

ФОТОИНДУЦИРОВАННАЯ СВЕРХСТРУКТУРА В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ФАЗЕ СИСТЕМЫ ПАЙЕРЛСА

А. Л. Семенов*

Ульяновский государственный университет
432700, Ульяновск, Россия

Поступила в редакцию 20 июня 1998 г.

Проведено теоретическое исследование свойств низкотемпературной фазы системы Пайерлса при возбуждении в ней неравновесных электрон-дырочных пар. Построена микроскопическая теория, в рамках которой показано, что при низких температурах в рассматриваемой термодинамически неравновесной системе образуется пространственно-неоднородная периодическая структура с модулированной шириной запрещенной зоны. Рассчитаны критическая температура формирования, критическая концентрация электрон-дырочных пар, пространственный период и глубина модуляции этой сверхструктуры.

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что одномерная цепочка эквидистантно расположенных атомов, на каждом из которых находится по одному внешнему электрону, при низких температурах становится неустойчивой по отношению к удвоению периода кристаллической решетки [1]. Соответствующий фазовый переход, характеризующийся структурными искажениями и образованием запрещенной зоны в электронном спектре, называют переходом Пайерлса, а систему, в которой он происходит, системой Пайерлса.

В рамках модели Пайерлса удается теоретически описать экспериментально наблюдаемые свойства целого ряда квазиодномерных материалов [1–6]. Среди наиболее изученных отметим, в частности, двуокись ванадия, одномерная электронная зона проводимости которой образуется благодаря перекрытию $3d$ -волновых функций атомов ванадия, расположенных в виде цепочек, параллельных кристаллической оси C [4]. При температуре ниже 340 К атомы ванадия в цепочке попарно сближаются, а в электронном спектре на уровне Ферми формируется запрещенная зона, так что низкотемпературную фазу VO_2 можно рассматривать как одномерный (квазиодномерный) пайерлсовский полупроводник [6].

В предположении, что в основе фазового перехода металл–полупроводник при 340 К в двуокиси ванадия лежит пайерлсовский механизм, а хаббардовское отталкивание электронов, находящихся на одном узле, несущественно, в серии работ [7–13] теоретически исследована и интерпретирована большая совокупность экспериментально наблюдаемых явлений, связанных с влиянием на этот переход различных внешних воздействий: одноосного и всестороннего давлений [7], легирования примесями замещения [8–11], взаимодействия пленки VO_2 с подложкой [12], адсорбции [13] и т. д.

* E-mail: semenov@quant.univ.sibirsk.su

Представляет интерес исследование поведения низкотемпературной фазы системы Пайерлса при возбуждении в ней неравновесных электрон-дырочных пар. Данная проблема; насколько известно автору, впервые была затронута в работе [14], где путем численного анализа показано, что за счет сильного электрон-фононного взаимодействия при увеличении концентрации электрон-дырочных пар происходит уменьшение ширины запрещенной зоны, которое при достаточно больших уровнях возбуждения может иметь скачкообразный характер. Полученный результат подтверждается теорией фотоиндуцированного фазового перехода в системе с пайерлсовской неустойчивостью [15, 16] и данными экспериментов по облучению пленки двуокиси ванадия мощным лазерным импульсом [17–19].

В работе [14] с учетом феноменологического разложения Гинзбурга—Ландау свободной энергии в ряд по параметру порядка фазового перехода показано, что одномерная полупроводниковая фаза системы Пайерлса при низких температурах и больших концентрациях неравновесных (например фотовозбужденных) электрон-дырочных пар оказывается неустойчивой по отношению к образованию периодической сверхструктуры с пространственно-модулированной шириной запрещенной зоны. Данная неустойчивость обусловлена сильной зависимостью электронного спектра от концентрации электронов в зоне проводимости [15]. Неустойчивость аналогичного вида, как известно, может быть вызвана также сильной зависимостью ширины запрещенной зоны полупроводника от температуры или деформации кристаллической решетки [20] или изменением диэлектрической проницаемости при изменении ширины запрещенной зоны [15]. Рассмотренные в работах [14, 15, 20] феноменологические диффузионно-деформационно-дрейфовые модели неустойчивостей описывают нестационарный режим сверхструктуры на начальном этапе ее формирования.

Отметим, что неоднородные по времени и пространству решения проанализированы в работах [21, 22], где указано на возможность возникновения движущихся сверхструктур и солитонов [21], а также периодических по времени изменений ширины запрещенной зоны в электронном спектре системы с пайерлсовской неустойчивостью [22].

В настоящей работе предлагается микроскопическая теория стационарной (сформировавшейся) сверхструктуры. В основе теории лежит обобщенный на случай неравновесных систем механизм низкотемпературной неустойчивости кристаллической решетки по отношению к статическим искажениям с волновым вектором \mathbf{q} , когда электронный спектр $\varepsilon(\mathbf{k})$ системы удовлетворяет условию нестинга [23]:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (1.1)$$

для всех \mathbf{k} вблизи поверхности Ферми и некоторого фиксированного \mathbf{q} , лежащего на поверхности Ферми.

В полупроводниковой фазе системы Пайерлса при больших уровнях возбуждения неравновесных электрон-дырочных пар квазиуровни Ферми валентной зоны и зоны проводимости находятся в соответствующих разрешенных зонах электронного спектра. В силу одномерности системы и симметрии спектра $\varepsilon(\mathbf{k})$ условие (1.1) выполняется вблизи каждого квазиуровня, что и ведет к перестройке кристаллической решетки при низких температурах. При этом вблизи квазиуровней Ферми образуются вторичные запрещенные зоны, что в данном случае эквивалентно пространственной модуляции параметра порядка фазового перехода металл-полупроводник и однозначно связанной с ним ширины запрещенной зоны электронного спектра системы.

2. ГАМИЛЬТониАН СИСТЕМЫ

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

$$H = \sum_m B_{m,m+1} (a_m^+ a_{m+1} + a_{m+1}^+ a_m), \quad (2.1)$$

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

Для узкозонных систем (в частности, для модели Пайерлса) расстояния $r_{m,m+1}$ между соседними атомами в несколько раз превышают эффективный радиус R атомной волновой функции электрона. В этом случае интеграл перекрытия $B_{m,m+1}$ определяется следующим выражением [24]:

$$B_{m,m+1} \propto \exp\left(-\frac{r_{m,m+1}}{R}\right). \quad (2.2)$$

Координату m -го узла в цепочке с пространственно-модулированным попарным сближением атомов запишем в виде

$$x_m = m r_0 + \frac{R\xi}{2} \cos(\pi m) \left\{ 1 + \zeta \cos \left[k_0 \left(m - \frac{1}{2} \right) \right] \right\}, \quad (2.3)$$

где r_0 — межатомное расстояние в металлической фазе (для эквидистантной цепочки); ξ — параметр удвоения периода одномерного кристалла, характеризующий величину попарного сближения атомов (параметр порядка фазового перехода металл-полупроводник); ζ — параметр модуляции ξ с волновым числом $k_0 = 2\pi/j$; j — число атомов цепочки в одном пространственном периоде сверхструктуры.

При $\zeta = 0$ формула (2.3) описывает пространственно-однородное попарное сближение атомов, характеризующее изменение структуры решетки при фазовом переходе металл-полупроводник в системе Пайерлса [1]. При $\zeta \neq 0$ имеется пространственная модуляция структурных искажений одномерного кристалла, что приводит к аналогичной модуляции ширины запрещенной зоны в полупроводниковой фазе системы Пайерлса.

Выражение (2.3) записано таким образом, чтобы в фурье-спектре статических смещений атомов из эквидистантного положения равновесия присутствовали три моды с волновыми числами $q = \pi, (\pi - k_0), (\pi + k_0)$. Это приводит, как будет показано ниже (см. разд. 3 и 4), к образованию в электронном спектре гамильтониана (2.1) запрещенных зон в точках, где квазиволновое число электрона равно $k = \pm\pi/2, \pm(\pi - k_0)/2, \pm(\pi + k_0)/2$ (см. ниже рис. 1). Данная перестройка электронного спектра, если уровень (квазиуровень) Ферми находится в запрещенной зоне, понижает свободную энергию электронной подсистемы и при определенных условиях может соответствовать новому устойчивому состоянию динамического равновесия (см. появление устойчивых нетривиальных решений $\xi \neq 0, \zeta \neq 0$ в уравнениях (5.4), (5.5)). Слагаемое $1/2$ под знаком косинуса в (2.3) не влияет на конечный результат и введено нами для того, чтобы формула (2.4) и все последующие имели более простой вид.

С учетом соотношения $r_{m,m+1} = x_{m+1} - x_m$ из (2.2), (2.3) в приближении $\zeta \ll 1$ получаем

$$B_{m,m+1} = B_m^{(1)} + B_m^{(2)} = b \exp [(-1)^m \zeta] + b \zeta \cos(\pi m) \cos(k_0 m) \cos(k_0/2), \quad (2.4)$$

где b — интеграл перекрытия в металлической фазе (при $\xi = 0$). Фазы атомных волновых функций при записи (2.1) выбираются таким образом, что b в (2.4) является действительной величиной.

Подставляя (2.4) в (2.1), окончательно находим

$$H = \sum_{i=1}^2 H_i, \quad H_i = \sum_m B_m^{(i)} (a_m^+ a_{m+1} + a_{m+1}^+ a_m). \quad (2.5)$$

Отметим, что в силу предположения $\zeta \ll 1$, сделанного при выводе (2.4), в гамильтониане (2.5) $H_2 \ll H_1$.

3. ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ПРОСТРАНСТВЕННО-ОДНОРОДНОЙ СИСТЕМЫ

Рассмотрим вначале пространственно-однородную систему Пайерлса ($\zeta = 0$). Тогда в (2.5) $H = H_1$. Для диагонализации гамильтониана (2.5) воспользуемся методом канонических преобразований Боголюбова [25]. Перейдем к коллективным фермиевским операторам вторичного квантования, c_k, c_k^+ , по формуле

$$a_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikm}, \quad (3.1)$$

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 (2.5) принимает вид

$$H_1 = \sum_k 2b (c_k^+ c_k \operatorname{ch} \xi \cos k + i c_k^+ c_{k-\pi} \operatorname{sh} \xi \sin k). \quad (3.2)$$

Применим в (3.2) еще одно каноническое преобразование к операторам α_k, α_k^+ :

$$c_k = \frac{\alpha_k + i\varphi_k \alpha_{k-\pi}}{\sqrt{1 + \varphi_k^2}}. \quad (3.3)$$

Функция φ_k в (3.3) подбирается таким образом, чтобы получившийся гамильтониан в новых переменных α_k, α_k^+ имел диагональный вид:

$$H_1 = \sum_k E_k \alpha_k^+ \alpha_k. \quad (3.4)$$

После подстановки (3.3) в (3.2) и приравнивания нулю недиагональных элементов находим φ_k и закон дисперсии E_k :

$$\varphi_k = \frac{\operatorname{ch} \xi \cos k - \operatorname{sign}(\cos k) \sqrt{\cos^2 k + \operatorname{sh}^2 \xi}}{\operatorname{sh} \xi \sin k}, \quad (3.5)$$

$$E_k = 2b \operatorname{sign}(\cos k) \sqrt{\cos^2 k + \operatorname{sh}^2 \xi}. \quad (3.6)$$

Из соотношения (3.6) видно, что спектр E_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 (3.6) представляет собой одну наполовину заполненную зону (металлическая фаза).

4. ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНОЙ СИСТЕМЫ

Рассмотрим теперь случай, когда в (2.3)–(2.5) $\zeta \neq 0$. Для вычисления электронного спектра гамильтониана (2.5) воспользуемся методом теории возмущений [26], имея в виду, что $H_2 \ll H_1$. Матричные элементы оператора возмущения H_2 (2.5), (2.4) в представлении фермиевских операторов вторичного квантования c_k (3.1) имеют вид

$$(H_2)_{pk} = d_k \delta_{p, k+k_0+\pi} + h_k \delta_{p, k-k_0+\pi}, \quad (4.1)$$

где

$$d_k = ib\xi\zeta \exp\left(-\frac{ik_0}{2}\right) \sin\left(k + \frac{k_0}{2}\right) \cos\frac{k_0}{2},$$

$$h_k = ib\xi\zeta \exp\left(\frac{ik_0}{2}\right) \sin\left(k - \frac{k_0}{2}\right) \cos\frac{k_0}{2}. \quad (4.2)$$

При переходе к фермиевским операторам α_k (3.3) матричные элементы (4.1) гамильтониана H_2 (2.5) преобразуются к следующей форме:

$$(H_2)_{sq} = [(1 + \varphi_s^2)(1 + \varphi_q^2)]^{-1/2} [(d_q \delta_{s, q+k_0+\pi} + h_q \delta_{s, q-k_0+\pi})(1 - \varphi_q \varphi_s) - i(d_q \delta_{s, q+k_0} + h_q \delta_{s, q-k_0})(\varphi_q + \varphi_s)]. \quad (4.3)$$

С учетом (4.3) находим приближенно электронный спектр ε_k гамильтониана (2.5) во втором порядке теории возмущений для $k \in [0, \pi/2]$:

$$\varepsilon_k = \frac{1}{2} \left[E_k + E_q + \operatorname{sign}(E_k - E_q) \sqrt{(E_k - E_q)^2 + 4|H_k|^2} \right], \quad (4.4)$$

где

$$q = k + k_0 + \pi, \quad H_k = \frac{\xi\zeta b(1 - \varphi_k \varphi_{k+k_0}) \sin(k + k_0/2)}{(1 + \varphi_k^2)(1 + \varphi_{k+k_0}^2)}, \quad (4.5)$$

E_k — электронный спектр невозмущенной системы (3.6). Для значений квазиволнового числа $k \in [-\pi, 0] \cup [\pi/2, \pi]$ спектр ε_k находится из (4.4), (4.5) с учетом свойств четности и симметрии: $\varepsilon_k = \varepsilon_{-k}$, $\varepsilon_k = -\varepsilon_{k+\pi}$. Схематический график зависимости ε_k изображен на рис. 1.

Видно, что попарное сближение атомов приводит к образованию запрещенной зоны в электронном спектре в точках $k \mp \pi/2$ (3.6), а пространственная модуляция этого попарного сближения (2.3) — к образованию вторичных запрещенных зон в точках $k = \mp k_{1,2}$, где $k_{1,2} = (\pi \mp k_0)/2$.

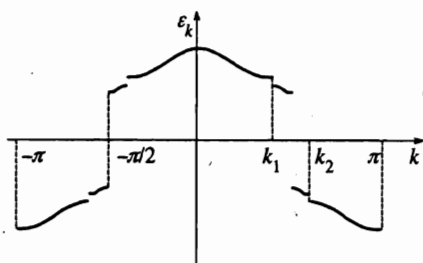


Рис. 1. Схематический график зависимости электронного спектра ϵ_k (4.4), (4.5) гамильтониана (2.5), (2.4) сверхструктуры системы Пайерлса с пространственно-модулированным попарным сближением атомов (2.3)

Иследуем более подробно зависимость ϵ_k при $k \in [0, \pi/2]$. Имея в виду, что электронный спектр (4.4) существенно отличается от (3.6) только в области $0 \leq \pi/2 - k \leq k_0 \ll 1$, с использованием (3.5) для H_k в (4.5) можно записать следующее приближенное соотношение:

$$H_k \simeq \begin{cases} b\xi\zeta, & k \in (\pi/2 - k_0, \pi/2) \\ 0, & k \in [0, \pi/2 - k_0] \end{cases} \quad (4.6)$$

Подставляя (4.6) в (4.4) и ограничиваясь квадратичным приближением для E_k вблизи дна зоны проводимости, окончательно получаем

$$\epsilon_k \simeq \begin{cases} E_{k_1} + \frac{b(k-k_1)^2}{\text{sh } \xi} - b \text{sign}(k-k_1) \sqrt{\left[\frac{k_0(k-k_1)}{\text{sh } \xi} \right]^2 + (\xi\zeta)^2}, & k \in \left(\frac{\pi}{2} - k_0, \frac{\pi}{2} \right) \\ E_k, & k \in [0, \pi/2 - k_0] \end{cases} \quad (4.7)$$

Таким образом, как следует из (4.7), при пространственной модуляции (2.3) в точке $k = k_1 = (\pi - k_0)/2$ образуется запрещенная зона $\Delta\epsilon_g = 2b\xi\zeta$.

Следует отметить, что форма соотношения (4.3) указывает на возможность образования запрещенной зоны также и в точке $k = k_0/2$. При этом ϵ_k вблизи $k = k_0/2$ имеет вид (4.4), где теперь $q = k - k_0$ и

$$H_k \simeq b \left(k - \frac{k_0}{2} \right)^2 \xi\zeta \text{th } \xi. \quad (4.8)$$

Однако из (4.8) видно, что $H_{k_0/2} = 0$ и, следовательно, при $k = k_0/2$ запрещенная зона в электронном спектре не образуется.

5. УРАВНЕНИЯ РАВНОВЕСИЯ

Рассмотрим поведение низкотемпературной фазы системы Пайерлса при возбуждении в ней неравновесных электрон-дырочных пар. Будем предполагать, что данное возбуждение обусловлено вынужденными переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости благодаря, например, дипольному электрон-фотонному взаимодействию с падающим излучением. Известно, что характерное время внутризонной релаксации электронов $\tau_e \sim 10^{-14}$ с значительно меньше времени межзонной релаксации $\tau \sim 10^{-11}$ с [27]. Поэтому при облучении системы световым полем с постоянной амплитудой приближенно считают [28], что внутри каждой электронной зоны устанавливается термодинамическое равновесие электронов со своим соответствующим данной

зоне квазиуровнем Ферми. Вызванное внешним облучением нарушение термодинамического равновесия между зонами выражается различием соответствующих квазиуровней Ферми.

Рассмотренный выше подход к описанию термодинамически неравновесной системы, состоящей из совокупности термодинамически равновесных подсистем, можно обобщить и на случай, когда падающее излучение имеет адиабатически медленно меняющуюся амплитуду A (изменение амплитуды поля ΔA за время $\tau_e \sim 10^{-14}$ с много меньше A). Это связано с тем, что электронная подсистема внутри каждой из зон успевает полностью отслеживать изменение поля и поэтому в любой момент времени находится в состоянии термодинамического равновесия. Данная ситуация в некоторой степени аналогична обычно встречающейся при описании термодинамически равновесных систем при адиабатически медленном изменении внешних параметров.

В дальнейшем мы ограничимся построением теории именно для такого случая, при этом переходные процессы, происходящие в системе за время $\tau_e \sim 10^{-14}$ с при прохождении крутого фронта или спада светового импульса, нами обсуждаться не будут.

Свободная энергия F_j электронной подсистемы j -й зоны ($j = 1, 2$) определяется соотношением

$$F_j = \mu_j N_j - k_B T \sum_k \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu_j - \varepsilon_k}{k_B T} \right) \right], \quad (5.1)$$

где μ_j и N_j — соответственно квазиуровень Ферми и число электронов j -й зоны. Суммирование по k в (5.1) идет в пределах j -й зоны спектра (4.4) ($|k| < \pi/2$ для $j = 1$ и $\pi/2 < |k| < \pi$ для $j = 2$).

Известно, что характерное время релаксации фононной подсистемы $\tau_{ph} \sim 10^{-13}$ с [27]. Поэтому в моменты времени, когда амплитуда импульса падающего излучения за отрезок времени $\tau_{ph} \sim 10^{-13}$ с изменяется незначительно (адиабатически медленное изменение внешнего параметра), фононная подсистема успевает релаксировать к своему динамически равновесному состоянию, зависящему от мгновенной амплитуды импульса.

В этом случае свободную энергию кристаллической решетки с учетом структурных искажений (2.3) можно описывать в гармоническом приближении выражением следующего вида:

$$F_c = F_0 + \frac{\gamma}{2} \sum_m (r_{m,m+1} - r_0)^2, \quad (5.2)$$

где F_0 — свободная энергия, характеризующая динамику решетки; γ — коэффициент жесткости решетки при статических смещениях (2.3) атомов. Формула (5.2) записана в приближении молекулярного поля [1], в котором предполагается, что фононная часть F_0 не зависит от параметров ξ и ζ , отвечающих за статические искажения. С физической точки зрения данное приближение предполагает отсутствие взаимодействия между динамическими (с частотой $\omega \neq 0$) и статическими (с частотой $\omega = 0$) фононными модами.

С учетом (2.3) и соотношения $r_{m,m+1} = x_{m+1} - x_m$ из (5.2) получаем

$$F_c = F_0 + \frac{A}{2} \xi^2 \left[1 + \frac{1}{2} \zeta^2 \cos^2 \left(\frac{k_0}{2} \right) \right], \quad (5.3)$$

где $A = \gamma NR^2$.

Для того чтобы рассматриваемая термодинамически неравновесная система находилась в стационарном состоянии динамического равновесия, необходимо равенство нулю обобщенных сил f_1, f_2 , соответствующих обобщенным координатам ξ и ζ :

$$f_1 \equiv - \left(\frac{\partial F_1}{\partial \xi} \right)_{T, N_1} - \left(\frac{\partial F_2}{\partial \xi} \right)_{T, N_2} - \left(\frac{\partial F_c}{\partial \xi} \right)_T = 0, \tag{5.4}$$

$$f_2 \equiv - \left(\frac{\partial F_1}{\partial \zeta} \right)_{T, N_1} - \left(\frac{\partial F_2}{\partial \zeta} \right)_{T, N_2} - \left(\frac{\partial F_c}{\partial \zeta} \right)_T = 0. \tag{5.5}$$

Отсюда, принимая во внимание формулы (5.1) и (5.3), находим

$$f_1 = -A\xi \left[1 + \frac{1}{2}\zeta^2 \cos^2 \left(\frac{k_0}{2} \right) \right] + 2 \sum_{|k| \leq \pi/2} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \xi} \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T} \right) = 0, \tag{5.6}$$

$$f_2 = -\frac{1}{2} A \xi^2 \zeta \cos^2 \left(\frac{k_0}{2} \right) + 2 \sum_{|k| \leq \pi/2} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \zeta} \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T} \right) = 0. \tag{5.7}$$

Выражения (5.6) и (5.7) представляют собой уравнения равновесия системы Пайерлса, определяющие поведение параметров ξ и ζ при возбуждении неравновесных электрон-дырочных пар.

С физической точки зрения в качестве внешне контролируемого параметра, характеризующего степень фотовоздействия, удобно рассматривать суммарную, включающую как равновесные, так и неравновесные возбуждения, концентрацию n электрон-дырочных пар. Для этого в дополнение к соотношениям (5.6), (5.7) необходимо записать уравнение электронейтральности системы, связывающее n и квазиуровень Ферми μ :

$$n = \frac{N}{2} - \sum_{|k| \leq \pi/2} \operatorname{th} \frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T}. \tag{5.8}$$

Таким образом, уравнения (5.6), (5.7) с учетом (5.8) образуют замкнутую систему для определения параметров структурных искажений решетки ξ и ζ (2.3) при заданной температуре T и концентрации n электрон-дырочных пар.

6. ОБРАЗОВАНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СВЕРХСТРУКТУРЫ ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ $T = 0$

Анализ уравнений (5.6)–(5.8) вначале проведем для случая $T = 0$ в предположении, что параметр модуляции сверхструктуры $\zeta \ll 1$. Тогда из соотношения (5.6) получаем

$$A\xi - \frac{4bN}{\pi} \left(K \left(\sqrt{1 - \operatorname{th}^2 \xi} \right) \operatorname{sh} \xi - 2\xi \ln \left| \frac{k_0/2 + \sqrt{(k_0/2)^2 + \xi^2}}{\xi} \right| \right) = 0, \tag{6.1}$$

где $K(x)$ — полный нормальный эллиптический интеграл первого рода.

Уравнение (6.1) описывает связь между параметром ξ и концентрацией n неравновесных электрон-дырочных пар системы Пайерлса. Учитывая, что для реальных физических систем концентрация электрон-дырочных пар $n \ll N$, а параметр порядка

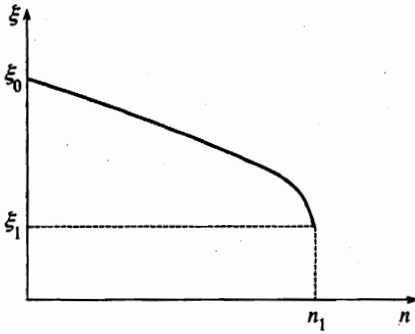


Рис. 2. Схематический график зависимости параметра порядка ξ фазового перехода металл-полупроводник от суммарной концентрации n электрон-дырочных пар. Величины ξ_1 , n_1 при $T = 0$ определяются формулой (6.6), при $T \neq 0$ (с учетом условия (7.2)) — формулой (7.5)

фазового перехода металл-полупроводник системы $\xi \leq 0.5$ [1-6], из (6.1) приближенно находим

$$n = \frac{N}{\pi} (\xi_0 - \xi) \sqrt{\frac{\xi}{\xi_0}}, \quad (6.2)$$

где

$$\xi_0 = \frac{\pi}{2} \exp \left\{ \text{Arcsin} \left(\frac{\pi}{4} \right) - \frac{A\pi}{4bN} \right\} \quad (6.3)$$

— параметр порядка фазового перехода металл-полупроводник при $n = 0$.

При выводе соотношений (6.2), (6.3) мы также использовали выполняющееся при $T = 0$ уравнение

$$k_0 = \frac{\pi n}{N}. \quad (6.4)$$

Схематический график зависимости $\xi(n)$ при учете условия устойчивости по отношению к пространственно-однородным флуктуациям параметра порядка ξ фазового перехода металл-полупроводник,

$$\frac{\partial n}{\partial \xi} < 0, \quad (6.5)$$

показан на рис. 2. Из него видно, что при увеличении концентрации n электрон-дырочных пар до значения n_1 параметр порядка ξ фазового перехода металл-полупроводник плавно уменьшается до значения ξ_1 , где

$$n_1 = \frac{2N\xi_0}{3\sqrt{3}\pi}, \quad \xi_1 = \frac{\xi_0}{3}. \quad (6.6)$$

В точке n_1 происходит скачкообразное уменьшение ξ от ξ_1 до нуля (фазовый переход в металлическое состояние).

Из уравнения (5.7) с учетом (4.7), (5.8) получаем выражение для параметра модуляции сверхструктуры ξ при $T = 0$:

$$\zeta = \frac{k_0^2}{2\xi \text{sh } \xi} \text{sh}^{-1} \frac{\pi A k_0 \cos^2(k_0/2)}{16bN \text{sh } \xi}. \quad (6.7)$$

Принимая во внимание (6.4), в предположении, что $k_0 = \pi n/N \ll 1$, из (6.7) приближенно находим

$$\zeta = \frac{8bn}{A\xi}. \quad (6.8)$$

Таким образом, при $T = 0$ сверхструктура в системе Пайерлса существует во всей полупроводниковой фазе при $n \in (0, n_1)$. При этом параметр модуляции ζ (6.8) при увеличении n монотонно растет от значения $\zeta(n=0) = 0$ до величины ζ_1 :

$$\zeta_1 = \zeta(n = n_1) = \frac{16bN}{\pi\sqrt{3}A}, \quad (6.9)$$

а пространственный период сверхструктуры, определяемый по формуле

$$\lambda = \frac{2\pi r_0}{k_0} = \frac{2r_0N}{n}, \quad (6.10)$$

монотонно убывает от $\lambda(n=0) = \infty$ до λ_1 :

$$\lambda_1 = \lambda(n = n_1) = \frac{3\sqrt{3}\pi r_0}{\xi_0}. \quad (6.11)$$

Проведем численные оценки. Для вычисления коэффициента A жесткости кристаллической решетки системы Пайерлса воспользуемся следующей формулой [10]:

$$A = \frac{4bN}{\pi} \left[\ln \left(\frac{\pi b}{2k_B T_0} \right) + 1 \right], \quad (6.12)$$

где T_0 — критическая температура термодинамически равновесного фазового перехода металл–полупроводник системы Пайерлса.

Положив характерные численные значения физических величин для VO_2 [4, 7]: $b \approx 0.3$ эВ, $T_0 \approx 340$ К, $r_0 \approx 3$ Å, $N \approx 10^{23}$ см $^{-3}$, $\xi_0 \approx 0.5$, из (6.12), (6.6), (6.9), (6.11) получаем $A \approx 10^{23}$ эВ/см 3 , $n_1 \approx 6 \cdot 10^{21}$ см $^{-3}$, $\zeta_1 \approx 0.9$, $\lambda_1 \approx 100$ Å.

7. ОБРАЗОВАНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СВЕРХСТРУКТУРЫ ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ $T \neq 0$

Анализ уравнений (5.6)–(5.8) в случае $T \neq 0$ проведем в предположении, что система Пайерлса является невырожденным либо слабовырожденным полупроводником:

$$\mu - 2b \operatorname{sh} \xi < 2k_B T. \quad (7.1)$$

Соотношение (7.1), накладывающее ограничение на пределы изменения квазиуровня Ферми μ , с учетом уравнения (5.8) эквивалентно приближенному неравенству, ограничивающему сверху концентрацию n электрон-дырочных пар:

$$n < n_2 = \frac{8N}{3\pi} \sqrt{\frac{k_B T \operatorname{sh} \xi}{b}}. \quad (7.2)$$

Используя формулы (5.6), (5.8), в предположении, что параметр модуляции сверхструктуры $\zeta \ll 1$, находим приближенное уравнение для параметра порядка ξ фазового перехода металл-полупроводник:

$$A\xi - 4b \left[\frac{N}{\pi} K \left(\sqrt{1 - \text{th}^2 \xi} \right) \text{sh} \xi - n \text{ch} \xi \right] = 0, \quad (7.3)$$

где $K(x)$ — полный нормальный эллиптический интеграл первого рода.

С учетом того факта, что для реальных физических систем концентрация электрон-дырочных пар $n \ll N$, а параметр порядка фазового перехода металл-полупроводник системы $\xi \leq 0.5$ [1-6], из (7.3) приближенно получаем следующее уравнение:

$$n = \frac{N\xi}{\pi} \ln \left(\frac{\xi_0}{\xi} \right), \quad (7.4)$$

где ξ_0 определяется формулой (6.3).

Схематический график участка зависимости $\xi(n)$ (7.4), на котором выполняется условие устойчивости (6.5), изображен на рис. 2. Картина изменения $\xi(n)$ аналогична ранее рассмотренному случаю $T = 0$, но скачкообразный переход в металлическую фазу теперь происходит при

$$n_1 = \frac{N\xi_0}{\pi e}, \quad \xi_1 = \frac{\xi_0}{e}. \quad (7.5)$$

Соотношение (6.5) является критерием устойчивости полупроводниковой фазы системы Пайерлса по отношению к фазовому переходу в металлическое состояние. Исследуем теперь эту систему на устойчивость по отношению к переходу в пространственно-неоднородное состояние с периодической пространственной модуляцией параметра порядка ξ фазового перехода металл-полупроводник ($\zeta \neq 0$). Исходя из того факта, что в момент потери устойчивости решения $\zeta = 0$ выполняется следующее соотношение:

$$\left. \frac{\partial f_2}{\partial \zeta} \right|_{T, \zeta=0} = 0, \quad (7.6)$$

из уравнения (5.7) получаем

$$T = \frac{2b^2 N k_0}{\pi A k_B \cos^2(k_0/2)}. \quad (7.7)$$

При образовании фотоиндуцированной сверхструктуры с волновым числом k_0 запрещенная зона в электронном спектре $E(k)$ (3.6) возникает в точке расположения квазиуровня Ферми μ :

$$E \left(\frac{\pi - k_0}{2} \right) = \mu. \quad (7.8)$$

Отсюда приближенно находим

$$\mu = 2b \text{sh} \xi + \frac{b k_0^2}{4 \text{sh} \xi}. \quad (7.9)$$

Концентрация n электрон-дырочных пар, когда квазиуровень Ферми μ лежит в зоне проводимости, в соответствии с уравнением (5.8) определяется следующим приближенным выражением:

$$n = \frac{N}{3\pi k_B T} \sqrt{\frac{\text{sh } \xi}{b} (\mu + 2k_B T - 2b \text{sh } \xi)^3}. \quad (7.10)$$

Используя формулы (7.7)–(7.10), находим соотношение для критической концентрации n_c электрон-дырочных пар, при превышении которой ($n > n_c$) в полупроводниковой фазе системы Пайерлса имеется фотоиндуцированная сверхструктура:

$$n_c = \frac{2N}{3\pi} \sqrt{\frac{2k_B T \text{sh } \xi}{b} \left[1 + \frac{k_B T}{32b^3 \text{sh } \xi} \left(\frac{\pi A}{N} \right)^2 \right]^3}. \quad (7.11)$$

Исходя из уравнений (7.9), (7.10), получаем выражение для пространственного периода λ сверхструктуры:

$$\lambda = \frac{2\pi\tau_0}{k_0} = \frac{\pi\tau_0}{\sqrt{(3\pi k_B T n \text{sh } \xi / Nb)^{2/3} - 2k_B T \text{sh } \xi / b}}. \quad (7.12)$$

В частности, в критической точке n_c в момент образования сверхструктуры, как следует из (7.11), (7.12), период $\lambda_c = \lambda(n_c)$ равен

$$\lambda_c = \frac{4b^2 N \tau_0}{A k_B T}. \quad (7.13)$$

Для наблюдения сверхструктуры необходимо выполнение следующего условия:

$$n_c < n < n_1, \quad (7.14)$$

из которого, в частности, следует, что $n_c < n_1$. Отсюда с учетом (7.5), (7.11) приближенно находим уравнение для критической температуры T_c , выше которой сверхструктура не существует при любом n :

$$\frac{8k_B T_c}{9b\xi_0} \left[1 + \frac{ek_B T_c}{32b^3 \xi_0} \left(\frac{\pi A}{N} \right)^2 \right]^3 = 1. \quad (7.15)$$

Проведем численные оценки. Положив характерные численные значения физических величин для VO_2 [4, 7]: $b \approx 0.3$ эВ, $\tau_0 \approx 3$ А, $N \approx 10^{23}$ см⁻³, $\xi_0 \approx 0.5$, $A \approx 10^{23}$ эВ/см³, $T \approx 100$ К, из (7.2), (7.5), (7.11), (7.13), (7.15) получаем $n_2 \approx 10^{22}$ см⁻³, $n_1 \approx 6 \cdot 10^{21}$ см⁻³, $n_c \approx 5 \cdot 10^{21}$ см⁻³, $\lambda_c \approx 130$ А, $T_c \approx 200$ К.

Отметим, что полученное здесь численное значение n_1 по порядку величины совпадает с оцененным нами из экспериментальных данных: $n_1 \approx 10^{21}$ см⁻³ [18].

8. ОПЕРАТОР ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА

В дальнейшем будем предполагать, что неравновесная концентрация электрон-дырочных пар в рассматриваемой системе создается благодаря электрическому дипольному взаимодействию электронов с пролетающими фотонами. Для описания этого взаимодействия вычислим сначала оператор дипольного момента пространственно-одномерной ($\zeta = 0$) системы Пайерлса, который в приближении сильной связи определяется

соотношением:

$$\mathbf{d} = \sum_n (\mathbf{d}_{n,n+1} a_n^+ a_{n+1} + \mathbf{d}_{n,n+1}^* a_{n+1}^+ a_n), \quad (8.1)$$

где зависимость $\mathbf{d}_{n,n+1}(\xi)$ аналогична соотношению (2.4):

$$\mathbf{d}_{n,n+1} = (\mathbf{d}_1 + i\mathbf{d}_2) \exp((-1)^n \xi) = -e \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_{n+1}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (8.2)$$

Здесь $\psi_n(\mathbf{r})$ — атомная волновая функция электрона, находящегося на n -ом узле, e — заряд электрона. Выбор фаз волновых функций $\psi_n(\mathbf{r})$, обеспечивающий реальность интеграла перекрытия (2.4), однозначно определяет \mathbf{d}_1 и \mathbf{d}_2 в (8.2).

Подставляя (3.1) в (8.1), с учетом (8.2) и тождества $\exp((-1)^n \xi) = \text{ch } \xi + (-1)^n \text{sh } \xi$ находим

$$\mathbf{d} = 2 \sum_k [\text{ch } \xi (\mathbf{d}_1 \cos k - \mathbf{d}_2 \sin k) c_k^+ c_k + i \text{sh } \xi (\mathbf{d}_1 \sin k + \mathbf{d}_2 \cos k) c_k^+ c_{k-\pi}]. \quad (8.3)$$

Переходя в (8.3) к фермиевским операторам α_k, α_k^+ , с учетом (3.3), (3.5) окончательно получаем

$$\mathbf{d} = \sum_k \left\{ \left[\frac{\mathbf{d}_1 E_k}{b} - \frac{2\mathbf{d}_2}{1 + \varphi_k^2} [(1 - \varphi_k^2) \text{ch } \xi \sin k + 2\varphi_k \text{sh } \xi \cos k] \right] \alpha_k^+ \alpha_k + \right. \\ \left. + i \frac{2\mathbf{d}_2}{1 + \varphi_k^2} [(1 - \varphi_k^2) \text{sh } \xi \cos k - 2\varphi_k \text{ch } \xi \sin k] \alpha_k^+ \alpha_{k-\pi} \right\}. \quad (8.4)$$

Следует отметить формальное сходство операторов (2.1) и (8.1) при $\mathbf{d}_2 = 0$. Аналогичное сходство поэтому имеют и операторы (3.4) и (8.4).

Пусть в отсутствие внешнего электрического поля суммарный дипольный момент системы равен нулю. Тогда из (8.4), (3.6) следует, что $\mathbf{d}_1 = 0$. Таким образом, выбор фаз волновых функций $\psi_n(\mathbf{r})$, при котором интеграл $B_{n,n+1}$ в (2.1) является действительной величиной, в рассматриваемом случае обеспечивает мнимость межузельного матричного элемента дипольного момента $\mathbf{d}_{n,n+1}$ в (8.1). 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 (3.5), $\varphi_k \rightarrow 0$, для всех $k \neq \pm\pi/2$. Поэтому в (8.4) $\mathbf{d}_{k,k-\pi} \rightarrow 0$, и все дипольные переходы запрещены. Если $\xi \neq 0$, то в (8.4) $\mathbf{d}_{k,k-\pi} \neq 0$ и соответствующие дипольные переходы разрешены. Поскольку в этом случае первой зоной Бриллюэна является область $k \in (-\pi/2, \pi/2)$, данные переходы оказываются вертикальными межзонными в спектре (3.6).

9. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ИЗЛУЧЕНИЕМ

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

$$V = -\mathbf{dE}(t) = -\mathbf{d} \int \mathbf{E}_\omega e^{-i\omega t} d\omega, \quad (9.1)$$

где e_ω и ω — соответственно амплитуда и частота спектральной компоненты светового поля.

Рассмотрим случай, когда падающее излучение $E(t)$ является линейно поляризованным вдоль оси кристалла квазимонохроматическим стационарным случайным процессом [29]. Тогда все спектральные компоненты E_ω статистически независимы [29, 30]:

$$\langle E_\omega E_{\omega_1} \rangle = G(\omega)\delta(\omega + \omega_1). \quad (9.2)$$

Здесь $G(\omega)$ — спектральная плотность светового поля, которая для квазимонохроматического сигнала может быть представлена в следующем виде [29]:

$$G(\omega) = I g(|\omega| - \omega_0), \quad (9.3)$$

где ω_0 — несущая частота; $g(x)$ — неотрицательная 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 в данном случае c — скорость света, n — показатель преломления среды).

Используя уравнение Лиувилля [31]

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H + V, \rho], \quad (9.4)$$

с учетом (9.1), (9.2) находим уравнение для диагональных элементов ρ_{kk} матрицы плотности ρ электронной подсистемы во втором порядке теории возмущений:

$$\frac{\partial \rho_{kk}}{\partial t} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_s |d_{ks}|^2 G\left(\frac{E_s - E_k}{\hbar}\right) (\rho_{ss} - \rho_{kk}), \quad (9.5)$$

где d_{ks} — матричный элемент оператора дипольного момента (8.4). 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 (9.5) переходит в хорошо известное золотое правило Ферми для вероятности вынужденных переходов [30]:

$$\frac{\partial \rho_{k, k-\pi}}{\partial t} = \frac{\pi}{2\hbar} |E_0 d_{k, k-\pi}|^2 \delta(2E_k - \hbar\omega_0). \quad (9.6)$$

В (9.6) предполагается, что нижний уровень (с квазиволновым числом $k - \pi$) заполнен, а верхний (с квазиволновым числом k) пустой.

С учетом (8.4), (3.6) из (9.5) получаем

$$\frac{\partial \rho_{kk}}{\partial t} = \frac{2\pi}{\hbar^2} d_k^2 G\left(\frac{2\varepsilon_k}{\hbar}\right) \text{th} \frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T}, \quad (9.7)$$

где

$$d_k = \frac{2d_2}{1 + \varphi_k^2} |(1 - \varphi_k^2) \text{sh} \xi \cos k - 2\varphi_k \text{ch} \xi \sin k|. \quad (9.8)$$

При выводе соотношения (9.7) предполагалось, что спектральная плотность $G(\omega)$ светового поля локализована в области тех частот $\omega_k = 2\varepsilon_k/\hbar$, где электронный спектр ε_k пространственно-неоднородной системы Пайерлса (4.7) совпадает со спектром E_k пространственно-однородной системы (3.6), т.е. имеет место возбуждение электрон-дырочных пар в глубину разрешенной зоны.

Принимая во внимание (3.6), из (9.7) находим кинетическое уравнение для концентрации электрон-дырочных пар $n = 2 \sum_{|k| \leq \pi/2} \rho_{kk}$:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{4\pi}{\hbar^2} \sum_{|k| \leq \pi/2} d_k^2 \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T} \right) G \left(\frac{2\varepsilon_k}{\hbar} \right) - \frac{n - n_0}{\tau}, \quad (9.9)$$

где n_0 — концентрация электрон-дырочных пар в отсутствие светового поля: $n_0 = n(\mu = 0)$. Последнее слагаемое в (9.9) учитывает межзонную релаксацию с временем релаксации τ . Уравнение (9.9) показывает, что изменение концентрации электрон-дырочных пар обусловлено взаимодействием электронной подсистемы со спектральными компонентами светового поля, имеющими частоты $\omega_k = 2\varepsilon_k/\hbar$.

Учитывая (9.3), из уравнения (9.9) для стационарного режима ($\partial n/\partial t = 0$) окончательно получаем

$$I = \frac{(n - n_0)\hbar^2}{4\pi\tau} \left[\sum_{|k| \leq \pi/2} d_k^2 \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{2k_B T} \right) g \left(\frac{2\varepsilon_k}{\hbar} - \omega_0 \right) \right]^{-1}. \quad (9.10)$$

Уравнения (5.8), (5.6), (9.10) образуют замкнутую систему относительно внутренних параметров μ , n , ξ пространственно-однородной ($\zeta = 0$) системы Пайерлса при заданных внешних параметрах T , I , ω_0 и т.д.

10. ВОЗБУЖДЕНИЕ МОНОХРОМАТИЧЕСКИМ СВЕТОВЫМ ПОЛЕМ

Анализ уравнения (9.10) с учетом соотношения (7.4), выполняющегося при $T \neq 0$, проведем для монохроматического светового поля, когда фактор формы $g(x) = \delta(x)$. Перейдем в (9.10) от суммирования к интегрированию по dE , имея в виду, что плотность $\nu(E)$ электронных состояний, соответствующая спектру (3.6), имеет вид

$$\nu(E) = \frac{2NE}{\pi \sqrt{(4b^2 \operatorname{ch}^2 \xi - E^2)(E^2 - 4b^2 \operatorname{sh}^2 \xi)}}, \quad (10.1)$$

а матричный элемент оператора дипольного момента d_k при $\varepsilon_k = E$ в соответствии с (9.8), (3.5), (3.6) определяется соотношением

$$d(E) \equiv d_k(\varepsilon_k = E) = \frac{4bd_2 \operatorname{ch} \xi \operatorname{sh} \xi}{E}. \quad (10.2)$$

Тогда в приближении $\operatorname{th} [(\hbar\omega_0/2 - \mu)/2k_B T] = 1$ получаем зависимость $I(\xi)$:

$$I = I(\xi) = \frac{\hbar^2 \omega_0 [\xi \ln(\xi_0/\xi) - \pi n_0/N]}{512\pi\tau b^2 d_2^2 \operatorname{ch}^2 \xi \operatorname{sh}^2 \xi} \sqrt{[16b^2 \operatorname{ch}^2 \xi - (\hbar\omega_0)^2] [(\hbar\omega_0)^2 - 16b^2 \operatorname{sh}^2 \xi]}. \quad (10.3)$$

В случае $T = 0$, как следует из (9.10), (6.2), (10.1), (10.2), аналогичные вычисления приводят к следующему выражению:

$$I = I(\xi) = \frac{\hbar^2 \omega_0 (\xi_0 - \xi) \sqrt{\xi/\xi_0}}{512\pi\tau b^2 d_2^2 \text{ch}^2 \xi \text{sh}^2 \xi} \sqrt{[16b^2 \text{ch}^2 \xi - (\hbar\omega_0)^2] [(\hbar\omega_0)^2 - 16b^2 \text{sh}^2 \xi]}. \quad (10.4)$$

Таким образом, для случая $T = 0$ мы получили зависимости $I(\xi)$ (10.4), $n(\xi)$ (6.2), $\zeta(n)$ (6.8), $\lambda(n)$ (6.10). Эти формулы неявно в параметрической форме задают зависимости концентрации n электрон-дырочных пар, параметра модуляции ζ и периода λ сверхструктуры от интенсивности светового поля I .

При $T \neq 0$ имеем соотношения $I(\xi)$ (10.3), $n(\xi)$ (7.4), $\lambda(n, \xi)$ (7.12), которые определяют в неявном виде $n(I)$ и $\lambda(I)$.

Проведем численные оценки. Положив характерные численные значения физических величин для VO_2 : $b \approx 0.3$ эВ, $N \approx 10^{23}$ см $^{-3}$, $\xi_0 \approx 0.5$ [4, 7]; $\tau \sim 10^{-11}$ с [27]; $d_2 \sim 10^{-18}$ СГС [30, 32], из (10.3), (10.4) с учетом (7.5), (6.6) получаем, что в точке фотоиндуцированного фазового перехода полупроводник-металл $I_1(T = 0) \approx I_1(T = 100 \text{ К}) \sim 10^6$ СГС. Это соответствует интенсивности светового поля $I_1 c/2\pi \sim 10^{15}$ СГС $\sim 10^8$ Вт/см 2 . Фотоиндуцированная сверхструктура может наблюдаться при значениях $I \in (I_c, I_1)$, где $I_c(T = 0) = 0$. Для $T = 100 \text{ К}$ из формул (7.11), (7.4), (10.3) получаем $I_1 - I_c \approx 2 \cdot 10^5$ СГС, что соответствует интенсивности светового поля $c(I_1 - I_c)/2\pi \approx 2 \cdot 10^{14}$ СГС $\approx 2 \cdot 10^7$ Вт/см 2 .

11. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные в рамках развитой в настоящей работе теории достаточно большие значения критических интенсивностей: $I_1 c/2\pi \approx I_c c/2\pi \sim 10^7 - 10^8$ Вт/см 2 , по нашему мнению, обусловлены тем фактом, что для наблюдения фотоиндуцированных эффектов образования сверхструктуры и фазового перехода полупроводник-металл требуется высокая концентрация неравновесных электрон-дырочных пар $n_c \sim n_1 \sim 0.05N$ (см. численные оценки в конце разд. 7). Величину n_c (а следовательно, и I_c) можно понизить путем уменьшения температуры T (см. (7.11)). Однако, как показывают численные оценки, даже для низких температур $T \approx 1 \text{ К}$ значения критической концентрации n_c и интенсивности I_c остаются весьма большими: $n_c \approx 5 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$, $I_c c/2\pi \approx 7 \cdot 10^6$ Вт/см 2 .

Для экспериментального наблюдения предсказанного явления следует использовать очень тонкие (вплоть до атомных размеров) нитевидные (одномерные) или пленочные (двумерные) образцы, находящиеся в прозрачном на частоте излучения лазера материале с хорошим теплоотводом (например, в сверхтекучем гелии).

Другим возможным способом не допустить сильного нагрева системы является использование мощного короткоимпульсного лазерного облучения. В этом случае формулы из разд. 7, в частности выражения для критических концентраций n_1 (7.5) и n_c (7.11), остаются в силе, если длительность лазерного импульса в несколько раз превышает характерные времена релаксации $\tau_{ph} \sim 10^{-13}$ с и $\tau_e \sim 10^{-14}$ с соответственно фононной и внутризонной электронной подсистем.

В связи со сказанным выше в качестве примера отметим эксперимент [18], в котором при облучении пленки двуокиси ванадия лазерным импульсом пикосекундного диапазона с интенсивностью $I \approx 5 \cdot 10^8$ Вт/см 2 наблюдался фотоиндуцированный

фазовый переход полупроводник-металл. При этом, как показали проведенные нами численные оценки, критическая концентрация неравновесных носителей в точке фазового перехода составляла величину $n_1/N \sim 10^{-2}$, а изменение температуры образца в полупроводниковой фазе не превышало значения $\Delta T \approx 10$ К.

По-видимому, эксперимент, аналогичный описанному в работе [18], но проведенный при низких температурах ($T < T_c$), позволит наблюдать также и фотоиндуцированную сверхструктуру. Температуру T образца следует делать возможно более низкой, поскольку в соответствии с соотношением (7.11) это приводит к снижению порогового значения критической концентрации n_c неравновесных электрон-дырочных пар, при превышении которого в пайерлсовском полупроводнике появляется рассматриваемая в настоящей работе сверхструктура.

12. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, в настоящей работе проведено исследование поведения поведения низкотемпературной фазы системы Пайерлса при возбуждении в ней неравновесных электрон-дырочных пар. Показано, что при увеличении суммарной концентрации n возбужденных электрон-дырочных пар (включающей тепловые и фотовозбуждения) параметр порядка ξ фазового перехода металл-полупроводник плавно уменьшается до величины ξ_1 ((7.4), (7.5), рис. 2), а при концентрации n_1 (7.5) происходит скачкообразный переход в металлическую фазу.

При низких температурах $T < T_c$, где T_c определяется формулой (7.15), и концентрации электрон-дырочных пар $n_c < n < n_1$ (7.11), (7.5) в системе Пайерлса формируется пространственно-неоднородная периодическая структура, которая представляет собой одномерную пространственную модуляцию ширины запрещенной зоны E_g электронного спектра с пространственным периодом $\lambda = 2\pi r_0/k_0$ (7.12):

$$E_g = 4b \operatorname{sh} \left\{ \xi \left[1 + \zeta \cos \left(k_0 \left(m - \frac{1}{2} \right) \right) \right] \right\}, \quad (12.1)$$

где m — номер атома в цепочке.

В момент образования при $n = n_c$ период λ гетероструктуры определяется формулой (7.13), а затем при увеличении n уменьшается в соответствии с уравнением (7.12). После прохождения светового импульса, когда концентрация n опускается ниже критической ($n < n_c$), гетероструктура исчезает.

При температуре $T = 0$ фотоиндуцированная гетероструктура существует в полупроводниковой фазе системы Пайерлса при любой концентрации $n < n_1$ (6.6), так как в этом случае $n_c = 0$. Пространственный период гетероструктуры λ (6.10) при увеличении n монотонно убывает от $\lambda(n = 0) = \infty$ до $\lambda(n = n_1) = \lambda_1$ (6.11). Параметр ζ (6.8), модулирующий ширину запрещенной зоны (12.1), при росте n возрастает от $\zeta(n = 0) = 0$ до $\zeta(n = n_1) = \zeta_1$ (6.9).

В предположении, что фотовозбуждение неравновесных электрон-дырочных пар обусловлено электрическим дипольным взаимодействием электронной подсистемы с пролетающими фотонами, получены выражения для интенсивности I светового поля, при которой возможно наблюдение фотоиндуцированной сверхструктуры, и проведены численные оценки (см. разд. 10). Показано, что сверхструктура формируется при значениях интенсивности $I \in (I_c, I_1)$, где $I_c(T = 0) = 0$, и монотонно растет до значения $I_c(T = T_c) = I_1$. Значение I_1 при изменении T меняется незначительно ($I_1(T = 0) \simeq I_1(T = T_c)$).

В заключение отметим, что наблюдавшаяся к настоящему времени в эксперименте фотоиндуцированная сверхрешетка чередующихся металлической и полупроводниковой фаз в пленке двуокиси ванадия на подложке представляет собой необратимую оставшуюся после прохождения импульса структуру, период которой $\lambda \sim 1$ мкм [19], и в рамках построенной в настоящей работе теории, по-видимому, интерпретирована быть не может. Эксперименты по обнаружению при низких температурах термодинамически неравновесной сверхструктуры, исчезающей после окончания облучения, насколько известно автору, пока не проводились.

Литература

1. Л. Н. Булаевский, УФН 115, 263 (1975).
2. С. Н. Артеменко, А. Ф. Волков, С. В. Зайцев-Зотов, УФН 166, 434 (1996).
3. Л. П. Горьков, УФН 144, 381 (1984).
4. А. А. Бугаев, Б. П. Захарченя, Ф. А. Чудновский, *Фазовый переход металл-полупроводник и его применение*, Наука, Ленинград (1979), сс. 28, 106.
5. Р. О. Зайцев, Е. В. Кузьмин, С. Г. Овчинников, УФН 148, 603 (1986).
6. А. Л. Семенов, ФТТ 39, 925 (1997).
7. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, А. Л. Семенов, Вестн. Моск. ун-та, сер. 3: физика, астрономия 30, 52 (1989).
8. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, А. Л. Семенов, ФТТ 31, 261 (1989).
9. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, А. Л. Семенов, Вестн. Моск. ун-та, сер. 3: физика, астрономия 31, 99 (1990).
10. А. Л. Семенов, ФТТ 36, 1974 (1994).
11. А. Л. Семенов, С. В. Сухов, Изв. вузов, Физика, вып. 6, 120 (1996).
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, сер. 3: физика, астрономия 32, 63 (1991).
14. K. F. Berggren and V. A. Huberman, Phys. Rev. B 18, 3369 (1978).
15. В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, С. Н. Молотков, Микроэлектроника 12, 499 (1983).
16. В. Ф. Елесин, В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, ЖЭТФ 71, 714 (1976).
17. А. А. Бугаев, Б. П. Захарченя, Ф. А. Чудновский, Письма в ЖЭТФ 33, 643 (1981).
18. А. А. Бугаев, В. В. Гудялис, Б. П. Захарченя, Ф. А. Чудновский, Письма в ЖЭТФ 34, 452 (1981).
19. А. А. Бугаев, А. В. Ключков, ФТТ 26, 3487 (1984).
20. В. И. Емельянов, И. Ф. Уварова, ЖЭТФ 94, 255 (1988).
21. Р. Ф. Мамин, ЖЭТФ 111, 1465 (1997).
22. Ю. В. Копаев, В. В. Меняйленко, С. Н. Молотков, ЖЭТФ 89, 1404 (1985).
23. Ю. В. Копаев, Р. Х. Тимеров, ЖЭТФ 63, 290 (1972).
24. О. Маделунг, *Физика твердого тела: локализованные состояния*, Наука, Москва (1985), с. 144.
25. Н. Н. Боголюбов, Н. Н. Боголюбов (мл.), *Введение в квантовую статистическую механику*, Наука, Москва (1984), с. 282.
26. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва, (1989), с. 167.
27. Н. Р. Белашенков, В. Б. Карасев, А. А. Солунин и др., ФТТ 36, 2475 (1994).
28. В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников, *Физика полупроводников*, Наука, Москва, (1977), с. 255.
29. С. А. Ахманов, Ю. Е. Дьяков, А. С. Чиркин, *Введение в статистическую радиофизику и оптику*, Наука, Москва (1981), с. 42.
30. Д. Н. Клышко, *Физические основы квантовой электроники*, Наука, Москва (1986), с. 22.
31. А. С. Давыдов, *Теория твердого тела*, Наука, Москва (1976), с. 296.
32. А. В. Андреев, В. И. Емельянов, Ю. А. Ильинский, *Кооперативные явления в оптике: Сверхизлучение. Бистабильность. Фазовые переходы*, Наука, Москва (1988) с. 256.