Краткие сообщения по физике № 7 июль 1971

О ХАРАКТЕРЕ ЭЛЕКТРОННОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПРИ ЭКСИТОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

Р. Р. Гусейнов, Л. В. Келдыш

Как было показано рядом авторов /1-5/, в кристалле при определенных условиях может возникнуть неустойчивость основного состояния относительно образования связанных состояний электронов и дырок типа экситонов Мотта.

Такая неустойчивость возникает, когда энергия связи экситона становится больше ширины запрещенной зоны. При этом перестраивается спектр одночастичных возбуждений, появляется новая ветвь элементарных возбуждений - двухчастичных и, по сути дела, возникает новая фаза, получившая название "экситонного диэлектрика" /4/. Было показано /3/, что переход в состояние "экситонного диэлектрика" есть фазовый переход П рода.

Эти результаты получены с учетом только кулоновского взаимодействия электронов и дырок. На языке диаграмм кулоновское взаимодействие частиц есть просто их рассеяние друг на друге. Однако, в гамильтониане кулоновского взаимодействия электронов есть и другие матричные элементы, которым соответствуют такие диаграммы, как рассеяние частицы с образованием пары, рождение из вакуума двух электронно-дырочных пар с суммарным импульсом равным нулю и т.д.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы показать, что учет этих дополнительных членов, неизбежно присутствующих в гамильтониане взаимодействия, приводит к существенным изменениям в спектре элементарных возбуждений и меняет характер фазового перехода в состояние "экситонного диэлектрика". А именно, появляется область абсолютной термодинамической неустойчивости, и фазовый переход становится переходом 1 рода.

Для выяснения характера перехода достаточно рассмотреть простейшую модель с двумя одинаковыми параболическими зонами с экстремумами в одной точке. Кроме того, не учитываются спины частиц и все рассмотрение проводится при T = 0.

Гамильтониан системы электронов и дырок в представлении вторичного квантования имеет вид

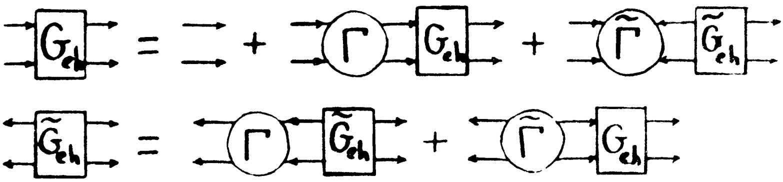
$$H = \sum_{\vec p} \varepsilon_{\vec p}(a^+_{\vec p}a_{\vec p} + b^+_{\vec p}b_{\vec p}) + \frac{1}{2V}\sum_{\vec p\vec p'\vec k}\Big[V_{\vec k}(a^+_{\vec p}a^+_{\vec p'}a_{\vec p'+\vec k}a_{\vec p-\vec k} +$$

$$+ b^+_{\vec p}b^+_{\vec p'}b_{\vec p'+\vec k}b_{\vec p-\vec k} - 2a^+_{\vec p}b^+_{\vec p'}b_{\vec p'+\vec k}a_{\vec p-\vec k}) +$$

$$+ (\tilde V_{\vec k}a_{\vec p}a_{\vec p'}b_{\vec k-\vec p'}b_{-\vec k-\vec p} + \text{э.с.})\Big], \qquad (1)$$

где $a_{\vec p}$ и $b_{\vec p}$ – фермиевские операторы уничтожения электрона и дырки, $V_{\vec k} = 4\pi e^2/\text{æ}\vec k^2$. æ – диэлектрическая постоянная, закон дисперсии электронов и дырок $\varepsilon_e(\vec p) = \varepsilon_h(\vec p) = \varepsilon(\vec p) = \frac{\Delta}{2} + \frac{\hbar^2 p^2}{2m^*}$, Δ – ширина щели в спектре одночастичных возбуждений. Вид $\tilde V_{\vec k}$ не конкретизируется. Считается только, что $\tilde V_{\vec k}$ мало и играет роль возмущения. В гамильтониане (1) оставлены не все междузонные матричные элементы, однако учет остальных не приводит к качественному изменению результатов, и поэтому они для простоты не рассматриваются.

Экситонная ветвь возбуждений определяется полюсами двухчастичной функции Грина $G_{eh}(\mathcal{P},p,p')$, где $\mathcal{P} = \{\vec{\mathcal{P}},E\}$ – суммарный импульс и энергия электронно-дырочной пары, а $p = \{\vec p,\varepsilon\}$ и $p' = \{\vec p',\varepsilon'\}$ – относительные импульсы и энергии такой пары. Наличие в гамильтониане матричных элементов, описывающих одновременное рождение из вакуума двух электронно-дырочных пар, заставляет рассматривать помимо функции $G_{eh}(\mathcal{P},p,p')$ еще функцию $\tilde{G}_{eh}(\mathcal{P},p,p')$, которая есть сумма всех связанных диаграмм, описывающих рождение из вакуума двух электронно-дырочных пар с суммарным импульсом, равным нулю. Функции $G_{eh}(\mathcal{P},p,p')$ и $\tilde{G}_{eh}(\mathcal{P},p,p')$ определяются системой уравнений /6/, подобной известной в теории Бозе-газа системе уравнений Беляева



Вершина Γ в данном случае есть просто кулоновское взаимодействие электрона с дыркой $-iV_{\vec{k}}$, а $\tilde{\Gamma}$ есть сумма всех диаграмм первого порядка по $\tilde{V}$, которые не могут быть разделены вертикальным сечением на две части, соединяющиеся одной электронной и одной дырочной линиями, идущими в одну сторону. Система решается с помощью известной процедуры /6/ с использованием функции Грина кулоновской задачи; вблизи наинизшего полюса $G_{eh}(\mathcal{P},p,p')$ по E находим для полюсной части функции Грина

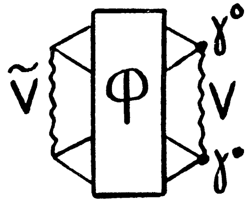
$$G_{eh}(\mathcal{P},p,p') \approx i(2\pi)^4\left(\mathcal{E}_1 - \frac{\hbar^2\vec{p}^2}{2m}\right)\left(\mathcal{E}_1 - \frac{\hbar^2\vec{p}'^2}{2m}\right)\times$$

$$\times\,\varphi_1(\vec{p})\varphi_1(\vec{p}')G_e(-p)G_h(-p)\times$$

$$\times\,G_e(p')G_h(-p')\,\frac{E+\Delta+\mathcal{E}_1+\frac{\hbar^2\vec{\mathcal{P}}^2}{2M}}{E^2-\left(\Delta+\mathcal{E}_1+\frac{\hbar^2\vec{\mathcal{P}}^2}{2M}\right)^2+|\tilde{V}|^2},$$

где $\mathcal{E}_1$ и $\varphi_1(\vec{p})$ - энергия и волновая функция основного водородоподобного состояния ($\mathcal{E}_1 < 0$), $m = m^*/2$, $M = 2m^*$;

$\tilde{v} = \frac{1}{(2\pi)^6}\int \varphi_1(\vec{p})\cdot(\tilde{V}_0 - \tilde{V}_{\vec{p}-\vec{p}'})\cdot\varphi_1(\vec{p}')d\vec{p}d\vec{p}' - \frac{1}{2}\tilde{\Lambda}$, а $\tilde{\Lambda}$ описывается графическим блоком



где $\gamma^0_{\vec{p},\vec{p}'} = \varphi_1(\vec{p}') - \varphi_1(\vec{p})$, а Φ есть четырехчастичная функция распространения, которая содержит всевозможные кулоновские взаимодействия двух электронно-дырочных пар и не содержит $\tilde{V}$.

Положительный полюс функций $G_{eh}(\mathcal{P},p,p')$ $E(\vec{\mathcal{P}}) = \sqrt{(\Delta + \mathcal{E}_1 + \hbar^2\vec{\mathcal{P}}^2/2M)^2 - |\tilde{v}|^2}$ определяет спектр экситонов при малых $|\mathcal{P}|$ и $\Delta + \mathcal{E}_1 \geqslant |\tilde{v}|$. Видно, что при $\Delta + \mathcal{E}_1 < |\tilde{v}|$ и достаточно малых импульсах подкоренное выражение становится отрицательным, и энергия возбуждений – мнимой. Это говорит о том, что основное состояние системы при $\Delta + \mathcal{E}_1 < |\tilde{v}|$ неустойчиво по отношению к образованию экситонов с нулевым импульсом.

Возникающая при этом перестройка волновых функций электронов и дырок может быть описана каноническим преобразованием Боголюбова

$$S = \exp\left\{ i \sum_{\vec{p}} \left[\varphi(\vec{p}) a^+_{\vec{p}} b^+_{-\vec{p}} - \varphi^*(\vec{p}) a_{\vec{p}} b_{-\vec{p}} \right] \right\},$$

$$S^+ a_{\vec{p}} S = u_{\vec{p}} a_{\vec{p}} + v^*_{\vec{p}} b^+_{-\vec{p}}, \tag{2}$$

$$S^+ b_{\vec{p}} S = u_{\vec{p}} b_{\vec{p}} - v^*_{\vec{p}} a^+_{-\vec{p}},$$

где

$$u_{\vec{p}} = \cos|\varphi(\vec{p})|, \quad v^*_{\vec{p}} = i\exp(i\arg\varphi)\sin|\varphi(\vec{p})|, \quad u^2_{\vec{p}} + |v_{\vec{p}}|^2 = 1. \tag{3}$$

Гамильтониан в результате преобразования приобретает следующую структуру

$$S^{+}HS = V\{\varphi(\vec{p})\} + \sum_{\vec{p}} \mathcal{E}_{\vec{p}}(a^{+}_{\vec{p}}a_{\vec{p}} + b^{+}_{\vec{p}}b_{\vec{p}}) + H_1, \qquad (4)$$

где $U\{\varphi(\vec{p})\}$ – числовой функционал от $\varphi(\vec{p})$, $\mathcal{E}_{\vec{p}}$ – перестроенный одночастичный спектр в приближении Хартри–Фока, а H_1 содержит, помимо имевшихся в гамильтониане (1) матричных элементов взаимодействия, еще такие, которые описывают рассеяние частицы с рождением (уничтожением) пары и уничтожение пары с рождением пары.

Решая соответствующее уравнение компенсации "опасных диаграмм" /6/, получим

$$\begin{aligned} v_{\vec{p}} &= f \cdot \sqrt{-\Delta - \mathcal{E}_1 + |\tilde{V}|} \cdot \varphi_1(\vec{p})\, e^{i\alpha}, \\ \alpha &\equiv \arg v_{\vec{p}} = \frac{1}{2}(\pi - \arg\tilde{V}), \end{aligned} \qquad (5)$$

где f – вполне определенная положительная константа. Действуя так же, как и до перестройки, находим для "экситонной" ветви возбуждений

$$E(\vec{P}) = \sqrt{(-\Delta - \mathcal{E}_1 + 2|\tilde{V}| + \hbar^2 \vec{P}^2/2M)^2 - (\Delta + \mathcal{E}_1)^2}. \qquad (6)$$

Спектр, вообще говоря, не звуковой при малых $|\vec{P}|$ за исключением одной точки, а именно, когда $\Delta + \mathcal{E}_1 - |\tilde{V}| = 0$. В этой точке спектр становится звуковым, со скоростью звука $s = \sqrt{|\tilde{V}|/M}$.

Наличие у $v_{\vec{p}}$ вполне определенной фазы, определяемой, по-существу, фазой $\tilde{V}$, ликвидирует неоднократно обсуждавшуюся ранее аналогию "экситонного диэлектрика" со сверхтекучим конденсатом Бозе-частиц или куперовских пар и является причиной незвукового характера спектра коллективных возбуждений.

Для выяснения характера фазового перехода в состояние "экситонного диэлектрика" вычислим вклад в энергию основного состояния системы, который вносит часть гамильтониана

$$\tilde{H} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p},\vec{p}',\vec{k}} (\tilde{V}_{\vec{k}} a_{\vec{p}}^{+} a_{\vec{p}'} b_{\vec{k}-\vec{p}'} b_{-\vec{k}-\vec{p}} + \text{э.с.}).$$

Изменение энергии основного состояния за счет взаимодействия $\tilde{H}$, как известно, есть $\delta\mathcal{E}_0 = \int_0^1 \langle \tilde{H} \rangle dg/g$, где g – это константа взаимодействия, содержащаяся в $\tilde{H}$, а среднее берется по основному состоянию полного гамильтониана. Это среднее выражается через $\tilde{G}_{eh}(\mathcal{P}, p, p')$, и $\delta\mathcal{E}_0$ может быть найдена как функция $\Delta + \mathcal{E}_1 - |\tilde{V}|$ вблизи точки $\Delta + \mathcal{E}_1 - |\tilde{V}| = 0$. Окончательный результат мы приведем не для энергии, а для давления системы в основном состоянии. Вблизи точки $\Delta + \mathcal{E}_1 - |\tilde{V}| = 0$ давление содержит слагаемое

$$\delta P = \text{const} \cdot \sqrt{\tilde{V}} \cdot |\Delta + \mathcal{E}_1 - |\tilde{V}|| \cdot \ln \left[|\Delta + \mathcal{E}_1 - |\tilde{V}|| / |\tilde{V}| \right], \quad (7)$$

которое определяет поведение всего давления в окрестности этой точки. Знак константы зависит от вида $\tilde{V}_{\vec{k}}$, но видно, что независимо от знака есть область, в которой $\partial(\delta P)/\partial V = (\partial(\delta P)/\partial\Delta)(d\Delta/dV) > 0$, более того $\partial(\delta P)/\partial\Delta \to +\infty$ при $|\Delta + \mathcal{E}_1 - |\tilde{V}|| \to 0$ и, следовательно, $\frac{\partial P}{\partial \Delta}$ также стремится к $+\infty$. Область, где $\partial P/\partial V > 0$, является областью абсолютной термодинамической неустойчивости, и поэтому при изменениях объема, включающих точку $\Delta + \mathcal{E}_1 - |\tilde{V}| = 0$, система претерпевает фазовый переход 1 рода.

Поступила в редакцию
13 мая 1971 г.

Л и т е р а т у р а

1. Л. В. Келдыш, Ю. В. Копаев. ФТТ, 6, 2791 (1964).
2. J. des Cloiseaux. J. Phys. Chem. Solids, 26, 259 (1965).
3. А. Н. Козлов, Л. А. Максимов. ЖЭТФ, 48, 1184 (1965); 49, 1284 (1965).

4. D. Jerome, T. M. Rice and W. Kohn. Phys. Rev., 158, 462 (1967).
5. B. I. Halperin and T. M. Rice. Rev. Mod. Phys., 40, 755 (1968).
6. Л. В. Келдыш, А. Н. Козлов. ЖЭТФ, 54, 978 (1968).