilon_{2\vec{k}} + \sqrt{[(\epsilon_{2\vec{k}} - \epsilon_{1\vec{k}})^2 + 4Q^2 |C_{12}(\vec{k}\vec{k}')|^2]}^{1/2} \}. \quad (2.8)$$

Спектр (2.8) был найден в работе<sup>/4/</sup>.  $G^{\vec{q}}(\vec{k}\omega)$  представляет собой решение уравнения (2.3) в MFA, т.е. в пренебрежении в (2.3) двухчастичной ФГ.

Сравнивая теперь уравнение (2.5) с уравнением Дайсона для одноэлектронной ФГ, видим, что массовый оператор  $\hat{\Sigma}(\vec{k}\omega)$  определяется собственной частью оператора  $\hat{R}(\vec{k}\omega)$  (не содержащей частей, соединенных одной линией  $\hat{G}^{\circ}$ ; см./7/), т.е.  $\hat{\Sigma}(\vec{k}\omega) = \hat{R}^P(\vec{k}\omega)$ .

Формальное решение уравнения Дайсона имеет вид

$$\hat{G}(\vec{k}\omega) = \frac{1}{\det[\hat{G}^{\circ -1} - \hat{\Sigma}]} \begin{pmatrix} \omega - \epsilon_{2\vec{k}} - \Sigma_{22}(\vec{k}\omega), Q C_{12}(0) + \Sigma_{12}(\vec{k}\omega) \\ Q C_{21}(0) + \Sigma_{21}(\vec{k}\omega), \omega - \epsilon_{1\vec{k}} - \Sigma_{11}(\vec{k}\omega) \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Аналогичным образом получаем уравнение для фононной ФГ

$$D(\vec{q}\omega) = D^{\circ}(\vec{q}\omega) + D^{\circ}(\vec{q}\omega) P(\vec{q}\omega) D^{\circ}(\vec{q}\omega), \quad (2.10)$$

где  $D^{\circ}(\vec{q}\omega)$  описывает свободное распространение "голых" фононов, а

$$P(\vec{q}\omega) = \quad (2.11)$$

$$= \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} C_{\sigma\bar{\sigma}}(\vec{k}\vec{k}+\vec{q}) \ll a_{\vec{\sigma}\vec{k}}^+ | a_{\vec{\sigma}\vec{k}+\vec{q}} | a_{\vec{\sigma}'\vec{k}'}^+ | a_{\vec{\sigma}'\vec{k}'-\vec{q}} \gg C_{\sigma'\bar{\sigma}'}^+(\vec{k}'\vec{k}-\vec{q})$$

Массовый оператор фононной ФГ,  $\Pi(\vec{q}\omega)$ , определяется собственной частью оператора  $P(\vec{q}\omega)$ ,  $\Pi(\vec{q}\omega) = P^P(\vec{q}\omega)$ . Окончательно,

$$D(\vec{q}\omega) = [\omega^2 - \omega_{\vec{q}}^2 - \Pi(\vec{q}\omega)]^{-1} \quad (2.12)$$

### 3. Нулевое приближение (MFA) для параметра порядка

Исходя из формулы (2.6) и пользуясь спектральным представлением <sup>/9/</sup>, найдем электронную корреляционную функцию, фигурирующую в уравнении (1.3). Подставляя ее в (1.3), получаем уравнение для параметра порядка

$$\bar{Q} \left\{ \omega_0^2 - 2 \sum_{\vec{k}} |C_{12}(\vec{k}, \vec{k})|^2 \frac{f_F(\epsilon_{1\vec{k}}) - f_F(\epsilon_{2\vec{k}})}{\epsilon_{2\vec{k}} - \epsilon_{1\vec{k}}} \right\} = 0, \quad (3.1)$$

где введена функция распределения  $f_{F,B} = [\exp(\omega/kT) \pm 1]^{-1}$ .

Решение  $\bar{Q} \equiv 0$  соответствует парафразе. Как и в <sup>/4/</sup>, решение для сегнетофазы легко получается в приближении равных электронных и дырочных масс, если ввести среднюю по невозмущенному спектру щель,  $\Delta = \epsilon_{2\vec{k}} - \epsilon_{1\vec{k}}$ . При этом для существования решения в сегнетофазе ( $\bar{Q} \neq 0$ ) необходимо выполнение условия

$$r \equiv \frac{2 |V(0)|^2}{M \omega_0^2 \Delta} > 1, \quad (3.2)$$

где предположено <sup>/4,8/</sup>, что

$$C_{12}(\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}) \approx C(\vec{q}) \equiv \frac{1}{\sqrt{MN}} V(\vec{q}).$$

Решение уравнения (3.1) имеет вид

$$kT = \frac{\bar{\Delta}}{2} \left[ \ln \frac{r + \bar{\Delta}/\Delta}{r - \bar{\Delta}/\Delta} \right]^{-1}, \quad Q \neq 0, \quad (3.3)$$

где, согласно (2.8), введена перенормированная средняя щель

$$\bar{\Delta}^2 = \Delta^2 + 4\bar{Q}^2 |C(0)|^2. \quad (3.4)$$

Определяемая формулой (3.3) температурная зависимость параметра порядка  $\bar{Q}(T)$  характерна для фазового перехода второго рода.

Следует отметить, что, в отличие от использованного нами условия равновесия,  $\partial_t \langle P_{\vec{q}}(t) \rangle = 0$ , в работе <sup>/4/</sup> уравнение для параметра порядка было найдено из условия минимума свободной энергии, вычисленной в MFA.

Согласно (3.2), межзонное взаимодействие должно быть достаточно сильным. Однако величина  $r$  не должна быть много больше единицы, т.к. в противном случае получатся аномально большие значения смещений ионов,  $\bar{Q}$ , и температуры фазового перехода,  $T_c$ . Кроме того, большие значения  $r$  приводят к значительному заполнению зоны проводимости:  $f_F(\epsilon_2; T=T_c) = (r-1)/(2r)$ . При этом необходимо было бы добавить в гамильтониан (1.1) член, учитывающий прямое электрон-электронное взаимодействие.

### 4. Самосогласованная система уравнения для ФГ

Рассмотрим теперь следующий порядок самосогласованной теории возмущений. В этом случае двухчастичные ФГ в массовых операторах  $\Sigma$  и  $\Pi$  (см. (2.7), (2.11)) можно приближенно вычислить, учитывая только первый член в уравнениях для этих функций, который описывает некоррелированное распространение двух перенормированных квазичастиц (см. <sup>/7/</sup>). Пользуясь спектральным представлением для ФГ, фигурирующей в формуле (2.7), и расцепляя временную корреляционную функцию

$$\langle Q'_{-\vec{q}}(t) a_{\vec{\sigma}, \vec{k}-\vec{q}}^+(t) a_{\vec{\sigma}, \vec{k}-\vec{q}}(t) \rangle \approx Q'_{\vec{q}}$$

$$\approx \Delta(\vec{q}-\vec{q}') \langle Q'_{-\vec{q}}(t) Q_{\vec{q}} \rangle \langle a_{\vec{\sigma}, \vec{k}-\vec{q}}^+(t) a_{\vec{\sigma}, \vec{k}-\vec{q}} \rangle, \quad (4.1)$$

получаем

$$\Sigma_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{q}} C_{\sigma\sigma'}(\vec{q}) C_{\sigma'\sigma}^+(\vec{q}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\pi^2} \times$$

$$\times \frac{1 + f_B(\omega_2) - f_F(\omega_1)}{\omega - \omega_2 - \omega_1} \times \quad (4.2)$$

$$\times \text{Im} D(\vec{q}, \omega_2 + i\epsilon) \text{Im} G_{\sigma\sigma'}(\vec{k}-\vec{q}, \omega_1 + i\epsilon).$$

Аналогично, исходя из (2.11), получаем для фононного массового оператора следующее выражение:

$$\Pi(\vec{q}, \omega) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma\sigma'} C_{\sigma\sigma'}(-\vec{q}) C_{\sigma'\sigma}^+(\vec{q}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\pi^2} \times$$

$$\times \frac{f_F(\omega_1) - f_F(\omega_2)}{\omega - \omega_2 + \omega_1} \times \quad (4.3)$$

$$\times \text{Im} G_{\sigma'\sigma}(\vec{k}, \omega_1 + i\epsilon) \text{Im} G_{\sigma\sigma'}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_2 + i\epsilon).$$

Уравнения (2.9), (2.12), (4.2) и (4.3) для электронной и фононной ФГ, вместе с уравнением для параметра порядка (1.3), представляют собой замкнутую самосогласованную систему уравнений. При конкретных значениях физических параметров задачи  $\epsilon_{\sigma\vec{k}}, \omega_{\vec{q}}, C(\vec{q})$ , эта система уравнений допускает точное численное решение.

Однако определенные приближенные результаты можно получить и в аналитическом виде, исходя из общих представлений о поведении параметров  $\epsilon_{\sigma\vec{k}}, \omega_{\vec{q}}, C(\vec{q})$ .

## 5. Мягкая мода

Вычислим спектр "критических" фононов, определяемый полюсами ФГ (2.12). Массовый оператор в интересующем нас длинноволновом пределе приближенно вычислим, подставляя в формулу (4.3) электронные "нулевые" ФГ (2.6), учитывающие перенормировку в MFA. Получим

$$\Pi(\vec{q}=0, \omega) = 2 \sum_{\vec{k}} |C(0)|^2 \frac{(\epsilon_{2\vec{k}} - \epsilon_{1\vec{k}})^2 f_F(\bar{\epsilon}_{1\vec{k}}) - f_F(\bar{\epsilon}_{2\vec{k}})}{\bar{\epsilon}_{2\vec{k}} - \bar{\epsilon}_{1\vec{k}} \omega^2 - (\bar{\epsilon}_{2\vec{k}} - \bar{\epsilon}_{1\vec{k}})^2} \quad (5.1)$$

Вводя, как и в разделе 3, среднюю по спектру шель  $\Delta$ , находим следующее выражение для частоты "одетых" фононов:

$$\Omega_{\mp}^2(\vec{q}=0) = \frac{1}{2} \{ \bar{\Delta}^2 + \omega_0^2 \mp [(\bar{\Delta}^2 + \omega_0^2)^2 -$$

$$- 16 \omega_0^2 |C(0)|^2 \bar{Q}^2 - \quad (5.2)$$

$$- 4 \bar{\Delta}^2 (\omega_0^2 - 2 \sum_{\vec{k}} |C(0)|^2 \frac{f_F(\bar{\epsilon}_{1\vec{k}}) - f_F(\bar{\epsilon}_{2\vec{k}})}{\bar{\Delta}})]^{1/2} \}.$$

Видно, что  $\Omega_{-}$  представляет собой мягкую фононную моду. В сегнетофазе, согласно (3.1), последний член под корнем в (5.2) тождественно равен нулю. Поведение мягкой моды при  $T \rightarrow T_c - 0$  определяется температурной зависимостью параметра порядка  $\bar{Q}(T)$ . Разлагая (5.2) при малых  $\bar{Q}$ , имеем:



$$\Omega_{-}^2(0) \approx \frac{4|C(0)|^2 \omega_0^2}{\Delta^2 + \omega_0^2} \bar{Q}^2 =$$

$$= \frac{T_c - T}{T_c} \frac{2\Delta^2 \omega_0^2}{\Delta^2 + \omega_0^2} \left[ \frac{2}{r(r^2-1)} \ln \frac{r+1}{r-1} - 1 \right]^{-1}. \quad (5.3)$$

При получении последнего равенства мы пользовались разложением формулы (3.3) при малых значениях  $\bar{Q}$ .

В случае парафразы член с  $\bar{Q}$  в (5.2) исчезает. При  $T \rightarrow T_c + 0$  малой величиной является последний член под корнем, который и определяет температурное поведение  $\Omega_{-}(0)$ . Получаемое при этом выражение совпадает с полученным в работе /4/. Там же из разложения свободной энергии было получено и выражение для мягкой моды в сегнетофазе, отличающееся от формулы (5.2), полученной методом ФГ, хотя их асимптотики при  $\bar{Q} \rightarrow 0$  приближенно одинаковы.

## 6. Перенормировка электронного спектра

Массовый оператор электронной ФГ,  $\hat{\Sigma}(\vec{k}, \omega)$ , в первом приближении найдем, подставляя в (4.2) нулевую электронную ФГ (2.6) и фоновую ФГ, описывающую распространение "одетых" фононов (спектр которых при  $\vec{q} = 0$  приведен в (5.2)):

$$\Sigma_{\sigma\sigma}(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{q}} \frac{|C_{12}(\vec{q})|^2}{\epsilon_{\vec{q}} \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}}} \times \quad (6.1)$$

$$\times [(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}}) L_1(\omega, \vec{q}, \vec{k}-\vec{q}) - (\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}}) L_2(\omega, \vec{q}, \vec{k}-\vec{q})],$$

$$\Sigma_{\sigma\sigma}(\vec{k}, \omega) = -\bar{Q} C_{\sigma\sigma}(0) \sum_{\vec{q}} \frac{C_{\sigma\sigma}(\vec{q}) C_{\sigma\sigma}(-\vec{q})}{\epsilon_{\vec{q}} \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}}} \times$$

$$\times [L_1(\omega, \vec{q}, \vec{k}-\vec{q}) - L_2(\omega, \vec{q}, \vec{k}-\vec{q})] \equiv \quad (6.2)$$

$$\equiv -\bar{Q} C(0) \Sigma'_{\sigma\sigma}(\vec{k}, \omega),$$

где

$$L_{\sigma} \equiv L_{\sigma}^{-} - L_{\sigma}^{+},$$

$$L_{\sigma}^{\mp} \equiv \frac{\Omega_{\mp}^2(\vec{q}) - \Delta^2}{2\Omega_{\mp}(\vec{q})(\Omega_{-}^2(\vec{q}) - \Omega_{+}^2(\vec{q}))} \times$$

$$\times \left[ \frac{1 + f_B(\Omega_{\mp}(\vec{q})) - f_F(\epsilon_{\sigma} \vec{k} - \vec{q})}{\omega - \Omega_{\mp}(\vec{q}) - \epsilon_{\sigma} \vec{k} - \vec{q}} + \right. \quad (6.3)$$

$$\left. + \frac{f_B(\Omega_{\mp}(\vec{q})) + f_F(\epsilon_{\sigma} \vec{k} - \vec{q})}{\omega + \Omega_{\mp}(\vec{q}) - \epsilon_{\sigma} \vec{k} - \vec{q}} \right].$$

Оценим поправки к электронному спектру, найденному в MFA, за счёт массового оператора (6.1) - (6.3). Полюса электронной ФГ (2.9) определяются из уравнения

$$(\omega - \epsilon_{1\vec{k}} - \Sigma_{11}(\vec{k}, \omega))(\omega - \epsilon_{2\vec{k}} - \Sigma_{22}(\vec{k}, \omega)) -$$

$$-\bar{Q}^2 |C(0)|^2 (1 - \Sigma'_{12}(\vec{k}, \omega))(1 - \Sigma'_{21}(\vec{k}, \omega)) = 0. \quad (6.4)$$

$$-\bar{Q}^2 |C(0)|^2 (1 - \Sigma'_{12}(\vec{k}, \omega))(1 - \Sigma'_{21}(\vec{k}, \omega)) = 0.$$

Предполагая, как обычно, массовый оператор медленно меняющейся функцией от  $\omega^{1/9}$ , разложим его по малой (относительно  $\Delta^2$ ) величине  $\bar{Q}^2 |C(\vec{q})|^2$ :

$$\Sigma_{\sigma\sigma}(\bar{Q}) \approx \Sigma_{\sigma\sigma}^{(0)} + \bar{Q}^2 |C(\vec{q})|^2 \Sigma_{\sigma\sigma}^{(1)}, \quad (6.5)$$

Где

$$\Sigma_{\sigma\sigma}^{(1)} \equiv \partial \Sigma_{\sigma\sigma} / \partial (\bar{Q}^2 |C(\vec{q})|^2) \Big|_{\bar{Q}=0}.$$

Тогда решение уравнения (6.4) запишем в виде

$$E_{1,2}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \{ \tilde{\epsilon}_{1\vec{k}} + \tilde{\epsilon}_{2\vec{k}} \mp [(\tilde{\epsilon}_{2\vec{k}} - \tilde{\epsilon}_{1\vec{k}})^2 + 4\bar{Q}^2 |\tilde{C}|^2]^{1/2} \}, \quad (6.6)$$

где

$$\tilde{\epsilon}_{\sigma\vec{k}} \equiv \epsilon_{\sigma\vec{k}} + \Sigma_{\sigma\sigma}^{(0)} \quad (6.7)$$

$$|\tilde{C}|^2 \equiv |C|^2 [(1 - \Sigma'_{12})(1 - \Sigma'_{21}) - \tilde{\epsilon}_1 \Sigma_{22}^{(1)} - \tilde{\epsilon}_2 \Sigma_{11}^{(1)}]. \quad (6.8)$$

Сравнение формул (6.6) и (2.8) показывает, что поправки, вносимые приближением первого порядка самосогласованной теории возмущений, сводятся к перенормировке исходного электронного спектра, (6.7), и межзонного электрон-фононного взаимодействия, (6.8). Для количественных оценок перенормировок необходимо иметь явный вид функции  $C(\vec{q})$ , однако из-за отсутствия данных относительно него мы можем здесь провести только качественные оценки. Последние показывают, что упомянутые перенормировки значительны. Вычисление зависимости  $C(\vec{q})$  для конкретных веществ является самостоятельной проблемой, которой мы здесь заниматься не будем.

В качестве примера приведем оценку перенормировки электронной щели в парафразе ( $\bar{Q} \equiv 0$ ). Основной вклад в интеграл в (6.1) вносит "флуктуационный" член от мягких фононов с частотой  $\Omega_-$ . Положив в  $\Sigma_{\sigma\sigma}(\omega)$   $\omega = \epsilon_{\sigma}$ , получим

$$\tilde{\Delta} \sim \Delta \left( 1 + \sum_{\vec{q}} \frac{|C(\vec{q})|^2}{\Omega_+^2(\vec{q}) - \Omega_-^2(\vec{q})} \cdot \frac{1 + 2f_B(\Omega_-(\vec{q}))}{2\Omega_-(\vec{q})} \right).$$

Поскольку  $\Omega_+^2(0) - \Omega_-^2(0) \sim \Delta^2$ , а среднее по  $\vec{q}$  значение "флуктуационного" члена  $kT / \langle \Omega_-^2(\vec{q}) \rangle \sim kT / \omega_0^2$ , видим, что поправка к щели порядка  $\tau \cdot \Delta$ .

Анализ условия возникновения сегнетофазы с учётом полученной в этом разделе перенормировки взаимодействия и электронного спектра показывает, что решение уравнения (1.3) с  $\bar{Q} \neq 0$  возможно при

$$\tilde{\tau} \equiv \frac{2N |\tilde{C}|^2}{\omega_0^2 \tilde{\Delta}} > 1, \quad (6.9)$$

где  $\tilde{\Delta}$  и  $|\tilde{C}|^2$  определены в (6.7), (6.8).

### Заключение

Таким образом, проведенный выше анализ фазового перехода в сегнетоэлектриках-полупроводниках с помощью метода самосогласованной теории возмущений для ФГ, показывает, что характер фазового перехода, полученный в нулевом приближении (МФА), сохраняется и при учёте членов следующего порядка. Однако для количественного описания и сравнения результатов теории с экспериментом, ввиду сильного электрон-фононного взаимодействия, необходимо учитывать и вклады первого порядка. Оценка их может быть проведена для конкретной модели полупроводника-сегнетоэлектрика на основе полученных нами общих выражений (6.1)-(6.9).

Следует отметить, что рассмотренная в этой работе модель с гамильтонианом (1.1) без учета собственного фононного ангармонизма недостаточна для исследования корреляционных эффектов в окрестности фазового перехода (см., напр., [11]). Анализу влияния ангармонизма будет посвящена следующая работа.

Мы глубоко благодарны Н.М.Плакиде, многочисленные и плодотворные дискуссии с которым оказали нам большую помощь при выполнении работы. Мы также признательны Н.Н.Кристофелю за интерес к работе и ценные замечания.

### Литература

1. L.P. Sinha, A.P. Sinha. Indian J. Pure Appl. Phys., 2, 91, 1964.  
G.C. Shukla, K.P. Sinha. Indian J. Pure Appl. Phys., 3, 430, 1965. J. Phys. Chem. Solids 27, 1837, 1966.
2. П.В.Андерсон. Физика диэлектриков. Изд. АН СССР, 1960, стр. 290.  
W. Cochran. Phys. Rev. Lett., 3, 412, 1959; Adv. Phys., 9, 387, 1960; 10, 401, 1961.  
R.A. Cowley. Phys. Rev., 134, A981 (1964).

3. I.V. Bersuker. Phys. Letters, 20, 589, 1966.  
И.В.Берсукер, Б.Г.Вехтер. ФТТ, 9, 2652 (1967).
4. N. Kristoffel, P. Kinsin. Phys. Stat. Sol., 21, K39, 1967; 28, 731, 1968.
5. Н.Н.Кристофель, П.И.Консин. ФТТ, 13, 2513 (1971); Изв. АН СССР, сер. физ., 35, 1770 (1971).
6. N. Kristoffel, P. Kinsin. Ferroelectrics 6, 3, 1973.
7. Н.М.Плакида. в сб. Статистическая физики и квантовая теория поля. М., Наука, 1973.  
N.M. Plakida, J. Phys. C.: Solid State Phys., 4, 1680, 1971.
8. Р.Нокс. Теория экситонов, М., Мир, 1966.
9. Н.Н.Боголюбов, С.В.Тябликов. ДАН СССР, 126, 53 (1959);  
Д.Н.Зубарев. УФН, 71, 71 (1960).
10. Ю.А.Щерковников. ДАН СССР, 143, 832 (1962); ТМФ, 7, 250 (1971).
11. В.Г.Вакс. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М., Наука, 1973.

Рукопись поступила в издательский отдел  
19 мая 1975 года.