УДК 539.2

Н.С. Буйнов, Н.А. Клиндухов

Взаимодействие сильной электромагнитной волны с сегнетоэлектриками типа порядок-беспорядок при учете туннелирования

Рассмотрим сегнетоэлектрик типа порядок-беспорядок, помещенный в сильное внешнее переменное электромагнитное поле. Поле предполагаем однородным вдоль образца. Оно включается адиабатически, т.е. пренебрегается процессами релаксации, а система «кристалл-поле» считается квазиравновесной. В данной модели рассматривается кристалл, в котором за сегнетоэлектричество «ответственен» только один радикал и не учитываются тепловые колебания решетки.

Гамильтониан с учетом туннелирования будет иметь вид [1]:

$$H(t) = -\hbar\sum_{r}\Omega\sigma_r{}^x - \frac{1}{2}\sum_{r,r'}J(r-r')\sigma_r{}^z\sigma_{r'}{}^z - pE(t)\sum_{r}\sigma_r{}^z. \qquad (1)$$

Первое слагаемое отвечает за эффект туннелирования. В большинстве сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок туннелирование пренебрежимо мало. Но в таких сегнетоэлектриках, как KDP, при фазовом переходе меняет свое положение ион водорода, т.е. радикал малой массы, и пренебрегать туннельными эффектами уже нельзя. Второе слагаемое описывает обменное взаимодействие ячеек, третье – взаимодействие с сильным пространственно-однородным внешним электромагнитным полем $E(t) = E_0\cos(\omega_0 t)$. Здесь p – дипольный момент ячейки.

Преобразуем гамильтониан (1) с помощью унитарного преобразования $U_1 = \frac{1+i\sigma^y}{\sqrt{2}}$. Действительно, легко убедиться, что $U_1^+U_1 = 1$, т.е. матрица U_1 является унитарной. Матрицы Паули $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ преобразуются следующим образом:

$$U_1^{-1}\sigma^x U_1 = -\sigma^z, \quad U_1^{-1}\sigma^z U_1 = \sigma^x, \quad U_1^{-1}\sigma^y U_1 = \sigma^y. \qquad (3)$$

В результате таких преобразований вместо гамильтониана (1) будем иметь гамильтониан

$$H'(t) = \hbar\sum_{r}\Omega\sigma_r{}^z - \frac{1}{2}\sum_{r,r'}J(r-r')\sigma_r{}^x\sigma_{r'}{}^x - pE(t)\sum_{r}\sigma_r{}^x. \qquad (4)$$

В приближении «вращающейся» волны можно пренебречь быстро осциллирующими членами $\sigma^- e^{-i\omega_0 t}$ и $\sigma^+ e^{i\omega_0 t}$. Тогда гамильтониан (4) примет вид:

$$H(t)=\hbar\sum_r \Omega\sigma_r^z-\frac{1}{2}\sum_{r,r'}J(r-r')(\sigma_r^+\sigma_{r'}^+ +\sigma_r^+\sigma_{r'}^- +\sigma_r^-\sigma_{r'}^+ +\sigma_r^-\sigma_{r'}^-)-$$
$$-\frac{pE_0}{2}\sum_r(\sigma_r^- e^{i\omega_0 t}+\sigma_r^+ e^{-i\omega_0 t}), \qquad (5)$$

где введены новые операторы $2\sigma^{\pm}=\sigma^x\pm i\sigma^y$.

Сделаем унитарное преобразование с зависящим от времени оператором $U_2(t)=\exp\left(-\frac{i\omega_0 t}{2}\sum_r \sigma_r^z\right)$. При этом гамильтониан преобразуется по следующему закону [2]:

$$H\to U_2^{-1}HU_2-i\hbar U_2^{-1}\frac{\partial U_2}{\partial t}. \qquad (6)$$

Учитывая соотношения

$$e^{\frac{\xi\sigma^z}{2}}\sigma^+e^{-\frac{\xi\sigma^z}{2}}=\sigma^+e^{\xi},$$
$$e^{\frac{\xi\sigma^z}{2}}\sigma^-e^{-\frac{\xi\sigma^z}{2}}=\sigma^-e^{-\xi}, \qquad (7)$$

и отбрасывая члены с двойными осцилляциями

$$U_2^{-1}\sigma_i^+\sigma_j^+U_2=\sigma^+e^{i2\omega_0 t},\quad U_2^{-1}\sigma_i^-\sigma_j^-U_2=\sigma^-e^{-i2\omega_0 t}, \qquad (8)$$

получим следующий не зависящий явно от времени гамильтониан:

$$H=\hbar\sum_r\left(\Omega-\frac{\omega_0}{2}\right)\sigma_r^z-\frac{1}{2}\sum_{r,r'}J(r-r')(\sigma_r^+\sigma_{r'}^- +\sigma_r^-\sigma_{r'}^+)-\frac{pE_0}{2}\sum_r\sigma_r^x=$$
$$=H=\hbar\sum_r\left(\Omega-\frac{\omega_0}{2}\right)\sigma_r^z-\frac{1}{4}\sum_{r,r'}J(r-r')(\sigma_r^x\sigma_{r'}^x+\sigma_r^y\sigma_{r'}^y)-\frac{pE_0}{2}\sum_r\sigma_r^x. \qquad (9)$$

Затем сделаем еще одно преобразование, обратное первому, с матрицей $U_2=U_1^{-1}=\frac{1-i\sigma^y}{\sqrt{2}}$. Окончательно, гамильтониан примет вид:

$$H=\hbar\sum_r\left(\Omega-\frac{\omega_0}{2}\right)\sigma_r^x-\frac{1}{4}\sum_{r,r'}J(r-r')(\sigma_r^z\sigma_{r'}^z+\sigma_r^y\sigma_{r'}^y)$$
$$-\frac{pE_0}{2}\sum_r\sigma_r^z \qquad (10)$$

При точном резонансе $\omega_0=2\Omega$, первый член в (10) обращается в нуль, и гамильтониан приводится к виду по форме подобному гамильтониану в модели поперечных ферромагнетиков теории анизотропных ферромагнитных кристаллов:

$$H=-\sum_{r,r'}J(r-r')(s_r^z s_{r'}^z+s_r^y s_{r'}^y)-pE_0\sum_r s_r^z, \qquad (11)$$

где $\vec{s}=\frac{1}{2}\vec{\sigma}$ – спиновый оператор.

Рассмотрим следующие две функции Грина:

$$G_{+-}(t-t',r-r')=\theta(t-t')\left\langle\left[s_r^+(t),s_{r'}^-(t')\right]\right\rangle=\left\langle\left\langle s_r^+(t)\middle|s_{r'}^-(t')\right\rangle\right\rangle,$$
$$G_{--}(t-t',r-r')=\theta(t-t')\left\langle\left[s_r^-(t),s_{r'}^-(t')\right]\right\rangle=\left\langle\left\langle s_r^-(t)\middle|s_{r'}^-(t')\right\rangle\right\rangle. \qquad (12)$$

где

$$2s^{+} = \sigma^{x} + i\sigma^{y}, \quad 2s^{-} = \sigma^{x} - i\sigma^{y}. \qquad (13)$$

Уравнения движения в энергетическом представлении для G_{+-} и G_{--}, согласно [3], примут вид:

$$\begin{aligned} EG_{+-}(E, r-r') &= \frac{i\langle s\rangle}{\pi}\delta_{rr'} + \left\langle\left\langle \left[s_r^{+}, H\right] \middle| s_{r'}^{-}\right\rangle\right\rangle_E, \\ EG_{--}(E, r-r') &= \left\langle\left\langle \left[s_r^{-}, H\right] \middle| s_{r'}^{-}\right\rangle\right\rangle_E. \end{aligned} \qquad (14)$$

Воспользовавшись расцеплением Тябликова [3] (данное расцепление соответствует улучшенному методу вторичного квантования), получим:

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle s_r^z s_l^- \middle| s_{r'}^-\right\rangle\right\rangle &= \left\langle s^z\right\rangle \left\langle\left\langle s_l^- \middle| s_{r'}^-\right\rangle\right\rangle, \\ \left\langle\left\langle s_r^z s_l^+ \middle| s_{r'}^-\right\rangle\right\rangle &= \left\langle s^z\right\rangle \left\langle\left\langle s_l^+ \middle| s_{r'}^-\right\rangle\right\rangle. \end{aligned} \qquad (15)$$

Сделаем преобразование Фурье по координатам:

$$\begin{aligned} G_{+-}(E, r-r') &= \frac{1}{N}\sum_{\nu} e^{i\nu(r-r')} G_{+-}(E, \nu), \\ G_{--}(E, r-r') &= \frac{1}{N}\sum_{\nu} e^{i\nu(r-r')} G_{--}(E, \nu) \end{aligned} \qquad (16)$$

и получим следующую систему линейных уравнений для функций Грина (переменные E и ν у функций Грина опустим):

$$G_{+-}\left(E - \frac{i\langle s\rangle}{\pi} - pE_0 - 2\langle s\rangle J(0) + J(\nu)\langle s\rangle\right) - J(\nu)\langle s\rangle G_{--} = 0,$$

$$G_{--}\left(E + pE_0 + 2\langle s\rangle J(0) - J(\nu)\langle s\rangle\right) + J(\nu)\langle s\rangle G_{+-} = 0.$$

Решая эту систему линейных уравнений, находим выражения для фурье-образов функций Грина G_{+-} и G_{--}. Нас будет интересовать только

$$G_{+-} = \frac{i\sigma}{2\pi}\frac{2pE_0 + \sigma\left(2J(0) - J(\nu)\right) + 2E}{E^2 - E_\nu^2}, \qquad (17)$$

где $\sigma = 2\langle s\rangle$ – средняя безразмерная поляризация, E_ν – спектр возбуждений:

$$E_\nu = \sqrt{(pE_0 + \sigma J(0))(pE_0 + \sigma(J(0) - J(\nu))}. \qquad (18)$$

Отметим, что из (18) следует наличие энергетической щели Δ в спектре:

$$\Delta = \sqrt{(pE_0 + \sigma J(0))pE_0}. \qquad (19)$$

Пользуясь спектральными представлениями для функции Грина [3], найдем выражение для средней безразмерной поляризации:

$$\left(e^{\frac{\omega}{kT}} - 1\right)J(\omega) = \sigma\left\{A(\nu)\delta(E - E_\nu) - B(\nu)\delta(E + E_\nu)\right\}. \qquad (20)$$

Здесь введены обозначения

$$A(\nu) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{2pE_0 + \sigma 2J(0) - \sigma J(\nu)}{2E_\nu}\right),$$

$$B(\nu)=\frac{1}{2}\left(-1+\frac{2pE_0+\sigma 2J(0)-\sigma J(\nu)}{2E_\nu}\right).$$

Для функции $G_{+-}(t-t',r-r')$ спектральная интенсивность будет иметь вид:

$$I_{rr'}(\omega)=\frac{\sigma}{N}\sum_{\nu}\frac{e^{i(r-r')\nu}}{e^{\frac{E_\nu}{kT}}-1}\left\{A(\nu)\delta(E-E_\nu)-B(\nu)\delta(E+E_\nu)\right\}. \qquad (21)$$

Зная спектральную интенсивность $I(\omega)$, получим выражение для корреля-тора

$$\left\langle s_r^- s_r^+\right\rangle=\frac{\sigma}{2N}\sum_{\nu}\left(\frac{2pE_0+\sigma(2J(0)-J(\nu))}{2E_\nu}\operatorname{cth}\frac{E_\nu}{2kT}-1\right). \qquad (22)$$

Запишем с помощью соотношения $\sigma=1-2\left\langle s^+s^-\right\rangle$ уравнение для нахождения безразмерной поляризации:

$$\frac{1}{\sigma}=\frac{1}{N}\sum_{\nu}\frac{2pE_0+\sigma(2J(0)-J(k))}{2E_\nu}\operatorname{cth}\frac{E_\nu}{2kT}. \qquad (23)$$

Таким образом, с помощью метода функций Грина получен энергетический спектр незатухающих элементарных возбуждений, энергетическая щель Δ в спектре кристалла, а также трансцендентное уравнение для нахождения средней безразмерной поляризации сегнетоэлектрика.

ЛИТЕРАТУРА

1. ***Апанасевич П.А.*** Основы теории взаимодействия света с веществом. Мн., 1977. – 496 с.
2. ***Вакс В.Г.*** Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М., 1973. – 328 с.
3. ***Тябликов С.В.*** Методы квантовой теории магнетизма. М., 1975. – 528 с.

S U M M A R Y

It is executed research of influence of a strong electromagnetic wave on ferro-electric of a type the order - disorder.

Поступила в редакцию 11.02. 2003