

УДК 621.315.592

КОСВЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭКРАНИРОВАННЫХ ДИПОЛЕЙ В УЗКОЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ ТИПА A^4B^6

В. К. Дугаев, П. П. Петров

Рассмотрена задача о косвенном взаимодействии через электронную подсистему примесей с дипольным моментом в узкощелевых полупроводниках со спектром дираковского типа. Масштабом, определяющим характер взаимодействия между экранированными диполями, является отношение матричного элемента межзонного взаимодействия к полуширине энергетической щели в спектре v/Δ . При среднем расстоянии между диполями $\bar{R} \ll v/\Delta$ энергия парного взаимодействия $\varepsilon_{int} \sim \bar{R}^{-5}$ и преобладает антисегнетоэлектрическое взаимодействие. На больших расстояниях $\bar{R} \gg v/\Delta$ имеет место тенденция к сегнетоэлектрическому упорядочению примесных диполей.

Поведение примесей и дефектов в твердых телах в значительной мере определяется взаимодействием между ними [1, 2]. Обычно основную роль играет прямое взаимодействие, которое имеет электрическую или деформационную природу.

В узкощелевых полупроводниках, к которым относятся некоторые соединения A^4B^6 и их твердые растворы (например, $Pb_{1-x}Sn_xTe$ и $Pb_{1-x}Ge_xTe$), взаимодействие примесей обладает рядом особенностей. Прежде всего в силу большой величины диэлектрической проницаемости ($\varepsilon_0 \sim 10^3$) прямое электрическое взаимодействие оказывается подавленным. Взаимодействие через решетку, которое включает обычное деформационное взаимодействие [3-5], содержит также вклад от обмена мягкими оптическими фононами [6] (двухфононные процессы) или от «однофононного» взаимодействия [7, 8]. Взаимодействие через фононы играет существенную роль вблизи точки фазового перехода в этих кристаллах.

В настоящей работе рассмотрен механизм косвенного взаимодействия примесей, обладающих дипольным моментом, через электронную подсистему. Этот механизм играет существенную роль в случае, когда энергетическая щель в электронном спектре мала. Следует отметить также, что исследование характера взаимодействия диполей в кристаллах $Pb_{1-x}Ge_xTe$ очень важно для выяснения механизма фазового перехода в этих кристаллах [9, 10].

Гамильтониан свободных электронов в кристаллах A^4B^6 запишем в виде матрицы 4×4 (модель дираковского спектра)

$$H_0 = \tau_x \Delta + \tau_x v \kappa \sigma, \quad (1)$$

где τ , σ — матрицы Паули в пространстве зон и спина соответственно; $\Delta = \varepsilon_g/2$ — полуширина запрещенной зоны; v — параметр межзонного взаимодействия; $\hbar = c_0 = 1$.

Взаимодействие электронов с полем, создаваемым примесным диполем, представим следующим вкладом в гамильтониан:

$$H_{int} = -e\varphi(\mathbf{r}) + g\sigma[\mathbf{pE}(\mathbf{r})], \quad (2)$$

$\varphi(\mathbf{r})$ — скалярный потенциал, $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\text{grad } \varphi(\mathbf{r})$. Второй член в (2) связан с взаимодействием рассматриваемых зон с удаленными зонами (при

этом константа g не содержит релятивистской малости¹ и по порядку величины $g \sim e/m_0 |\Delta\epsilon|$, где $\Delta\epsilon$ — энергия высоколежащей зоны). Потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ для диполя, расположенного в точке $\mathbf{r}=0$, можно записать для $r \gg \delta$ (δ — характерный размер диполя) с учетом экранирования

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{d\mathbf{r}}{r^3} \exp(-\kappa r), \quad (3)$$

\mathbf{d} — дипольный момент, κ — обратный радиус экранирования.

Матричные элементы возмущения (2) на волновых функциях, которые составляют базис Латтинжера—Кона для матрицы (1), с учетом (3) отличны от нуля только для межзонных переходов. Кроме того, для переходов между состояниями k и k' , такими, что $k, k' \ll \kappa$, можно считать потенциал δ -образным (поскольку в задаче будут существенными $k \sim \Delta/v$, это условие приводит к $\kappa \gg \Delta/v$).

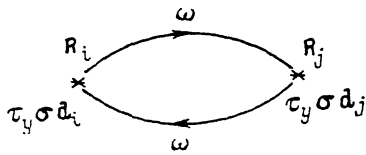


Рис. 1. Диаграмма для расчета энергии парного взаимодействия локализованных дипольных моментов.

Вычисляя матричные элементы (2) с учетом сказанного выше, получаем для системы диполей

$$H_{\text{int}} = \sum_i \mu \tau_y \sigma E_i(\mathbf{r}), \quad (4)$$

где $E_i(\mathbf{r}) = \mathbf{d}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ — электрическое поле i -го диполя в точке \mathbf{R}_i ; \mathbf{d}_i — его дипольный момент. Константа μ по порядку величины $\mu \sim (em_0 a_0^3 v + ev/\Delta\epsilon) \sim ev/\Delta\epsilon$ (a_0 — параметр решетки). Отметим, что возможность включения в гамильтониан Дирака внешнего возмущения в виде (4) отмечалась в [12].

Выражение (4) можно рассматривать и как взаимодействие электронов с неоднородным сегнетоэлектрическим параметром порядка $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, возникающим в результате сдвига подрешеток при фазовом переходе. Таким образом, в рассматриваемой модели «взаимодействующими диполями» могут являться также локальные флуктуации сегнетоэлектрического параметра порядка и полученные ниже выражения для взаимодействия диполей можно рассматривать как взаимодействие этих флуктуаций.

Рассмотрим петлевую диаграмму (рис. 1) для взаимодействия двух примесных диполей \mathbf{d}_i и \mathbf{d}_j , находящихся на расстоянии R друг от друга. Соответствующее выражение для энергии взаимодействия имеет вид (температуру полагаем равной нулю и пренебрегаем возможным заполнением зон)

$$\varepsilon_{\text{int}}(R) = -i\mu^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Sp} [\tau_y \sigma \mathbf{d}_i G(\omega, R) \tau_y \sigma \mathbf{d}_j G(\omega, -R)], \quad (5)$$

где $G(\omega, R)$ — функция Грина свободных электронов, соответствующая гамильтониану (1), в координатно-энергетическом представлении. Используя (1), находим

$$G(\omega, k) = (\omega + \tau_x \Delta + \tau_x v k \sigma) / (\omega^2 - \Delta^2 - k^2 v^2), \quad (6)$$

откуда следует

$$G(\omega, R) = - \left[\omega + \tau_x \Delta + \tau_x \frac{i v \sigma \mathbf{R}}{R^2} \left(1 - \frac{i R \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}{v} \right) \right] \times \frac{\exp(i R \sqrt{\omega^2 - \Delta^2}/v)}{4\pi v^2 R}, \quad (7)$$

причем $R > 0$, а частота ω в (6), как обычно, содержит мнимую добавку $i\delta \text{sign } \omega$. Функция $G(\omega, -R)$ отличается от (7) знаком недиагональных элементов.

¹ Аналогичный вывод сделан в работе [11] при рассмотрении спин-орбитального взаимодействия, связанного с полем вблизи поверхности кристалла.

Подставляя полученные выражения для функций Грина в (5) и вычисляя след, приходим к следующему выражению для энергии взаимодействия

$$\varepsilon_{\text{int}}(R) = -i \frac{\mu^2 d_i^\alpha d_j^\beta}{4\pi^2 v^4 R^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ \delta_{\alpha\beta} \left[\omega^2 - \Delta^2 + \frac{v^2}{R^2} \left(1 - \frac{iR\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}{v} \right)^2 \right] - \frac{2R_\alpha R_\beta v^2}{R^4} \left(1 - \frac{iR\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}}{v} \right)^2 \right\} \exp(i2R\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}/v). \quad (8)$$

Интеграл по частоте ω в (8) идет по контуру (рис. 2, а). Сдвиг контура вверх или вниз с действительной оси связан с наличием добавки $i\delta \text{sign} \omega$ в частоте ω в исходных функциях Грина.

На этом рисунке показаны также разрезы в плоскости комплексных ω . Других особенностей, кроме ветвлений в точках $\omega = \pm \Delta$, подынтегральная функция не имеет. Учитывая наличие экспоненциального множителя в (8), контур интегрирования по ω можно сдвинуть (рис. 2, б). При этом вклад в интеграл дает только участок контура вдоль мнимой оси.

Обозначим $\xi = -i\omega$. В результате вместо (8) получаем

$$\varepsilon_{\text{int}} = - \frac{\mu^2 d_i^\alpha d_j^\beta}{4\pi^2 v^4 R^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{2\pi} \left\{ \delta_{\alpha\beta} \left[\xi^2 + \Delta^2 - \frac{v^2}{R^2} \times \left(1 + \frac{R\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{v} \right)^2 \right] + \frac{2R_\alpha R_\beta v^2}{R^4} \times \left(1 + \frac{R\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{v} \right)^2 \right\} \exp(-2R\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}/v). \quad (9)$$

Сделаем замену переменной интегрирования $x = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}$. Тогда

$$\varepsilon_{\text{int}}(R) = \frac{\mu^2 d_i^\alpha d_j^\beta}{4\pi^3 v^4 R^2} \int_{\Delta}^{\infty} \frac{x dx}{\sqrt{x^2 - \Delta^2}} \left[\delta_{\alpha\beta} \left(\frac{v^2}{R^2} + \frac{2xv}{R} \right) - \frac{2R_\alpha R_\beta v^2}{R^4} \left(1 + \frac{xR}{v} \right)^2 \right] \exp(-2xR/v). \quad (10)$$

Оставшиеся интегралы по x могут быть приведены к следующему виду:

$$\varepsilon_{\text{int}}(R) = \frac{\mu^2 \Delta d_i^\alpha d_j^\beta}{(2\pi)^3 v^2 R^2} \left\{ \delta_{\alpha\beta} \left(-\frac{2}{R} \frac{d}{dR} + \frac{2}{R^2} \right) - \frac{R_\alpha R_\beta}{R^2} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{4}{R} \frac{d}{dR} + \frac{4}{R^2} \right) \right\} K_1(2R\Delta/v), \quad (11)$$

где $K_1(z)$ — модифицированная функция Бесселя.

Используя асимптотики функции $K_1(z)$ [13]

$$K_1(z) = \begin{cases} \sqrt{\pi/2z} \exp(-z), & z \gg 1, \\ 1/z, & z \ll 1, \end{cases} \quad (12)$$

получим при $R \gg v/\Delta$

$$\varepsilon_{\text{int}}(R) = -\frac{\mu^2}{4v} \left(\frac{\Delta}{\pi R v} \right)^{5/2} d_i^\alpha d_j^\beta \frac{R_\alpha R_\beta}{R^2} \exp(-2R\Delta/v), \quad (13)$$

а при $R \ll v/\Delta$

$$\varepsilon_{\text{int}}(R) = \frac{\mu^2}{4\pi^3 v R^5} d_i^\alpha d_j^\beta \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{5}{2} \frac{R_\alpha R_\beta}{R^2} \right). \quad (14)$$

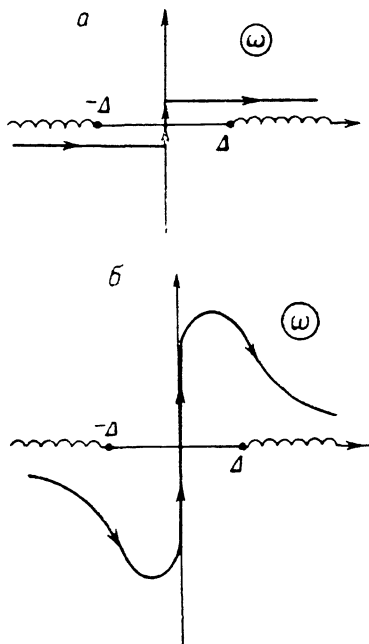


Рис. 2. Преобразование контура интегрирования в интеграле (8).

Как следует из (13), (14) угловые зависимости энергии косвенного взаимодействия диполей через электронную подсистему имеют совершенно нестандартный вид. При $R \ll v/\Delta$ взаимодействие имеет «дальнодействующий характер», но с существенно большим показателем степени $\varepsilon_{\text{int}} \sim R^{-5}$, чем в случае прямого диполь-дипольного взаимодействия.

В случае больших расстояний имеет место тенденция к сегнетоэлектрическому упорядочению примесных диполей, тогда как на малых расстояниях преобладает антисегнетоэлектрическое взаимодействие. Действительно, усредняя (13), (14) по направлениям вектора R , получим

$$\varepsilon_{\text{int}}(R) = \begin{cases} -\frac{\mu^2}{12v} \left(\frac{\Delta}{\pi v R}\right)^{5/2} \mathbf{d}_i \mathbf{d}_j \exp(-2R\Delta/v), & R \gg v/\Delta, \\ (\mu^2/24\pi^3 v R^5) \mathbf{d}_i \mathbf{d}_j, & R \ll v/\Delta. \end{cases} \quad (15)$$

$$(16)$$

Вычислим среднюю энергию взаимодействия случайно ориентированных дипольных моментов в параэлектрической фазе. Для этого усредним (13), (14) по направлениям векторов \mathbf{d}_i и \mathbf{d}_j

$$\varepsilon_{\text{пара}}(R) = \begin{cases} -\frac{\mu^2 \langle d^2 \rangle}{4v} \left(\frac{\Delta}{\pi v R}\right)^{5/2} \exp(-2R\Delta/v), & R \gg v/\Delta, \\ \mu^2 \langle d^2 \rangle / 8\pi^3 v R^5, & R \ll v/\Delta. \end{cases} \quad (17)$$

$$(18)$$

В заключение сделаем оценку величины энергии взаимодействия двух диполей на расстоянии $\bar{R} = N^{-1/3}$ (N — концентрация диполей). Примем следующие значения параметров для $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ [14]: $v \approx 2 \cdot 10^{-8}$ эВ·см; величина Δ меняется от ~ 0.1 эВ до нуля при изменении состава. Отсюда следует, что при $N \geq 10^{18}$ см $^{-3}$ условие $\bar{R} \ll v/\Delta$ может быть выполнено. Полагая $d = Zea_0$ (Ze — эффективный заряд) и воспользовавшись (18), получим

$$|\varepsilon| \sim Z^2 \left(\frac{\varepsilon_{\text{ар}}}{\Delta\varepsilon}\right)^2 \frac{v}{a_0} \left(\frac{N}{N_0}\right)^{5/3}, \quad (19)$$

где N_0 — число элементарных ячеек в единице объема. Принимая $\varepsilon_{\text{ар}}/\Delta\varepsilon = 10$, $Z = 1$, получим из (19) при $N = 10^{19}$ см $^{-3}$ $|\varepsilon| \sim 10$ К.

Список литературы

- [1] Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов. М., 1969. 654 с.
- [2] Товстюк К. Д. Полупроводниковое материаловедение. Киев: Наукова думка, 1984. 264 с.
- [3] Косевич А. М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наукова думка, 1981. 327 с.
- [4] Кривоглаз М. А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев: Наукова думка, 1983. 408 с.
- [5] Лейбфрид Г., Бройер Н. Точечные дефекты в кристаллах. М., 1981. 440 с.
- [6] Dugaev V. K., Litvinov V. I., Tovstyuk K. D. // Phys. Lett. 1982. V. 92A. N 4. P. 186—188.
- [7] Вихнин В. С., Борковская Ю. Б. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 12. С. 3603—3607.
- [8] Вугмейстер Б. Е., Глинчук М. Д. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. № 3. С. 947—952.
- [9] Katayama S., Murase M. // Sol. St. Comm. 1980. V. 36. N 8. P. 707—711.
- [10] Litvinov V. I. // Sol. St. Comm. 1984. V. 51. N 2. P. 119—121.
- [11] Васью Ф. Т. // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т. 30. № 9. С. 574—577.
- [12] Панкратов О. А. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45. № 2. С. 82—85.
- [13] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовиц и И. Стиган. М., 1979. 832 с.
- [14] Nimitz G., Schlicht B. Narrow-Gap Semiconductors. Berlin, 1985. P. 1—117.

Львовский политехнический институт
Львов

Поступило в Редакцию
14 июля 1988 г.
В окончательной редакции
13 марта 1989 г.