Физика твердого тела, 1998, том 40, № 4

Автолокализованные состояния носителей и диэлектрический гистерезис в неупорядоченных дипольных системах

© *М.Д. Глинчук, В.А. Стефанович*, Л. Ястрабик***

Институт проблем материаловедения Академии наук Украины,
252680 Киев, Украина
* Институт физики полупроводников Академии наук Украины,
252650 Киев, Украина
** Институт физики Академии наук Чехии,
Прага, Чешская Республика

(Поступила в Редакцию 31 октября 1997 г.)

Развита теория автолокализованных состояний свободных носителей (флуктуонов) на флуктуациях поляризации в неупорядоченных сегнетоэлектриках типа $KTaO_3:Li, Nb$. Основные характеристики флуктуона — его энергия, радиус локализации, эффективная масса и подвижность рассчитаны как функции концентрации примесных диполей и температуры. Теория предсказывает появление устойчивых флуктуонных состояний как в смешанной фазе сегнетоэлектрик–дипольное стекло так и в состоянии дипольного стекла неупорядоченных сегнетоэлектриков. Обсуждается возможная роль флуктуонов в проводимости и других кинетических явлениях в неупорядоченных сегнетоэлектриках.

Автолокализованные состояния носителей такие как поляроны [1] и флуктуоны [2] играют важную роль в физике полупроводников и диэлектриков. Флуктуон, как известно, это носитель, захваченный вблизи флуктуации поляризации кристалла [2,3]. Поэтому флуктуоны обусловлены взаимодействием носителя как с продольными, так и с поперечными колебаниями решетки. Последнее особенно существенно для сегнетоэлектриков, где спонтанная поляризация связана с поперечными фононами. Физика автолокализованных состояний развивалась в основном для поляронов (см., например, [1,4]), тогда как информация о флуктуонных состояниях очень ограничена. Теория флуктуонов в обычных сегнетоэлектриках была предложена в [5], где доменные стенки были рассмотрены как основной источник флуктуации поляризации. Однако в неупорядоченных дипольных системах, находящихся в состоянии дипольного стекла либо в смешанной сегнето-стекольной фазе существуют лишь полярные кластеры ближнего порядка либо сосуществуют ближний и дальний порядок (см., например, [6] и ссылки там). Очевидно, что флуктуации поляризации должны быть характерной чертой таких систем. Учитывая существенную электропроводность во многих системах со случайными электрическими диполями [7–9], можно ожидать, что появление флуктуонов в таких системах более вероятно, чем в обычных сегнетоэлектриках.

В настоящей работе развивается теория автолокализованных флуктуонных состояний носителей заряда в системах со случайными электрическими диполями, которые могут индуцировать фазовые переходы дипольное стекло–сегнето-стекло–сегнетоэлектрическая фаза.

Расчеты проведены для модельной неупорядоченной системы с электрическими диполями $K_{1-x}Li_xTaO_3$ (KLT) ($x < 0.05$), в которой нецентральные ионы Li^+ являются случайно расположенными и ориентированными электрическими диполями в виртуальном сегнетоэлектрике $KTaO_3$. Известно, что в KLT литиевые диполи индуцируют сегнетоэлектрический фазовый переход для $x > 0.05$ и переходы дипольное стекло–сегнето-стекольная фаза для $x \leqslant 0.05$ при низких температурах $T < 50\,K$ [10]. Далее мы покажем, что в связи с большими флуктуациями поляризации в двух вышеуказанных фазах флуктуационные состояния автолокализованных носителей устойчивы и создают очень мелкие локальные состояния носителей в запрещенной зоне кристалла.

1. Общие уравнения

Функционал энергии флуктуона в приближении эффективной массы[1] для сильной связи с поляризацией диэлектрика с дипольными примесями может быть записан аналогично тому, как это сделал Пекар (см., например, [1]),

$$W = \frac{\hbar^2}{2m^*}\int |(\nabla\psi)^2| d^3r - \int \mathbf{PD} d^3r + \int f d^3r, \qquad (1)$$

где m^*, ψ и $\mathbf{D}$ — соответственно эффективная масса, волновая функция и индукция электрического поля носителя, $\mathbf{P}$ — поляризация, f — плотность свободной энергии неупорядоченного диэлектрика с дипольными примесями, полученная в [11]. Наиболее простое выражение для f получается в случае восьми возможных ориентаций примесного диполя (см. [11])

$$f = \frac{C}{2}(\nabla P)^2 + \frac{4\pi}{C_1}\left[\frac{1}{2}P^2 - \frac{d^{*2}}{V_0^2\beta} \times \int\limits_0^\infty \frac{\big(1-\cos(\rho P_1 E_0(\rho))\big)\exp(F_1(\rho))}{\mathrm{sh}(\pi\rho/2\beta)\rho E_0(\rho)} d\rho\right],$$

$$C_1 = (1/\varepsilon_\infty) - (1/\varepsilon_0), \qquad (2)$$

где $d^* = \gamma_0 d\varepsilon_0/3$ — эффективный дипольный момент примеси, γ_0 — фактор Лоренца, ε_0 и ε_∞ — низко- и

[1] Мы пренебрегаем анизотропией эффективной массы носителя, что не оказывает качественного влияния на свойства флуктуона.

высокочастотная диэлектрические проницаемости, функции $E_0(\rho)$ и $F_1(\rho)$ характеризуют соответственно среднее поле и полуширину функции распределения случайного электрического поля в системе [11], $P_1 = PV_0/d^*$, V_0 — объем элементарной ячейки, $\beta \equiv 1/kT$. Вектор $\mathbf{D}$ — индукция электрического поля носителя (электрона) (см. [1]). Она дается формулой

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = -e\int|\psi(\mathbf{r}_1)|^2\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|^3}\,d^3r_1. \tag{3}$$

Далее для определенности будем считать, что $\mathbf{P}$ и $\mathbf{D}$ направлены вдоль оси z, т.е. $\mathbf{P} = P\mathbf{i}_z$ и $\mathbf{D} = D\mathbf{i}_z$.

Выражение (1) с учетом (2) и (3) определяет статические свойства нашего флуктуона. Независимая вариация (1) по ψ и P дает следующие уравнения для структуры флуктуона[2]

$$-D|\psi| - C\Delta P + \frac{4\pi}{C_1}\Bigg[P - \frac{d^{*2}}{V_0^2\beta}\int\limits_0^\infty\frac{\sin(\rho P_1E_0(\rho))\exp(F_1(\rho))}{\operatorname{sh}(\pi\rho/2\beta)}d\rho\Bigg] = 0,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta\psi - eP(\psi)\int\psi(\mathbf{r}_1)\frac{(z-z_1)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|^3}d^3r_1 = 0. \tag{4}$$

Система (4) должна быть решена при дополнительном условии нормировки

$$\int|\psi|^2d^3r = 1. \tag{5}$$

Система интегродифференциальных уравнений в частных производных (4) является основным теоретическим результатом работы. Она очень сложна и имеет много классов решений; одно из них отвечает носителю локализованному на различных неоднородностях $\mathbf{P}$ типа доменных стенок. Многие физически важные заключения могут быть сделаны из анализа случая макроскопически однородной поляризации, т.е. когда $\Delta\mathbf{P} = 0$. В этом случае связь между $\mathbf{D}$ и $\mathbf{P}$ становится алгебраической, а не дифференциальной, так что мы имеем

$$D = \frac{4\pi}{C_1}\Bigg[P - \frac{d^{*2}}{V_0^2\beta}\int\limits_0^\infty\frac{\sin(\rho P_1E_0(\rho))\exp(F_1(\rho))}{\operatorname{sh}(\pi\rho/2\beta)\rho E_0(\rho)}d\rho\Bigg]. \tag{6}$$

Отметим, что при $P_1 = L$, т.е. в равновесии, выражение в скобках (6) равно нулю, так что $D = 0$ и флуктуон не существует. Это означает, что несмотря на пренебрежение членом, содержащим ΔP, флуктуон попрежнему существенно нелинейное явление. Более того, включение ΔP внесет только неоправданные усложнения, так как в неупорядоченных системах наиболее важные флуктуации возникают из-за беспорядка; они описываются уравнением (6).

[2] Здесь необходимо помнить, что для основного состояния флуктуона ψ есть действительная функция.

Система (4)–(6) остается достаточно общей. Она может быть применена к исследованию влияния носителей заряда на поляризацию в неупорядоченных диэлектриках. Это влияние оказывается важным в исследуемых веществах [12] и типично для сегнетоэлектриков — полупроводников [13]. Однако, данная система все еще слишком сложна, так что мы не смогли найти ее аналитического решения. Поэтому мы будем изучать свойства флуктуона прямым вариационным методом. Для этого мы должны подставить (6) в (1) с учетом (3) и минимизировать полученное выражение с учетом (5) с некоторой пробной функцией.

Для дальнейшего необходимо исследовать связь поляризации с индукцией, которая важна также и для описания диэлектрического гистерезиса в изучаемых системах в случае, когда D — индукция внешнего электрического поля. Перейдем к исследованию этого явления.

2. Диэлектрический гистерезис

В безразмерных переменных уравнение (6) имеет вид

$$\mathcal{D} = P_1 - 4\pi\nu\tau\int\limits_0^\infty\sin(2\pi P_1g_2(x))\frac{\exp(-2\pi\nu g_1(x))}{\operatorname{sh}(2\pi^2\nu\tau x)}dx, \tag{7}$$

где $\mathcal{D} = C_1V_0D/4\pi d^*$, $\nu = nr_c^3$, $\tau = T/T_{cMF}$, $k_BT_{cMF} = 4\pi nd^{*2}/3\varepsilon_0$, $x = \rho d^{*2}/\varepsilon_0r_c^3$, функции $g_1(x)$ и $g_2(x)$ связаны с функциями $F_1(\rho)$ и $E_0(\rho)$, записанными в безразмерных переменных. В приближении среднего поля (7) упрощается и может быть записано как

$$\mathcal{D} = P_1 - \operatorname{th}\left(\frac{P_1}{\tau_1}\right). \tag{8}$$

Зависимость $P_1(\mathcal{D})$ (8) показана на рис. 1 для различных τ. Видно, что эта зависимость имеет s-образную форму при $\tau < 1$ ($T < T_{cMF}$), т.е. в сегнетоэлектрической фазе. Ниже будет показано, что часть кривой $P_1(\mathcal{D})$, где $dP_1/d\mathcal{D} < 0$ отвечает максимуму энергии (а не минимуму как при $dP_1/d\mathcal{D} > 0$), т.е. неустойчивому флуктуону. Таким образом, в сегнетоэлектрической фазе зависимость P_1 от внешнего электрического поля (в нашем случае это электрическая индукция $\mathcal{D}$) имеет вид обычного гистерезиса. Ситуация качественно подобна и вне приближения среднего поля (рис. 1, b).

Отметим, что, если рассматривать $\mathcal{D}$ как функцию внешнего электрического поля, гистерезисные зависимости $P(E)$ могут быть использованы для описания экспериментально наблюдаемых петель диэлектрического гистерезиса в KTN и других виртуальных сегнетоэлектриках с дипольными примесями (см., например, [10,12,14,15]).

3. Неподвижный флуктуон

Зависимости $P_1(\mathcal{D})$ (рис. 1) позволяют сделать важное наблюдение: как "устойчивые", так и "неустойчивые" части гистерезисной кривой могут быть хорошо аппроксимированы прямыми линиями; максимальная ошибка имеет место вблизи точек, где $dP_1/d\mathcal{D} = 0$. Такое приближение не влияет на качественные результаты и в то же время позволяет достаточно легко проанализировать структуру флуктуона аналогично случаю полярона Пекара (см. [1]).

Аппроксимация прямыми линиями гистерезисной зависимости (7) может быть сделана разложением ее в ряд вблизи $P_1 = P_0$, $\mathcal{D}(P_0) = 0$ до первой степени по $\mathcal{D}$,

$$P_1 = P_0 + \frac{\mathcal{D}}{\Phi(\nu,\tau)}, \quad \Phi(\nu,\tau) = \left(\frac{dP_1}{d\mathcal{D}}\right)\Big|_{P=P_0}, \tag{9}$$

где P_0 определяется уравнением

$$P_0 = 4\pi\nu\tau \int\limits_0^\infty \sin(2\pi P_0 g_2(x)) \frac{\exp(-2\pi\nu g_1(x))}{\mathrm{sh}(2\pi^2\nu\tau x)} dx. \tag{10}$$

В явном виде

$$\Phi(\nu,\tau) = 1 - 8\pi^2\nu^2\tau$$
$$\times \int\limits_0^\infty x g_1(x) \cos\big(2\pi P_0 g_2(x)\big) \frac{\exp\big(-2\pi\nu g_1(x)\big)}{\mathrm{sh}(2\pi^2\nu\tau x)} dx. \tag{11}$$

Данное разложение для "устойчивой" части гистерезиса может быть легко сделано, если положить в (11) $P_0 = 0$.

Отметим, что в приближении среднего поля явные выражения для указанного разложения следующие:

$$P_1 = P_0 + \mathcal{D}\frac{\tau\,\mathrm{ch}^2 P_0/\tau}{\tau\,\mathrm{ch}^2 P_0/\tau - 1} \tag{12}$$

для "устойчивой" и

$$P_1 = \frac{\tau}{\tau - 1}\mathcal{D}$$

для "неустойчивой" частей гистерезиса.

С учетом (9)–(11) функционал энергии флуктуона принимает простой вид

$$W = \frac{\hbar^2}{2m^*}\int |(\nabla\psi)^2| d^3r - \frac{2\pi d^{*2}}{C_1 V_0^2(\nu,\tau)}\int \mathcal{D}^2 d^3r, \tag{13}$$

$\Phi(\nu,\tau)$ определяется (11). Можно видеть, что выражение (3) для $D = D_z$ для сферически-симметричной функции $\psi = \psi(r)$ может быть тождественно переписано в виде

$$D(\mathbf{r}) = 4\pi\cos\theta\frac{e}{r^2}\int\limits_0^r r_1^2|\psi(r_1)|^2 dr_1. \tag{14}$$

Для получения энергии основного состояния флуктуона выберем однопараметрическую пробную функцию в виде

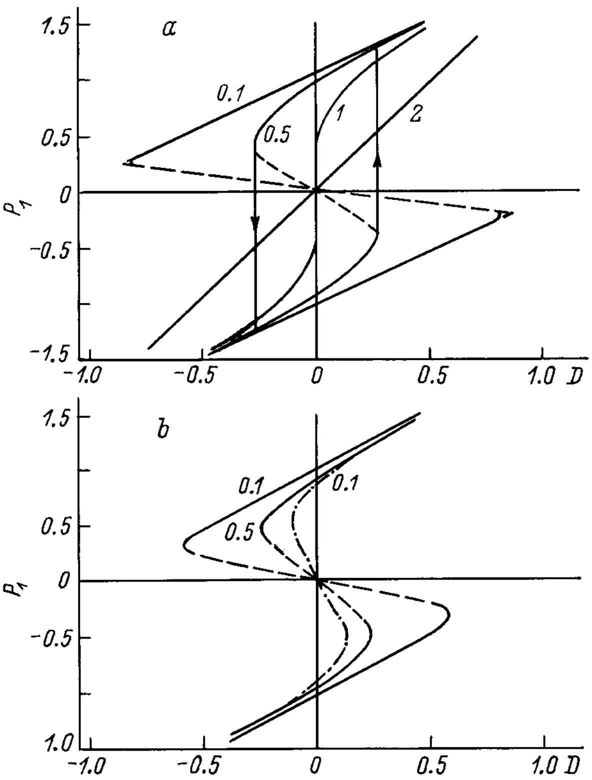

Рис. 1. Гистерезисная зависимость $P_1(\mathcal{D})$. Числа у кривых соответствуют значениям τ. a — приближение среднего поля: штриховые линии отвечают "неустойчивой" части гистерезисной кривой, а также ее аппроксимации прямыми линиями, вертикальные линии со стрелками показывают движение по кривой гистерезиса; b — вне приближения среднего поля: $nv_c^3 = 1$ (сплошные линии) и 0.05 (штрих–пунктирные линии).

Пекара (см. [1]). Такой выбор обусловлен тем, что эта функция дает низшую энергию основного состояния по сравнению со всеми другими однопараметрическими пробными функциями. Она имеет вид

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{7\pi}r_0^{3/2}}\left(1 + \frac{r}{r_0}\right)\exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \tag{15}$$

где r_0 — вариационный параметр.

Подстановка (14) и (15) в (13) дает

$$W_\psi = \frac{3\hbar^2}{14m^* r_0^2} - 0.428332\frac{e^2 C_1}{6\Phi(\nu,\tau) r_0}. \tag{16}$$

Легко показать, что для "неустойчивой" части гистерезиса энергия W_ψ имеет максимум (рис. 2), в то время как для "устойчивой" она имеет минимум, так что

$$r_{\min} = \frac{6\hbar^2\Phi(\nu,\tau)}{m^* e^2 C_1},$$

$$W_{\min} = -0.0054946\frac{m^* e^4 C_1^2}{\hbar^2\Phi^2(\nu,\tau)}. \tag{17}$$

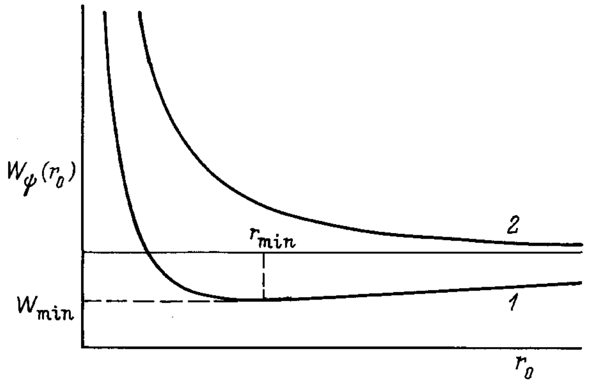

Рис. 2. Схематическая зависимость $W_\psi(r_0)$ (16) на "устойчивой" (*1*) и "неустойчивой" (*2*) частях гистерезисной кривой.

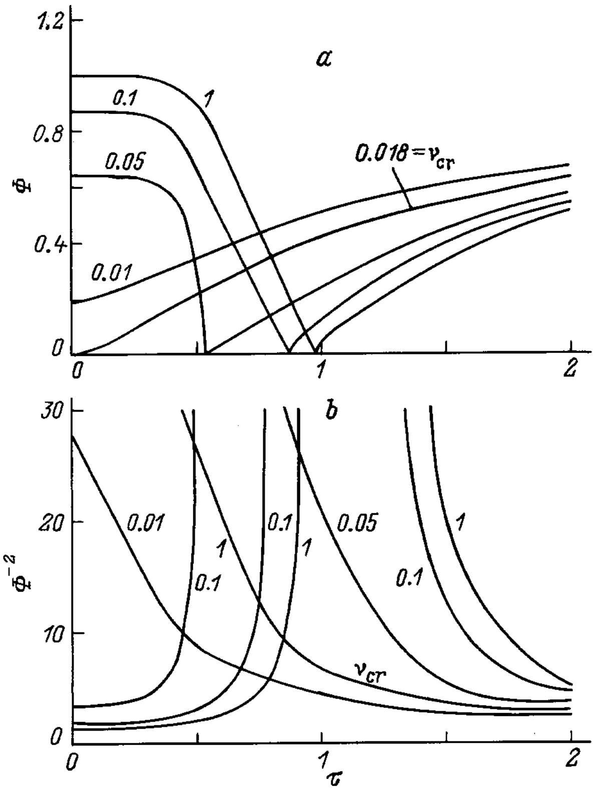

Рис. 3. Безразмерный радиус локализации Φ (*a*) и абсолютное значение энергии основного состояния флуктуона Φ^{-2} (*b*) как функции безразмерной температуры τ. Числа около кривых отвечают значениям nr_c^3.

Зависимости $\Phi(\nu,\tau)$ (безразмерный радиус локализации) и $1/\Phi^2$ (абсолютное значение безразмерной энергии основного состояния) показаны для различных ν на рис. 3 для параэлектрической, сегнетоэлектрической и фазы дипольного стекла в неупорядоченном сегнетоэлектрике (о фазовой диаграмме см., например, [11,15]). Видно, что в сегнетоэлектрической фазе радиус локализации имеет температурную зависимость, качественно подобную спонтанной поляризации. Это типичное проявление флуктуонной (а не поляронной) природы локализации носителя в неупорядоченных сегнетоэлектриках. Действительно, рост спонтанной поляризации с уменьшением температуры означает подавление флуктуаций, что в свою очередь уменьшает вероятность образования флуктуона. Это же поведение следует из (17) и рис. 3, так как $|W_{\min}| \propto 1/r_{\min}^2$. Точки, где $\Phi(\nu,\tau) = 0$, отвечают температуре сегнетоэлектрического фазового перехода [11]. В этих точках $r_{\min} \to 0$, а $W_{\min} \to -\infty$. Это означает, что в точке фазового перехода флуктуон коллапсирует, а в пара- и сегнетоэлектрической фазе он имеет конечный радиус. В параэлекрической фазе спонтанная поляризация отсутствует и локализация носителя обусловлена как флуктуациями поляризации, индуцированными случайными электрическими полями, так и обычным поляронным эффектом. В пределе $\nu \to 0$ носитель локализуется только из-за поляронного эффекта. Это следует из уравнений (9) и (16), где при $\tau \to \infty$ и/или $\nu \to 0$ оказывается, что $\Phi = 1$ и мы получаем случай полярона Пекара [1].

Поскольку асимптотика $\nu \to 0$ также справедлива для фазы дипольного стекла, которая реализуется при $\nu < \nu_{\mathrm{cr}} \approx 0.0184$ [11], здесь мы снова имеет полярон Пекара. Однако при $\nu \propto \nu_{\mathrm{cr}}^-$ и низких температурах поляронный вклад существен также и для состояния дипольного стекла.

4. Эффективная масса и подвижность флуктуона

Эффективная масса флуктуона, как обычно, может быть вычислена из его энергии при движении с малыми скоростями. Поскольку флуктуон связан с примесной подсистемой, его движение будет носить диссипативный характер.

Уравнения движения флуктуона могут быть легко получены с помощью свободной энергии (2) как уравнения Ландау–Халатникова

$$\frac{dP_1}{dt} = -\Gamma\frac{\delta F}{\delta P_1}, \tag{18}$$

где F — свободная энергия (2), взятая при $C = 0$, Γ — кинетический коэффициент, связанный со временем релаксации поляризации [16].

Явный вид уравнения (18) следующий:

$$\frac{dP_1}{dt} = \Gamma\frac{4\pi d^{*2}}{C_1V_0^2}\Bigg[\mathcal{D} - P_1 + \int\limits_0^\infty \sin(2\pi P_1 g_2(x))\frac{\exp(-2\pi\nu g_1(x))}{\operatorname{sh}(2\pi^2\nu\tau x)}dx\Bigg]. \tag{19}$$

Процедура линеаризации вблизи P_0 может быть применена и к (19). Полагая $P = P_0 + \delta P$, получим

$$\frac{d\delta P}{dt} = -\Gamma\frac{4\pi d^{*2}}{C_1V_0^2}\left[-\mathcal{D} + \Phi\delta P\right], \tag{20}$$

где Φ определено (11). Решение (20) имеет вид

$$P_1 - P_0 = \gamma \exp(-\gamma\Phi t) \int\limits_{-\infty}^{t} \mathcal{D}(t_1) \exp(\gamma\Phi t_1) dt_1,$$

$$\gamma = \Gamma \frac{4\pi d^{*2}}{C_1 V_0^2}. \tag{21}$$

Это решение справедливо при произвольных скоростях флуктуона. Исследование движения флуктуона с произвольными скоростями (например во внешнем электрическом поле) интересно с точки зрения описания кинетических явлений (таких как фотопроводимость [9]) в исследуемых веществах. Такое исследование может быть сделано аналогично работе Давыдова и Энольского [17] для полярона Пекара. Мы же ограничимся изучением движения флуктуона с малыми скоростями.

Пусть флуктуон движется вдоль оси x. В этом случае $\mathcal{D} = \mathcal{D}(x - vt, y, z)$, v — скорость. При малых v из (21) получим

$$P_1(\xi, y, z) - P_0 \simeq \frac{1}{\Phi}\left(\mathcal{D} + \zeta\left(\frac{\partial\mathcal{D}}{d\xi}\right) + \zeta\left(\frac{\partial^2\mathcal{D}}{\partial\xi^2}\right) + \dots\right),$$

$$\xi = x - vt, \quad \zeta = \frac{v}{\gamma\Phi}. \tag{22}$$

Для получения (22) из (21) мы положили в (21) $t - t_1 = t_2$ и разложили результирующее выражение по t_2 с учетом $\partial/\partial t = -v\partial/\partial\xi$.

Из (22) следует, что при $v = 0$ мы имеем результат (9) для покоящегося флуктуона. Подстановка (20) в (1) после несложных преобразований дает следующее выражение для энергии флуктуона, двигающегося с малыми скоростями

$$W_v = \frac{\hbar^2}{2m^*} \int |(\nabla\psi)^2| d^3r - \frac{2\pi d^{*2}}{C_1 V_0^2}\left[\frac{1}{\Phi(\nu, \tau)} \int \mathcal{D}^2 d^3r - \frac{u^2}{\gamma^2\Phi^3} \int \left(\frac{\partial\mathcal{D}}{\partial x}\right)^2 d^3r\right]. \tag{23}$$

Следующий шаг, как обычно, подстановка в (23) $\psi_v = \psi_0 + v^2\psi_1$ и нахождение коэффициента коэффициента при v^2 в энергии W_v. Это дает

$$\mathcal{M} = \frac{C_1 V_0^2}{4\pi d^{*2}\Gamma^2\Phi^3} \int \left(\frac{\partial\mathcal{D}}{\partial x}\right)^2 d^3r, \tag{24}$$

где $\mathcal{M}$ — искомая эффективная масса флуктуона. Для ее расчета достаточно использовать волновую функцию ψ_0 покоящегося полярона (15) (см., например, [1,18]).

В пределе малых скоростей флуктуона его подвижность также может быть рассчитана. Можно показать, что во внешнем электрическом поле $\mathcal{E}$ (предположим, что оно направлено по оси x) уравнение движения флуктуона имеет вид

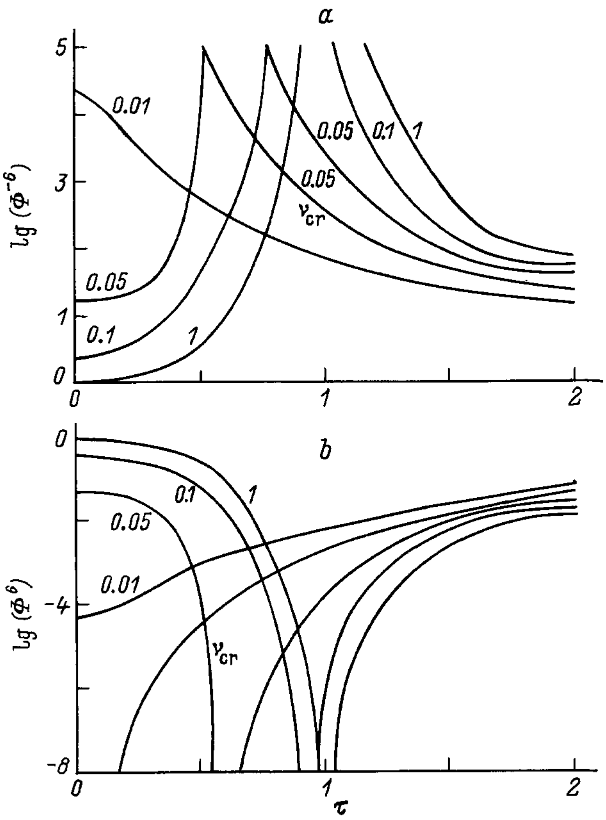

Рис. 4. Безразмерная эффективная масса флуктуона Φ^{-6} (a) и подвижность Φ^6 (b) как функции безразмерной температуры τ. Числа около кривых отвечают значениям nr_c^3.

$$e\mathcal{E}v = \frac{dW_t}{dt}, \tag{25}$$

где W_t — энергия движущегося флуктуона. При малых v $dW_t/dt \simeq W_t/\tau_0$, где τ_0 — время релаксации поляризации. Так как при малых v $W_t - W_0 \simeq \mathcal{M}v^2/2$, где W_0 — энергия покоящегося флуктуона, $\mathcal{M}$ — эффективная масса (24), для подвижности $\mu = v/\mathcal{E}$ получим

$$\mu = \frac{2e\tau_0}{\mathcal{M}}. \tag{26}$$

Выражение (26) для подвижности флуктуона формально тождественно формуле для подвижности зонного носителя в полупроводнике (см., например, [19]). Из него следует, что при малых скоростях подвижность флуктуона обратно пропорциональна его эффективной массе.

Подстановка пробной функции (15) в (24) с учетом (14) и (17) дает

$$\mathcal{M} = 2.719 \cdot 10^{-7} \frac{C_1^6 V_0^4 e^8 m^{*3}}{\Gamma^2 d^{*4}\hbar^6} \frac{1}{\Phi_6}(g). \tag{27}$$

Безразмерные эффективная масса и подвижность флуктуона показаны на рис. 4, a и b соответственно.

Видно, что в точках фазового перехода эффективная масса становится бесконечно большой, а подвижность обращается в нуль. Это означает, что в точках фазового перехода флуктуонный вклад в подвижность полностью исчезает. Максимальный флуктуационный вклад имеет место, как это видно, при $T = 0$ в сегнетоэлектрической фазе. Это означает, что тепловые и пространственные флуктуации в примесной подсистеме подавляют флуктуонный вклад в проводимость.

Отметим, что температурное и концентрационное поведение подвижности качественно подобно поведению радиуса локализации (сравни рис. $3, a$ и $4, b$), так что все обсуждавшиеся выше эффекты проявляются также и в подвижности.

Сделаем некоторые численные оценки. К сожалению, экспериментальные данные (см. [10,14,15] и ссылки там) для неупорядочения диэлектриков недостаточны для более-менее точного расчета параметров флуктуона. Поэтому здесь мы ограничимся лишь порядковыми оценками. Из (17) имеем

$$r_{\min} = 3.18\frac{\Phi}{\alpha C_1},\ \text{Å},\quad W_{\min} = -0.16\frac{\alpha C_1^2}{\Phi^2},\ \text{eV},\qquad (28)$$

где $\alpha = m^*/m_0$, m_0 — масса свободного электрона. Для справедливости использованного приближения эффективной массы необходимо, чтобы $r_{\min}$ было достаточно большим, $r_{\min}/a \geqslant 3{-}4$, где $a \simeq 4\,\text{Å}$ — постоянная решетки $KTaO_3$. Полагая в (28) $r_{\min} = 3a$, получим $\Phi/\alpha C_1 \simeq 3.8$, что дает

$$W_{\min} \simeq -\frac{0.01}{\alpha},\ \text{eV}.$$

Известно, что приближение эффективной массы хорошо выполняется для $|W_{\min}| \leqslant 0.01\,\text{eV}$. В этом случае $\alpha \sim 1$, т.е. для существования флуктуона "затравочный" носитель должен быть тяжелым. Это заключение, однако ограничено использованным приближением эффективной массы[3].

Оценки эффективной массы и подвижности также оказываются очень грубыми из-за отсутствия достоверных значений Γ. Взяв $\Gamma \sim V_0/W_{\min}\tau_0$, получим оценку $\mathcal{M} \sim 10^3 m_0$. Эта оценка делает флуктуонный вклад в проводимость очень малым, но необходимо помнить, что более точные значения Γ и m^* могут изменить это значение на порядки.

Работа была выполнена при частичной финансовой поддержке Международной соросовской программы поддержки просвещения в области точных наук (ISSEP) (грант N SPU072012).

[3] Наш метод позволяет выйти за рамки приближения эффективной массы. В этом случае периодический потенциал решетки кристалла-матрицы должен быть включен во флуктуонный функционал (1).

Список литературы

[1] С.И. Пекар. Собрание трудов. Наук. думка, Киев (1987). 380 с.
[2] М.А. Кривоглаз. УФН **16**, 856 (1974).
[3] М.И. Клингер. УФН **28**, 391 (1985).
[4] Ю.А. Фирсов. Поляроны. Наука, М. (1975).
[5] Б.В. Егоров, И.Б. Егорова, М.А. Кривоглаз. ФТТ **26**, *7*, 1874 (1984).
[6] M.D. Glinchuk, R. Farhi. J. Phys.: Condens. Matter. **8**, 6985 (1996).
[7] А.И. Лебедев, И.А. Случинская. ФТТ **35**, *3*, 629 (1993).
[8] K. Woicik, J. Blaszczak, J. Handerek. Ferroelectrics **70**, 3946 (1986).
[9] R.S. Klein, G.E. Kugel, M.D. Glinchuk, R.O. Kuzian, I.V. Kondakova. Phys. Rev. **B50**, *8*, 9721 (1994).
[10] B.E. Vugmeister, M.D. Glinchuk. Rev. Mod. Phys. **62**, *4*, 993 (1990).
[11] V.A. Stephanovich. Ferroelectrics **192**, *1–4*, 29 (1997).
[12] Б.Е. Вугмейстер, М.Д. Глинчук. УФН **28**, *7*, 459 (1985).
[13] В.М. Фридкин. Сегнетоэлектрики-полупроводники. Высш. шк., М. (1976). 257 с.
[14] W. Kleemann. Int. J. Mod. Phys. **B7**, *13*, 2469 (1993).
[15] U.T. Hochli, K. Knorr, A. Loidl. Adv. Phys. **39**, *5*, 405 (1990).
[16] R. Blinc, B. Zeks. Soft modes in ferroelectrics and antiferroelectrics. North-Holland (1974). 342 p.
[17] А.С. Давыдов, В.З. Энольский. ЖЭТФ **81**, *10*, 1088 (1981).
[18] Ю.Г. Семенов, В.А. Стефанович. ЖЭТФ **101**, *3*, 1024 (1992).
[19] А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников. Наука, М. (1978). 832 с.