

СПЕКТР ЭКСИТОНОВ В МИКРОКРИСТАЛЛАХ СФЕРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ С УЧЕТОМ СИЛ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

Н. В. Ткач, В. А. Головацкий

Возможность создания на основе микрокристаллов сверхбыстродействующих приборов для оптической обработки сигналов, а также другие заманчивые перспективы использования физики размерно ограниченных образований в кристаллах стимулируют интенсивные исследования различных свойств полупроводниковых микрокристаллов.

Одним из объектов детального изучения является экситон (типа Ванье—Мотта) в полупроводниковом микрокристалле сферической формы. В работах [1-3] исследована зависимость энергетического спектра такого экситона от радиуса кристалла, при этом пренебрегалось поляризационными зарядами на границах полупроводникового кристалла.

Цель настоящей работы — исследовать зависимость экситонного спектра в сферическом микрокристалле с учетом не только размерного квантования, но и сил электростатического изображения. Предполагается, что экситон образован в кристалле сферической формы радиуса R и диэлектрической проницаемости ϵ , который помещен в среду с проницаемостью ϵ_c . Положение экситона удобно описывать в системе триангулярных координат [2] $r_1 = |r_e|$, $r_2 = |r_h|$, $r_3 = |r_e - r_h|$ с началом в центре сферы. Учитывая кинетическую энергию электрона и дырки, их взаимодействие между собой и с электростатическими изображениями, а также считая сферу непроницаемой для экситона, получим гамильтониан системы в виде

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{2}{r_1} \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{r_1^2 - r_2^2 + r_3^2}{r_1 r_3} \frac{\partial^2}{\partial r_1 \partial r_3} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \times \\ \times \left(\frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{2}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{r_2^2 - r_1^2 + r_3^2}{r_2 r_3} \frac{\partial^2}{\partial r_2 \partial r_3} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + \frac{2}{r_3} \frac{\partial}{\partial r_3} \right) - \frac{e^2}{\epsilon r_3} + \\ + \frac{\epsilon - \epsilon_c}{\epsilon + \epsilon_c} \frac{e^2}{2\epsilon} \left(\frac{r_1}{R^2 - r_1^2} + \frac{r_2}{R^2 - r_2^2} - \frac{r_1 + r_2}{\sqrt{R^4 + r_1^2 r_2^2 + (r_3^2 - r_1^2 - r_2^2) R^2}} \right) + V(r_1, r_2), \quad (1)$$

где

$$V(r, r_2) = \begin{cases} 0, & r_1 r_2 \leq R, \\ \infty, & r_1, r_2 > R, \end{cases} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Уравнение Шредингера с гамильтонианом (1) точно не решается, поэтому энергетический спектр для трех нижних уровней найдем вариационным методом. Следуя подходу, развитому в работе [1], пробные волновые функции будем выбирать из следующих соображений. Так как мы изучаем случай $\epsilon > \epsilon_c$, то потенциал сил изображений имеет характер отталкивания и, следовательно, качественно не существенно изменяет потенциал сферической ямы, поэтому для расчетов следует взять волновые функции, которые содержат характерные черты собственных функций экситона Ванье—Мотта в случае $R \rightarrow \infty$, а также собственные функции невзаимодействующих частиц в сферической потенциальной яме. Для трех нижних состояний такими могут быть те же, что использовались в работе [1]

$$\Psi_1 = \Psi_{1,1,1s}(r_1, r_2, r_3) = j_0(\pi r_1/R) j_0(\pi r_2/R) \exp(-r_3/a), \\ \Psi_2 = \Psi_{1,2,2s}(r_1, r_2, r_3) = j_0(\pi r_1/R) j_0(2\pi r_2/R) \exp(-r_3/\delta), \\ \Psi_3 = \Psi_{1,1,1p}(r_1, r_2, r_3) = j_1(\beta r_1/R) j_1(\beta r_2/R) \cos \gamma,$$

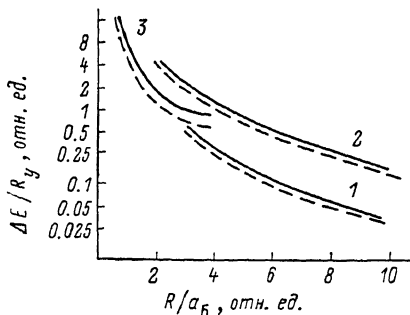
j — сферическая функция Бесселя; α, δ — вариационные параметры: $\cos \gamma = (r_1^2 + r_2^2 - r_3^2)/(2r_1 r_2)$; $j_1(\beta = 4.493) = 0$.

Все три функции удовлетворяют требованию ортонормированности, но при этом следует отметить, что если Ψ_1 и Ψ_2 хорошо определены для произвольных радиусов R , то выражение для Ψ_3 оправдано лишь для сравнительно малых значений R , так как в этой функции отсутствует множитель типа $\exp(-\alpha r_3)$, который обеспечивает связь электрона и дырки в экситон при больших значениях R . Включение же такого множителя в Ψ_3 привело бы к нарушению ортонормировки, что недопустимо.

Расчет зависимости энергетических уровней от радиуса микрокристалла выполняется путем минимизации функционалов

$$E_k = \langle H_k \rangle = \int_0^R dr_1 \int_0^R dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_3 r_1 r_2 r_3 \Psi_k H \Psi_k.$$

Результаты численных расчетов при значениях $\epsilon=20$ и $\epsilon_c=1$ приведены на рисунке (сплошные линии). Там же для сравнения изображены зависимости тех же уровней от R , рассчитанные в работе [1], без учета сил электростатического изображения (штриховые линии). Видно, что учет сил изображения качественно не изменяет



Зависимости сдвига энергетических уровней электронно-дырочной системы от радиуса кристалла.

1 — электрон и дырка в $1s$ -состоянии; 2 — электрон в $1s$ -, а дырка в $2s$ -состояниях (при $m_1=m_2$);
3 — электрон и дырка в $1p$ -состоянии.

характера зависимости от R энергетических уровней, но сдвигает их в область больших энергий. Для s -состояний величина сдвига максимальна в области $1 \leq R/a_B \leq 10$. По поводу сдвига p -состояния можно констатировать только то, что в исследуемой области значений R он несколько больший, чем для s -состояний в той же области. Это и понятно, так как в p -состоянии электрон и дырка оттесняются ближе к поверхности микрокристалла.

Список литературы

- [1] Kayanuma Y. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 14. P. 9797—9805.
- [2] Kayanuma Y. // Sol. St. Comm. 1986. V. 59. N 6. P. 405—408.
- [3] Эфрос Ал. Л., Эфрос А. Л. // ФТП. 1982. Т. 16. № 7. С. 1209—1214.

Черновицкий
государственный университет

Поступило в Редакцию
27 февраля 1990 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОЕМКОСТИ КРИСТАЛЛОВ $\text{Li}_2\text{V}_4\text{O}_7$

Н. П. Теханович, А. У. Шелег, Я. В. Бурак

Тетраборат лития ($\text{Li}_2\text{V}_4\text{O}_7$), пр. группа $I41cd$, $a=9.477 \text{ \AA}$, $c=10.286 \text{ \AA}$, является хорошим пьезоэлектрическим материалом, представляющим значительный интерес для использования его в акустоэлектронике [1, 2]. Кристаллы тетрабората лития отличаются большой радиационной устойчивостью и механической прочностью, а также широкой спектральной