

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РЕЗОНАНСНЫХ И ВИРТУАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ДЕФЕКТОВ С РЕШЕТКОЙ**

В.С. Виноградов

*Автолокализация электрона в виртуальном состоянии единичной примеси и резонансном состоянии пары различных примесей сопровождается потерей устойчивости решетки. В случае пары одинаковых примесей неустойчивости не возникает. Эти различия определяются симметрией.*

Резонансные состояния (РС) играют большую роль в физике узкозонных полупроводников. Их исследованию посвящено значительное число экспериментальных и теоретических работ [1-5]. До сих пор, однако, нет ясности [2] с какими дефектами связаны РС. Также нет микротехники взаимодействия РС с решеткой. Поэтому представляет интерес исследование новых моделей РС, а также более детальное рассмотрение их взаимодействия с решеткой.

Удобной для анализа моделью является пара центров с притягивающими  $\delta$ -образными потенциалами. При уменьшении расстояния между центрами ( $r_{12}$ ) одно из связанных состояний становится РС [6]. Рассмотрим также виртуальное состояние (ВС) единичного центра.

Такая модель описывается уравнением

$$[-(\hbar^2/2m^*)\Delta + \sum_i v_i(r) + v(r) + v_l]\Psi = E\Psi, \tag{1}$$

$$v_l = (1/2) \int dy \hbar \omega(y) q^*(y) q(y),$$

$$v(r) = \int dy \gamma(y) q(y) \exp(iyr),$$

$$v_i(r) = - (2\pi\hbar^2/a_i m^*) \delta(r - r_i) f(r - r_i), \quad f(r) = 1 + r \nabla.$$

Здесь  $v_l$  — потенциальная энергия фононов (кинетической пренебрегаем);  $v(r)$  — электрон-фононное взаимодействие;  $v_i(r)$  — потенциал  $i$ -той примеси; оператор  $f(r)$  уничтожает особенность  $\propto r^{-1}$  в волновой функции (ВФ);  $a_i$  связана с энергией ионизации изолированного центра:  $E_{oi} = \hbar^2 a_i^2 / 2m^*$ ; для ВС  $a_i < 0$ .

Чтобы решить задачу, надо выразить  $E$  через  $q(y)$  и найти минимум. Для этого подействуем на (1) оператором  $\hat{L}^{-1}$ , где  $\hat{L} = -(\hbar^2/2m^*)\Delta - \epsilon$  ( $\epsilon = E - v_l = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ ). Получим интегральное уравнение для  $\Psi(r)$ , в которое также входит  $\Psi_0(r)$  — решение уравнения  $\hat{L}\Psi_0(r) = 0$ . Положим  $\Psi_0(r) = 0$ , что отвечает условию существования связанного и РС. Проведя итерации в интегральном уравнении, выразим  $\Psi(r)$  через  $v(r)$ , функции Грина и  $x_i = [f(r - r_i)\Psi(r)]|_{r=r_i}$ . Применяя далее операцию  $[f...]|_{r=r_i}$ , получим систему линейных уравнений для  $x_i$ . Для случая  $k^2 < 0$  ( $k = ia$ ) она имеет вид

$$[1 - a/a_i + \gamma_{ii}/a_i]x_i + \sum_{k \neq i} [e(ik) + \gamma_{ik}]x_k/a_k = 0, \tag{2}$$

$$\gamma_{ik} = -\mu \int dr_1 e(i1)v(1)e(1k) + \mu^2 \int dr_1 dr_2 e(i1)v(1)e(12)v(2)e(2k) + \dots,$$

где  $\mu = (m^*/2\pi\hbar^2)$ ,  $e(ik) = \exp(-ar_{ik})/r_{ik}$ ,  $v(i) = v(r_i)$ .

Уравнение для случая  $k^2 > 0$  получим из (2), опустив член  $a/a_i$  и сделав замену  $e(ik) \rightarrow C(ik) = \cos(kr_{ik})/r_{ik}$ . Далее в расчетах используем условия

$$|k|r_{12} \ll 1, \tag{3}$$

$$\Gamma_{12} \sim \Gamma_0, \quad (4)$$

где  $\Gamma_0$  — постоянная решетки. Из равенства нулю детерминанта системы (2) и условий (3),  $k^2 > 0$  и  $\gamma_{ik} = 0$ , найдем энергию пустого РС:  $E_\Gamma = \hbar^2 k_\Gamma^2 / 2m^*$ , где  $k_\Gamma^2 = 2(1 - \sqrt{a_1 a_2} \Gamma_{12}) / \Gamma_{12}^2$ .

Рассмотрим случай различных центров ( $a_1 \neq a_2$ ,  $|a_1 - a_2| \sim a_1 a_2$ ). Из (2), учитывая (3) получим

$$E = E_\Gamma + \int dy \chi(y, k^2) q(y) + v_I \quad (k^2 > 0), \quad (5)$$

$$E = -\epsilon_3 a^2 / a_3^2 + v_I \quad (k^2 = -a^2 < 0), \quad (6)$$

где  $a = -\Phi(a, q) \equiv (a_3 / \epsilon_3) [\int dy \chi(y, k^2) q(y) + E_\Gamma]$  ( $a \geq 0$ ),

$$a_3 = (\sqrt{a_1} - \sqrt{a_2})^2, \quad \epsilon_3 = \hbar^2 a_3^2 / 2m^*, \quad \chi(y, k^2) = \gamma(y) \varphi(y, k^2), \quad (7)$$

$$\varphi(y, k^2) = (1/4\pi r_{12}^2) \int dr [F(1)/\sqrt{a_1} - F(2)/\sqrt{a_2}]^2 \exp(iyr).$$

Здесь  $F(i) = C(i)$  при  $k^2 > 0$  и  $F(i) = e(i)$  при  $k^2 < 0$ .

При выводе (6), (7) в  $\gamma_{ik}$  опущены слагаемые  $\propto v^n$  ( $n > 1$ ), что можно сделать для взаимодействия с акустическими фононами, если справедливы (3), (4). При этих же условиях можно пренебречь зависимостью  $\chi(y, k^2)$  от  $q(y)$  через  $k^2$  при варьировании.

В случае  $k^2 > 0$  из условия  $\delta E = 0$  получим равновесные значения координаты, полной и решеточной энергий ( $E_{\min}$ ,  $E_{I\min}$ ), а также  $\epsilon_{\min}$ :

$$q_0(y) = -\chi^*(y, k^2) / \hbar \omega(y), \quad E_{\min} = E_\Gamma - (1/2)S, \quad E_{I\min} = (1/2)S, \quad \epsilon_{\min} = E_\Gamma - S, \quad (8)$$

где  $S = \int dy |\chi(y, k^2)|^2 / \hbar \omega(y)$ . Учитывая (3), (4) получим  $S \approx (\pi E_1^2 / 16 \rho v_{\parallel}^2 r_0) a_3^2$ , где  $E_1$  — потенциал деформации,  $\rho$  — плотность,  $v_{\parallel}$  — скорость продольного звука.

В случае  $k^2 < 0$  из условия  $\delta E = 0$  найдем  $q_0(y) = (2/a_3) \Phi \chi^*(y, k^2) / \hbar \omega(y)$ . Подставив  $q_0$  в  $\Phi$ , найдем  $\Phi$ , и из уравнения  $a = -\Phi(a, q)$  получим уравнение для определения  $a = a_0$  в экстремуме

$$a = (a_3 / \epsilon_3) E_\Gamma / [K(a) - 1], \quad (9)$$

где  $K(a) = (2/\epsilon_3) S$ .

Представив  $E$  в виде разложения по отклонениям  $\delta q = \eta q_0(y)$  от  $q_0$ , получим

$$E = \gamma_0 + \gamma_2 (\eta - 1)^2, \quad (10)$$

где  $\gamma_0 = (E_\Gamma^2 / \epsilon_3) / (K_0 - 1)$ ;  $\gamma_2 = (E_\Gamma^2 / \epsilon_3) K_0 / (1 - K_0)$ ;  $K_0 = K(a_0)$ . Из условия  $a \geq 0$  следует  $\eta \geq (K_0 - 1) K_0$ .

Из (9) видно, что при  $a_0 > 0$ ,  $K_0 > 1$  и  $\gamma_2 < 0$ , т.е. при локализации электрона теряется устойчивость решетки. Можно показать, что мода  $\delta q \sim q_0$  наименее устойчива. Члены  $v^n$  ( $n > 1$ ) в  $\gamma_{ik}$  только увеличивают неустойчивость, и для ее восстановления надо учесть в (10) решеточную ангармоничность  $\kappa \eta^4$ . При этом возникают следующие возможности. При  $(4/27) \eta_k^2 \ll 1$ , где  $\eta_k^2 = |\gamma_2| / 2\kappa$ ,  $E(\eta)$  не имеет экстремумов в области  $\eta \geq (K_0 - 1) / K_0$ . При  $(4/27) \eta_k^2 \gg 1$  имеется максимум ( $\eta_{\max} = 1$ ,  $E_{\max} = \gamma_0 + \kappa$ ) и минимум ( $\eta_{\min} = \eta_k - 1/2$ ,  $E_{\min} = \gamma_0 - (1/2) \eta_k (1 + 4/\eta_k)$ )\*. Используя (7), (3), (4) получим  $K(a) \approx K(0) [1 - (\pi/2)(a/r_0)]$ ,  $K(0) \approx (\pi/4) (E_1^2 m^* / \rho v_{\parallel}^2 \hbar^2 r_0) \approx K_0$ ; для PbTe  $K_0 \approx 1,2$ .

\* Если  $E_\Gamma = 0$  и  $K_0 = 1$ , то при  $\kappa = 0$  возникает безразличное равновесие, при  $\kappa \neq 0$  — состояние с  $q = 0$ ,  $a = 0$ , т.е. энергия РС из-за взаимодействия не меняется. Этот случай интересен в связи с результатами [7].

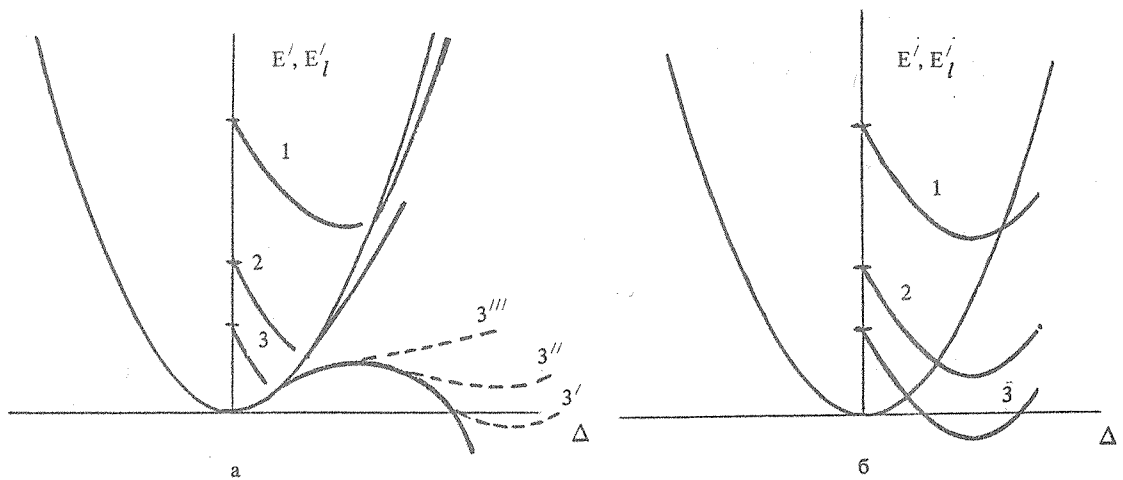


Рис. 1. Конфигурационная схема для РС пары различных примесей (а) для двух одинаковых примесей (б). Номера кривых и число штрихов возрастают, соответственно, с увеличением взаимодействия ( $S$ ) и ангармоничности ( $\kappa$ ).

Результаты для ВС в случае  $k^2 < 0$  получаются из предыдущих, если положить  $a_3 = |a_0|$ ,  $\epsilon_3 = E_T = \hbar^2 |a_0|^2 / 2m^*$ ; предполагается  $|a_0| r_0 \ll 1$ .

Для двух одинаковых центров ( $a_1 = a_2$ ) выражение для  $E$  имеет вид (5) в обоих случаях  $k^2 > 0$  и  $k^2 < 0$ , а характеристики в минимуме — вид (8), где теперь  $S_{ak} \approx \pi E_1^2 / 12 \rho v_{||}^2 r_0^3$ ,  $S_{опт} \approx e^2 / \epsilon^* r_0$ ,  $1/\epsilon^* = 1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_0$  ( $S \geq E_T$ ). Неустойчивости решетки не возникает.

Полученные результаты изображены с помощью конфигурационных кривых  $E'(\Delta)$ ,  $E'_I(\Delta)$  на рис. 1, где  $q(y) = -\Delta\chi(y, k^2) / \hbar\omega(y)$ ,  $E' = E/S$ ,  $E'_I = E'_I/S = (1/2)\Delta^2$ . Различие в характере кривых на рис. 1а и 1б объясняется симметрией. В первом случае ВФ дна зоны и РС (ВС) имеют общие элементы симметрии (они не ортогональны), во втором их нет (они ортогональны).

В случае  $a_1 \neq a_2$  локализованное состояние обладает дипольным моментом ( $p \approx (1/4\pi)\epsilon r_{12}$  при  $a_1 \gg \gg a_2$  или  $a_1 \ll a_2$ ). В случаях  $a_1 = a_2$  и ВС  $p = 0$ .

Вывод о существовании двух типов примесной автолокализации основан на соображениях симметрии и может быть распространен на более сложные системы, чем рассмотренная в статье.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Кайданов В. И., Равич Ю. И. УФН, 145, 51 (1985).
2. Lisehka K. Phys. Stat. Sol. (b), 133, 17 (1986).
3. Волков Б. А., Панкратов О. А. ДАН СССР, 255, 93 (1980).
4. Каган Ю., Кикоин К. А. Письма в ЖЭТФ, 31, 367 (1980).
5. Драбкин И. А., Мойжес Б. Д. ФТП, 15, 625 (1981).
6. Виноградов В. С. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 3, 3 (1986).
7. Ицкевич Е. С. и др. Письма в ЖЭТФ, 43, 303 (1986).

Поступила в редакцию 13 мая 1986 г.  
После переработки 7 июля 1986 г.