Письма в ЖЭТФ, том 15, вып.9, стр. 577 – 580 5 мая 1972 г.

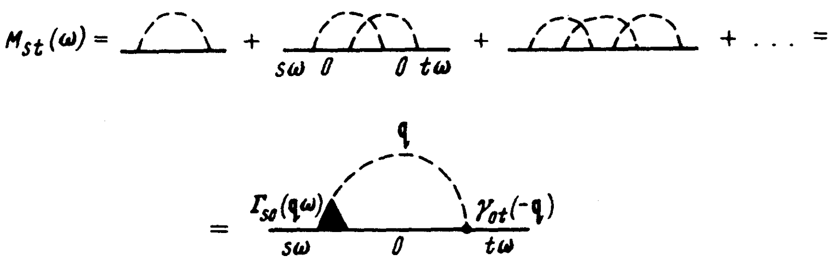
ТЕОРИЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ ФОНОНОВ С ПРИМЕСНЫМИ ЦЕНТРАМИ И ЭКСИТОНАМИ

Э.И.Рашба

Коганом и Сурисом [1] было показано, что при резонансе частоты фононов ω_0 с одной из электронных частот локального центра возникает новый тип локальных колебаний. Они вскоре были обнаружены экспериментально [2] и получили название диэлектрических. Диэлектрические моды были обнаружены также в центрах, в которых резонанс отсутствовал [3, 4].

Ниже предлагается общая теория диэлектрических мод при $a << 1$; a – константа электрон-фононной связи. Показано, что если пренебречь дисперсией фононов, всегда существует бесконечное число таких мод.

В отсутствии резонанса они представляют собой связанные состояния фонона вблизи примесного центра.



Для состояний, энергия которых близка к порогу испускания фонона, можно ограничиться в массовом операторе M диаграммами рис. 1, в которых все однофононные сечения являются опасными [5]; в связи с проблемой связанных состояний они уже рассматривались в [6, 7]. Здесь s, t – индексы кулоновских состояний, 0 – основное состояние. Записывая соответствующее уравнение для Γ и преобразуя его согласно рисунку в уравнение для матрицы M, получаем

$$M^{-1}(\omega) = (\omega - \omega_0 - \epsilon_0)A^{-1} - G^0(\omega - 2\omega_0)\,. \qquad (1)$$

Здесь

$$A_{st} = \sum_q \gamma_{s0}(q)\gamma_{0t}(-q), \quad \gamma_{st}(q) = C_q(s|e^{iqr}|t),$$
$$G^0_{st}(\omega) = (\omega - \epsilon_s)^{-1}\delta_{st}\,, \qquad (2)$$

ϵ_s – энергии электронных уровней, а C_q – коэффициенты в гамильтониане электрон-фононного взаимодействия.

Можно показать, что уравнение для полюсов $G(\omega)$:

$$|M^{-1}_{st}(\omega) - G^0_{st}(\omega)| = 0 \qquad (3)$$

в сочетании с (1) приводит к секулярному уравнению:

$$\left| A_{st} - \delta_{st}\lambda(\lambda + \Omega_s - \omega_0)\frac{\omega_0 + \Omega_s}{2\Omega_s}\right| = 0, \quad s, t = 1, 2, \ldots \infty, \qquad (4)$$

где $\Omega_s = \epsilon_s - \epsilon_0$, а $\lambda = \epsilon_0 + \omega_0 - \omega$ – энергия связи. При резонансе $\Omega_s \approx \omega_0$ возникает пара корней $\lambda \approx \pm\sqrt{A_{ss}}$ [1] и бесконечное число корней с меньшими $|\lambda|$.

В нерезонансном случае

$$\left| A_{st} - \delta_{st}\lambda\frac{\Omega_s^2 - \omega_0^2}{2\Omega_s}\right| = 0, \quad s, t = 1, 2, \ldots \infty \qquad (5)$$

Матрица A положительно определена, так как она имеет структуру $A = \gamma\gamma^+$. Если все $\Omega_s > \omega_0$, то согласно критерию Сильвестра все собственные значения $\lambda_k > 0$, то есть все частоты диэлектрических мод меньше ω_0. Существуют моды, отвечающие всем значениям углового момента; подчеркнем, что при этом каждому значению момента отвечает бесконечное число частот. Если некоторые $\Omega_s < \omega_0$, то возникает столько же корней $\lambda_k < 0$. Все эти частоты отвечают связанным состояниям фонона у примесного центра; в соответствующих им волновых функциях доминирует однофононный член.

Используя (2) и (5) легко определить масштаб λ_k; для поляризационных фононов

$$\lambda_k = b_k a\omega_0(\omega_0/R)^{1/2} = b_k\omega_0\left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty} - 1\right), \quad b_k \sim 1, \tag{6}$$

κ – диэлектрическая постоянная, R – потенциал ионизации центра. Бесконечное число корней этого порядка величины есть всегда. При резонансе, как следует из (4), появляется также пара больших корней $|\lambda| \sim \sqrt{a}\,\omega_0$; они отвечают гибридным состояниям, в которых число фононов $\sim 1/2$.

Для расчета b_k удобно перейти в конфигурационное представление, записав уравнение Шредингера, соответствующее (5):

$$\lambda[(H - \epsilon_0)^2 - \omega_0^2]\,\psi = 2A\,(H - \epsilon_0)\,\psi, \tag{7}$$

где $H(\mathbf{r})$ гамильтониан электрона в центре без взаимодействия с фононами, а

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \psi_0(\mathbf{r})V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\psi_0(\mathbf{r}'), \quad V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}}^2 e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \tag{8}$$

ψ_0 – кулоновская $1s$-функция. Ядро A представляет собой своеобразный потенциал, зависящий от электрон-фононного взаимодействия через $V(\mathbf{r})$, и от кулоновского – через ψ_0. Для поляризационного взаимодействия $V(\mathbf{r}) \hookrightarrow 1/r$, а для неполяризационного $V(\mathbf{r}) \hookrightarrow \delta(\mathbf{r})$. В последнем случае интегродифференциальное уравнение сводится к дифференциальному.

Используя (7) можно найти λ вариационным методом; с однопараметрической аппроксимацией для первого p-уровня при $R \gg \omega_0$ получаем оценку снизу $b_{2p} \approx 0{,}15$ – втрое больше, чем в двухуровневой схеме [3, 4].

Итак, электрон-фононное взаимодействие порождает совокупность нерезонансных уровней для фонона; они уже обнаружены в [3, 4]. Согласно (6) при $R \gg \omega_0$ и фиксированном κ_0/κ_∞ их энергия связи не зависит от R, то-есть связанные состояния в равной мере должны возникать и у глубоких центров. Акцепторные центры в CdS с $R \approx 4\omega_0$, на которых связанные состояния обнаружены в [4], занимают в этом отношении промежуточное положение. Особенно интересно выделить последовательность уровней с одинаковой симметрией, что пока не сделано. Аналогичные уровни должны возникать и когда центр находится в возбужденном электронном состоянии.

Экситон с большим отношением масс частиц (например $m_h >> m_e$) аналогичен примесному центру; поэтому должны возникать связанные состояния экситона и фонона. Их образованию препятствует энергия отдачи экситона, которая порядка Rm_e/m_h. Малость ее в сравнении с энергией связи (6):

$$\frac{m_e}{m_h} \lesssim 0,1\left(\frac{\kappa_0}{\kappa_\infty} - 1\right)\frac{\omega_0}{R} \qquad (9)$$

и является условием образования связанных состояний. Поскольку здесь остается неопределенным численный фактор, который может дать лишь последовательная теория, трудно говорить о выполнении (9) для конкретных веществ; однако в целом этот критерий не является слишком жестким. Резонансные связанные состояния, аналогичные [1], были рассмотрены для экситонов вариационным методом в [8]. Однако рассмотренные здесь нерезонансные связанные состояния там не могли быть получены, поскольку в [8] не учитывались двухфононные состояния, обязательно присутствующие в диаграммах рисунка.

Я благодарен И.Б.Левинсону за ценную дискуссию.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
6 апреля 1972 г.

Литература

[1] Ш.М.Коган, Р.А.Сурис. ЖЭТФ, 50, 1279, 1966.

[2] A.Onton, P.Fisher, A.K.Ramdas, Phys. Rev. Lett., 19, 781, 1967.

[3] P.J.Dean, D.D.Manchon, J.J.Hopfield, Phys. Rev. Lett., 25, 1027, 1970.

[4] D.C.Reynolds, C.W.Litton, T.C.Collins, Phys. Rev.,4, B1868, 1971.

[5] Л.П.Питаевский, ЖЭТФ, 36, 1168, 1959.

[6] В.И.Мельников, Э.И.Рашба, Письма в ЖЭТФ, 10, 95, 359, 1969.

[7] И.Б.Левинсон, Письма в ЖЭТФ, 12, 496, 1970.

[8] Y. Toyozawa, J.Hermanson, Phys. Rev. Lett., 21, 1637, 1968.