

ЛЬВОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени И.Я.ФРАНКА

На правах рукописи

ЛУКВИНЕЦ

Богдан Антонович

ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА И ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
В СЛОИСТЫХ ПОЛУПРОВОДИКАХ

01.04.02 - теоретическая физика

А в т о р е ф е р а т  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Львов - 1991

Работа выполнена в Ч  
проблем материаловедени

ЛНБ України ім.В.Стефаніка



00761170 (М)

Официальные оппонент

доктор физико-ма

ГАШИМЗАДЕ Ф.М.,

доктор физико-математически наук профессор

СУТАКОВ В.И.,

доктор физико-математических наук профессор

СТАХИРА И.М.

Ведущая организация - Институт полупроводников АН УССР.

Защита состоится " 17 " июли 1991г. в 15 часов  
на заседании специализированного совета Д 068.26.05 по  
защите диссертаций на соискание ученой степени доктора  
физико-математических наук во Львовском государственном  
университете им.Ивана Франко /290005 Львов, ул.Ломоносова,8,  
Большая физическая аудитория/.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке  
Львовского госуниверситета /290005 Львов, ул.Драгоманова,5/.

Автореферат разослан " 15 " июль 1991 г.

Ученый секретарь  
специализированного совета

И.И.ПОЛОВИНКО

ЛНБ ім. В. Стефаніка  
АН України

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность проблемы.** Современная микроэлектроника в значительной степени отражает лицо научно-технического прогресса. Учитывая то, что ускоренный научно-технический прогресс — стержень решения народно-хозяйственных задач в нашей стране, актуальность исследований, связанных с микроэлектроникой, несомненна.

Наука и техника, народное хозяйство требуют приборы с новыми, более широкими функциональными возможностями, работающие во всевозможных условиях по температуре, давлению, магнитным полям и проч., обладающие стабильными характеристиками на протяжении длительного времени. Один из путей реализации такой задачи — материаловедение, позволяющее путем подбора компонент соединений и технологий получить материал с заранее заданными характеристиками. Второй путь — глубокое осознание и практическое использование процессов, протекающих в кристаллах. Безусловно, что между этими путями существует органическая связь.

Широкий класс кристаллов, известных как слоистые кристаллы /СК/, может служить яркой иллюстрацией как первого, так и второго путей решения задачи.

Интерес к СК особенно обострился в последнее десятилетие. Свидетельством этого может служить многочисленное количество обзоров и монографий, посвященных всевозможным проблемам таких кристаллов: технологии выращивания и кристаллографии, структурным неустойчивостям и связанным с ними волнам зарядовой плотности, оптическим и кинетическим свойствам, сверхпроводимости и др.

Характерная особенность СК — резкая анизотропия физических свойств как следствие различной природы химической связи по различным кристаллографическим направлениям. Поскольку особый интерес к СК появился лет 10–20 назад, то поначалу казалось, что исследование СК не составит особого труда, т.к. на то время уже существовали мощные, хорошо апробированные методики расчетов как электронного, так и фононного спектров, к тому же быстрыми темпами развивалась вычислительная техника. Да и СК, как объект исследования, казалось бы, проще обычных трехмерных кристаллов. В действительности же реальность оказалась намного сложнее.

Возникает необходимость комплексного исследования СК. Поэтому цель работы — установить и изучить последствия резкоанизотропного характера закона дисперсии носителей на физические

процессы в СК, электрон-фононное взаимодействие в присутствии магнитного поля и без него.

Научная новизна. Развита теория циклотронного резонанса для СК, в результате которой получены аналитические выражения для циклотронной эффективной массы при различных ориентациях внешнего магнитного поля.

Разработана теория эффекта Яна-Теллера и кооперативного эффекта Яна-Теллера в слоистых полупроводниках, содержащих более одного подслоя в примитивной ячейке.

Исследованы особенности перенормировки электронного спектра электрон-фононным взаимодействием в СК по сравнению с аналогичной в изотропном кристалле, как результат особенностей как электронного, так и фононного законов дисперсии.

На основе развитой диаграммной техники при  $T = 0$  для электронов во внешнем магнитном поле исследован аналог Фурье-образа кулоновского потенциала, а также поляризационные свойства электронов в СК во внешнем магнитном поле.

Обоснована теоретическая модель для описания интеркалированного СК и на ее основе изучено поведение уровня локализованного электронного состояния интеркалированного СК и электронного заполнения интеркалированных атомов.

Получено адекватное дифференциальному уравнению уравнение на собственные значения энергии для экситонов в слоистом полупроводнике.

Достоверность и практическая ценность. Результаты получены современными методами теоретической физики с использованием методов квантовой теории поля, теоретико-группового анализа, электронно-вычислительных машин. Полученные результаты в предельных случаях согласуются с результатами, полученными на модели с изотропным законом дисперсии носителей.

Результаты расчетов в большинстве случаев представляют собой выражения для наблюдаемых величин как функции параметров исследуемых кристаллов, внешних воздействий.

Практическая ценность работы определяется фундаментальным характером изучаемых проблем и возможностью на этой основе дальнейших экспериментальных исследований /искажения решетки СК при гидростатическом сжатии или при интеркаляции; особенностей, вытекающих из зависимости поляризационного оператора от степени слоистости и др./, для выяснения сущности физических процессов, происходящих в СК.

Развитая в диссертации теория циклотронного резонанса совместно с экспериментальными исследованиями позволит решить вопрос о параметрах зонного электронного спектра, что важно не только для объяснения различных экспериментальных данных, но и для исследования более тонких, многочастичных, эффектов в СК. Полученная в работе спектральная зависимость коэффициента поглощения на краю собственного поглощения позволяет реализовать графическое определение оптической ширины запрещенной зоны для резкоанизотропных полупроводников, где общепринятая методика неприемлива. Представленные в работе результаты по комбинационному рассеянию света в *GaSe* позволят на основе сравнения с данными экспериментальных исследований, не разрушающих самого образца, делать выводы о кристаллической структуре такого слоистого полупроводника.

Результаты диссертации использовались для интерпретации экспериментальных данных, планирования экспериментов, а также для развития последующих теоретических исследований.

#### Основные защищаемые положения:

1. Особенности дисперсионных зависимостей электронов в СК как причина
  - возможных искажений решетки СК при гидростатическом сжатии или при его интеркаливании;
  - особенностей поляризационных свойств в окрестности топологического перехода Лифшица от открытой к замкнутой изосоэнергетической поверхности;
  - особенностей перенормировки электронного спектра электрон-фононным взаимодействием;
  - добавочной аномалии Кона и спектральной зависимости мнимой части поляризационной петли для СК во внешнем магнитном поле или для цепочечного кристалла с косинусоидальным законом дисперсии электронов;
  - немонотонной температурной зависимости парамагнитной составляющей магнитной восприимчивости носителей заряда СК.
2. Дифференциальное уравнение с отклоняющимся аргументом вдоль  $C$ -оси – как адекватное дифференциальному уравнению на собственные значения энергии экситонов в слоистых полупроводниках.
3. Модель типа модели Андерсона – модель для описания интеркалированного СК.
4. Исследование комбинационного рассеяния света как метод высе-

пресс-анализа структуры политипа слоистого полупроводника *GaSe*.

Апробация работы. Основные результаты доложены, обсуждены и опубликованы в трудах симпозиума по физическим свойствам сложных полупроводников /Баку, 1979/, XI всесоюзном совещании по физике низких температур /Харьков, 1980/, 4-го республиканского школы-семинара /Черновцы, 1980/, XV всесоюзного семинара "Экситоны в кристаллах" /Черновцы, 1981/, 2-го республиканского семинара по теории полупроводников /Черновцы, 1982/, XVI республиканской конференции по статистической физике /Львов, 1982/, международной конференции "Экситоны в полупроводниках-82" /Ленинград, 1982/, школы-семинара "Физика и химия интеркалированных и других квазидвухмерных систем" /Харьков, 1985/, всесоюзных семинаров "Энергетическая структура неметаллических кристаллов с различным типом химической связи" /Паланга Лит.ССР, 1986, Красный Лиман Донецкой обл., 1987/, всесоюзной конференции по физике сегнетоэлектриков /Черновцы, 1987/, II всесоюзной школы-семинара "Физика и материаловедение полупроводников с глубокими центрами" /Черновцы, 1988/, школ-семинаров по теории полупроводников /Красный Лиман Донецкой обл., 1988, Черновцы, 1990/, 14-го всесоюзного /Пекаревского/ совещания по теории полупроводников /Донецк, 1989/, а также опубликованы в материалах XVI международной конференции по физике низких температур /Лос-Анжелес, США, 1981/, XX совещания "Высокие давления в физике твердого тела" /Штутгарт, ФРГ, 1982/, 8-й всеобщей конференции конденсированного состояния /Будапешт, Венгрия, 1988/.

Результаты докладывались и обсуждались на научных семинарах Черновицкого отделения ИГи АН УССР, ИТФ АН УССР, Отделения "Статистическая физика" ИТФ АН УССР, ИГи АН УССР, ИФ АН УССР, ИФ АН АзССР, ИИИПТ АН УССР, Черновицкого городского семинара Западного научного центра АН УССР.

Вклад автора в разработку проблемы. Настоящая работа является обобщением исследований, выполненных автором в период с 1977 г. по настоящее время в Черновицком отделении Института проблем материаловедения АН УССР, и непосредственно связана с выполнением плановых научных исследований физики слоистых кристаллов и их практического применения Черновицким отделением ИГи АН УССР, проводимых на протяжении лет согласно Постановлению Президиума АН УССР №398 от 20.II.75г. и №604 от 25.II.80 г.

и М474 от 27.II.85 г. Личный вклад автора состоит в формировании описанного цикла исследований, теоретических расчетах, трактовке полученных результатов и осмысления их роли и места в современной физике твердого тела.

В работе также частично использованы результаты, изложенные в кандидатских диссертациях К.К.Данилевич-Товстук и Г.В.Вовкत्वской, которые получены при непосредственном участии автора, являвшегося руководителем этих диссертационных работ. В работах же выполненных с другими авторами, личное участие автора было определяющим/в [18] автору принадлежит теоретическая часть/.

Публикации. По теме диссертации автором опубликовано более 30 работ. Основное содержание диссертации опубликовано в статьях, список которых приведен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, двух приложений и главы, содержащей ее основные результаты и выводы. Каждая глава начинается с краткого обзора современного состояния рассматриваемой в главе задачи. Диссертация изложена на 228 страницах машинописного текста. Список цитируемой литературы включает 218 наименований.

#### СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.

Во введении обоснована актуальность рассмотренных в диссертации задач, сформулирована цель работы, изложено краткое содержание работы, ее научная и практическая ценность, перечислены основные защищаемые положения.

I-ая глава посвящена одноэлектронному приближению и эффектам из него вытекающим в СК.

Глава начинается из определений, описания объектов исследования.

СК могут быть представлены как совокупность подслоев, каждый из которых - набор моноатомных плоскостей типа X-M-X, где для большинства кристаллов X - халькоген / S, Se /, а M - либо металл переходной группы периодической таблицы элементов Менделеева, либо  $\text{Ga-Ga}$ ,  $\text{In-In}$  и др. В СК типа  $\text{Ag}_2\text{B}_6$   $\beta$ -модификации или дихалькогенидов переходных металлов  $\text{MX}_2$  с тригональным расположением катионов примитивная ячейка содержит по два подслоя, каждый из которых обладает точечной симметрией  $D_{3h}$ , а их взаимное расположение и определяет пространственную симметрию таких кристаллов -  $D_{6h}^N$ . Атомы в подслое связаны между собой ис-

валентной или ионно-ковалентной связи, в то время как межслойная связь более слабая -- ван-дер-ваальсова. Исходя из наличия различного типа химической связи в различных кристаллографических направлениях СК их резкоанизотропные свойства, казалось бы, следуют как что-то само собой разумеющееся, и именно поэтому, опираясь на качественные соображения, А.И.Губанов и А.Д.Чевычелов, а позже Р.Фиваз предложили модельный закон дисперсии для носителей в СК в точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна в виде:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}^*} + \beta(1 - \cos k_{\parallel}). \quad /I/$$

/I/ записан в системе координат с плоскостью XOY, совпадающей с плоскостью слоев, а OZ -- с направлением C-оси СК -- нормали к слоям.

/I/ "схватывает" отмеченные особенности СК -- сильную ковалентную связь в плоскости слоев, позволяющую при этом воспользоваться приближением эффективной массы  $m_{\perp}^*$  -- эффективная масса в плоскости слоев;  $\vec{k}_{\perp} = (k_x, k_y)$ , и слабое электронное перемешивание между слоями, описываемое в приближении ближайших соседей  $\beta$  -- константа межслойного перемешивания, равная по величине половине разрешенной зоны в направлении OZ обратного пространства, -- величина, определяющая степень квазидвухмерности закона дисперсии носителей/. В /I/ и ниже  $a_{\parallel}$  -- постоянная решетки вдоль C-оси принята равной единице.

Тем не менее представленный в обзоре к главе I анализ имеющихся на сегодняшний день исследований по электронному спектру СК приводит к выводу: несмотря на их многочисленность, такие исследования дают не всегда совпадающие между собой результаты /в вопросах зависимости энергии от квазиимпульса для различных зон, их абсолютного и взаимного расположения на энергетической шкале/, а также между результатами теоретических расчетов и экспериментальными данными. Разнобой в трактовке законов дисперсии носителей проявляется и исходя из экспериментальных исследований СК. В частности, в последнее время для интерпретации экспериментальных данных предлагается даже изотропный параболический закон дисперсии носителей.

Все это порождает проблемы, которые как последовательность взаимосвязанных задач сформулированы в диссертации. Часть из них, например, исследования многочастичных эффектов, возможна лишь

при известном спектре квазичастиц. Возникает необходимость выбора модели закона дисперсии носителей в СК. В качестве такового в настоящей работе был выбран закон дисперсии типа /1/ - наиболее общий, позволяющий моделировать в широких пределах степень анизотропии кристалла. С одной стороны, /1/ позволяет учесть эффекты ненарабличности, с другой - приближение эффективной массы по направлению С-оси содержится в /1/ как частный случай. При возрастании величины межслойного перемешивания, когда ширина разрешенной зоны в направлении  $Ox$  обратного пространства,  $2\beta$ , достигнет величины  $\sim$  единиц эВ /характерная величина ковалентной связи/, равной аналогичным величинам в направлении  $Ox, Oy$ , закон дисперсии становится близким к изотропному. При этом для малых  $k_x^2$  /1/ принимает параболический вид и в направлении С-оси -  $\hbar^2 k_x^2 / 2m_x^*$  с  $m_x^* = \hbar^2 / \beta$ . Если  $\beta$  порядка десятых эВ, при реально достижимых концентрациях носителей эффекты ненарабличности могут оказаться существенными и следует пользоваться /1/, в то время как при больших  $\beta$  закон дисперсии с  $m_x^*$  ниже химпотенциала с высокой точностью совпадает с точным законом дисперсии /1/.

В обзоре обсуждены возможные причины наблюдения в некоторых СК слабой анизотропии закона дисперсии носителей при наличии резкой анизотропии механических свойств. Одна из них - качество СК. Среди уникальных, но малопривлекательных особенностей СК - политипизм их кристаллических решеток. Например, кроме упоминаемой \* -модификации *base* существует еще по крайней мере три модификации, отличающиеся либо взаимным расположением подслоев, либо их количеством в примитивной ячейке, причем с малостатичными их, политипов, энергиями образования. Последнее обстоятельство является причиной получения при грубой технологии выращивания СК в виде смеси, причем в различных соотношениях, различных политипов. Очевидно, что для удовлетворительного согласования экспериментальных и теоретических расчетов зонного спектра необходима уверенность в том, что образцы, к которым прилагается теория, адекватны /по структуре/ образцы, параметры которых использованы в теории. Такая уверенность в физике СК на сегодняшний день отсутствует.

Более совершенные технологии получения СК позволяют получить кристаллы с резкоанизотропными свойствами. С тенденцией к получению таких высококачественных СК свидетельствует анализ и

них отношения проводимостей  $\epsilon_{\perp}/\epsilon_{\parallel}$  /  $\epsilon_{\perp}$  - проводимость в плоскости слоев,  $\epsilon_{\parallel}$  - вдоль С-оси/. Если 20 лет назад такое отношение составляло  $\sim 10^3$ , то в настоящее время оно достигло  $\sim 10^5 - 10^6$ .

/I/ - модельный закон дисперсии носителей, Возникает вопрос как он соотносится с аналогичным для реального кристалла. Такая задача была решена К.К.Данилевич-Товстик и Д.М.Берчой путем анализа секулярного детерминанта, полученного на базе локализованных функций с учетом конкретной симметрии СК и слабости межслойного перемешивания. Результаты для СК с симметрией  $D_{6h}^n$ , представителем которых является, напр.,  $\beta$ -GaSe, - законы дисперсии электронов, в точности совпадающие с /I/ для зон в окрестности точки Г, описываемых одномерными неприводимыми представлениями. Зоны же проводимости и валентная зона  $\beta$ -GaSe описываются именно такими одномерными представлениями -  $\Gamma_4^-$ ,  $\Gamma_3^+$  соответственно. Поэтому ниже /I/ привлекается не только для описания модельных задач, но и конкретного СК -  $\beta$ -GaSe.

Имеющиеся на сегодняшний день сомнения относительно степени анизотропии зонного спектра носителей в некоторых СК могут быть сняты более тщательными, чем большинство проведенных до сих пор опытов, которые бы давали не опосредствованную, а непосредственную информацию о зонных параметрах. К числу таких опытов следует отнести в первую очередь циклотронный резонанс.

В диссертационной работе была разработана теория циклотронного резонанса в СК с законом дисперсии носителей типа /I/ /§4 главы I/. Рассматривались два случая: 1/ квазиклассического приближения и 2/ квантовый. При условиях допускающих квазиклассическое приближение, выражение для циклотронной эффективной массы  $m_c^*$  в полупроводнике может быть получено из рассмотрения движения носителя по изоэнергетической поверхности. При этом  $m_c^* = (\partial S / \partial \epsilon)_{k_{\parallel}}$ , где  $S$  - площадь сечения изоэнергетической поверхности плоскостью с нормалью, совпадающей с направлением внешнего магнитного поля, а  $\epsilon$  - энергия.

Поскольку аналитическое определение  $S$  в случае произвольного направления магнитного поля  $\vec{H}$  не представляется возможным, то были рассмотрены два частных случая: а/ случай направления  $H$ , мало отличающегося от С-оси, и б/ произвольного направления  $\vec{H}$  в плоскости слоев, т.е. ХОУ. В последнем случае зависимость  $m_c^*$  от направления  $H$  возможна лишь при несовпада-

ших эффективных массах в плоскости слоев, т.е. при  $m_x^* \neq m_y^*$ . Такое условие несложно практически реализовать даже в изотропном в слое кристалле, т.е. с  $m_x^* = m_y^*$ , например, осевым, в плоскости XOY, сжатием. Такая деформация СК, перпендикулярная C-оси, практически не меняет  $\beta$  - величину, являющуюся целью исследования в данном случае /см. ниже/. В результате расчетов получены выражения для  $m_c^*$ , представляющие некие функциональные зависимости от  $\beta$ ,  $m_x^*$ ,  $m_y^*$  /или от  $m_x^*$  /,  $\epsilon$  /что характерно при выходе за рамки параболичности зоны/ и магнитного поля. Полученные выражения для  $m_c^*$  позволяют определить  $\beta$ . Действительно, проводя измерения  $m_c^*$  при четырех ориентациях магнитного поля и подставляя их в формулы для  $m_c^*$ , получим систему из четырех уравнений с четырьмя неизвестными -  $m_x^*$ ,  $m_y^*$ ,  $\beta$ ,  $\epsilon$ . Решая ее, получим, в частности, величину  $\beta$ , по которой, в духе вышеизложенного, можно судить насколько целесообразно пользоваться законом дисперсии носителей  $|I|$ , а не параболическим с  $m_c^*$ , а следовательно, решить вопрос о степени квазидвухмерности СК.

Отметим, что недавние исследования циклотронного резонанса в СК InSb - свидетельство реализации тех нетривиальных условий, при которых возможно такое информативное исследование.

В случае невыполнения критерия квазиклассичности необходимо решать квантовую задачу циклотронного резонанса, которая представляет собой стационарное уравнение Шредингера с произвольной ориентацией внешнего магнитного поля - пусть в плоскости XOZ /или YOZ /. После замены в  $|I| \vec{k} = i\vec{\nabla} + e\vec{A}/c$  /В.Л.Бонч-Бруевич, С.Г.Калашников/, где  $\vec{A}$  - векторный потенциал, гамильтониан можно разбить на два слагаемые так, что решение одного из них известно - это решение задачи гармонического осциллятора. Тогда исходная задача сводится к матричному уравнению Шредингера с эффективным гамильтонианом, построенном на базисе собственных функций, описывающих гармонический осциллятор. При этом такой эффективный гамильтониан - матрица типа матрицы Якоби, т.е. с отличными от нуля лишь диагональными и субдиагональными элементами. Такая задача может быть решена только численными методами.

В диссертации рассмотрен частный случай квантовой теории циклотронного резонанса, когда магнитное поле по направлению образует малые углы с C-осью. Тогда исходный гамильтониан может

быть разбит на два слагаемые  $H_1$  и  $H_2$  так, что решение с 1-ым известно /как и выше/, а 2-ое содержит косинус угла  $\vec{H}, \vec{Ox}$ , что в рассматриваемом случае выступает в роли малого параметра. Блоховский электрон в присутствии магнитного поля описывается вырожденным по квазиимпульсу /в нас по  $k_y$ / состоянием, что следует учитывать при решении задачи по теории возмущений. Нами рассмотрен упрощенный случай, отражающий тенденцию искажения спектра в магнитном поле с  $\vec{H} \parallel Oz$ , т.е.

$$E_n(k_x) = \hbar \omega_b \left( n + \frac{1}{2} \right) + \beta (1 - \cos k_x), \quad /2/$$

гамильтонианом  $H_2 \sim \cos(\vec{H}, \vec{Ox})$ , а именно, \* когда в суперпозиции по состояниям  $k_y$  в  $|n k_x k_y\rangle$  - собственной функции гамильтониана  $H_1$ , существенно лишь одно состояние с неким  $k_{y0}$ . Тогда  $E_n(k_x)$  из /2/ в первом приближении по теории возмущений сместится на энергетической шкале на величину  $\langle n k_x k_{y0} | H_2 | n k_x k_{y0} \rangle$ . При этом наблюдается существенная зависимость спектра /2/ от  $\vec{H}$ : даже при бесконечно малом изменении направления магнитного поля от  $Oz$  - "схлонивание" зоны по  $k_x$  в уровень. Столь резкое,  $\sigma$ -образное, изменение следует рассматривать скорее как тенденцию. В действительности же, такой переход будет иметь более размытый характер при учете в разложении волновой функции по  $|n k_x k_y\rangle$  других, а не только с  $k_{y0}$ , состояний вырожденного уровня.

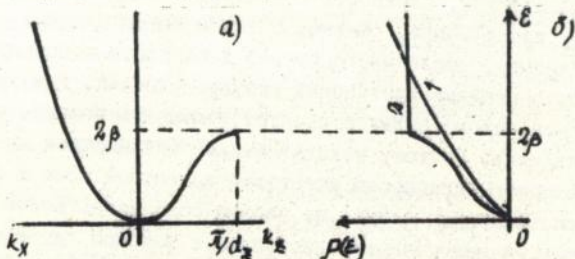
В последующих параграфах гл. I рассмотрены эффекты твердого тела, где закон дисперсии носителей особенно важен. Среди них - исследование оптического поглощения в слоистых полупроводниках в области края собственного поглощения света. Отметим, что СК представляют собой удобные объекты для проведения подобных исследований: благодаря слоистости и спайности удается получить образцы практически любой требуемой толщины, вплоть до  $\sim 10$  микрон. При скалывании СК получаются естественные, абсолютно гладкие грани, не нуждающиеся в дополнительной шлифовке и полировке - процедурах, резко искажающих оптические измерения.

Известно, что при анализе экспериментальных данных по оптическому краю поглощения света прямозонных полупроводников по линейной зависимости  $[\alpha(\omega) \cdot \omega]^{1/2}$  либо  $[\alpha(\omega) \cdot \omega]^{3/2}$  графически определяется оптическая ширина запрещенной зоны  $E_g / \alpha(\omega)$  - коэффициент поглощения/. По такие зависимости - результат параболического закона дисперсии носителей. В ряде экспериментальных исследований красного оптического поглощения на слоистых полупро-

водниках наблюдалось резкое возрастание  $\epsilon(\omega)$ , которое не укладывалось ни в одну из известных зависимостей, полученных для параболических законов дисперсии. Возник вопрос о роли законов дисперсии типа /1/. При интересующих нас частотах,  $\omega \sim E_g/\hbar$ , зависимость  $\epsilon(\omega)$  может быть представлена в простом виде, т.к. действительный показатель преломления, фигурирующий в выражении для  $\epsilon(\omega)$ , слабо зависит от частоты, и  $\epsilon(\omega)$  определяется обобщенной плотностью состояний, с виде которой можно судить из рис.1б. Как обычная, так и обобщенная плотности состояний в СК обладают тем характерным свойством, что у дна зоны для обычной и для  $\omega \sim E_g/\hbar$  для обобщенной, она больше по величине аналогичной плотности для изотропного закона дисперсии. Это позволяет качественно объяснить упоминаемое выше более резкое, чем в изотропных полупроводниках, экспериментально наблюдаемое изменение  $\epsilon(\omega)$  в слоистых полупроводниках.

В работе рассмотрены случаи разрешенных и запрещенных прямых переходов. В I-ом случае предложена система координат, позволяющая графическое определение оптической ширины запрещенной зоны. Полученная зависимость  $\epsilon(\omega)$  позволяет решать обсуждавшуюся выше актуальную задачу СК: по известной  $E_g$  определять  $\beta$ . Сделаны оценки влияния непараболическости закона дисперсии носителей в данном эффекте. Показано, что наиболее существенное отличие от изотропной модели, приблизительно на 10%, наблюдается в области частот  $\omega \sim (E_g + \beta v_c + \beta v_v)/\hbar$  /с,  $v_c, v_v$  - индексы зоны проводимости и валентной зоны соответственно/. В области  $\omega > (E_g + \beta v_c + \beta v_v)/\hbar$   $\epsilon(\omega) \cdot \omega \approx \text{const}$ .

Представленная на рис.1б плотность состояний электронов в СК, соответствующая закону дисперсии /1/ /см.рис.1а/, обладает



Фиг.1. а/ Закон дисперсии электронов СК /1/ в направлениях  $Ox$  и  $Oz$  обратного пространства; б/ плотность состояний: 1 - соответствующая параболическому, а 2 - закону дисперсии /1/.

неаналитичностью первой производной по частоте при  $\omega = \omega_p/\eta$ . Такая точка соответствует точке так называемого перехода  $2^{1/2}$ -рода /И.М.Лифшиц/. Суть перехода состоит в топологическом изменении изоэнергетической поверхности – переход от замкнутой к открытой в точке  $\omega = \omega_p/\eta$ , происходящем без изменения симметрии кристаллической решетки или значительного изменения числа носителей. Возникает вопрос о проявлении такой особенности плотности состояний в СК в парамагнитной составляющей магнитной восприимчивости носителей  $\chi_p$  – физической характеристике, непосредственно связанной с плотностью состояний. Такая задача, представленная в §6, сводилась к определению перераспределения электронов с различными спинами на энергетической шкале под действием внешнего магнитного поля. Расчеты  $\chi_p$  как функции температуры при различных заполнениях зоны проводимости были проведены на ЭВМ ЕС 1020. В результате было получено аномальное – немонотонное – изменение  $\chi_p$  с температурой при заполнениях зоны в окрестности перехода Лифшица. С целью устранения возможных сомнений в правильности численных расчетов нами были проведены аналогичные представленным выше расчеты, используя тот же алгоритм вычислений, для изотропной модели дисперсии носителей. При этом было получено известное в литературе поведение  $\chi_p(T)$  – ее монотонное уменьшение с ростом температуры. Сравнение  $\chi_p$  по величине для изотропной модели и модели типа /I/ показывает, что она больше во втором случае, что связано с отличием величин плотности состояний в первом и во втором случаях. Отметим, что в случае СК существуют внешние факторы, позволяющие менять  $\epsilon$ , а следовательно, плотность состояний – гидростатическое или осевое, вдоль С-оси, сжатие, а также интеркаляция.

Наконец, последний параграф I-ой главы посвящен экситонному спектру в крайнеанизотропных полупроводниках. При исследовании экситонов малого радиуса следует учитывать большие области зоны Бриллюэна. Поэтому модель Ваннье, опирающаяся на параболические законы дисперсии носителей валентной зоны и зоны проводимости, в данном случае не вполне оправдана. Более того, для слоистых /и цепочечных/ кристаллов с законом дисперсии носителей типа /I/, применимость обычной модели Ваннье еще более сомнительна. Выход за рамки параболическости законов дисперсии носителей важен в модели Ваннье не только для задачи крайнеанизотропных моделей, но и из-за возможности выхода за рамки ограниченной самой модели. Действительно, такая модель неприменима

для описания экситона малого радиуса даже в изотропных кристаллах по причине параболичности законов дисперсии носителей в зонах при выводе основных соотношений модели. Такое предположение, согласно соотношению неспределенности, справедливо лишь для небольшой окрестности особой точки зоны Бриллюэна, а следовательно, большого расстояния, т.е. радиуса экситона. Для малых же радиусов следует рассматривать большие области  $k$ -пространства, где и актуален учет непараболичности законов дисперсии носителей.

В настоящем параграфе получено адекватное дифференциальному уравнению уравнение для энергетических экситонных состояний в СК. С этой целью в сформулированном Ванье уравнении рассматривались непараболические законы дисперсии  $\epsilon_c(\vec{k})$ ,  $\epsilon_v(\vec{k})$  типа /I/. После замены в них  $\vec{k}$  операторами  $(-i\vec{\nabla} \pm \frac{1}{2}\vec{z})$  учитывалось, что  $\cos(-i\vec{v}_z \cdot \vec{d}_z) = \text{ch}(\frac{v_z d_z}{2}) = \frac{1}{2}(e^{v_z d_z} + e^{-v_z d_z})$  и действие такого функционального оператора на собственную функцию равнозначно действию оператора смещения, т.е.  $\exp(\pm \frac{v_z d_z}{2})f(z) = f(z \pm d_z)$ . Окончательное уравнение сводится к дифференциальному уравнению с отклоняющимся аргументом волновой функции вдоль нормали слоев для СК и  $x$ -,  $y$ -аргумента в случае цепочечного кристалла, направленного вдоль  $Oz$ . Проанализирован вид уравнения для некоторых граничных условий. Одно из них - случай большого по сравнению с постоянной решетки вдоль  $Oz$  значения  $z$ -свой составляющей радиуса экситона в СК. В этом случае уравнение с отклоняющимся аргументом приводится к обычному уравнению Ванье. Так как в таких популярных слюистых полупроводниках как *CdSe* и *InSe*  $z$ -овая компонента радиуса экситона велика, то согласно сказанному, если не преследуется особая точность, задача на собственные значения энергии экситонов в таких кристаллах может быть решена в рамках обычной теории Ванье. Иными словами, непараболичность законов дисперсии электрона и дырки, породивших экситон, в общем случае приводящая к дифференциальному уравнению с отклоняющимся аргументом, в данном случае несущественна.

Во второй главе предложено комбинационное рассеяние света в качестве экспресс-анализа определения политипов *CdSe*. На важность такой информации указывалось выше. Предложенный метод обладает рядом преимуществ перед традиционным методом - рентгеноструктурным анализом. Первый метод позво-

яет работать с малыми по размеру образцами, не разрушая их при этом, и характеризуется малым временем эксперимента. Надо отметить перспективность современного метода комбинационного рассеяния с применением лазеров в качестве источника для СК из-за возможности исследования спектров рассеяния при различных температурах, различных, вплоть до высоких, давлениях, меняющих степень слоистости СК. В работе анализировалась степень деполяризации,  $\rho = I_{\perp} / I_{\parallel}$ , где  $I_{\perp} / I_{\parallel}$  - интенсивность излучения той составляющей дипольного момента, которая излучает параллельно /перпендикулярно/ плоскости рассеяния. Для падающего света вдоль С-оси анализировался фактор деполяризации рассеяния в плоскости XOY. Полученные результаты указывают на возможность разделения совпадающих пиков  $E_1$   $\delta$ -base и  $E_1'$   $\sigma$ -base на частоте  $19.3 \text{ см}^{-1}$ , а также  $\sigma$ - и  $\rho$ -модификаций на частоте  $59.1 \text{ см}^{-1}$ , и окончательно установить наличие или отсутствие таких политипов в исследуемом образце.

Третья глава посвящена исследованию особенностей электрон-фононного взаимодействия в СК на примере эффекта Яна-Теллера. Рассмотрим конкретный СК -  $\rho$ -base. Как отмечалось выше, его элементарная ячейка состоит из двух подслоев симметрии  $D_{3h}$ , которые и определяют его пространственную симметрию -  $D_{6h}^4$ . Исходя из симметрии можно проклассифицировать нормальные колебания решетки по неприводимым представлениям. В точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна они суть  $\Gamma_1^+ /1/$ ,  $\Gamma_2^+ /1/$ ,  $\Gamma_3^+ /1/$ ,  $\Gamma_4^+ /1/$  - колебания атомов вдоль С-оси,  $\Gamma_5^- /2/$ ,  $\Gamma_6^- /2/$  - в плоскости слоев /в скобках указана кратность вырождения мод/. Наличие в элементарной ячейке двух слабозадействующих подслоев порождает, в частности, в электронном спектре пары близкорасположенных зон - аналог давидовских уровней/зон/. Из условия совместимости групп симметрий подслоев и слоя /У. Дерешвайне, 1984/ можно сделать вывод о наличии следующих давидовских дублетов в точке  $\Gamma$ :

$\Gamma_1^+ /1/ - \Gamma_4^+ /1/$ ,  $\Gamma_2^+ /1/ - \Gamma_3^+ /1/$ ,  $\Gamma_5^- /2/ - \Gamma_6^- /2/$  в задачах без учета спина и  $\Gamma_7^+ /2/ - \Gamma_8^+ /2/$ ,  $\Gamma_9^+ /2/ - \Gamma_9^- /2/$  в задачах с учетом спина.

Отмеченная особенность электронного спектра СК ставит их в ряд объектов, благоприятных с точки зрения проявления в них эффекта, а точнее псевдоэффекта Яна-Теллера. Известно, что теорема Яна-Теллера утверждает о нестабильности электронного ви-

рождения по отношению к дисторсии, снижающей это вырождение, и справедлива также для случая близкорасположенных уровней /зон/ - псевдоэффект Яна-Теллера. Реализация его критерия -  $\Delta < \hbar^2 / K$  /И.Б.Берсукер/ /  $\Delta$  - энергетическая щель между близкими уровнями,  $\hbar$  - интенсивность электрон-колебательного взаимодействия,  $K$  - силовая постоянная/ упрощена в СК малостью  $\Delta$  и  $K$ .

В первой задаче 3-ей главы исследовался адиабатический потенциал системы электронов и фононов, взаимодействующих в первом порядке по смещениям атомов и описываемой эффективным гамильтонианом, построенном на собственных волновых функциях давидовского дублета,

$$\mathcal{H}_{ij} = E_i \delta_{ij} + \frac{1}{2} \sum_s \left( \frac{p_s^2}{\mu_s} + \mu_s \omega_s^2 Q_s^2 \right) + \sum_s h_{ij}(s) Q_s, \quad /3/$$

где 1-ое слагаемое - энергия электронной подсистемы, 2-ое - энергия колебаний в гармоническом приближении / $p_s$  - оператор импульса, сопряженный с нормальным смещением  $Q_s$ ;  $\mu_s$  - эффективная масса,  $\omega_s$  - частота  $s$ -ой нормальной моды/; 3-е - электрон-решеточное взаимодействие в линейном по смещениям атомов приближении с интенсивностью  $h_{ij}(s)$ . Иногда по виду адиабатического потенциала можно судить о характере динамики ядер, не решая точную для такой системы вибронную задачу.

Адиабатический потенциал исследовался для различных, приведенных выше дублетов. В случае дублета  $\Gamma_7^+ - \Gamma_8^-$  активными с точки зрения проявления эффекта Яна-Теллера /т.е. при которых  $h_{ij}(s) \neq 0$ , что можно установить по правилам отбора/ являются моды, преобразующиеся по неприводимым представлениям  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_5$ ,  $\Gamma_4$ ,  $\Gamma_6$ , причем первые две ответственны за "чистый" эффект Яна-Теллера - расщепление двухкратновырожденных  $\Gamma_7$ ,  $\Gamma_8$ , а две последние - за "чистый" псевдоэффект, при котором меняется лишь величина давидовской щели  $\Delta_D$ . В частности, при исследовании адиабатического потенциала в случае "чистого" псевдоэффекта получено, что вид его зависит от величины давидовской щели. На шкале  $\Delta_D$  существует 3 области, в которых: 1/  $\Delta_D \rightarrow 0$  - при больших  $\Delta_D$ , / $Q_4^0, Q_6^0$  - дисторсии кристалла, преобразующиеся соответственно по неприводимым представлениям  $\Gamma_4$  и  $\Gamma_6$ /, т.е. СК неискажен электрон-колебательным взаимодействием; 2/ по мере уменьшения  $\Delta_D$  - проявление одной из дисторсий  $Q_4^0 \neq 0$  при  $Q_6^0 = 0$  или наоборот в зависимости от соотношения частот таких мод и их

взаимодействия с электронами; и наконец  $\Delta_D$  при дальнейшем уменьшении  $\Delta_D$  — возможность сосуществования обоих типов дисторсий. Если учесть, что величина давидовской щели в СК может меняться такими внешними воздействиями как гидростатической или осевой, вдоль  $O$ -оси, сжатие, то это позволит создавать те или иные условия проявления или снятия дисторсий.

Кооперативному эффекту Яна-Теллера посвящен следующий параграф гл.3. При этом взаимодействующая в линейном по смещениям атомов приближении электрон-колебательная система описывается гамильтонианом типа /3/, в котором учитывается зависимость от квазимпульса. В приближении среднего поля было получено уравнение для величин  $\langle \delta_{\vec{q}} \rangle$ , описывающей статическое искажение решетки / $\vec{q}$  — квазимпульс,  $f$  — номер активной с точки зрения эффекта Яна-Теллера ветви/. Такое уравнение вместе с уравнением, определяющим положение химпотенциала, образуют систему уравнений, исследование которой для случая равномерных искажений, т.е.  $\langle \delta_{\vec{q}f} \rangle = \delta_{\vec{q}0} \langle \delta_{2f} \rangle$ , приводит к необходимому условию существования дисторсии кристаллической решетки:

$$\frac{\omega_f}{\Phi} < \min \left\{ \frac{4n}{\Delta_D}, 4r [1 - \exp(-\frac{n}{2\rho\theta})] \right\}, \quad /4/$$

где  $\Phi$  — величина электрон-колебательного взаимодействия,  $n$  — количество носителей в системе,  $\rho$  — плотность состояний электронных зон.

Из /4/ следует, что, во-первых, благоприятным для реализации дисторсии кристаллической решетки является малое значение отношения  $\omega_f / \Phi$ ; и, во-вторых, возможность стимулированного перехода от искаженной фазы СК к неискаженной под действием, например, гидростатического сжатия. Действительно, при этом кристалл становится более жестким, т.е. увеличивается  $\omega_f$ , и одновременно увеличивается величина давидовской щели  $\Delta_D$ .

Согласно /4/ при  $n \rightarrow 0$  реализация искаженного состояния невозможна. Такой же вывод следует из точного решения /а не из необходимого условия /4// системы уравнений в пределе  $n \rightarrow \infty$ .

Полученные выводы привлекаются к анализу свойств интеркалированных СК. Согласно широкоиспользуемой при описании интеркаляции модели "жестких" зон, интеркаляция — введение инородных атомов /молекул/ в ван-дер-ваальсовы пространства СК — не ме-

няет его зонных параметров, а лишь приводит к дозаполнению зон. Поэтому в рамках такой модели и полученных выше результатов интеркаляцию можно рассматривать как лишь изменение  $n$ . Таким образом, если решетка исходного неинтеркалированного СК неискажена, то, согласно вышесказанному, интеркалирование в начальной его стадии может привести к искажению решетки, а в дальнейшем — из-за увеличения концентрации носителей — к ее исходному, неискаженному состоянию. Такие изменения в перестройке решетки в процессе интеркаляции взаимосвязаны и изменение одного, скажем, переход в искаженную фазу решетки, может влиять на интеркаляцию, ее кинетику, и наоборот.

В 4-ой главе обоснована модель теоретического описания интеркалированного СК и на ее основе рассмотрен электронный спектр такого кристалла и электронное заполнение интеркалированных атомов.

При выборе модели, описывающей интеркалированный СК, среди уже существующих моделей твердого тела обращалось внимание на два обстоятельства: а/ наличие в СК слабой межслойной связи и б/ образование интеркалированными атомами двухмерной суперструктуры. Такие обстоятельства позволяют провести некоторую параллель между настоящей задачей и задачей адсорбированного на кристаллической поверхности монослоя атомов. Действительно, атомные плоскости, ограничивающие ван-дер-ваальсовы пространства СК, из-за слабого межслойного перемешивания можно отождествить с ролью поверхности в задаче с адсорбцией. С этой точки зрения СК можно рассматривать как кристалл с довольно развитой "поверхностью": для одинаковых по размерам в виде параллелепипеда образцов СК и адсорбента  $\lambda_x \cdot \lambda_y \cdot \lambda_z / \lambda_z$  — величина стороны параллелепипеда/ размеры "поверхности" для СК в  $\lambda_x / \lambda_z$  раз больше /  $\lambda_y$  — постоянная решетки СК вдоль C-оси/. Таким образом, поверхности подслоев можно отождествить с поверхностью адсорбента, а интеркалированные атомы — с адатомами, также в большинстве случаев образующих суперструктуру, и для теоретического описания использовать ту же модель — типа модели Андерсона, которая интенсивно используется для описания адсорбции /Д.Ньюс и др./. Следует отметить, что в нашем случае задача намного проще, т.к. задача интеркаляции — задача объемная, тогда как задача адсорбции — в значительной степени связанная с поверхностью. Таким образом, в первом случае поверхностные эффекты ничтожны, в то

время как во втором случае наличие поверхности должно быть учтено /если задачу решать последовательно/ в исходном гамильтониане, что само по себе — нетривиальная задача.

В работе предложена модель типа модели Андерсона для описания интеркалированного СК, в рамках которой а/ рассматривается бесспиновая задача и б/ кулоновское взаимодействие электронов рассматривается на различных интеркалированных атомах, т.е.

$U, n, n_i$ . Учет такого кулоновского взаимодействия важен, т.к. большинство интеркалиантов /напр., щелочные металлы в дихалькогенидах переходных металлов/, попадающих в ван-дер-ваальсовы щели, ионизируются, отдавая свои валентные электроны в зону СК.

На основе такой модели рассмотрим спектр  $\rho$  интеркалированного слоистого полупроводника. Используя методику двухвременных запаздывающих функций Грина в приближении Хартри-Фока, анализируются локализованные состояния, связанные с интеркалированными атомами в СК. В результате получено, что кулоновское взаимодействие между электронами на интеркалированных атомах понижает энергию активации локализованного уровня. Проанализирована также температурная зависимость положения такого уровня на энергетической шкале /по его зависимости от  $\langle n_i \rangle$ /. В зависимости от соотношения между исходным положением уровня изолированного интеркалианта  $\epsilon$ , величиной электронного перемешивания интеркалиант-интеркалят и кулоновского взаимодействия между электронами на интеркалированных атомах перенормированное положение уровня от температуры может меняться по-разному: либо подтягиваться ко дну зоны проводимости, либо опускаться вглубь запрещенной зоны.

В следующем параграфе данной главы исследуется заполнение узлов интеркалированных атомов. С этой целью используется предложенная в предыдущем параграфе модель для описания однозонной двухпримесной системы. При бесконечно удаленных интеркалированных узлах кулоновское взаимодействие между электронами на них  $U \approx 0$  и его можно использовать в качестве малого параметра. При этом с точностью до линейных членов по  $U$  в случае равномерного электронного заполнения интеркалированных узлов  $\langle n \rangle$  получим

$$\langle n \rangle = \langle n \rangle_{U=0} \left\{ 1 - \frac{U}{2\theta} \left[ e^{\frac{\epsilon+W+M-\mu}{\theta}} f(\epsilon+W+M) + e^{\frac{\epsilon+W-\mu}{\theta}} f(\epsilon+W-M) \right] \right\}, /5/$$

где  $f(\epsilon)$  - функции распределения Ферми-Дирака,  $\mu$  - химпотенциал,  $M^2 = W_{01}W_{10} / W_{AA} = \sum_{\vec{k}} \frac{V(\vec{k}/a)V(\vec{k}'/a)}{\omega - \epsilon_{\vec{k}}}$  с  $V(\vec{k}/a)$  - интегралом электронного перемешивания между кристаллической матрицей и локализованных в  $\vec{R}_\alpha$  ( $\alpha = 0, 1$ ) интеркалированных атомов/, а  $W = W_{00} = W_{11}$ .

Детально анализируются условия неравномерного электронного заполнения интеркалированных атомов, т.е. когда  $\langle n_0 \rangle \neq \langle n_1 \rangle$ . Исследована роль электронного перемешивания  $V(\vec{k}/a)$  в реализации  $\langle n_0 \rangle \neq \langle n_1 \rangle$ . Анализ полученных  $\langle n_0 \rangle, \langle n_1 \rangle$  в области низких температур в пределе малых  $V(\vec{k}/a)$  показывает, что его,  $V(\vec{k}/a)$ , изменение по разному может влиять на условие реализации неравенства между  $\langle n_0 \rangle$  и  $\langle n_1 \rangle$  в зависимости от величин самих  $\langle n_0 \rangle, \langle n_1 \rangle$ .

В последнем параграфе главы полученные выше выводы, в частности /5/, привлекается к объяснению экспериментально наблюдаемого поведения химического потенциала в концентрации носителей заряда в слоистом полупроводнике  $VI_2Te_3$  в зависимости от степени интеркалирования его литием [16]. Связывая увеличение степени интеркалирования с уменьшением расстояния между соседними интеркалированными атомами, а следовательно, увеличением  $U$ , пользуясь /5/, можно объяснить природу экспериментально наблюдаемого возрастания химпотенциала и концентрации носителей заряда для  $x > 0.17$  /  $x$  - количество интеркалированных атомов лития на одну формульную единицу исходного  $VI_2Te_3$ /.

В главе 5 рассмотрены многочастичные эффекты в СК в отсутствие внешнего магнитного поля.

В §1 главы исследовалось электрон-фононное взаимодействие в СК с учетом особенностей законов дисперсии как электронов /см./I//, так и фононов /изгибные/ колебания/. Рассматривалась модельная задача - искажение закона дисперсии носителей СК электрон-фононным взаимодействием /в первом порядке по такому взаимодействию/ в окрестности химического потенциала  $\mu$  /А.Б.Мигдал/, а точнее, мнимую часть массового оператора  $\delta \epsilon_{\vec{k}}$ . Рассмотрены два предельных случая фононной моды  $\omega(\vec{k})$ : а)  $\omega(\vec{k}) \sim k_{\perp}^2$  и б)  $\omega(\vec{k}) \sim k_{\perp}$ . Как в первом, так и во втором случае получены выражения для  $Im \delta \epsilon_{\vec{k}}$  в виде слагаемых, часть из которых зависит, а часть не зависит от энергии  $\epsilon$ . Так как  $Im \delta \epsilon_{\vec{k}}$  описывает размытие уровней, то первая часть слагаемых,  $\Gamma(\epsilon)$ , будет описывать размытие, величина которого будет зависеть от положе-

ния уровня на энергетической шкале. В работе были определены области  $(\mu, \epsilon)$ , где  $\Gamma(\epsilon) \neq 0$ . Полученные выводы сравнивались с аналогичными в случае перехода к закону дисперсии носителей со слабой анизотропией. Показано, что величина разрешенной зоны в направлении  $C$ -оси,  $2\beta$ , отражается на том, что область  $(\mu, \epsilon)$ , в которой  $\Gamma(\epsilon) \neq 0$ , тем меньше, чем меньше  $\beta$ , т.е. чем больше выражена слоистость СК.

В §2 гл.5 представлена особенность поляризации  $Re \Pi(\varphi)$  в окрестности перехода Лифшица в СК, полученная в результате анализа поляризационного оператора для электронов с законом дисперсии  $\propto |k|$ . Проведенные расчеты  $Re \Pi$  как функции межслойного перемешивания  $\beta$  при заполнениях зоны, при которых реализуется переход Лифшица. Получено резкое изменение  $Re \Pi(\beta)$  при переходе от открытой к замкнутой изоэнергетической поверхности.

Последняя, 6-ая глава, посвящена многочастичным эффектам в СК во внешнем магнитном поле  $\vec{H}$ . В подобной задаче существующие методы при  $\vec{H} = 0$  не могут быть автоматически перенесены на случай с внешним магнитным полем. Действительно, в случае идеального кристалла в отсутствие магнитного поля, например, диаграммная техника строится, как правило, на языке Фурье-образов функций Грина с учетом однородности пространства. Если на тот же идеальный кристалл наложить внешнее магнитное поле, то из-за зависимости векторного потенциала от координат, рассматриваемая система становится формально неоднородной, что, в конечном счете, значительно усложняет математическую сторону задачи. Поэтому в §1 главы разработана диаграммная техника для электронной подсистемы изотропного кристалла во внешнем магнитном поле. С этой целью рассматривался гамильтониан электронов с учетом межэлектронного кулоновского взаимодействия и внешнего магнитного поля, направленного вдоль  $Oz$ . Переход к представлению вторичного квантования проведен на полном ортонормированном базисе функций Ландау, характеризующихся квантовыми числами  $\alpha = \{n, k_x, k_y\}$  /  $n$  - номер уровня Ландау/. При этом гамильтониан принимает вид

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4} V_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4} a_{\alpha_1}^{\dagger} a_{\alpha_2}^{\dagger} a_{\alpha_3} a_{\alpha_4}. \quad /6/$$

Здесь

$$\dot{\epsilon}_2 = A + \frac{\pi^2 k_F}{2m}$$

/7/

с  $A = \pi v_0 (n + \frac{1}{2})$  ( $v_0 = \frac{eH}{mc}$ );  $B_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}$  - матричный элемент кулоновского взаимодействия, вычисленный на функциях Ландау. Для введенной функции Грина  $G_{\alpha\alpha}(\tau - \tau') = -i \langle T a_{\alpha}(\tau) a_{\alpha}^{\dagger}(\tau') \rangle$  была разработана диаграммная техника для случая  $T = 0$ . Вид диаграмм в случае  $\vec{H} \neq 0$  не отличается от их вида в обычной технике, с  $\vec{H} = 0$ , за исключением правил сопоставления аналитических выражений диаграммам. Из сопоставления диаграмм, описывающих обменное взаимодействие при наличии магнитного поля и без него, получен и проанализирован аналог фурье-образа кулоновского потенциала в присутствии магнитного поля,  $V(n, n_2, q_z)$ . Показано, что такое "голое" взаимодействие электронов в состояниях  $n_1$  и  $n_2$  сингулярно в длинноволновом пределе,  $q_z \rightarrow 0$ , при  $n_1 = n_2$ . Показано, что экранирование в приближении хаотических фаз снимает такую сингулярность. Проанализирована  $V(0, n, q_z)$  в том же пределе. Показано, что из-за свойств заполнения уровней Ландау вытекают особенности потенциалов  $V(n, n, q_z \rightarrow 0)$ , а именно: их осциллирующая зависимость при изменении внешнего магнитного поля и/или заполнения зон.

В следующем параграфе представлены особенности поляриза-ционного оператора в СК, опираясь на выражения для  $Re \Pi_{\alpha\alpha}$ , полученные при анализе экранирования кулоновского взаимодействия во внешнем магнитном поле в предыдущем параграфе. При этом собственные значения энергии электронов СК во внешнем магнитном поле, направленном вдоль С-оси, имеют вид /2/. Если формально принять первое слагаемое в /2/ равным константе, то такой спектр совпадает с собственными значениями энергии цепочечного кристалла без или с магнитным полем, направленным вдоль его оси. Таким образом, полученные в работе выводы в одинаковой мере справедливы и для одномерного кристалла, но с непараболическим законом дисперсии носителей /в противоположность известным моделям/.

Анализ  $Re \Pi_{n, n_2}$  при  $n_1 = n_2$  в статическом пределе обнаруживает ее сингулярности при изменении  $q_z$ , а именно: при  $q_z = 2k_F$  и  $q_z = 2(\pi - k_F) / k_F$  - импульс Ферми/. Сингулярность при  $q_z = 2k_F$  повторяется также и в трехмерных кристаллах с параболическими за-

коном дисперсии без магнитного поля с той лишь разницей, что в последнем случае сингулярен лишь сомножитель  $|n|$  в  $Re \Pi(\omega)$ , но поляризационный оператор при этом — конечная величина, в то время как в одномерном кристалле или в трехмерном в магнитном поле такая сингулярность присуща и  $Re \Pi_{nn}$ . Физические проявления сингулярности на  $q_z = 2k_z$  — известны: это либо переход Гайерса в одномерной структуре, либо коновская аномалия в фоновом спектре, проявляющаяся в смитчении фононной моды. В исследуемой нами задаче, таким образом, появилась аналогичная дисперсионная сингулярность, т.е. реализуется случай, на возможность которого указывал Дж.Займан.

В последнем параграфе проанализирована мнимая часть  $\Pi_{nn}$  в рассматриваемой задаче. Полученные результаты сравниваются с рассчитанной в работе  $Im \Pi_{nn}$  для параболического закона дисперсии  $\omega/\omega_0$ . Отличие между ними состоит в том, что  $Im \Pi_{nn}$  в случае СК зависит от частоты и не зависит для изотропного кристалла. Показано, что такая зависимость тем более существенна, чем больше выражена сложность, и пропадает при увеличении в  $Im \Pi_{nn}$  для СК либо величины ее разрешенной зоны вдоль  $OZ$  и/или уменьшения ее заполнения.

В приложении рассматривается вопрос о правомочности использования уравнения Ванье для описания экситонных состояний в случае СК /§7, гл. I/, а в приложении 2 вычислены функции Грина в интеркалированном СК.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

I. Развита теория циклотронного резонанса в СК, получены аналитические выражения для циклотронной эффективной массы при различных ориентациях внешнего магнитного поля. Подобные результаты совместно с экспериментально исследуемой циклотронной эффективной массой способны дать однозначный ответ на вопрос насколько важен учет непараболичности в законе дисперсии носителей в СК.

Рассмотрена квантовая теория циклотронного резонанса в СК. Полученные при этом выводы указывают на существенную зависимость спектра носителей во внешнем магнитном поле от его ориентации относительно нормали к слоям в СК.

2. Проведено исследование оптического поглощения света прямо-зонных слоистых полупроводников в области края собственного поглощения. Представлен способ графического определения оптической ширины запрещенной зоны  $E_g$  при прямых разрешенных переходах. Полученное выражение частотной зависимости коэффициента поглощения совместно с экспериментальными данными такой величины позволяют при известной  $E_g$  оценить степень слоистости  $\beta$  исследуемого СК. Показано, что наиболее существенное отличие коэффициента поглощения, рассчитанное в рамках изотропной модели носителей и с учетом непараболичности типа  $\Gamma$ , имеет место на частоте  $\sim E_g + \beta$  ( $\beta = \beta_c + \beta_v$ ).

3. На основании анализа температурной зависимости парамагнитной составляющей магнитной восприимчивости носителей СК установлено, что она обладает немонотонным характером в области перехода Лифшица, т.е. вблизи заполнения зоны, при котором изоэнергетическая поверхность меняет топологию, переходя от открытой к замкнутой.

4. Получено точное уравнение на собственные значения энергии для экситонов в крайнеанизотропных, в том числе и слоистых полупроводниках, представляющее собой дифференциальное уравнение с отклоняющимся аргументом. Как частный случай, для экситонов в СК с большой  $\kappa$ -овой составляющей радиуса, полученное уравнение переходит к общепринятому уравнению на собственные значения энергии — уравнению Ванье, полученному в предположении о параболических законах дисперсии как валентной зоны, так и зоны проводимости.

5. Предложен метод комбинационного рассеяния света в качестве неразрушающего исследуемый образец экспресс-метода определения политипа  $\Gamma$ -ов/ слоистого полупроводника  $InSe$ .

6. Разработана теория эффекта Яна-Теллера в СК со свойственными им давидовски расщепленными электронными зонами. Получены и проанализированы адиабатические потенциалы. Указано на существование области проявления различного типа искажений за счет электрон-колебательного взаимодействия в зависимости от ширины давидовской щели.

Исследовано влияние закона дисперсии носителей на искажения решетки в эффекте Яна-Теллера и проанализированы проявления

такого искажения при интеркаляции СК.

7. Проведено исследование перенормировки электрон-фононным взаимодействием в СК затравочного электронного спектра с учетом особенностей как электронного, так и фононного законов дисперсии. При исследовании мнимой части массового оператора, описывающего обменное взаимодействие, получены диаграммы  $(\mu, \epsilon)$ , т.е. заполнение зоны-частота, — области, в которых зависящая от частоты такая мнимая часть равна или отлична от нуля. Проведен анализ диаграмм в зависимости от параметра слоистости кристалла.

8. Обоснована модель теоретического описания интеркалированного СК и на ее основе исследован электронный спектр такого кристалла. Показано, что учет кулоновского взаимодействия в характеристных для СК интеркалатах — донорах при соизмеримых плотностях энергии в зоне проводимости и валентной зоне и электронного перемешивания кристаллическая матрица-примесь энергии активации локализованного уровня уменьшается за счет подтягивания его ко дну зоны проводимости. Указано на различную температурную зависимость положения локализованного уровня от заполнения зон.

На основании той же модели исследовано также электронное заполнение интеркалированных атомов. Показано, что увеличенные кулоновского взаимодействия между электронами на узлах интеркалянта  $U$  при равномерном их электронном заполнении приводит к уменьшению такого заполнения. Отсюда следует, что увеличение концентрации вводимого интеркалянта, сопровождающемуся уменьшением расстояния между соседними узлами интеркалянта и, как следствие, увеличением  $U$ , благоприятствует переносу заряда с интеркалянта в зону. Подобный вывод находит экспериментальное подтверждение в  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , легированном литием.

Исследована роль электронного перемешивания системы интеркалянт-интеркалат в неравномерном заполнении узлов интеркалянта. Показано, что в низкотемпературном пределе такое взаимодействие может благоприятствовать либо уместочать условие реализации такого неравномерного заполнения в зависимости от величины индивидуального заполнения каждого из интеркалированных атомов.

9. Проведено исследование поляризационного оператора как функции медленного перемешивания  $\beta$  в СК. Указано на его резкое

изменение при переходе Лидшица. Известная связь перенормированной электрон-фононным взаимодействием фононной моды с поляризационным оператором позволяет надеяться на экспериментальное обнаружение зависимости такой перенормированной моды от величины межслойного перемешивания через зависимость  $Re\Gamma(\rho)$ .

10. Развита диаграммная техника при  $T = 0$  для фермионов во внешнем магнитном поле. Представлен детальный анализ  $V(n\pi q_x)$  — аналога Фурье-образа кулоновского потенциала в случае без магнитного поля. Проведено исследование особенностей поляризационного оператора для СК во внешнем магнитном поле. Предсказана дополнительная коновская аномалия в спектре колебаний решетки СК при  $\chi_{\pm} = 2(\mathcal{K} - k_F)$ .

При исследовании мнимой части поляризационного оператора в СК во внешнем магнитном поле обнаружена спектральная зависимость, которая пропадает при переходе к изотропному кристаллу.

#### ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В СТАТЬЯХ:

1. Вовкивская Г.В., Лукиянец Б.А. Кулоновское взаимодействие в магнитном поле// В сб.: Физическая электроника / Львов/. - 1977. - №5. - С.28-26.
2. Данилевич-Товстык К.К., Лукиянец Б.А. Сптические свойства слоистых полупроводников в области края собственного поглощения// ФТН. - 1980. - 14, в.7. - С.1447.
3. Данилевич-Товстык К.К., Лукиянец Б.А. Проблема экситонного спектра в сильноанизотропных полупроводниках// Т.Д. - 1981. - 48, №3. - С.428-432.
4. Вовкивская Г.В., Лукиянец Б.А. Поляризационные свойства полупроводников со сложной дисперсией носителей в сильном магнитном поле. - Киев, 1981. - 20 с. - Препринт/ АН УССР, Ин-т теор.физики; ИТФ-81-38Р .
5. Лукиянец Б.А., Данилевич-Товстык К.К. Размерные эффекты в слоистых кристаллах. - Киев, 1980. - 16 с. - (Препринт/ АН УССР, Ин-т теор.физики; ИТФ-80-133Р) .
6. Лукиянец Б.А., Данилевич-Товстык К.К., Товстык Л.Д. Некомтонность поляризации в окрестности перехода Лидшица в слоистых кристаллах// ФТН. - 1981. 23, в.10. - С.2998-3000.

7. Лукиянец Б.А., Товстюк К.Д. Спектр интеркалированных слоистых полупроводников// ФТП. - 1982. - 16, в.5. - С.945.
8. Лукиянец Б.А. Многочастичные эффекты в слоистых кристаллах/ Физические основы полупроводникового материаловедения. - Киев: Наук.думка, 1982. - С.126-137.
9. Лукиянец Б.А., Вовкивская Г.В. Парамагнетизм носителей в слоистых кристаллах// УФЖ. - 1982. - 27, №12. - С.1861-1863.
10. Товстюк К.Д., Данилевич-Товстюк К.К., Лукиянец Б.А. Одночастковї спектри в шаруватих напівпровідниках// Вісник АН УРСР. - 1983. - №6. - С.5-13.
11. Лукиянец Б.А., Бойчук В.В. Теория циклотронного резонанса в слоистых кристаллах// ФТП. - 1983. - 17, в.11. - С.1918-1922.
12. Лукиянец Б.А., Вовкивская Г.В., Товстюк К.Д. Особенности поляризации в узкозонных кристаллах во внешнем магнитном поле// ФТП. - 1984. - 26, в.1. - С.254-256.
13. Лукиянец Б.А., Бойчук В.В. Комбинационное рассеяние как метод определения модификаций слоистых кристаллов// УФЖ. - 1984. - 29, №12. - С.1871-1873.
14. Лукиянец Б.А. Полуширина уровней колебаний слоистого кристалла во внешнем магнитном поле// УФЖ. - 1985. - 30, №11. - С.1730-1732.
15. Лукиянец Б.А. Перенормировка электронного спектра электрон-фононным взаимодействием в слоистых кристаллах. - Киев, 1986. - 16 с. - (Препринт/АН УССР, Ин-т теор.физики; ИТФ-86-38F).
16. Лукиянец Б.А., Вовкивская Г.В. Физические свойства слоистых кристаллов во внешнем магнитном поле/ Физические основы полупроводникового материаловедения. - Киев: Наук.думка, 1986. - С.33-37.
17. Лукиянец Б.А., Вовкивская Г.В. Спектр электронов слоистого кристалла во внешнем магнитном поле, не совпадающим с его кристаллографической осью. - Киев, 1987. - 18 с. - (Препринт/АН УССР, Ин-т проблем материаловедения).
18. Влияние интеркаляции литием на положение уровня Ферми и концентрации свободных носителей заряда в теллуриде висмута/ И.М.Григорчук, Б.А.Лукиянец, Э.Л.Ковалюк, И.Д.Козымик, Г.П.Бахматюк, В.В.Бойчук// ФТП. - 1989. - 23, в.11. - С.2033-2035.

19. Lukiyane'ts B.a., Danilevich-Tovstyuk K.K. The influence of layer crystal plate on structural phase transitions// phys.stat.sol.(b). - 1981. - 104, N2. - P.485-489.
20. The Jahn-Teller effect in layered crystals/ B.A.Lukiyane'ts, K.D.Tovstyuk, V.V.Boichuk, K.K.Danilevich-Tovstyuk// phys.stat.sol.(b). - 1984. - 124, N2. - P.693-698.
21. Danilevich-Tovstyuk K.K., Lukiyane'ts B.A. On the electron-phonon interaction in layered crystals// phys.stat.sol.(b). 1985. - 132, N2. - P.K81-K85.
22. Lukiyane'ts B.A., Cooperative Jahn-Teller effect in layered crystals// phys.stat.sol.(b). - 1987. - 142, N1. - P.K39-K43.
23. Lukiyane'ts B.A. Charge distribution of electrons at intercalated atoms in layer crystals// phys.stat.sol.(b). - 1991. - 163, N1. - P.171-176.



Подписано к печати 05.05.91.  
Формат 60x84/16. Бумага писчая №1.  
Офсетная печать. Усл.печ.листов 1,7.  
Уч-изд.листов 1,8. Заказ №214. Тираж 100.  
Бесплатно.

Лаборатория копировально-множительной печати Черновицкого  
государственного университета.

г. Черновцы, ул.Коцюбинского 2.

444852

БЕСПЛАТНО

АВ 33.007