Квазилокальные состояния и особенности резонансного рассеяния частиц дефектами в полупроводниковых кристаллах, обладающих зонной структурой энергетического спектра

© С.Е. Савотченко¶

Белгородский государственный университет,
308007 Белгород, Россия

(Получена 22 февраля 2000 г. Принята к печати 14 мая 2000 г.)

Изучены особенности взаимодействия частиц с плоским дефектом в полупроводниковом кристалле на основе модели зонного энергетического спектра. Показано, что вблизи дефекта существуют обобщенные локализованные состояния. Неквадратичность закона дисперсии в рассматриваемой системе приводит к появлению квазилокальных состояний. Проанализированы особенности рассеяния частиц на границе раздела полупроводниковых кристаллов. Полное отражение от границы раздела возможно при условии, когда энергия налетающей частицы совпадает с энергией квазилокального состояния. Установлено, что слабая диссипация энергии частиц в кристалле приводит к неустойчивости резонансного условия полного отражения.

1. В последнее время возрос интерес к проблемам рассеяния волн двумерными или точечными дефектами в кристаллах. В работах [1,2] исследовано рассеяние упругих волн тонким пассивным слоем (т. е. не имеющим внутренних степеней свободы) в изотропной среде. Было установлено, что если фазовая скорость налетающей волны лежит в интервале между продольной и поперечной скоростями звуковых волн ($c_t < c < c_l$), то возможны как полное прохождение, так и полное отражение волны. Аналогичная задача была проанализирована в [3] методами динамики кристаллической решетки на основе простой модели плоского дефекта в гранецентрированном кубическом кристалле, а также в [4] при исследовании роли учета взаимодействия не только ближайших соседних атомов в линейной цепочке. Теория, объясняющая физические причины резонансных явлений такого рода и, в частности, неожиданный эффект полного отражения, была предложена в [5].

В этих работах изучались векторные поля упругих смещений, которые состоят из двух парциальных слагаемых. Если фазовая скорость волны лежит в интервале $c_t < c < c_l$, то одно парциальное слагаемое отвечает локализованной вблизи дефекта продольной волне, а второе — объемной поперечной. Колебания такого типа называют квазилокальными [6,7]. Резонансное рассеяние возможно благодаря взаимодействию поперечной и продольной мод на дефекте. В объеме идеального кристалла эти волны не взаимодействуют и распространяются независимо. Резонанс осуществляется при условии, если фазовая скорость (или частота) падающей волны совпадает со скоростью (частотой) квазилокального колебания.

Наличие неоднозначности в частотном спектре может возникнуть в случае физического поля, описывающего электроны или дырки в особого сорта полупроводниковых кристаллах с зонной структурой энергетического спектра. Например, в [8] на основе обобщенной модели энергетического спектра удалось объяснить разнообразные свойства кристаллов CdSb, ZnSb. В этой модели основным является наличие двух долин энергетического спектра у края зоны Бриллюэна в валентной зоне и двух долин в зоне проводимости. Детальный анализ [9,10] показал, что зависимость энергии ε от квазиимпульса $\mathbf{k}$ для невырожденных зон как электронов, так и дырок кристалла In_4Se_3 соответствует закону дисперсии

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E_0 - \alpha_x k_x^2 - \alpha_y k_y^2 - \alpha_z k_z^2 + \beta_x k_x^4 + \beta_y k_y^4 + \beta_z k_z^4 \quad (1)$$

в окрестности запрещенного энергетического промежутка, который характеризуется полидолинной непараболичностью с отрицательной кривизной при наименьших волновых векторах, причем при больших $\mathbf{k}$ параболичность восстанавливается. Такой нестандартный закон дисперсии (1), полученный без учета спин-орбитального взаимодействия, для окрестностей центра зоны Бриллюэна кристалла In_4Se_3 является следствием взаимодействия близко расположенных подзон зоны проводимости и валентной зоны.

В данной работе проводится анализ собственных стационарных состояний и задачи рассеяния плоским дефектом квазичастиц, описываемых двупарциальным скалярным полем в полупроводниковом кристалле с зонной структурой спектра. Сделанные нами далее предположения о параметрах закона дисперсии (1) сводят фактически задачу к одномерной, что позволяет легко получить аналитические результаты и заметить некоторые особенности динамики двупарциальных полей. В полупроводниковом кристалле, обладающем зонной структурой энергетического спектра, закон дисперсии является не квадратичным, а биквадратным вида (1). При этом волновая функция такого состояния будет состоять из двух парциальных слагаемых. Поэтому возможно явление полного отражения от плоской границы раздела сред при нетривиальных условиях, т. е. когда дефект (граница раздела) характеризуется отличным от нуля значением параметра и энергия налетающей частицы не совпадает с границей непрерывного спектра объемных состояний.

¶ E-mail: savotchenko@bsu.edu.ru

В рассматриваемой системе могут существовать как локальные, так и квазилокальные состояния. Среда, в которой распространяется волна, обладает пространственной дисперсией, благодаря которой и реализуется неквадратичная зависимость энергии от квазиимпульса. Ясно, что учет пространственной дисперсии приведет к изменению некоторых физических свойств системы. Например, локальные состояния становятся обобщенными [11,12], т. е. амплитуды волновых функций таких состояний убывают с расстоянием осциллирующим образом (по аналогии с обобщенными рэлеевскими волнами). Вопрос о возникновении локальных состояний вблизи дефектов хорошо изучен и для моделей, основанных на использовании биквадратного закона дисперсии [13]. Однако квазилокальные состояния, характеризуемые скалярным полем, и в особенности несимметричные собственные стационарные состояния с энергией, принадлежащей непрерывному спектру бездефектной среды, не рассматривались, и поэтому их изучение представляет большой как теоретический, так и прикладной интерес.

В недавней работе [14] было показано, что эффект аномального полного отражения волны от пассивного дефекта не сохраняется в более реалистической модели, когда учитываются диссипативные процессы в кристалле. Интерес к этой проблеме связан с выяснением возможности наблюдения аномального отражения волны от границы раздела в кристалле. В рамках рассматриваемой модели полупроводникового кристалла мы проанализируем влияние диссипации энергии рассеивающихся квазичастиц на условие резонанса отражения.

2. Рассмотрим плоский дефект, например границу раздела двух одинаковых полупроводниковых кристаллов, обладающих законом дисперсии вида (1), где $\alpha_j > 0$ и $\beta_j > 0$ $(j = x, y, z)$. Предположим, что кристалл обладает такой анизотропией, при которой пространственная дисперсия сильно проявляется только в одном из направлений, а именно в направлении, перпендикулярном плоскости дефекта. Выберем систему координат так, что ось Ox перпендикулярна плоскости дефекта, а плоскость yOz совпадает с ней. Тогда, обозначив $\alpha = \alpha_x$, $\beta = \beta_x$, $\alpha_\perp = \alpha_y = \alpha_z$ и считая $\beta_x \gg \beta_y$ и $\beta_z \gg \beta_z$, запишем закон дисперсии в виде

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E_0 - \alpha k^2 - \alpha_\perp k_\perp^2 + \beta k^4, \tag{2}$$

где $k = k_x$ и $k_\perp^2 = k_y^2 + k_z^2$. Закону дисперсии (2) отвечает стационарное уравнение типа Шредингера:

$$\varepsilon\Psi = E_0\Psi + \alpha\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \alpha_\perp\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + \beta\frac{\partial^4\Psi}{\partial x^4} + U(x)\Psi, \tag{3}$$

где потенциал, моделирующий границу раздела кристаллических полупространств, есть $U(x) = U_0\delta(x)$. Будем считать, что кристалл вдоль границы раздела однородный, и поэтому решение уравнения (3) следует искать в виде $\Psi(x, y, z) = \psi(x)\exp(ik_y y + ik_z z)$. С учетом этого из (3) получается одномерное уравнение относительно функции ψ:

$$E\psi = E_0\psi + \alpha\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \beta\frac{\partial^4\psi}{\partial x^4} + U(x)\psi, \tag{4}$$

где обозначено $E = \varepsilon + \alpha_\perp k_\perp^2$. Из (4) следует, что стационарные однородные состояния $\psi(x) = \psi_0\exp(ikx)$ имеют закон дисперсии

$$E(k) = E_0 - \alpha k^2 + \beta k^4. \tag{5}$$

Проинтегрировав (2) вблизи граничной области $x = 0$, нетрудно получить граничное условие

$$\alpha\left(\frac{\partial\psi(+0)}{\partial x} - \frac{\partial\psi(-0)}{\partial x}\right) + \beta\left(\frac{\partial^3\psi(+0)}{\partial x^3} - \frac{\partial^3\psi(-0)}{\partial x^3}\right) + U_0\psi(0) = 0. \tag{6}$$

При $\beta = 0$ условие (6) совпадает с хорошо известным граничным условием для стандартного уравнения Шредингера с квадратичным законом дисперсии. Мы будем интересоваться случаем, когда $\beta \neq 0$. Систему граничных условий необходимо дополнить требованием непрерывности волновой функции $\psi(x)$ и ее второй производной при $x = 0$, но тогда и первая производная должна быть непрерывной в этой точке. Таким образом, мы будем пользоваться следующей системой граничных условий:

$$\psi(+0) = \psi(-0), \qquad \frac{\partial\psi(+0)}{\partial x} = \frac{\partial\psi(-0)}{\partial x},$$

$$\frac{\partial^2\psi(+0)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2\psi(-0)}{\partial x^2}, \qquad \frac{\partial^3\psi(+0)}{\partial x^3} - \frac{\partial^3\psi(-0)}{\partial x^3} = \eta\psi(0), \tag{7}$$

где $\eta = -U_0/\beta$.

Решения уравнения (4) будут описывать различные состояния — однородные, локальные или квазилокальные — в зависимости от значения энергии E.

Из закона дисперсии (5) следует, что состояние задается двумя различными квазимпульсами. Так, в интервале сплошного спектра $E_m < E < E_0$, где $E_m = E_0 - \alpha^2/4\beta$ будут две пары вещественных квазиимпульсов:

$$k_{1,2}^2 = k_m^2 \pm \sqrt{\frac{E - E_m}{\beta}}. \tag{8}$$

Ясно, что волновая функция однородных волн с квазиимпульсами (8) состоит из двух слагаемых с различными амплитудами и характерами осцилляций:

$$\psi(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{ik_2 x}. \tag{9}$$

Более интересным, с точки зрения физики конденсированного состояния, является вопрос о возникновении локализованного вблизи дефекта состояния. Поэтому случай $E < E_m$ мы проанализируем более подробно.

В этой области спектра состояние задается двумя комплексными квазиимпульсами: $\kappa_1 = \gamma - iq$ и $\kappa_2 = \gamma + iq$, где

$$q^2 = \frac{1}{2}\left\{\sqrt{\frac{E_0 - E}{\beta}} + k_m^2\right\},$$

$$\gamma^2 = \frac{1}{2}\left\{\sqrt{\frac{E_0 - E}{\beta}} - k_m^2\right\}, \tag{10}$$

$k_m^2 = \alpha/2\beta$. Тогда, использовав граничные условия (7), решение уравнения (4) можно записать в виде

$$\psi(x) = A\sin\bigl(q|x| + \vartheta\bigr)\mathrm{e}^{-\gamma|x|}, \tag{11}$$

где фаза задается соотношением $\sin 2\vartheta = \sqrt{(E_m - E)/(E_0 - E)}$, A — произвольная постоянная. Волновая функция (11) описывает так называемое обобщенное локализованное состояние [11,12], которое спадает осциллирующим образом при удалении от дефекта. Из граничных условий (4) следует дисперсионное соотношение для локальных уровней энергии

$$4\gamma(\gamma^2 + q^2) = \eta, \tag{12}$$

которые существуют только при определенном знаке параметра дефекта $U_0 < 0$.

Условие возникновения локального состояния вблизи плоского дефекта, аналогичное (11), обсуждалось, например, в [13], где рассматривалась доменная стенка в ферромагнитном сверхпроводнике. В однородном магнитном поле при температуре ниже критической возможно появление неоднородного сверхпроводящего состояния. Волновая функция в этом случае имеет смысл параметра порядка и подчиняется линеаризованному уравнению Гинзбурга–Ландау с четвертой пространственной производной, так как эффективное обменное поле вблизи доменной стенки существенно ослабляется. В этой работе было получено решение типа (11) вблизи точечного дефекта для трехмерного сферически симметричного случая зависимости энергии от волнового вектора.

3. Рассмотрим теперь случай $E > E_0$, когда один из квазиимпульсов будет вещественным $k_1 = k$, а другой — чисто мнимым $k_2 = i\kappa$:

$$k^2 = \sqrt{\frac{E - E_0}{\beta} + k_m^4} + k_m^2,$$

$$\kappa^2 = \sqrt{\frac{E - E_0}{\beta} + k_m^4} - k_m^2. \tag{13}$$

Из рис. 1, где изображены зависимости $E(k) = E_0 - \alpha k^2 + \beta k^4$ и $E(\kappa) = E_0 + \alpha\kappa^2 + \beta\kappa^4$, видно, что одному и тому же значению энергии соответствуют два квазиимпульса (13).

В рассматриваемом случае внутри сплошного спектра возникает квазилокальное состояние [6,7], волновая функция которого состоит из двух парциальных слагаемых, одно из которых соответствует стоячей волне

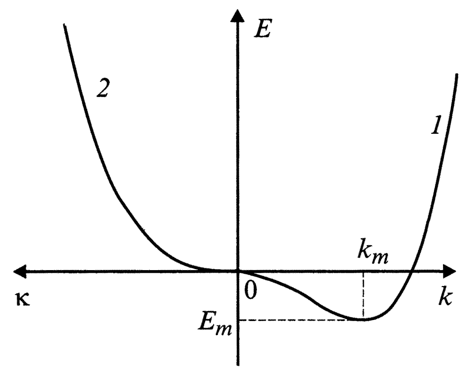

Рис. 1. Зависимости энергии квазичастиц от вещественного (*1*) и мнимого (*2*) квазиимульсов.

на всей оси Ox, а второе — локализованному вблизи дефекта колебанию:

$$\psi(x) = \begin{cases} A\sin(kx - \varphi_1) + M\mathrm{e}^{\kappa x}, & x < 0, \\ B\sin(kx - \varphi_2) + M\mathrm{e}^{-\kappa x}, & x > 0. \end{cases} \tag{14}$$

Решение (14) характеризуется пятью параметрами: амплитудами A, B, M и фазами φ_1, φ_2. Подставив решение (14) в граничные условия (7), можно получить систему алгебраических однородных уравнений для нахождения амплитуд квазилокальных состояний A, B и M:

$$\begin{cases} A\sin\varphi_1 - B\sin\varphi_2 = 0, \\ Ak\cos\varphi_1 - Bk\cos\varphi_2 + 2\kappa M = 0, \\ A(\eta\sin\varphi_1 + k^3\cos\varphi_1) - Bk^3\cos\varphi_2 - M(\eta + 2\kappa^3) = 0. \end{cases} \tag{15}$$

Условие равенства нулю определителя системы (15) задает связь фаз φ_1 и φ_2, оставляя одну из них в качестве свободного параметра:

$$\left\{\eta + 2\kappa(k^2 + \kappa^2)\right\}k\sin(\varphi_1 - \varphi_2) = 2\kappa\eta\sin\varphi_1\sin\varphi_2. \tag{16}$$

Любопытно заметить следующую особенность квазилокальных состояний. Оказывается, что существует стационарное собственное состояние $\psi_N = \psi_S + \psi_L$, в котором стоячая волна существует только в одном из полупространств

$$\psi_S(x) = \begin{cases} A\sin kx, & x < 0, \\ 0, & x > 0, \end{cases} \tag{17}$$

а локальное состояние существует по обе стороны от дефекта $\psi_L(x) = M\exp(-\kappa|x|)$. Действительно, положив $B = 0$ в (15), видим, что при этом из (16) автоматически вытекает $\varphi_1 = 0$ и амплитуда локального состояния однозначно задается выражением $M = -(k/2\kappa)A$. Энергия таких квазилокальных состояний определяется из соотношения

$$\eta = -2\kappa(k^2 + \kappa^2). \tag{18}$$

Квазилокальное состояние ψ_N существует только при $U_0 > 0$. В следующем пункте будет показано, что условие существования квазилокального состояния несимметричного типа (у которого $B = 0$) совпадает с условием полного резонансного отражения волны от дефекта.

Заметим, что квазилокальное состояние, отвечающее единой стоячей волне на всей оси Ox ($A = B$) при отличной от нуля локальной амплитуде M, возможно только при $\kappa = 0$, что соответствует энергии, совпадающей с границей спектра $E = E_0$.

4. Проанализируем теперь задачу рассеяния квазичастицы на границе раздела кристаллов. Пусть энергия квазичастицы, налетающей на границу раздела сред, находится в области существования квазилокальных состояний $E > E_0$. Тогда решение уравнения (4) следует искать в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} + Me^{\kappa x}, & x < 0, \\ Te^{ikx} + Ne^{-\kappa x}, & x > 0, \end{cases} \tag{19}$$

где R, T, M, N — амплитуды отраженной, прошедшей и локализованных по обе стороны от дефекта волн, а k и κ определяются выражениями (13). Подставив решение (19) в граничные условия (7), можно легко вычислить соответствующие амплитуды. Нас будут интересовать коэффициенты отражения и прохождения:

$$|R(E)|^2 = \frac{|\Delta_R^0(E)|^2}{|\Delta_R^0(E)|^2 + |\Delta_T^0(E)|^2}, \tag{20}$$

$$|T(E)|^2 = \frac{|\Delta_T^0(E)|^2}{|\Delta_R^0(E)|^2 + |\Delta_T^0(E)|^2}, \tag{21}$$

где

$$|\Delta_R^0(E)|^2 = 4\eta^2\kappa^2, \tag{22}$$

$$|\Delta_T^0(E)|^2 = 4k^2\{\eta + 2\kappa(\kappa^2 + k^2)\}^2. \tag{23}$$

Естественно, что выполняется квантово-механический закон сохранения

$$|R(E)|^2 + |T(E)|^2 = 1 \tag{24}$$

в среде, если не учитывается поглощение энергии волны в объеме кристалла.

Коэффициент отражения пропорционален интенсивности дефекта $|R|^2 \sim U_0^2$, и поэтому $|R|^2 = 0$ и $|T|^2 = 1$ при $U_0 \to 0$, т. е. квазичастица не чувствует границу и проходит свободно из одного полупространства в другое. При отличном от нуля значении параметра дефекта U_0 полное прохождение может осуществляться, если энергия налетающей квазичастицы совпадает с границей спектра $E = E_0$. Для больших значений энергии налетающей квазичастицы граница раздела сред является практически прозрачной (рис. 2, a). Но это — тривиальные условия, которые выполнялись и в случае квадратичного закона дисперсии.

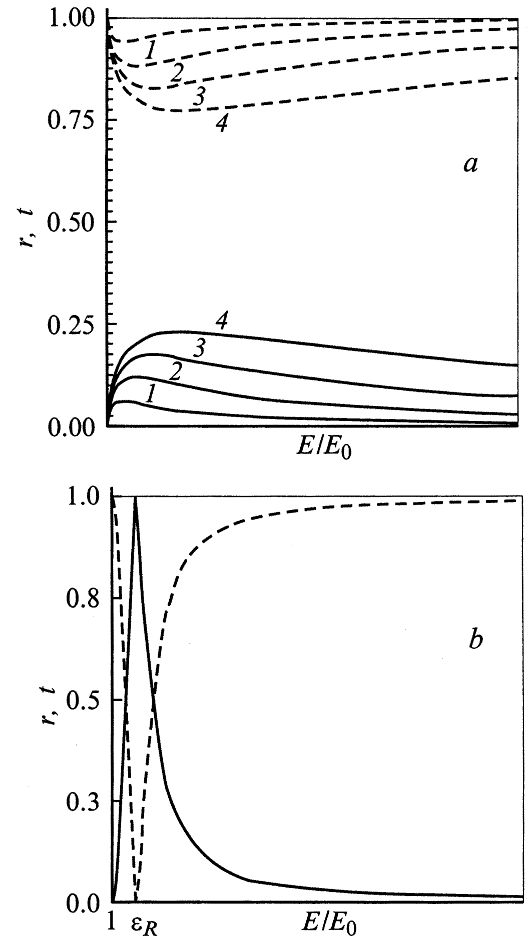

Рис. 2. Типичное поведение зависимостей коэффициентов отражения $r = |R|^2$ (сплошные линии) и прохождения $t = |T|^2$ (штриховые линии): a — нерезонансная ситуация при $U_0 < 0$ для различных значений параметра дефекта $U_0 = U_j$ ($j = 1, 2, 3, 4$), причем $|U_1| < |U_2| < |U_3| < |U_4|$ (*1–4* соответственно); b — резонансная ситуация при $U_0 > 0$, причем величина $\varepsilon_R = E_R/E_0$ определяется из условия (18).

Интересным же оказывается то, что при нетривиальных условиях возможно полное отражение квазичастицы от границы раздела, когда $|R|^2 = 1$ и $|T|^2 = 0$ (рис. 2, b). Анализ выражений (20) и (21) показал, что полное отражение осуществляется, если энергия налетающей квазичастицы $E_R(\eta)$ определяется из соотношения $2\kappa(k^2 + \kappa^2) = -\eta$, совпадающего с выражением (18).

Известно, что если коэффициенты отражения или прохождения имеют особенности при некоторых значениях энергии, то на этих энергетических уровнях наблюдаются резкие пики плотности состояний. Поэтому уровни энергии, при которых наблюдаются явления полного отражения или прохождения, называются резонансными.

В рассматриваемой системе резонанс, а точнее полное отражение, возникает тогда, когда значение энергии налетающей квазичастицы совпадает с энергетическим уровнем собственного квазилокального состояния несимметричного типа. Резонансный эффект возможен благодаря взаимодействию на границе раздела сред двух парциальных слагаемых волновой функции, отвечающих локализованному в пространстве состоянию и бегущей волне. Эти выводы согласуются с результатами работ [2–5], хотя в них изучались резонансные явления для совершенно других физических полей (акустических рэлеевских волн).

5. Для выяснения принципиальной возможности наблюдения в эксперименте явления аномального отражения волны от пассивного дефекта, рассмотренного в предыдущем пункте, можно учесть диссипативные процессы в кристалле. Следуя [14], мы хотим показать, что условие полного отражения может оказаться неустойчивым по отношению к незначительным возмущениям системы. В качестве такого возмущения рассмотрим поглощение энергии волны в среде. Диссипативные процессы в объеме могут быть учтены добавлением в уравнение (4) слагаемого типа $i\nu\psi$. Тогда уравнение для скалярного поля в рассматриваемой модели примет вид

$$E\psi = E_0\psi + \alpha\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \beta\frac{\partial^4\psi}{\partial x^4} - i\nu\psi + U(x)\psi. \tag{25}$$

Решение задачи рассеяния на основе уравнения (25) можно записать в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ipx} + Re^{-ipx} + Me^{\lambda x}, & x < 0, \\ Te^{ipx} + Ne^{-\lambda x}, & x > 0, \end{cases} \tag{26}$$

где квазиимпульсы p и λ являются комплексными величинами. Считая диссипацию энергии квазичастиц достаточно слабой, получим

$$p = k + \frac{i\nu}{2k\Omega} \quad \text{и} \quad \lambda = \kappa + \frac{i\nu}{2\kappa\Omega}, \tag{27}$$

где $\Omega(E) = 2\sqrt{\beta(E - E_m)}$, а k и κ по-прежнему определяются (13). Тогда коэффициенты отражения и прохождения будут иметь вид

$$\left|R(E,\nu)\right|^2 = \frac{\left|\Delta_R(E,\nu)\right|^2}{\left|\Delta(E,\nu)\right|^2}, \tag{28}$$

$$\left|T(E,\nu)\right|^2 = \frac{\left|\Delta_T(E,\nu)\right|^2}{\left|\Delta(E,\nu)\right|^2}, \tag{29}$$

где

$$\left|\Delta_R(E,\nu)\right|^2 = \left|\Delta_R^0(E)\right|^2 + \frac{\nu^2\eta^2}{\kappa^2\Omega^2}, \tag{30}$$

$$\left|\Delta_T(E,\nu)\right|^2 = \left|\Delta_T^0(E)\right|^2\left(1 + \frac{\nu^2}{16k^4\Omega^2}\right) + \frac{2\nu^2}{\kappa\Omega}\left\{\frac{2k^4(5\kappa^2+k^2)^2}{\kappa\Omega} - \left|\Delta_T^0(E)\right|\frac{5(\kappa^2+k^2)}{k}\right\}, \tag{31}$$

$$\left|\Delta(E,\nu)\right|^2 = \left|\Delta_R(E,\nu)\right|^2 + \left|\Delta_T(E,\nu)\right|^2 + \frac{\nu^2}{\kappa\Omega^2}\left|\Delta_T^0(E)\right|(5\kappa^2+k^2) + \frac{2\nu\eta}{\Omega}\left\{\left|\Delta_T^0(E)\right|\frac{2k^2-\kappa^2}{2\kappa k^2} - 4k(5\kappa^2+k^2)\right\}, \tag{32}$$

а детерминанты $\left|\Delta_R^0(E)\right| = \left|\Delta_R(E,\nu=0)\right|$ и $\left|\Delta_T^0(E)\right| = \left|\Delta_T(E,\nu=0)\right|$ определяются выражениями (22) и (23). Естественно, что при учете диссипативных процессов в средах нарушается закон сохранения (24).

Рассмотрим случай, когда частота падающей волны близка к резонансной частоте E_R, определяемой из соотношения (18). Напомним, что тогда $|\Delta_T^0(E_R)| = 0$. Тогда коэффициенты отражения (28) и прохождения (29) можно записать в виде

$$\left|R(E_R)\right|^2 = \frac{d^2}{d^2+\gamma^2+2\gamma d}, \tag{33}$$

$$\left|T(E_R)\right|^2 = \frac{\gamma^2}{d^2+\gamma^2+2\gamma d}, \tag{34}$$

где мы ввели безразмерные величины: эффективная длина поглощения энергии квазичастицы $\gamma = \nu/\Omega\kappa_R^2 \ll 1$, эффективная толщина дефекта $d = U_0/\beta k_R(k_R^2 + 5\kappa_R^2)$, а $\kappa_R = \kappa(E_R)$ и $k_R = k(E_R)$.

В случае, когда эффективная толщина дефекта превышает эффективную длину поглощения, $d \gg \gamma$, т. е. квазичастица сильно взаимодействует с границей, как мы видим из (33) и (34), резонансная ситуация полного отражения практически не изменяется.

Если квазичастица достаточно слабо взаимодействует с границей, что обеспечивается выполнением условия $d \ll \gamma \ll 1$, то из (33) и (34) следует, что $|T|^2 = 1$ и $|R|^2 = 0$, т. е. возможно полное прохождение волны через дефект. Если энергия налетающей квазичастицы близка к резонансной энергии отражения в кристалле без диссипации, то учет малого поглощения энергии квазичастицы приводит к обратной резонансной ситуации полного прохождения при условии слабого взаимодействия квазичастицы с дефектом. Таким образом, особенности коэффициентов отражения и прохождения $|R|^2 = 1$ и $|T|^2 = 0$ оказываются неустойчивыми по отношению к малым возмущениям системы, которое может привести к выполнению $|T|^2 = 1$ и $|R|^2 = 0$, если взаимодействие квазичастицы с дефектом гораздо слабее ее малой поглощаемой энергии в кристалле. Такие выводы были сделаны в [14] при анализе влияния диссипативных процессов на рассеяние упругих волн в кристалле.

6. Мы рассмотрели модель полупроводникового кристалла с зонной структурой спектра квазичастиц при наличии неоднозначной зависимости энергии от квазиимпульсов. Модельное предположение в основном сводилось к учету пространственных производных порядка выше второго в уравнении Шредингера, т. е. к учету пространственной дисперсии. В результате нам удалось описать несколько качественно новых эффектов, связанных с неквадратичностью закона дисперсии квазичастиц даже в простейшем случае, когда рассматриваемая задача фактически сводилась к одномерной. Поэтому в заключение хотелось бы отметить роль пространственной дисперсии при изучении резонансных явлений рассеяния волн дефектами в кристаллах.

Учет пространственной дисперсии посредством неквадратичной зависимости энергии от квазиимпульса приводит к возможности полного отражения волны $\psi(x) \sim \exp(ikx)$ (квазичастицы) от границы раздела диспергирующих сред при нетривиальных значениях исходных параметров. Напомним, что в случае квадратичного закона дисперсии $E(k) = E_0 + \alpha k^2$ коэффициенты отражения и прохождения имеют вид

$$|R|^2 = \frac{U_0^2}{U_0^2 + 4\alpha(E - E_0)},$$

$$|T|^2 = \frac{4\alpha(E - E_0)}{U_0^2 + 4\alpha(E - E_0)}. \tag{35}$$

Ясно, что в этом случае полное отражение возможно только при $E = E_0$. Следовательно, как показал анализ коэффициентов отражения (20) и прохождения (21), резонансные свойства границы раздела сред существенно изменяются, если среда обладает пространственной дисперсией.

В диспергирующей среде локальные состояния тоже приобретают некоторые новые особенности. В частности, пространственное убывание волновой функции локальных состояний носит осцилляционный характер. Напомним, что в случае квадратичного закона дисперсии при $E < E_0$ локальное состояние описывается монотонно убывающей волновой функцией $\psi(x) = \psi(0)\exp(-\kappa|x|)$, где $\kappa^2 = (E_0 - E)/\alpha > 0$. Энергия такого локального состояния задается явной формулой $E_l = E_0 - (U_0^2/4\alpha)$.

Квазилокальные состояния, задаваемые скалярным полем, в средах с квадратичным законом дисперсии не возникают.

Если среда обладает пространственной дисперсией противоположного знака ($\beta < 0$), то описанные резонансные особенности процесса рассеяния и квазилокальные состояния не изменяются. Положив во всех формулах $\beta = -|\beta|$, легко видеть, что поменяются местами типы состояний в зависимости от значений энергии. Теперь квазилокальные состояния будут при $E < E_0$, а локализованные при $E > E_0$, причем при $E_0 < E < E_0 + (\alpha^2/4\beta)$ локализованные состояния будут обычными (амплитуды убывают экспоненциально с расстоянием при удалении от дефекта), а при $E > E_0 + (\alpha^2/4\beta)$ — обобщенными. Таким образом, при $\beta < 0$ в системе возможен переход от обычных локальных состояний к обобщенным при изменении параметра дефекта, аналогичный описанному в [11,12].

Полученные в п. 1 и 2 результаты, как можно убедиться, слабо зависят от конкретного вида граничных условий и вида динамических уравнений, приводящих к неквадратичному закону дисперсии квазичастиц в полупроводниковом кристалле, имеющему несколько долин, в рассмотренном случае — к двудолинному. Основные выводы справедливы не только по отношению к системам с непрерывным распределением поля, но и к дискретным моделям.

Автор выражает искреннюю благодарность А.М. Косевичу и Е.С. Сыркину за обсуждение работы и ценные замечания.

Список литературы

[1] A.N. Darynskii, G.A. Maugin. Wave Motion, **23**, 363 (1996).
[2] A.M. Kosevich, A.V. Tutov. Phys. Lett. A, **248**, 271 (1998).
[3] А.М. Косевич, Д.В. Мацокин, С.Е. Савотченко. ФНТ, **25**, 63 (1999).
[4] А.М. Косевич, С.Е. Савотченко. ФНТ, **25**, 737 (1999).
[5] А.М. Косевич. ЖЭТФ, **115**, 306 (1999).
[6] А.М. Косевич, А.В. Тутов. ФНТ, **19**, 1273 (1993).
[7] А.М. Косевич, Д.В. Мацокин, С.Е. Савотченко. ФНТ, **24**, 992 (1998).
[8] Д.М. Берча, О.Б. Митин, И.М. Раненко. ФТП, **28**, 1249 (1994).
[9] Д.М. Берча, О.Б. Митин, Л.Ю. Харкалис, А.И. Берча. ФТТ, 37, 3233 (1995).
[10] D.M. Bercha, L.Yu. Kharkhalis, A.I. Bercha, M.A. Sznajder. Phys. St. Sol. (b), **203**, 427 (1997).
[11] С.В. Тарасенко. ФНТ, **24**, 219 (1998).
[12] С.В. Тарасенко. ФНТ, **24**, 832 (1998).
[13] А.И. Буздин, В.Н. Меньшов, В.В. Тугушев. ЖЭТФ, **91**, 2204 (1986).
[14] Yu.A. Kosevich, E.S. Syrkin. Phys. Lett. A, **251**, 378 (1998).

Редактор В.В. Чалдышев

Quasi-localized state and peculiarities of resonance scatterling of particles on defects in semiconductor crystals with band spectrum structure

E. Savotchenko

Belgorod State University,
308007 Belgorod, Russia

Abstract Peculiarities of the particle–⟨plane defect⟩ interaction in semiconductor crystals have been investigated within the framework of the band energy spectrum structure. It is shown that generalized localized states exist at defects. In the system under consideration a non-square energy–momentum interrelationship leads to a quasi-localized state appearance. Peculiarities of the particle scattering at semiconductor subboundaries are analyzed. The total reflection phenomenon may occur if the coincidence of the incident particle energy and the quasi-localized state energy takes place. It has been found that a weak dissipation of the particle energy in the crystal leads to the instability of the resonance condition of the total reflection.