

СИСТЕМА ПАЙЕРЛСА В СВЕТОВОМ ПОЛЕ

А. Л. Семенов

Ульяновский филиал Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова
432700, Ульяновск, Россия

Поступила в редакцию 4 апреля 1996 г.

Исследуется поведение низкотемпературной фазы системы Пайерлса в квазимонохроматическом стационарном случайном световом поле, частота которого меньше частоты нижнего края межзонного перехода. Методом матрицы плотности в дипольном приближении получены уравнения для ширины запрещенной зоны. Найдена зависимость ширины запрещенной зоны от интенсивности светового поля в приближении низкой концентрации неравновесных электронов в зоне проводимости. Показана возможность и определены условия возникновения светоиндуцированного фазового перехода полупроводник–полупроводник и безрезонантной оптической бистабильности при нарастающем поглощении.

1. ВВЕДЕНИЕ

Система Пайерлса представляет собой одномерную цепочку атомов, на каждом из которых находится по одному внешнему электрону. В высокотемпературной металлической фазе атомы в цепочке расположены эквидистантно, а электронная зона проводимости заполнена наполовину. При охлаждении, когда температура достигает некоторого критического значения T_0 , металлическая фаза становится неустойчивой, и происходит фазовый переход металл–полупроводник. Атомы в цепочке при этом парно сближаются [1].

Теоретические результаты, полученные на основе модели Пайерлса, используются для описания экспериментально наблюдаемых свойств целого ряда квазиодномерных материалов: комплексных соединений платины [1], соединений $m\text{-TaS}_3$ [2], органических проводников [3], оксидных ванадиевых бронз [4, 5] и др. [6, 7]. В частности, в рамках этой модели удается объяснить влияние на переход металл–полупроводник в пленке диоксида ванадия таких факторов, как одноосное давление [8], легирование [9–11], сцепление пленки VO_2 с подложкой [12], адсорбция и т. д. [13].

Поведение низкотемпературной фазы системы Пайерлса в световом поле, частота которого превышает частоту нижнего края межзонного перехода, изучалось теоретически [14] и экспериментально (в диоксиде ванадия) [15, 16]. Было показано, что за счет сильного электрон–фононного взаимодействия при облучении происходит уменьшение ширины запрещенной зоны, а в сильных полях реализуется фазовый переход полупроводник–металл. Данный результат основывается на том факте, что рост концентрации электронов проводимости приводит к сужению запрещенной зоны системы Пайерлса [6].

В настоящей работе исследуется поведение низкотемпературной фазы системы Пайерлса в квазимонохроматическом световом поле, частота которого несколько меньше частоты нижнего края межзонного перехода. Конечная ширина оптического спектра

светового поля тем не менее позволяет происходить процессам переброса электронов из валентной зоны в зону проводимости. В таких условиях в системе при увеличении интенсивности облучения возможно скачкообразное уменьшение ширины запрещенной зоны (светоиндуцированный фазовый переход полупроводник–полупроводник). Это связано с появлением положительной обратной связи. Первоначально нерезонансное световое поле вызывает незначительное уменьшение ширины запрещенной зоны. В результате электрон-фотонное взаимодействие становится более резонансным и, следовательно, более интенсивным, что, в свою очередь, ведет к дальнейшему уменьшению ширины запрещенной зоны. Таким образом, положительная обратная связь снижает устойчивость системы. В случае же, когда она становится достаточно сильной, устойчивость теряется и происходит скачкообразный переход в новое состояние равновесия (фазовый переход).

Итак, в модели Пайерлса благодаря сильному взаимодействию электронной подсистемы со статической фоновой модой [8] реализуется один из механизмов, вызывающих безрезонаторную оптическую бистабильность при нарастающем поглощении [17]. Данный тип бистабильности в общем случае обусловлен нелинейной зависимостью коэффициента поглощения от интенсивности падающего излучения и может быть вызван различными причинами [17]: атомными корреляциями в малом объеме; температурной зависимостью ширины запрещенной зоны; перенормировкой ширины запрещенной зоны за счет экситон-экситонного взаимодействия [17, 18]; изменением частоты перехода в ансамбле двухуровневых атомов, обусловленным эффектами локального поля или электрон-фононным взаимодействием [19]. Однако предлагаемый в настоящей работе механизм безрезонаторной оптической бистабильности в системе Пайерлса, насколько известно автору, еще не рассматривался.

2. ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР СИСТЕМЫ

Рассмотрим цепочку атомов, на каждом из которых находится по одному внешнему электрону. Гамильтониан электронной подсистемы в приближении сильной связи запишем в виде [1]

$$H = \sum_n B_{n,n+1} (a_n^+ a_{n+1} + a_{n+1}^+ a_n), \quad (1)$$

где n — номер атома в цепочке; $B_{n,n+1}$ — интеграл перекрытия волновых функций соседних атомов; a_n^+ и a_n — операторы рождения и уничтожения электрона на n -м атоме.

Для узкозонных систем, в частности для модели Пайерлса, расстояния $r_{n,n+1}$ между соседними атомами в несколько раз превышают эффективный радиус R атомной волновой функции электрона. В этом случае $B_{n,n+1} \propto \exp(-r_{n,n+1}/R)$ [20]. Расстояние $r_{n,n+1}$ запишем в форме:

$$r_{n,n+1} = r_0 + (-1)^{n+1} R\xi, \quad (2)$$

где r_0 — межатомное расстояние в металлической фазе, ξ — параметр удвоения периода одномерного кристалла. С учетом (2) интеграл перекрытия $B_{n,n+1}$ принимает вид

$$B_{n,n+1} = b \exp((-1)^n \xi), \quad (3)$$

где b — интеграл перекрытия в металлической фазе ($\xi = 0$). Фазы атомных волновых функций при записи гамильтониана (1) выбираются таким образом, что b в (3) является действительной величиной.

Для диагонализации гамильтониана (1) воспользуемся методом канонических преобразований Боголюбова [21]. Перейдем к коллективным фермиевским операторам вторичного квантования c_k, c_k^\dagger по формуле

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikn}, \tag{4}$$

где N — число атомов в цепочке; $k = 0, \pm 2\pi/N, \dots, \pm\pi$; $c_{k+2\pi} = c_k$.

В новом операторном представлении гамильтониан (1) принимает вид

$$H = \sum_k 2b (c_k^\dagger c_k \operatorname{ch} \xi \cos k + i c_k^\dagger c_{k-\pi} \operatorname{sh} \xi \sin k). \tag{5}$$

Выполним в (5) каноническое преобразование к фермиевским операторам $\alpha_k, \alpha_k^\dagger$:

$$c_k = \frac{\alpha_k + i\varphi_k \alpha_{k-\pi}}{\sqrt{1 + \varphi_k^2}}. \tag{6}$$

Функция φ_k подбирается таким образом, чтобы получившийся гамильтониан в новых переменных $\alpha_k, \alpha_k^\dagger$ имел диагональный вид:

$$H = \sum_k \varepsilon_k \alpha_k^\dagger \alpha_k. \tag{7}$$

Подставляя (6) в (5) и приравнявая нулю недиагональные элементы, находим φ_k и закон дисперсии ε_k :

$$\varphi_k = \frac{\operatorname{ch} \xi \cos k - \operatorname{sign}(\cos k) \sqrt{\cos^2 k + \operatorname{sh}^2 \xi}}{\operatorname{sh} \xi \sin k}, \tag{8}$$

$$\varepsilon_k = 2b \operatorname{sign}(\cos k) \sqrt{\cos^2 k + \operatorname{sh}^2 \xi}. \tag{9}$$

Из соотношения (9) видно, что спектр ε_k при $\xi \neq 0$ имеет две зоны, нижняя из которых в основном состоянии полностью заполнена, а верхняя пустая (полупроводниковая фаза). При $\xi = 0$ спектр (9) представляет собой одну наполовину заполненную зону (металлическая фаза).

3. ОПЕРАТОР ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА

Оператор дипольного момента системы Пайерлса в приближении сильной связи определяется соотношением

$$\mathbf{d} = \sum_n (\mathbf{d}_{n,n+1} a_n^\dagger a_{n+1} + \mathbf{d}_{n,n+1}^* a_{n+1}^\dagger a_n), \tag{10}$$

где зависимость $\mathbf{d}_{n,n+1}$ от ξ аналогична соотношению (3):

$$\mathbf{d}_{n,n+1} = (\mathbf{d}_1 + i\mathbf{d}_2) \exp[(-1)^n \xi] = -e \int_V \psi_n^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_{n+1}(\mathbf{r}) dV. \quad (11)$$

Здесь $\psi_n(\mathbf{r})$ — атомная волновая функция электрона, находящегося на n -м узле; e — заряд электрона. Выбор фаз волновых функций $\psi_n(\mathbf{r})$, обеспечивающий реальность интеграла перекрытия (3), однозначно определяет \mathbf{d}_1 и \mathbf{d}_2 в (11).

Подставляя (4) в (10), с учетом (11) и тождества $\exp[(-1)^n \xi] = \text{ch } \xi + (-1)^n \text{sh } \xi$ находим

$$\mathbf{d} = 2 \sum_k \left[\text{ch } \xi (\mathbf{d}_1 \cos k - \mathbf{d}_2 \sin k) c_k^+ c_k + i \text{sh } \xi (\mathbf{d}_1 \sin k + \mathbf{d}_2 \cos k) c_k^+ c_{k-\pi} \right]. \quad (12)$$

Переходя в (12) к фермиевским операторам α_k, α_k^+ , с учетом (6), (8) окончательно получаем

$$\mathbf{d} = \sum_k \left\{ \left[\frac{\mathbf{d}_1 \varepsilon_k}{b} - \frac{2\mathbf{d}_2}{1 + \varphi_k^2} \left[(1 - \varphi_k^2) \text{ch } \xi \sin k + 2\varphi_k \text{sh } \xi \cos k \right] \right] \alpha_k^+ \alpha_k + \right. \\ \left. + i \frac{2\mathbf{d}_2}{1 + \varphi_k^2} \left[(1 - \varphi_k^2) \text{sh } \xi \cos k - 2\varphi_k \text{ch } \xi \sin k \right] \alpha_k^+ \alpha_{k-\pi} \right\}. \quad (13)$$

Следует отметить формальное сходство операторов (1) и (10) при $\mathbf{d}_2 = 0$. Аналогичное сходство поэтому имеют и операторы (7) и (13).

Пусть в отсутствие внешнего электрического поля суммарный дипольный момент системы равен нулю. Тогда из (13), (9) следует, что $\mathbf{d}_1 = 0$. Таким образом, выбор фаз волновых функций $\psi_n(\mathbf{r})$, при котором интеграл $B_{n,n+1}$ в (1) является действительной величиной, в рассматриваемом случае обеспечивает мнимость межузельного матричного элемента дипольного момента $\mathbf{d}_{n,n+1}$ в (10). Случай $\mathbf{d}_1 \neq 0$, по-видимому, может быть реализован в системах, обладающих сегнетоэлектрическими свойствами. Такие системы в данной работе не рассматриваются. При $\xi \rightarrow 0$, как видно из (8), $\varphi_k \rightarrow 0$ для всех $k \neq \pm\pi/2$. Поэтому в (13) $\mathbf{d}_{k,k-\pi} \rightarrow 0$ и все дипольные переходы запрещены. Если $\xi \neq 0$, то в (13) $\mathbf{d}_{k,k-\pi} \neq 0$ и соответствующие дипольные переходы разрешены. Поскольку в этом случае первой зоной Бриллюэна является область $k \in [-\pi/2, \pi/2]$, то данные переходы оказываются вертикальными межзонными в спектре (9).

4. УРАВНЕНИЕ РАВНОВЕСИЯ

При описании поведения системы Пайерлса в световом поле будем предполагать, что время внутризонной релаксации электронов много меньше времени межзонной релаксации τ [22]. В этом случае, следуя принятому в [14, 23] приближению, можно считать, что в каждой зоне статистика электронов описывается распределением Ферми со своим квазиуровнем Ферми. Тогда с учетом (9) получаем соотношение для разности населенностей Δ валентной зоны и зоны проводимости в световом поле:

$$\Delta = 2 \sum_{|k| \leq \pi/2} \Delta_k = 2 \sum_{|k| \leq \pi/2} \text{th} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T} \right). \quad (14)$$

Здесь μ — квазиуровень Ферми зоны проводимости (квазиуровень Ферми валентной зоны в силу симметрии закона дисперсии (9) имеет противоположное значение), k_B — постоянная Больцмана, $\Delta_k = \rho_{k-\pi, k-\pi} - \rho_{k, k}$, $\rho_{k, k}$ — элемент матрицы плотности ρ электронной подсистемы. Коэффициент 2 перед суммой в (14) обусловлен спиновым вырождением каждого уровня.

Рассматривая параметр ξ в качестве обобщенной координаты, запишем уравнение равновесия системы Пайерлса:

$$\left(\frac{\partial F_1}{\partial \xi}\right)_{T, N_1} + \left(\frac{\partial F_2}{\partial \xi}\right)_{T, N_2} + \left(\frac{\partial F_{ph}}{\partial \xi}\right)_T = 0, \tag{15}$$

где

$$F_j = \mu_j N_j - k_B T \sum_k \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu_j - \varepsilon_k}{k_B T} \right) \right], \quad F_{ph} = \frac{A}{2} \xi^2, \tag{16}$$

F_j , μ_j , N_j — соответственно свободная энергия электронов, квазиуровень Ферми и число электронов j -й зоны ($j = 1, 2$), A — коэффициент разложения свободной энергии F_{ph} фоновой подсистемы по параметру ξ [1]. Суммирование по k в (16) идет в пределах j -й зоны спектра (9).

Подставляя (16) в (15) и преобразуя, окончательно получаем

$$-2 \sum_{|k| \leq \pi/2} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \xi} \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T} \right) + A \xi = 0. \tag{17}$$

Коэффициент разложения A выражается через критическую температуру T_0 термодинамически равновесного (в отсутствие светового поля) перехода металл-полупроводник и другие характеристики системы [8, 11]. Условием такого перехода является потеря устойчивости металлической фазы ($\partial^2 F(T_0, \xi = 0) / \partial \xi^2 = 0$, где F — свободная энергия системы). В отсутствие светового поля квазиуровни Ферми валентной зоны и зоны проводимости спектра (9) равны нулю: $\mu_{1,2} = \mp \mu = 0$. Отсюда с учетом (17), (9) имеем

$$A = 2 \sum_{|k| \leq \pi/2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial \xi^2} \operatorname{th} \frac{\varepsilon_k}{2k_B T_0} \right)_{\xi=0}. \tag{18}$$

Вычисляя сумму в (18), приближенно получаем

$$A = \frac{4bN}{\pi} \left[\ln \left(\frac{\pi b}{2k_B T_0} \right) + 1 \right]. \tag{19}$$

Таким образом, мы получили уравнение (14), выражающее зависимость разности населенностей Δ от квазиуровня Ферми μ , и уравнение равновесия (17), описывающее связь между параметром ξ системы Пайерлса и μ . В свою очередь, квазиуровень Ферми μ определяется степенью светового воздействия на систему. Уравнение, описывающее это воздействие, должно зависеть от конкретного механизма взаимодействия излучения с электронной подсистемой.

5. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ИЗЛУЧЕНИЕМ

Взаимодействие системы со световым полем будем описывать оператором V , который в дипольном приближении имеет вид

$$V = -\mathbf{d}\mathbf{E}(t) = -\mathbf{d} \int \mathbf{E}_\omega e^{-i\omega t} d\omega, \quad (20)$$

где \mathbf{E}_ω и ω — соответственно амплитуда и частота спектральной компоненты светового поля.

Рассмотрим случай, когда падающее излучение $\mathbf{E}(t)$ является линейно поляризованным вдоль оси кристалла квазимонохроматическим стационарным случайным процессом [24]. Тогда все спектральные компоненты \mathbf{E}_ω статистически независимы [24, 25]:

$$\langle \mathbf{E}_\omega \mathbf{E}_{\omega_1} \rangle = G(\omega) \delta(\omega + \omega_1). \quad (21)$$

Здесь $G(\omega)$ — спектральная плотность светового поля, которая для квазимонохроматического сигнала может быть представлена в следующем виде [24]:

$$G(\omega) = I g(|\omega| - \omega_0), \quad (22)$$

где ω_0 — несущая частота; $g(x)$ — функция колоколообразной формы с максимумом в точке $x = 0$, удовлетворяющая условию нормировки $\int g(x) dx = 1$. Ширина $\Delta\omega$ спектра $G(\omega)$ удовлетворяет неравенству $\Delta\omega \ll \omega_0$. Величина $I = \int G(\omega) d\omega / 2$ характеризует интенсивность светового поля (в гауссовой системе с точностью до множителя $cn/2\pi$, где c — скорость света, n — показатель преломления среды).

Используя уравнение Лиувилля [26]

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H + V, \rho], \quad (23)$$

с учетом (20), (21) находим уравнение для диагональных элементов ρ_{kk} матрицы плотности ρ электронной подсистемы во втором порядке теории возмущений:

$$\frac{\partial \rho_{kk}}{\partial t} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_s |\mathbf{d}_{ks}|^2 G\left(\frac{\varepsilon_s - \varepsilon_k}{\hbar}\right) (\rho_{ss} - \rho_{kk}), \quad (24)$$

где \mathbf{d}_{ks} — матричный элемент оператора дипольного момента (13). В частном случае монохроматического светового поля $E(t) = E_0 \cos(\omega_0 t + \varphi)$ с равномерно распределенной случайной фазой φ спектральная плотность

$$G(\omega) = \frac{1}{4} E_0^2 [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)].$$

Тогда уравнение (24) переходит в хорошо известное золотое правило Ферми для вероятности вынужденных переходов [25].

С учетом (13), (9) из (24) получаем

$$\frac{\partial \rho_{kk}}{\partial t} = \frac{2\pi}{\hbar^2} d_k^2 G\left(\frac{2\varepsilon_k}{\hbar}\right) \Delta_k, \quad (25)$$

где

$$d_k = \frac{2d_2}{1 + \varphi_k^2} |(1 - \varphi_k^2) \operatorname{sh} \xi \cos k - 2\varphi_k \operatorname{ch} \xi \sin k|. \quad (26)$$

Используя (14) и справедливое в силу симметрии электронного спектра (9) соотношение $\rho_{k,k} + \rho_{k-\pi,k-\pi} = 1$, из (25) находим кинетическое уравнение для разности населенностей Δ :

$$\frac{\partial \Delta}{\partial t} = -\frac{8\pi}{\hbar^2} \sum_{|k| \leq \pi/2} d_k^2 \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T} \right) G \left(\frac{2\varepsilon_k}{\hbar} \right) - \frac{\Delta - \Delta_0}{\tau}, \quad (27)$$

где Δ_0 — разность населенностей зон в отсутствие светового поля: $\Delta_0 = \Delta(\mu = 0)$. Последнее слагаемое в (27) учитывает межзонную релаксацию с временем релаксации τ . Уравнение (27) показывает, что изменение разности населенностей Δ обусловлено взаимодействием электронной подсистемы со спектральными компонентами светового поля, имеющими частоты $\omega_k = 2\varepsilon_k/\hbar$.

Учитывая (22), из уравнения (27) для стационарного режима ($\partial \Delta / \partial t = 0$) окончательно получаем

$$I = \frac{(\Delta_0 - \Delta)\hbar^2}{8\pi\tau} \left(\sum_{|k| \leq \pi/2} d_k^2 \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T} \right) g \left(\frac{2\varepsilon_k}{\hbar} - \omega_0 \right) \right)^{-1}. \quad (28)$$

Уравнения (14), (17), (28) образуют замкнутую систему относительно внутренних параметров μ , Δ , ξ системы Пайерлса при заданных внешних параметрах T , I , ω_0 и т. д.

6. СВЯЗЬ МЕЖДУ ШИРИНОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ И ИНТЕНСИВНОСТЬЮ СВЕТОВОГО ПОЛЯ

Проведем анализ уравнений (14), (17), (28) для случая, когда частота света меньше частоты нижнего края межзонного перехода: $\varepsilon_0 - \hbar\omega_0 > 0$, где ε_0 — ширина запрещенной зоны системы в отсутствие светового поля.

Световое воздействие будем считать достаточно слабым, чтобы выполнялось условие

$$\frac{\varepsilon/2 - \mu}{k_B T} > 2. \quad (29)$$

Здесь ε — ширина запрещенной зоны. С физической точки зрения (29) означает, что 1) $4k_B T < \varepsilon$; 2) концентрация возбужденных электронов настолько мала, что квазиуровень Ферми зоны проводимости лежит в глубине запрещенной зоны. Тогда, рассматривая $\exp[-(\varepsilon/2 - \mu)/k_B T]$ в качестве малого параметра, уравнение (14) для разности населенностей Δ приближенно преобразуем к виду

$$\Delta = N \left[1 - \sqrt{\frac{\varepsilon k_B T}{\pi b^2}} \exp \left(-\frac{\varepsilon/2 - \mu}{k_B T} \right) \right]. \quad (30)$$

Уравнение равновесия (17) перепишем в следующей форме:

$$\exp\left(-\frac{\varepsilon/2 - \mu}{k_B T}\right) = \sqrt{\frac{\varepsilon}{4\pi k_B T}} \left[\arcsin \frac{\pi}{4} + \ln\left(\frac{2\pi b}{\varepsilon}\right) - \frac{\pi A}{4bN} \right]. \quad (31)$$

При выводе (31) кроме (29) мы предполагали также, что параметр $\xi \leq 0.5$. Данное предположение оправдано, поскольку именно такая ситуация реализуется в большинстве известных материалов, описываемых в рамках модели Пайерлса [1, 6, 8].

Используя (31), с учетом (19) рассчитаем ширину запрещенной зоны ε_0 в отсутствие светового воздействия ($\mu = 0$) при температуре $k_B T \ll \varepsilon$:

$$\varepsilon_0 = 4k_B T_0 \exp[\arcsin(\pi/4) - 1] \simeq 3.63k_B T_0. \quad (32)$$

Условие $k_B T \ll \varepsilon$, при котором справедливо (32), тогда принимает вид $T < T_0/2$. Следует отметить, что близкий результат $\varepsilon_0 \simeq 3.53k_B T_0$ был получен ранее в работе [1].

Подставляя (31) в (30), с учетом (32) находим связь между неравновесной разностью населенностей Δ и шириной запрещенной зоны ε :

$$\Delta = N \left(1 - \frac{\varepsilon}{2\pi b} \ln \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon} \right). \quad (33)$$

Полученное соотношение справедливо в случае малых значений $\Delta\varepsilon \equiv \varepsilon_0 - \varepsilon$. Это связано с используемым приближением (29), которое с учетом (31), (32) может быть записано в более удобной форме:

$$\Delta\varepsilon \equiv \varepsilon_0 - \varepsilon < \sqrt{\varepsilon_0 k_B T} / 2, \quad (34)$$

где, так же, как и в (32), предполагается, что $T < T_0/2$.

Для решения уравнения (28) необходимо знать функцию $g(\omega)$, характеризующую спектральную плотность светового поля. Будем предполагать, что она имеет лоренцеву форму [25]:

$$g(\omega) = \frac{\tau_0}{\pi [1 + (\omega\tau_0)^2]}, \quad (35)$$

где τ_0 — обратная полуширина спектра.

Учитывая, что вблизи нижнего края оптического перехода, как следует из (26), $d_k \simeq 2d_2 \operatorname{ch} \xi$, из (28) с использованием (33), (35), (9) получаем следующее выражение для интенсивности светового поля:

$$I = \frac{\hbar^2 x_0 z(x)}{16\pi d_2^2 \tau \sqrt{\tau_0^3 \omega_0}}, \quad (36)$$

где

$$z(x) = \left(1 - \frac{x}{x_0} \right) \sqrt{(1+x^2) \left(x + \sqrt{1+x^2} \right)}, \quad (37)$$

$x = \tau_0(\varepsilon/\hbar - \omega_0)$ — безразмерный параметр, характеризующий отстройку частоты нижнего края оптического перехода от несущей частоты светового поля, $x_0 = \tau_0(\varepsilon_0/\hbar - \omega_0)$ — начальная отстройка.

7. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ПОЛУПРОВОДНИК-ПОЛУПРОВОДНИК И БЕЗРЕЗОНАТОРНАЯ ОПТИЧЕСКАЯ БИСТАБИЛЬНОСТЬ

Уравнения (36), (37) описывают связь между интенсивностью I светового поля и шириной запрещенной зоны $\varepsilon = \hbar(\omega_0 + x/\tau_0)$ системы Пайерлса в стационарном состоянии равновесия. Для того чтобы это состояние было устойчивым, необходимо, как показывает анализ кинетического уравнения (27), выполнение условия $\partial I/\partial \varepsilon < 0$, или в более удобной для анализа форме

$$\frac{\partial z}{\partial x} < 0. \quad (38)$$

Исследуем зависимость $z(x)$ (37) в области $|x| \leq 1$. Для этого выполним разложение (37) в ряд Тейлора, ограничившись кубическими по x членами:

$$z(x) = 1 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3, \quad (39)$$

где

$$a_1 = \frac{x_0 - 2}{2x_0}, \quad a_2 = \frac{5x_0 - 4}{8x_0}, \quad a_3 = \frac{3x_0 - 10}{16x_0}. \quad (40)$$

Точки x_1, x_2 , соответствующие потере устойчивости системы, определяются из уравнения $\partial z/\partial x = 0$. Отсюда с учетом (39) получаем

$$x_{1,2} = -\frac{a_2 \pm \sqrt{a_2^2 - 3a_1 a_3}}{3a_3}. \quad (41)$$

Как видно из (41), критическое поведение системы наблюдается, если $a_2^2 - 3a_1 a_3 > 0$. Отсюда, используя (40), находим необходимое условие фазового перехода, накладывающее ограничение на начальную отстройку несущей частоты светового поля от частоты нижнего края оптического перехода: $x_0 > 1.55$, или в исходных обозначениях

$$\varepsilon_0 - \hbar\omega_0 > 1.55\hbar/\tau_0. \quad (42)$$

При выполнении критерия (42), как показывает анализ выражений (36), (37), схематический график зависимости I от ε имеет вид, изображенный на рисунке. При увеличении интенсивности точка на графике движется по кривой $0 \rightarrow 4 \rightarrow 1 \rightarrow 3$, при уменьшении — по кривой $3 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 0$. Скачкообразное изменение ε на участках $1 \rightarrow 3$ и $2 \rightarrow 4$ соответствует прямому и обратному фазовым переходам. Участок $I_2 < I < I_1$ является областью бистабильности.

Анализируя уравнение (39), находим точки x_3 и x_4 , отвечающие новым положениям равновесия соответственно для прямого и обратного переходов:

$$x_{3,4} = -\frac{a_2 \mp 2\sqrt{a_2^2 - 3a_1 a_3}}{3a_3}, \quad (43)$$

а также безразмерную величину Δx скачка ширины запрещенной зоны $\Delta \varepsilon = \hbar\Delta x/\tau_0$ при фазовом переходе:

$$\Delta x = -\frac{\sqrt{a_2^2 - 3a_1 a_3}}{a_3}. \quad (44)$$

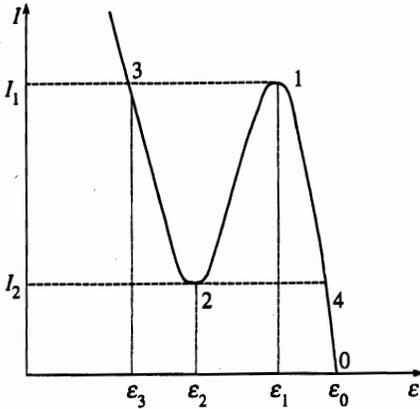


График зависимости интенсивности I светового поля от ширины запрещенной зоны ϵ

При этом оказывается, что скачок Δx при прямом и обратном переходах одинаков.

Используя (39), так же получаем выражение для ширины петли гистерезиса при фазовом переходе полупроводник–полупроводник (размер области безрезонансной оптической бистабильности по безразмерной интенсивности светового поля):

$$\Delta z = z(x_1) - z(x_2) = \frac{8(a_2^2 - 3a_1a_3)^{3/2}}{27a_3^2}. \quad (45)$$

Уравнения (39)–(45) получены при условии $|x| \leq 1$. Это накладывает ограничение на изменение x_0 . Используя (40), находим, что уравнение (41) для x_1 справедливо при $x_0 \leq 1.77$, для x_2 — при $x_0 \leq 3.32$, уравнение (43) для x_3 — при $x_0 \leq 2$, для x_4 — при $x_0 \leq 1.60$. Таким образом, в рамках рассматриваемого приближения удастся описать поведение системы вблизи порогового значения $x_0 = 1.55$, выше которого наблюдаются критические особенности.

Проведем численные оценки. Возьмем $x_0 = 1.6$. Тогда в соответствии с уравнениями (39)–(45) получаем

$$x_1 \approx 0.757, \quad x_2 \approx 0.271, \quad x_3 \approx 0.028, \quad x_4 \approx 1, \quad \Delta x \approx 0.729, \quad \Delta z \approx 0.409, \quad z(x_1) \approx 1.$$

Положив $d_2 \approx 10^{-18}$ ед. CGSE [19, 25], $\tau \approx 10^{-10}$ с [22], $\tau_0 \approx 10^{-13}$ с, $\omega_0 \approx 10^{15}$ с $^{-1}$, находим отстройки $\epsilon_j - \hbar\omega_0 = \hbar x_j / \tau_0 \approx x_j \cdot 10^{-2}$ эВ для $j = 0, 1, 2, 3, 4$ и скачок ширины запрещенной зоны при фазовом переходе $\Delta\epsilon = \hbar\Delta x / \tau_0 \approx 0.7 \cdot 10^{-2}$ эВ. Используя формулу (36), получаем $I_1 \approx 10^3$ ед. CGSE, $\Delta I = I_1 - I_2 \approx 0.4 \cdot 10^3$ ед. CGSE, что соответствует значениям интенсивности светового поля $\sim 10^5$ Вт/см 2 .

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, предлагаемая теория показывает, что при облучении световым полем, частота которого меньше частоты нижнего края межзонного перехода, в системе Пайерлса возможны фазовый переход полупроводник–полупроводник и безрезонансная оптическая бистабильность. Данные явления наблюдаются при выполнении условия (42), накладывающего ограничение на частоту ω_0 светового поля сверху. Наличие

критерия (42) обусловлено конкуренцией двух механизмов обратной связи. Положительной обратной связи соответствует первое слагаемое в правой части уравнения (27), а сама она подробно описана во Введении настоящей статьи. Отрицательная обратная связь состоит в том, что при увеличении концентрации n неравновесных электронов в зоне проводимости усиливается темп рекомбинации, что ведет к снижению концентрации n . Этому процессу соответствует второе слагаемое в правой части (27). В случае, если отрицательная обратная связь доминирует над положительной, равновесное состояние системы является устойчивым, и при медленном изменении внешних параметров внутренние меняются плавно. В противном случае, когда доминирует положительная обратная связь, в соответствии с (27) начинается быстрый рост флуктуаций, что ведет к скачкообразному изменению внутренних параметров системы.

При начальных отстройках частоты ω_0 , значительно превышающих ширину оптического спектра $\Delta\omega$, когда $\varepsilon_0 - \hbar\omega_0 \gg \hbar/\tau_0$, интенсивность I , необходимая для наблюдения возможного фазового перехода полупроводник–полупроводник, резко возрастает. Эта область частот в рамках развитой в настоящей работе теории рассмотрена быть не может, поскольку нарушается приближение слабого оптического возбуждения (34). Данное условие при температурах $T \approx 100$ К ($k_B T \approx 8.6 \cdot 10^{-3}$ эВ) и ширине запрещенной зоны $\varepsilon_0 \approx 0.5$ эВ накладывает следующее ограничение на область изменения ε : $0 < \varepsilon_0 - \varepsilon < 0.033$ эВ.

В заключение хотелось бы отметить, что безрезонаторная оптическая бистабильность при нарастающем поглощении, аналогичная рассмотренной в настоящей работе (но вызванная другими механизмами), экспериментально наблюдалась в селениде цинка [27], аморфном полупроводнике GeS_2 [28], аморфных пленках GeSe_2 [17], пластинках CdS и других веществах [17, 18]. Однако для материалов, электронные свойства которых описываются в рамках модели Пайерлса, насколько известно автору, подобные эксперименты пока не проводились.

Литература

1. Л. Н. Булаевский, УФН **115**, 263 (1975).
2. В. Е. Минакова, Ю. И. Латышев, В. А. Волков, Письма в ЖЭТФ **62**, 442 (1995).
3. Л. П. Горьков, УФН **144**, 381 (1984).
4. А. А. Фотиев, В. Л. Волков, В. К. Капусткин, *Оксидные ванадиевые бронзы*, Наука, Москва (1978), с. 151.
5. А. В. Дмитриев, Н. А. Журавлев, В. Л. Волков, ФТТ **32**, 3420 (1990).
6. А. А. Бугаев, Б. П. Захарченя, Ф. А. Чудновский, *Фазовый переход металл–полупроводник и его применение*, Наука, Ленинград (1979), с. 28.
7. Р. О. Зайцев, Е. В. Кузьмин, С. Г. Овчинников, УФН **148**, 603 (1986).
8. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, А. Л. Семенов, Вестн. Моск. ун-та, серия Физика, астрономия **30**, 52 (1989).
9. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, А. Л. Семенов, ФТТ **31**, 261 (1989).
10. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, А. Л. Семенов, Вестн. Моск. ун-та, серия Физика, астрономия **31**, 99 (1990).
11. А. Л. Семенов, ФТТ **36**, 1974 (1994).
12. В. И. Емельянов, А. Л. Семенов, ФТТ **32**, 3083 (1990).
13. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, С. Ю. Поройков, А. Л. Семенов, Вестн. Моск. ун-та, серия Физика, астрономия **32**, 63 (1991).

14. K. F. Berggren and V. A. Huberman, Phys. Rev. B **18**, 3369 (1978).
15. А. А. Бугаев, Б. П. Захарченя, Ф. А. Чудновский, Письма в ЖЭТФ **33**, 643 (1981).
16. А. А. Бугаев, В. В. Гудялис, Б. П. Захарченя и др., Письма в ЖЭТФ **34**, 452 (1981).
17. Х. Гиббс, *Оптическая бистабильность. Управление светом с помощью света*, Мир, Москва (1988) с. 108.
18. П. И. Хаджи, Г. Д. Шибаршина, А. Х. Ротару, *Оптическая бистабильность в системе когерентных экситонов и биэкситонов в полупроводниках*, Штиинца, Кишинев (1988), с. 120.
19. А. В. Андреев, В. И. Емельянов, Ю. А. Ильинский, *Кооперативные явления в оптике: Сверхизлучение. Бистабильность. Фазовые переходы*, Наука, Москва (1988), с. 256.
20. О. Маделунг, *Физика твердого тела: локализованные состояния*, Наука, Москва (1985).
21. Н. Н. Боголюбов, Н. Н. Боголюбов (мл.), *Введение в квантовую статистическую механику*, Наука, Москва (1984), с. 282.
22. Н. Р. Белашенков, В. Б. Карасев, А. А. Солунин и др., ФТТ **36**, 2475 (1994).
23. В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников, *Физика полупроводников*, Наука, Москва (1977), с. 255.
24. С. А. Ахманов, Ю. Е. Дьяков, А. С. Чиркин, *Введение в статистическую радиофизику и оптику*, Наука, Москва (1981), с. 42.
25. Д. Н. Клышко, *Физические основы квантовой электроники*, Наука, Москва (1986), с. 22.
26. А. С. Давыдов, *Теория твердого тела*, Наука, Москва (1976), с. 296.
27. В. А. Стадник, ФТТ **29**, 3594 (1987).
28. В. М. Любин, В. К. Тихомиров, Письма в ЖЭТФ **55**, 25 (1992).