ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17 - 11763

МАИЛЯН
Гурген Левонович

ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Специальность 01.04.02 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1978

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель -
доктор физико-математических наук
старший научный сотрудник Н.М.ПЛАКИДА

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук
профессор Н.Н.КРИСТОФЕЛЬ

кандидат физико-математических наук
старший научный сотрудник Д.И.ХОМСКИЙ

Ведущее научно-исследовательское учреждение:
Математический институт им. В.А.Стеклова АН СССР.

Автореферат разослан "   " ______________ 1978 года.
Защита диссертации состоится "   " ______________ 1978 года
на заседании Специализированного ученого совета К047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук
В.И.ЖУРАВЛЕВ

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы. Исследование веществ, обладающих сегнетоэлектрическими свойствами, занимает одно из центральных мест в физике конденсированного состояния. За последнее десятилетие в понимании микроскопического механизма сегнетоэлектричества был достигнут определенный прогресс. К настоящему времени установлена существенная роль электрон-фононного (вибронного) взаимодействия как микроскопической причины возникновения сегнетоэлектрического упорядочения в ряде полупроводниковых и диэлектрических соединений с фазовым переходом (ФП) типа смещения. Для описания сегнетоэлектрического ФП в вибронной теории, предложенной Н.Н.Кристофелем и П.И.Консиным[1], а также И.Б.Берсукером с сотрудниками[2], рассматриваются две близкие электронные зоны противоположной четности (полупроводник или диэлектрик), которые взаимодействуют с подсистемой активных нечетных оптических колебаний решетки (в случае диэлектриков возникает необходимость включить в гамильтониан ангармоническое взаимодействие). Если энергия электрон-фононного взаимодействия меньше полуширины зоны, но больше некоторого критического значения, то в результате зонного аналога известного эффекта (псевдоэффекта) Яна - Теллера возможно низкосимметричное искажение решетки по предельным оптическим колебаниям ($\vec{q}=0$) с соответствующим ФП. В рамках такой модели могут быть описаны и другие типы ФП, например, антисегнетоэлектрический и структурный ФП без возникновения дипольных моментов.

В большинстве работ, посвященных вибронной теории ФП в сегнетоэлектриках-полупроводниках, расчеты соответствуют приближению среднего поля (ПСП), т.е. при вычислении свободной энергии в гамильтониане системы фононные нормальные координаты заменялись на их средние значения. Фактически в таком подходе учитывается взаимодействие электронов лишь со статическим смещением подрешеток, взаимодействие же с флуктуациями этого смещения - фононами не учитывается. Однако известно, что флуктуации параметра порядка, в данном случае коллективные возбуждения - мягкие фононы, играют важную роль в ФП, и их учет необходим при описании сегнетоэлектрических ФП[3]. Поскольку ПСП справедливо только вдали от точки ФП, то вибронная теория, использующая ПСП, может оказаться неприменимой для описания ФП и свойств системы в окрестности ФП. Отметим в связи с этим, что вычисленная в ПСП температура ФП более чем на порядок превышает экспериментально наблюдаемые значения для сегнетоэлектрика-полупроводника $SnTe$ [4]. Кроме того, высказывалось предположение [5], что учет коллективных возбуждений при структурных ФП должен приводить к ФП первого рода.

Таким образом, вибронная модель сегнетоэлектрика требовала дальнейшего изучения с целью выяснения в ней роли флуктуаций параметра порядка - мягких фононов. В этой связи представлялось перспективным исследование вибронной модели ФП с помощью самосогласованного метода вычисления двухвременных функций Грина (ФГ) [6], предложенного в работах [7,8] и примененного, в частности, в теории ангармонических кристаллов [8]. Применение этого метода к структурным ФП позволило найти в данной диссертации поправки к ПСП (флуктуационные поправки) и провести оценки точности последнего. Анализ вычисленной с учетом такой поправки свободной энергии системы позволил получить новую информацию о механизме ФП в вибронной теории. Отметим, что в последнее время подобные поправки к ПСП были также рассмотрены методом температурных ФГ в работах [9,10].

<u>Цель работы</u> - изучение ФП в вибронной теории с учетом флуктуаций параметра порядка.

<u>Научная новизна и практическая ценность</u>. В диссертации впервые получена самосогласованная система уравнений для ФГ в вибронной модели структурных ФП. Проведено сравнение этих уравнений с уравнениями ПСП. Эта система уравнений может быть численно решена в применении к конкретным реальным системам.

Впервые с учетом мягких фононов вычислена свободная энергия вибронной модели; получена новая функциональная зависимость температуры ФП от параметров модели, существенно отличающаяся от ПСП; получено сильное понижение температуры ФП по сравнению с ПСП; установлена решающая роль фононной подсистемы при переходе из низкосимметричной в высокосимметричную фазу.

Впервые проведено обобщение вибронной теории, учитывающей флуктуации параметра порядка, для систем, содержащих свободные носители заряда. Развиваемая теория применима к таким реальным системам, как теллуриды олова, свинца, германия и их твердые растворы.

Используемый в работе теоретический подход может найти применение при исследовании других моделей, в которых имеется мягкая мода.

<u>Следующие результаты выдвигаются для защиты</u>:

1. Получение самосогласованной системы уравнений для ФГ и параметра порядка вибронной модели сегнетоэлектрика.

2. Вычисление и анализ свободной энергии вибронной модели с учетом мягких фононов.

3. Получение новых выражений для температуры ФП и уточнение роли фононной подсистемы при ФП.

4. Сравнение стабилизирующего действия, оказываемого на колебания решетки ангармоническим взаимодействием и взаимодействием электронов с мягкими фононами. Оценка корреляционных поправок к температуре ФП.

5. Обобщение развиваемой теории для широкозонных систем, содержащих свободные носители заряда.

<u>Апробация работы</u>. Основные результаты диссертации докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики ОИЯИ, Математического института им. В.А.Стеклова АН СССР и Школе по избранным вопросам теории твердого тела (г. Черновцы, 1977г.).

<u>Публикации</u>. По результатам диссертации опубликовано четыре статьи.

<u>Объем работы</u>. Диссертация состоит из введения и трех глав, содержит 111 страниц машинописного текста, 5 рисунков и библиографический список из 99 названий. В конце каждой главы приведены выводы.

<u>Содержание работы</u>

<u>Во введении</u> дан краткий исторический обзор развития вибронной теории сегнетоэлектричества, показана актуальность проблемы, сформулирована задача и кратко изложены содержание диссертации и полученные в ней основные результаты.

<u>В первой главе</u> диссертации на основе метода двухвременного расцепления многочастичных ФГ [7,8] рассмотрена самосогласованная электрон-фононная теория вибронной модели сегнетоэлектрика-полупроводника.

В § 1.1 приводится гамильтониан вибронной модели сегнетоэлектрика-полупроводника [1]

$$H = \sum_{\sigma \vec{k}} \varepsilon_{\sigma \vec{k}}\, a^+_{\sigma \vec{k}}\, a_{\sigma \vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} j} \left(P^+_{\vec{q} j} P_{\vec{q} j} + \omega^2_{\vec{q} j}\, Q^+_{\vec{q} j} Q_{\vec{q} j} \right) +$$

$$+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}j}\sum_{\sigma\sigma'\vec{k}} V^{j}_{\sigma\sigma'}\left(\vec{k}\,{}^{\vec{q}}_{\vec{k}-\vec{q}}\right) a^{+}_{\sigma\vec{k}}\, a_{\sigma'\vec{k}-\vec{q}}\, Q_{\vec{q}j}\,, \qquad (I)$$

где $a^{+}_{\sigma\vec{k}}$ и $a_{\sigma\vec{k}}$ – операторы рождения и уничтожения электрона с с импульсом $\vec{k}$ и энергией $\varepsilon_{\sigma\vec{k}}$ в зоне σ =I,2. $Q_{\vec{q}j}$ и $P_{\vec{q}j}$ – нормальные координата и сопряженный ей импульс фонона с частотой $\omega_{\vec{q}j}$, где $\vec{q}$ – волновой вектор, а j – номер колебательной ветви. $V^{j}_{\sigma\sigma'}\left(\vec{k}\,{}^{\vec{q}}_{\vec{k}-\vec{q}}\right)$ – матричные элементы электрон-фононного взаимодействия. В дальнейшем в гамильтониане (I) оставляется только одна "активная" мода $j=j_a$ (индекс j_a опускается) и учитывается только межзонное взаимодействие: $\sigma'=\bar{\sigma}$, где $\bar{\sigma}$ =I,2 при σ =2,I соответственно. Для сегнетоэлектриков матричные элементы $V_{\sigma\bar{\sigma}}\left(\vec{k}\,{}^{\vec{q}}_{\vec{k}-\vec{q}}\right)\approx V(\vec{q})$ максимальны при $\vec{q}=0$ /I/. Так как сегнетоэлектрический ФП связан с конденсацией активных фононов в центре зоны Бриллюэна ($\vec{q}=0$), далее в гамильтониане (I) посредством замены

$$Q_{\vec{q}} \to \sqrt{N}\, y\, \Delta(\vec{q}) + Q_{\vec{q}} \qquad (2)$$

выделяется параметр порядка – среднее смещение подрешеток ниже температуры ФП, $y=\langle Q_{\vec{q}=0}\rangle/\sqrt{N}$, где $\langle\ldots\rangle$ означает статистическое усреднение с гамильтонианом (I). Затем приводится точное уравнение для параметра порядка, найденное из условия равновесия $\partial_t\langle P_{\vec{q}}(t)\rangle = 0$ /8/, (где $P_{\vec{q}}(t)$ – оператор в представлении Гейзенберга):

$$\omega_0^2\, y + \frac{1}{N}\sum_{\sigma\vec{k}} V_{\sigma\bar{\sigma}}\left(\vec{k}\,{}^{0}_{\vec{k}}\right)\langle a^{+}_{\sigma\vec{k}}\, a_{\bar{\sigma}\vec{k}}\rangle = 0\,. \qquad (3)$$

В § I.2 вводятся двухвременные ФГ /6/ для электронных и фононных операторов

$$G_{\sigma\vec{k},\sigma'\vec{k}'}(t-t') = -i\,\theta(t-t')\langle[a_{\sigma\vec{k}}(t),\, a^{+}_{\sigma'\vec{k}'}(t')]_{+}\rangle\,, \qquad (4а)$$

$$D_{\vec{q},\vec{q}'}(t-t') = -i\,\theta(t-t')\langle[Q_{\vec{q}}(t),\, Q^{+}_{\vec{q}'}(t')]_{-}\rangle\,, \qquad (4б)$$

где $[\ldots]_{\mp}$ – коммутатор или антикоммутатор соответственно. Составляя уравнения движения по двум временам t и t' /7,8/ для электронной ФГ (4а), для ее фурье-образов получено уравнение в виде матричного уравнения Дайсона, в котором "нулевыми" являются ФГ ПСП. Электронная ФГ записана в виде матрицы

$$\hat{G}(\vec{k},\omega) = [\det(\hat{G}^{o-1} - \hat{M})]^{-1} \times \qquad (5)$$
$$\times\begin{pmatrix} \omega - \varepsilon_{2\vec{k}} - M_{22}(\vec{k},\omega) & y V_{12}\left(\vec{k}\,{}^{0}_{\vec{k}}\right) + M_{12}(\vec{k},\omega) \\ y V_{21}\left(\vec{k}\,{}^{0}_{\vec{k}}\right) + M_{21}(\vec{k},\omega) & \omega - \varepsilon_{1\vec{k}} - M_{11}(\vec{k},\omega)\end{pmatrix}.$$

ФГ G° дается формулой (5), в которой массовый оператор $M\to 0$. При этом $\det\hat{G}^{o-1} = (\omega-\bar{\varepsilon}_{1\vec{k}})(\omega-\bar{\varepsilon}_{2\vec{k}})$, где $\bar{\varepsilon}_{\sigma\vec{k}}$ – перенормированный в ПСП электронный спектр

$$\bar{\varepsilon}_{1,2\,\vec{k}} = \frac{1}{2}\left\{\varepsilon_{1\vec{k}} + \varepsilon_{2\vec{k}} \mp \sqrt{(\varepsilon_{2\vec{k}}-\varepsilon_{1\vec{k}})^2 + 4\,|V_{12}(\vec{k}\,{}^{0}_{\vec{k}})|^2 y^2}\right\}. \qquad (6)$$

Позднее подобные же результаты для температурных ФГ были получены в работе /10/.

В § I.3 рассмотрено уравнение для параметра порядка (3) в ПСП, в котором $\langle a^{+}_{\sigma\vec{k}}\, a_{\bar{\sigma}\vec{k}}\rangle$ вычисляется с помощью ФГ нулевого приближения. При этом получены известные результаты вибронной теории /I/: критерий возможности сегнетофазы, $\tau > 1$, и выражение для температуры ФП

$$T_c^{(0)} = \frac{\Delta}{2}\left[\ln\frac{\tau+1}{\tau-1}\right]^{-1}, \qquad \tau = \frac{2V^2(0)}{\omega_0^2\,\Delta}\,, \qquad \Delta \approx \varepsilon_{2\vec{k}} - \varepsilon_{1\vec{k}}\,. \qquad (7)$$

В § I.4 методом двухвременного расцепления корреляционных функций /7,8/ для $M_{\sigma\sigma'}$ и Π получены уравнения

$$M_{\sigma\sigma'}(\vec{k},\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\sigma\bar{\sigma}}(\vec{q})\, V^{+}_{\sigma'\bar{\sigma}'}(\vec{q}) \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\pi^2}\, \frac{1+f_B(\omega_1) - f_F(\omega_2)}{\omega-\omega_1-\omega_2}\, \times$$
$$\times\, \mathrm{Im}\, D(\vec{q},\omega_1+i\varepsilon)\, \mathrm{Im}\, G_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}'}(\vec{k}-\vec{q},\omega_2+i\varepsilon)\,, \qquad (8)$$

$$\Pi(\vec{q},\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\sigma\sigma'\vec{k}} V_{\sigma\bar{\sigma}}(-\vec{q})\, V^{+}_{\bar{\sigma}'\sigma'}(-\vec{q}) \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\pi^2}\, \frac{f_F(\omega_1) - f_F(\omega_2)}{\omega+\omega_1-\omega_2}\, \times$$
$$\times\, \mathrm{Im}\, G_{\bar{\sigma}'\sigma}(\vec{k},\omega_1+i\varepsilon)\, \mathrm{Im}\, G_{\bar{\sigma}\sigma'}(\vec{k}+\vec{q},\omega_2+i\varepsilon)\,, \qquad (9)$$

где $f_{F,B}(x) = (e^{x/T}\pm 1)^{-1}$. Эти уравнения вместе с уравнениями Дайсона для $\hat{M}$ и Π и уравнением для параметра порядка представляют собой замкнутую самосогласованную систему уравнений, которая может быть численно решена для конкретных значений параметров задачи.

В § I.5 вычисляется спектр мягкой фононной моды; при этом в поляризационный оператор (9) подставлялись электронные ФГ нулевого приближения. В длинноволновом пределе получены известные выражения вибронной теории /I/.

В § I.6 при помощи массового оператора (8), вычисленного с ФГ нулевого приближения, исследуется перенормировка электронного спектра и матричного элемента межзонного электрон-фононного взаимодействия. С помощью массового оператора и формулы (3) найдено уравнение для параметра порядка.

<u>Вторая глава</u> посвящена вычислению и анализу свободной энергии

вибронной модели, а также изучению влияния на ФП ангармонизма колебаний решетки.

В § 2.I для вычисления свободной энергии гамильтониан (I) представлен в виде

$$H(\lambda) = H_0 + H_1(\lambda) , \qquad (10)$$

где H_0 – гамильтониан ПСП, учитывающий взаимодействие электронов лишь со статическим смещением подрешеток y , а $H_1(\lambda)$ учитывает взаимодействие электронов с фононами – флуктуациями этих смещений. Введенная в (I0) безразмерная константа связи λ меняется от 0 до I, что соответствует переходу от H_0 к H . Диагонализация H_0 позволяет вычислить свободную энергию ПСП, F_0 /I/. Полная свободная энергия $F = F_0 + \Delta F$, где ΔF выражается через интеграл по константе связи λ /8/. С помощью поляризационного оператора $\Pi_{\vec{q}\lambda}$, вычисленного в однопетлевом приближении с помощью ФГ ПСП, в ΔF выполнено интегрирование по λ . Далее вычисление ΔF проведено по аналогии с теорией плазмы, и для свободной энергии получено выражение (ср. с /5/)

$$F = -\sum_{\sigma\vec{k}} \ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_{\sigma\vec{k}}}{T}}\right) + \frac{N}{2}\omega_0^2 y + T\sum_{\vec{q}} \ln\left(2\,\mathrm{sh}\frac{\Omega_{\vec{q}}}{2T}\right), \qquad (11)$$

где $\Omega_{\vec{q}} = (\omega_{\vec{q}}^2 + \Pi_{\vec{q}}(\Omega_{\vec{q}}))^{1/2}$ – частота мягкой моды, зависящая от y.

В § 2.2 из условия минимальности свободной энергии (II) относительно вариации y получено уравнение для равновесного значения параметра порядка. Исследование этого уравнения при $y \to 0$ (в сегнетофазе) позволило вычислить температуру ФП, T_c . Оценка ее в двух предельных случаях имеет вид

$$T_c \approx \frac{1}{9}\,\frac{\tau - 1}{\tau^2}\,\Delta , \qquad \Delta \gg T_c \gg \omega_0 , \qquad (12а)$$

$$T_c \approx \sqrt{2\,\frac{\tau - \tau_c}{3\pi^2\tau^2}\,\Delta\omega_0} , \qquad T_c \ll \omega_0 , \qquad (12б)$$

где введено минимальное значение константы связи τ_c , ниже которой ФП невозможен

$$\tau_c \approx 1 + \frac{9}{4}\tau^2\frac{\omega_0}{\Delta} . \qquad (12в)$$

Поправка к значению ПСП $\tau_c^{(0)} = 1$ обычно мала: $\omega_0 \ll \Delta$. Из (I2) следует, что температура ФП $T_c \ll \Delta$ и намного ниже вычисленной в ПСП. Такое же понижение T_c получается из условия обращения в нуль щели в фононном спектре мягкой моды, если поляризационный оператор вычислять с учетом диаграмм четвертого порядка /9,II/.

Далее исследуется разложение Ландау для свободной энергии (II)

$$f(T, x^2) \equiv \frac{1}{N}F(T, x^2) = f_0(T) + \alpha(T)x^2 + \frac{1}{2}\beta(T)x^4 + \dots , \qquad (13)$$

где $x = 2V(0)y/\Delta$. Коэффициент $\alpha = at$, где a – постоянная, $t = (T - T_c)/T_c$. Второй коэффициент представлен в виде

$$\beta(T) = \beta_0[1 - \xi(T)] , \qquad \beta_0 = \frac{\Delta}{8} , \qquad (14)$$

и проведена оценка флуктуационной поправки к ПСП в двух предельных случаях:

$$\xi(T) \approx 10\,\frac{\tau - 1}{\tau}\,\frac{T}{T_c} , \qquad \Delta \gg T_c \gg \omega_0 , \qquad (15а)$$

$$\xi(T) \approx 10\,\tau\frac{\omega_0}{\Delta} + 10\,\frac{\tau - \tau_c}{\tau}\,\frac{T^2}{T_c^2} , \qquad T_c \ll \omega_0 . \qquad (15б)$$

Из формул (I5) следует, что флуктуации малы ($\xi(T) < 1$, и ФП – второго рода) только при условии: $\omega_0 \ll \Delta$, $\tau - 1 \ll 1$.

В § 2.3 к гамильтониану системы добавлен член, учитывающий четверное ангармоническое взаимодействие,

$$H_{анг} = \sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2\vec{q}_3\vec{q}_4} B(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3, \vec{q}_4)\,\Delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4)\,Q_{\vec{q}_1}Q_{\vec{q}_2}Q_{\vec{q}_3}Q_{\vec{q}_4} , \qquad (16)$$

и найдены выражения для температуры ФП, которые можно получить из формул (I2), если в них провести замену $\tau^2 \to \tau^2 + \mu/\nu$, где $\nu = \omega_0/\Delta$, $\mu = B(0,0,0,0)/\omega_0^3$. В этом параграфе ангармоническое взаимодействие учтено в первом порядке теории возмущений ($\mu \sim B$), а электрон-фононное – в четвертом ($\tau^2\nu \sim V^4(0)$). Вклады $\sim B$ и $\sim V^4(0)$ в $\Pi(\vec{q}, \omega)$ повышают фононную частоту, т.е. оказывают на колебания решетки стабилизирующее действие. Следовательно, по величине μ и ν можно судить об относительном вкладе ангармонического и электрон-фононного взаимодействий в это стабилизирующее действие. Проведена оценка μ и ν для $BaTiO_3$.

В § 2.4 для исследования корреляционных поправок к T_c рассмотрен эффективный гамильтониан вида

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\vec{q}}\left(P_{\vec{q}}^{+}P_{\vec{q}} + \overline{\omega_{\vec{q}}^2}\,Q_{\vec{q}}^{+}Q_{\vec{q}}\right) + \frac{\overline{B}}{4N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2\vec{q}_3\vec{q}_4}\Delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4)\,Q_{\vec{q}_1}Q_{\vec{q}_2}Q_{\vec{q}_3}Q_{\vec{q}_4} , \qquad (17)$$

где $\overline{\omega_{\vec{q}}^2} = -\alpha_0^2 + c^2q^2$, т.е. введена мнимая затравочная частота /I/:

$-\alpha_0^2 = \omega_0^2 - 2V^2(0)/\bar{\Delta}$ $(\bar{\Delta} = \Delta(1+x^2)$, где $x = 2V(0)y/\Delta)$, в которой учтена поправка второго порядка по электрон-фононному взаимодействию. Стабилизирует колебания решетки эффективное ангармоническое взаимодействие $\bar{B} = B + 4V^4(0)/[\Delta^3(1+x^2)^{5/2}]$. Проведена оценка корреляционных поправок к T_c, (I2а) и (I2б), т.е. поправок, связанных с учетом в поляризационном операторе и уравнении для параметра порядка эффективного ангармонического взаимодействия (I7) во втором порядке самосогласованной теории возмущений /8/. В высокотемпературном пределе $(T_c >> \omega_0)$

$$T_c^{(2)} \approx T_c^{(1)}\left[1 + \frac{\pi^2}{12}(\tau - 1)\ln\left(1 + \frac{0{,}052\, T_c^{(1)}}{(\tau-1)(T_c^{(2)} - T_c^{(1)})}\right)\right]. \quad (I8)$$

Поправка к T_c мала при $\tau - 1 \ll 1$.

В главе 3 рассмотрена вибронная теория широкозонных сегнетоэлектриков-полупроводников, содержащих при Т=0 К свободные носители заряда.

В § 3.I введен уровень Ферми μ, от которого отсчитываются электронные энергии (при этом свободная энергия определяется формулой (II), в которой $\bar{\varepsilon}_{\sigma\vec{k}} \to \bar{\varepsilon}_{\sigma\vec{k}} - \mu$), и из условий $\partial F/\partial\mu = 0$ и $\partial F/\partial y = 0$ найдены уравнения для равновесного значения μ и y. С учетом малости параметра ν $(\nu \ll 1)$ эти уравнения представлены в виде

$$\sum_{\sigma\vec{k}} f_F(\tilde{\bar{\varepsilon}}_{\sigma\vec{k}} - \mu) = N + n, \quad (I9)$$

$$y\left[\omega_0^2 + \frac{2}{N}\sum_{\sigma\vec{k}} f_F(\tilde{\bar{\varepsilon}}_{\sigma\vec{k}} - \mu)\frac{\partial\tilde{\bar{\varepsilon}}_{\sigma\vec{k}}}{\partial y^2}\right] = 0, \quad (20)$$

где $f_F(x) = (1+e^{x/T})^{-1}$; $N+n$ – полное число электронов в единице объема (если $n<0$, то $|n|$ равно концентрации дырок в валентной зоне при Т=0, а если $n>0$, то оно при Т=0 равно концентрации электронов в зоне проводимости). $\tilde{\bar{\varepsilon}}_{\sigma\vec{k}}$ – перенормированный электронный спектр

$$\tilde{\bar{\varepsilon}}_{\sigma\vec{k}} = \bar{\varepsilon}_{\sigma\vec{k}} + \delta\varepsilon_{\sigma\vec{k}}, \quad (2I)$$

где $\bar{\varepsilon}_{\sigma\vec{k}}$ – спектр, перенормированный в ПСП, а $\delta\varepsilon_{\sigma\vec{k}}$ – поправка за счет электрон-фононного взаимодействия

$$\delta\varepsilon_{2\vec{k}} \approx -\frac{V^2(0)\Delta_{\vec{k}}^2}{\bar{\Delta}_{\vec{k}}^3}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\frac{1}{\Omega_{\vec{q}}}\,\mathrm{cth}\frac{\Omega_{\vec{q}}}{2T}, \quad (22)$$

$$\delta\varepsilon_{1\vec{k}} = -\delta\varepsilon_{2\vec{k}}, \quad \Delta_{\vec{k}} = \varepsilon_{2\vec{k}} - \varepsilon_{1\vec{k}}, \quad \bar{\Delta}_{\vec{k}} = \bar{\varepsilon}_{2\vec{k}} - \bar{\varepsilon}_{1\vec{k}}.$$

§ 3.2 посвящен численному решению уравнений (I9)-(22) для простой модели полупроводника с квадратичным законом дисперсии зон с целью исследовать зависимость T_c от n.

В § 3.3 проведено обсуждение результатов численного решения уравнений и сравнение с экспериментальными данными для сегнетоэлектрика-полупроводника $SnTe$ /4/. Результаты расчета зависимости T_c от n хорошо согласуются с данными $SnTe$.

Основные результаты, полученные в диссертации

I. Предложена последовательная схема введения двухвременных ФГ, пригодная для описания структурных ФП в модели двух электронных зон, взаимодействующих через фононную подсистему. Получены уравнения для ФГ в виде матричного уравнения Дайсона, в котором нулевыми являются ФГ ПСП. Методом "двухвременного" расцепления многочастичных ФГ /7,8/ получена самосогласованная система уравнений для ФГ и параметра порядка вибронной модели сегнетоэлектрика.

2. Вычислена свободная энергия модели, учитывающая, в отличие от ПСП, мягкие фононы.

3. Установлено, что температура ФП намного ниже, чем дает ПСП; она порядка затравочной энергии активных фононов, в то время как в ПСП – порядка средней разности энергий электронных зон. При повышении температуры (начиная с 0°К) ФП в высокосимметричную фазу обусловлен не столько повышением энергии электронной подсистемы из-за тепловых перебросов электронов в зону проводимости, сколько повышением средней колебательной энергии решетки из-за увеличения числа мягких фононов.

4. Проведено сравнение стабилизирующего действия, оказываемого на колебания решетки ангармоническим взаимодействием и взаимодействием электронов с фононами: в широкощельных системах преобладает вклад фононного ангармонизма в стабилизацию колебаний решетки; в узкощельных системах важно учесть вклад электрон-фононного взаимодействия. Найдены корреляционные поправки к температуре ФП и получены условия их малости.

5. Рассмотрена теория структурных ФП в широкозонных узкощельных системах, содержащих (при Т=0) свободные носители заряда. Результаты проведенного расчета зависимости температуры ФП от концентрации носителей хорошо согласуются с экспериментальными данными $SnTe$.

Результаты диссертации опубликованы в работах:

Г.Л.Маилян, З.К.Петру, ТМФ, 27, 233, 1976;
ОИЯИ, Р4-8893, Дубна, 1975.

Н.М.Плакида, Г.Л.Маилян, ФТТ, 19, 121, 1977;
ОИЯИ, Р17-9853, Дубна, 1976.

G.L.Mailyan, N.M.Plakida, phys. stat. sol.(b), 80, 543, 1977; ОИЯИ, Р17-9856, Дубна, 1976.

G.L.Mailyan, Solid State Commun., 24, 611, 1977.

Литература

1. N.Kristoffel, P.Konsin, phys. stat. sol., 21, K39, 1967; 28, 731, 1968; Ferroelectrics, 6, 3, 1973; ФТТ, 13, 2513, 1971; Н.Н.Кристофель, Препринт F-3, АН ЭССР, Тарту, 1977.
2. I.B.Bersuker, Phys. Lett., 20, 589, 1966; I.B.Bersuker, B.G.Vekhter, A.A.Muzalevskii, J. de Phys., C2, Suppl. 4, 33, 139, 1972.
3. В.Л.Гинзбург, ФТТ, 2, 2031, 1960; УФН, 77, 621, 1962; А.П.Леванюк, ФТТ, 5, 1776, 1963; Изв. АН СССР, сер. физ., 29, 879, 1965; W.Cochran, phys. stat. sol., 30, K157, 1968.
4. M.Iizumi et al., J. Phys. Soc. Japan, 38, 443, 1975; S.Watarai, T.Matsubara, Prog. Theor. Phys., 53, 1214, 1975.
5. Б.А.Волков, Ю.В.Копаев, Письма ЖЭТФ, 23, 244, 1976.
6. Н.Н.Боголюбов, С.В.Тябликов, ДАН СССР, 126, 53, 1959; Д.Н.Зубарев, УФН, 71, 71, 1960.
7. Ю.А.Церковников, ДАН СССР, 143, 832, 1962; ТМФ, 7, 250, 1971.
8. Н.М.Плакида, В сб. "Статистическая физика и квантовая теория поля", Под ред. Н.Н.Боголюбова, Наука, М., 1973.
9. Я.Г.Гиршберг, В.И.Тамарченко, ФТТ, 18, 1066, 1976.
10. Я.Г.Гиршберг, В.И.Тамарченко, ФТТ, 18, 3340, 1976.
11. P.Konsin, phys. stat. sol.(b), 86, 57, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 июля 1978 года.