

КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА НА $2LO$ -ФОНОНАХ

Л. Е. Семенова*, К. А. Прохоров

Институт общей физики Российской академии наук
117942, Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 ноября 2000 г.

Представлена теория резонансного комбинационного рассеяния света на $2LO$ -фононах в полупроводниковых кристаллах. В качестве промежуточных состояний рассматриваются экситоны Ванье. Аналитически получены выражения, позволяющие учитывать вклады различных цепочек промежуточных состояний. Показано, что сечение рассеяния слабо зависит от волнового вектора, переданного фононной системе. Теоретическая модель позволяет вычислять сечение рассеяния при энергии кванта возбуждающего излучения ниже уровня экситонных резонансов.

PACS: 78.30.-j

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование резонансного комбинационного рассеяния света вблизи края собственного поглощения кристалла представляет значительный интерес, так как приводит к различным особенностям в спектре рассеяния. Одной из таких особенностей является чередующийся характер изменения сечений рассеяния с увеличением числа возбуждаемых фононов в кристалле CdS [1, 2]. При этом доминируют по интенсивности линии четных порядков. В работе [1] эта закономерность объяснялась в рамках теоретической модели, учитывающей экситоны в качестве промежуточных состояний. Взаимодействие экситонов с фононами рассматривалось через механизм внутризонного фреilihовского электрон-фононного взаимодействия. Согласно этой модели, микроскопический механизм комбинационного рассеяния с излучением n фононов может быть описан следующей последовательностью процессов: 1) поглощение фотона возбуждающего излучения, сопровождающееся переходом электронной системы в экситонное состояние; 2) переход между экситонными состояниями с последовательным излучением n фононов; 3) излучение фотона рассеянного света и возвращение электронной системы в основное состояние. Нерегулярный характер интенсивностей в спектрах комбинационного рассеяния обусловлен

различным чередованием промежуточных экситонных состояний s - и p -типов. Это следует из разложения матричного элемента фреilihовского взаимодействия по волновому вектору фонона \mathbf{q}_p :

$$F_{\lambda'\lambda} \propto \langle \chi_{cv}^{\lambda'} | \hat{q}_p \mathbf{r} | \chi_{cv}^{\lambda} \rangle + \frac{i}{2q_p} \frac{m_e^* - m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \times \\ \times \langle \chi_{cv}^{\lambda'} | (\mathbf{q}_p \cdot \mathbf{r})^2 | \chi_{cv}^{\lambda} \rangle + \dots, \quad (1)$$

где \hat{q}_p — единичный вектор в направлении волнового вектора фонона, m_e^* и m_h^* — эффективные массы электрона и дырки; $\chi_{cv}^{\lambda}(r)$ — водородная волновая функция; λ обозначает набор квантовых чисел, характеризующих относительное электронно-дырочное движение. Первый исчезающий член, соответствующий дипольному приближению, описывает переходы между s - и p -экситонными состояниями. Переходы между s -состояниями соответствуют второму (квадрупольному) члену в разложении (1). Так как дипольный переход из основного состояния разрешен только в s -экситонное состояние, то нечетные порядки обязательно включают в цепочку промежуточных состояний процесс рассеяния одинаковой четности (s - s для $1LO$, s - p - s - s для $3LO$). Следовательно, сечение рассеяния таких процессов содержит множитель, который в случае близких по величине эффективных масс электрона и дырки приводит к нерегулярному распределению интенсивности многофононных линий.

Многофононное комбинационное рассеяние рас-

*E-mail: semenov@sci.lebedev.ru

сма тривалось в ряде работ [1, 3–5]. Однако в настоящее время нет полной теории многофононного рассеяния света с учетом экситонных эффектов. В предлагаемой работе представлена теоретическая модель комбинационного рассеяния света на $2LO$ -фононах при энергии кванта возбуждающего излучения вблизи экситонных уровней.

2. ТЕОРИЯ

2.1. Матричные элементы

Вероятность процесса двухфононного комбинационного рассеяния света описывается в четвертом порядке теории возмущений [6]:

$$W_{2LO}^{RS} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_f \left| \sum_{a,b,c} \frac{\langle f | \hat{H}_{ER} | c \rangle \langle c | \hat{H}_{EL} | b \rangle \langle b | \hat{H}_{EL} | a \rangle \langle a | \hat{H}_{ER} | i \rangle}{(E_c - \hbar\omega_S)(E_b + \hbar\omega_p - \hbar\omega_L)(E_a - \hbar\omega_L)} \right|^2 \delta(\omega_L - \omega_S - 2\omega_p), \quad (2)$$

где $|i\rangle$ и $|f\rangle$ — начальное и конечное состояния; $|a\rangle$, $|b\rangle$ и $|c\rangle$ — промежуточные виртуальные состояния; ω_L , ω_S и ω_p — частоты соответственно возбуждающего излучения, рассеянного света и решеточного колебания; \hat{H}_{ER} и \hat{H}_{EL} — гамильтонианы электрон-фотонного и электрон-фононного взаимодействий. При резонансном комбинационном рассеянии частоты возбуждающего излучения и рассеянного света близки к ширине запрещенной зоны, поэтому процесс рассеяния можно рассматривать в рамках двухзонной модели.

Учитывая экситоны Ванье в качестве промежуточных виртуальных состояний электронной системы, запишем матричный элемент перехода из основного состояния в экситонное при поглощении кванта возбуждающего излучения в дипольном приближении [7]:

$$\langle a | \hat{H}_{ER} | i \rangle = \frac{e}{m n_L} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_L}} N_L^{1/2} (2\pi)^{3/2} \hat{\epsilon}_\alpha^L \pi_{cv}^\alpha \chi_{cv}^{\lambda_a^*}(0) \delta(\mathbf{K}_a - \mathbf{q}_L), \quad (3)$$

где e и m — заряд и масса электрона; $\hat{\epsilon}_L$, \mathbf{q}_L и N_L — поляризация, волновой вектор и плотность фотонов возбуждающего излучения; n_L — коэффициент преломления; \mathbf{K}_a — волновой вектор экситона; π_{cv} — междозонный матричный элемент оператора импульса электрона. Здесь и далее индексы L и S соответствуют возбуждающему излучению и рассеянному свету. Как можно видеть из выражения (3), дипольный переход разрешен только в s -экситонное состояние.

Матричный элемент внутрizonного фреilihовского экситон-решеточного взаимодействия имеет вид [1, 8]

$$\langle b | \hat{H}_{EL} | a \rangle = \gamma_F V^{-1/2} (n_p + 1)^{1/2} \delta(\mathbf{K}_b + \mathbf{q}_p - \mathbf{K}_a) P_{\lambda_b \lambda_a}(\mathbf{q}_p), \quad (4)$$

где

$$P_{\lambda_b \lambda_a}(\mathbf{q}_p) = \langle \chi_{cv}^{\lambda_b} | i q_p^{-1} (\exp(-i\alpha_e \mathbf{q}_p \cdot \mathbf{r}) - \exp(i\alpha_h \mathbf{q}_p \cdot \mathbf{r})) | \chi_{cv}^{\lambda_a} \rangle, \quad (5)$$

$$\gamma_F = e \sqrt{2\pi\hbar\omega_p (\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1})}. \quad (6)$$

Здесь ϵ_∞ и ϵ_0 — высокочастотная и низкочастотная диэлектрические проницаемости; V — объем кристалла; n_p — число фононов. Параметр $\alpha_{e(h)}$ определяется как $\alpha_{e(h)} = m_{h(e)}^* / (m_h^* + m_e^*)$.

Подставляя матричные элементы (3) и (4) в (2) и заменяя суммы по волновым векторам фононов интегралами, получим [1, 9]

$$W_{2LO}^{RS} = \frac{e^4 N_L (n_p + 1)^2}{2m^4 n_L^2 n_S^2 \omega_L \omega_S} \int |\hat{\epsilon}_\alpha^L \hat{\epsilon}_\beta^S \gamma_F^2 \pi_{cv}^\alpha \pi_{vc}^\beta \{ \alpha(\mathbf{q}_p, \mathbf{q}_L - \mathbf{q}_S - \mathbf{q}_p) + \alpha(\mathbf{q}_L - \mathbf{q}_S - \mathbf{q}_p, \mathbf{q}_p) \}|^2 \delta(\omega_L - \omega_S - 2\omega_p) d\mathbf{q}_p, \quad (7)$$

где

$$\alpha(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} \frac{\chi_{cv}^{\lambda_3}(0) \left\langle \chi_{cv}^{\lambda_3} \left| \frac{i}{q'} (\exp(-i\alpha_e \mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}) - \exp(i\alpha_h \mathbf{q}' \cdot \mathbf{r})) \right| \chi_{cv}^{\lambda_2} \right\rangle}{(E_{\lambda_3} - \hbar\omega_S) \left(E_{\lambda_2} + \frac{\hbar^2 q^2}{2M} + \hbar\omega_p - \hbar\omega_L \right)} \times \left\langle \chi_{cv}^{\lambda_2} \left| \frac{i}{q} (\exp(-i\alpha_e \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) - \exp(i\alpha_h \mathbf{q} \cdot \mathbf{r})) \right| \chi_{cv}^{\lambda_1} \right\rangle \chi_{cv}^{\lambda_1^*}(0) (E_{\lambda_1} - \hbar\omega_L)^{-1}. \quad (8)$$

Здесь $M = m_e^* + m_h^*$.

2.2. Метод функции Грина

При вычислении $\alpha(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ значительную трудность представляет суммирование по всем промежуточным экситонным состояниям дискретного и непрерывного спектров. Если частота возбуждающего излучения меньше частоты экситонного резонанса, $E_{1S} > \hbar\omega_L$, то эту проблему можно решить, используя метод функции Грина [10, 11]. В этом случае сумму по всем промежуточным s -экситонным состояниям можно записать в следующем виде [11]:

$$\sum_{\lambda} \frac{\chi_{cv}^{\lambda}(\mathbf{r})\chi_{cv}^{\lambda*}(0)}{E_{\lambda} - \hbar\omega} = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2 r} \Gamma(1 - \kappa) W_{\kappa, 1/2} \left(\frac{2r}{\kappa a} \right), \quad (9)$$

где μ — приведенная масса экситона ($\mu^{-1} = m_e^{*-1} + m_h^{*-1}$); $\Gamma(z)$ — гамма-функция; $W_{\kappa, 1/2}(z)$ — функция Уиттекера; $\kappa = \sqrt{R/(E_g - \hbar\omega)}$; R и a — энергия связи и боровский радиус экситона; E_g — ширина запрещенной зоны. Применяя метод функции Грина, вычислим функцию

$$f_{\lambda}(\mathbf{q}) = \sum_{\lambda_3} \frac{\chi_{cv}^{\lambda_3}(0) \langle \chi_{cv}^{\lambda_3} | iq^{-1} (\exp(-i\alpha_e \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) - \exp(i\alpha_h \mathbf{q} \cdot \mathbf{r})) | \chi_{cv}^{\lambda} \rangle}{E_{\lambda_3} - \hbar\omega_S}. \quad (10)$$

С учетом соотношения (9) выражение (10) примет вид

$$f_{\lambda}(\mathbf{q}) = i \frac{\mu}{2\pi q \hbar^2} \Gamma(1 - \kappa_S) \int \chi_{cv}^{\lambda}(\mathbf{r}) (\exp(-i\alpha_e \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) - \exp(i\alpha_h \mathbf{q} \cdot \mathbf{r})) W_{\kappa_S, 1/2} \left(\frac{2r}{\kappa_S a} \right) \frac{d\mathbf{r}}{r}. \quad (11)$$

Для вычисления интеграла (11) используем разложение плоской волны по сферическим функциям [12]:

$$e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} j_{\ell}(qr) Y_{\ell m}(\vartheta_q, \varphi_q) Y_{\ell m}^*(\vartheta, \varphi), \quad (12)$$

где $j_{\ell}(z)$ — сферическая функция Бесселя, $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$ ($Y_{\ell m}(\vartheta_q, \varphi_q)$) означает сферическую функцию от полярного угла и азимута направления вектора \mathbf{r} (\mathbf{q}) относительно фиксированной системы координат. Далее запишем волновую функцию относительного электронно-дырочного движения как $\chi_{cv}^{\lambda}(\mathbf{r}) = Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) R_{\lambda}(r)$ [12] и, учитывая ортогональность сферических функций,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{\ell m}^*(\vartheta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}, \quad (13)$$

найдем интеграл по угловым переменным:

$$f_{\lambda}(\mathbf{q}) = i^{\ell+1} \frac{2\mu}{\hbar^2 q} \Gamma(1 - \kappa_S) Y_{\ell m}(\vartheta_q, \varphi_q) \int_0^{\infty} W_{\kappa_S, 1/2} \left(\frac{2r}{\kappa_S a} \right) R_{\lambda}(r) \{ (-1)^{\ell} j_{\ell}(\alpha_e qr) - j_{\ell}(\alpha_h qr) \} r dr. \quad (14)$$

Подставляя радиальные функции

$$R_{n\ell}(\rho) = \frac{2}{\sqrt{a^3} n^{\ell+2} (2\ell+1)!} \sqrt{\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}} (2\rho)^{\ell} \exp\left(-\frac{\rho}{n}\right) F\left(-n+\ell+1, 2\ell+2, \frac{2\rho}{n}\right) \quad (15)$$

и

$$R_{k\ell}(\rho) = \frac{2k \exp(\pi/2k) |\Gamma(\ell+1 - ik^{-1})|}{\sqrt{V} (2\ell+1)!} (2k\rho)^{\ell} \exp(-ik\rho) F\left(\frac{i}{k} + \ell+1, 2\ell+2, 2ik\rho\right) \quad (16)$$

для дискретной и непрерывной частей спектра ($\rho = r/a$) [12], получим

$$f_\lambda(\mathbf{q}) = i^{\ell+1} \frac{2\mu}{\hbar^2 q} \Gamma(1 - \kappa_S) \frac{Y_{\ell m}(\vartheta_q, \varphi_q)}{(2\ell + 1)!} \sqrt{a} \begin{cases} C_n \{(-1)^\ell A_\ell(n, \alpha_e qa) - A_\ell(n, \alpha_h qa)\}, & \lambda = (n\ell m), \\ C_k \left\{(-1)^\ell A_\ell\left(\frac{i}{k}, \alpha_e qa\right) - A_\ell\left(\frac{i}{k}, \alpha_h qa\right)\right\}, & \lambda = (k\ell m), \end{cases} \quad (17)$$

где введены обозначения

$$A_\ell(n, Q) = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\rho}{n}\right) F\left(-n + \ell + 1, 2\ell + 2, \frac{2\rho}{n}\right) W_{\kappa_S, 1/2}\left(\frac{2\rho}{\kappa_S}\right) j_\ell(Q\rho) \rho^{\ell+1} d\rho, \quad (18)$$

$$C_n = \frac{2^{\ell+1}}{n^{\ell+2}} \sqrt{\frac{(n + \ell)!}{(n - \ell - 1)!}}, \quad (19)$$

$$C_k = \sqrt{\frac{a^3}{V}} (2k)^{\ell+1} \exp\left(\frac{\pi}{2k}\right) \left| \Gamma\left(\ell + 1 - \frac{i}{k}\right) \right|. \quad (20)$$

При вычислении интеграла (18) мы использовали соотношение для функции Бесселя [13]

$$j_\ell(z) = \frac{1}{z} \sum_{\nu=0}^{\ell} \frac{(\ell + \nu)!}{\nu!(\ell - \nu)!} \frac{1}{(2z)^\nu} \operatorname{Re}(i^{\ell+1-\nu} e^{-iz}) \quad (21)$$

и интегральное представление функции Уиттекера [14]

$$W_{\kappa, 1/2}(z) = \frac{z e^{-z/2}}{\Gamma(1 - \kappa)} \int_0^\infty e^{-zt} \left(\frac{1+t}{t}\right)^\kappa dt. \quad (22)$$

Подставляя выражения (21) и (22) в (18) и учитывая, что преобразование Лапласа для гипергеометрической функции имеет вид [14]

$$\int_0^\infty e^{-s\rho} F(a, c; k\rho) \rho^{b-1} d\rho = \frac{\Gamma(b)}{s^b} F\left(a, b; c; \frac{k}{s}\right), \quad (23)$$

получим

$$A_\ell(n, Q) = \frac{2\kappa_S^4}{Q^{\ell+1} \Gamma(1 - \kappa_S)} I_\ell(Q, \kappa_S, n), \quad (24)$$

где

$$I_\ell(Q, \kappa_S, n) = \frac{1}{2^{\ell+2} \kappa_S^3} \times \\ \times \sum_{\nu=0}^{\ell} \frac{(\ell + \nu)!}{\nu!} (\ell + 1 - \nu) (\kappa_S Q)^{\ell-\nu} \operatorname{Re} \left\{ i^{\ell+1-\nu} \int_0^\infty \left(\frac{1+t}{t}\right)^{\kappa_S} \left[t + \frac{1}{2} + \frac{\kappa_S}{2n} + i \frac{\kappa_S Q}{2} \right]^{-\ell-2+\nu} \times \right. \\ \left. \times F\left(-n + \ell + 1, \ell + 2 - \nu; 2\ell + 2; \frac{\kappa_S n^{-1}}{t + \frac{1}{2} + \frac{\kappa_S}{2n} + i \frac{\kappa_S Q}{2}}\right) dt \right\}. \quad (25)$$

Таким образом, функция $f_\lambda(q)$ будет иметь вид

$$f_\lambda(\mathbf{q}) = \frac{\kappa_S^4}{R\sqrt{a}} \frac{Y_{\ell m}(\vartheta_q, \varphi_q)}{(2\ell + 1)!} \begin{cases} \frac{2^{\ell+2}}{n^{\ell+2}} \sqrt{\frac{(n + \ell)!}{(n - \ell - 1)!}} J_\ell(Q, \kappa_S, n), & \lambda = (n\ell m), \\ \sqrt{\frac{a^3}{V}} 2^{\ell+2} k^{\ell+1} \exp\left(\frac{\pi}{k}\right) \left| \Gamma\left(\ell + 1 - \frac{i}{k}\right) \right| J_\ell\left(Q, \kappa_S, \frac{i}{k}\right), & \lambda = (k\ell m), \end{cases} \quad (26)$$

где

$$J_\ell(Q, \kappa_S, n) = \frac{i^{\ell+1}}{Q} \left\{ (-1)^\ell \frac{I_\ell(\alpha_e Q, \kappa_S, n)}{(\alpha_e Q)^{\ell+1}} - \frac{I_\ell(\alpha_h Q, \kappa_S, n)}{(\alpha_h Q)^{\ell+1}} \right\}. \quad (27)$$

2.3. Сечение рассеяния

Принимая во внимание полученные результаты, выражение (8) запишем в следующем виде:

$$\alpha(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \frac{4\kappa_S^4 \kappa_L^4}{\pi R^3 a} \sum_\ell P_\ell(\cos \gamma) \alpha_\ell(qa, q'a), \quad (28)$$

$$\alpha_\ell(Q, Q') = \frac{2^{2\ell}}{(2\ell+1)!(2\ell)!} \left\{ \sum_n \frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!n^{2\ell+4}} \frac{J_\ell(Q', \kappa_S, n) J_\ell(Q, \kappa_L, n)}{\eta(\omega_L, Q) - n^{-2}} + \int \left| \frac{k}{1 - \exp(-2\pi/k)} \right| \prod_{s=1}^{\ell} (s^2 k^2 + 1) \frac{J_\ell(Q', \kappa_S, ik^{-1}) J_\ell(Q, \kappa_L, ik^{-1})}{\eta(\omega_L, Q) + k^2} dk \right\}, \quad (29)$$

где $\eta(\omega_L, Q) = R^{-1}(E_g + \hbar^2 Q^2/2Ma^2 + \hbar\omega_p - \hbar\omega_L)$, $Q = qa$, $P_\ell((\mathbf{q}' \cdot \mathbf{q})/q'q)$ — полином Лежандра. Как видно из выражения (29), $\ell = 0$ соответствует цепочке промежуточных состояний $s-s-s$, $\ell = 1$ — цепочке $s-p-s$ и т. д.

Дифференциальное поперечное сечение двухфононного комбинационного рассеяния в этом случае можно записать в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 n_S \omega_S [n_p + 1]^2 V}{\pi^5 m^4 c^4 a^5 n_L \omega_L} \iint \left| C \kappa_S^4 \kappa_L^4 \sum_\ell P_\ell(\cos \gamma) [\alpha_\ell(Q, |\mathbf{Q}_{LS} - \mathbf{Q}|) + \alpha_\ell(|\mathbf{Q}_{LS} - \mathbf{Q}|, Q)] \right|^2 Q^2 dQ do, \quad (30)$$

где $C = \hat{\varepsilon}_\alpha^L \hat{\varepsilon}_\beta^S \pi_{cv}^\alpha \pi_{vc}^\beta \gamma_f^2 / R^3$; $do = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$; $\mathbf{Q}_{LS} = (\mathbf{q}_L - \mathbf{q}_S)a$ — волновой вектор, переданный фононной системой; γ — угол между векторами $\mathbf{Q} = \mathbf{q}a$ и $\mathbf{Q}_{LS} - \mathbf{Q}$.

3. ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим зависимость сечения рассеяния от величины волнового вектора \mathbf{Q}_{LS} , переданного фононной системе. Волновые векторы фотонов малы по сравнению с размерами зоны Бриллюэна. Так, для резонансного комбинационного рассеяния на $2LO$ -фононах при геометрии рассеяния «назад» в кристалле CdS $Q_{LS} \approx 0.2$. Чтобы оценить вклады фононов с малыми волновыми векторами ($Q \ll 1$), рассмотрим выражение (18). Так как функция Бесселя от малого аргумента имеет вид [12]

$$j_\ell(z) \approx \frac{z^\ell}{(2\ell+1)!!}, \quad (31)$$

то, следовательно, при $Q \rightarrow 0$ величины $A_\ell(n, Q)$ и $I_\ell(Q, \kappa_S, n)/Q^{\ell+1}$ зависят от Q как Q^ℓ . Отсюда при $Q, Q' \ll 1$ имеем $\alpha_\ell(Q, Q') \propto (QQ')^{\ell-1}$ для $\ell \geq 1$ ($\alpha_0(Q, Q') \propto QQ'$). Таким образом, в предельном случае $Q, Q' \rightarrow 0$ только цепочка промежуточных

состояний $s-p-s$ дает вклад в рассеяние, так как $\alpha_1(Q, Q') \rightarrow \text{const}$. При этом вклад области $Q \ll 1$ в интеграл (30) будет мал. Таким образом, основную роль в рассеянии играют фононы с $Q, Q' \gg Q_{LS}$. Это приводит к слабой зависимости сечения рассеяния от волнового вектора, переданного фононной системе. Этот вывод хорошо согласуется с результатами исследований многофононного рассеяния в работе [1], в которой экспериментально было обнаружено, что ниже края собственного поглощения сечение рассеяния многофононных процессов четных порядков не зависит от величины волнового вектора, переданного фононной системе. Следовательно, в этом случае при вычислении сечения рассеяния можно предположить, что в процессе комбинационного рассеяния рождаются два фонона с равными по величине и противоположно направленными волновыми векторами, т. е.

$$\alpha(\mathbf{q}_{LS} - \mathbf{q}, \mathbf{q}) \approx \alpha(\mathbf{q}, \mathbf{q}_{LS} - \mathbf{q}) \approx \alpha(\mathbf{q}, -\mathbf{q}). \quad (32)$$

Заметим, что область, в которой применимо приближение (31), расширяется по мере удаления от резонанса. Это ясно видно на рис. 1, на котором изображены зависимости $I_1(Q, \kappa_S, 2)/Q^2$ от Q при $\kappa_S = 0.9$ и 0.2 . Эта особенность вытекает из соотношения (18). Действительно, подынтегральное выражение включает функцию $\exp[-(\rho/\kappa_S)(1 + i\kappa_S Q)]$, которая разлагается в ряд по малому параметру $\kappa_S Q \ll 1$. Следовательно, зависимость сечения рассеяния от волнового вектора $\mathbf{q}_L - \mathbf{q}_S$ уменьшается по мере удаления от резонанса.

Из выражения (14) следует, что при близких по величине эффективных массах электрона и дырки вклад в рассеяние дают только состояния с нечетными ℓ , которым соответствуют цепочки промежуточных состояний $s-p-s$, $s-f-s$ и т.д. К тому же с увеличением ℓ вклад соответствующих промежуточных состояний уменьшается. Следовательно, при $m_e^* \approx m_h^*$ основной вклад вносит механизм рассеяния, которому соответствует цепочка промежуточных состояний $s-p-s$. Однако, если эффективные массы электрона и дырки значительно различаются, необходимо учитывать также и переходы между s -экситонными состояниями ($s-s-s$). На рис. 2 показана зависимость относительных вкладов Λ_ℓ для двух цепочек промежуточных состояний, $s-p-s$ (Λ_1) и $s-s-s$ (Λ_0), в сечение рассеяния от эффективных масс электрона и дырки, где

$$\Lambda_\ell = \int |\alpha_\ell(Q, Q)|^2 Q^2 dQ. \quad (33)$$

На рисунке видно, что при $m_e^*/m_h^* > 0.5$ вклад переходов между s -экситонными состояниями пренебрежимо мал ($\Lambda_0 \ll \Lambda_1$), но уже при $m_e^*/m_h^* \approx 0.2$ вклады Λ_1 и Λ_0 оказываются величинами одного порядка, а при значительном различии эффективных масс ($m_e^*/m_h^* < 0.15$) значение Λ_0 превышает Λ_1 .

С помощью развитой здесь теоретической модели мы оценили сечение комбинационного рассеяния света на $2LO$ -фононах в кристалле CdS. При этом учитывались вклады от двух цепочек промежуточных состояний: $s-s-s$ ($\ell = 0$) и $s-p-s$ ($\ell = 1$). Расчеты были выполнены для такой же геометрии, в которой наблюдалось многофононное комбинационное рассеяние в работе [1]. В этом случае вклад в рассеяние дают экситонные серии A , B и C . Для расчета использовались следующие параметры кристалла: ширина запрещенной зоны $E_{gA} = 2.579$ эВ, $E_{gB} = 2.596$ эВ и $E_{gC} = 2.66$ эВ; энергия связи экситона $R_A = 0.03$ эВ, $R_B = 0.028$ эВ и $R_C = 0.026$ эВ [15]; сила осциллятора для $1S$ -экситонного состояния $4\pi f_A = 0.0125$,

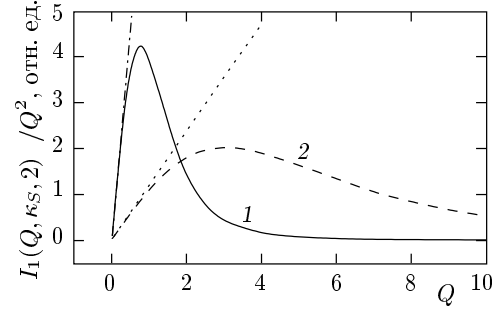


Рис. 1. Зависимости $I_1(Q, \kappa_S, 2)/Q^2$ от волнового вектора фотона Q для значений $\kappa_S = 0.9$ (кривая 1) и 0.2 (кривая 2). Пунктирная и штрихпунктирная линии описывают соответствующие приближенные функции $f(\kappa_S, 2)Q$, где $I_1(Q, \kappa_S, n)/Q^2 \xrightarrow{Q \rightarrow 0} f(\kappa_S, n)Q$

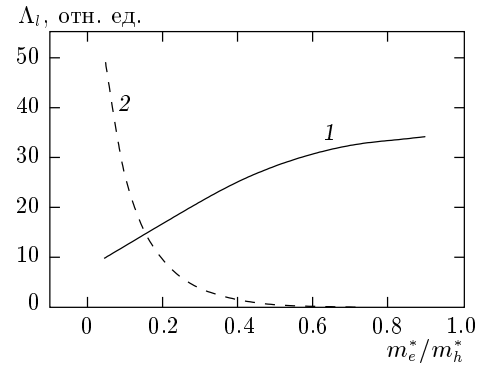


Рис. 2. Зависимость относительных вкладов Λ_ℓ двух цепочек промежуточных состояний $s-p-s$ (Λ_1 , кривая 1) и $s-s-s$ (Λ_0 , кривая 2) в сечение рассеяния от отношения эффективных масс электрона и дырки m_e^*/m_h^*

$4\pi f_B = 0.0075$ и $4\pi f_C = 0.005$ для экситонных серий A , B и C [16]; $\hbar\omega_p = 305$ см $^{-1}$; $\epsilon_0 = 9.3$; $\epsilon_\infty = 5.2$ [17]; $m_e^*/m_h^* = 0.2$ [8]. Вычисленная таким образом эффективность двухфононного комбинационного рассеяния $S_{eff} = V^{-1}d\sigma/d\Omega$ как функция длины волны возбуждающего излучения представлена на рис. 3.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построена теоретическая модель резонансного комбинационного рассеяния света на $2LO$ -фононах, позволяющая вычислять сечение двухфононного комбинационного рассеяния при частоте возбуждающего излучения меньше частоты экситонных переходов. Показано, что ниже края фундаментального поглощения зависимость сечения рассеяния от

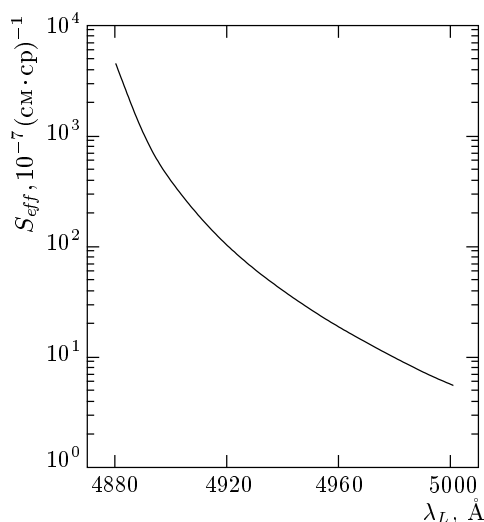


Рис. 3. Эффективность комбинационного рассеяния света S_{eff} на $2LO$ -фононах в кристалле CdS как функция длины волн возбуждающего излучения

волнового вектора $\mathbf{q}_L - \mathbf{q}_S$, переданного фононной системе, слабая и уменьшается по мере удаления от резонанса. Получены аналитические выражения, позволяющие учитывать вклады различных цепочек промежуточных состояний. Показано, что при близких по величине эффективных массах электрона и дырки основной вклад в рассеяние вносит цепочка промежуточных состояний $s-p-s$, но если m_e^* и m_h^* значительно различаются, то необходимо также учитывать переходы между s -экситонными состояниями. С помощью разработанной теоретической модели вычислена эффективность комбинационного рассеяния на $2LO$ -фононах при различных длинах волн возбуждающего излучения для кристалла CdS.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 98-02-17607).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Клочихин, С. А. Пермогоров, А. Н. Резницкий, ЖЭТФ **71**, 2230 (1976).
2. R. H. Callender, S. S. Sussman, M. Selders et al., Phys. Rev. B **7**, 3788 (1973).
3. A. K. Ganguly and J. L. Birman, Phys. Rev. **162**, 806 (1967).
4. А. А. Клочихин, Я. В. Морозенко, С. А. Пермогоров, ФТТ **20**, 3557 (1978).
5. Е. Л. Ивченко, М. М. Собиров, ФТТ **28**, 2023 (1986).
6. Р. Лоудон, *Квантовая теория света*, Мир, Москва (1976), с. 406.
7. М. М. Denisov and V. P. Makarov, Phys. Stat. Sol. B **56**, 9 (1973).
8. R. M. Martin, Phys. Rev. B **4**, 3676 (1971).
9. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, Мир, Москва (1966), с. 41.
10. L. Hostler, J. Math. Phys. **5**, 591 (1964).
11. G. D. Mahan, Phys. Rev. **170**, 825 (1968).
12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989), с. 133.
13. Г. Н. Ватсон, *Теория бесселевых функций*, Изд-во иностр. лит., Москва (1949).
14. Г. Бейтман, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, Наука, Москва (1965), с. 237.
15. F. Pradere, Thèse de doctorat d'état des sciences physiques, Université de Paris Sud (1973).
16. J. Jackel and H. Mahr, Phys. Rev. B **17**, 3387 (1978).
17. *Физические величины: Справочник*, под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова, Энергоатомиздат, Москва (1991), с. 478.