Лекція 9

Фазові переходи напівметал - діелектрик.

Давайте розглянемо метал із малою концентрацією носіїв. Якщо валентна зона такої речовини перекривається з більш високою зоною провідності, як на Рис. 1а, то система буде поводити себе як метал.

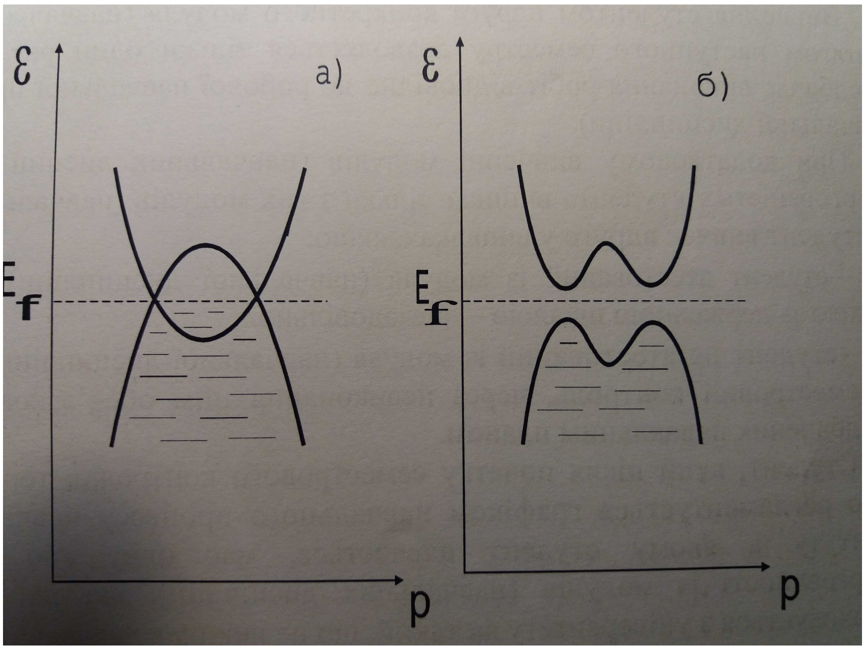

Рис.1. Зонна картина напівметалу для переходу метал - діелектрик у моделі Келдиша - Копаєва: а) - металічний стан, б) - діелектричний стан (кулонівська щілина у спектрі)

У такій системі можливі як електронна, так і діркова провідність, і, крім того, вільні носії можуть пов'язуватися в електрон - діркові пари - екситони, що відображається на зонній картині (Рис. 1б). А саме, як наслідок з'являється кулонівська щілина в спектрі, що розділяє зони. Збільшення температури може розривати екситонний зв'язок, звідки витікає, що такий перехід може відбуватися за температурою.

Розрахуємо тепер, притримуючись викладення матеріалу в [1], фазовий перехід діелектрик - метал, враховуючи існування електрон-діркових пар у системі.У відповідності з Рис.1 уведемо до розгляду гамільтоніан напівметалу, приймаючи до уваги тільки валентну зону та зону провідності поблизу рівня фермі:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ E_1(\mathbf{p}) \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} + E_2(\mathbf{p}) \hat{b}^+_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \right\} + \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{b}^+_{\mathbf{p}} U_{\mathbf{pp}'} \hat{a}_{\mathbf{p}'} \hat{b}_{\mathbf{p}'} , \tag{1}$$

де $\hat{a}^+_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}}$ - оператори народження та знищення електрона в зоні провідності з імпульсом $\mathbf{p}$, $\hat{b}^+_{\mathbf{p}}, \hat{b}_{\mathbf{p}}$ - оператори народження та знищення дірки в валентній зоні, $E_1(\mathbf{p})$, $E_2(\mathbf{p})$ - відповідні енергії. Перший доданок в (1) описує кінетичну енергію електронів і дірок, другий доданок - породження й знищення екситонів за рахунок кулонівської взаємодії притягання $U_{\mathbf{pp}'}$. Для більшої ясності можна ввести до розгляду оператори народження $\hat{\mu}^+_{\mathbf{p}} \equiv \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{b}^+_{\mathbf{p}}$ та знищення $\hat{\mu}_{\mathbf{p}} \equiv \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}$ екситону. Для спрощення картини будемо вважати далі що маси електрона m_e дорівнює масі дірки m_h,

$$m_e = m_h \equiv m$$

і введемо позначення

$$E_1(\mathbf{p}) = E_2(\mathbf{p}) \equiv \xi_{\mathbf{p}} , \quad \xi_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m} - \varepsilon_F \tag{2}$$

(тут ε_F - енергія Фермі), завдяки чому уведений гамільтоніан (1) набуде вигляду:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \xi_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{b}^+_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \right\} + \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \hat{\mu}^+_{\mathbf{p}} U_{\mathbf{pp}'} \hat{\mu}_{\mathbf{p}'} . \tag{3}$$

Другому доданку в (3) можна надати вигляду взаємодії з середнім полем

$$\Delta_{\mathbf{p}} \equiv \sum_{\mathbf{p}'} U_{\mathbf{pp}'} \left\langle \hat{a}_{\mathbf{p}'} \hat{b}_{\mathbf{p}'} \right\rangle , \tag{4}$$

якщо прийняти наступне наближення (згадаймо процедуру введення середнього поля Вейсса):

$$\hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{b}^+_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}'} \hat{b}_{\mathbf{p}'} \approx \left\langle \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{b}^+_{\mathbf{p}} \right\rangle \hat{a}_{\mathbf{p}'} \hat{b}_{\mathbf{p}'} + \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{b}^+_{\mathbf{p}} \left\langle \hat{a}_{\mathbf{p}'} \hat{b}_{\mathbf{p}'} \right\rangle . \tag{5}$$

Ураховуючи (4), (5), із (3) здобудемо:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \xi_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{b}^+_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \right\} + \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \Delta_{\mathbf{p}} \hat{a}^+_{\mathbf{p}} \hat{b}^+_{\mathbf{p}} + \Delta^*_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}'} \hat{b}_{\mathbf{p}'} \right\} . \tag{6}$$

Подальша задача полягає в діагоналізації отриманого гамільтоніану, для чого вводяться канонічні перетворення операторів

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} = u_{\mathbf{p}}\hat{\alpha}_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}}\hat{\beta}^{+}_{\mathbf{p}}, \qquad \hat{b}_{\mathbf{p}} = u_{\mathbf{p}}\hat{\beta}_{\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}}\hat{\alpha}^{+}_{\mathbf{p}}, \tag{7}$$

$$\hat{a}^{+}_{\mathbf{p}} = u_{\mathbf{p}}\hat{\alpha}^{+}_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}}\hat{\beta}_{\mathbf{p}}, \qquad \hat{b}^{+}_{\mathbf{p}} = u_{\mathbf{p}}\hat{\beta}^{+}_{\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}}\hat{\alpha}_{\mathbf{p}}$$

таким чином, щоб вони задовольняли ферміонним законам комутації:

$$\left\{\hat{\alpha}_{\mathbf{p}}, \hat{\alpha}^{+}_{\mathbf{p}'}\right\} = \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}, \qquad \left\{\hat{\beta}_{\mathbf{p}}, \hat{\beta}^{+}_{\mathbf{p}'}\right\} = \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}, \qquad \left\{\hat{\alpha}_{\mathbf{p}}, \hat{\beta}_{\mathbf{p}'}\right\} = 0, \tag{8}$$

що можливо, як можна впевннитись, за умови справедливості співвідношення

$$u^2_{\mathbf{p}} + v^2_{\mathbf{p}} = 1. \tag{9}$$

Підставляючи (7) до (6) й використовуючи закони комутації (8), гамільтоніан можна звести до наступного вигляду

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \left\{\hat{\alpha}^{+}_{\mathbf{p}}\hat{\alpha}_{\mathbf{p}} + \hat{\beta}^{+}_{\mathbf{p}}\hat{\beta}_{\mathbf{p}}\right\}\left\{\xi_{\mathbf{p}}\left(u^2_{\mathbf{p}} - v^2_{\mathbf{p}}\right) - 2u_{\mathbf{p}}v_{\mathbf{p}}\Delta_{\mathbf{p}}\right\} + \tag{10}$$

$$+\sum_{\mathbf{p}} \left\{\hat{\alpha}^{+}_{\mathbf{p}}\hat{\beta}^{+}_{\mathbf{p}} + \hat{\alpha}_{\mathbf{p}}\hat{\beta}_{\mathbf{p}}\right\}\left\{\Delta_{\mathbf{p}}\left(u^2_{\mathbf{p}} - v^2_{\mathbf{p}}\right) + 2u_{\mathbf{p}}v_{\mathbf{p}}\xi_{\mathbf{p}}\right\}.$$

Завдяки останньому доданку здобутий гамільтоніан не має діагонального виду. Зануюючи коефіцієнт при цьому доданку, ми добиваємось діагонального вигляду для гамільтоніану, здобуваючи при цьому ще одне рівняння (поряд із уже існуючим (9)) для визначення двох функцій $u_{\mathbf{p}}, v_{\mathbf{p}}$:

$$\Delta_{\mathbf{p}}\left(u^2_{\mathbf{p}} - v^2_{\mathbf{p}}\right) + 2u_{\mathbf{p}}v_{\mathbf{p}}\xi_{\mathbf{p}} = 0. \tag{11}$$

Розв’язок цих рівнянь дається формулами

$$u^2_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{p}}}{\varepsilon_{\mathbf{p}}}\right), \quad v^2_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{p}}}{\varepsilon_{\mathbf{p}}}\right), \quad \varepsilon_{\mathbf{p}} \equiv \sqrt{\xi^2_{\mathbf{p}} + \Delta^2_{\mathbf{p}}}, \tag{12}$$

де введена величина $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ має сенс спектру елементарних збуджень над поверхнею Фермі, оскільки гамільтоніан набуває діагонального вигляду - гамільтоніану ідеального газу квазічастинок:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}}\left\{\hat{\alpha}^{+}_{\mathbf{p}}\hat{\alpha}_{\mathbf{p}} + \hat{\beta}^{+}_{\mathbf{p}}\hat{\beta}_{\mathbf{p}}\right\}. \tag{13}$$

З огляду на останню із формул (12) можна говорити про появу скінченної кулонівської щілини (порядку $2\Delta_{\mathbf{p}}$) на рівні Фермі між валентною зоною та зоною провідності (див. Рис. 1б).

Залишається визначити величину цієї щілини в термінах фізичних характеристик системи. Уведемо з цією метою поняття функцій розподілу елементарних збуджень:

$$n_{\mathbf{p}}^{\alpha} = \left\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{p}}^{+} \hat{\alpha}_{\mathbf{p}} \right\rangle, \; n_{\mathbf{p}}^{\beta} = \left\langle \hat{\beta}_{\mathbf{p}}^{+} \hat{\beta}_{\mathbf{p}} \right\rangle \tag{14}$$

і врахуємо, що завдяки нашому спрощенню $m_e = m_h \equiv m$ маємо

$$n_{\mathbf{p}}^{\alpha} = n_{\mathbf{p}}^{\alpha} \equiv n_{\mathbf{p}}. \tag{15}$$

Тоді функція розподілу електронів $f_{\mathbf{p}}$ може бути виражена через функції (14), (15):

$$f_{\mathbf{p}} = \left\langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^{+} \hat{a}_{\mathbf{p}} \right\rangle = u_{\mathbf{p}}^{2} \left\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{p}}^{+} \hat{\alpha}_{\mathbf{p}} \right\rangle + v_{\mathbf{p}}^{2} \left\langle \hat{\beta}_{\mathbf{p}} \hat{\beta}_{\mathbf{p}}^{+} \right\rangle = u_{\mathbf{p}}^{2} n_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}}^{2} \left(1 - n_{\mathbf{p}} \right). \tag{16}$$

Ми врахували при цьому, що внесок членів типу $\left\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{p}}^{+} \hat{\beta}_{\mathbf{p}}^{+} \right\rangle$, $\left\langle \hat{\beta}_{\mathbf{p}} \hat{\alpha}_{\mathbf{p}} \right\rangle$ дорівнює нулеві. Зазначимо, що функція $n_{\mathbf{p}}$ є фермієвською функцію розподілу з нульовим хімічним потенціалом, оскільки число квазічастинок не зберігається:

$$n_{\mathbf{p}} = \frac{1}{e^{\varepsilon_{\mathbf{p}}/T} + 1}. \tag{17}$$

Тепер ми маємо змогу здобути рівняння для визначення величини $\Delta_{\mathbf{p}}$, а тим самим, і величини щілини в спектрі елементарних збуджень, див. вище. Для цього підставимо в визначення (4) формули (7), (12), (14). Після простих перетворень здобудемо

$$\Delta_{\mathbf{p}} = -\sum_{\mathbf{p}'} U_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} u_{\mathbf{p}'} v_{\mathbf{p}'} \left(1 - 2n_{\mathbf{p}'} \right) = -\sum_{\mathbf{p}'} U_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \frac{\Delta_{\mathbf{p}'}}{2\sqrt{\xi_{\mathbf{p}'}^{2} + \Delta_{\mathbf{p}'}^{2}}} \left(1 - 2n_{\mathbf{p}'} \right). \tag{18}$$

Будемо вважати далі, що взаємодія $U_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ менша нуля в певному діапазоні $\left| \xi_{\mathbf{p}} - \xi_{\mathbf{p}'} \right| < \omega$, тобто там, де існує електрон-діркове притягання, й покладемо $U_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = -V$ в інтервалі $(-\omega, \omega)$ і рівним нулеві поза цим інтервалом. Тоді з (18) з урахуванням того, що величина Δ за таких умов від імпульсу взагалі не залежить, здобудемо наступне рівняння:

$$\Delta = V\int_{-\omega}^{\omega} d\xi N(\xi)\frac{\Delta}{2\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}\tanh\left(\frac{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}{2T}\right). \tag{19}$$

Зазначимо, що дане рівняння в точності співпадає з рівнянням БКШ, добре відомим у теорії надпровідності. Величина $N(\xi)$ цьому рівнянні є односпіновою густиною станів, $N(\xi)=\rho(\xi)/2\sim\sqrt{\xi+\varepsilon_F}\approx\sqrt{\varepsilon_F}$, що поблизу рівня Фермі майже не залежить від енергії. Якщо визначити константу зв'язку формулою

$$\lambda = N(0)V, \tag{20}$$

то прийдемо до наступного інтегрального рівняння:

$$1=\lambda\int_0^{\omega} d\xi\frac{1}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}\tanh\left(\frac{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}{2T}\right). \tag{21}$$

Зазначимо, що за нульової температури інтеграл (21) береться точно, внаслідок чого отримаємо значення параметра порядку:

$$\Delta=\frac{\omega}{\sinh(1/\lambda)}\approx 2\omega\exp(-1/\lambda), \qquad \lambda\ll 1, \quad T=0. \qquad (19)\ (22)$$

У наближенні $\Delta\to 0$, тобто, в точці фазового переходу $T=T_c$, маємо

$$1=\lambda\int_0^{\omega} d\xi\frac{1}{\xi}th\left(\frac{\xi}{2T_c}\right)=\tanh x\ln x\Big|_0^{\omega/2T_c}-\int_0^{\omega/2T_c}dx\frac{\ln x}{\cosh^2 x}=\ln\left(\frac{2\omega\gamma}{\pi T_c}\right)\Bigg|_{\omega/2T_c\gg 1}, \tag{23}$$

де

$$\gamma=\exp(C), \quad C=0.577=\ln\left(\frac{\pi}{4}\right)-\int_0^{\infty}dx\frac{\ln x}{\cosh^2 x}.$$

Із (23) маємо вирз для критичної температури

$$T_c\approx 1.14\omega\exp(-1/\lambda). \tag{24}$$

Наголосимо, що даний вираз визначає температуру, за якої кулонівська щілина в спектрі пропадає, і речовина переходить із діелектричного до металічного стану. Масштаб цієї температури визначається частотою обрізання ω і константою зв'язку λ. Якщо частота обрізання порядку одного електронвольта (порядок кулонівських енергій), то із-за перенормування за рахунок константи звєєязку критична температураможе бути порядку декількох сотень кельвінів, $T_c \sim 100-500K$.

Допоміжна література.

1. В.Ф.Елесин, В.А. Кашурников. Физика фазовых переходов. Учебное пособие. МФТИ, 1997.