

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ФОНОНОВ У ГРАНИЦЫ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

*Л. А. Фальковский**

*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
117334, Москва, Россия
Groupe d'Etudes des Semiconducteurs, cc074 UM2-CNRS
34095, Montpellier, France*

Поступила в редакцию 16 ноября 1999 г.

Рассмотрено влияние дефектов на усредненную гриновскую функцию оптических фононов, мнимая часть которой пропорциональна зависящему от переданной частоты сечению рамановского однофононного рассеяния света. Используется вариант «крестовой» техники, позволяющий принять во внимание локализованные состояния на дефектах. Дефекты предполагаются двумерными (типа дислокаций), на которых локализованные состояния существуют в окрестности границы непрерывного спектра при слабом взаимодействии с дефектом. В результате взаимодействия, которое оказывается зависящим от концентрации дефектов, состояния непрерывного спектра сдвигаются и уширяются, причем неоднородное уширение существенно зависит от переданной частоты (эффект фононной плотности состояний), что приводит к асимметрии рамановской линии. Концентрация дефектов сказывается и на локализованных состояниях, которые в основном взаимодействуют через зонные состояния.

PACS: 79.60.Jv, 78.30.-j

1. ВВЕДЕНИЕ

Со времени первых работ о локализованных состояниях [1, 2] появилось большое количество исследований как теоретических, так и экспериментальных на эту тему. Наиболее простой и точно решаемой является задача о состояниях на одном изотопическом дефекте [1, 3]. К сожалению, в этом примере частота локализованного состояния отделена конечным частотным интервалом от границы непрерывного спектра, а при малой разнице масс атомов матрицы и дефекта локализованное состояние может не существовать. Таким образом, состояние на дефекте определяется интегральными характеристиками всего фононного спектра, и помимо взаимодействия дефекта с матрицей требуется знать всю плотность состояний исходной невозмущенной задачи.

Особый интерес представляет случай хотя и малой, но конечной концентрации дефектов, когда взаимодействием состояний на близких дефектах нельзя пренебречь [4]. Тогда приходится решать задачу о многократном рассеянии фононов во всех ее

аспектах, принимая во внимание и возможность образования зоны локализованных состояний, и переход в ней к делокализованным состояниям [5–11]. Ситуация напоминает задачу о примесных уровнях в полупроводниках. Существенное различие, однако, состоит в том, что в полупроводниках благодаря малой эффективной массе носителей и большой диэлектрической постоянной примесные уровни оказываются мелкими, и обычно говорят о хвостах плотности состояний в запрещенной зоне. Состояния на изотопическом дефекте всегда являются глубокими.

Наконец, еще одна особенность наблюдаемых фононных спектров заключается в обязательном присутствии так называемого естественного затухания фононов даже при нуле температур и для идеальных решеток. Это затухание связано с возможностью распада фононов (частоты ω_0) на пары и описывается ангармонизмами третьего и более высоких порядков. Относительная величина естественного затухания Γ^{nat}/ω_0 имеет порядок квадрата отношения амплитуды колебания атомов к межатомному расстоянию и обычно составляет величину порядка 10^{-2} .

*E-mail: falk@itp.ac.ru

В настоящей работе мы делаем попытку справиться с описанными трудностями, рассматривая локализованные состояния на анизотропных дефектах, а именно на двумерных дефектах типа дислокаций. В этом случае локализованные состояния существуют при сколь угодно слабом потенциале дефекта. Как известно из квантовой механики, энергия состояния в двумерной потенциальной яме экспоненциально близка к границе непрерывного спектра. Следовательно, локализованное состояние на двумерном дефекте определяется непосредственной окрестностью экстремума фононной ветви. Взаимодействие таких дефектов друг с другом и с непрерывным спектром должно рассматриваться в рамках единой схемы в надлежащем порядке по концентрации дефектов.

Существенно, что взаимодействие фононов с дефектами является упругим в отличие от взаимодействия их друг с другом. По этой причине вклад дефектов в затухание фононов зависит от поведения плотности состояний вблизи границы непрерывного спектра и, таким образом, является особой функцией частотной переменной. В этом легко можно убедиться, написав согласно «золотому правилу» вероятность рассеяния фонона на потенциале дефекта и выделив $\delta(\omega^2 - \omega_0^2 + s^2 k^2)$ -функцию, учитывающую закон сохранения энергии для фонона вблизи, скажем, максимума ветви с частотой ω_0 . В случае рассеяния на точечном дефекте затухание фононов обращается в нуль пропорционально $\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}$, для линейного дефекта имеется конечный скачок, а для плоского — корневая расходимость. В то же время естественное затухание Γ^{nat} является гладкой функцией ω (практически постоянной величиной в малом интервале изменения ω), и поскольку мы интересуемся малой окрестностью частоты ω_0 , это затухание можно учесть (в спектре фононов или в выражении для запаздывающей гриновской функции), добавив мнимую константу $i\Gamma^{nat}$ к частотной переменной ω .

Из написанной выше формулы с δ -функцией видно, что нас интересуют расстояния масштаба $1/k \sim s/\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2} \sim s/\sqrt{\omega_0 \Gamma^{nat}}$. Поскольку дисперсионный параметр s имеет порядок скорости звука и для оптических фононов $\omega_0 \sim \pi s/a$, где a — параметр решетки, то характерные $1/k \sim a\sqrt{\omega_0/\Gamma^{nat}}$ велики в атомном масштабе. В настоящее время нет экспериментальной информации относительно того, на каких расстояниях должен падать потенциал дефекта. При расчете фононных спектров хорошо работает схема, в которой принимается, что некулоновская часть взаимодействия атомов может учитываться в приближении нескольких ближайших со-

седей. Это равносильно предположению о короткодействии взаимодействия. Кроме того, существует убеждение, что значительная доля возмущения, вызванного различием параметров решетки в гетеропереходах, также релаксирует на атомных расстояниях. По этой причине мы будем рассматривать короткодействующие дефекты, т. е. предполагать малым их радиус r_0 по сравнению с характерным значением $1/k$ ($r_0 \ll a\sqrt{\omega_0/\Gamma^{nat}}$) и считать константой фурье-компоненту потенциала взаимодействия в области интересующих нас k . В этом случае изотопический дефект лишь размерностью отличается от линейного или плоского дефекта.

И наконец, об экспериментальной стороне проблемы. В настоящее время наиболее точная информация о фононных спектрах получается с помощью рамановского рассеяния света, в технике которого достигнуто частотное разрешение порядка 1 К. Это позволяет изучать не плотность состояний, а саму линию рамановского рассеяния под влиянием различных факторов: давления, ионной имплантации, дефектов и т. д. (см., например, [12]). Исследование роли дефектов представляет особый интерес в полупроводниковых приложениях, где применяется методика микрорамановского рассеяния, использующая лазерные пучки с размером пятна порядка длины волны.

Нашей целью здесь является вычисление функции Грина оптических фононов (мнимая часть которой непосредственно дает однофононное сечение рамановского рассеяния) в модели беспорядка, обусловленного двумерными короткодействующими дефектами.

2. ВКЛАД ЛОКАЛИЗОВАННЫХ КОЛЕБАНИЙ В РАССЕЙНИЕ ФОНОНОВ

Существующая «крестовая» техника [13] используется обычно для изучения процессов рассеяния зонных квазичастиц на хаотически расположенных примесях. Она должна быть видоизменена в нашем случае, допускающем локализованные состояния. Рассмотрим уравнение для запаздывающей функции Грина

$$(H - i\omega\Gamma^{nat} + U(\mathbf{r}) - \omega^2) D(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1)$$

где матрица

$$H_{ij} = \omega_0^2 \delta_{ij} + \mu_{ijlm} \frac{\partial^2}{\partial x_l \partial x_m}$$

описывает длинноволновое разложение динамической матрицы вблизи экстремума ветви, собственное

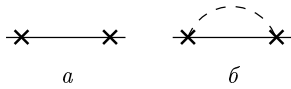


Рис. 1. Диаграммы второго порядка. Сплошными линиями изображены гриновские функции оптического фонона, крестами — взаимодействие с дефектом, штрихами показана передача импульса, и по переданному импульсу проводится интегрирование в последующей гриновской функции

затухание Γ^{nat} учитывает взаимодействие фононов друг с другом и возмущение

$$U_{ij}(\mathbf{r}) = \sum_n u_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \quad (2)$$

представляет взаимодействие с дефектами, расположенными в точках \mathbf{r}_n . Для линейных дефектов вектор $\mathbf{r} - \mathbf{r}_n$ есть двумерный вектор в плоскости, перпендикулярной оси дефекта. Индекс j учитывает возможное вырождение фононных ветви, которое может быть существенно для рамановских фононов в центре зоны Бриллюэна.

Будем разлагать решение уравнения (1) по степеням возмущения U , которое запишем в компонентах Фурье

$$U_{ij}(\mathbf{r}) = \sum_{n,q} u_{ij}(\mathbf{q}) \exp [i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)], \quad (3)$$

и на каждом этапе усреднять, т. е. интегрировать получившееся выражение,

$$\frac{1}{V} \int d\mathbf{r}_n \dots,$$

по расположению дефектов. Функция Грина нулевого приближения зависит от разности координат, и ее компонента Фурье имеет вид

$$D_{ij}^0(k, \omega) = \delta_{ij}(\omega_0^2 - s^2k^2 - i\omega\Gamma^{nat} - \omega^2)^{-1}, \quad (4)$$

где для простоты записи мы пренебрегли зависимостью дисперсионного параметра от направления.

Поправка первого порядка равна $-cD_0(k, \omega)u_0D_0(k, \omega)$, где $u_0 = u(q = 0)$ и c — концентрация дефектов; для случая двумерных дефектов она рассчитывается на единичную поверхность, перпендикулярную оси дефектов. Мы сохранили здесь последовательность функций D и u , поскольку они являются матрицами. Однако в последующих промежуточных выкладках мы не будем за этим следить.

Во втором порядке имеется, во-первых, вклад $c^2u_0^2D^3(k, \omega)$ (рис. 1а), который получается, если в обеих суммах по дефектам взять члены,

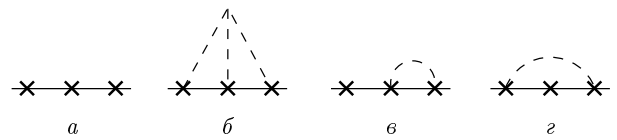


Рис. 2. Диаграммы третьего порядка по взаимодействию с дефектом. Три соединенные штриховые линии означают сохранение суммарного импульса

отвечающие разным дефектам, и, во-вторых, вклад от одного и того же дефекта (рис. 1б): $cu_0^2D_0^2(k, \omega) \sum_q D_0(q, \omega)$. Мы считаем при этом, что количество дефектов велико по сравнению с единицей. Кроме того, как уже отмечалось во Введении, при интегрировании по q существенны малые $q \sim \sqrt{\Gamma^{nat}/\omega_0}/a$. Поэтому при вычислении второго вклада,

$$\sum_q |u(\mathbf{k} - \mathbf{q})|^2 D_0(q, \omega) = u_0^2 \sum_q D_0(q, \omega),$$

из-под знака интеграла вынесен фактор $|u(\mathbf{k} - \mathbf{q})|^2$ при значении аргумента, равном нулю, а оставшийся логарифмический интеграл может быть обрезан на больших q , порядка обратного радиуса дефекта. Заметим, что результат, т. е. поправка к гриновской функции, нас интересует при еще меньших значениях $k \ll \sqrt{\Gamma^{nat}/\omega_0}/a$, а именно, для $k \sim 10^{-3}/a$, соответствующих оптическому диапазону, поскольку именно в этой области изучается на эксперименте рамановское рассеяние света.

Простое вычисление дает для появившегося интеграла следующий результат:

$$\begin{aligned} \sum_q D_0(q, \omega) &= -\frac{1}{4\pi s^2} \times \\ &\times \left[\frac{1}{2} \ln \frac{s^4/r_0^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + (\omega\Gamma^{nat})^2} - \right. \\ &\left. - i \left(\frac{\pi}{2} \text{sign}(\omega) - \arctg \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{\omega\Gamma^{nat}} \right) \right]. \quad (5) \end{aligned}$$

Отметим, что оба вклада (а и б на рис. 1) могут быть одного порядка, несмотря на то что при малой концентрации c первый содержит лишнюю степень c . Дело в том, что при $\omega \rightarrow \omega_0$ он имеет полюсный характер, тогда как второй всего лишь логарифмически велик.

В третьем порядке появляются четыре типа слагаемых. Вклад

$$-c^3u_0^3D^4(k, \omega),$$

показанный на рис. 2а, получается, если во всех суммах по дефектам взять члены, отвечающие разным

дефектам. Вклад от одного и того же дефекта изображен на рис. 2б:

$$-cu_0^3 D_0^2(k, \omega) \left(\sum_q D_0(q, \omega) \right)^2.$$

Вклад «смешанного» типа (рис. 2в) имеет вид

$$-2c^2 u_0^3 D_0^3(k, \omega) \sum_q D_0(q, \omega),$$

где коэффициент 2 учитывает число диаграмм такого типа, а «перекрестное» слагаемое (рис. 2г) —

$$-c^2 u_0^3 D_0^2(k, \omega) \sum_q D_0^2(q, \omega).$$

Последние два члена одного порядка по концентрации c , однако интеграл в перекрестном слагаемом, как можно увидеть, дает полюсный множитель типа $D_0(k, \omega)$ и по количеству полюсов оба члена сравниваются, тогда как в смешанном слагаемом имеется дополнительный большой логарифм $\ln(\omega_0/\Gamma^{nat})$, появившийся из-за интегрирования по q . По этой причине мы опустим перекрестное слагаемое.

В четвертом порядке по взаимодействию имеются члены разного порядка по концентрации: четвертого,

$$c^4 u_0^4 D^5(k, \omega),$$

первого,

$$cu_0^4 D_0^2(k, \omega) \left(\sum_q D_0(q, \omega) \right)^3,$$

несколько диаграмм порядка c^3 , среди которых большой логарифм содержит только вклад смешанного типа,

$$3c^3 u_0^4 D_0^4(k, \omega) \sum_q D_0(q, \omega),$$

и, наконец, диаграммы порядка c^2 :

$$c^2 u_0^4 D_0^3(k, \omega) \left(\sum_q D_0(q, \omega) \right)^2,$$

$$c^2 u_0^4 D_0^3(k, \omega) \sum_q D_0^2(q, \omega),$$

содержащие квадрат большого логарифма.

Аналогичным образом могут быть рассмотрены и следующие порядки по взаимодействию дефектов. При этом в каждом порядке по концентрации перекрестные слагаемые оказываются малыми в меру

указанного большого логарифма. Остающиеся члены с учетом коэффициентов типа 2 в диаграмме на рис. 2в сворачиваются в геометрическую прогрессию. Ее суммирование дает для фурье-компоненты усредненной гриновской функции следующий результат:

$$\begin{aligned} D(k, \omega) &= D_0(k, \omega) + cD_0^2(k, \omega) \times \\ &\times \sum_{n=0}^{\infty} (-u_0)^{n+1} \left(cD_0(k, \omega) + \sum_q D_0(q, \omega) \right)^n = \\ &= \left(\frac{1}{D_0(k, \omega)} + \frac{cu_0}{\left(1 + u_0 \sum_q D_0(q, \omega)\right)} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (6)$$

Выражение типа (6) получалось ранее в работе [14] для случая рассеяния на точечных изотопических дефектах путем замыкания уравнения для матрицы рассеяния. Отличие в данном случае заключается в том, что мы рассматриваем, во-первых, двумерные дефекты, а во-вторых, принимаем во внимание естественное затухание фононов. Это позволяет оценивать порядок опущенных диаграмм (по $\ln(\omega_0/\Gamma^{nat})$), а также рассматривать взаимодействие локализованных и делокализованных состояний.

3. ОПТИЧЕСКАЯ МОДА И ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В РЕЖИМЕ СЛАБОЙ СВЯЗИ

При малом потенциале дефекта u_0 у гриновской функции (6) имеются две очевидные особенности. Одна — вблизи полюса $D_0(k, \omega)$ — соответствует зонным состояниям кристалла с дефектами, вторая — вблизи нуля выражения $1 + u_0 \sum_q D_0(q, \omega)$ — возникает при $u_0 > 0$ и описывает состояния, локализованные на дефектах. При достаточно сильном потенциале u_0 расстояние по частоте между этими состояниями велико по сравнению с их шириной и соответствующие вклады можно разделить.

3.1. Влияние дефектов на сдвиг и затухание оптической моды

Присутствие дефектов приводит к сдвигу и дополнительному затуханию оптической моды. Вблизи полюса D_0 медленно меняющуюся вещественную часть выражения $1 + u_0 \sum_q D_0(q, \omega)$ (см. (5)) можно брать при $\omega = \omega_0$, и гриновская функция (6) приобретает вид

$$D(k, \omega) = (\Omega^2 - s^2 k^2 - i\omega\Gamma - \omega^2)^{-1}, \quad (7)$$

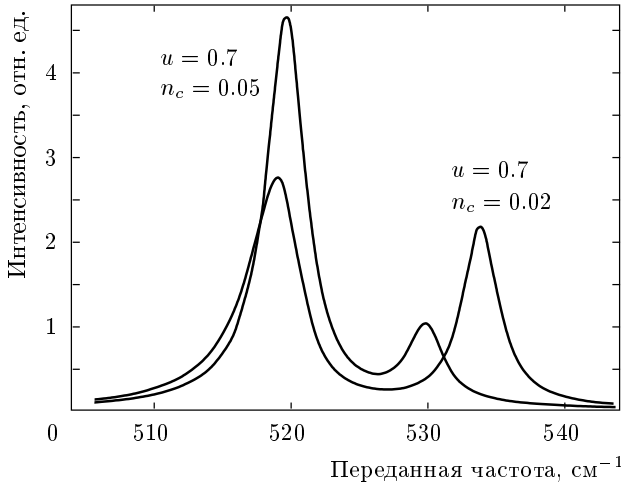


Рис. 3. Зависимость от переданной частоты ω мнимой части усредненной по дефектам гриновской функции фононов. Кривые построены с помощью формулы (6) для разной концентрации дефектов при одной и той же величине взаимодействия фононов с дефектом. Исходные параметры — центр линии 520 см^{-1} и естественная ширина 3.2 см^{-1} — соответствуют чистому кремнию. Предполагается, что эта линия отвечает максимуму ветви оптических фононов в центре зоны Бриллюэна. Пики на рисунке при больших переданных частотах изображают локализованное состояние

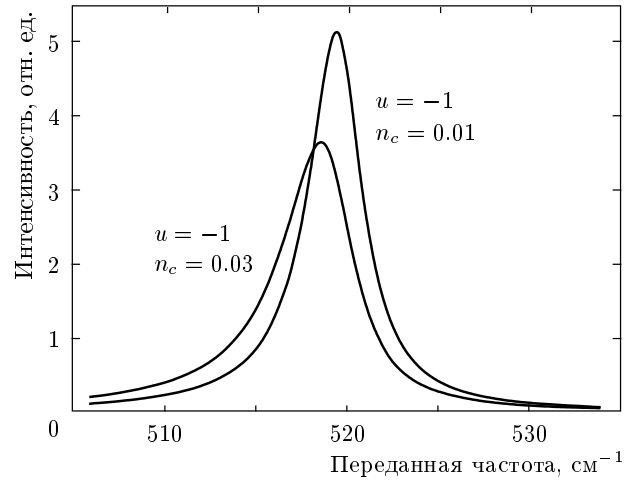


Рис. 4. Частотная зависимость мнимой части гриновской функции в случае, исключающем возможность существования локализованного состояния ($u < 0$)

причем новые значения границы ветви Ω и затухания Γ определяются формулами

$$\Omega^2 = \omega_0^2 + \frac{n_c u \omega_0^2}{1 - u \ln(s^2/r_0^2 \omega_0 \Gamma^{nat})}, \quad (8)$$

$$\Gamma = \Gamma^{nat} + \left(\frac{\pi}{2} - \arctg \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{\omega_0 \Gamma^{nat}} \right) \times \frac{n_c u^2 \omega_0}{[1 - u \ln(s^2/r_0^2 \omega_0 \Gamma^{nat})]^2}, \quad (9)$$

где введены безразмерная константа связи с дефектом, $u = u_0/4\pi s^2$, и число дефектов $n_c = 4\pi c s^2/\omega_0^2$ в области с размером s/ω_0 порядка радиуса дефекта r_0 . Заметим, что в условиях применимости написанных выше формул, а именно, вдали от частоты локализованного уровня, знаменатели в (8) и (9) в нуль не обращаются.

Из выражений (8) и (9) видно, что граница ветви и затухание изменяются на величину порядка Γ^{nat} (масштаб, наблюдаемый в эксперименте), если концентрация дефектов составляет $n_c \sim \Gamma^{nat}/\omega_0$. При малых u линейное по u слагаемое представляет собой влияние среднего поля дефектов на сдвиг

фононных частот, а квадратичное слагаемое описывает неоднородные сдвиг и уширение моды вследствие рассеяния фононов на флуктуациях дефектов. В виде разложения по u они были получены ранее [15] обычной диаграммной техникой и наблюдались в эксперименте по рамановскому рассеянию света вблизи гетеропереходов [12]. Флуктуационный вклад в затухание является быстроменяющейся функцией частотной переменной ω вблизи ω_0 на интервале порядка Γ^{nat} ; множитель в круглых скобках в (9) изменяется при этом от π до нуля. Таким образом проявляется особенность в плотности состояний фононов вблизи границы (максимума) непрерывного спектра: фононы могут рассеиваться на дефектах лишь при $\omega^2 < \omega_0^2$ (в пределе $\Gamma^{nat} \rightarrow 0$). В эксперименте влияние дефектов может быть обнаружено по увеличению ширины линии рамановского рассеяния и, как мы видим, по возникновению асимметрии спектра. В случае, например, максимума фононной ветви более пологим оказывается низкочастотное крыло линии. Эту асимметрию можно заметить на кривых (рис. 3 и 4), которые построены с помощью точного выражения (6). Для линий, соответствующих минимуму ветви, асимметрия будет обратной. В случае $u > 0$ с увеличением величины взаимодействия зависимости (8) и (9) имеют резонансный характер при $u \simeq 1/\ln(s^2/r_0^2 \omega_0 \Gamma^{nat})$, а на больших u сдвиг и затухание от взаимодействия не зависят. Получившаяся резонансная зависимость отражает возможность существования локализованных состояний.

3.2. Локализованные состояния вблизи границы оптической моды

При $u_0 > 0$ вблизи границы непрерывного спектра возникает локализованное состояние на одной примеси. Оно определяется уравнением

$$\operatorname{Re} \left(1 + u_0 \sum_q D_0(q, \omega) \right) = 0, \quad (10)$$

решение которого с учетом (5) можно записать в форме

$$\omega_l^2 = \omega_0^2 \pm \left[(s/r_0)^4 e^{-2/u} - (\omega_0 \Gamma^{nat})^2 \right]^{1/2}. \quad (11)$$

Верхний знак в этой формуле соответствует локализованному состоянию. Для нижнего знака частота лежит в области непрерывного спектра: в формуле (5) даже в пределе $\Gamma^{nat} \rightarrow 0$ присутствует конечная мнимая часть $i\pi/2$, и такое состояние в действительности является квазилокальным.

Если по-прежнему считать взаимодействие u настолько сильным, что расстояние между границей непрерывного спектра ω_0 и частотой ω_l велико по сравнению с затуханием, то вклад локализованного состояния в гриновскую функцию можно представить в виде

$$D(k, \omega) = -n_c i \omega_0^2 (\omega_0^2 - \omega_l^2)^{-2} \left[1 + u_0 \sum_q D_0(q, \omega) + n_c i \omega_0^2 (\omega_0^2 - \omega_l^2 - i \omega \Gamma^{nat})^{-1} \right]^{-1}. \quad (12)$$

Сравнивая (12) с (7), видим, что вклад локализованных состояний пропорционален, как и должно быть, концентрации дефектов. Концентрация дефектов стоит и в знаменателе последнего выражения, что приводит к сдвигу и затуханию локализованного состояния — таков эффект взаимодействия с непрерывным спектром. Разложив знаменатель по степеням $\omega^2 - \omega_l^2$, находим соответствующие поправки:

$$\Omega_l^2 = \omega_l^2 + n_c \omega_0^2, \quad (13)$$

$$\Gamma_l = \Gamma^{nat} + n_c \omega_0^2 \Gamma^{nat} / (\omega_l^2 - \omega_0^2). \quad (14)$$

Любопытно, что потенциал взаимодействия с дефектом входит сюда только посредством ω_l (см. (11)).

Заметим, что для квазилокального состояния частота $\omega^2 < \omega_0^2$ и мнимая часть в (5) близка к π .

Тогда в правой части выражения (14) первым слагаемым вместо Γ^{nat} стоит $2\pi|\omega_0 - \omega_l|$, т.е. величина, большая по сравнению с интервалом между квазилокальным колебанием и границей непрерывного спектра. Это означает, что ширина квазилокальных колебаний фактически сравнима с расстоянием до границы непрерывного спектра.

4. РЕЗОНАНСНАЯ СВЯЗЬ ОПТИЧЕСКОЙ МОДЫ С ЛОКАЛИЗОВАННЫМИ СОСТОЯНИЯМИ

Малые знаменатели в формулах (8), (9) и (14) являются отражением резонансного взаимодействия зонных и локализованных состояний. В случае, когда расстояние по частоте между этими состояниями мало, но велико по сравнению с затуханием, можно проанализировать их взаимодействие, если разложить в общей формуле (6) логарифм (5) по степеням $\omega^2 - \omega_l^2$, ограничиваясь членом первого порядка. Мы находим, что полюсы гриновской функции (6) связаны с нулями выражения

$$D_0^{-1}(k=0, \omega) \left(1 + u_0 \sum_q D_0(q, \omega) \right) + c u_0 \propto (\omega^2 - \omega_l^2)(\omega_0^2 - \omega^2) + n_c \omega_0^2 (\omega_l^2 - \omega_0^2) - i(\omega^2 - \omega_0^2) \omega \Gamma(\omega), \quad (15)$$

где ω_l — по-прежнему определяется выражением (11). Значения частоты

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{\omega_0^2 + \omega_l^2}{2} \pm \left[\frac{(\omega_0^2 - \omega_l^2)^2}{4} + n_c \omega_0^2 (\omega_l^2 - \omega_0^2) \right]^{1/2}, \quad (16)$$

при которых вещественная часть этого выражения обращается в нуль, дают положения зонных и локализованных состояний при $k=0$ и, соответственно, максимумы рамановского рассеяния. Условием справедливости проведенного выше разложения логарифма является малость второго слагаемого под корнем в (16) по сравнению с первым, и тогда эта формула приводится к виду

$$\omega_1^2 = \omega_l^2 + n_c \omega_0^2, \quad \omega_2^2 = \omega_0^2 - n_c \omega_0^2. \quad (17)$$

Первая формула (17) совпадает с (13), а вторая отличается от (8) в пределе больших u отсутствием логарифма.

Значение мнимой части в (15) существенным образом зависит от частоты. Вблизи значения ω_1 , опи-

сывающего сдвиг локализованных состояний, затухание $\Gamma(\omega_1) = \Gamma^{nat}$. Однако для значения ω_2 , определяющего новую границу исходного непрерывного спектра, $\omega\Gamma(\omega_2) = \pi(\omega_l^2 - \omega_0^2)\text{sign}\omega$.

С помощью выражений (15) и (16) мы находим мнимую часть гриновской функции:

$$\begin{aligned} \text{Im } D(k=0, \omega) &= \\ &= \text{Im} \frac{\omega^2 - \omega_l^2 + i\omega\Gamma^{nat}}{(\omega_1^2 - \omega^2)(\omega^2 - \omega_2^2) - i(\omega^2 - \omega_0^2)\omega\Gamma(\omega)}, \end{aligned} \quad (18)$$

дающую сечение рамановского рассеяния.

В отличие от (7) и (12) выражение (18) описывает одновременно зонные и локализованные состояния при малой концентрации дефектов. Концентрационная зависимость их положения видна из формул (17). Отметим различие в их ширине. В то время как ширина локализованных состояний определяется в основном естественной шириной Γ^{nat} , в ширину зонных состояний рассеяние на дефектах вносит существенный вклад, который оказывается равным $\Gamma = \pi n_c \omega_0$.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 3–5 приведены графики зависимости от переданной частоты ω сечения рамановского рассеяния, а именно мнимой части гриновской функции оптических фононов. Графики построены с помощью точного выражения (6) для известных из эксперимента на кремнии значений частоты $\omega_0 = 320 \text{ см}^{-1}$ в центре зоны Бриллюэна и естественного затухания $\Gamma^{nat} = 3.2 \text{ см}^{-1}$. Изменялись параметры дефектов: безразмерная концентрация n_c ; число дефектов в области с размером порядка радиуса взаимодействия (который в (5) считался равным $r_0 = \pi s/\omega_0$) и безразмерная константа связи u . При $u < 0$ локализованных состояний нет и рост взаимодействия или концентрации приводит к сдвигу и уширению границы непрерывного спектра в соответствии с формулами (8) и (9). При $u > 0$ возникает локализованное состояние за пределами непрерывного спектра (при $\omega^2 > \omega_0^2$) для случая максимума в центре зоны. Для случая минимума оптической ветви в центре зоны Бриллюэна локализованное состояние появляется при $u < 0$ и его частота лежит ниже границы ветви. С ростом взаимодействия локализованное состояние экспоненциально быстро отдаляется от непрерывного спектра в соответствии с (13), тогда как граница непрерывного спектра смещается немонотонно (8).

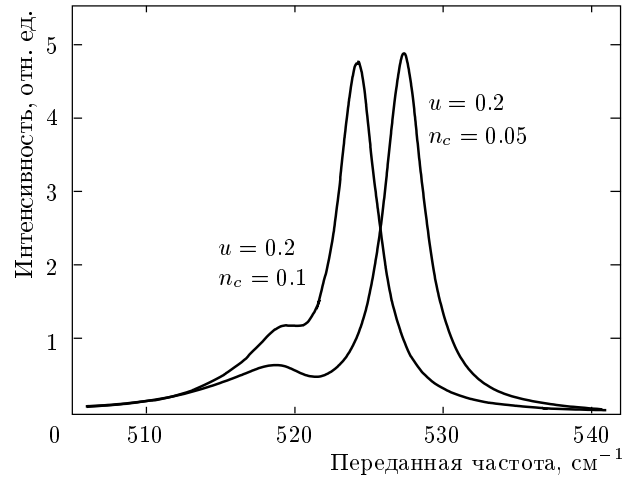


Рис. 5. Частотная зависимость мнимой части гриновской функции при большой концентрации дефектов

Взаимное влияние локализованных состояний и состояний непрерывного спектра на их ширину особенно велико при относительно небольшом расстоянии между ними (см. (9) и (14)). Отметим существенно различный характер зависимости ширины зонного и локализованного состояний от естественного затухания при $\Gamma^{nat} \rightarrow 0$: у зонного состояния остается мало меняющийся при этом вклад за счет рассеяния на дефектах — второе слагаемое в (9), в то время как ширина (14) локализованного состояния исчезает.

На рис. 5 показан рамановский спектр при большой концентрации дефектов, когда зонный вклад едва различим рядом с острым пиком, созданным локализованными состояниями.

В заключение заметим, что здесь рассмотрен случай, предельно малой концентрации дефектов s : в знаменателе выражения (6) просуммированы все поправки, линейные по s . На следующем шаге следует провести согласование, т. е. заменить $D_0(q, \omega)$ на $D(q, \omega)$ под знаком суммы в последнем равенстве в (6). Это так называемое ренормированное приближение исследовано в [16].

Работа была выполнена в значительной части во время пребывания автора в GES, Университет Montpellier-II, Франция. Я признателен Ж. Камаселю (J. Camassel) за сотрудничество и гостеприимство. Я также благодарю С. Мешкова и В. Фатеева за обсуждение работы. Работа была поддержана Российским фондом фундаментальных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **17**, 1017 (1947); I. M. Lifshits, Nuovo Cim. **3** Suppl., 716 (1956).
2. F. J. Dyson, Phys. Rev. **92**, 133 (1953).
3. P. G. Dauber and R. J. Elliott, Proc. Roy. Soc. **273**, 222 (1963).
4. И. М. Лифшиц, УФН **83**, 617 (1964).
5. I. M. Lifshits and A. M. Kosevich, Rep. Progr. Phys. **29**, pt. 1, 217 (1966), перевод в книге И. М. Лифшиц, *Избранные труды, Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987), стр. 142.
6. I. M. Lifshits, S. A. Gredeskul, and L. A. Pastur, J. Stat. Phys. **38**, 37 (1985), перевод в книге И. М. Лифшиц, *Избранные труды, Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987), стр. 177.
7. Ю. М. Каган, Я. А. Иоселевский, ЖЭТФ **45**, 819 (1963).
8. T. R. Kirkpatrick, Phys. Rev. B **31**, 5746 (1985).
9. М. А. Иванов, Ю. Г. Погорелов, ЖЭТФ **72**, 2198 (1977).
10. Х. Бётгер, *Принципы динамической теории решетки*, Мир, Москва (1986), гл. 2,.
11. И. Я. Полищук, А. Л. Бурин, Л. А. Максимов, Письма в ЖЭТФ **51**, 644 (1990).
12. L. A. Falkovsky, J. M. Bluet, and J. Camassel, Phys. Rev. B **55**, R14697 (1997); **57**, 11283 (1998).
13. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Наука, Москва (1963).
14. D. V. Taylor, in *Dynamical Properties of Solids*, Vol. 2, ed. by G. K. Horton and A. A. Maradudin, North-Holland, (1975), p. 285.
15. Л. А. Фальковский, Письма в ЖЭТФ **66**, 817 (1997).
16. Л. А. Фальковский, Письма в ЖЭТФ **71**, 225 (2000).