# ЛОКАЛЬНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ ВБЛИЗИ ТОЧЕЧНЫХ И ЛИНЕЙНЫХ ДЕФЕКТОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

*Ф.Г.Басс, В.Л.Фалько, С.И.Ханкина*

Институт радиофизики и электроники Академии наук Украины,
310085, Харьков, Украина
(Получена 6 апреля 1994 г. Принята к печати 6 июля 1994 г.)

Построена теория локальных колебаний в проводящей среде вблизи точечного и линейного дефектов. В оптическом диапазоне частот в кристаллах с легким изотопом существуют поперечные локальные колебания, при наличии тяжелого изотопа — продольные колебания, обусловленные кулоновскими взаимодействиями между дефектом, ионами решетки и электронами проводимости. Показано, что наличие электронной подсистемы приводит к экспоненциальному убыванию амплитуды колебаний на макроскопических расстояниях порядка длины поперечной электромагнитной волны в среде или на расстояниях порядка дебаевского радиуса.

Хорошо известная и широко цитируемая теория локальных колебаний в дефектных кристаллах, начало развития которой положено И.М. Лифшицем и его школой, относится к диэлектрическим кристаллам, содержащим электронейтральные дефекты [1]. Благодаря упругим взаимодействиям дефекта с атомами решетки вблизи дефекта возникают колебания с дискретной частотой, находящейся вне сплошного спектра частот идеального кристалла. Амплитуда этих колебаний убывает экспоненциально по мере удаления от дефекта, и характерный размер области локализации колебаний определяется близостью локальной частоты к краю сплошного спектра частот.

В работах [2,3] теория локальных колебаний развита для ионного диэлектрического кристалла с дефектом, когда наряду с короткодействующими упругими силами существуют дальнодействующие кулоновские силы. В статье [2] получен спектр локальных колебаний при наличии точечного заряженного дефекта (заряд дефекта отличается от заряда ионов решетки). В работе [3] исследованы спектр и координатная зависимость амплитуд локальных колебаний в случае, когда дефект отличается от регулярного узла только массой. В [3] показано, что благодаря дальнодействующим кулоновским силам взаимодействия между дефектом и ионами решетки координатная зависимость амплитуд локальных колебаний характеризуется убыванием по степенному закону (дефект — точечный или линейный).

В настоящей работе теория локальных колебаний обобщена на случай проводящей среды. Показано, что в оптическом диапазоне частот благодаря электромагнитным взаимодействиям между ионами решетки, дефектом и электронами проводимости существуют колебания, локализованные вблизи дефекта: в кристаллах с легким изотопом — поперечные колебания, в кристаллах с тяжелым изотопом — продольные. Частота поперечных колебаний $\omega_{\text{loc}}^{(1)}$ находится вблизи верхней границы частотной полосы объемных оптических колебаний $\omega_0 : \omega_{\text{loc}}^{(1)} \geqslant \omega_0$; частота продольных колебаний $\omega_{\text{loc}}^{(2)}$ — вблизи частоты объемных поляритонов: $\omega_{\text{loc}}^{(2)} \leqslant \omega_{l\min}$ ($\omega_{l\min}^2 = \omega_{\min}^2 + \Omega^2$, $\omega_{\min}$ — минимальное значение частоты объемных оптических колебаний, $\Omega$ — плазменная частота ионов решетки). Электронная подсистема не участвует в формировании частоты локальных колебаний, но приводит к существенному изменению структуры их поля. Из-за экранирования дефекта электронами проводимости пространство вокруг дефекта разделяется на две области — ближнюю ($r \ll r_D$) и дальнюю ($r \gg r_D$, $r_D$ — дебаевский радиус). В ближней зоне координатная зависимость смещений $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t)$ имеет такой же вид, как в ионном диэлектрике. Электронная подсистема определяет характер распределения поля в дальней зоне, где амплитуда смещения является суперпозицией колебаний, убывающих на микроскопических расстояниях от дефекта. Эти расстояния — порядка дебаевского радиуса $r_D$ и длины поперечной электромагнитной волны в среде — $c/\omega\sqrt{\varepsilon}$.

## 1. Точечный дефект

Для качественного описания колебаний, локализованных вблизи точечного дефекта в проводящей среде используем модель полупроводника с ионной кубической решеткой, когда элементарная ячейка решетки содержит два разноименных иона и каждый ион является центром инверсии (например, халькогениды свинца: PbS, PbSe, PbTe). Дефект отличается от регулярного узла только массой и не меняет параметры упругого взаимодействия между соседними ионами.

Известно [1], что в длинноволновом пределе $ka \ll 1$ ($a$ — период решетки, $\mathbf{k}$ — волновой вектор) уравнения движения центра тяжести ячейки и уравнения движения относительных смещений ионов $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t)$ разделяются в оптическом диапазоне частот $\omega \sim \omega_0$, который и будем рассматривать. В этом случае уравнения движения центра тяжести описывают акустическую ветвь колебаний, а динамические уравнения для $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t)$ — оптическую ветвь. Предполагаем, что связь двух ветвей через дефект является слабой, т. е. влияние дефекта на акустические и оптические колебания можно рассматривать независимо. Относительное смещение ионов $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t)$ изменяет дипольный момент элементарной ячейки, поэтому оптические колебания в полупроводнике интенсивно взаимодействуют с электромагнитными полями и электронами проводимости. В рассматриваемой модели система уравнений для описания локальных колебаний вблизи дефекта состоит из динамических уравнений для относительных смещений ионов $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r},t)$, уравнений Максвелла и соотношений, связывающих ток электронов проводимости $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ с электрическим полем $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$:

$$\frac{\partial^2 \xi_i(\mathbf{r})}{\partial t^2} - \sum_{\mathbf{n}'} C_{ik}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\mathbf{n}'})\xi_k(\mathbf{r}_{\mathbf{n}'}) = W\xi_i(0)\delta(\mathbf{r}) + \frac{e}{M}E_i(\mathbf{r},t); \tag{1}$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}; \quad \operatorname{rot}\mathbf{H} = \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}; \tag{2}$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi e N\boldsymbol{\xi};$$

$$j_i(\mathbf{r},t) = \int \sigma_{ik}(\mathbf{r}'-\mathbf{r},t)E_k(\mathbf{r}',t)d\mathbf{r}'. \tag{3}$$

В уравнении (1) $C_{ik} = (\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\mathbf{n}'})$ — динамическая силовая матрица; для оптической ветви колебаний решетки матрица $C_{ik}(0)$ является положительно определенной; $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_\mathbf{n}$ — координата $\mathbf{n}$-го иона. Для кубического кристалла в длинноволновом пределе второе слагаемое в левой части уравнения (1) можно записать в дифференциальной форме [4]:

$$-\sum_{\mathbf{n}'} C_{ik}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\mathbf{n}'})\xi_k(\mathbf{r}_{\mathbf{n}'}) = \omega_0^2\xi_i(\mathbf{r}) + d_1\Delta\xi_i + \alpha_2\nabla_i(\boldsymbol{\nabla\xi}). \tag{4}$$

Величины $\alpha_1$ и $\alpha_2$ определяются упругими характеристиками кристалла. Запись (4) фактически соответствует изотропному приближению, которым можно ограничиться при обсуждении интересных для нас качественных эффектов. Симметричный точечный дефект расположен в начале координат $\mathbf{r} = 0$, его взаимодействие с ионами решетки описывается первым слагаемым в правой части уравнения (1), где $W$ — константа этого взаимодействия. Второе слагаемое в правой части этого уравнения обусловлено влиянием электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ на колебания ионного кристалла, $M$ — приведенная масса ионов. В уравнении (2) введены следующие обозначения: $\mathbf{H}$ — магнитное поле, $c$ — скорость света в вакууме, $\mathbf{D}$ — электрическая индукция, $N \sim 1/a^3$, $\sigma_{ik}(\mathbf{r}'-\mathbf{r},t)$ — тензор электрической проводимости.

Систему уравнений (1)–(3), (4) решаем, используя преобразования Фурье по координатам $x$, $y$, $z$ и предполагая зависимость всех функций от времени в виде $\exp(-i\omega t)$. Система координат $x$, $y$, $z$ совпадает с главными кристаллографическими осями. В такой системе координат в длинноволновом приближении, в котором записано соотношение (4), и в предложении, что электронная плазма изотропна, продольные и поперечные оптические колебания разделяются. В результате для компонент смещений получим выражения

$$\xi_i(\mathbf{r}) = \frac{W}{(2\pi)^3}\mathcal{G}_{ik}(\mathbf{r})\boldsymbol{\xi}_k(0), \tag{5}$$

$$\mathcal{G}_{ik}(\mathbf{r}) = \int G_{ik}(\omega,\mathbf{k})\mathrm{e}^{\mathbf{ikr}d\mathbf{r}}, \tag{6}$$

где $\mathcal{G}_{ik}(\mathbf{r})$ — тензор Грина системы (1)–(3), (4) в отсутствие дефекта ($W = 0$), а его Фурье-образ имеет вид

$$G_{ik}(\omega, \mathbf{k}) = G_{ik\,\mathrm{long}}(\omega, \mathbf{k}) + G_{ik\,\mathrm{tr}}(\omega, \mathbf{k}), \tag{7}$$

$$G_{ik\,\mathrm{long}}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_{long}(\omega, \mathbf{k})}{[\omega^2_{\mathrm{long}}(\mathbf{k}) - \omega^2]\varepsilon_{\mathrm{long}}(\omega, \mathbf{k}) + \Omega^2} \frac{k_i k_k}{k^2},$$

$$G_{ik\,\mathrm{tr}}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2 - (\omega^2/c^2)\varepsilon_{\mathrm{tr}}(\omega, \mathbf{k})}{[\omega^2_{\mathrm{tr}}(\mathbf{k}) - \omega^2][k^2 - (\omega^2/c^2)\varepsilon_{\mathrm{tr}}(\omega, \mathbf{k})] - (\omega^2/c^2)\Omega^2} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2}\right).$$

Здесь $\omega_{\mathrm{long}}(\mathbf{k})$ и $\omega_{\mathrm{tr}}(\mathbf{k})$ — законы дисперсии продольных и поперечных оптических колебаний, определенных в полосе $\omega_{\min} \leqslant \omega_{\mathrm{long,tr}}(\mathbf{k}) \leqslant \omega_0$. Поскольку концы этой полосы обычно являются точками экстремума для функций $\omega_{\mathrm{long,tr}}(\mathbf{k})$, дисперсия вблизи концов оптической полосы квадратична. Ограничимся исследованием случая сферического закона дисперсии $\omega_{\mathrm{long,tr}}(\mathbf{k})$, т.е. коэффициенты $\alpha_1$ и $\alpha_2$ в формуле (4) являются константами и не содержат угловой зависимости [5,6]. Интервал изменения волнового вектора $\mathbf{k}$ определяется в пределах приведенной зоны Бриллюэна: $0 \leqslant k_i \leqslant 2\pi/a$ ($i = x, y, z$). Рассмотрим 2 модели для законов дисперсии $\omega_{\mathrm{long,tr}}(\mathbf{k})$.

1. При $k = 0$ функции $\omega_{\mathrm{long,tr}}(\mathbf{k})$ достигают своего максимального значения $\omega_0$:

$$\omega^2_{\mathrm{tr}}(\mathbf{k}) = \omega_0^2 - \alpha_1 k^2; \quad \omega^2_{\mathrm{long}}(\mathbf{k}) = \omega_0^2 - \alpha k^2 (\alpha = \alpha_1 + \alpha_2). \tag{8}$$

2. При $k = 0$ эти функции принимают минимальные значения:

$$\omega^2_{\mathrm{tr}}(\mathbf{k}) = \omega^2_{\min} + \alpha'_1 k^2; \quad \omega^2_{\mathrm{long}}(\mathbf{k}) = \omega^2_{\min} + \alpha' k^2. \tag{9}$$

( Во втором случае в формуле (4) $\omega_0^2$ нужно заменить на $\omega^2_{\min}$, а $\alpha_1$ и $\alpha_2$ на величины $(-\alpha'_1)$ и $(-\alpha'_2)$).

В (7) $\Omega^2 = 4\pi N e^2/M$; $\varepsilon_{\mathrm{long}}(\omega, \mathbf{k})$ и $\varepsilon_{\mathrm{tr}}(\omega, \mathbf{k})$ — продольная и поперечная компоненты диэлектрической проницаемости изотропной полупроводниковой плазмы (см., например, [7]). Формула (7) получена с учетом эффектов запаздывания электромагнитных полей. Однако эти эффекты оказывают существенное влияние только на распределение полей колебаний $\xi_i(\mathbf{r})$ на расстояниях порядка или больше дебаевского радиуса экранирования $r_D = v/\omega_p$ ($v$ — тепловая скорость электронов, $\omega_p$ — их плазменная частота). Это можно увидеть из следующих оценок. Основной вклад в интеграл (6) дают значения $k \approx k_0 \sim 1/|\mathbf{r}|$. Разделим пространство вокруг дефекта на две области — $r \ll r_D$ (ближняя зона) и $r \gg r_D$ (дальняя зона). В ближней зоне характерное значение волнового числа — $k_0 \gg 1/r_D \gg \omega/c$, поэтому эффектами запаздывания можно пренебречь, т.е. справедливо квазистатическое приближение ($c \to \infty$). Кроме того, при $kr_D \gg 1$ можно считать $\varepsilon_{\mathrm{long}} \simeq \varepsilon_{\mathrm{tr}} \simeq 1$ [6], и, значит, присутствие электронной подсистемы можно не принимать во внимание. В дальней зоне эффектами запаздывания пренебречь нельзя, поскольку характерные значения $k \ll 1/r_D$ могут быть порядка

$\omega\varepsilon_{\rm tr}/c$. При таких $k \sim k_0$ необходимо также учитывать зависимость $\varepsilon_{\rm long}$ и $\varepsilon_{\rm tr}$ от $k$ и параметров электронов проводимости — их плазменной частоты $\omega_p$ и скорости $v_0$ для изотропной электронной плазмы [6]:

$$\varepsilon_{\rm long} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\left[1 + 3\frac{\omega_p^2}{\omega^2}k^2 r_D^2\right], \quad \varepsilon_{\rm tr} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\left[1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}k^2 r_D^2\right].$$

Для определения частот колебаний, локализованных вблизи дефекта нужно знать области существования собственных колебаний идеального полупроводника с ионной решеткой. Спектры этих возбуждений находятся из условия обращения в нуль знаменателей функции Грина (7) и в рассматриваемой модели описываются уравнениями

$$[\omega_{\rm long}^2(\mathbf{k}) - \omega^2]\varepsilon_{\rm long}(\omega, \mathbf{k}) + \Omega^2 = 0 \tag{10}$$

— для продольных колебаний и

$$[\omega_{\rm tr}^2(\mathbf{k}) - \omega^2][k^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_{\rm tr}(\omega, \mathbf{k})] - \frac{\omega^2}{c^2}\Omega^2 = 0 \tag{11}$$

— для поперечных [7].

Из-за сложного вида зависимости $\omega_{\rm long,tr}(\mathbf{k})$ и $\varepsilon_{\rm long,tr}(\mathbf{k})$ в полупроводниках аналитические выражения для дисперсионных соотношений можно найти в предельных случаях $kr_D \ll 1$ и $kr_D \gg 1$. При $kr_D \ll 1$ соотношение (10) имеет вид

$$v^2k^2 = \frac{\omega^2}{3\omega_p^2}\frac{(\omega^2 - \omega_1^2)(\omega^2 - \omega_2^2)}{\omega^2 - \omega_0^2}, \tag{12}$$

а соотношение (1) —

$$c^2k^2 = (\omega^2 - \omega_1^2)(\omega^2 - \omega_2^2). \tag{13}$$

Здесь

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{\omega_p^2 + \omega_l^2}{2} \mp \frac{1}{2}[(\omega_p^2 + \omega_l^2) - 4\omega_p^2\omega_0^2]^{1/2};$$
$$\omega_e^2 = \omega_0^2 + \Omega^2; \quad \omega_2 > \omega_1. \tag{14}$$

Нетрудно увидеть, что $\omega_2 > \omega_l$ и $\omega_1 < \omega_0$. Из формул (12) и (13) следует, что запрещенная полоса частот полупроводника определяется неравенствами

$$\omega_0 < \omega < \omega_2. \tag{15}$$

В области волновых чисел $k$, где $kr_D \gg 1 (\varepsilon_{\rm long} \simeq \varepsilon_{\rm tr} \simeq 1)$ собственные колебания кристалла не зависят от свойств электронной плазмы. Запрещенная область частот сужается по сравнению с (14) и становится такой, как в диэлектрике [1]:

$$\omega_0 < \omega < \omega_{l\,\rm min} = \left(\omega_{\rm min}^2 + \Omega^2\right)^{1/2}. \tag{16}$$

Частоты колебаний, локализованных вблизи точечного дефекта, определяются из уравнения (5). Полагая $\mathbf{r} = 0$, получим систему линейных однородных уравнений для $\boldsymbol{\xi}(0)$, условие совместимости которых имеет вид

$$\| \delta_{ik} - \frac{W}{(2\pi)^3} \mathcal{G}_{ik}(\omega, 0) \| = 0. \tag{17}$$

Для симметричного точечного дефекта все диагональные компоненты тензора $\mathcal{G}_{ik}(\omega,0)$ равны между собой, а недиагональные компоненты равны нулю, $\mathcal{G}_{xx}(\omega,0) = \mathcal{G}_{yy}(\omega,0) = \mathcal{G}_{zz}(\omega,0) \equiv \mathcal{G}(\omega,0)$, и уравнение (16) вырождается — сводится к трем одинаковым уравнениям. Основной вклад в интеграл $\mathcal{G}(\omega,0)$ (6) дают большие значения волнового числа $k$: $k \gg \omega/c$, $1/r_D$.[1]

Вычислим приближенно величины локальных частот $\omega_{\text{loc}}^{(1)}$ и $\omega_{\text{loc}}^{(2)}$. Введем функцию

$$\Phi_1(\omega) = \frac{\omega^2}{(2\pi)^3} \int (n_x^2 + n_y^2) \frac{d^3\mathbf{k}}{(\omega^2 - \omega_0^2) + \alpha_1 k^2}. \tag{20}$$

Тогда уравнение (18) записывается в виде

$$\Phi_1(\omega) = 1/|U| \quad (U = W/\omega^2), \tag{21}$$

где функция $\Phi_1(\omega)$ определена в области $\omega > \omega_0$, причем $\Phi_1(\omega) < \Phi_1(\omega_0)$. Частота $\omega_{\text{loc}}^{(1)}$ есть

$$\omega_{\text{loc}}^{(1)} = \omega_0 \left\{ 1 + \frac{18\pi^2 \alpha_1^3}{\omega_0^6} \left[ \frac{|U| - |U_{1kp}|}{U_{1kp} U} \right]^2 \right\}. \tag{22}$$

$$(|U_{1kp}| = 1/\Phi_1(\omega_0); \quad |U| > |U_{1kp}|).$$

Аналогичным образом определяем локальную частоту $\omega_{\text{loc}}^{(2)}$. Для этого введем функцию

$$\Phi_2(\omega) = \frac{\omega^2}{(2\pi)^3} \int n_z^2 \frac{d^3\mathbf{k}}{\omega_{l\,\text{min}}^2 - \omega^2 + \alpha' k^2} \tag{23}$$

и получим

$$\omega_{\text{loc}}^{(2)} = \omega_{l\,\text{min}} \left\{ 1 - \frac{72\pi^2 \alpha'^3}{\omega_{l\,\text{min}}^6} \left[ \frac{U - U_{2kp}}{U_{2kp} U} \right]^2 \right\}. \tag{24}$$

$$(U_{2kp} = 1/\Phi_2(\omega_{l\,\text{min}}); U > U_{2kp}).$$

Исследуем зависимость от координат амплитуды локальных колебаний $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r},\omega)$ в кристаллах с легким дефектом ($U < 0$). В ближней зоне

[1] Это нетрудно увидеть, если в интегралах (6) перейти к полярным координатам: интеграл по $k = |\mathbf{k}|$ расходится на верхнем пределе $k \to \infty$, что и означает вклад больших $k$.

$(a < r < r_D)$ координатная зависимость компонент смещений локальных поперечных колебаний с частотой $\omega = \omega_{\rm loc}^{(1)} > \omega_0$ имеет вид

$$\xi_\alpha(r) = \frac{|U|\omega_0^2}{4\pi}\xi_\alpha(0)\frac{\mathrm{e}^{-i\omega t}}{r}\left[\frac{\mathrm{e}^{-r/l}}{\alpha_1} - \frac{1}{\omega^2-\omega_0^2}\frac{1}{r^2}\right] (\alpha = x, y), \tag{25}$$

$$\xi_z(r) = -\frac{|U|\omega_0^2}{4\pi}\xi_z(0)\frac{\mathrm{e}^{-i\omega t}}{r}\left[\mathrm{e}^{-r/l}\frac{l}{\alpha_1 r} - \frac{1}{\omega^2-\omega_0^2}\frac{1}{r^2}\right]. \tag{26}$$

Здесь $\mathbf{r} \parallel 0z$;

$$l = \alpha_1/|\omega^2 - \omega_0^2|^{1/2}. \tag{27}$$

Выражения (25) и (26) содержит слагаемые двух типов. Одни, пропорциональные $\exp(-r/l)$, обусловлены упругими силами в уравнении (1) и убывают на расстояниях порядка нескольких постоянных решетки; другие слагаемые, пропорциональные $r^{-3}$, связаны с дальнодействующими кулоновскими взаимодействиями между ионами и дефектом. (Степенной закон убывания смещений $\xi_i(\mathbf{r}, t)$ продольных колебаний был впервые получен для диэлектриков в работе [3].) Как видно из (25) и (26), в ближней зоне электроны проводимости не влияют на амплитуду локальных колебаний.

В дальней зоне амплитуды смещений описываются формулами

$$\xi_\alpha(r) = \frac{|U|\omega_0^2}{2\pi}\xi_\alpha(0)\frac{\Delta(\omega)}{\Omega^2}\frac{\mathrm{e}^{-i\omega t}}{r}\left\{\frac{\mathrm{e}^{-r/r_1}}{rr_1} - \frac{\mathrm{e}^{-r/r_2}}{r_2^2}\left(1 + \frac{r_2}{r} + \frac{r_2^2}{r^2}\right)\right\}, \tag{28}$$

$$\xi_z(r) = -\frac{|U|\omega_0^2}{2\pi}\xi_z(0)\frac{\Delta(\omega)}{\Omega^2}\frac{\mathrm{e}^{-i\omega t}}{r}\left[\frac{\mathrm{e}^{-r/r_1}}{2r_1^2} - \frac{\mathrm{e}^{-r/r_2}}{rr_2}\left(1 + \frac{r_2}{r}\right)\right],$$

где радиусы $r_1$ и $r_2$ существенно отличаются от дебаевского радиуса и равны

$$r_1 = \left(3\frac{\omega^2-\omega_0^2}{\omega_0^2}\right)^{1/2}\frac{\omega_p}{\omega_0}\frac{v}{\Omega}; \quad r_2 = \left(\frac{\omega^2-\omega_0^2}{\omega_0^2}\right)^{1/2}\frac{c}{\Omega}; \quad \Delta(\omega) = \frac{\Omega^2}{\omega^2-\omega_0^2}. \tag{29}$$

При наличии тяжелого изотопа в кристаллах $(W > 0)$, когда возникают продольные локальные колебания с частотой $\omega_{\rm loc}^{(2)}$, координатные зависимости смещений $\xi_i(\mathbf{r}, t)$ в ближней зоне по форме совпадают с выражением для $\xi_i(\mathbf{r}, t)$ в диэлектрике, приведенными в работе [3]. (Однако здесь и в дальнейшем следует иметь в виду, что функцию $\omega_{\rm long}(\mathbf{k})$ нужно раскладывать вблизи минимума оптической полосы, а частота локального колебания $\omega_{\rm loc}^{(2)} < \omega_{l\,\rm min}$ ).

В дальней зоне зависимости $\xi_i(\mathbf{r}, t)$ имеют форму (28), в которой параметры $r_1$, $r_2$ и $\Delta$ существенно отличаются от (29):

$$r_1 = \sqrt{3}\frac{v}{\omega_{l\,\rm min}}; \quad r_2 = \frac{c}{\omega_p}; \quad \Delta = -\frac{\omega_{l\,\rm min}^2}{\omega_p^2}. \tag{30}$$

Таким образом, координатные зависимости смещений $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r})$ различны в ближней и дальней зонах. Во-первых, из-за кулоновского экранирования дефекта электронами проводимости в дальней зоне отсутствует медленно убывающая ($\sim r^{-3}$) компонента $\xi_i(r)$. Во-вторых, характерный масштаб экспоненциально затухающих слагаемых существенно иной — вместо микроскопических длин $l$ возникают макроскопические величины $r_1$ и $r_2$. В отличие от $l$, зависящих только от упругих характеристик кристалла, $r_1$ и $r_2$ обусловлены электронами проводимости и их взаимодействием с электромагнитными полями в среде.

Отметим, что формальная запись выражений $\xi_i(r,t)$ в дальней зоне для продольных и поперечных колебаний совпадает. Однако из сравнения параметров $r_1$, $r_2$ и $\Delta$ следует, что амплитуда ($\sim \Delta$) поперечных колебаний больше, чем амплитуда продольных, но расстояния, на которых они экспоненциально убывают, значительно меньше.

## 2. Линейный дефект

Рассмотрим случай протяженного линейного дефекта, сосредоточенного на оси $0z$. В плоскости $xy$ введем двумерный радиус-вектор $\rho$. В системе уравнений (1)–(3) изменится только вид первого слагаемого в правой части уравнения (1). Оно равно

$$W\xi(0,z)\delta(\rho). \tag{31}$$

Систему уравнений (1)–(3) решаем, используя двумерное преобразование Фурье по координатам $x$ и $y$ и полагая, что все функции пропорциональны $\exp(iqz - i\omega t)$. Волновое число $q$ входит в уравнения (1)–(7), (17) как параметр, для которого выполняется условие $qa \ll 1$. Исследуем спектр локальных колебаний вблизи линейного дефекта. Тензор Грина имеет следующие компоненты: $\mathcal{G}_{xx}(\omega,q,\rho=0) = \mathcal{G}_{yy}(\omega,q,\rho=0)$; $\mathcal{G}_{zz} = (\omega,q,\rho=0) \neq 0$; $\mathcal{G}_{ik}(\omega,q,\rho=0) = 0$ при $i \neq k$. Соотношение (17) сводится к двум независимым ураненияи. Уравнение

$$1 - \frac{U\omega^2}{(2\pi)^2}\mathcal{G}_{zz}(\omega,q,\rho=0) = 0 \tag{32}$$

определяет частоту поперечных локальных колебаний, если $U < 0$, и уравнение

$$1 - \frac{U\omega^2}{(2\pi)^2}\mathcal{G}_{xx}(\omega,q,\rho=0) = 0 \tag{33}$$

определяет частоту продольных колебаний при $U > 0$.

Вектор смещения $\boldsymbol{\xi}(0)$ в волне (32) направлен вдоль оси $0z$, а в волне (33) он расположен в плоскости $x0y$. Решение уравнения (32) имеет вид

$$\left[\omega_{\mathrm{loc}}^{(1)}\right]^2 = \omega_0^2 + \alpha_1 \varkappa_1^2 \mathrm{e}^{-4\pi\alpha_1/|U|\omega_0^2} \quad (U < 0). \tag{34}$$

Здесь $\varkappa_1 = q\exp(2\pi\alpha_1/|U_{1kp}|\omega_0^2) \sim \frac{1}{a}$, $U_{1kp}^{-1} = \frac{\omega_0^2}{(2\pi)^2}\mathcal{G}_{zz}(\omega=\omega_0,q,\rho=0)$. Частота продольных колебаний равна

$$\left[\omega_{\mathrm{loc}}^{(2)}\right]^2 = \omega_{l\,\mathrm{min}}^2 - \alpha' \varkappa_2^2 \mathrm{e}^{-8\pi\alpha/U\omega_{l\,\mathrm{min}}^2} \quad (U > 0). \tag{35}$$

Величина $\varkappa_2 \sim 1/a$ определяется через $\mathcal{G}_{xx}(\omega = \omega_{l\,\min}, q, \rho = 0)$.

Пространственное распределение амплитуд колебаний $\xi_i(\rho)$ описывается суммой цилиндрических функций мнимого аргумента $K_0(z)$, $K_1(z)$. Чтобы не загромождать изложение, приведем выражения в областях, где эти функции имеют простые асимптотики.

При наличии линейного дефекта появляется новый (по сравнению со случаем точечного дефекта) параметр $q$ — волновой вектор волны, распространяющейся вдоль оси $0z$. Рассмотрим ситуацию, когда $qr_D < 1$. Вычисления смещений $\xi_i(\rho, q)$ по формулам (5)–(7), (31) удобно проводить так же, как и в рязд. 1, выделяя ближнюю и дальнюю зоны.

Поперечные волны. В области пространства, где выполняется условие $\rho < \min\{\lambda = 2\pi/q; r_2\}$ влияние электронов проводимости оказывается несущественным, и координатная зависимость смещений $\xi_i$ имеет вид

$$\xi_x(\rho) = -i\frac{|U|q\omega_0^2}{2\pi[(\omega_{\mathrm{loc}}^{(1)})^2 - \omega_0^2]}\xi_z(0)\frac{\mathrm{e}^{iqz-i\omega t}}{\rho};$$

$$\xi_y(\rho) = 0;$$

$$\xi_z(\rho) = \frac{|U|q^2\omega_0^2}{2\pi[(\omega_{\mathrm{loc}}^{(1)})^2 - \omega_0^2]}\xi_z(0)\ln(q\rho)\mathrm{e}^{iqz-i\omega t}. \tag{36}$$

Вообще говоря, локализованная вблизи линейного дефекта волна представляет собой суперпозицию двух колебаний, связанных с различными физическими причинами. В ближней зоне ($\rho < r_D$) — это электромагнитные и упругие силы взаимодействия дефекта с ионами решетки. Упругие взаимодействия так же, как и в случае точечного дефекта, приводят к экспоненциально затухающим слагаемым $\sim \exp(-\rho/l)$ (см. (25), (26)). В дальней зоне в интервале $r_D < \rho < \min\{\lambda, r_2\}$ кроме взаимодействия дефекта с ионами, которое описывается формулой (36), существуют взаимодействия с электронами проводимости. Однако такие взаимодействия здесь дают экспоненциально малые добавки ( $\sim \exp(-\rho/r_1)$) к степенны́м зависимостям (36).

На больших расстояниях, $\rho > r_2$, если $qr_2 \ll 1$, взаимодействия дефекта с электронной подсистемой полупроводника являются определяющими. При этом

$$\xi_x'(\rho) = -i\frac{|U|\omega_0^2}{2(2\pi)^{1/2}[(\omega_{\mathrm{loc}}^{(1)})^2 - \omega_0^2]}\xi_z(0)\frac{q\mathrm{e}^{-\rho/r_2}}{\rho^{1/2}r_2^{1/2}}\mathrm{e}^{iqz-i\omega t},$$

$$\xi_y(\rho) = 0,$$

$$\xi_z(\rho) = \frac{|U|\omega_0^2}{2(2\pi)^{1/2}[(\omega_{\mathrm{loc}}^{(1)})^2 - \omega_0^2]}\xi_z(0)\frac{\mathrm{e}^{-\rho/r_2}}{\rho^{1/2}r_2^{3/2}}\mathrm{e}^{iqz-i\omega t}, \tag{37}$$

т.е.

$$|\xi_z(\rho)|/|\xi_x(\rho)| \sim 1/qr_2 \gg 1.$$

Если выполнено условие $qr_2 \gg 1$, то в дальней зоне в области $\rho > \lambda$ смещения имеют вид

$$\xi_z(\rho) = -i\xi_x(\rho) = \frac{|U|q^2\omega_0^2}{2(2\pi)^{1/2}[(\omega_{\text{loc}}^{(1)})^2 - \omega_0^2]}\xi_z(0)\frac{\mathrm{e}^{-q\rho+iqz-i\omega t}}{(q\rho)^{1/2}}. \quad (38)$$

В этом случае смещения обладают круговой поляризацией в плоскости $x0z$.

П р о д о л ь н ы е  в о л н ы. В области $\rho < \min\{\lambda, r_2\}$ амплитуды продольных колебаний $\xi_x(\rho) \sim \xi_y(\rho)$ убывают с расстоянием от линии дефекта по закону $\rho^{-2}$, что совпадает с результатами работы [3] для диэлектриков в интервале $\rho < \lambda$ ($|\xi_z(\rho)| \ll |\xi_x(\rho)|$). На расстояниях $\rho > r_2$ (если $qr_2 < 1$) наибольшим оказывается смещение вдоль оси $0y$:

$$\xi_y(\rho) = \frac{U}{2(2\pi)^{1/2}}\frac{\omega_{l\,\min}^4}{\omega_p^2\Omega^2}\xi_y(0)\frac{\mathrm{e}^{-\rho/r_2}}{\rho^{1/2}r_2^{3/2}}\mathrm{e}^{i(qz-\omega t)} \quad (39)$$

$$(|\xi_x|/|\xi_y| \sim r_2/\rho; |\xi_z|/|\xi_y| \sim qr_2 < 1).$$

Если выполняется критерий $qr_2 > 1$, то вдали от дефекта при $\rho > \lambda$ продольная волна, также как и поперечная, характеризуется круговой поляризацией

$$\xi_x(\rho) = i\xi_z(\rho) = \frac{|U|q^2\omega_{l\,\min}^4}{2(2\pi)^{1/2}\omega_p^2\Omega^2}\xi_x(0)\frac{\mathrm{e}^{-q\rho+i(qz-\omega t)}}{(q\rho)^{1/2}} \quad (40)$$

$$(|\xi_y|/|\xi_x| \sim 1/q\rho),$$

и величина ее амплитуды существенно зависит от параметров полупроводника.

Если $qr_D \gg 1$, то координатные зависимости смещений для продольных и поперечных ветвей такие же, как в диэлектрике — (36), (37) [2].

В заключение этого раздела рассмотрим однородные колебания ($q = 0$). Такие колебания поперечной ветви являются собственными колебаниями дефекта. Они поляризованы вдоль оси $0z$,

$$(\xi_x(\rho) = \xi_y(\rho) = 0)$$

$$\xi_z(\rho) = \frac{|U|\omega_{l\,\min}^2}{2(2\pi)^{1/2}\left[(\omega_{\text{loc}}^{(1)}) - \omega_0^2\right]}\xi_z(0)\frac{\mathrm{e}^{-\rho/l}}{\rho^{1/2}l^{3/2}}\mathrm{e}^{-i\omega t}, \quad (41)$$

и затухают на расстоянии $l \sim a$, т.е. остальная часть решетки находится в покое.

В заключение оценим условия, при которых локальные колебания являются слабо затухающими. При расчетах плазма полупроводника предполагалась бесстолкновительной. Это возможно, если $\omega_p \gg \nu$, $\nu$ — частота соударений электронов с фононами. Влияние электронов существенно при $\omega_p \sim \omega_{\text{loc}} \sim 10^{13}$ с$^{-1}$. Для этого образец должен быть чист и находиться при достаточно низких температурах, $\sim 10$ К,

($\nu \sim 10^{11}$ с$^{-1}$). Из приведенных оценок следует, что концентрация электронов проводимости (с эффективной массой, например, $10^{-29}$ г) ограничена со стороны больших значений условием $\sim 10^{18}$ см$^{-3}$.

К сожалению, в настоящее время нам не известны экспериментальные работы, в которых исследовались бы локальные колебания в проводящей среде. По нашим представлениям, наличие дальнодействующих сил, связанных с электронной подсистемой, должно привести к росту эффективного сечения рассеяния нейтронов и электромагнитных или акустических волн. Следует также ожидать увеличение электросопротивления полупроводникового кристалла за счет увеличения области взаимодействия локального колебания с электронами проводимости.

### Список литературы


[1] А.М. Косевич. *Теория кристаллической решетки* (Харьков, Вища шк., 1988).
[2] В.В. Брыскин, Ю.А. Фирсов. ЖЭТФ, **58**, 1025 (1970).
[3] А.М. Косевич, В.А. Погребняк. ЖЭТФ, **83**, 1886 (1982).
[4] В.М. Агранович, В.Л. Гинзбург. *Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов* (М., Наука, 1979).
[5] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (М., Наука, 1990).
[6] В.В. Брыскин, Ю.А. Фирсов. ЖЭТФ, **56**, 841 (1969).
[7] В.П. Силин, А.А. Рухадзе. *Электромагнитные свойства плазмы и плазмоподобных сред* (М., Госатомиздат, 1961).
[8] М.И. Хейфец. ФТТ, **7**, 1642 (1965).


Редактор Л.В. Шаронова

## Local optical oscillations near point and linear defects in semiconductors

*F.G. Bass, V.L. Falko, S.I. Khankina*

Institute of Radiophysics and Electronics, Kharkov, the Ukraine

A theory of local oscillations near point and linear defects in semiconductors has been built. In the opical range, transverse local oscillations are present in the crystal having a light defect while longitudinal ones exist in the crystal having a heavy defect. These oscillations take place due to the Coulomb interaction of the defect with lattice ions and conduction electrons. It is show that the availability of the electron subsystem leads to an exponential drop of the oscillation amplitude at macroscopic distances having the scale of the length of the transverse electromagnetic wave in the medium or that of the Debye radius.