КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 535.372

МЕТОД СИЛЬНОЙ СВЯЗИ В ТЕОРИИ ЛОКАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ ТОЧЕЧНОГО ДЕФЕКТА ПРИ СТРУКТУРНОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ

В. Д. Вернер, С. В. Фоминых

При структурном фазовом переходе в твердом теле происходит изменение электрофизических, оптических свойств как самого твердого тела, так и точечного дефекта (ТД) в нем, например, электронной структуры. Теоретическое рассмотрение фазового перехода и электронной структуры ТД при переходе является сложной задачей [1]. Рассмотрение одномерной модели позволит качественно понять влияние структурного искажения на электронную структуру ТД, в частности, на энергетическое положение локального состояния.

В методе сильной связи волновые функции электронов рассматриваемой одномерной цепочки с базисом из двух атомов представим в виде линейной комбинации блоховских функций

$$\psi^{\text{э}}_{\lambda,\mathbf{k}} = c_1^{\lambda}\left\{N^{-1/2}\sum_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}\varphi_1(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)\right\} + c_2^{\lambda}\left\{N^{-1/2}\sum e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}\varphi_2(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j-\mathbf{a})\right\}, \tag{1}$$

где $\varphi_1(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)$, $\varphi_2(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j-\mathbf{a})$ — ортогональные базисные функции Ванье, a — расстояние между атомами базиса, для определенности атом 1 расположен в начале координат. Опуская несложные вычисления, энергетические спектры валентной зоны и зоны проводимости одномерной модели соответственно равны

$$E_k = E_0 \pm \frac{1}{2}(\Delta^2 + f_1^2 + f_2^2 + 2f_1f_2\cos k(a+b))^{1/2}, \tag{2}$$

где $\hat{H}$ — гамильтониан системы, $f_1 = \langle\varphi_1(r)|\hat{H}|\varphi_1(r-a)$, $f_2 = \langle\varphi_2(r+b) \times |\hat{H}|\varphi_1(r)\rangle$, $f_{11} = \langle\varphi_1(r)|\hat{H}|\varphi_1(r)\rangle$, $f_{22} = \langle\varphi_2(r-a)|\hat{H}|\varphi_2(r-a)\rangle$, $\Delta = f_{11} - f_{22}$, $E_0 = \frac{1}{2}(f_{11}+f_{22})$, $(d+b)$ — период цепочки. Для удобства отсчета энергии положим $E_0 = 0$.

В одноэлектронном приближении энергетический спектр локальных состояний определяется уравнением (3). Здесь $\hat{G}$ — функция Грина бездефектного кристалла, $\hat{V}$ — потенциал возмущения ТД

$$\det\|1 - \hat{G}\hat{V}\| = 0. \tag{3}$$

Применение метода сильной связи для изучения точечного дефекта является оправданным в случае короткодействующего потенциала ТД [2-4]. Поэтому при рассмотрении модельного возмущения ТД в начале координат с отличным от нуля только членом $V_{11} = \langle\varphi_1(r)|\hat{V}|\varphi_1(r)\rangle$ спектр локальных состояний определяется из соотношения

$$1 - V_{11}G_{11} = 0, \quad G_{11} = N^{-1/2} \sum_{\lambda, k} c_{1}^{*\lambda} c_{1}^{\lambda} / (E - E_{\lambda, k}), \tag{4}$$

где $E_{\lambda,k}$ — энергетический спектр λ-зоны. Тогда с учетом (2) матричный элемент функции Грина G_{11} равен

$$G_{11} = -(E + \Delta) \left[(\Delta^2 - E^2)^2 + 2 (f_1^2 + f_2^2) (\Delta^2 - E^2) + (f_1^2 - f_2^2)^2\right]^{-1/2}. \tag{5}$$

При структурном фазовом переходе смещение подрешетки из атомов типа 2 относительно подрешетки из атомов типа 1 на величину δ изменяет матричные члены G_{11} и V_{11}, определяющие спектр локальных состояний. Считаем δ мало: $(\delta/a)^2 \ll 1$, $(\delta/b)^2 \ll 1$. Воспользуемся для оценки G_{11} и V_{11} при искажении приближением d^{-2} [5], согласно которому двухцентровые члены взаимодействия f_1 и f_2 обратно пропорциональны квадрату расстояния между центрами взаимодействия, а одноцентровые члены f_{11}, f_{22}, V_{11} будут независимы от расстояния между центрами. Тогда

$$f_1(\delta) = f_1 (1 + \delta/a)^{-2}, \quad f_2(\delta) = f_2 (1 - \delta/b)^{-2}. \tag{6}$$

В случае $f_1^2 + f_2^2 \gg \Delta^2$ возможно аналитическое решение (3) при учете (5), что соответствует рассмотрению модели с узкой шириной запрещенной зоны. Неискаженная цепочка с дефектом в нулевом узле может иметь и не иметь центр инверсии.

При наличии центра инверсии $a=b$, $f=f_1=f_2$. Тогда, рассчитав функцию Грина цепочки со структурным искажением $G_{11}(\delta)$, находим выражение (8) положения локального состояния $E_l(\delta)$ в запрещенной зоне шириной $2\,|\Delta|$

$$G_{11}(\delta) = -\frac{1}{2f} (E + \Delta) (\Delta^2 - E^2 + 16 f^2 \delta^2 a^{-2})^{-1/2}, \tag{7}$$

$$E_l(\delta) = \Delta \left[(1 + c^2\delta^2)^{1/2} - g^2\right] / (1 + g^2), \tag{8}$$

где $g = V_{11}/(2f)$, $c^2 = 16\,(1+g^2)(f/\Delta a)^2$. В неискаженной цепочке $\delta=0$ локальное состояние существует в запрещенной зоне при условии $g\Delta < 0$. Из (8) имеем, что изменение энергетического положения локального состояния не зависит от знака смещения и линейно зависимо от параметра $(1+c^2\delta^2)^{1/2}$ при малом структурном искажении. При сильном возмущении $|g| \gg 1$, характерном для вакансии, наблюдается заглубление связанного состояния, т. е. уровень движется к середине запрещенной зоны. При слабом возмущении $|g| < 1$ уровень подымается.

В отсутствие центра инверсии $a \neq b$, $f_1 \neq f_2$. В случае $(f_1^2 - f_2^2)^2 \gg (f_1^2 + f_2^2)\,\Delta^2$ функция Грина и уровень локального состояния в зависимости от смещения δ при структурном искажении соответственно равны

$$G_{11}(\delta) = -(E + \Delta)\,|f_1^2 - f_2^2 - 8\delta\,(f_1^2 a^{-1} - f_2^2 b^{-1})|^{-1}, \tag{9}$$

$$E_l(\delta) = -|f_1^2 - f_2^2 - 8\delta\,(f_1^2 a^{-1} - f_2^2 b^{-1})|\,V_{11}^{-1} - \Delta. \tag{10}$$

Заметим, что в исходной цепочке $\delta=0$ локальное состояние существует при условии $\Delta V_{11} < 0$. Качественный вывод из (10) заключается в том, что в отсутствие центра инверсии сдвиг уровня локального состояния пропорционален величине структурного искажения δ, и уровень либо заглубляется, либо подымается в зависимости от знака δ.

Таким образом, методом сильной связи для одномерной модели выявлено влияние структурного искажения на положение локального состояния точечного дефекта с короткодействующим потенциалом возмущения. Показано, что при наличии центра инверсии в исходной решетке энергетическое положение локального состояния точечного дефекта линейно зависимо от величины $(1+c^2\delta^2)^{1/2}$, а в отсутствие центра инверсии от δ, где δ — смещение подрешеток относительно друг друга.

Литература

[1] *Брус А., Каули Р.* Структурные фазовые переходы. М.: Мир, 1984. 408 с.
[2] *Koster G. F., Slater J. R.* Phys. Rev. B, 1954, vol. 95, N 3, p. 1119—1131.
[3] *Baraff G. A., Schluter M., Allan G.* Phys. Rev., 1983, vol. B27, N 2, p. 1010—1016.
[4] *Клочихин А. А., Оглоблин С. Г.* ФТТ, 1984, т. 26, № 11, с. 3467—3469.
[5] *Харрисон У* Электронная структура и свойства твердых тел, т. 1. М.: Мир, 1983. 381 с.

Московский институт
электронной техники
Москва

Поступило в Редакцию
22 мая 1987 г.

УДК 537.312.62

Физика твердого тела, том 30, в. 3, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 3, 1988

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБНАРУЖЕНИЕ РАЗБАЛАНСА ЗАРЯДА КВАЗИЧАСТИЦ, ВОЗНИКАЮЩЕГО ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ НА СВЕРХПРОВОДНИК ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Г. А. Овсянников, С. В. Проклов, И. Л. Серпученко

При наличии внешнего воздействия в сверхпроводнике возможно возникновение двух типов неравновесных состояний, характеризующихся возмущением симметричной и несимметричной частей функции распределения квазичастиц [1]. Первый тип неравновесных возбуждений сопровождается изменением модуля параметра порядка Δ и неоднократно наблюдался в сверхпроводниках при однородном воздействии, например, при облучении сверхпроводника высокочастотным электромагнитным полем. Второй тип неравновесных явлений характеризуется существованием разбаланса электронной и дырочной ветвей спектра элементарных возбуждений сверхпроводника — разбаланса заряда квазичастиц (РЗК). Он возникал из-за инжекции избыточных квазичастиц в неоднородной системе при протекании тока через границу сверхпроводника с нормальным металлом или другим сверхпроводником. Несмотря на большое число экспериментальных работ, посвященных изучению РЗК в неоднородной системе, результаты по обнаружению РЗК при однородном воздействии слабого [1] электромагнитного поля отсутствуют.

В настоящей работе представлены результаты экспериментального обнаружения и исследования разбаланса заряда квазичастиц в сверхпроводниках, возникающего при воздействии СВЧ поля. Возбуждение под действием СВЧ поля РЗК должно приводить к появлению в сверхпроводнике градиентно-инвариантного потенциала μ, связанного с разбалансом населенностей ветвей Q простым соотношением $\mu = Q/N(0)\,e^2$. Величину μ обычно измеряют с помощью перехода сверхпроводник—изолятор—нормальный металл (SIN), величина напряжения на котором при нулевом смещении связана с неравновесным μ соотношением [3]

$$\tilde{V}_{\text{нер}} = F(T)\,\mu, \tag{1}$$

где $F(T) \sim 1$ при $T \sim T_c$. Так, что при воздействии СВЧ поля $\tilde{V}_{\text{нер}}$ представляет собой разность напряжений между автономной и возмущенной ВАХ в точке $I=0$, т. е. детекторный отклик SIN перехода на СВЧ поле.

На рис. 1, *а* показана упрощенная схема эксперимента. СВЧ излучение частотой 45 ГГц подавалось в криостат по волноводу и попадало на обра-

---

[1] При большой амплитуде СВЧ поля наблюдается переход к неоднородной системе, характеризующейся наличием центров проскальзывания фазы [2].