Письма в ЖЭТФ, том 31, вып. 2, стр. 122 – 126 *20 января 1980 г.*

АВТОИОНИЗАЦИОННЫЕ ЗОНЫ ЭЛЕКТРОН-ЭКСИТОННЫХ КОМПЛЕКСОВ В ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ ПОНИЖЕННОЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ РАЗМЕРНОСТИ

Ф.И.Далидчик, В.З.Слоним

Поставлен и решен вопрос об особенностях взаимодействия в периодических структурах пониженной пространственной размерности одноцентровых резонансных состояний фешбаховского типа. Показано, что при сильном обменном взаимодействии в этих структурах формируются автоионизационные зоны двухчастичных связанных состояний (электрон-экситонных комплексов), мнимая часть закона дисперсии которых является неаналитической функцией энергии и квазиимпульса. Предсказанные состояния могли бы быть обнаружены в экспериментах по отражению моноэнергетических электронов от поверхности твердого тела (графита или металла) покрытого субмонослойной пленкой инертного газа.

1. В последние годы в теории элементарных возбуждений твердых тел интенсивно исследуются свойства электрон-квазичастичных комплексов (связанных пар), в состав которых входит несохраняющаяся частица – оптический фонон, экситон, магнон и т. д. (см., например, [1–3]). Однако, до сих пор исследовались свойства лишь объемных кристаллических структур, причем рассматривались энергии, лежащие под границей вакуумного континуума. Цель настоящего сообщения – отметить качественно новые особенности состояний электрон-экситонных комплексов (ЭЭК) в периодических структурах пониженной пространственной размерности – двумерных, одномерных и полуограниченных кристаллов. Современные исследования электронных спектров подобных систем стимулируются, как известно, поисками методов создания высокотемпературной сверхпроводимости, а также многочисленными задачами быстро развивающейся физики поверхностных явлений [4]. Следует ожидать, что при положительных энергиях (за ноль принята граница вакуумного континуума) из-за возможности автоионизации в периодических структурах, имеющих канал свободного ухода электрона на бесконечность, закон дисперсии электрон-экситонных связанных пар будет комплексной неаналитической функцией энергии и квазиимпульса [5].

2. Действительно, рассмотрим свойства ЭЭК в рамках простой точно решаемой модели, сохраняющей, однако, все качественные особенности общего случая. Найдем спектр собственных значений гамильтониана:

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = -\frac{\Delta}{2}\hat{1} + \hat{H}_0 + \sum_{s=1}^{N}\hat{u}_s(r_s), \qquad \mathbf{r}_s = \mathbf{r} - \mathbf{R}_s \tag{1}$$

$$(e = h = m = 1).$$

Здесь $\mathbf{r}$ — координата электрона, $\mathbf{R}_s$ — радиус-векторы центров взаимодействия (атомных остовов), $\hat{H}_o$ — матричный гамильтониан системы остовов, размерность которого равна $N+1$, $\hat{1}$ — единичная матрица. Каждый атомный центр имеет по предположению два уровня, возможностью одновременного возбуждения двух центров в рассматриваемом интервале энергий пренебрегаем. Матрица $\hat{H}_o$ имеет вид

$$(\hat{H}_o)_{nn'} = (1-\delta_{no})(1-\delta_{n'o})\,[\omega\delta_{nn'} + (1-\delta_{nn'})\,V(|n'-n'|)\,] \tag{2}$$

(при $n \neq 0$ индекс канала движения электрона совпадает с индексом центра, на котором (в нулевом по V приближении) локализовано возбуждение. Канал с индексом $|0>$ соответствует движению электрона в поле невозбужденных остовов). Матрицы одноцентровых взаимодействий электрона, $\hat{u}_s$, имеют вид

$$(\hat{u}_s)_{nn'} = u_o(r_s)\delta_{no}\delta_{n'o} + u_1(r_s)\delta_{ns}\delta_{n's} + u_{o1}(r_s)(\delta_{no}\delta_{n's} + \delta_{ns}\delta_{n'o}), \tag{3}$$

при $n, n' = 0, s$. При $n, n' \neq 0, s$ $(\hat{u}_s)_{nn'} = u_o(r_s)\delta_{nn'}$.

Воспользуемся методом потенциалов нулевого радиуса [6], который допускает обобщение на случай взаимодействующих центров рассеяния [7]. В экситонном представлении (диагонализующем матрицу $\hat{H}_o$) система точных алгебраических уравнений, определяющих спектр резонансных состояний гамильтониана (1) имеет вид[1)]

$$(ik+\kappa_o)r_s(0) - 2\pi\sum_{s'\neq s} G_o^{(+)}(E,\mathbf{R}_s,\mathbf{R}_{s'})r_{s'}(0) +$$

$$+\frac{\kappa_{o1}}{\sqrt{N}}\sum_{p=1}^{N} e^{i\,2\pi/N(s-1)(p-1)}\, r_s(p) = 0,$$

$$(ik(p)+\kappa_o)r_s(p) - 2\pi\sum_{s'\neq s} G_o^{(+)}(E(p),\mathbf{R}_s,\mathbf{R}_{s'})r_{s'}(p) +$$

$$+\frac{\kappa_{10}}{\sqrt{N}}e^{-i\,2\pi/N\,(s-1)(p-1)}\, r_s(0) +$$

$$+\frac{\kappa_1-\kappa_o}{N}\sum_{p'=1}^{N} e^{i\,2\pi/N\,(s-1)(p'-p)}\, r_s(p') = 0 \tag{4}$$

$$(E(p) = k^2(p)/2 = E-\epsilon(p),\quad \mathbf{R}_s = (as,0,0),\quad N>>1).$$

[1)] В целях простоты система уравнений (4) выписана для периодической структуры типа линейной цепочки. Возможность обобщения решения на практически наиболее важный случай двумерных кристаллов непосредственно следует из вида дисперсионного уравнения (5).

В уравнениях (4) $k = \sqrt{2E}$, E — энергия; κ_o, κ_1, κ_{o1} — параметры одноцентрового (двухканального) рассеяния электрона изолированным атомным центром [6], $\epsilon(p)$ — спектр экситонных возбуждений гамильтониана остовов, $G_o^{(+)}(E, \mathbf{R}_s, \mathbf{R}_{s'})$ — функция Грина свободного движения электрона с энергией E, $\epsilon(p) \approx \omega + \beta\cos pa$)[1].

Решение системы уравнений (4) ищем в представлении квазиимпульса:

$$r_s(0) = A(0)e^{iqas}, \qquad r_s(p) = A(p)\, e^{i(q-p)as}.$$

В итоге получаем следующее дисперсионное уравнение

$$2\pi(\kappa_o - \kappa_1 + \kappa_{o1}^2 Z_o^{-1}(E, q))^{-1} = aD(E, q), \tag{5}$$

$$Z_o(E, q) = (ik + \kappa_o - 4\pi \sum_{s=1}^{\infty} G_o^{(+)}(E, 0, as)\cos qas), \tag{6}$$

$$D(E, q) = \int_o^{2\pi/a} \frac{dp}{Z_1(E, p, q)},$$

$$Z_1(E, p, q) = (ik(p) + \kappa_o - 4\pi \sum_{s=1}^{\infty} G_o^{(+)}(E(p), 0, as)\cos(q-p)as) \tag{7}$$

определяющее полный спектр электронных и электрон-экситонных состояний рассматриваемой системы ($N \to \infty$).

В рамках принятой модели взаимодействий дисперсионное уравнение (5) является точным. Варьируя в нем характерные параметры нетрудно проследить предельный переход к самым различным частным случаям, рассматривавшимся ранее в работах [9 — 11], а также в теории подпороговых связанных состояний электрона с несохраняющейся квазичастицей [1] (последний случай соответствует условиям : $\kappa_1 = \kappa_o >> \beta a\, |e^{ik(p)a}|$). Рассмотри·· пользуясь дисперсионным уравнением (5) вопрос о возможности существования в периодических структурах связанных электрон-экситонных пар, спектр возбуждения которых лежит на фоне континуума свободных состояний электрона. Пусть $\kappa_{o1} << \kappa_1$, $\beta \neq 0$. В нулевом (по параметру κ_{o1}/κ_1) приближении уравнение (5) определяет зону взаимодействующих, но несвязанных электрон-экситонных состояний (закон дисперсии последних находится из уравнения $Z_1(E, p, q) = 0$), а также ветвь электрон-экситонного комплекса закон дисперсии которого находится из уравнения

$$\frac{2\pi}{(\kappa_o - \kappa_1)a} = D(E, q), \tag{8}$$

1) Аналогичные уравнения могут быть выведены и в рамках более реалистических моделей, типа многоканальных "muffin- tin" потенциалов [8].

Действительные решения уравнения (8) $E^{\circ}(q)$ легко могут быть найдены аналитически (в приближении сильной связи для электронных и экситонных зон), а также численно. Оценочный расчет, проведенный для случая двумерной кристаллической решетки образованной атомами Xe на поверхности графита[1)] (все характерные параметры задачи в этом случае известны: $\kappa_o = -0,17$; $\kappa_1 = 0,2$; $\omega = 0,30$ (ат. ед.) [12], $\beta = 0,5$ эВ, $a = 9$ (ат. ед.) [13]) приводит к выводу, что в этом случае формируется ветвь ЭЭК отстоящая от границы несвязанных электрон-экситонных состояний на величину $\sim 0,5$ эВ, при этом $|E_{min} - E_{max}| \sim 0,1 - 0,2$ эВ.

Учет взаимодействия каналов ($\kappa_{o1} \neq 0$) приводит к затуханию рассматриваемых состояний, при этом

$$\mathrm{Im}E(q) = \frac{\kappa_{o1}^2}{2\pi}\left(\frac{d}{dE}\;\frac{1}{D(E,q)}\right)^{-1}_{E=E^{\circ}(q)} \frac{\left(ka + \pi\left(1 - \left\{\dfrac{a(k+q)}{2\pi}\right\} - \left\{\dfrac{a(k-q)}{2\pi}\right\}\right)\right)}{|Z_o(E^{\circ}(q), q)|^2}$$

$$(\mathbf{R}_s = (as, 0, 0)). \qquad (9)$$

Здесь $\{x\}$ — дробная часть x. Среднее время жизни комплекса (по отношению к отрыву электрона от структуры) оказывается, таким образом, неаналитической функцией энергии и квазиимпульса. В точках, являющихся корнями уравнения

$$a(\sqrt{2E^{\circ}(q)} \pm q) = 2\pi m, \quad m = 0, \pm 1, \ldots \qquad (10)$$

$\mathrm{Im}\,E(q)$ скачком меняется на величину порядка своего первоначального значения (для одномерных структур). Для двумерных структур особенности имеют характер корневых расходимостей. Оценка $\mathrm{Im}E(q)$ для ксенона (параметр κ_{o1} восстановлен по известной ширине одноцентрового фешбаховского резонанса иона $(Xe^-)^{а.и.}$ $\Gamma_{Xe^-} \cong 3\cdot 10^{-3} - 1\cdot 10^{-2}$ эВ [12]) при $a(k+q)/2\pi \sim 1/2$ дает величину порядка 10^{-3} эВ.

3. С общефизической точки зрения рассмотренная выше ситуация соответствует сильному обменному взаимодействию одноцентровых фешбаховских резонансов[2)]. Такие резонансы есть практически у всех атомных частиц [14], что делает перспективу экспериментального обнаружения автоионизационных зон ЭЭК достаточно обнадеживающей. Существование ветви (электрон-экситонных) двухчастичных возбужде-

---

1) При переходе к двумерным кристаллам в дисперсионном уравнении (5) суммирование проводится по двум дискретным индексам и интегрирование по $d\mathbf{p}$ заменяется интегрированием по двум проекциям вектора $\mathbf{p}$.

2) Особенности автоионизационных зон, формирующихся при сильном обменном взаимодействии потенциальных ("shape") резонансов рассмотрены в отдельной публикации [15].

ний в двумерных кристаллах могло бы проявиться в самых различных физических экспериментах, например, в процессах типа фотоотрыва электрона из адсорбированных атомных монослоев, а также при резонансном отражении электронов от поверхности твердого тела при наличии упорядоченного монослоя адсорбированных атомов. В последнем случае можно бы было измерять зависимость (энергетическую и угловую) отношения интенсивности рефлексов, соответствующих отражению электронов от монослоя и атомов подложки. Существование ЭЭК должно бы было привести к резонансной зависимости измеряемых величин.

Авторы глубоко признательны В.И.Мельникову за обсуждение работы и замечания, способствовавшие уточнению сделанных в работе предсказаний. Мы благодарны также И.В.Александрову за критический просмотр рукописи и обсуждение затронутых в статье вопросов.

Институт химической физики
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
1 декабря 1979 г.

Литература

[1] И.Б.Левинсон, Э.И.Рашба. УФН, 111, 683, 1973.

[2] Э.Л.Нагаев. Физика магнитных полупроводников. М., изд. Наука, 1979.

[3] Л.П.Питаевский. ЖЭТФ, 70, 738, 1976.

[4] Л.А.Большов, А.П.Напартович, А.Г.Наумовец, А.Г.Федорус. УФН, 122, 125, 1977.

[5] Ф.И.Далидчик. ЖЭТФ, 77, 2422, 1979.

[6] Ю.Н.Демков, В.Н.Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., изд. ЛГУ, 1975.

[7] Ф.И.Далидчик. ТЭХ, 10, 579, 1974.

[8] John Slater. Quantum Theory of Molecules and Solids v. 4, Mc Crow Book Comp, N-Y. 1974.

[9] Ю.Н.Демков, Р.Субраманян. ЖЭТФ, 57, 698, 1969.

[10] Дж.Каллуэй. Теория энергетической зонной структуры. М., изд. Мир, 1969.

[11] Ю.М.Каган, А.М.Афанасьев. ЖЭТФ, 50, 271, 1966.

[12] Б.М.Смирнов. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. Атомиздат, 1968.

[13] L.Resca al. Phys. Rev. (B), 17, 3334, 1978.

[14] G.Schulz. Rev. Mod. Phys., 45, 378, 1973.

[15] Г.В.Голубков, Ф.И.Далидчик, Г.К.Иванов. ЖЭТФ, 78, вып. 6, 1980.