Изв. АН Армянской ССР, Физика, 13, 96—101 (1978)

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭКСИТОНОВ ВАННЬЕ-МОТТА С ВИНТОВЫМИ ДИСЛОКАЦИЯМИ

К. О. КЕЧЕЧЯН, А. А. КИРАКОСЯН

Рассчитан энергетический спектр экситона большого радиуса (Ванньe-Мотта) в поле винтовой дислокации. Задача решена в пределе сильного и слабого взаимодействий носителей с дислокацией. В первом случае расчет проведен на основе вариационного метода разделения переменных. Учет взаимодействия между носителями приводит к появлению квазинепрерывных экситонных подзон, «подвешенных» к дислокационным зонам. Во втором случае расчет с помощью теории возмущений в рамках адиабатического приближения указывает на возможность образования экситонно-дислокационного комплекса.

1. Структурные дефекты кристаллической решетки могут оказывать существенное и весьма своеобразное влияние на поведение квазичастиц в твердых телах и тем самым на физические свойства последних, а также на различные процессы, происходящие в них. Экспериментальные данные последних лет свидетельствуют о наличии выраженного воздействия деформации среды, обусловленной, в частности, структурными дефектами, на комплексы квазичастиц. Так, например, в работах [1, 2] экспериментально было показано, что в неоднородно-деформированном германии при гелиевых температурах электронно-дырочные капли способны проходить значительные расстояния, накапливаясь в узкозонной части кристалла. Более того, имеются прямые экспериментальные доказательства того, что зародыши электронно-дырочных капель образуются преимущественно на дислокациях [1].

Вопрос о взаимодействии свободных носителей—электронов и дырок—с дислокациями в полупроводниках обсуждался во многих работах (см., например, [3—6]). Целью настоящей работы является исследование взаимодействия простого квазичастичного комплекса — экситона большого радиуса — с винтовой дислокацией. Как известно, деформации, порождаемые последней, представляют собой чистый сдвиг. Основную роль во взаимодействии как со свободными носителями, так и с экситонами играет потенциал деформации в виде, данном Бонч-Бруевичем [4]. Для свободных носителей этот потенциал есть

$$V = \frac{\alpha_l}{\rho}, \tag{1}$$

где ρ — расстояние от оси дислокации, α_l — феноменологическая постоянная, вообще говоря, различная для электронов и дырок.

Нами рассмотрены два, по-видимому, наиболее интересных предельных случая:

а) взаимодействие электрона и дырки с дислокацией сильнее, чем кулоновское взаимодействие их между собой;

б) взаимодействие электрона с дыркой сильнее их взаимодействия с дислокацией.

Обе задачи решаются в приближении эффективной массы в предположении параболичности энергетических зон.

2. Рассмотрим случай (*a*), т. е. предположим, что выполняется условие

$$\frac{e^2}{\varepsilon} \ll |\alpha_i| \; (i = n, \; p), \tag{2}$$

где ε — диэлектрическая проницаемость среды, n и p обозначают соответственно электрон и дырку (для Te, например, $\alpha = 5 \cdot 10^{-20}$ *ед. CGSE*, $\varepsilon \simeq 30$). Будем полагать здесь обе α_i отрицательными, поскольку только в этом случае могут возникать связанные электронно-дырочные состояния. При пренебрежении взаимодействием электрона с дыркой для них получается спектр энергии двумерной квантовомеханической кеплеровой задачи [4]. Из-за трансляционного движения носителя по направлению оси дислокации возникает находящаяся в запрещенной зоне образца дислокационная зона. Учет взаимодействия между носителями, как будет показано ниже, приводит к появлению экситонных уровней, «подвешенных» к дислокационным зонам.

Уравнение, описывающее движение электрона и дырки в поле винтовой дислокации, имеет следующий вид:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\,m_n}\nabla_n^2 - \frac{\hbar^2}{2\,m_p}\nabla_p^2 + \frac{\alpha_n}{\rho_n} + \frac{\alpha_p}{\rho_p} - \frac{e^2}{\varepsilon\, r_{np}}\right)\Psi = W\Psi, \tag{3}$$

где m_n, m_p—эффективные массы электрона и дырки, ρ_n, ρ_p—их расстояния от оси дислокации, $r_{np} = |r_n - r_p|$, ось z направлена вдоль вектора Бюргерса b. Введем обозначения

$$Z = \frac{m_n z_n + m_p z_p}{M}, \qquad z = z_n - z_p,$$
$$M = m_n + m_p, \qquad \mu^{-1} = m_n^{-1} + m_p^{-1} \tag{4}$$

и представим решение уравнения (3) в виде

$$\Psi = \exp(iZK_z)\,\chi(\rho_n, \rho_p, z), \quad E = W - \frac{\hbar^2 K_z^2}{2M}, \tag{5}$$

что соответствует выделению трансляционного движения экситона как целого вдоль оси дислокации.

Подставив (5) в (3), для χ получим уравнение

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\,m_n}\nabla_{\rho_n}^2 - \frac{\hbar^2}{2\,m_p}\nabla_{\rho_p}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_z^2 + \frac{\alpha_n}{\rho_n} + \frac{\alpha_p}{\rho_p} - \frac{e^2}{\varepsilon r_{np}}\right)\chi = E\chi. \tag{6}$$

Для его решения воспользуемся вариационным методом разделения переменных. Выбрав функцию χ в виде

$$\chi(\rho_n, \rho_p, z) = \varphi(z)\, F(\rho_n, \rho_p), \tag{7}$$

для $\varphi(z)$, описывающей относительное движение носителей вдоль оси z, получим уравнение

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_z^2 + V_{n_1l_1n_2l_2}(z)\right]\varphi(z) = \Lambda_{n_1l_1n_2l_2}\varphi(z), \tag{8}$$

$$V_{n_1l_1n_2l_2}(z) = \int F^*_{n_1l_1n_2l_2}(\rho_n, \rho_p)\frac{e^2}{\varepsilon r_{np}}F_{n_1l_1n_2l_2}(\rho_n, \rho_p)\,d\rho_n^2 d\rho_p^2, \tag{9}$$

где

$$F_{n_1l_1n_2l_2}(\rho_n, \rho_p) = \Phi_{n_1l_1}(\rho_n)\,\Phi_{n_2l_2}(\rho_p) \tag{10}$$

есть произведение волновых функций носителей, описывающих связанные состояния в поле винтовой дислокации. Уравнение (8) напоминает полученное Эллиотом и Лоудоном [7] эффективное одномерное уравнение для диамагнитных экситонов.

Вычислим эффективный потенциал $V_{n_1l_1n_2l_2}$ для наиболее важного случая $n_1=l_1=n_2=l_2=0$, т. е. когда электрон и дырка находятся в дислокационных зонах основных состояний. Соответствующие волновые функции имеют вид [4]

$$\Phi_{00}(\rho_i) = (2/\pi)^{1/2}\beta_i\exp(-\beta_i\rho_i) \quad (i=n,\ p), \tag{11}$$

$$\beta_i = \frac{2}{a_i}, \tag{12}$$

где $a_i = \hbar^2/m_i|\alpha_i|$ — „боровский" радиус свободного носителя в поле дислокации.

После довольно громоздких преобразований эффективный потенциал $V_0(z) \equiv V_{0000}(z)$ можно представить в следующей интегральной форме:

$$V_0 = -\frac{2e^2}{\varepsilon}\beta_p\xi\int\limits_0^\infty \exp(-yx)(x^2+1)^{-3/2}(x^2+\xi)^{-3/2}dx, \tag{9'}$$

$$\xi = \left(\frac{\beta_p}{\beta_n}\right)^2 = \left(\frac{m_p\alpha_p}{m_n\alpha_n}\right)^2, \quad y = 2\beta_n|z|.$$

Интеграл (9′) для различных значений параметра ξ вычислен на ЭВМ

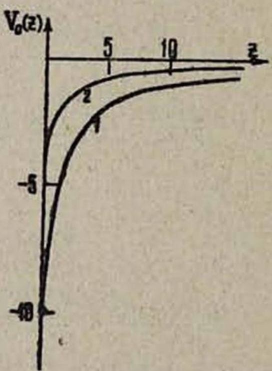

Рис. 1. Вид зависимости потенциала V_0 (в ед. $2e^2\beta_p\xi/\varepsilon$) от z (в ед. $2\beta_n$): 1) $\xi = 100$ ($V_0 \times 10^4$); 2) $\xi = 25$ ($V_0 \times 2\cdot10^3$).

(см. рис. 1). Нетрудно показать, что при $|z|\to\infty$

$$V_0 \simeq -\frac{e^2}{\varepsilon|z|}. \tag{9''}$$

Таким образом, потенциал V_0 по аналогии с [7] можно заменить выражением

$$V_{eff} = -\frac{e^2}{\varepsilon|z| + a}, \qquad (9''')$$

где $a(\alpha_n, \alpha_p) > 0$*. Уравнение Шредингера с таким потенциалом рассматривалось Лоудоном [8] в задаче об одномерном атоме водорода. Из инвариантности потенциала V_{eff} относительно преобразования $z \to -z$ следует, что волновые функции должны иметь определенную четность.

Спектр находится из следующих двух уравнений:

$$W_{\nu, 1/2}(2a/\nu a_{ex}) = 0 \qquad (13)$$

для нечетных состояний, и

$$\frac{d}{dz} W_{\nu, 1/2}[2(a+z)/\nu a_{ex}]|_{z=0} = 0 \qquad (14)$$

для четных состояний, где $W_{\nu, 1/2}(z)$ — функция Уиттекера, $a_{ex} = \varepsilon\hbar^2/\mu e^2$ — боровский радиус экситона в среде, $\nu(\alpha_n, \alpha_p)$ определяется выражением $\Lambda_0^\nu = \hbar^2/2\mu a_{ex}^2 \nu^2$ и принимает дискретные значения.

Полная энергия системы „экситон—дислокация" дается выражением

$$E^0_{K_z\nu} = \frac{\hbar^2 K_z^2}{2M} + \Delta + E_n^0 + E_p^0 + \Lambda_0^\nu. \qquad (15)$$

Здесь Δ — ширина запрещенной зоны, E_n^0, E_p^0 — энергии носителей в экстремальных точках дислокационных зон, Λ_0^ν — энергия относительного движения электрона и дырки в поле дислокации. Как следует из (15), учет взаимодействия между электроном и дыркой приводит к увеличению числа разрешенных состояний в запрещенной зоне, т. е. к сгущению дислокационной «вуали» непрерывного спектра (по образному выражению В. Л. Бонч-Бруевича).

3. Предположим теперь, что имеет место неравенство

$$\frac{e^2}{\varepsilon} \gg |\alpha_i|, \qquad (16)$$

т. е. кулоновское взаимодействие между носителями превалирует над дислокационным взаимодействием. Для решения уравнения (3) воспользуемся адиабатическим приближением, полагая отношение $m_n/m_p \ll 1$. Следует заметить, что в действительности $m_n/m_p \gtrsim 0{,}1$, однако член неадиабатичности в уравнении для тяжелой дырки, вычисленный с помощью электронных волновых функций нулевого приближения, является не зависящей от координат дырки постоянной, которая приводит лишь к изменению начала отсчета энергии и потому не влияет на условие применимости приближения.

---

* Указанную аппроксимацию можно применить и для $V_{n_1 l_1 n_2 l_2}$, когда $n_1, \cdots, l_2 \neq 0$, с различными характерными длинами a для различных наборов $(n_1 l_1 n_2 l_2)$.

ՀԱՅԿ.ՍՍՀ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ... ԳՐԱԴԱՐԱՆ

Перейдем к вычислению энергии взаимодействия экситона с дислокацией. Уравнение, описывающее движение электрона в поле неподвижной дырки и дислокации, запишется в виде

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_n}\nabla^2-\frac{e^2}{\varepsilon r_1}+\frac{\alpha_n}{\rho}+\frac{\alpha_p}{R}\right)\varphi(R,\ r)=E(R)\,\varphi(R,\ r), \tag{17}$$

где для большей наглядности проведено переобозначение переменных: $\rho_n\equiv\rho$, $\rho_p\equiv R$, $r_1=|r-R|$, r — радиус-вектор электрона; ось x направлена по оси дислокации, а дырка находится на оси z. Согласно (16) член α_n/ρ можно считать малой поправкой к экситонному гамильтониану.

Воспользовавшись результатами нулевого приближения

$$\begin{gathered} E_0^0(R)=\frac{\alpha_p}{R}-\frac{m_n e^4}{2\varepsilon^2\hbar^2}, \\ \varphi_0^0=(\beta^3/\pi)^{1/2}\exp(-\beta r_1),\quad \beta=\frac{m_n e^2}{\hbar^2\varepsilon}, \end{gathered} \tag{18}$$

с учетом поправки первого порядка теории возмущений для энергии взаимодействия экситона с дислокацией получим выражение

$$E_0(R)=\beta[(\alpha_n+\alpha_p)/\beta R-\alpha_n\exp(-2\beta R)(1+1/\beta R)]. \tag{19}$$

Здесь за начало отсчета энергии выбрана энергия основного состояния экситона. Анализируя это выражение для различных α_i, приходим к следующим выводам:

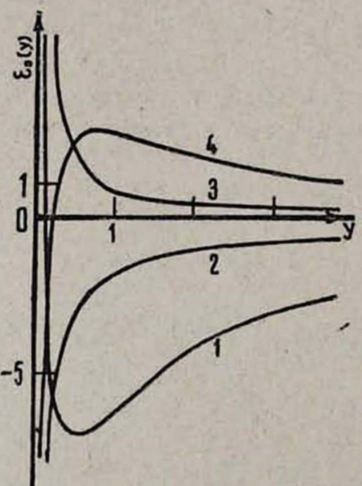

Рис. 2. Энергия взаимодействия $E_0(y)$ (в ед. $\beta|\alpha_p|$, $y=\beta R$) для следующих значений α_i: 1) $\alpha_n<0$, $\alpha_p=0{,}1\,|\alpha_n|$; 2) $\alpha_n<0$, $\alpha_p=\alpha_n$; 3) $\alpha_n<0$, $\alpha_p=2\,|\alpha_n|$; 4) $\alpha_n>0$, $\alpha_p=-0{,}2\,\alpha_n$.

а) при $\alpha_n<0$ и $\alpha_p<|\alpha_n|$, а также при $\alpha_n>0$, $\alpha_p<0$ экситон как целое притягивается к дислокации и возможно образование связанных состояний экситона, движущегося вокруг дислокации, т. е. образование экситонно-дислокационного комплекса;

б) при $\alpha_n<0$, $\alpha_p\geqslant|\alpha_n|$, а также при $\alpha_n>0$, $\alpha_p>0$ происходит рассеяние экситона на отталкивающем потенциале.

Графики $E(R)$ для некоторых значений параметров приведены на рис. 2. Заметим, что при наличии двумерной потенциальной ямы произвольной глубины, в отличие от трехмерной, всегда существуют связанные состояния [9]; при этом имеет место инфинитное движение экситона вдоль дислокации в полном соответствии с общей симметрией задачи.

Полученные результаты справедливы в случае пренебрежения экситонным взаимодействием, что предполагает относительно небольшую концентрацию экситонов.

Ереванский государственный
университет

Поступила 3.II.1977

ЛИТЕРАТУРА

1. *В. С. Багаев и др.* Письма ЖЭТФ, 10, 309 (1969).
2. *А. С. Алексеев, В. С. Багаев, Т. И. Галкина.* ЖЭТФ, 63, 1020 (1972).
3. *В. Л. Бонч-Бруевич, В. Б. Гласко.* ФТТ, 3, 36 (1961).
4. *В. Л. Бонч-Бруевич.* ФТТ, 3, 47 (1961).
5. *Э. А. Канер, Э. П. Фельдман.* ЖЭТФ, 61, 419 (1971).
6. *J. L. Forvacque, E. Gerlach.* Phys. Stat. Sol. (b), 77, 651 (1976).
7. *R. J. Elliott, R. Loudon.* J. Phys. Chem. Sol., 15, 196 (1960).
8. *R. Loudon.* Amer. J. Phys., 27, 649 (1959).
9. *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.* Квантовая механика, Изд. Наука, М., 1974.

ՎԱՆՅԵ-ՄՈՏԻ ԷՔՍԻՏՈՆՆԵՐԻ ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ՊՏՈՒՏԱԿԱՅԻՆ ԴԻՍԼՈԿԱՑԻԱՆԵՐԻ ՀԵՏ

Կ. Հ. ՔԵՉԵՉՅԱՆ, Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Հաշվված է պտուտակային դիսլոկացիայի դաշտում գտնվող մեծ շառավղով (Վանյե-Մոտի) էքսիտոնի էներգետիկ սպեկտրը։ Խնդիրը լուծված է դիսլոկացիայի հետ լիցքակիրների ուժեղ և թույլ փոխազդեցության սահմանային դեպքերում։ Առաջին դեպքում հաշվարկը կատարված է փոփոխականների բաժանման վարիացիոն մեթոդի հիման վրա։ Լիցքակիրների միջև փոխազդեցության հաշվառումը բերում է քվազիանընդհատ էքսիտոնային ենթագոտիների ի հայտ գալուն, որոնք «կախված» են դիսլոկացիոն գոտիներից։ Երկրորդ դեպքում հաշվարկը կատարված է գրգռումների տեսությամբ, ադիաբատիկ մոտավորության շրջանակներում և ցույց է տրված էքսիտոն-դիսլոկացիա կոմպլեքսի առաջացման հնարավորությունը։

INTERACTION OF WANNIER-MOTT EXCITONS WITH SCREW DISLOCATIONS

K. O. KECHECHYAN, A. A. KIRAKOSSYAN

The energy spectrum of large-radius (Wannier-Mott) excitons in the field of a screw dislocation is calculated. The problem is solved in the limit of strong and weak interactions of charge-carriers with the dislocation. In the first case the calculation is performed using the variational method for the separation of variables. The consideration of the interaction between charge-carriers leads to the formation of quasi-continious excitonic subbands "suspended" to the dislocation bands. In the second case the perturbation theory calculation made within the framework of adiabatic approximation indicates to the possibility of the formation of an exciton-dislocation complex.