

Н. КРИСТОФЕЛЬ

ЗАВИСИМОСТЬ ПЛАЗМЕННОЙ ЧАСТОТЫ НОСИТЕЛЕЙ ВИБРОННОГО СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА ОТ СПОНТАННОГО ИСКАЖЕНИЯ РЕШЕТКИ

N. KRISTOFFEL. VIBROONSE SENJETTELEKTRIKU LAENGUKANDJATE PLASMASAGEDUSE SÖL-
 TUVUS SPONTAANSEST VOREMOONUTUSEST

N. KRISTOFFEL. DEPENDENCE OF THE CARRIERS PLASMA FREQUENCY OF A VIBRONIC
 FERROELECTRIC ON THE SPONTANEOUS LATTICE DISTORTION

Вибронная теория фазовых переходов типа смещения в сегнетоэлектриках оказалась эффективной в объяснении комплекса физических свойств этих систем (см., напр., [1-3]). Ведущим фактором, обуславливающим в этой теории динамическую нестабильность решетки, служит электронно-колебательное взаимодействие между валентной зоной и зоной проводимости. В частности, это взаимодействие вызывает существенную температурно-зависимую перенормировку энергий активных электронных зон. Последняя приводит, например, к дополнительной температурной зависимости ширины запретной щели [4] и т. д. Многие сегнетоэлектрики обладают полупроводниковыми свойствами на основании различных механизмов генерации носителей (см., напр., [5]). При этом концентрации носителей могут оказаться достаточными даже для полной экранировки спонтанной поляризации. В настоящем сообщении показано, что активное межзонное вибронное взаимодействие должно приводить к зависимости плазменной частоты носителей от спонтанного искажения решетки (зависящего от температуры) в сегнетофазе. Эффект вызван вибронной перенормировкой эффективной массы носителей.

Действительная часть электронной диэлектрической проницаемости, обусловленная вкладом квазисвободных носителей одной зоны с законом дисперсии $E(\vec{k})$, может быть записана в виде [6]

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{e^2}{\pi^2 \hbar^2 \omega^2} \int_{\text{з.с.}} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_z^2} d^3 k. \quad (1)$$

Интегрирование в выражении (1) идет по занятым носителями состояниям, остальные обозначения общеприняты. Перенормированные энергии активных электронных зон (полагаемых для простоты невырожденными) для вибронного сегнетоэлектрика имеют вид

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \frac{1}{2} [\varepsilon_2(\vec{k}) + \varepsilon_1(\vec{k})] \pm \sqrt{[\varepsilon_2(\vec{k}) - \varepsilon_1(\vec{k})]^2 + 4V^2y_0^2}, \quad (2)$$

где V — константа активного межзонного электрон-фононного взаимодействия, $y_0(T)$ — низкосимметричное искажение решетки на ячейку по нормальной координате мягкой сегнетоактивной колебательной

моды с $\vec{q} = 0$. В выражении (2) мы пренебрегли в сравнении с $4V^2y_0^2$ флуктуационного типа членом, содержащим в знаменателе частоту мягкой моды (см. [4]). Примем для простоты квадратичные за-

коны дисперсии затравочных электронных зон: $\varepsilon_2(\vec{k}) = \Delta + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} k^2$,

$\varepsilon_1(\vec{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m_h^*} k^2$. Если добавочная энергия от спонтанного иска-

жения решетки в (2) меньше запрещенной щели, можно воспользоваться разложением в ряд, так что

$$E_+(\vec{k}) = \Delta + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} k^2 + \frac{V^2y_0^2}{\Delta + ak^2}. \quad (3)$$

При этом можно пренебречь температурной зависимостью затравочной щели Δ , обусловленной процессами внутризонного рассеяния; $a = = \hbar^2(2\mu)^{-1}$, $\mu^{-1} = (m_e^*)^{-1} + (m_h^*)^{-1}$. На основании (3) в связи с соответствующей перенормировкой эффективной массы можно (1) записать в виде (результат для $-E_-(\vec{k})$ аналогичен)

$$\varepsilon_1 = 1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2, \quad (4)$$

где перенормированная плазменная частота дана выражением

$$\omega_p^2 = \omega_{p0}^2 \left(1 - \frac{m_e^*}{\mu} \frac{V^2y_0^2}{4\pi^3n} \Xi \right). \quad (5)$$

Здесь $\omega_{p0}^2 = 4\pi e^2n(m_e^*)^{-1}$, $n = (4\pi^3)^{-1} \int_{\text{з.с.}} d^3\vec{k}$ — концентрация квазисвободных носителей, а

$$\Xi = \int_{\text{з.с.}} \frac{\Delta + ak^2 - 4ak_z^2}{(\Delta + ak^2)^3} d^3\vec{k}. \quad (6)$$

Выполнение здесь интегрирования по k от 0 до $k_0 = (3\pi^2n)^{1/3}$ дает

$$\Xi = \frac{4\pi k_0^3}{3\Delta^2} (1+x)^{-2}, \quad \text{но поскольку в рассматриваемого типа систе-}$$

мах $x = ak_0^2\Delta^{-1} \ll 1$, то с достаточной точностью

$$\omega_p^2 = \omega_{p0}^2 \left(1 - \frac{m_e^*}{\mu} \frac{V^2y_0^2(T)}{\Delta^2} \right). \quad (7)$$

Следовательно, в точке фазового перехода, где возникает спонтанное искажение решетки, вибронная теория предсказывает возникновение дополнительного вклада в плазменную частоту (и эффективную

массу) носителей активной электронной зоны. С дальнейшим понижением температуры рост и выход к насыщению $y_0^2(T)$ должны обуславливать соответствующее понижение плазменной частоты *. Характерная величина второго члена в выражении (7) составляет проценты и может в благоприятных случаях достигать 1/10. Тем самым предсказываемый эффект может быть, в принципе, наблюдаем.

* Напомним, что (7) дает вклад носителей одной зоны, накладывающийся на регулярный вклад других зон при наличии вырождения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кристофель Н. Н., Консин П. И. О межзонной теории сегнетоэлектричества. — В кн.: Титанат бария. М., 1973, с. 11—19.
2. Kristoffel, N., Kohn, P. Electron-phonon interaction, microscopic mechanism and properties of ferroelectric phase transitions. — *Ferroelectrics*, 1973, v. 6, p. 3—12.
3. Берсукер И. Б., Вехтер Б. Г., Огурцов И. Я. Туннельные эффекты в многоатомных системах с электронным вырождением и псевдовырождением. — *УФН*, 1975, т. 116, № 4, с. 605—641.
4. Консин П., Кристофель Н. Температурная зависимость запрещенной зоны в широкощельных сегнетоэлектриках. — *Изв. АН ЭССР, Физ. Матем.*, 1973, т. 22, № 2, с. 173—178.
5. Фридкин В. М. Сегнетоэлектрики-полупроводники. М., 1976.
6. Тауц Я. Оптические свойства полупроводников. М., 1967.

*Институт физики
Академии наук Эстонской ССР*

Поступила в редакцию
13/XII 1977