УДК 530.145. 539.2

РАССЕЯНИЕ КОГЕРЕНТНЫХ КВАЗИЧАСТИЦ НА ПРОСТРАНСТВЕННЫХ НЕОДНОРОДНОСТЯХ

Е.Я.Глушко

Проблема взаимодействия квазичастиц (экситонов, электронов проводимости) с неоднородностями, имеющими характер сдвига дна зоны или примесного смещения уровня, сведена к задаче теории возмущений. С использованием ортогонального пакетного преобразования исследованы спектр и координатные зависимости рассеяния для квазичастиц в неоднородных системах.

Влияние пространственной неоднородности на энергетический спектр квазичастиц проявляется в тонких пленках, слоистых и интеркалированных структурах, везде, где относительно велика роль границы раздела сред [1–3]. В этих случаях область неоднородного сдвига дна зоны квазичастиц имеет размеры порядка дебаевской длины экранирования, что зачастую охватывает практически весь объем. В то же время следует учитывать условность зонной терминологии при наличии неоднородности, так же как и понятий локальной теории, поскольку частицы делокализованы [4]. Наиболее адекватным ситуации представляется использование ортогонального пакетного преобразования (ОПП) [5], обобщающего координатное и импульсное представления соответственно при $\Pi = N$ и $\Pi = 1$, где N — число узлов решетки, Π задает число импульсных состояний в пакете.

Другим объектом развиваемой теории являются кристаллы, содержащие дефекты и примеси. Локальное возмущение энергии квазичастиц здесь определяется концентрацией центров, а также величиной и знаком исходного энергетического сдвига.

Характерные особенности задачи рассеяния зонной квазичастицы неоднородностью можно проследить на примере гамильтониана

$$\hat{H} = \sum V_{nm}^{st} \hat{a}_{ns}^{+} \hat{a}_{mt} + \sum W_n^s \hat{a}_{ns}^{+} \hat{a}_{ns}, \tag{1}$$

где s, t нумеруют зоны, $\mathbf{n}$ — вектор решетки, $\hat{a}$ — операторы рождения-уничтожения, V определяет междуузельный перенос, W задает затравочную неоднородность дна зоны s. Последнее слагаемое после перехода к импульсному представлению приводит к однородному сдвигу зон и, кроме того, индуцирует специфическое рассеяние k-состояний на неоднородности [6].

Основная идея настоящей работы заключается в использовании при $W \simeq V$ ОПП для волновых функций. Такой переход при некоторых условиях позволяет свести неоднородную задачу к задаче теории возмущений.

В работе рассмотрено рассеяние квазичастиц на различного рода неоднородностях. Показано, что на больших расстояниях в общем случае энергетический сдвиг $\sim 1/r$. Исследованы условия приближенной диагонализации гамильтониана неоднородной задачи.

1. Общий случай. Моменты потенциальной кривой

Представим неоднородную часть (1) в виде ряда Фурье

$$W_n^s = \sum_k e^{-ikn} W^s(q). \tag{2}$$

Во избежание излишнего загромождения формул здесь и ниже рассматривается одномерный случай. Обобщение на $3d$ ситуацию не представляет труда. Переход к ОПП, согласно [5], задается унитарным оператором $\hat{C}$

$$C_{XK,n} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum e^{-ik(X-n)} \delta^{\Pi}_{k,K},$$

где K, X — векторы сверхрешетки в обратном и прямом пространстве соответственно; одномерный δ^{Π}-символ вырезает на оси k отрезок $[K, K+\Delta K]$, $\Delta K = 2\pi\Pi/aN$, где a — постоянная решетки, постоянная сверхрешетки X-векторов $A = L/\Pi$, $L = Na$.

Используя свойства δ^{Π}-символов, приведенные в Приложении, получаем под знаком суммы для неоднородного слагаемого в [1]

$$W^s_{XK,X_1K_1} =$$

$$= \sum_q e^{-iqX_1} W^s(q) \begin{cases} \dfrac{\delta_{Q+1,K_1-K} - \delta_{Q,K_1-K}}{i\Delta K(X-X_1)}(1 - e^{-iq'(X-X_1)}), & X \neq X_1, \\ (1 - q'/\Delta K)\delta_{Q,K_1-K} + \delta_{Q+1,K_1-K} q'/\Delta K, & X = X_1. \end{cases} \tag{3}$$

Здесь $q = Q + q'$, $q' \subseteq [0, \Delta K]$, Q, K измеряются в единицах ΔK. Первое слагаемое в (1), определяющее однородную дисперсию зоны квазичастиц-пакетов $\sum \mathcal{E}^{st}_K \hat{a}^+_{XK,s} \hat{a}_{XK,t}$ приводится к диагональному виду стандартной процедурой Боголюбова–Тябликова. Кроме того, имеется неоднородная добавка ΔE^s_{XK}, определяемая нижней строкой (3) при $K = K_1$.

Представляя

$$W^s(q)\delta_{Q,K_1-K} = \sum_{n=0} \frac{W^{(n)}(Q)}{n!} q'^n \delta_{Q,K_1-K},$$

$$W^s(q)\delta_{Q+1,K_1-K} = \sum \frac{W^{(n)}(Q)}{n!} (q' - \Delta K)^n \delta_{Q+1,K_1-K}, \tag{4}$$

приходим после суммирования в (3) к выражению для ΔE^s_{XK}

$$\Delta E^s_{XK} = \begin{cases} 2\sum\limits_{m=1} \dfrac{M^{(m)}(0)}{\tilde{X}^m} \sum\limits_{n=1}^{\left[\frac{m+1}{2}\right]} (-1)^n (2\pi\tilde{X})^{2n-2} \dfrac{2m+n+1}{(2m)!}, & \tilde{X} \neq 0, \\ 2\sum\limits_{m=0} \dfrac{(-1)^m}{(2m+2)!}(2\pi^2)^{2m} M^{(2m)}(0), & \tilde{X} = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь $\tilde{X} = X/A$ — безразмерный вектор суперрешетки; обобщенные моменты потенциальной кривой $M^{(m)}$

$$M^{(m)}(Q) = \frac{\Pi}{N} \sum_n (n/A)^m W_{nn} e^{iQn}. \quad (6)$$

Результат для недиагональных матричных элементов (МЭ) $Q = 0$, $X = X_1$ аналогичен (5) с заменой моментов $W(0)$ на обобщенные

$$W^s_{XK,XK_1} = \delta_{Q,K_1-K} \Delta E^s_{XK}[M(0) \to M(Q)]. \quad (7)$$

Недиагональные МЭ $X_1 = X$ рассчитываются по верхней строке (3) дифференцированием по параметру (X, X_1)

$$W^s_{XK,X_1K_1} = \delta_{Q,K_1-K} \sum_{m=2} \frac{2M^{(m)}(Q)}{\tilde{X} - \tilde{X}_1} \sum_{n=1}^{\left[\frac{m}{2}\right]} \frac{(2\pi)^{2n-2}}{(2n)!} \left[\tilde{X}^{2n-m-1} - \tilde{X}_1^{2n-m-1}\right],$$
$$X \neq X_1 \neq 0. \quad (8)$$

Формула (8) определяет рассеяние квазичастиц на неоднородности с перебросом внутри объема: упругое ($Q = 0$) и неупругое. Переходы между поверхностью и объемом ($X = 0$, $X_1 \neq 0$ или $X \neq 0$, $X_1 = 0$ описываются (8) с заменой сумм и соответствующего слагаемого в квадратных скобках выражением

$$\sum_{m=1} \frac{(-1)^{(m)} M^{(2m+2)}(Q)}{(2m+2)!} (2\pi)^{2m+2}. \quad (9)$$

Определенное заключение в общем случае можно сделать лишь для расстояний, больших в сравнении с характерным размером неоднородности. Добавка к энергии, как видно из (5), не зависит от волнового вектора, спадает обратно пропорционально расстоянию. Такая зависимость, связанная с отличием от нуля момента $M^{(1)}(0)$, характерна для приповерхностных неоднородностей. Вероятность рассеяния с пространственным перебросом квазичастицы $\sim 1/r^2$.

Для $3d$ случая результаты (5)–(9) обобщаются заменой одномерных моментов M на трехмерные

$$M^{(m_1,m_2,m_3)} = \sum_{n_1=1} \left(\frac{n_1}{A}\right)^{m_1} \sum_{n_2=1} \left(\frac{n_2}{A}\right)^{m_2} \sum_{n_3=1} \left(\frac{n_3}{A}\right)^{m_3} W_{nn} e^{i\bar{Q}\bar{n}}, \quad (10)$$

где индексы 1, 2, 3 задают орты системы координат. Соответственно первые суммы в (5), (8), (9) становятся тройными, а вторые суммы с координатными множителями факторизуются по индексам осей.

2. Лоренцева аппроксимация энергетического сдвига

Рассмотрим теперь объемную неоднородность вдали от поверхности, когда зависимость энергии уровня от координаты лоренцева

$$W_{nn}^{(0)} = \frac{W_0^{(0)}}{1 + \left(\frac{n}{d}\right)^2}. \tag{11}$$

где $d \ll L$ — характерный размер неоднородности (ширина), $W_0^{(0)}$ — амплитуда сдвига. После преобразования к пакетному представлению имеем для (11) соотношение (3), где

$$W_{(q)}^s \to \frac{\pi d W_0^{(0)}}{L} e^{-|q|d}. \tag{12}$$

Опуская выкладки, приведем окончательные результаты. Поправка к энергии зонной квазичастицы, генерируемая неоднородностью, имеет вид

$$\Delta E_X = W_0^{(0)} \tilde{d} \frac{\tilde{X}^2(1 + 2\pi\tilde{d} - \bar{e}^{-2\pi\tilde{d}}) + \tilde{d}^2(2\pi\tilde{d} - 1 - \bar{e}^{-2\pi\tilde{d}})}{2\pi(\tilde{X}^2 + \tilde{d}^2)^2}, \tag{13}$$

где $\tilde{d} = d/A$. Энергетический сдвиг в соответствии с общим результатом (5) не зависит от волнового вектора. Пространственная неоднородность приводит к однородному смещению зоны как целого в каждой точке X. Зависимость $1/X^2$ для больших расстояний здесь связана с равенством нулю I момента потенциальной кривой МЭ рассеяния с перебросом в пространстве $X \neq X_1$ имеем

$$W_{XK,X_1K_1}^s = \delta_{Q,K_1-K} W_0^{(0)} \frac{\tilde{d}}{2\pi} e^{-|Q|d} \begin{cases} \dfrac{(1 - \mathrm{ch}(2\pi\tilde{d}))}{(\tilde{d} + i\tilde{X}\zeta)(\tilde{d} + i\tilde{X}\zeta)}, & Q \neq 0, \\ \dfrac{(1 - e^{-2\pi\tilde{d}})(\tilde{d} - \tilde{X}\tilde{X}_1)}{(\tilde{d}^2 + \tilde{X}_1^2)(\tilde{d}^2 + \tilde{X}^2)}, & Q = 0, \end{cases} \tag{14}$$

где $\zeta = \mathrm{sign}(Q)$. Для рассеяния без переброса ($X = X_1$) имеем

$$W_{XK,X_1K_1} = \delta_{Q,K_1-K} e^{-|Q|d} 2\pi\tilde{d} \frac{(1 - \mathrm{ch}(2\pi\tilde{d}))}{(\tilde{X} - i\tilde{d}\zeta)^2}. \tag{15}$$

Если пакетный параметр П выбран достаточно большим $\Pi \gg L/d$ или $d \gg A$, то для таких состояний основной вклад в рассеяние начинают вносить упругие процессы с перебросом. Неупругое рассеяние экспоненциально слабое в меру передаваемого импульса. Кроме того, следует отметить, что в результате ОПП недиагональная часть гамильтониана (14)–(15) приобретает параметр малости A/d, т.е. имеет место приближенная диагонализация.

Рассмотренный выше случай представляет интерес еще и потому, что произвольную зависимость $V(n)$ для сдвига уровня в неограниченном кристалле можно представить в виде свертки распределений Коши

$$V(n) = \sum_m \frac{W_0^{(m)}}{1 + \left(\frac{n-m}{d}\right)^2}. \qquad (16)$$

Обобщение (12) и (15) теперь имеет вид

$$W_{XK,X_1K_1} = \delta_{Q,K_1-K} \frac{\tilde{d}}{2\pi} e^{-|Q|d} \times \sum_m W_0^{(m)} e^{iQm} \times$$

$$\times \begin{cases} \dfrac{1 + \mathrm{ch}(\zeta\tilde{d} - i\tilde{m})}{b_{mX} b_{mX}}, & Q \neq 0, \\ (1-e)^{-2\pi\tilde{d}} \cos(2\pi\tilde{m}) \dfrac{|b_{mX}|^2 - 2d^2}{|b_{mX}|^4} - e^{-2\pi\tilde{d}} \sin(2\pi\tilde{m}) \dfrac{2\tilde{X}(\tilde{m} - \tilde{X})}{|b_{mX}|^2} + \dfrac{2\pi d}{|b_{mX}|}, & \\ & Q = 0, \end{cases} \qquad (17)$$

где $b_{mX} = i(\tilde{m} - \tilde{X}) + \tilde{d}\zeta$.

Диагональный вклад в преобразованный гамильтониан дается нижней строкой (17). Обобщение (14) для рассеяния с перебросом имеет вид

$$W_{XK,X_1K_1} = \delta_{Q,K_1-K} \tilde{d} e^{-|Q|d} \times$$

$$\times \sum_m W_0^{(m)} e^{iQm} \begin{cases} \dfrac{\mathrm{ch}\, 2\pi(\zeta\tilde{d} - i\tilde{m}) - 1}{2\pi b_{mX} b_{mX_1}}, & Q \neq 0, \\ \dfrac{B_{mXX_1}}{2\pi |b_{mX}|^2 |b_{mX_1}|^2}, & Q = 0, \end{cases} \qquad (18)$$

$$B_{mXX} = (\tilde{d} - (\tilde{m} - \tilde{X}_1)(\tilde{m} - \tilde{X})(1 - e^{-2\pi\tilde{d}} \cos 2\pi\tilde{m}) + \tilde{d} e^{-2\pi\tilde{d}} (2\tilde{m} - \tilde{X} - \tilde{X}_1) \sin 2\pi\tilde{m}.$$

Легко видеть, что недиагональные МЭ малы как $1/\tilde{d}$ в сравнении с диагональными, т.е. пакетное преобразование диагонализует задачу для объемной неоднородности с точностью $\tilde{d}^{-1}$.

3. Оптимальные условия ОПП

Параметр ОПП П следует выбирать из условия min погрешности при преобразовании слагаемых в (1). Неточность при трансформации трансляционного слагаемого

$$V_{nm}^{st} \hat{a}_{ns}^{+} \hat{a}_{mt} \to E_K^{st} \hat{a}_{XK,s}^{+} \hat{a}_{XK,t}$$

возникает из-за приближения стационарности пакетов [7], в результате чего квазиконтинуум ВВ k заменяется огрубленной сеткой пакетных ВВ

K. Оценим вносимую при этом погрешность, сравнивая интегральные характеристики

$$J_0 = \sum_k E(k), \qquad J_1 = \sum_{XK} E(K) = \Pi \sum_K E(K).$$

Очевидно,

$$J_1 < J_0 < J_1 + \Pi\Delta, \tag{19}$$

где Δ — ширина зоны квазичастиц. Для неоднородного члена (1) следует сравнивать

$$I_0 = \sum_n W_{nm} \quad \text{и} \quad I_1 = \sum_{XK} W_{XK,XK} = \frac{N}{\Pi} \sum_X W_{XX},$$

где

$$W_{XX} = \sum_n W^s_{nn} \frac{1 - \cos 2\pi(\tilde{X} - \tilde{n})}{2\pi^2(\tilde{X} - \tilde{n})^2}. \tag{20}$$

Заметим, что (20) есть результат непосредственного преобразования W^s_{nn} без использования лоренцевой или иной аппроксимации.[1] Так как $W_{XX} = W^s_{nn}$, если $X = n$, и $W_{XX} < W^s_{nn}$, если $n \in (X, X + A)$, то

$$I_1 = \frac{N}{\Pi} W_0 < I_0 < I_1, \tag{21}$$

где W_0 — максимальное по модулю значение затравочного неоднородного сдвига. Суммарная погрешность ОПП

$$\delta = \Pi\Delta + \frac{N}{\Pi} W_0. \tag{22}$$

Из (22) находим оптимальное значение параметра Π, дающее min погрешность

$$\Pi = N^{1/2}(W_0/\Delta)^{1/2}. \tag{23}$$

Последнее соотношение дает естественные предельные переходы к координатному представлению ($\Pi \to N$) для случая сильной неоднородности $W_0/\Delta \to N$ и импульсному ($\Pi = 1$) для случая широкой зоны $W_0/\Delta \to 1/N$.

Условие приближенной диагонализации неоднородной задачи позволяет увязать с учетом (23) основные характеристики системы и аппроксимационную ширину d

$$d \gg a\sqrt{N}\sqrt{\Delta/W_0}. \tag{24}$$

Если неоднородное смещение уровня и ширина зоны одного порядка, то ширина d для возникновения в результате ОПП малого параметра должна выбираться макроскопической. Например, для кристалла толщиной ≈ 1 мкм $N \approx 10^4$ и $d >\approx 10^3$ Å, что соответствует $\bar{d} \approx 0.1$.

---

[1] Таким образом, рассматриваются наиболее жесткие условия.

П Р И Л О Ж Е Н И Е

$$\sum_k \delta^{\Pi}_{k,K} \delta^{\Pi}_{k+q,K_1} e^{ikX} =$$

$$= \begin{cases} \dfrac{\delta_{Q+1,K_1-K} - \delta_{Q,K_1-K}}{i\Delta K X}(1 - e^{iq'X}), & X \neq 0, \\ \delta_{Q,K_1-K} + \dfrac{q'}{\Delta K}\left(\delta_{Q+1,K_1-K} - \delta_{Q,K_1-K}\right), & X = 0, \end{cases} \tag{П.1}$$

$$\sum C_{XK,n} C_{n,X_1K_1} = \delta_{KK_1} \delta_{XX_1}, \tag{П.2}$$

$$\sum C_{n,XK} C_{XK,n_1} = \delta_{nn_1}. \tag{П.3}$$

Список литературы

[1] Бродин М.С., Прихотько А.Ф. // Опт. и спектр. 1959. Т. 7. С. 132–139.
[2] Давыдов А.С. // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. С. 723–729.
[3] Hopfield J.J., Thomas D.G. // Phys. Rev. 1963. V. 132. N 2. P. 563–572.
[4] Мясников Э.Н. // Сб. «Спектроскопия молекул и кристаллов». Киев, 1978. С. 17–25.
[5] Глушко Е.Я. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 11. С. 3143–3152.
[6] Аранович В.М., Дарманян С.А., Рупасов В.И. // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. № 3. С. 656–671.
[7] Glushko E.Ya. // Phys. Stat. Sol. (b). 1982. V. 114. P. 685–694.

Криворожский государственный
педагогический институт

Поступило в Редакцию
7 июля 1992 г.
В окончательной редакции
30 марта 1993 г.