

18. Gaida R. P., Tretyak V. I. Single-time form of the Fokker-type relativistic dynamics. I // Acta phys. pol. B.— 1980.— 11, N 7.— P. 509—522.
19. Dirac P. A. M. Generalized Hamiltonian dynamics // Can. J. Math.— 1950.— 2.— P. 129—148.
20. Droz-Vincent Ph. Two-body relativistic systems // Ann. Inst. H. Poincaré.— 1977.— A27, N 4.— P. 407—424.
21. Komar A. Space-time orbits for interacting relativistic particles: syntactic versus semantic observables // Phys. Rev. D.— 1978.— 18, N 10.— P. 3617—3623.
22. Todorov I. T. Constraint Hamiltonian mechanics of directly interacting relativistic particles // Lect. Notes Phys.— 1982.— 162.— P. 213—263.
23. Shanmugadhasan S. Canonical formalism for degenerate Lagrangians // J. Math. Phys.— 1973.— 14, N 6.— P. 677—687.
24. Клепиков Н. П., Шатний Ф. Н. Ковариантная механика и формы релятивистской динамики // Вестн. Моск. ун-та. Физика. Астрономия.— 1983.— 24, № 3.— С. 32—37.
25. Gomis J., Noel M., Pons J. M. Instant and front form realizations for N relativistic particles // Ann. Phys.— 1984.— 153, N 2.— P. 389—404.
26. Bakamjian B., Thomas L. H. Relativistic particle dynamics. II // Phys. Rev.— 1953.— 92, N 5.— P. 1300—1310.
27. Дуєряк А. А., Ключковський Ю. Б. Коваріантні двочастинкові світові лінії в релятивістській гамільтоновій механіці // Мат. методи і фіз.-мех. поля.— 1991.— Вип. 34.— С. 93—97.
28. Pryce M. H. L. The mass-centre in the restricted theory of relativity and its connection with the quantum theory of elementary particles // Proc. Roy. Soc. London.— 1948.— A195, N 1040.— P. 62—81.
29. Currie D. G., Jordan T. F., Sudarshan E. C. G. Relativistic invariance and Hamiltonian theories of interacting particles // Rev. Mod. Phys.— 1963.— 35, N 2.— P. 350—375.
30. Гайда, Р. П., Третьяк В. И. Лагранжианы прямых взаимодействий и гамильтоново описание системы частиц в различных формах релятивистской динамики.— Киев, 1982.— 40 с.— (Препр./АН УССР. Ин-т теорет. физики. № 82-87Р).

Інститут фізики конденсованих систем
АН України, Львів

Одержано 9.07.92

УДК 539.143.34

М. В. ТКАЧ, С. А. ОРЛОВСЬКИЙ

СПЕКТР ЕКСИТОНУ, ЛОКАЛІЗОВАНОГО БІЛЯ ПОВЕРХНІ РОЗДІЛУ СЕРЕДОВИЩ У ГЕТЕРОСИСТЕМІ

Самоузгодженим способом знайдено спектр поверхневого екситону, локалізованого на межі двох середовищ. Отримана залежність енергії зв'язку такого екситону для довільних співвідношень — оцінюють ефективних мас електрона і дірки та для довільних співвідношень між величинами діелектричних проникностей контактуючих кристалів. Показано, що за умовою $m_{\perp e}, m_{\perp h} \leq 3m_{\parallel}$, незалежно від величини діелектричної проникності зовнішнього середовища (ϵ_3) по відношенню до внутрішнього (ϵ_B), існує лише фаза об'ємних тривимірних екситонів. При $3m_{\parallel} < m_{\perp e}, m_{\perp h} \leq 25m_{\parallel}$ в області $\infty > \epsilon_3 > \epsilon_K$ існує фаза плоского екситону, а в області $\epsilon_K > \epsilon_3 > \epsilon_B$ — фаза об'ємного екситону. При $m_{\perp e}, m_{\perp h} > 25m_{\parallel}$ в області $\infty > \epsilon_3 > \epsilon_{K_1}$ існує фаза незв'язаних між собою, але зв'язаних зі своїми зображеннями електрона і дірки; в області $\epsilon_{K_1} > \epsilon_3 > \epsilon_{K_2}$ існує фаза плоского екситону і в області $\epsilon_{K_2} > \epsilon_3 > \epsilon_B$ — фаза об'ємного екситону.

Спектр квазічастинок в неоднорідних і гетероструктурах останнім часом є об'єктом інтенсивного дослідження як теоретичного, так і експериментального. Інтерес до такого типу задач зумовлений відкриттям нових ефектів та механізмів їх утворень, нехарактерних для гомогенних середовищ.

Задача про спектр екситону, локалізованого на межі розділу двох середовищ, належить до згаданого класу. Її вже частково розв'язано у працях [1, 2], де в адиабатичному наближенні варіаційним методом оцінено енергію основного стану, знайдено залежність цієї енергії від співвідношення діелектричних проникностей при різних значеннях ефективних мас електрона і дірки. Суттєвим обмеженням теорії [1, 2] є також те, що «плоскі» компоненти ефективних мас електрона і дірки вважаються рівними, тимчасом як у загальному вигляді вони можуть значно відрізнятися. Нарешті, теорія не містить жодної інформації про вищі енергетичні стани локалізованого екситону.

© М. В. Ткач, С. А. Орловський, 1993

У запропонованій статті самоузгодженим способом буде знайдено спектр екситону, локалізованого біля плоскої поверхні, яка розділяє кристал (діелектричною проникністю ϵ_b), де перебуває екситон, від кристалу з більшою діелектричною проникністю ϵ_a . Застосована комбінація варіаційного методу і теорії збурень дасть можливість послідовно розв'язати

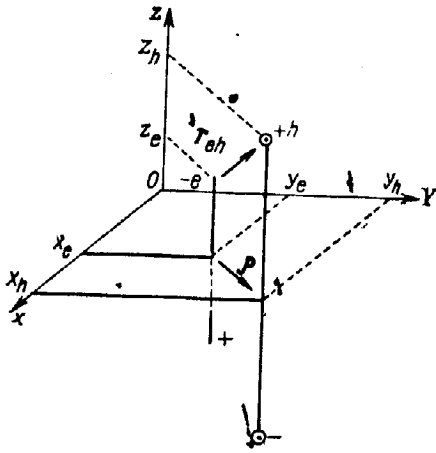


Рис. 1. Екситон біля плоскої межі зовнішнього середовища

квантово-механічну задачу про весь спектр у загальному вигляді при довільному співвідношенні ефективних мас електрона і дірки та їх компонент. Буде точно знайдено відстані електрона і дірки від поверхні розділу середовищ та між собою в залежності від співвідношення між діелектричними проникностями обох середовищ та від динамічних змінних системи.

Розгляньмо екситон, що складається з електрона (e) і дірки (h), які знаходяться в середовищі з діелектричною проникністю ϵ_b біля плоскої межі зовнішнього середовища, діелектрична проникність (ϵ_a) якого більша за ϵ_b . Виберемо декартову систему координат так, щоб площина XOY збігалася з площиною розділу,

а вісь OZ спрямуємо в середовище, де знаходиться екситон (рис. 1). З урахуванням потенціалів сил зображень гамільтоніан системи матиме вигляд

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\parallel e}^2}{2m_{\parallel e}} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\parallel h}^2}{2m_{\parallel h}} - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m_{\perp e} \partial z_e^2} - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m_{\perp h} \partial z_h^2} - \frac{e^2}{\epsilon_b r_{eh}} - \frac{\gamma e^2}{\epsilon_b z_e} - \frac{\gamma e^2}{\epsilon_b z_h} + \frac{4\gamma e^2}{\epsilon_b \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + (z_e - z_h)^2}}, \quad (1)$$

де $\gamma = \frac{\epsilon_b - \epsilon_a}{4(\epsilon_b + \epsilon_a)}$, перші чотири доданки описують кінетичну енергію відповідно плоскої (\parallel) і вертикальної (\perp) складових електрона (e) і дірки (h), а решта доданків послідовно відповідають потенціальним енергіям взаємодії: електрона з діркою, електрона зі своїм зображенням, дірки зі своїм і, нарешті, обох зарядів з чужими зображеннями.

Для знаходження енергетичного спектра і хвильових функцій цієї досить складної системи при розв'язуванні рівняння Шредінгера

$$H\Psi = E\Psi \quad (2)$$

застосуємо відомий з теорії атома гелію [3] комбінований підхід варіаційного методу з теорією збурень. Для цього, врахувавши очевидну симетрію системи та ввівши параметри екранування плоскої (α) та двох вертикальних (β_e і β_h) підсистем, запишемо гамільтоніан (1) у вигляді $H = H^0 + V$ де повний основний гамільтоніан містить три складових:

$$H^0 = H_{\parallel}^0 + H_{\perp e}^0 + H_{\perp h}^0, \quad (3)$$

з яких

$$H_{\parallel}^0 = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\parallel e}^2}{2m_{\parallel e}} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\parallel h}^2}{2m_{\parallel h}} - \frac{(1 - \alpha) e^2}{\epsilon_b \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2}}$$

— основний гамільтоніан плоскої підсистеми,

$$H_{\perp i}^0 = -\frac{\hbar^2 \partial^2}{2m_{\perp i} \partial z_i^2} - \frac{\gamma (1 - \beta_i) e^2}{\epsilon_b z_i} \quad (i = e, h) \quad (4)$$

— основні гамільтоніани вертикальних підсистем відповідно електрона ($i = e$) та дірки ($i = h$):

$$V = \frac{(1 - \alpha) e^2}{\epsilon_B \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2}} - \frac{\gamma \beta e^2}{\epsilon_B z_e} - \frac{\gamma \beta e^2}{\epsilon_B z_h} - \frac{e^2}{\epsilon_B r_{eh}} + \frac{4\gamma e^2}{\epsilon_B \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (5)$$

— потенціал збурення.

Тепер знайдемо точний розв'язок рівняння Шредінгера з основним гамільтоніаном (3) $H^0\Psi^0 = E^0\Psi^0$. Оскільки складові H_{1i}^0 комутують між собою та з H_{\parallel}^0 , то

$$E^0 = E_{\parallel}^0 + E_{1e}^0 + E_{1h}^0, \quad (6)$$

$$\Psi^0 = \Psi_{\parallel}^0 \Psi_{1e}^0 \Psi_{1h}^0, \quad (7)$$

де енергії і хвильові функції задовольняють рівняння

$$H_{\parallel}^0 \Psi_{\parallel}^0 = E_{\parallel}^0 \Psi_{\parallel}^0, \quad (8)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2 \partial^2}{2m_{1i} \partial z_i^2} - \frac{\gamma(1 - \beta_i) e^2}{\epsilon_B z_i} \right) \Psi_{1i}^0(z_i) = E_{1i}^0 \Psi_{1i}^0(z_i) \quad (i = e, h). \quad (9)$$

Точні розв'язки останніх двох рівнянь (8), (9) відомі з теорії атома водню [4] при $l = 0$, згідно з якою

$$E_{n_i}^0 = -\frac{\gamma^2 m_{1i} e^4 (1 - \beta_i)^2}{2\hbar^2 \epsilon_B^2 n_i^2} \quad (n_i = n_e, n_h = 1, 2, 3, \dots, \infty), \quad (10)$$

$$\Psi_{n_i}^0(z_i) = \frac{Z_i}{\sqrt{2n_i}} \left(\frac{2}{n_i a_{1i}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Z_i}{n_i a_{1i}}\right) F\left(1 - n_i, 2, \frac{Z_i}{n_i a_{1i}}\right), \quad (11)$$

де $a_{1i} = \frac{\hbar^2 \epsilon_B}{m_{1i} e^2 \gamma (1 - \beta_i)}$ — ефективні борівські радіуси, які характеризують відстані електрона ($i = e$) та дірки ($i = h$) відносно площини розділу середовищ; F — вироджена гіпергеометрична функція.

Тепер знайдемо точні розв'язки рівняння (8). Для цього перейдемо до нових змінних

$$R_{\parallel} = \frac{1}{2}(r_{\parallel e} + r_{\parallel h}), \quad \rho = r_{\parallel e} - r_{\parallel h} \quad (12)$$

та зручних параметрів

$$\mu_{\parallel} = \frac{m_{\parallel e} m_{\parallel h}}{m_{\parallel e} + m_{\parallel h}}, \quad m_{\parallel} = m_{\parallel e} + m_{\parallel h}, \quad \tilde{e} = e \sqrt{\frac{1 - \alpha}{\epsilon_B}},$$

які можна трактувати як плоскі компоненти відповідно приведені і ефективної маси екситону та ефективні величини обох зарядів його складових.

У цих змінних рівняння Шредінгера (8) матиме вигляд

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_{R_{\parallel}}^2}{8\mu_{\parallel}} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\rho}^2}{2\mu_{\parallel}} - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_{\parallel e}} - \frac{1}{m_{\parallel h}} \right) \nabla_{R_{\parallel}} \nabla_{\rho} - \frac{e^2}{\rho} \right] \Psi_{\parallel}^0(R, \rho) = E_{\parallel}^0 \Psi_{\parallel}^0(R, \rho). \quad (13)$$

Шукаючи функцію $\Psi_{\parallel}^0(R, \rho)$ так, щоб уникнути доданка з $(\nabla_{R_{\parallel}} \cdot \nabla_{\rho})$, як і для 3-вимірного екситону [5], знайдемо

$$\Psi_{\parallel}^0(R, \rho) = \exp\left[ik_{\parallel} \left(R + \frac{\rho}{2} \frac{m_{\parallel e} - m_{\parallel h}}{m_{\parallel e} + m_{\parallel h}} \right) \right] \Phi^0(\rho),$$

внаслідок чого отримано рівняння для E_{\parallel}^0 і Φ^0 :

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla_{\rho}^2}{2\mu_{\parallel}} - \frac{e^2}{\rho} \right) \Phi^0(\rho) = \left(E_{\parallel}^0 - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} \right) \Phi^0(\rho). \quad (14)$$

Рівняння (14) було точно розв'язано у праці Шіноди і Сугано [6], тому одержуємо енергетичний спектр і хвильові функції плоскої екситонної підсистеми в нульовому наближенні:

$$E_{\parallel n}^0(k_{\parallel}) = -\frac{\mu_{\parallel} e^4 (1-\alpha)^2}{2\hbar^2 \epsilon_b^2 \left(n + \frac{1}{2}\right)^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\parallel}} \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots, \infty); \quad (15)$$

$$\Phi_{nm}^0(\rho) = \left[\frac{(n-|m|)!}{\pi a_{\parallel}^2 \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 [(n+|m|)!]^2} \right]^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\rho}{a_{\parallel} \left(n + \frac{1}{2}\right)} + im\varphi\right) \times \\ \times \left[\frac{2\rho}{a_{\parallel} \left(n + \frac{1}{2}\right)} \right]^{|m|} L_{n+|m|}^{2|m|}\left(\frac{2\rho}{a_{\parallel} \left(n + \frac{1}{2}\right)}\right), \quad (16)$$

де $m = 0; \pm 1; \pm 2; \dots; \pm n$; — поліном Лагерра; $a_{\parallel} = \frac{\hbar^2 \epsilon_b}{\mu_{\parallel} e^2 (1-\alpha)}$ — ефективний борівський радіус плоского екситону.

Враховуючи формули (10), (11), (15), (16), отримуємо в основному наближенні спектр і хвильові функції досліджуваної системи

$$E_{n_e n_h k_{\parallel}}^0(\alpha, \beta_e, \beta_h) = \\ = -E \left\{ \frac{\mu_{\parallel} (1-\alpha)^2}{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2} + \gamma^2 \left[\frac{m_{\perp e} (1-\beta_e)^2}{n_e^2} + \frac{m_{\perp h} (1-\beta_h)^2}{n_h^2} \right] \right\} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\parallel} m_0}; \quad (17)$$

$$\Psi_{n_e n_h k_{\parallel}}^0(\mathbf{R}, \rho, z_e, z_h) = \exp\left[ik_{\parallel} \left(\mathbf{R} + \frac{\rho}{2} \frac{m_{\parallel e} - m_{\parallel h}}{m_{\parallel e} + m_{\parallel h}}\right)\right] \Phi_{nm}^0(\rho, \alpha) \times \\ \times \Psi_{n_e}^0(z_e, \beta_e) \Psi_{n_h}^0(z_h, \beta_h), \quad (18)$$

виражені через ефективний рідберг $E = m_0 e^4 / 2\hbar^2 \epsilon_b^2$ (m_0 — маса електрона у вакуумі) та варіаційні параметри α, β_e, β_h . Зазначимо, що надалі, починаючи з формули (17), всі маси вже фігурують лише як безрозмірні, виражені в одиницях m_0 .

Згідно з теорією [4], уточнений енергетичний спектр обчислюється шляхом мінімізації величини

$$E_{n_e n_h k_{\parallel}}(\alpha, \beta_e, \beta_h) = E_{n_e n_h k_{\parallel}}^0(\alpha, \beta_e, \beta_h) + \langle n_e n_h | V | n_e n_h \rangle \quad (19)$$

за всіма параметрами для кожної фіксованої сукупності квантових чисел зокрема. Проте у цій праці обмежимося такою мінімізацією лише основного рівня системи, що дозволить достатньо точно знайти його величину та дослідити залежність від параметрів системи ($m_e, m_h, \epsilon_s, \epsilon_b$). Знаючи значення параметрів $\alpha^0, \beta_e^0, \beta_h^0$, які мінімізують основний рівень, і використовуючи формули (17), (18), можемо також отримати прийнятну оцінку і для збуджених станів екситону.

Тепер знайдемо величину енергії основного рівня екситону. Для цього у формулі (17) покладемо $k_{\parallel} = 0, n = 0, n_e = n_h = 1$. Тоді з урахуванням (17) — (19) і явного вигляду хвильових функцій отримаємо

$$E_{0110}^0(\alpha, \beta_e, \beta_h) = -E \{ 4\mu_{\parallel} (1-\alpha)^2 + \gamma^2 [m_{\perp e} (1-\beta_e)^2 + m_{\perp h} (1-\beta_h)^2] \} + \\ + \frac{2 \cdot 8^3}{\pi a_{\parallel}^2 a_{\perp e}^3 a_{\perp h}^3} \frac{e^2}{\epsilon_b} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} d\rho \int_0^{\infty} dz_e \int_0^{\infty} dz_h \rho z_e^2 z_h^2 \times \\ \times \exp\left[-2\left(\frac{2\rho}{a_{\parallel}} + \frac{z_e}{a_{\perp e}} + \frac{z_h}{a_{\perp h}}\right)\right] \times \\ \times \left[\frac{1-\alpha}{\rho} - \frac{\gamma\beta_e}{z_e} - \frac{\gamma\beta_h}{z_h} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} + \frac{4\gamma}{\sqrt{\rho^2 + (z_e + z_h)^2}} \right].$$

Інтегрування з першими трьома доданками в квадратних дужках виконується точно. Для спрощення останнього інтеграла зручно зробити заміну $\rho = a_{\parallel} \mu_{\parallel} (1 - \alpha) t$, $z_e = a_{\perp e} \gamma m_{\perp e} (1 - \beta_e) v$, $z_h = a_{\perp h} \gamma m_{\perp h} (1 - \beta_h) u$ і виконати інтегрування за кутом φ . У результаті маємо

$$E_{0110}^0(\alpha, \beta_e, \beta_h) = -E \{4\mu_{\parallel} (1 - \alpha)^2 + \gamma^2 [m_{\perp e} (1 - \beta_e)^2 + m_{\perp h} (1 - \beta_h)^2]\} + \\ + 2E \{4\mu_{\parallel} (1 - \alpha)^2 - \gamma^2 [m_{\perp e} \beta_e (1 - \beta_e) + m_{\perp h} \beta_h (1 - \beta_h)]\} + \\ + 8^3 E (1 - \alpha)^2 (1 - \beta_e)^3 (1 - \beta_h)^3 \mu_{\parallel}^2 m_{\perp e}^3 m_{\perp h}^3 \gamma^6 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} t u^2 v^2 dt du dv \times \\ \times \left[\frac{4\gamma}{\sqrt{t^2 + (u+v)^2}} - \frac{1}{\sqrt{t^2 + (u-v)^2}} \right] \times \\ \times \exp \{-2[2\mu_{\parallel} (1 - \alpha)t + \gamma(m_{\perp e} (1 - \beta_e)u + m_{\perp h} (1 - \beta_h)v)]\}.$$

Зробивши перехід до сферичної системи координат $v = r \sin(\theta) \sin(\varphi)$, $u = r \sin(\theta) \cos(\varphi)$, $t = r \cos(\theta)$, виконавши інтегрування за радіальними змінними та зробивши заміну $\cos(\theta) = x_1$, $\cos(\varphi) = x_2$, знайдемо вираз енергії основного стану екситону у зручному для розрахунків на ЕОМ вигляді:

$$E_0 = E_{0110}^0(\bar{\alpha}, \bar{\beta}_e, \bar{\beta}_h) = -E \{\gamma^2 [m_{\perp e} (1 - \bar{\beta}_e^2) + m_{\perp h} (1 - \bar{\beta}_h^2)] - \\ - 4\mu_{\parallel} (1 - \bar{\alpha})^2\} + \frac{45}{2} E (1 - \bar{\alpha})^2 (1 - \bar{\beta}_e)^3 (1 - \bar{\beta}_h)^3 \mu_{\parallel}^2 m_{\perp e}^3 m_{\perp h}^3 \gamma^6 \times \\ \times \int_0^1 \int_0^1 \frac{f(x_1, x_2) dx_1 dx_2}{\varphi^7(x_1, x_2, \bar{\alpha}, \bar{\beta}_e, \bar{\beta}_h)}, \quad (20)$$

$$f(x_1, x_2) = x_1 (1 - x_1^2)^2 x_2^2 \sqrt{1 - x_2^2} \left[\frac{4\gamma}{\sqrt{1 + 2x_2(1 - x_1^2)} \sqrt{1 - x_2^2}} - \frac{1}{\sqrt{1 - 2x_2(1 - x_1^2)} \sqrt{1 - x_2^2}} \right];$$

$$\varphi(x_1, x_2, \bar{\alpha}, \bar{\beta}_e, \bar{\beta}_h) = \\ = \mu_{\parallel} (1 - \bar{\alpha}) x_1 + \gamma \frac{\sqrt{1 - x_1^2}}{2} [m_{\perp e} (1 - \bar{\beta}_e) x_2 + m_{\perp h} (1 - \bar{\beta}_h) \sqrt{1 - x_2^2}];$$

$\bar{\alpha}$, $\bar{\beta}_e$, $\bar{\beta}_h$ — значення варіаційних параметрів, які реалізують мінімум енергії і знаходяться як розв'язки системи рівнянь

$$8 + 45(1 - \beta_e)^3 (1 - \beta_h)^3 \mu_{\parallel}^2 m_{\perp e}^3 m_{\perp h}^3 \gamma^6 \int_0^1 \int_0^1 \frac{f(x_1, x_2) dx_1 dx_2}{\varphi^7(x_1, x_2, \alpha, \beta_e, \beta_h)} \times \\ \times \left[\frac{7\mu_{\parallel} (1 - \alpha) x_1}{2\varphi(x_1, x_2, \alpha, \beta_e, \beta_h)} + 1 \right] = 0, \\ 4\beta_e + 45(1 - \alpha)^2 (1 - \beta_e)^2 (1 - \beta_h)^3 \mu_{\parallel}^2 m_{\perp e}^3 m_{\perp h}^3 \gamma^4 \times \\ \times \int_0^1 \int_0^1 \frac{f(x_1, x_2) dx_1 dx_2}{\varphi^7(x_1, x_2, \alpha, \beta_e, \beta_h)} \left[\frac{7\gamma m_{\perp e} (1 - \beta_e) x_2 \sqrt{1 - x_1^2}}{2\varphi(x_1, x_2, \alpha, \beta_e, \beta_h)} - 3 \right] = 0, \quad (21) \\ 4\beta_h + 45(1 - \alpha)^2 (1 - \beta_e)^3 (1 - \beta_h)^2 \mu_{\parallel}^2 m_{\perp e}^3 m_{\perp h}^3 \gamma^4 \times \\ \times \int_0^1 \int_0^1 \frac{f(x_1, x_2) dx_1 dx_2}{\varphi^7(x_1, x_2, \alpha, \beta_e, \beta_h)} \left[\frac{7\gamma m_{\perp h} (1 - \beta_h) \sqrt{(1 - x_1^2)(1 - x_2^2)}}{2\varphi(x_1, x_2, \alpha, \beta_e, \beta_h)} - 3 \right] = 0.$$

Увівши величину $a = \hbar^2 \epsilon_{\parallel} / m_0 e^2$ з розмірністю відстані, характерної для кристала, в якому перебуває екситон, тепер можна записати вираз для

нормованої хвильової функції його внутрішнього основного стану

$$\Psi_0(\rho, z_e, z_h) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{8}{a^4} z_e z_h \mu_{\parallel} (1 - \bar{\alpha}) \gamma^3 [(1 - \bar{\beta}_e)(1 - \bar{\beta}_h) m_{\perp e} m_{\perp h}]^{\frac{3}{2}} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{2}{a} [\mu_{\parallel} (1 - \bar{\alpha}) \rho + \gamma (m_{\perp e} (1 - \bar{\beta}_e) z_e + m_{\perp h} (1 - \bar{\beta}_h) z_h)] \right\}, \quad (22)$$

а також ефективні борівські радіуси плоскої і вертикальної складових цього екситону

$$a_{\parallel} = \frac{a}{\mu_{\parallel} (1 - \bar{\alpha})}, \quad a_{\perp e} = \frac{a}{\gamma m_{\perp e} (1 - \bar{\beta}_e)}. \quad (23)$$

Наступні розрахунки залежності шуканих величин від параметрів системи ($\epsilon_v, \epsilon_s, m_{\perp e}, m_{\perp h}$ і т. ін.) виконані за допомогою IBM PC/AT.

Перш ніж вдатися до аналізу розрахунків, зауважимо, що за змістом введених параметрів екранування (α, β) їх значення не можуть виходити за межі інтервалу $[0; 1]$, бо рівність

одиноці будь-якого з них означала б повне екранування, а від'ємна величина α чи β відповідала б антиекрануванню, для якого немає фізичних причин.

У цій статті розрахунки виконані лише для випадку, коли маси електрона і дірки рівні, хоча формули (20) — (23) дають можливість розглядати довільні співвідношення між компонентами мас обох часток.

На рис. 2 наведено типову залежність енергії екситону E_0 , зв'язаного біля поверхні, від величини відношення P діелектричних проникностей контактуючих середовищ. Аналіз показує таке.

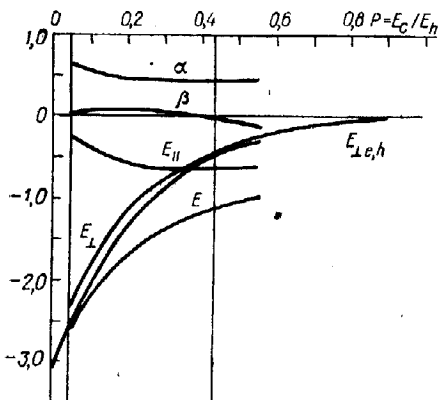


Рис. 2. Залежність енергії та параметрів від P при $m_{\perp e}, m_{\perp h}/m_{\parallel} = 30$

В області $0,1 \leq P = \frac{\epsilon_v}{\epsilon_s} \leq 0,43$, де існує плоский поверхневий екситон, енергія основного стану практично співпадає з сумою енергій його плоскої ($E_{\parallel} = E_{\parallel 0}^0$) і вертикальної ($E_{\perp} = E_{\perp e}^0 + E_{\perp h}^0$) складових. При цьому, якщо ϵ_s значно більше ϵ_v ($P \geq 0,1$), основний внесок в E_0 дає складова E_{\perp} , оскільки енергія локалізованих своїми зображеннями електрона і дірки у цьому випадку значно перевищує енергію кулонівського зв'язку електрона і дірки між собою. Проте у міру зменшення ϵ_s (збільшення P) енергія E_{\perp} швидко спадає, а E_{\parallel} повільно зростає, тому енергія основного стану зменшується за величиною. У точці $P \approx 0,4$ внески обох складових вирівнюються, а далі їх роль міняється. Оскільки при $0,43 \leq P \leq 1$ $\beta < 0$, то, хоча формально E_0 тут існує (як видно з рис. 2), однак від'ємність β свідчить про те, що прийнята модель у цій області стає некоректною і тому потребує заміни моделлю 3-вимірного екситону. Саме значення $P = 0,43$, де $\beta = 0$, можна розглядати як точку фазового переходу від плоского до 3-вимірного екситону.

З іншого боку, існує точка $P \approx 0,1$, де $\alpha = 1$. Вона відділяє область існування плоского екситону від області, де вільні електрон і дірка пов'язані лише зі своїми зображеннями. В останній моделі енергія визначається як

$$E_{\perp e,h} = -\frac{e^4 (m_{\perp e} + m_{\perp h})}{32h^2 \epsilon_v^2} \left(\frac{1-P}{1+P} \right)^2,$$

і тому із збільшенням ϵ_s (зменшенням P) енергія зв'язку зростає за величиною, оскільки внаслідок збільшення ефективного заряду зростає сила притягання між кожною із квазічастинок та її зображенням.

На рис. 3 і 4 наведено залежність енергії основного стану плоского екситону, параметрів α , β та радіусів a_{\parallel} , a_{\perp} від P для різних співвідношень між плоскими та вертикальними компонентами ефективних мас екситону.

При $m_{\perp} \leq 3m_{\parallel}$ поверхневий екситон не утворюється при будь-якій величині ϵ_3 . Це відповідає аналогічному висновку праці [1]. З рис. 3 видно, що коли $m_{\perp} > 3m_{\parallel}$, то поступово з'являється область значень P , де існує зв'язаний поверхневий екситон. У міру збільшення відношення $m_{\perp}e, h/m_{\parallel}$ область існування екситону (за P) зростає, що зрозуміло з фізичних міркувань, оскільки збільшення m_{\perp} сприяє кращій локалізації зарядів біля поверхні розділу кристалів. З цього ж рисунка видно, що при різних співвідношеннях m_{\perp}/m_{\parallel} існує права точка обриву спектра, після якої розглядувана модель некоректна через те, що там вже діє модель об'ємного екситону.

На цьому рисунку спостерігаємо нову важливу обставину. При $m_{\perp}e, h > 25m_{\parallel}$ спектр екситону обривається і в лівій точці. Це означає, що при збільшенні ϵ_3 до певного критичного значення внаслідок наближення електрона і дірки

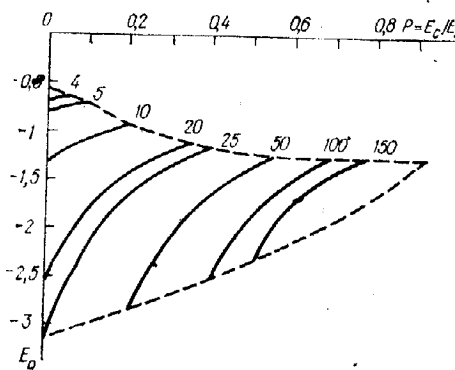
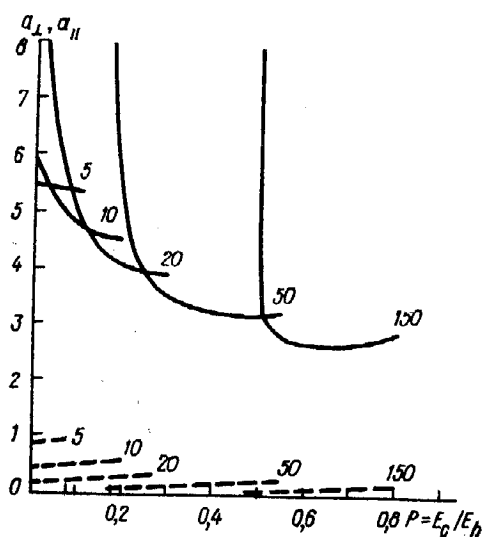
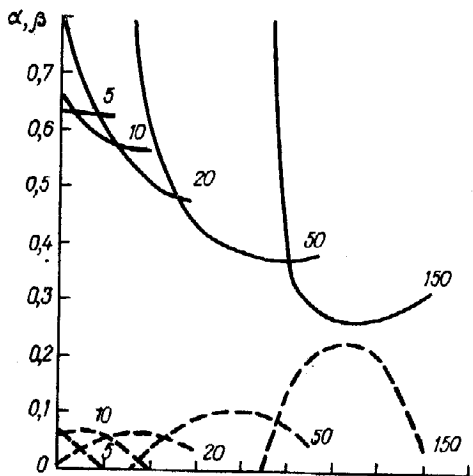


Рис. 3. Залежність E_0 від P при різних значеннях $m_{\perp}e, h/m_{\parallel}$

Рис. 4. Залежність параметрів α , a_{\perp} (суцільні криві) та β , a_{\parallel} (штрихові) від P при різних значеннях $m_{\perp}e, h/m_{\parallel}$



до поверхні розділу виникають такі відштовхувальні сили електростатичної взаємодії цих квазічастинок із зображеннями сусідів, які переважають сили їх притягання між собою, а це приводить до розриву плоского екситону. Так утворюється ще одна (не виявлена у праці [2]) фаза — фаза електрона і дірки, зв'язаних біля поверхні. Із збільшенням відношення $m_{\perp}e, h/m_{\parallel}$ область значень P , в якій існує зв'язаний плоский екситон, звужується і зсувається в область меншої різниці величин діелектричних проникностей внутрішнього і зовнішнього середовищ.

Щодо радіуса плоского екситону a_{\parallel} , то, як видно з рис. 4, він майже незалежно від співвідношення між компонентами мас і діелектричних проникностей не менше ніж в'яттеро перевищує відстань від зарядів до поверхні розділу середовищ.

1. Лозовик Ю. Е., Нишанов В. Н. Экситоны Ванье — Мотта в слонстых структурах и вблизи границы двух сред // ФТТ.— 1976.— 18, № 11.— С. 3267—3272.
2. Непомнящий И. М., Нишанов В. Н. Энергия локализации экситонов Ванье — Мотта на границе раздела двух сред // Там же.— 1984.— 26, № 10.— С. 3184—3187.
3. Бете Г. Квантовая механика простейших систем.— Л. : ОНТИ, 1935.— 399 с.
4. Давыдов А. С. Квантовая механика.— М. : Физматгиз, 1963.— 748 с.
5. Нокс Р. Теория экситонов.— М. : Мир, 1986.— 219 с.
6. Shinada M., Sugano S. Interband optical transitions in extremely anisotropic semiconductors. 1. Bound and unbound exciton absorption // J. Phys. Soc. Jap.— 1966.— 21, N 10.— P. 1936—1946.

Чернівецький державний університет
ім. Ю. Федьковича

Одержано 9.07.92