Письма в ЖЭТФ, том 23, вып. 9, стр. 492 – 495 5 мая 1976 г.

НОВЫЙ МЕХАНИЗМ АВТОЛОКАЛИЗАЦИИ ЭКСИТОНА В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ И КВАЗИДВУМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В.М.Агранович, Б.П.Антонюк, А.Г.Мальшуков

В квазиодномерных и квазидвумерных системах кулоновское притяжение между связанными электронами и дырками, находящимися на различных плоскостях или нитях, приводит к деформации решетки и образованию автолокализованных экситонов с большой трансляционной массой, даже в тех случаях, когда взаимодействие с решеткой свободных носителей пренебрежимо мало.

В квазиодномерных и квазидвумерных системах при образовании состояний, отвечающих пространственно разделенным электронам и дыркам, кулоновское взаимодействие квазичастиц друг с другом приводит в ряде случаев к появлению спонтанной деформации решетки, являющейся в известном смысле аналогом поляронных эффектов. Эта деформация, однако, может иметь место и в условиях, когда обычные константы рассеяния свободных квазичастиц на фононах пренебрежимо малы, что и будет ниже предполагаться.

Чтобы проиллюстрировать сказанное, как и в [1] рассмотрим экситоны большого радиуса. Находящиеся на разных плоскостях или нитях связанные между собой электрон и дырка, притягиваясь друг к другу, деформируют плоскости (нити). В результате возникает выигрыш в энергии кулоновского взаимодействия, что может привести к локализации экситона как целого в возникшей области деформации. При этом деформация, сопровождающая движение экситона, существенно увеличивает его трансляционную массу.

Будем исходить из известного в теории поляронов большого радиуса приближения сильной связи [2] и, для простоты, считать, что радиус внутреннего движения экситона мал по сравнению с размером области деформации. Тогда в статическом приближении энергия системы имеет вид

$$F = \frac{\hbar^2}{2m}\int|\nabla\psi|^2 d\mathbf{r} - \frac{\partial E}{\partial d}\int d\mathbf{r}\, u(\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}^2|q_{\mathbf{k}}|^2, \tag{1}$$

где $\psi(r)$ – волновая функция движения центра тяжести экситона, E – его внутренняя энергия в недеформированном кристалле [1], d – расстояние между плоскостями (нитями), $U(\mathbf{r})$ – изменение этого расстояния, вызванное деформацией, m – суммарная эффективная масса электрона и дырки. Последний член в (1) учитывает энергию статической деформации решетки.

Выразим $u(\mathbf{r})$ через нормальные координаты $q_{\mathbf{k}}$, а затем минимизируя F относительно q_k, найдем связь между $u(\mathbf{r})$ и $|\psi(\mathbf{r})|^2$. Подставляя найденное выражение для $u(\mathbf{r})$ в (1), получим функционал, зависящий лишь от $\psi(\mathbf{r})$. Полученный функционал по виду совпадает с рассмотренным в [5], где показано, что в одномерном случае задача о минимизации допускает точное решение. Для оценки минимума в двумерной системе достаточно выбрать простой вид пробной функции $\psi(\mathbf{r})\sim e^{-\kappa|\mathbf{r}|}$. В результате, полагая спектр дебаевским, для квазиодномерной системы ($E_1 = e^2/d\sqrt{\epsilon_{\parallel}\epsilon_{\perp}}$) получим:

$$F_1 = -\frac{a^2 m}{2\hbar^2}, \tag{2}$$

а для квазидвумерной ($E_2 = e^2/d\epsilon_{\parallel}$)

$$F_2 = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} - \beta\kappa^2 \tag{3}$$

где

$$a = \frac{e^4}{2\pi d^4\rho\,\epsilon_{\perp}\epsilon_{\parallel}}\left(\frac{1}{c_e^2} + \frac{1}{2c_t^2}\right), \tag{4}$$

$$\beta = \frac{e^4}{2\pi d^3\epsilon_{\parallel}^2\rho\, c_e^2}. \tag{5}$$

В выражениях (4), (5) ρ – плотность среды, c_e, c_t – скорости продольного и поперечного звука, $\epsilon_{\parallel}$, $\epsilon_{\perp}$ – главные значения тензора диэлектрической проницаемости. Для квазиодномерных систем всегда имеет место неустойчивость однородного состояния. Для значений параметров $\epsilon_{\parallel}\epsilon_{\perp} = 100$, $\bar{c}^2 = c_e^2\left(1 + \dfrac{c_e^2}{2c_t^2}\right)^{-1} = 2\cdot 10^9$ $см^2/сек^2$, $d = 6\text{Å}$, получаем размер деформированной области $2\kappa^{-1} = 2\hbar^2/am = 40\text{Å} \gg \bar{x} = 8\text{Å}$ ($\bar{x}$ – внутренний размер экситона [1]). Для рассматриваемых параметров $|F_1| = 8\cdot 10^{-3}$ $эв \gtrsim \hbar\omega_0$, где ω_0 – дебаевская частота, поэтому, строго говоря, необходимы некоторые уточнения оценок в рамках приближения промежуточной связи.

Для нахождения трансляционной массы новой квазичастицы экситон + + деформация будем считать, как и в [3], что экситон и деформация движутся как целое со скоростью v. Учитывая дополнительно в (1) кинетическую энергию движения решетки $T = \dfrac{1}{2}\sum\limits_{\mathbf{k}}|\dot{q}_{\mathbf{k}}|^2$ получаем

$$m^* = m + \frac{e^4\kappa^3}{4\pi d^2\epsilon_{\parallel}\epsilon_{\perp}\rho c_e^4}\left[3 + \frac{c_e^4}{2c_t^4}\right]\ln\frac{1}{\kappa d}\,. \qquad (6)$$

Для рассматриваемых параметров $m^* \approx 200\, m_e$, и сильно растет с уменьшением размера области деформации (m_e – электронная масса). Для квазидвумерной системы, как видно из (3) и, следовательно, "локализованное" состояние экситона в рассматриваемой модели образуется только при $\beta > \hbar^2/2m$. Так как при этом выигрыш энергии в деформированном состоянии монотонно растет с уменьшением размера деформированной области, то равновесное значение $\kappa \gtrsim 1/\bar{x}$ и не может быть найдено в рамках использованного подхода, где считается, что $\kappa\bar{x} \ll 1$. Как видно из (3), (5) условие возникновения деформации имеет вид

$$\frac{e^4 m}{\pi d^3\epsilon_{\parallel}^2 c_e^2\rho\hbar^2} > 1,$$ что выполняется, например, при $\epsilon_{\parallel} = 3$, $m = 2m_e$, $d = 8\text{Å}$, $c_e = 0{,}7\cdot 10^5$ $см/сек$, $\rho = 1$ $г/см^3$.

В заключение отметим, что обусловленный электрон-дырочным притяжением эффект деформации решетки в системах рассматриваемого типа может стимулировать возникновение неустойчивости однородного состояния электронов и дырок и, в частности, приводить к стабилизации электронно-дырочных капель. Кроме того, в полупроводниках с достаточно узкой запрещенной зоной этот эффект может, вообще говоря, приводить к неустойчивости основного состояния полупроводника относительно спонтанного рождения автолокализованных экситонов или скоплений (капель). Рассмотренные эффекты автолокализации и возрастания трансляционной массы экситонов важны также в системах указанного вида при рассмотрении явлений, обсуждавшихся в [1, 4] (экситонный изолятор, электронно-дырочные капли, сверхтекучесть экситонов и т. п.).

Институт спектроскопии
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
11 марта 1976 г.

Литература

[1] В.М.Агранович, Б.П.Антонюк. ЖЭТФ, 67, 2352, 1974.

[2] "Поляроны" под редакцией Ю.А.Фирсова. М., изд. Наука, 1975.

[3] Л.Д.Ландау, С.И.Пекар. ЖЭТФ, 18, 419, 1948.

[4] P.B.Visshеr, L.M.Falicov. Phys. Rev., B3, 2541, 1971; Y.Kuramoto, H.Kamimura. J. Phys. Soc. Japan, 37, 716, 1974; Ю.Е.Лозовик, В.И.Юдсон. Письма в ЖЭТФ, 22, 556, 1975; С.И.Шевченко, И.О.Кулик. Письма в ЖЭТФ, 23, 171, 1976.

[5] Э.И.Рашба. ЖОС, 2, 88, 1957.