

$$\left(\Delta \frac{1}{H}\right) = \frac{|e| \hbar}{m_{\text{пр}} c}, \quad (16)$$

В пределе $T=0$ этот результат совпадает с $-\partial^2 \bar{Q} / \partial \mu^2$ из [1] и легко обобщается на случай произвольного энергетического спектра электрона заменой $\mu \rightarrow S_{\nu} / 2\pi m$, где S_{ν} — площадь ν -го экстремального сечения поверхности Ферми плоскостью $p_z^{\nu} = \text{const}$, и введенном дополнительном суммировании по номерам ν экстремальных сечений поверхности Ферми. Учет $T \neq 0$ не меняет периода осцилляций и отражается лишь на их амплитуде.

3. В заключение отметим, что при получении $\bar{\rho}(\mu)$ (15) не использовалась известная формула суммирования Пуассона [1]. Это обстоятельство несомненно связано с принятием в качестве базиса волновых функций (4), которые, не являясь собственными волновыми функциями оператора \mathcal{H} (3), тем не менее наиболее полно описывают состояние электрона в металле на поверхности Ферми в присутствии магнитного поля.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Абрикосов А. А. Основы теории металлов. М.: Наука, 1987. С. 520.
- [2] Глаубер Р. Оптическая когерентность и статистика фотонов. Квантовая оптика и квантовая радиофизика. М.: Мир, 1966. С. 91—279.
- [3] Хакен Х. Квантовополевая теория твердого тела. М.: Наука, 1980. С. 341.
- [4] Малкин И. А., Манько В. И. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. М.: Наука, 1979. С. 320.
- [5] Feldman A., Kahn A. // Phys. Rev. 1970. V. B1. P. 4584.
- [6] Грановский Я. И., Димашко Ю. А. // Укр. физ. журн. 1974. Т. 19. С. 1456.
- [7] Додонов В. В., Манько В. И. // Тр. ФИАН. 1987. Т. 183. С. 182—286.
- [8] Додонов В. В., Манько В. И. // Тр. ФИАН. 1989. Т. 191. С. 171—244.
- [9] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. С. 767.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
15 июня 1990 г.

УДК 539.2

© Физика твердого тела, том 32, № 11, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 11, 1990

УСИЛЕНИЕ МНОГОФОНОННОГО РЕЗОНАНСНОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В СЛУЧАЕ РАВНЫХ ЭФФЕКТИВНЫХ МАСС ЭЛЕКТРОНА И ДЫРКИ

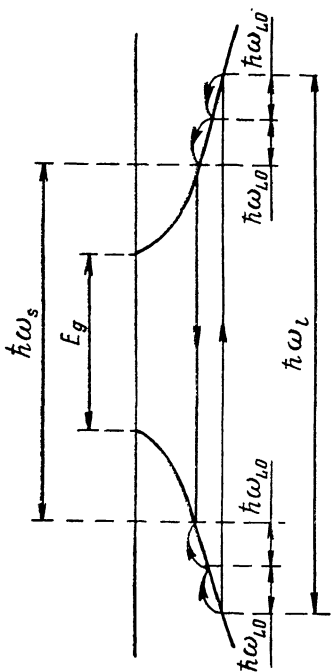
И. Г. Ланг, С. Т. Павлов, О. Сотолонго Коста

В [1-4] получены спектры многофононного резонансного комбинационного рассеяния света (МРКРС) при облучении в области фундаментального поглощения кристаллов InVg и InI, принадлежащих к классу A^3B^7 . Эти спектры отличаются от ранее наблюдавшихся спектров МРКРС в полупроводниках A^2B^6 двумя особенностями: 1) наблюдается очень большое (достигающее 20) число линий, 2) интенсивность линий четного порядка больше интенсивности линий нечетного. Вторая особенность должна быть присуща спектрам МРКРС при условии равенства эффективных масс электрона и дырки [3-6]. В [7] показано, что вывод о равных нулю величинах сечений нечетных порядков справедлив независимо от того, какие именно состояния электронно-дырочных пар (ЭДП) рассматриваются в качестве промежуточных — экситоны или свободные ЭДП.

Настоящая работа посвящена объяснению первой особенности спектров МРКРС при условии $m = m_h$. Существуют два механизма процессов МРКРС, которые действуют одновременно. Первый — экситонный, второй — с участием свободных ЭДП. В [7-9] рассмотрен экситонный механизм применительно к InBr и InI. Эффективность экситонного механизма рассеяния при больших числах N испущенных LO фононов подавляется процессами распада экситонов. В [7] показано, что при $m = m_h$ для InBr и InI вероятность распада экситона приблизительно на порядок превышает сумму вероятностей прочих переходов, при которых экситон сохраняется как целое. При таких условиях экситонный механизм МРКРС должен быть малоэффективным для высоких порядков N рассеяния. Кроме того, отметим, что никакого увеличения интенсивности МРКРС при $m = m_h$ за счет экситонного механизма не должно происходить.

Итак, остается только возможность объяснить рост интенсивности МРКРС в случае равных масс носителей тока с помощью ЭДП-механизма. Такое объяснение изложено ниже.

На рисунке схематически изображен процесс МРКРС 4-го порядка ($N=4$) с участием свободных ЭДП в качестве промежуточных состояний в случае $m = m_h$. Свет с частотой ω_l посредством прямого перехода рождает ЭДП, затем электрон и дырка испускают по два LO фонона и про-



Схематическое изображение процесса, дающего наибольший вклад в сечение МРКРС четвертого порядка ($N=4$) в случае равных эффективных масс электрона и дырки.

исходит прямая аннигиляция ЭДП с испусканием кванта света $\hbar\omega_s$. Возможны другие процессы, например испускание всех четырех фононов электроном и т. п., но эти процессы дают меньший вклад в сечение МРКРС, поскольку они обязательно включают один непрямой переход — не прямое рождение ЭДП или непрямую аннигиляцию, как в случае неравных эффективных масс электрона и дырки [10]. Непрямым переходом мы называем переход через виртуальное состояние, энергия которого не равна начальной и конечной энергии системы.

Вклад процесса, изображенного на рисунке, был вычислен с использованием модели и диаграммной методики, описанной в [10]. Для сечения рассеяния получаем результат

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\omega_s} = -\frac{V_0^5 m^{10}}{2^4 \pi^7 \hbar^{20} c^4} \frac{\omega_s n_e}{\omega_l n_l} |e_s J|^2 |e_l J|^2 k_0 k_1^2 k_2 \times$$

$$\times \delta(\omega_l - \omega_s - 4\omega_{l,0}) \int \frac{d\omega_1}{4\pi} \int \frac{d\omega_2}{4\pi} \int \frac{d\omega_3}{4\pi} \int \frac{d\omega_4}{4\pi} |C_{k_0-k_s}|^2 |C_{k_1-k_2}|^2 |C_{k_2-k_3}|^2 |C_{k_3-k_0}|^2 \times$$

$$\times \int d\mathbf{p} (k_0 \mathbf{p} - iQ_0^2)^{-1} (k_2 \mathbf{p} - iQ_2^2)^{-1} [(k_0 + k_1) \mathbf{p} - i(Q_0^2 + Q_1^2)]^{-1} \times$$

$$\times \{ [(k_0 + k_2) \mathbf{p} - i(Q_0^2 + Q_2^2)]^{-2} [(k_2 + k_3) \mathbf{p} - i(Q_2^2 + Q_3^2)]^{-1} +$$

$$+ [(k_1 + k_3) \mathbf{p} - 2iQ_1^2]^{-1} [(k_0 + k_1 + k_2 + k_3) \mathbf{p} - i(Q_0^2 + 2Q_1^2 + Q_3^2)]^{-1} \times$$

$$\times [(k_2 + k_3) \mathbf{p} - i(Q_2^2 + Q_3^2)]^{-1} + [(k_1 + k_2) \mathbf{p} - i(Q_1^2 + Q_2^2)]^{-1} \times$$

$$\times [(k_1 + k_3) \mathbf{p} - 2iQ_1^2]^{-1} [(k_0 + k_1 + k_2) \mathbf{p} - i(Q_0^2 + Q_1^2 + Q_2^2)]^{-1} \}, \quad (1)$$

где V_0 — нормировочный объем; e_i (e_s); n_i (n_s) — векторы поляризации и показатели преломления возбуждающего (рассеянного) света соответственно; $\mathbf{J} = (e/m_0)\mathbf{p}_{cv}$; e , m_0 — заряд и масса свободного электрона; \mathbf{p}_{cv} — междузонный матричный элемент импульса; m — эффективная масса электрона и дырки.

$$C_q = -i\hbar\omega_{LO} \left(\frac{4\pi a l^3}{V_0} \right)^{1/2} \frac{1}{ql}, \quad l = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}} \right)^{1/2}, \quad a = \frac{e^2 (\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1})}{2\hbar\omega_{LO}l}$$

— фреilihовская константа связи электронов и дырок с LO фононами; ϵ_0 (ϵ_∞) — статическая (высокочастотная) диэлектрическая проницаемость; \mathbf{k}_0 , \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 , \mathbf{k}_3 — волновые векторы электронов и дырок в промежуточных состояниях кристалла, модули которых равны $k_0 = [(m/\hbar) (\omega_l - E_g/\hbar)]^{1/2}$; $k_1 = k_3 = [(m/\hbar) (\omega_l - E_g/\hbar - 2\omega_{LO})]^{1/2}$; $k_2 = [(m/\hbar) (\omega_l - E_g/\hbar - 4\omega_{LO})]^{1/2}$; E_g — ширина запрещенной зоны полупроводника; $Q_i^2 = (m/\hbar) \gamma(k_i)$; $\gamma(k_i)$ — вероятность в единицу времени испускания LO фонона электроном или дыркой с волновым вектором \mathbf{k}_i ; o_i — набор углов, определяющих направление вектора \mathbf{k}_i в пространстве. Можно показать, что величина (1) вещественна и положительна. Вектор \mathbf{p} , по которому в правой части (1) производится интегрирование, описывает неопределенность волнового вектора относительно движения электрона и дырки [10]. С этой неопределенностью связан конечный объем ЭДП.

Подынтегральное выражение из правой части (1) при больших значениях p пропорционально p^{-2} , так что интеграл по p конечен. Совершая замену переменной $\mathbf{p} = Q_0^2 \mathbf{x}/k_0$, где \mathbf{x} — безразмерный вектор, находим, что в интеграле (1) существенны p порядка $m\gamma/\hbar k$ и величина сечения пропорциональна первой степени константы α . Для более высоких порядков рассеяния $N=6, 8 \dots$ также получаем, что процессы типа изображенных на рисунке, при которых электроны и дырки испускают равное число LO фононов и происходят прямое рождение и прямая аннигиляция ЭДП, дают в сечение рассеяния максимальные вклады, пропорциональные α . Это утверждение справедливо при условии

$$\omega_l > E_g/\hbar + (N+2)\omega_{LO}. \quad (2)$$

В случае неравных масс электронов и дырок вклад процессов с участием свободных ЭДП пропорционален α^3 при любых $N \geq 4$ [10, 11]. Добавочный множитель α^2 в случае $m \neq m_h$ возникает из-за неизбежных непрямых переходов. Таким образом, интенсивность линий МРКРС четных порядков в случае равных масс в α^{-2} раз превышает интенсивность соответствующих линий при неравных массах, как в A^2B^6 . Этим, по-видимому, объясняется первая особенность процессов МРКРС в полупроводниках InBr и InI.

Ситуация аналогична увеличению на несколько порядков интенсивности МРКРС при включении сильного магнитного поля (СМП), предсказанному в [12, 13] и экспериментально обнаруженному в [14], а также увеличению скорости рождения экситонов в СМП, что экспериментально проявляется в росте интенсивностей линий экситонной люминесценции [15]. При включении СМП также совершается переход от зависимости $\sigma_N \sim \alpha^3$ к $\sigma_N \sim \alpha$, однако физическая причина усиления МРКРС иная — переход от свободного трехмерного к квазиодномерному движению электронов и дырок.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Nakamura K., Ohno N., Yoshida M., Nakai Y. // Sol. St. Comm. 1980. V. 36. N 1. P. 211—214.
- [2] Yoshida M., Watanabe H., Ohno N., Mitsutaka H., Nakamura K., Nakai Y. // J. Luminescence. 1984. V. 31/32. Pt 1. P. 488—490.
- [3] Yoshida M., Ohno N., Mitsutake H., Nakamura K., Nakai Y. // J. Phys. Soc. Jap. 1985. V. 54. N 7. P. 2754—2761.
- [4] Ohno N., Yoshida M., Nakamura K., Nakai Y. // Sol. St. Comm. 1985. V. 53. N 7. P. 569—572.

- [5] Генкин В. М. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. № 6. С. 2005—20011.
- [6] Ключихин А. А., Пермогоров С. А., Резницкий А. Н. // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. № 6. С. 2230—2251.
- [7] Рьера Р., Сотолонго Коста О., Траллеро Гинер К., Ланг И. Г., Павлов С. Т. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 83—88.
- [8] Trallero Giner C., Riera R. // Proc. XI Int. Conf. Raman Spectroscopy. London, 1988. P. 319—320.
- [9] Trallero Giner C., Riera R. // Phys. St. Sol. (b). 1989. V. 152. P. 357—367.
- [10] Goltsev A. V., Lang I. G., Pavlov S. T., Bryzhina M. F. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1983. V. 16. N 21. P. 4221—4241.
- [11] Zeyher R. // Sol. St. Comm. 1975. V. 16. N 1. P. 49—55.
- [12] Беллицкий В. И., Гольцев А. В., Ланг И. Г., Павлов С. Т. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 4. С. 1224—1226; 1984. Т. 26. № 7. С. 2182—2185; ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 1. № 1. С. 272—286.
- [13] Belitsky V. I., Goltsev A. V., Lang I. G., Pavlov S. T. // Phys. St. Sol. (b). 1984. V. 122. N 2. P. 581—590.
- [14] Ruf T., Cardona M. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. N 20. P. 2288—2290.
- [15] Сейсян Р. П., Юлдашев Ш. У. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 1. С. 12—22.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
15 июня 1990 г.

УДК 538.915 · 669'35'24

© Физика твердого тела, том 32, № 11, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 11, 1990

ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА ЛМТО — ФУНКЦИИ ГРИНА НА СЛУЧАЙ КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ В ПРИБЛИЖЕНИИ КОГЕРЕНТНОГО ПОТЕНЦИАЛА

И. А. Абрикосов, Ю. Х. Векилов, А. В. Рубан

Расчеты равновесных и кинетических свойств неупорядоченных материалов, выполненные в приближении когерентного потенциала (ПКП), по сравнению с другими одноузельными приближениями в наибольшей степени соответствуют результатам экспериментов. Однако эти расчеты проводились либо с использованием достаточно грубых моделей, например однозонной модели сплава в приближении сильной связи, либо было чрезвычайно трудоемкими, как метод Кона, Корринга и Ростокера—ПКП (ККР—ПКП) [1, 2].

В настоящей работе предлагается более эффективный, но достаточно точный по сравнению с ККР—ПКП метод расчета электронной структуры неупорядоченных твердых растворов. Он основан на обобщении метода линейных МТ-орбиталей — функции Грина (ЛМТО—ФГ), применяемого для расчета электронной структуры одиночной примеси, на случай концентрированных систем. Простота вычислений достигается за счет использования удобных процедур параметризации метода ЛМТО [3], энергетически независимых структурных констант, интегрирования по зоне Бриллюэна с использованием равномерного распределения Вейля для k -точек с одновременным итерационным решением уравнений ПКП.

Уравнения предлагаемого метода ЛМТО—ПКП могут быть получены, если рассматривать атомы компонентов твердого раствора А и В как примеси в идеальном кристалле, свойства которого соответствуют эффективной среде [4]. Тогда их функции Грина могут быть найдены из уравнения Дайсона, имеющего для метода ЛМТО—ФГ вид [3]

$$g_{LL}^i(E) = [g_{LL}^1(E) + (P_i^1(E) - P_L(E))^{-1}], \quad (1)$$

где $i=A, B$; $g_{LL}^i(E)$ — функция Грина эффективной среды (для кубических кристаллов диагональна по $L=(l, m)$; l, m — квантовые числа; в дальнейшем L и E используются только в тех случаях, когда они необходимы); g определяется как