

## Локализованные состояния поляронного типа в сегнетоэлектриках-сегнетоэластиках

© М.Б. Белоненко, Е.В. Демушкина

Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет,  
400074 Волгоград, Россия

E-mail: mbelonenko@yandex.ru, demushkina@mail.ru

Прямым вариационным методом установлено существование и исследованы зависимости от параметров задачи основного и первых возбужденных состояний дискретного спектра в задаче о заряженной частице в несобственном сегнетоэлектрике-сегнетоэластике.

PACS: 71.38.-k, 62.20.Dc, 77.80.-e

1. В настоящее время направления физики сегнетоэлектрических и сегнетоэластических явлений, требующие создания веществ с заданными сегнетоэлектрическими и электронными свойствами, существенно стимулируют работы по исследованию автолокализованных состояний в средах, испытывающих сегнетоэлектрический фазовый переход.

2. Энергию несобственного сегнетоэлектрика-сегнетоэластика с водородными связями в присутствии заряженной частицы можно записать как

$$E = E_{fe} + E_{fe-ps} + E_{ch} + E_{ps} + E_{ps-ch} + E_{fe-ch}, \quad (1)$$

где  $E_{fe}$  — энергия сегнетоэластической подсистемы,  $E_{fe-ps}$  — энергия взаимодействия сегнетоэлектрической-сегнетоэластической подсистем,  $E_{ch}$  — кинетическая энергия заряженной частицы,  $E_{ps}$  — энергия протонов на водородных связях,  $E_{ps-ch}$  — энергия взаимодействия заряженной частицы с протонами на водородных связях,  $E_{fe-ch}$  — энергия взаимодействия заряженной частицы с сегнетоэластической подсистемой. Здесь мы считаем, что поляризация сегнетоэлектрика-сегнетоэластика однозначно определяется конфигурацией протонов на водородных связях [1,2]. В предположении, что сегнетоэластический параметр порядка имеет одну компоненту  $\rho$ , можно записать

$$\begin{aligned} E_{fe} &= \frac{1}{2} \int_V dr' \gamma \rho^2, & E_{fe-ps} &= - \int_V dr' \rho S^z d, \\ E_{ch} &= \frac{1}{2m^*} \int_V dr' \nabla \psi \nabla \psi^*, & E_{ps-ch} &= 2\mu_0 \int_V dr' S^z \partial_{z'} \varphi, \\ E_{ps} &= \int_V dr' (-\Omega S^x - JS^z S^z + AS_{x'}^z S_{x'}^z + AS_{y'}^z S_{y'}^z), \\ E_{fe-ch} &= - \int_V dr' \sigma |\psi|^2 \rho, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $A \equiv J\Delta^2$ ,  $\Delta$  — расстояние между соседними сегнетоэлектрическими ячейками в плоскости, перпендикулярной полярной оси;  $J$  и  $\Omega$  — интегралы обмена и туннелирования для протона на водородной связи

соответственно ( $h = 1$ );  $S^x$  и  $S^z$  — неравновесные (в присутствии заряженной частицы) средние операторов туннелирования и электрического дипольного момента обмена для протона на водородной связи соответственно;  $x', y', z'$  — оси координат ( $z'$  — полярная ось);  $\mu_0$  — электрический дипольный момент одной сегнетоэлектрической ячейки;  $d, \sigma$  — константы связи,  $S_y^\alpha = \partial S^\alpha / \partial \gamma$  [1,2];  $\gamma$  — упругая постоянная;  $m^*$  — эффективная масса заряженной частицы;  $\varphi$  — потенциал, создаваемый заряженной частицей

$$\varphi(r') = -\varepsilon \int_V dr'' \frac{|\psi''|^2}{|r' - r''|}, \quad (3)$$

$\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость нашего вещества. Используя адиабатическое приближение [1] и варьируя по  $\rho$ , легко получаем

$$\rho = \frac{\sigma |\psi|^2 + S^z d}{\gamma}. \quad (4)$$

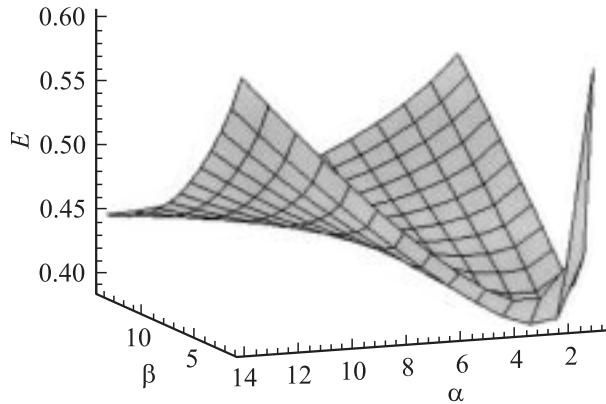
Для выяснения связи компонент вектора псевдоспина  $S^\alpha$  с другими переменными воспользуемся уравнениями движения для вектора псевдоспина в параэлектрической фазе в приближении времен релаксации

$$\begin{aligned} \dot{S}^x &= (JS^z + AS_{x'}^z + AS_{y'}^z + E_{ex}) S^y - \frac{(S^x - S^x)}{T_1}, \\ \dot{S}^y &= \Omega S^z - (JS^z + AS_{x'}^z + AS_{y'}^z + E_{ex}) S^x - \frac{S^y}{T_2}, \\ \dot{S}^z &= -\Omega S^y - \frac{S^z}{T_2}, \end{aligned} \quad (5)$$

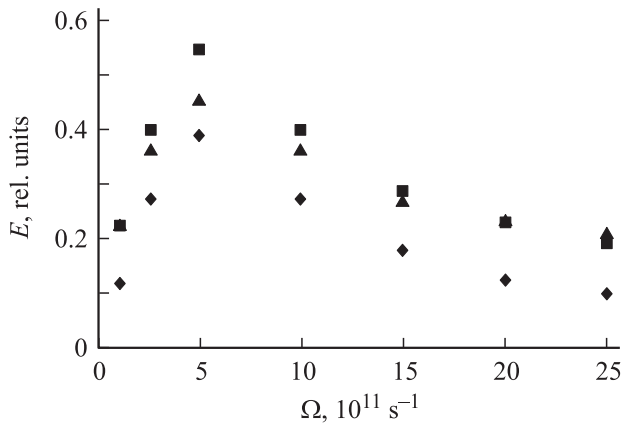
где  $S_{y'}^\alpha = \partial^2 S^\alpha / \partial \gamma'^2$ ;  $S^x$  — равновесное температурное среднее значение оператора туннелирования;  $T_1, T_2$  — времена продольной и поперечной релаксации для вектора псевдоспина [1];  $E_{ex}$  — внешнее поле для псевдоспина; исходя из выражения (1),

$$E_{ex} = \rho d - 2\mu_0 \frac{\partial \varphi}{\partial z'}. \quad (6)$$

По-прежнему оставаясь в рамках адиабатического приближения, полагаем  $\dot{S}^\alpha = 0$ . Тогда можно получить выражение для компонент вектора псевдоспина через потенциал, создаваемый заряженной частицей. Это дает возможность выразить все величины, входящие в выражение для энергии системы (1), через волновую функцию



**Рис. 1.** Зависимость энергии системы от параметров пробных функций. Энергия в условных единицах,  $\Omega = 5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ ,  $J = 2.5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ ,  $T_1 = 1.4 \cdot 10^{-9} \text{ s}$ ,  $T_2 = 0.2 \cdot 10^{-9} \text{ s}$ ,  $\gamma = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ ,  $\sigma = 1.5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ ,  $S^x = 0.15$ .



**Рис. 2.** Зависимости параметров состояния дискретного спектра от степени дейтерирования образца,  $T_1 = 1.4 \cdot 10^{-9} \text{ s}$ ,  $T_2 = 0.2 \cdot 10^{-9} \text{ s}$ . Остальные параметры как на рис. 1. Ромбы соответствуют основному состоянию  $\Psi_1$ , треугольники — состоянию с волновыми функциями  $\Psi_2, \Psi_3$ ; квадраты —  $\Psi_4$ .

заряженной частицы  $\psi$ . Можно воспользоваться прямым вариационным методом [3] и определить, существует ли локализованное состояние, и если существует, то каковы его параметры. Для вычисления энергий основного и первых возбужденных состояний дискретного спектра прямым вариационным методом использовался тот факт, что при выборе ортогональной системы пробных волновых функций минимальные средние значения энергии системы, полученные при варьировании параметров волновых функций, будут соответствовать значениям энергии дискретного спектра [3]. В качестве пробных волновых функций были выбраны

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= C_1 e^{-\alpha(x'^2+y'^2)-\beta z'^2}, & \Psi_2 &= C_2 x' e^{-\alpha(x'^2+y'^2)-\beta z'^2}, \\ \Psi_3 &= C_3 y' e^{-\alpha(x'^2+y'^2)-\beta z'^2}, & \Psi_4 &= C_4 z' e^{-\alpha(x'^2+y'^2)-\beta z'^2}, \end{aligned} \quad (7)$$

где константы  $C_1, C_2, C_3, C_4$  — выбирались из условия нормировки.

3. Пробной функции  $\Psi_1$  соответствует энергетическая поверхность, приведенная на рис. 1. Для сегнетоэлектриков-сегнетоэластиков с водородными связями весьма важным является параметр  $\Omega$ , который отвечает за степень дейтерирования образца [4]. Для состояния дискретного спектра заряженных частиц в исследуемых кристаллах в результате численных расчетов было установлено, что энергия низших состояний зависит от степени дейтерирования как представлено на рис. 2. Первоначальное увеличение энергии локализованных состояний можно связать с тем, что при дейтерировании происходит „замораживание“ движения протонов на водородных связях, и флуктуации электрического поля, возникающего при движении протонов, не „разрушают“ волновой пакет (7) заряженной частицы. А последующее падение энергии можно связать с растущим влиянием релаксационных механизмов.

### Список литературы

- [1] Р. Блинц, Б. Жекш. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Мир, М. (1975).
- [2] М.Б. Белоненко, В.В. Немеш. Укр. физ. журнал **44**, 7, 112 (1999).
- [3] А.С. Давыдов. Квантовая механика. Физ.-мат., М. (1963).
- [4] А.В. Шильников, Е.Г. Надолинская, В.А. Федорихин, С.В. Родин. Кристаллография **39**, 1, 84 (1994).