РАССЕЯНИЕ КВАЗИЧАСТИЦ В ВЫРОЖДЕННОЙ ЗОНЕ НА КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИХ ПОТЕНЦИАЛАХ

Герчиков Л. Г., Харченко В. А.

На основании аналитических свойств матрицы рассеяния найдены амплитуды рассеяния медленных квазичастиц на короткодействующих дефектах в полупроводниковых кристаллах с вырожденной зоной. Полученные амплитуды используются для описания процесса рассеяния носителей на кластерах точечных дефектов и энергетического спектра локализованных на них состояний.

Рассеяние квазичастиц в полупроводниковых кристаллах с вырожденным спектром энергий существенно усложняется из-за наличия нескольких «сортов» квазичастиц. Так, легкие и тяжелые дырки при рассеянии на примесях могут преобразовываться друг в друга. Задача нахождения амплитуд рассеяния не имеет аналитического решения даже в простейших случаях, например когда зонная структура описывается сферической моделью Латтинжера и потенциал дефекта обладает центральной симметрией. Причина трудностей кроется в необходимости решения сложной системы дифференциальных уравнений [1, 2]. Простые аналитические выражения для амплитуд рассеяния получены в [2] в предельном случае малого отношения эффективных масс легких m_l и тяжелых m_h дырок, $m_l/m_h \ll 1$.

В принципе, существует альтернативный подход к получению энергетических зависимостей амплитуд рассеяния, основанный на использовании аналитических свойств матрицы рассеяния, связанных с такими фундаментальными законами, как сохранение полного числа частиц, обратимость процессов во времени и т. д. При этом нет необходимости решать систему дифференциальных уравнений, однако получаемые амплитуды содержат ряд параметров, связанных с характеристиками рассеивающего потенциала, например длину рассеяния. В настоящей работе используется именно такой подход для нахождения общего вида амплитуд рассеяния на произвольном короткодействующем центральном потенциале для сферической модели Латтинжера [3] при любом соотношении m_l/m_h. Подробно исследуется резонансное рассеяние медленных частиц с вырожденным законом дисперсии. С использованием полученных результатов рассмотрены рассеяние и локализация частиц на паре точечных потенциалов. Кратко обсуждена возможность экспериментального наблюдения резонансного рассеяния на паре точечных дефектов.

1. *Парциальный анализ рассеяния.* В сферической модели Латтинжера при движении квазичастицы в поле центрального потенциала сохраняются величина полного момента F, его проекция M и четность I [1, 2]. Рассмотрим парциальную волну с определенными значениями F, M и I. Движение в такой волне осуществляется с двумя возможными орбитальными моментами l и $l+2$, где в зависимости от четности $l=F-3/2$ или $l=F-1/2$. Вне области действия потенциала существует четыре линейно независимых решения [1, 2]

$$\varphi^{(\pm)}_{FMI\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{\pm i}{\sqrt{2F+1}} \sum_{d=l,\, l+2} C^{F|\nu|}_{d0j|\nu|} \sqrt{\frac{\pi k_\lambda}{r}}\, H^{(1,2)}_{d+1/2}(k_\lambda r)\, \Omega_{FMd}(\mathbf{n}), \tag{1}$$

где $j=3/2$ — квазиспин дырок, ν — спиральность частицы, $\nu=\pm 3/2$ для тяжелой дырки $\lambda=h$ и $\nu=\pm 1/2$ для легкой дырки $\lambda=l$, $k_\lambda=\sqrt{2m_\lambda E}/\hbar$ — квазиимпульс дырки сорта λ, $\Omega_{FMd}(\mathbf{n})=\sum_\mu C^{FM}_{dM-\mu j\mu} Y_{dM-\mu}(\mathbf{n})\,X_\mu$ — собственная функция F, M и I, Y_{dm} — сферическая функция, X_μ — собственный вектор оператора $\mathbf{j}$. На общее решение накладывается два условия регулярности в нуле независимо по движению с моментами l и $l+2$. В итоге число независимых решений уменьшается до двух, в качестве которых для задачи рассеяния следует выбирать функции, содержащие в сходящейся волне дырки одного сорта:

$$\begin{aligned}\Psi_{FMIh}(r\to\infty)&=-\varphi^{(-)}_{FMIh}+S^{(FI)}_{hh}\varphi^{(+)}_{FMIh}+\sqrt[4]{\frac{m_l}{m_h}}\,S^{(FI)}_{lh}\varphi^{(+)}_{FMIl},\\ \Psi_{FMIl}(r\to\infty)&=-\varphi^{(-)}_{FMIl}+S^{(FI)}_{ll}\varphi^{(+)}_{FMIl}+\sqrt[4]{\frac{m_h}{m_l}}\,S^{(FI)}_{hl}\varphi^{(+)}_{FMIh}.\end{aligned} \tag{2}$$

Коэффициенты в (2) выбраны так, чтобы введенная нами матрица $S^{(FI)}_{\lambda'\lambda}$ соответствовала общепринятой матрице рассеяния [4, 5], в силу чего $S^{(FI)}_{\lambda'\lambda}$ обладает свойствами унитарности, симметричности и рядом других общих свойств аналитического характера, присущих всем S-матрицам [5]. Множитель $(m_l/m_h)^{1/4}$ связан с различием скоростей легкой и тяжелой дырок.

В дальнейшем мы будем анализировать поведение амплитуд рассеяния, которые в многоканальной задаче определяются стандартным образом [5]:

$$S^{(FI)}_{\lambda'\lambda}=\delta_{\lambda'\lambda}+2i\sqrt{k_{\lambda'}k_\lambda}\,f^{(FI)}_{\lambda'\lambda}. \tag{3}$$

Можно показать, что амплитуда рассеяния $f^{(FI)}_{\lambda'\lambda}$ связана с матричным элементом оператора рассеяния

$$f^{(FI)}_{\lambda'\lambda}=-\frac{\sqrt{m_{\lambda'}m_\lambda}}{2k_{\lambda'}k_\lambda\hbar^2}\langle\varphi_{FMI\lambda'}\,|\,V\,|\,\Psi_{FMI\lambda}\rangle, \tag{4}$$

где V — потенциал рассеивателя, $\varphi=i(\varphi^{(-)}-\varphi^{(+)})$ — волновая функция свободного движения дырки сорта λ' [см. (1)].

Переходя к рассеянию плоских волн с определенными спиральностями $\exp(i\mathbf{k}_\lambda\mathbf{r})\,D^{(j)*}_{\nu\mu}(\mathbf{k}_\lambda/k_\lambda)$, разложим полную амплитуду рассеяния по парциальным амплитудам

$$f_{\nu'\nu}(\mathbf{k}'_{\lambda'},\,\mathbf{k}_\lambda)=\sum_F(2F+1)\,D^{(F)*}_{\nu'\nu}(\widehat{\mathbf{k}'_{\lambda'}\mathbf{k}_\lambda})\left(f^{(FI)}_{\lambda'\lambda}+\frac{\nu'\nu}{|\nu'\nu|}f^{(F-I)}_{\lambda'\lambda}\right)\Big/2, \tag{5}$$

где $I=(-1)^{F-3/2}$, $D^{(F)}_{\nu'\nu}$ — матрица конечных вращений. Появление двух слагаемых в (5) связано с тем, что $\exp(i\mathbf{k}_\lambda\mathbf{r})\,D^{(j)*}_{\nu\mu}(\mathbf{k}_\lambda/k_\lambda)$ не обладает определенной четностью. Сечение рассеяния без изменения сорта дырки λ оказывается равным

$$\sigma_{\nu'\nu}=\frac{\pi}{4k_\lambda^2}\sum_F(2F+1)\left|\left(S^{(FI)}_{\lambda\lambda}-1\right)+\frac{\nu'\nu}{|\nu'\nu|}\left(S^{(F-I)}_{\lambda\lambda}-1\right)\right|^2, \tag{6}$$

а с изменением λ

$$\sigma_{\nu'\nu}=\frac{\pi}{4k_\lambda^2}\sum_F(2F+1)\left|S^{(FI)}_{\lambda'\lambda}+\frac{\nu'\nu}{|\nu'\nu|}S^{(F-I)}_{\lambda'\lambda}\right|^2. \tag{6'}$$

2. *Рассеяние медленных квазичастиц.* Перейдем теперь непосредственно к анализу парциального рассеяния при малых энергиях. Под малыми понимаются такие энергии, при которых для обоих сортов дырок выполняется условие

$$k_\lambda L\ll 1, \tag{7}$$

где L — размер рассеивающего потенциала.

Наличие центробежного барьера приводит к тому, что плотность волновой функции свободной частицы мала в области действия потенциала рассеивателя, причем [см. (1)] движение с моментом $l+2$ оказывается в $(k_\lambda L)^2$ раз подавленным по сравнению с движением с моментом l. Поэтому для медленной частицы рассеяние будет определяться движением с минимальным орбитальным моментом l. Исключение составляет случай, когда волна с моментом $l+2$ резонансно усилена по сравнению с волной с моментом l. Такая ситуация возникает только при специальных условиях, накладываемых на рассеивающий потенциал и массы дырок, поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать типичный случай, в котором определяющим является движение с моментом l. Амплитуда рассеяния, так же как и в невырожденной зоне, оказывается малой по параметру $(k_\lambda L)$: $f \propto E^l$. Тот факт, что рассеяние определяется волной с орбитальным моментом l, приводит к тому, что все амплитуды линейно связаны между собой с коэффициентами пропорциональности, зависящими от отношения масс дырок. Это можно показать, воспользовавшись формулой (4). Действительно, при переходе от $f_{h\lambda}^{(FI)}$ к $f_{l\lambda}^{(FI)}$ в $\langle \varphi_{FMI\lambda'} | V | \Psi_{FMI\lambda} \rangle$ изменению подвергается только левая обкладка. При малой энергии в области действия потенциала радиальные волновые функции свободного движения с моментом l для легкой и тяжелой дырок различаются лишь множителем, зависящим от отношения масс [см. (1)]. Поэтому

$$f_{lh}^{(FI)}/f_{hh}^{(FI)} = f_{ll}^{(FI)}/f_{hl}^{(FI)} = \beta\,(m_l/m_h)^{\frac{l+1}{2}}, \tag{8}$$

где $\beta = [3\,(F - {}^1/_2)/(F + {}^3/_2)]^{1/2}$ для $l = F - {}^3/_2$, $\beta = [(F - {}^1/_2)/3\,(F + {}^3/_2)]^{1/2}$ для $l = F - {}^1/_2$, $f_{lh}^{(FI)} = f_{hl}^{(FI)}$ в силу симметричности S-матрицы.

Найдем вид амплитуды рассеяния при малых E. Воспользуемся для этого свойством [5]

$$f_{\lambda'\lambda}^{(FI)}\,(-\sqrt{E^*}) = f_{\lambda'\lambda}^{(FI)*}\,(\sqrt{E}). \tag{9}$$

Запишем амплитуду рассеяния (для определенности $f_{hh}^{(FI)}$) в аналитическом виде, удовлетворяющем (9),

$$f_{hh}^{(FI)} = [g\,(\sqrt{E}) - iu\,(\sqrt{E})]^{-1}, \tag{10}$$

где g, u — вещественные функции, разлагающиеся соответственно по четным и нечетным степеням $\sqrt{E}$. Для нахождения $u\left(\sqrt{E}\right)$, так же как и в невырожденной зоне [4], используем условие унитарности S-матрицы, которое при рассеянии тяжелой дырки имеет вид

$$\operatorname{Im} f_{hh}^{(FI)} = k_h\,|f_{hh}^{(FI)}|^2 + k_l\,|f_{lh}^{(FI)}|^2, \tag{11}$$

откуда

$$u = k_h + k_l\,|f_{lh}^{(FI)}/f_{hh}^{(FI)}|^2. \tag{12}$$

Последний член в правых частях (11), (12) связан с наличием канала рассеяния $h \to l$. Отношение $f_{lh}^{(FI)}/f_{hh}^{(FI)}$ при малых энергиях определяется (8). Что касается $g\,(E)$, то его разложение, как и в случае невырожденной зоны, начинается с члена $\sim E^l$.

Рассмотрим сначала парциальное рассеяние с моментом $F = {}^3/_2$ и $I = +1$, ему соответствуют значения орбитального момента 0 и 2. Выражение (10) в этом случае принимает вид

$$f_{hh}^{({}^3/_2+1)} = (\alpha - ik_h - ik_l m_l/m_h)^{-1}, \tag{13}$$

или, вводя длину рассеяния $a_h = -1/\alpha$, $a_l = a_h m_l/m_h$, запишем выражение для амплитуды в симметричном виде

$$f_{\lambda'\lambda}^{({}^3/_2+1)} = -(a_{\lambda'} a_\lambda)^{1/2}/(1 + ik_h a_h + ik_l a_l). \tag{14}$$

Интересно отметить, что распределение рассеянных частиц по каналам, даваемое отношением мнимых членов в знаменателе (14), оказывается равным $(m_l/m_h)^{3/2}$ — отношению соответствующих фазовых объемов.

Если длина рассеяния положительна и по величине много больше радиуса потенциала, то потенциал создает мелкий уровень с энергией связи, равной

$$\varepsilon = -\frac{\hbar^2}{2\left(\sqrt{m_h}\, a_h + \sqrt{m_l}\, a_l\right)^2}. \tag{15}$$

Теперь обратимся к рассеянию с отличным от нуля орбитальным моментом, при этом интерес представляет только резонансное рассеяние, так как потенциальная часть амплитуды мала, как E^l. Формально резонансному рассеянию соответствует случай, когда первый член в разложении $g(E)$ аномально мал и необходимо удерживать также и второй член. Амплитуда рассеяния принимает вид формулы Брейта—Вигнера

$$f_{\lambda'\lambda}^{(FI)} = -(\Gamma_{\lambda'}\Gamma_\lambda/4k_{\lambda'}k_\lambda)^{1/2}/[E - \varepsilon + i\,(\Gamma_l + \Gamma_h)/2], \tag{16}$$

где ε — положение квазидискретного уровня. Ширины каналов Γ_λ оказываются пропорциональными

$$\Gamma_h \infty k_h^{2l+1},\ \Gamma_l \infty k_l^{2l+1},\ \frac{\Gamma_l}{\Gamma_h} = \left(\frac{m_l}{m_h}\right)^{1/2} \left|\frac{f_{lh}^{(FI)}}{f_{hh}^{(FI)}}\right|^2 = \beta^2 \left(\frac{m_l}{m_h}\right)^{l+3/2}. \tag{17}$$

Отметим, что зависимость ширин резонанса от энергии оказалась такой же, как и у квазидискретного уровня с моментом l в невырожденной зоне. Это связано с тем, что рассмотренное квазистационарное состояние имеет характер резонанса в l-волне: в области центробежного барьера радиальные волновые функции движения с моментами l и $l+2$ имеют одинаковую координатную зависимость r^{-l-1}. В силу соотношения (8) члены $\sim r^{-l-3}$ в функциях с $l+2$ тяжелой и легкой дырок взаимокомпенсируются.

3. *Рассеяние на паре точечных потенциалов.* Если в рассеянии на потенциале отсутствуют резонансы с отличными от нуля орбитальными моментами, то основной вклад в полную амплитуду рассеяния (5) дает парциальная амплитуда $f_{\lambda'\lambda}^{(3/2+1)}$, описываемая формулой (14). Зная амплитуду рассеяния на изолированном потенциале, можно вычислить амплитуду рассеяния на системе потенциалов как сумму вкладов всевозможных процессов многократного рассеяния [6]. Упрощающим обстоятельством при рассеянии на паре потенциалов является сохранение проекции момента на ось пары. Это приводит к факторизации каждого члена суммы, в результате чего ряд легко суммируется и дает

$$f_{\nu'\nu}(\mathbf{k}'_{\lambda'}, \mathbf{k}_\lambda) = 4 f_{\lambda'\lambda}^{(3/2+1)} \sum_M D_{\nu' M}^{(j)}\left(\frac{\mathbf{k}'_{\lambda'}}{k'_{\lambda'}}\right) D_{\nu M}^{(j)*}\left(\frac{\mathbf{k}_\lambda}{k_\lambda}\right) \times$$
$$\times \left[\frac{\cos(\mathbf{k}'_{\lambda'}\mathbf{R}/2)\cos(\mathbf{k}_\lambda \mathbf{R}/2)}{1 + G_{MM}(\mathbf{R}, E)\, 4\pi f_{hh}^{(3/2+1)}/m_h} - \frac{\sin(\mathbf{k}'_{\lambda'}\mathbf{R}/2)\sin(\mathbf{k}_\lambda \mathbf{R}/2)}{1 - G_{MM}(R, E)\, 4\pi f_{hh}^{(3/2+1)}/m_h}\right], \tag{18}$$

где векторы $\pm\mathbf{R}/2$ определяют положение примесных центров,

$$G_{MM'}(\mathbf{R}, E) = -\frac{\delta_{MM'}}{4\pi}\left[\frac{m_h}{R} e^{ik_h R} + \frac{m_l}{R} e^{ik_l R} + (-1)^{|M|}\left(m_h \sqrt{\frac{\pi k_h}{2R}}\, H_{5/2}^{(1)}(k_h R) - \right.\right.$$
$$\left.\left. - m_l \sqrt{\frac{\pi k_l}{2R}}\, H_{5/2}^{(1)}(k_l R)\right)\right]$$

— функция Грина свободной частицы в вырожденной зоне, в качестве направления квантования момента выбрана ось пары $\mathbf{R}/R$.

Полюса амплитуды рассеяния (18) соответствуют связанным состояниям. Условие равенства нулю знаменателя в первом члене (18) определяет положение двух двукратно вырожденных по направлению момента уровней с волновыми функциями, симметричными относительно центра пары. Полюса второго члена соответствуют антисимметричным состояниям. С уменьшением радиуса пары R энергии связи симметричных состояний растут, а антисимметричных падают по абсолютной величине, и при $R = (a_h + 3a_l)/2$, $(a_l + 3a_h)/2$ антисимметричные состояния с $M = 3/2$, $1/2$ выходят в непрерывный спектр, образуя квазидискретные уровни с энергиями

$$M = 3/2, \quad \varepsilon = 4\hbar^2\,[(a_h + 3a_l)/2R - 1]/(5a_h m_h + 3a_l m_l)R, \quad \Gamma = \Gamma_h + \Gamma_l, \tag{19}$$

$$\Gamma_h = \frac{28\hbar^2 k_h^3 a_h R}{15\,(5a_h m_h + 3a_l m_l)}, \quad \Gamma_l = \frac{12\hbar^2 k_l^3 a_l R}{15\,(5a_h m_h + 3a_l m_l)}, \quad a_h = \frac{a_l m_h}{m_l},$$

для $M=1/2$ необходимо заменить в (19) $h \rightleftarrows l$. Резонансное состояние, образуемое парой, сходно с резонансом при орбитальном моменте, равном единице, рассмотренном ранее. Это видно из координатной зависимости волновой функции квазистационарного состояния для пары, содержащей множитель $P_1(\cos\nu)$ (угол ν отсчитывается от направления оси пары), характерный для $l=1$. Указанное обстоятельство приводит к тому, что соотношения между ширинами и их зависимость от энергии (19) подобны соотношению при процессе резонансного рассеяния с $l=1$.

Полное сечение резонансного рассеяния, усредненное по всем ориентациям пары, оказывается равным

$$\sigma_{\nu'\nu} = \frac{\pi}{2k_\lambda^2}\Gamma_{\lambda'}\Gamma_\lambda/[(E-\varepsilon)^2+\Gamma^2/4]. \tag{20}$$

Резонансный характер рассеяния на парах дефектов с радиусами $R=(a_h+$ $+3a_l)/2$, $(a_l+3a_h)/2$ может приводить к их преимущественному заселению по сравнению с изолированными потенциалами и парами другого радиуса. Действительно, для пар, имеющих квазидискретный уровень, плотность волновой функции налетающей частицы будет иметь резонансное усиление в области $r \sim R$, что должно приводить к эффективному захвату частиц в основное состояние [7], например, с испусканием фонона. Точный расчет сечения такого процесса приводит к формуле

$$\sigma = \frac{\pi}{k_\lambda^2}\Gamma_\phi\Gamma_\lambda/[(E-\varepsilon)^2+(\Gamma_\phi+\Gamma_l+\Gamma_h)^2/4], \tag{21}$$

где Γ_ϕ — ширина квазидискретного состояния относительно перехода в основное состояние с испусканием фонона. Преимущественное заселение «резонансных» пар может наблюдаться при изучении спектров краевой люминесценции полупроводниковых кристаллов [7].

Авторы благодарны Н. Н. Аблязову за обсуждение результатов.

Литература

[1] Ralph H. I. — Phil. Res. Rep., 1977, v. 32, N 3, p. 160—191.
[2] Аблязов Н. Н., Гельмонт Б. Л., Райх М. Э., Эфрос А. Л. — ЖЭТФ, 1984, т. 87, в. 2, с. 646—657.
[3] Luttinger J. M. — Phys. Rev., 1956, v. 102, N 4, p. 1030—1041.
[4] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1972. 748 с.
[5] Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., 1971. 544 с.
[6] Economou E. N. Green's functions in quantum physics. Berlin, 1979. 263 p.
[7] Агекян В. Ф., Герчиков Л. Г., Харченко В. А. — ЖЭТФ, 1987, т. 92, в. 5, с. 1970—1979.

Ленинградский
политехнический институт
им. И. М. Калинина

Получена 15.09.1987
Принята к печати 6.11.1987