

Александр ШЕЛКАН, Григорий ЗАВТ

ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА КРИСТАЛЛА НА БАРЬЕР АВТОЛОКАЛИЗАЦИИ КВАЗИЧАСТИЦ

(Представил Ч. Луцик)

Рассмотрены самосогласованные состояния электрона, сопровождаемые деформацией решетки, в анизотропном кристалле. В континуальном приближении численными методами найдена зависимость высоты барьера между свободными и автолокализованными состояниями, а также радиусов барьерного состояния от параметров анизотропии электронного и фононного спектров. В некоторых предельных случаях квазиодномерного и квазидвухмерного спектров получены аналитические решения.

В системах с электрон-фононным взаимодействием деформационного типа может возникать автолокализованное состояние электрона (экситона), в общем случае отделенное от свободных состояний автолокализационным барьером (АБ, см. обзоры [1, 2]). Теория АБ наиболее подробно развита для изотропных систем [2]. В связи со значительным интересом, проявленным в последнее время к анизотропным системам [3], и учитывая роль автолокализации в целом ряде явлений (например, дефектообразование) [1], представляет интерес рассмотреть влияние анизотропии решетки на высоту и другие свойства АБ. Кратко этот вопрос обсуждается в [2], где показано, что высота барьера в случае анизотропного тензора эффективных масс экситона $E \sim \sim (m_1 m_2 m_3)^{-1}$, т. е. барьер исчезает в одно- и двухмерном случаях. При этом, однако, фононный спектр и экситон-фононное взаимодействие остаются изотропными.

В данной работе, основываясь на варианте метода адиабатической теории АБ, развитом в [4], рассмотрена роль анизотропии всех членов гамильтониана. Для простоты рассматриваются системы с симметрией не ниже ромбоэдрической (т. е. с диагональными тензорами эффективных масс и упругих постоянных). Для упрощения оператора электрон-фононного взаимодействия (имеющего в анизотропных системах сложную форму, см. напр. [5]) предполагается, что автолокализация сопровождается смещением частиц только вдоль одной оси (обозначаемой z). Кроме того, считается, что, во-первых, энергия деформации решетки при конфигурациях ядер, отвечающих АБ, существенно превышает среднюю энергию акустических фононов, и, во-вторых, радиус барьерного состояния гораздо больше постоянной решетки. Эти допущения позволяют использовать адиабатическое приближение и рассматривать задачу в континуальном пределе.

В указанных приближениях энергетический функционал имеет вид [4]:

$$E = E_e + E_p + V,$$

$$E_e = - \int d^3r C(r) \left[J_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + J_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + J_3 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] C(r),$$

$$E_p = \int d^3r \left[\beta_1 \left(\frac{\partial u(r)}{\partial x} \right)^2 + \beta_2 \left(\frac{\partial u(r)}{\partial y} \right)^2 + \beta_3 \left(\frac{\partial u(r)}{\partial z} \right)^2 \right], \quad (1)$$

$$V = - \int d^3r \left[\lambda \frac{\partial u(r)}{\partial z} C^2(r) \right].$$

Здесь \bar{E}_e — кинетическая энергия электрона, \bar{E}_p — упругая энергия решетки, V — энергия электрон-фононного взаимодействия, $u(r)$ — компонента смещения атомов.

В рамках описанной выше модели существует самосогласованное состояние, отвечающее барьеру и представляющее собой седловую точку функционала (1).

При нахождении этой точки функционал (1) варьируется сначала по $u(r)$, а затем выбирается волновая функция

$$C(r) = \left(\frac{8}{\pi^3}\right)^{1/4} (R_1 R_2 R_3)^{-1/2} \exp\left\{-\frac{x^2}{R_1^2} - \frac{y^2}{R_2^2} - \frac{z^2}{R_3^2}\right\}, \quad (2)$$

где R_i рассматриваются как вариационные параметры, имеющие смысл радиусов состояний электрона.

Функционал энергии приобретает вид:

$$E = \sum_{i=1}^3 \frac{J_i}{R_i^2} - \frac{\lambda^2}{4} \pi f(R_1, R_2, R_3), \quad (3)$$

где

$$f(R_1, R_2, R_3) = \int_0^{\infty} dt t^2 [(\beta_1 + R_1^2 t^2)(\beta_2 + R_2^2 t^2)(\beta_3 + R_3^2 t^2)^3]^{-1/2}. \quad (4)$$

Для уменьшения количества свободных параметров мы несколько упростим рассматриваемую задачу. Будем считать систему изотропной в плоскости (x, y) , т. е. положим:

$$R_1 = R_2 = R; \quad J_1 = J_2 = J; \quad \beta_1 = \beta_2 = \beta. \quad (5)$$

Параметры β совпадают с модулями упругости [6]

$$\beta = \lambda_{zxzx}; \quad \beta_3 = \lambda_{zzzz}. \quad (6)$$

При этом условие упругой изотропии имеет вид

$$\lambda_{zzzz} - \lambda_{zzxx} - 2\lambda_{zxzx} = 0. \quad (7)$$

Кроме того, в приближении центральных сил $\lambda_{zxzx} = \lambda_{zzxx}$, т. е. условие (7) в обозначениях (6) приобретает вид $\beta_3 = 3\beta$. Для электронного спектра условие изотропности имеет очевидный вид $J_3 = J$, т. е. нарушение условий изотропности удобно характеризовать отклонением от единицы параметров

$$\gamma = \frac{J}{J_3}, \quad \alpha = \frac{3\beta}{\beta_3}. \quad (8)$$

В обозначениях (8) выражение для энергии принимает вид

$$E = J_3 \left[\frac{2\gamma}{R^2} + \frac{1}{R_3^2} - \frac{\lambda^2 \pi}{4J_3 \beta_3} \int dx \frac{x^2}{\left(\frac{\alpha}{3} \frac{R_3^2}{R^2} + x^2\right)(1+x^2)^{3/2}} \right]. \quad (9)$$

Перейдем к новым вариационным параметрам:

$$R^2 = d \sin \theta, \quad R_3^2 = d \cos \theta.$$

В силу положительной определенности R_i угловые переменные задаются в первом квадранте.

После вариации по d функционал энергии принимает вид:

$$E = \frac{64}{27} J^3 \beta^2 \lambda^{-4} \operatorname{ctg} \theta \frac{(2\gamma + \operatorname{tg} \theta)^3}{\left[\int dx \frac{x^2}{(\alpha \operatorname{ctg} \theta + x^2)(1+x^2)^{3/2}} \right]^2}. \quad (10)$$

Теперь остается найти минимум по θ — что и будет минимальной высотой барьера. Эта задача решается численными методами.

Из (2) видно, что результат, кроме α и γ , зависит также от J_3 , β_3 и λ . Мы интересуемся, как анизотропия электронного и фононного спектра влияет на высоту барьера. Поэтому будем искать отношение высот в анизотропном и изотропном случаях E/E_0 . В качестве масштабирующих параметров удобно выбрать

$$J^{\text{из}} = J_3^{\text{из}} = \frac{2J + J_3}{3}, \quad (11)$$

$$\beta^{\text{из}} = \beta_3^{\text{из}} = \frac{6\beta + \beta_3}{3},$$

$$\lambda^{\text{из}} = \lambda.$$

Тогда отношение E/E_0 зависит только от α и γ , т. е. от параметров анизотропии. Аналогично вводим величины R/R_0 и R_3/R_0 .

Результаты численных расчетов представлены на рис. 1—6 в виде зависимостей E/E_0 , k/k_0 и k_3/k_0 от параметров анизотропии. Здесь для удобства введена величина $k=1/R$, имеющая смысл обратного радиуса состояния электрона.

Видно (рис. 1 и 2), что максимальная высота АБ достигается при $\gamma \sim 1$ и $\alpha \sim 0,1$. В случае квазиодномерного ($\gamma \ll 1$) электронного спектра барьер исчезает медленнее, чем в квазидвухмерном ($\gamma \gg 1$) пределе. Одномерность фононного спектра ($\alpha \ll 1$) влияет на высоту АБ слабо, а при больших γ не влияет вообще.

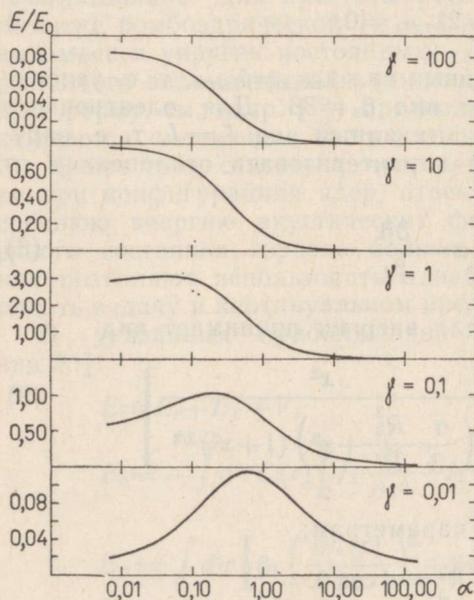


Рис. 1. Зависимость E/E_0 от α при различных значениях γ .

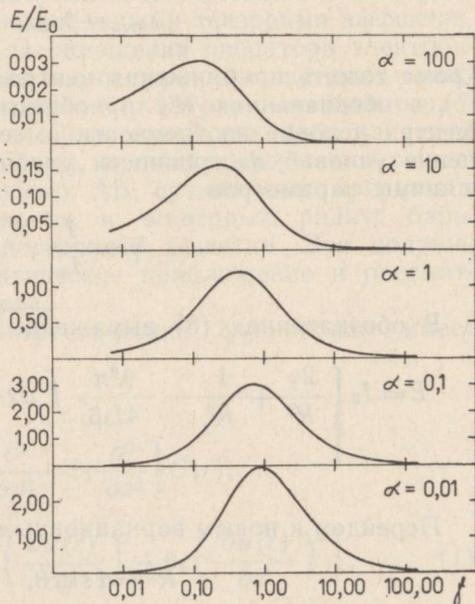


Рис. 2. Зависимость E/E_0 от γ при различных значениях α .

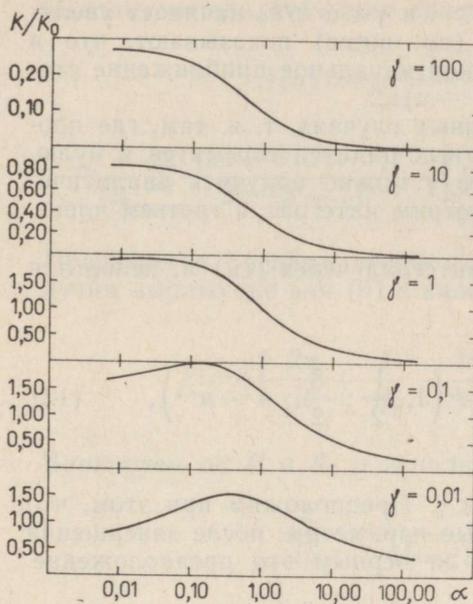


Рис. 3. Зависимость k/k_0 от α при различных значениях γ .

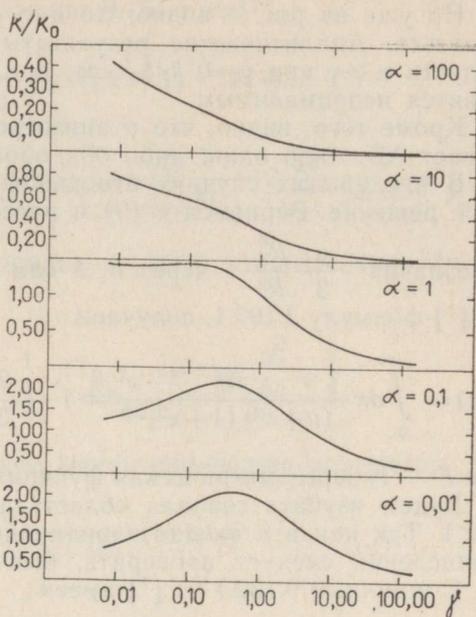


Рис. 4. Зависимость k/k_0 от γ при различных значениях α .

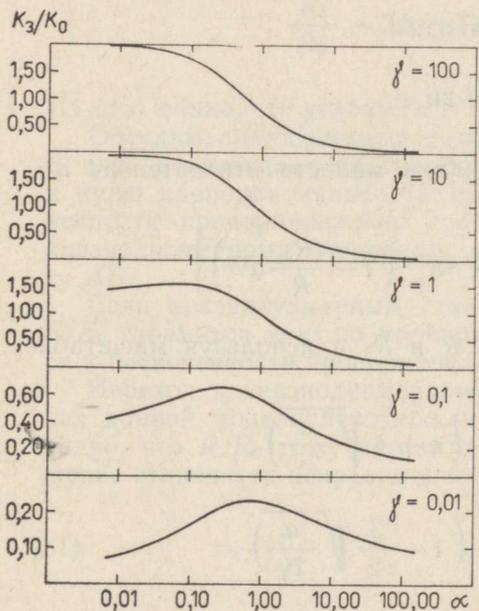


Рис. 5. Зависимость k_3/k_0 от α при различных значениях γ .

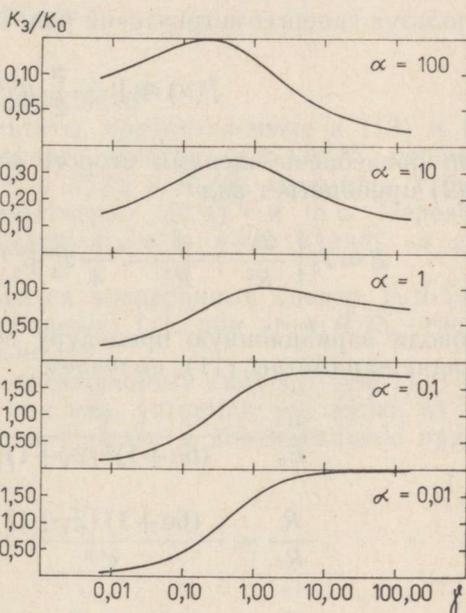


Рис. 6. Зависимость k_3/k_0 от γ при различных значениях α .

Обратившись к зависимости обратных радиусов состояния электрона от параметров анизотропии (рис. 3—6), нужно прежде всего отметить, что при использованных для численных расчетов значениях параметров анизотропии k/k_0 и k_3/k_0 порядка единицы или меньше. Отсюда следует, что в этих случаях рассмотрение АБ в анизотропных кристаллах в континуальном приближении оправдано в той же мере, что и в соответствующих изотропных кристаллах (т. е. $J^{из}$ и $\beta^{из}$).

Но уже из рис. 4 видно, что при $\alpha > 1$ и $\gamma \ll \alpha k/k_0$ начинает увеличиваться. Аналитические результаты (см. ниже) показывают, что в области $\alpha \gg \gamma$ при $\gamma \rightarrow 0$ $k/k_0 \rightarrow \infty$, т. е. континуальное приближение становится неприменимым.

Кроме того, видно, что в анизотропных случаях, т. е. там, где пропадает АБ, либо один, либо оба обратных радиуса стремятся к нулю.

В предельных случаях отношения α/γ можно получить аналитическое решение. Вернемся к (9) и рассмотрим интеграл в третьем члене.

Обозначив $\frac{\alpha}{3} \frac{R_3^2}{R^2}$ через u , а сам интеграл через $f(u)$ и, используя из [7] формулу 3.197.1, получаем

$$f(u) = \int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{(u+x^2)(1+x^2)^{3/2}} = 1 - \frac{2}{3} F\left(1, \frac{1}{2}; \frac{5}{2}; 1-u^{-1}\right), \quad (12)$$

где F — гипергеометрическая функция.

Будем изучать сначала область $\alpha \ll \gamma$. Предположим при этом, что $u \ll 1$. Так как в u входят вариационные параметры, после завершения вычислений следует проверить, было ли верным это предположение.

С помощью 9.132.1 из [7] имеем

$$f(u) = 1 - \frac{\pi}{2} u^{1/2} F\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}; \frac{1}{2}; u\right) + 2u F\left(1, 2; \frac{3}{2}; u\right).$$

Используя гипергеометрический ряд, находим

$$f(u) \approx 1 - \frac{\pi}{2} u^{1/2} + 2u - \dots$$

Если пренебречь членами второго порядка малости относительно $u^{1/2}$, то (9) приобретает вид

$$E = J_3 \left[\frac{2\gamma}{R^2} + \frac{1}{R^2} - \frac{\lambda}{4} J_3^{-1} \beta_3^{-1} R^{-2} R_3^{-1} \left(1 - \frac{R_3}{R} \alpha^{1/2} \right) \right].$$

Проводя вариационную процедуру по R и R_3 и используя масштабирующие параметры (11), получаем

$$\begin{aligned} \frac{E}{E_0} &\sim \frac{\gamma^2}{(6\alpha+1)^2 (2\gamma+1)^3} \left(1 + 4 \sqrt{\frac{\alpha}{2\gamma}} \right), \\ \frac{R}{R_0} &\sim \frac{(6\alpha+1)(2\gamma+1)}{\gamma^{1/2}} \left(1 - \frac{3}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{2\gamma}} \right), \\ \frac{R_3}{R_0} &\sim \frac{(6\alpha+1)(2\gamma+1)}{\gamma} \left(1 - 3 \sqrt{\frac{\alpha}{2\gamma}} \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Из (13) видно, что $u \sim \alpha/\gamma$. Условие $u \ll 1$ выполнено, т. е. сделанное выше разложение оправдано.

Обратимся теперь к области $\alpha \gg \gamma$. Здесь предположим, что $u \gg 1$. Используя свойства гипергеометрической функции, перепишем (12) в виде:

$$f(u) = \frac{1}{3} F\left(1, 1; \frac{5}{2}; 1-u\right). \quad (14)$$

Используем аналитическое продолжение 9.154.1 из [7]

$$f(u) = \frac{1}{2\pi(u-1)} [\ln 4(u-1) - 2] + \\ + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k-3)!! (-1)^{k+1}}{2^{k+1}(u-1)^{k+1}} \left[\ln 4(u-1) + \sum_{m=1}^k \frac{1}{m} - 2 \sum_{m=1}^{k-1} \frac{1}{2m-3} \right].$$

Пренебрегая членами второго порядка малости относительно $1/u$, получим выражение для (9) в виде

$$E = J_3 \left[\frac{2\gamma}{R^2} + \frac{1}{R_3^2} - \frac{\lambda^2}{4} \cdot \frac{1}{2} J_3^{-1} \beta_3^{-1} \alpha^{-1} R_3^{-3} \ln \frac{R_3^2}{R^2} \alpha \right].$$

Варьируем по R и R_3 и используем масштабирующие параметры (11)

$$\frac{E}{E_0} \sim \frac{\alpha^2}{(6\alpha+1)^2 (2\gamma+1)^3} (\ln \alpha/\gamma)^{-2}, \\ \frac{R}{R_0} \sim (2\gamma+1) \gamma^{1/2} (\ln \alpha/\gamma)^{3/2}, \\ \frac{R_3}{R_0} \sim (2\gamma+1) \ln \alpha/\gamma. \quad (15)$$

Из (15) видно, что условие $u \gg 1$ выполнено.

Обсудим аналитические результаты, представленные в (13) и (15). В случае квазидвухмерного фоннного спектра ($\alpha \gg 1$) E/E_0 стремится к нулю пропорционально $(\ln \alpha)^{-2}$, а R/R_0 и R_3/R_0 стремятся к бесконечности пропорционально соответственно $(\ln \alpha)^{3/2}$ и $\ln \alpha$. Переход к квазиодномерному фоннному спектру ($\alpha \ll 1$) мало влияет на высоту АБ.

Если квазидвухмерным становится электронный спектр ($\gamma \gg 1$), то E/E_0 стремится к нулю пропорционально $1/\gamma$, при этом R/R_0 стремится к бесконечности пропорционально $\gamma^{1/2}$.

Переход к квазиодномерному электронному спектру ($\gamma \ll 1$) в рамках данной модели невозможен, так как, устремив γ к нулю, из (15) видно, что R/R_0 тоже устремляется к нулю, и континуальное приближение становится неправомерным.

ЛИТЕРАТУРА

1. Луцик Ч. Б. // Экситоны. М., Наука, 1985, гл. 12.
2. Рашба Э. И. // Экситоны. М., Наука, 1985, гл. 13.
3. Беленький Г. Л. // УФН, 1988, 155, № 1, 89—127.
4. Завт Г. С., Рейфман С. П. // ФТТ, 1976, 18, № 6, 1519—1523 (1976).
5. Давыдов А. С. Теория твердого тела. М., Наука, 1976.
6. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Теория упругости. М., Наука, 1987.
7. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., 1963.

Институт физики
Академии наук Эстонии

Поступила в редакцию
3/V 1990

KRISTALLI ENERGIASPEKTRI ANISOTROOPIA MÖJU
KVAASIOSAKESTE AUTOLOKALISATSIOONI BARJÄÄRILE

On vaadeldud enesekooskõlastatud elektronseisundeid, mis kaasnevad võre deformatsiooniga anisotroopses kristallis. Kontinuaalses lähenduses on arvutusmeetoditega leitud vabade ja autolokaliseeritud seisundite vahelise barjääri kõrguse ja barjääri seisundi raadiuste sõltuvus elektron- ja foononspektrite anisotroopia parameetritest. Mõnedel kvaasiühemõõtmeliste ja kvaasikahemõõtmeliste spektrite piirjuhtudel on leitud analüütilised lahendid.

Aleksander SHELKAN and Grigori ZAVT

EFFECT OF THE ANISOTROPY OF THE ENERGY SPECTRUM OF A CRYSTAL
ON THE SELF-TRAPPING BARRIER OF QUASI-PARTICLES

Self-consistent states of electrons, accompanied by the deformation of the lattice in an anisotropic crystal are considered in continuous approximation. The dependence of the height of the barrier between free and self-trapped states and of the barrier state radii on electron and phonon spectra anisotropy parameters are found by numerical methods. The analytical results for limiting cases of quasi one- and two-dimensional spectra are obtained.