

ІНСТИТУТ ФІЗИКИ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

На правах рукопису

РУВІНСЬКИЙ Марк Аунович

КОЛЕКТИВНІ І ДИНАМІЧНІ ЕФЕКТИ

КВАЗІЧАСТИНКОВИХ ЗБУДЖЕНЬ

У НЕМЕТАЛІЧНИХ КРИСТАЛАХ

01.04.07 – фізика твердого тіла

Автореферат

дисертації на здобуття наукового

ступеня доктора фізико-математичних наук

Київ - 1993

Робота виконана у Прикарпатському університеті ім. В. Стефаника.

Офіційні опоненти:

доктор фізико-математичних наук,
професор В. С. Машкевич,

доктор фізико-математичних наук,
професор Б. М. Ніщович,

доктор фізико-математичних наук,
професор І. В. Стасюк.

Провідна установа - Інститут теоретичної фізики
ім. М. Боголюбова АН України.

Захист відбудеться "17 Лютого 1994 р. о 15 год. на
засіданні Спеціалізованої Вченої Ради Д 016.04.01 при Інституті
фізики АН України за адресою: 252650, Київ, ГСП-28, Проспект
науки, 46, Спеціалізована Рада при ІФ АН України.

З дисертацією можна ознайомитись в бібліотеці Інституту
фізики АН України.

Автореферат розіслано "10 січня 1994 р.

Вчений секретар
Спеціалізованої Ради,
канд. фіз.-мат. наук

 Ісук В. А.

ЛНБ України ім. В. Стефаника



00801500 (E)

ЛНБ ім. В. Стеф.
АН України

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ.

Актуальність теми. У даній роботі досліджені деякі колективні і динамічні ефекти квазічастинкових збуджень у молекулярних і напівпровідникових кристалах.

При високому рівні оптичного навантаження кристалів, досягнутому завдяки лазерам, виникають великі густини екситонних збуджень і пов'язані з ними ефекти різної фізичної природи, зумовлені взаємодіями у багаточастинковій системі. Переважна більшість досліджень у цьому напрямку відноситься до екситонів Ваньє-Мотта в напівпровідниках (проблема бозе-ейнштейнівської конденсації екситонів і біекситонів, екситонно-діркова рідина в напівпровідниках). Визначальною рисою екситона Френкеля (як екситона малого радіуса) є відсутність внутрішніх ступенів вільності, внутрішніх квантових чисел; його стан повністю визначається номером екситонної зони, до якої він належить, і квазіхвильовим вектором $\vec{k}$. При великих концентраціях систему френкелівських екситонів у молекулярних кристалах (молекулярних екситонів) можна розглядати як приклад безструктурної квантової системи з відповідними кореляціями і характерними взаємодіями у кристалі, що викликають появу колективних і когерентних ефектів, дослідження яких є актуальним для фізики твердого тіла, як і проведених у великому обсязі досліджень для випадку екситонів Ваньє-Мотта в напівпровідниках.

Методи оптичної спектроскопії продовжують займати значне місце у фізиці екситонів (особливо в зв'язку з використанням і далішим розвитком лазерної техніки). При вивченні інших типів елементарних збуджень (фононів, плазмонів, електронів і магнонів) у фізиці конденсованих станів успішно застосовуються динамічні методи досліджень, наприклад, розсіяння повільних нейтронів, поглинання ультра- і гіперзвуку, непружне розсіяння швидких електронів. При зростаючій точності в техніці експерименту все більш реальним стає широке залучення цих методів (поряд з оптичними) для отримання додаткової інформації, яку не можна одержати оптичними методами і яка є доповнювальною до даних оптичної спектроскопії. Виявлення нових можливостей динамічних методів досліджень екситонних збуджень у молекулярних і напівпровідникових кристалах є актуальним на даному етапі розвитку фізики екситонів.

Створення і вдосконалення в останні роки піко- і фемтосекундної лазерної техніки стимулює детальні дослідження кінетики швидкозміняючихся процесів, в яких знаходять свій прояв динамічні ефекти відповідних класичних і квантових систем. В кінетиці екситонного поглинання світла і екситонної люмінесценції важливу роль відіграє динаміка екситон-фононної релаксації, вплив якої на кінетику екситон-фотонної системи і при невеликих рівнях збудження молекулярних кристалів вимагає докладного розгляду.

У широкозонних напівпровідникових кристалах можна виявити ряд цікавих динамічних ефектів, пов'язаних з фотоелектронними і фононними збудженнями цих кристалів. Зокрема це стосується сполук, що утворюють неперервний ряд твердих розчинів, де плавна зміна таких параметрів, як сталої ґратки і вмісту другої (домішкової) компоненти, дозволяє належним чином прослідкувати за характерними рисами прояву цих ефектів, з'ясувати їх основні механізми і сприяти створенню матеріалів із заданими фізичними властивостями. З цієї точки зору актуальним є проведення комплексу систематичних досліджень динамічних ефектів, зокрема, від'ємної фотопровідності, поширення і поглинання ультразвуку, а також фотопружності, в твердих розчинах телуридів цинку і кадмію (типових представників групи $A^{II}B^{VI}$) при звичайних (невеликих) інтенсивностях світла і ультразвуку.

Мета дисертаційної роботи полягала у розв'язанні таких завдань:

1. Теоретичне дослідження колективних, динамічних і кореляційних властивостей системи молекулярних екситонів великої концентрації; визначення поляритонного спектра у сильно збуджених молекулярних кристалах.

2. Провести теоретичні дослідження можливих когерентних і нелінійних ефектів в системі молекулярних екситонів, розглянути, зокрема, боре-конденсацію, квантову екситонну рідину і солітони.

3. З'ясувати можливості динамічних методів дослідження екситонів у молекулярних і напівпровідникових кристалах: розсіяння нейтронів при високому рівні оптичного накачування екситонів; поглинання і підсилення гіперзвуку на екситонах; непружне розсіяння електронів з народженням екситонів та екситонно-домішкових комплексів.

4. Теоретичний розгляд еволюції нерівноважної екситон-фотонної системи при урахуванні релаксаційної взаємодії молекулярних екситонів з коливаннями кристалічної ґратки.

5. Дослідження динамічних ефектів фотоелектронних і фононних збуджень, пов'язаних з від'ємною фотопровідністю, акустичними і акустооптичними властивостями напівпровідникових твердих розчинів телуридів цинку і кадмію; встановлення основних механізмів розглянутих ефектів.

Наукова новизна і практична цінність роботи.

Визначено енергетичний спектр, функцію розподілу, динамічний і статичний структурні фактори тривимірної системи молекулярних екситонів високої концентрації з урахуванням кінематичної, динамічної і екситон-фононної взаємодія. Отримано простий вираз для поляритонного спектра у сильно збуджених кристалах.

У загальному випадку вперше знайдено спектр і функцію розподілу елементарних збуджень в умовах бозе-конденсації молекулярних екситонів (з урахуванням кінематичної і динамічної взаємодія, без переходу до бозонного представлення і наближення ефективної маси); враховано неаналітичність спектра енергії дипольних екситонів. Встановлено можливість існування двох гілок елементарних збуджень, якщо бозе-конденсація відбувається в точці мінімуму енергії екситонної зони $k_0 = 0$.

Одержано загальні вирази для хімічного потенціалу системи молекулярних екситонів; визначено енергію основного стану і вільну енергію системи. Показано, що при певних умовах можливим є утворення квантової діелектричної екситонної рідини; знайдено низькотемпературну область фазової діаграми "екситонна рідина - газ" для дипольно заборонених і дозволених переходів.

Вперше запроваджені узагальнені когерентні стани нелінійних молекулярних екситонів (з урахуванням їх небозевості), за допомогою яких розглянуто, зокрема, давидівське розщеплення у сильно збуджених молекулярних кристалах і солітони.

Запропоновано вперше для дослідження екситонів і екситон-фононної взаємодії (також і в умовах бозе-конденсації) використання таких динамічних методів, як розсіяння нейтронів і поглинання ультра- і гіперзвуку на екситонах при високому рівні збудження кристалів. З'ясовано основні механізми взаємодії нейтронів з екситонами у напівпровідникових і молекулярних кристалах, а також - гіперзвуку з екситонами великого радіуса. Проведено перший розрахунок непружного розсіяння електронів з

народженням екситонів Ванье-Мотта і екситонно-домішкових комплексів у напівпровідникових кристалах.

Поняття статистичної матриці густини узагальнено для випадку розширеного базису діраківських векторів стану з індефінітною метрикою. При виході за межі стандартного наближення "оберткових хвиль" досліджено еволюцію екситон-фотонної системи у фононному термостаті молекулярного кристала при явному врахуванні динаміки екситон-фононної релаксації і скінченного часу життя збуджень.

Спостережено вперше і систематично досліджено явище від'ємної фотопровідності в твердих розчинах телуридів цинку і кадмію при власному і домішковому збудженні. Пояснення ефекту, включаючи його електричну нестійкість при власному збудженні, подано в рамках сформульованої теоретичної моделі для високоомних кристалів на основі механізму, пов'язаного із зміною рухливості носіїв заряду внаслідок оптичної перезарядки локальних центрів. Розроблено спосіб визначення і отримано ряд важливих параметрів центрів перезарядки і динаміки розсіювання на них електронних збуджень.

Проведено теоретичний розгляд вищезгаданого динамічного ефекту від'ємної фотопровідності при екситонному поглинанні світла, з якого випливає можливість визначення деяких параметрів динаміки екситонів Ванье-Мотта. Досліджено вперше роль екситонно-домішкових комплексів в ефекті від'ємної фотопровідності.

З акустичних і акустооптичних досліджень $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ визначено ряд динамічних параметрів кристалічної ґратки; з'ясовано основні механізми поглинання ультразвуку, пов'язані з фонон-фононними і фонон-домішковими взаємодіями. Встановлено значне зменшення загасання поперечних хвиль ультразвуку для складу $x=0,7+0,8$. За допомогою проведеного напівфеноменологічного розгляду отримано пояснення поведінки фотопружних коефіцієнтів і визначено величини, які характеризують зміни ширини забороненої зони з тиском для різних складів твердих розчинів.

Основні положення дисертації, які виносяться на захист:

1. Статистика і енергетичний спектр екситонів Френкеля у тривимірних молекулярних кристалах, визначені з одночасним урахуванням кінематичної і динамічної взаємодії, містять характерні і явні залежності від концентрації екситонів. Функція розподілу екситонів у наближеннях Хартрі-Фока і хаотичних фаз має квазібозевський характер. Спектри молекулярних екситонів і фононів перенормуються

внаслідок екситон-фононної і екситон-екситонної взаємодії.

2. При визначенні динамічного і статичного структурних факторів системи молекулярних екситонів великої концентрації виявлено суттєвий вплив кінематичної, динамічної і екситон-фононної взаємодії на кореляції в системі.

3. Поляритонний спектр у сильно збуджених молекулярних кристалах зазнає істотних змін за рахунок кінематичної і динамічної взаємодії екситонів.

4. Обгрунтовано висновок про можливість бозе-конденсації екситонів у тривимірних молекулярних кристалах без переходу до бозонного представлення і наближення ефективної маси з врахуванням як кінематичної, так і динамічної взаємодії екситонів, а також з узагальненням на випадок неаналітичності спектра енергій дипольних екситонів. Встановлено існування двох гілок елементарних збуджень, коли рівноважна бозе-конденсація має місце в точці мінімуму екситонної енергії $\epsilon_0 \neq 0$. Показано, що у загальному випадку спектр елементарних збуджень задовольняє критерію надтекучості Ландау і відрізняється від спектра неідеального бозе-газу наявністю членів, залежних від концентрації екситонів.

5. Визначена на основі отриманого загального виразу для хімічного потенціалу системи молекулярних екситонів енергія основного стану ідеального газу пауліонів є нижчою за енергію бозе-газу твердих сфер. При достатньо сильному притяганні між екситонами можливим є утворення квантової діелектричної екситонної рідини, стабільної відносно розпаду на вільні екситони.

6. Запроваджені узагальнені когерентні стани молекулярних екситонів враховують небозевість екситонів. Давидівське розщеплення у сильно збуджених молекулярних кристалах залежить від екситонної заповненості підґраток.

7. Виявлені нові можливості динамічних методів фізики твердого тіла - розсіяння нейтронів, поглинання гіперзвуку і непружного розсіяння електронів - для дослідження енергетичного спектра екситонів, екситон-фононної взаємодії і сил осциляторів екситонних переходів, а також бозе-конденсату і закону дисперсії надконденсатних елементарних збуджень.

8. Особливості кінетики екситон-фотонної системи у фононному термостаті молекулярного кристала пов'язані з поляритонними

ефектами, динамікою екситон-фононної релаксації і скінченням часом життя збуджень. Визначені ефективні, інтегральні, характеристики часового загасання просторово-однорідних збуджень екситон-фотонної системи враховують вихід за межі наближення "оберткових хвиль" і часу релаксації.

9. Стационарні і кінетичні властивості від'ємної фотопровідності та її електричної нестійкості у високоомних кристалах твердих розчинів телуридів цинку і кадмію пояснюються на основі однокоробочкової моделі напівпровідника р-типу з двома ефективними глибокими рівнями прилипання, які при оптичній перезарядці зумовлюють зміну рухливості носіїв струму. З цим же механізмом пов'язаний ефект від'ємної фотопровідності при екситонному поглинанні світла за участю екситонів Ванье-Мотта. Показана можлива роль екситонно-домішкових комплексів в ефекті від'ємної фотопровідності в n-CdSe і ZnO. З досліджень від'ємної фотопровідності випливає розроблений спосіб визначення ряду важливих параметрів напівпровідників і динаміки екситонів.

10. Проведений комплекс досліджень акустичних і акустооптичних властивостей твердих розчинів $Zn_{1-x}Cd_xTe$ виявляє суттєвий фононний ангармонізм і фонон-домішкові взаємодії при поширенні і поглинанні ультразвуку в системі і вплив деформації звукової хвилі на електронну поляризованість кристала, пов'язаний з фотопружністю. Визначено ряд динамічних параметрів кристалічної ґратки. Встановлена кореляція пружних властивостей з характером хімічного зв'язку для різних складів твердих розчинів. Значне зменшення поглинання поперечного звуку для складу $x=0,7+0,8$ пояснюється істотним внеском домішкової компоненти в розсіяння дотеплових фононів.

Апробація роботи. Результати роботи доповідались на V, XII, XIV Всесоюзних семінарах "Екситони в кристалах" (Ленінград, 1969р.; Черноголовка, 1976р.; Львів, 1979р.), Всесоюзній нараді з участю вчених соціалістичних країн "Екситони в напівпровідниках-82" (Ленінград, 1982р.), Всесоюзній конференції з радіаційної фізики твердого тіла (Звенигород, 1981р.), II Всесоюзному симпозиумі з світлової луни (Казань, 1981р.), IX Нараді з теорії напівпровідників (Тбілісі, 1978р.), VI Республіканській конференції з статистичної фізики (Львів, 1982р.), Всесоюзному науковому семінарі "Взаємодія матеріалів високотемпературного призначення з середовищем" (Львів, 1987р.), Мінвузівській науковій конференції, присвяченій

О.Г.Столетову (Володимир, 1969р.), II Нараді "Оптичні і електричні властивості широкозонних напівпровідників" (Київ, 1971р.), II, III, IV Всесоюзних нарадах з фізики і хімії сполук А^{III}В^V (Ужгород, 1969р.; Вільнюс, 1972р.; Одеса, 1976р.), V Всесоюзній конференції з хімічного зв'язку у напівпровідниках і напівметалах (Мінськ, 1974р.), III Симпозіумі з процесів росту і синтезу напівпровідникових кристалів і плівок (Новосибірськ, 1972р.), Республіканській школі "Актуальні проблеми фізики напівпровідників" (Фергана, 1982р.), I Всесоюзній школі з термодинаміки і технології напівпровідникових кристалів і плівок (Івано-Франківськ, 1986р.), XII, XIII Всесоюзних конференціях з акустoeлектроніки і квантової акустики (Саратов, 1983р.; Чернівці, 1986р.), XV Ікарівській нараді з теорії напівпровідників (Львів, 1992р.), IV Міжнародній конференції з фізики і технології тонких плівок (Івано-Франківськ, 1993р.); обговорювались на наукових семінарах Інституту теоретичної фізики АН УРСР і Львівського відділення "Статистична фізика", Інституту спектроскопії АН СРСР, Інституту хімічної фізики АН СРСР, Філіалу Науково-дослідного фізико-хімічного інституту ім. Л.Я. Карпова (Обнинськ), кафедри теоретичної фізики Одеського держуніверситету ім. І.І. Мечнікова, кафедри фізики напівпровідників Московського держуніверситету ім. М.В. Ломоносова, сектора акустики твердого тіла Фізико-технічного інституту ім. А.Ф. Іоффе АН СРСР, на звітно-наукових конференціях Дрогобицького та Івано-Франківського педінститутів, Прикарпатського університету ім. В. Стефаника.

Публікації. По матеріалах дисертації опубліковано 44 наукові роботи. Перелік основних з них наведено в кінці автореферату.

Структура і обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається з вступу, п'яти розділів, висновків і списку літератури. Вона містить 354 сторінки машинописного тексту, включаючи 42 рисунки, 8 таблиць і 296 назв літературних джерел.

ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність обраного напрямку досліджень, висвітлені мета, наукова новизна і практична цінність роботи, сформульовані основні положення, які виносяться на захист, і подано **структуру дисертації**.

Як відомо, оператори народження і знищення вузлових електронних збуджень у тривимірних молекулярних кристалах є операторами Паулі. У наближенні малої густини екситонів є справедливою проведена багатьма авторами заміна операторів Паулі операторами Бозе або

першими членами нескінченного ряду точного бозонного представлення операторів Паулі. Інший загальний і послідовний шлях вивчення екситонів полягає у використанні істинних операторів квазічастинок. Така програма для розгляду колективних і когерентних властивостей системи молекулярних екситонів великої концентрації (у сильно збуджених кристалах) реалізована у перших двох розділах дисертації.

У розділі I проведено аналіз статистики екситонів Френкеля у зв'язку з певною модифікацією параферміонної статистики Гріна-Волкова з характерними трилінійними співвідношеннями комутації типу:

$$[(a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger)_-, (a_k^\dagger)_-] = 2\pi^{-1} a_k^\dagger, \quad \vec{q} = \vec{k} - \vec{k}' + \vec{k}'', \quad (1)$$

де $a_k^\dagger$, a_k - оператори народження і знищення екситонів з квазіхвильовим вектором $\vec{k}$, π - кількість вузлів ґратки з однією молекулою в елементарній комірці. Статистика екситонів допускає π -кратне заповнення одночастинкових станів

$$(a_k^\dagger)^\pi |0\rangle \neq 0, \quad (a_k^\dagger)^{\pi+1} |0\rangle = 0, \quad (2)$$

де $|0\rangle$ - стан екситонного вакууму, і суттєва відмінність від звичайних параферміонних співвідношень комутації полягає у тому, що замість символа Кронекера значення вектора $\vec{q}$ у правій частині (1) визначається законом збереження квазіімпульсу. Досліджено енергетичний спектр і функцію розподілу елементарних збуджень системи екситонів Френкеля у тривимірних молекулярних кристалах з урахуванням кінематичної і динамічної взаємодії. Розгляд проведено методом двочасових температурних функцій Гріна з точними співвідношеннями комутації для операторів екситонів, що дозволило автоматично врахувати кінематичну взаємодію. Отримані вирази для закону дисперсії елементарних збуджень у наближеннях Хартрі-Фока і частинних фаз. У розглянутих наближеннях енергія і функція розподілу елементарних збуджень явно залежать від концентрації екситонів, і статистика екситонів має квазібозевський характер. Так, у частинному випадку фіксованого числа екситонів N енергія ϵ_k і функція розподілу $\bar{n}_k$ елементарних збуджень екситонної системи в узагальненому ізольованні Хартрі-Фока мають вигляд:

$$\epsilon_k = \Delta + M_k - \frac{2}{\pi} \sum_{\vec{k}} (N(M_k - E_0) + \sum_{\vec{q}} (M_q - E_{q-k}) \bar{n}_q), \quad (3)$$

$$\bar{n}_k = \frac{1 - 2N/\pi}{\exp[\beta(\epsilon_k - \mu)] - 1}, \quad (4)$$

Δ - енергія збудження молекули у кристалі, M_k і F_k - фур'є-образи енергії резонансної і динамічної взаємодія відповідно, β - обернена температура в енергетичних одиницях, μ - хімічний потенціал екситонів, який визначається з умови $\sum_k \bar{n}_k = N$. Поправки на небезвідність екситонів (кінематичну взаємодію) є такого ж самого порядку, що і поправки на неідеальність екситонного газу (динамічну взаємодію). Для кристалів з шириною екситонної зони $\sim 10^8 \text{ см}^{-1}$ і концентрація екситонів $N/\pi \sim 5 \cdot 10^{-8}$ кінематична взаємодія приводить до звуження зони збудження на величину $\sim 10 \text{ см}^{-1}$.

Досліджені кореляції в системі молекулярних екситонів з урахуванням кінематичної і динамічної взаємодія. Динамічний структурний фактор $S(k, \omega)$ визначається через кореляційну функцію густини-густини $\langle \rho_k(0) \rho_{-k}(t) \rangle$ екситонів

$$S(k, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \langle \rho_k(0) \rho_{-k}(t) \rangle, \quad (5)$$

де кутові дужки відповідають усередненню за статистичним ансамблем Гіббса,

$$\rho_k = (1 / \sqrt{\pi}) \sum_q a_q^\dagger a_{q+k}. \quad (6)$$

Кореляційна функція густини-густини обчислена за допомогою колективної функції Гріна « $\rho_k(t) | \rho_{-k}(t')$ ». Отриманий статичний корелятор густини екситонів $\langle \rho_k(0) \rho_{-k}(0) \rangle$ задовольняє точному правилу сум

$$\sum_k \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle = N, \quad (7)$$

яке впливає з кінематичних властивостей операторів екситонів (N - середнє число екситонів). На основі знайденого статичного структурного фактора визначено парну кореляційну функцію електронних збуджень молекул у координатному представленні $g(r)$. Чисельний розрахунок $g(r)$ проведено для кубічного кристала при середній концентрації екситонів $N/\pi = 5 \cdot 10^{-8}$, ефективній масі екситона $m^* = 30 m_0$ (m_0 - маса електрона) і температурі $T = 20 \text{ K}$. Графік залежності $g(r)$, отриманий у наближенні ефективної маси, наведено на рис. 1 (крива 1); d - стала кристалічної ґратки. Для порівняння на

тому ж графіку по-
дана парна функція,
обчислена у зви-
чайному наближенні
хаотичних фаз (кри-
ва 2). Покращення
цього наближення до-
сягнуто за допомо-
гою введення пара-
метра розчеплення
вищих функцій Грі-
на для забезпечення
виконання кінема-
тичного правила сум
(7), вплив якого на
кореляції електрон-
них збуджень у мо-
лекулярних кристалах
виявляється сутте-

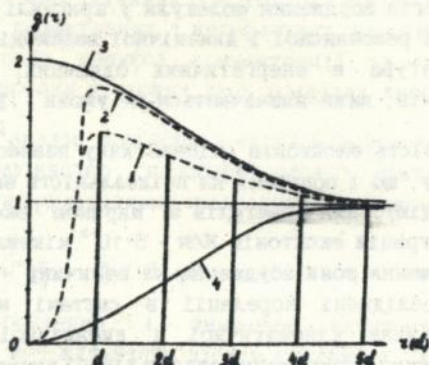


Рис.І. Парна кореляційна функція електронних збуджень у молекулярному кристалі.

вим. На рис.І наведені також парні кореляційні функції ідеального бозе-газу (крива 3) і фермі-газу (крива 4) для тих же значень параметрів, що і у випадку молекулярних збуджень.

Розглянуто вплив екситон-фононої взаємодії на систему молекулярних екситонів великої концентрації (з кінематичною і динамічною взаємодією). Отримано перенормування екситонних і фононних станів за рахунок неадіабатичної і адіабатичної екситон-фононої взаємодії (для випадку слабкого зв'язку), визначено масовий і поляризаційний оператори екситонів і фононів, енергетичний зсув і загасання екситонів, залежні від концентрації екситонів. Урахування концентраційних залежностей є важливим для розгляду різного типу нестійкостей і нелінійних ефектів у сильно збуджених кристалах.

Кінематична взаємодія зменшує загасання екситонів на величину $\sim 4 (N/a) \Gamma_k^{5/2\omega}$ ($\Gamma_k^{5/2\omega}$ - загасання при низьких рівнях збудження), що призводить до зменшення ширини екситонної смуги поглинання і деякого збільшення максимуму смуги. Зміщення екситонної смуги внаслідок взаємодії з фононами (оцінка для продовжних акустичних і низькочастотних оптичних (лібраційних) коливань) в кристалі типу антрацену становить величину $\leq 10^2$ см⁻¹, причому концентраційні

поправки в екситон-фононне зміщення дають внесок порядку кількох см^{-1} при концентрації екситонів $\sim 5 \cdot 10^{-3}$ (і низьких температурах, коли середнє число фононів $\bar{n}_{\vec{q}} \ll 1$).

Наведені вище оцінки прямого зміщення екситонного спектра і за рахунок екситон-фононної взаємодії свідчать, що врахування кінематичної і динамічної взаємодії при великих концентраціях екситонів може привести до експериментально спостережувальних змін у спектрах молекулярних кристалів, які можна виявити, зокрема, при порівнянні спектрів поглинання і люмінесценції при малих і великих рівнях збудження кристалів.

У наближенні випадкових фаз знайдені також динамічний і статичний структурні фактори екситонів з одночасним урахуванням кінематичної, динамічної і екситон-фононної взаємодії, що є необхідним для розгляду розсіяння нейтронів на екситонах, оскільки переріз розсіяння визначається через ці фактори.

При великих концентраціях екситонів відбувається суттєва зміна поляритонного спектра за рахунок кінематичної і динамічної взаємодії. Ідея розгляду полягає у можливості виведення у наближенні хаотичних фаз для екситонної системи замкнутого диференціального рівняння четвертого порядку для фотонного оператора $\hat{\rho}_{\vec{k}} = \hat{c}_{\vec{k}} + \hat{c}_{-\vec{k}}^+$ на основі комбінації рівнянь руху для операторів фотонів і екситонів. Одержаний спектр поляритонів у сильно збуджених молекулярних кристалах визначається простою формулою і складається з двох гілок:

$$\hbar\omega_{\vec{k}}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ A_{\vec{k}} \pm \sqrt{A_{\vec{k}}^2 - 4 \tilde{e}_{\vec{k}}^2 [(\hbar\omega_{\vec{k}})^2 + 2 \frac{N}{\pi} (\hbar f_{\vec{k}})^2]} \right\}^{1/2}, \quad (8)$$

$$A_{\vec{k}} = \tilde{e}_{\vec{k}}^2 + (\hbar\omega_{\vec{k}})^2 + (\hbar f_{\vec{k}})^2, \quad (9)$$

$$\tilde{e}_{\vec{k}}^2 = \Delta + M_{\vec{k}} \left(1 - 2 \frac{N}{\pi} \right) + 2 \frac{N}{\pi} F_0, \quad (10)$$

де $\hbar\omega_{\vec{k}}$ - енергія фотона у кристалі, $f_{\vec{k}}$ - константа екситон-фотонної взаємодії, $\tilde{e}_{\vec{k}}$ - енергія екситона у наближенні хаотичних фаз. При $2 N/\pi \ll 1$ у лінійному за концентрацією екситонів наближенні залежності $(\nu_0^{\pm})^2$ від концентрації узгоджуються з отриманими в роботі інших авторів¹¹.

1) Авдюгин А.Н., Заворотнев Ю.Д., Овандер Л.Н. // ФТТ - 1983, Т.25 - В.8. - С.2501-2502.

У другому розділі досліджені когерентні стани системи екситонів Френкеля, пов'язані з бозе-конденсацією, утворенням квантової екситонної рідини і солітонними ефектами.

При рівноважній бозе-конденсації звичайно припускається, що час життя екситона $\tau_{ex} \gg \tau_r$, де τ_r - час релаксації (термолізації) екситонів у кристалі. Розглядається проміжок часу t , що лежить в інтервалі $\tau_r < t < \tau_{ex}$ (для синглетних екситонів $\tau_{ex} \sim 10^{-9}$ с, для триплетних - $\tau_{ex} \sim 10^{-8}$ с, в той час як оцінка часу релаксації за рахунок екситон-фононої взаємодії для молекулярних кристалів типу антрацену становить $\tau_r \sim 10^{-13}$ с). Знайдено спектр елементарних збуджень в умовах бозе-конденсації екситонів у тривимірних молекулярних кристалах без переходу до бозонного представлення і наближення ефективної маси з врахуванням як кінематичної, так і динамічної взаємодії екситонів:

$$E_k = (M_k - M_0)^2 \left(1 - \frac{2N_0^*}{9t}\right)^2 + \frac{4N_0^*}{9t} \left(1 - \frac{2N_0^*}{9t}\right) (M_k - M_0) (E_k - M_0)^{1/2}, \quad (11)$$

$$N_0^* \approx N_0 \left(1 - \frac{N_0}{9t}\right) \gg 1, \quad (12)$$

N_0 - число екситонів у бозе-конденсаті, відмінність N_0^* від N_0 пов'язана з небозевістю екситонів. Формула (II) є справедливою при $N - N_0^* \ll N_0^*$ (що з урахуванням $N_0 \sim N$ еквівалентно нерівності $2N_0/9t \ll 1$ і в умовах застосовності борнівського наближення для динамічної взаємодії з радіусом $R: |F_0| d / |M_0| R \ll 1$). Спектр (II) відповідає бозе-конденсації у стан з $\vec{k}=0$. Умовою стійкості бозе-конденсованого стану є нерівність

$$\frac{1}{4} \frac{9t}{N_0^*} (M_k - M_0) + \frac{1}{2} |M_k + M_0| > -E_k. \quad (13)$$

У випадку відштовхування між екситонами ($F_k > 0$) ця умова завжди виконується. У випадку притягання між екситонами ($F_k < 0$) для стійкості бозе-конденсованого стану, крім виконання умови (13), необхідно також, щоб не відбулось утворення зв'язаних станів (типу біекситонів). Функція розподілу елементарних збуджень з енергією E_k (11) має квазібозевський характер:

$$\bar{n}_k = \frac{1 - 2N_0^*/9t}{e^{\beta E_k} - 1}. \quad (14)$$

При врахуванні для дипольно активних екситонів неаналітичної частини екситонного спектра, пов'язаної з довгохвильовим (макроскопічним) полем, зумовленим кулонівською далекодією, спектр елементарних збуджень (II) стає також неаналітичною функцією при $|\vec{R}| \rightarrow 0$. Критична температура T_0 бозе-конденсації дипольних екситонів у випадку простої кубічної ґратки виявляється рівною

$$T_0 \approx \frac{4\sqrt{2}}{(6\pi)^{1/4}} \frac{|\vec{p}_{0f}|^{1/2} |M_0|^{3/4}}{k_B d^{3/4}} \left(\frac{N}{\pi} \right)^{1/2} \quad (15)$$

($\vec{p}_{0f}$ - ефективний дипольний момент квантового переходу, k_B - стала Больцмана), в той час як для ідеального екситонного бозе-газу (з аналітичним спектром) $T_0^6 \propto (N/\pi)^{2/3}$. Оцінка T_0 для молекулярного кристала з шириною екситонної зони $\Delta E_1 = 2 |M_0|/3 = 400 \text{ см}^{-1}$ і параметрами, близькими до антрацену, при концентрації екситонів $N/\pi = 10^{-4}$ становить $T_0 \approx 16 \text{ K}$, тоді як відповідна оцінка за формулою ідеального бозе-газу дає $T_0 \approx 2 \text{ K}$.

Якщо бозе-конденсація екситонів відбувається в точці мінімуму енергії в екситонній зоні $\vec{R}_0 \neq 0$, то спектр надконденсатних елементарних збуджень складається, взагалі кажучи, з двох гілок:

$$E_k = \frac{1}{2} (T_k - T_{2k_0-k}) (1 - 2 N_{k_0}^*/\pi) \pm \frac{1}{2} ((T_k + T_{2k_0-k})^2 \cdot \\ \cdot (1 - 2 \frac{N_k^*}{\pi})^2 + 8 \frac{N_k^*}{\pi} (1 - 2 \frac{N_{k_0}^*}{\pi}) (T_k + T_{2k_0-k}) (E_{k-k_0} - M_{k_0}^*))^{1/2}, \quad (16)$$

де

$$T_k = M_k - M_{k_0}. \quad (17)$$

При $\vec{R} \rightarrow 0$ в (11) і $\vec{R} \rightarrow \vec{R}_0$ в (16) $E_k \rightarrow 0$, тобто відсутня енергетична щільна. Спектр елементарних збуджень задовольняє критерію надтекучості Ландау і містить характерну залежність від концентрації екситонів, пов'язану з небозевістю екситонів.

Одержано загальний вираз для хімічного потенціалу молекулярних екситонів в умовах бозе-конденсації. Визначено енергію основного стану ідеального газу пауліонів при $(n a_M^3)^{1/2} \ll 1$:

$$\frac{E}{V} = \frac{2\pi\hbar^2 a_M}{m^*} n^2 \left[1 + \frac{32}{15\sqrt{\pi}} (n a_M^3)^{1/2} \right]. \quad (18)$$

відраховану від дна екситонної зони $(\Delta + M_0)n$, де для зручності порівняння з енергією бозе-газу твердих сфер введено ефективну довжину розсіювання a_m , пов'язану з кінематичною взаємодією екситонів.

$$2d^* |M_0| = 4\pi \hbar^2 a_m / m^* \quad (19)$$

$n = N/V$ - густина екситонів, m^* - ефективна маса екситона, $a_m = 3d / (2\kappa)$. Формула (18) відрізняється від енергії основного стану розрідженого бозе-газу тим, що коефіцієнт у квадратних дужках при $(na_m^3)^{1/2}$ є в чотири рази менший, ніж для бозе-газу. Пониження енергії екситонів пов'язано з урахуванням "квазіфермієвського" співвідношення для операторів екситонів

$$\sum_k a_k a_{-k} = \sum_k a_k^\dagger a_{-k}^\dagger = 0. \quad (20)$$

В цілому кінематична взаємодія, яка враховує небозевість екситонів, виявляється як ефективне відштовхування типу твердих куль, а (18) за виглядом нагадує енергію бозе-газу, але незалежне розділення бозевських і фермієвських рис у поведінці екситонної системи не є адекватним розглянутій ситуації газу пауліонів. При розгляді неідеальної системи пауліонів встановлено істотно важливу роль дисперсії динамічної взаємодії.

Досліджено основний стан екситонної системи, в якій радіус динамічної взаємодії екситонів R перевищує середню відстань між ними $r = n^{-1/3}$ і виконуються нерівності

$$d \ll r \ll R. \quad (21)$$

Показано, що при достатньо сильному притяганні екситонів

$$|a_F| > a_m, \quad a_b < 0, \quad (22)$$

енергія, розрахована на одну квазічастинку, E/N , як функція n , має мінімум

$$(E/N)^* = - \frac{2\kappa \hbar^2}{3m^*} (|a_F| - a_m)n^*, \quad (23)$$

який відповідає зв'язаному багаточастинковому стану або діелектричній екситонній рідині з густиною

$$n^* = \frac{25\kappa^4}{864} n_{\max} \left(\frac{|a_F|}{a_m} - 1 \right)^2, \quad (24)$$

де a_p - довжина розсіяння, пов'язана з динамічною взаємодією

$$2d^2\Gamma_0 = 4\pi\hbar^2 a_p / m^*, \quad (25)$$

$n_{\max} = n^*$ - максимальна концентрація екситонів, що дорівнює густині молекул у кристалі. Отримані результати справедливі при $n^* \ll n_{\max}$; припускається також, що стани вільних електронних біекситонів при малих квазіімпульсах не виникають. Порівняно з газом вільних екситонів утворення нової фази з підвищеною густиною екситонів є енергетично більш вигідним. Ця фаза є квантовою рідиною, характерною для стану бозе-конденсованих екситонів. Розглянуто вплив неаналітичності спектра дипольно активних екситонів на енергію основного стану екситонної рідини та її рівноважну концентрацію n^* в залежності від параметра, пов'язаного з матричним елементом дипольного моменту переходу $\tilde{\mu}_{0f}$. Виявляється, що урахування неаналітичності спектра енергії екситонів може привести до зменшення значень рівноважної концентрації n^* . Чисельні оцінки для n^* і зсуву $\delta = |(\epsilon / N)^*|$ смуги екситонної рідини відносно дна екситонної зони становлять при $T = 0$ К для молекулярних кристалів типу антрацену значення $n^* \sim (0,004 + 0,1) n_{\max}$ і $\delta \sim 10$ см⁻¹.

При скінченній температурі ($T \neq 0$) і середній густині екситонів $n(T) < n^* = n^*(0)$ система поділяється на дві фази: рідку фазу з великою густиною $n^*(T)$ і газову фазу з малою густиною $n_g(T)$. Внаслідок того, що тиск насиченої пари при низьких температурах є відносно малим, можна нехтувати його впливом на рідку фазу. Тоді густину екситонної рідини можна визначити шляхом мінімізації вільної енергії системи F/N , розрахованої на одну квазічастинку. Густину екситонів у газовій фазі n_g можна знайти з умови термодинамічної рівноваги між рідиною і газом, прирівнюючи хімпотенціал газу до хімпотенціалу екситонної рідини. Визначено низькотемпературну область фазової діаграми "екситонна рідина-газ" для дипольно заборонених і дозволених переходів (з урахуванням неаналітичності спектра енергії дипольних екситонів). Випадок дипольно активних екситонів відповідає зміщенню фазової діаграми екситонної рідини у бік нижчих концентрацій з можливим підвищенням критичної температури T_c . Одержані оціночні формули для критичної температури і концентрації (T_c , n_c), які орієнтовно визначають область критичної точки двофазної системи. Для параметрів кристала

$$\Delta E_1 = 400 \text{ см}^{-1}, \sqrt{\alpha} / q_m = 0,1 \left(\alpha = \frac{8\pi m^* |\tilde{\mu}_{0f}|^2}{\hbar^2 d^2}, q_m = \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{d} \right),$$

$a = 9 \cdot 10^{-8}$ см,
 $|a_F| / a_M = 1,16$
 маємо оціночні значення $n \approx 9 \cdot 10^{18}$ см $^{-3}$
 і $T_c \approx 43$ К. На рис. 2
 подано розраховану при
 вищевказаних значеннях
 параметрів низькотемпера-
 турну частину фазової
 діаграми екситонної ріди-
 ни для випадку дипольно
 активних екситонів; пункти-
 ром показана її екстраполяція,
 а точками у критичній
 області представлені
 значення на основі "універсаль-
 ної" фазової діаграми
 Гугенгеяма для простих
 рідин. Для випадку диполь-

но неактивних екситонів є суттєві відхилення від універсальної
 фазової діаграми в області критичної точки.

Отримані результати можуть бути пов'язані з появою нової смуги
 у низькотемпературній флуоресценції кристалів антрацену при високому
 рівні оптичного накачування, зумовленої можливим утворенням
 квантової екситонної рідини²⁾.

У § 2.3 запроваджено когерентні стани молекулярних екситонів з
 урахуванням їх небозовості. Узагальнення когерентний стан для $K^{\text{от}}$ -
 моди визначається так:

$$|\alpha_K\rangle = D_{\alpha_K} |0\rangle, \quad (26)$$

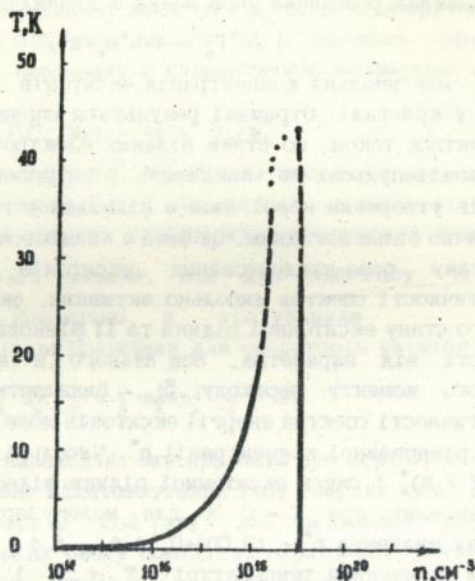


Рис. 2. Фазова діаграма екситонної рідини у молекулярних кристалах (дипольно дозволені переходи).

2) Бендерский В.А., Брикенштейн В.Х., Броуде В.Л., Таргаковский И.И.
 // Письма в ЖЭТФ. - 1975. - Т. 22. - № 6. - С. 332-335.

$$D_{\alpha_k} = \exp(\alpha_k a_k^\dagger - \alpha_k^* a_k), \quad (27)$$

де α_k - комплексна "амплітуда" екситонної хвилі. Стан $|\alpha_k\rangle$ є власною функцією оператора знищення "нелінійних екситонів" $\tilde{a}_k$ з власним значенням $\tilde{\alpha}_k$:

$$\tilde{a}_k |\alpha_k\rangle = \tilde{\alpha}_k |\alpha_k\rangle, \quad (28)$$

$$\tilde{a}_k = a_k + \frac{\alpha_k^*}{\pi} a_k^\dagger, \quad (29)$$

$$\tilde{\alpha}_k = \alpha_k \frac{\operatorname{tg} \zeta_k}{\zeta_k}, \quad \zeta_k = \frac{|\alpha_k|}{\sqrt{\pi}}. \quad (30)$$

Середня заселеність N_k^{oi} моди виявляється рівною $N_k/\pi = \sin^2 \zeta_k$. Співвідношення повноти для системи узагальнених когерентних станів $|\alpha_k\rangle$ містить статистичну вагу ρ , пов'язану з нерівномірним розподілом $|\alpha_k\rangle\langle\alpha_k|$ у комплексній площині і скінченним числом базисних станів (всього $\pi + 1$ базисних станів однієї моди разом з вакуумним):

$$\int |\alpha_k\rangle\langle\alpha_k| \rho \frac{d^2 \alpha_k}{\pi} = 1, \quad (31)$$

$$\rho = \frac{(\pi+1)/\pi}{(1 + \frac{|\alpha_k|^2}{\pi})^2}. \quad (32)$$

При $\pi \rightarrow \infty$ і скінченному $|\alpha_k|$ одержуються відомі співвідношення для бозонів: $N_k \rightarrow |\alpha_k|^2$, $\tilde{\alpha}_k \rightarrow \alpha_k$, $\rho \rightarrow 1$. Звичайне мультиплікативне представлення багатомодових когерентних станів (при відсутності динамічної взаємодії) є тепер наближенням: воно відповідає точному урахуванню кінематичної взаємодії усередині кожної окремої моди при нехтуванні кореляцією різних мод.

Методом когерентних станів обґрунтовано стійкість при певних умовах бозе-конденсату відносно включення кінематичної і динамічної взаємодії екситонів. Досліджено екситонний спектр у когерентних станах і давидівське розщеплення у сильно збуджених кристалах. У загальному випадку виявлена можливість існування нових нелінійних стаціонарних періодичних хвиль і солітонів у багато-екситонній системі при урахуванні кінематичної, динамічної і екситон-фононої взаємодії. Вказані взаємодії приводять також до появи нових

нелінійних членів в рівняннях самоіндукованої прозорості і зумовлюють можливість існування у кристалі при компенсації взаємодії найпростіших солітонних розв'язків, характерних для газів.

У третьому розділі викладено результати досліджень, з яких випливають нові можливості, що виникають у фізиці твердого тіла, в зв'язку з використанням таких динамічних методів як розсіяння повільних нейтронів, поглинання ультра- і гіперзвуку і непружне розсіяння швидких електронів.

В § 3.1 розглянуто розсіяння нейтронів при високому рівні оптичного накачування екситонів. Основними механізмами взаємодії повільних нейтронів з екситонами великого радіуса у напівпровідниках є магнітне розсіяння на нелокалізованих екситонах Ванье-Мотта і ядерне розсіяння на поляризованих екситонах типу Дикмана-Пекара. Оцінені ефективні перерізи розсіяння нейтронів виявляються сумірними (в розрахунку на один екситон) з перерізами розсіяння на вільних електронах і поляронах, електронах домішкових центрів і містять такі характеристики екситонів, як "магнітні формфактори", розподіл електронного і діркового зарядів, різні ефективні маси.

Проведено аналіз процесу розсіяння нейтронів на молекулярних екситонах у сильно збуджених кристалах. З'ясовано, що можливими механізмами розсіяння на екситонах є ядерне розсіяння, зумовлене зміною рівноважної ядерної конфігурації при електронному збудженні молекул, і магнітне розсіяння, яке визначається різницею магнітної взаємодії нейтрона з молекулами у збудженому і основному станах (магнітне розсіяння на триплетних станах). Для системи екситонів великої концентрації одночасно враховано кінематичну і динамічну взаємодії. Непружне розсіяння нейтронів при енергіях передачі, менших за ширину екситонної зони, пов'язано з внутрішньозонними екситонними переходами, і переріз розсіяння

$$\frac{d^2 \Sigma^{ex}}{dE_p d\Omega} = \frac{1}{8\pi^2} \frac{F_2}{F_1} \sum_{\vec{K} \neq 0} \left(\Lambda^e(\vec{q}) \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{\vec{g}} \epsilon(\vec{q}-\vec{K}-2\pi\vec{g}) + \Lambda^{inc}(\vec{q}) \right) S(\vec{K}, E), \quad (33)$$

де $S(\vec{K}, E)$ - динамічний структурний фактор екситонів, v - об'єм елементарної комірки, $\vec{q} = \vec{p}_1 - \vec{p}_2$ і $E = E_{p_1} - E_{p_2}$ - імпульс і енергія передачі нейтрона ($\vec{p}_1$ і $\vec{p}_2$ - початковий і кінцевий імпульс нейтрона), $\vec{K}$ - квазіімпульс екситона ($\hbar=1$), $\vec{g}$ - вектор оберненої ґратки кристала,

величини Λ^c і Λ^{inc} відносяться відповідно до когерентного і некогерентного розсіяння:

$$\Lambda^c(\vec{q}) = m_n^2 \kappa^{-1} \left| \sum_j (\vec{q} \cdot \vec{\Delta R}_{0,j}) A_j e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_{0,j}} e^{-i\vec{v}_j \cdot \vec{q}} \right|^2, \quad (34)$$

$$\Lambda^{inc}(\vec{q}) = m_n^2 \kappa^{-1} \sum_j (\vec{q} \cdot \vec{\Delta R}_{0,j})^2 \overline{|A_j - \bar{A}_j|^2} e^{-2i\vec{v}_j \cdot \vec{q}} +$$

$$+ 4\pi \sigma^M(\vec{q}) e^{-2i\vec{v} \cdot \vec{q}}, \quad (35)$$

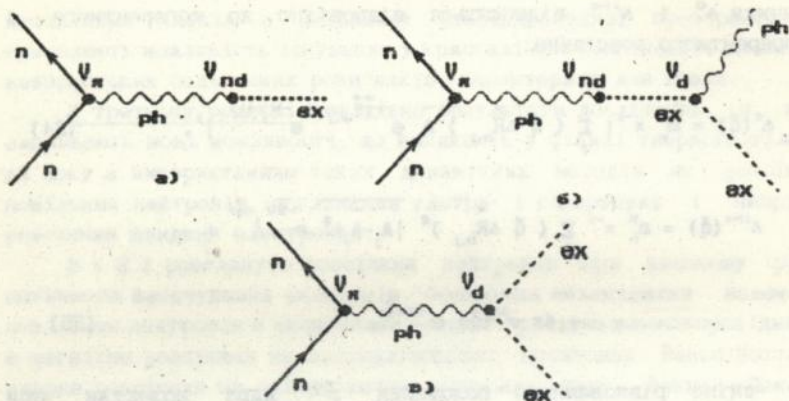
$\vec{\Delta R}_{0,j}$ - зміна рівноважного положення j -го ядра молекули при електронному збудженні, m_n - маса нейтрона, $W_j(\vec{q})$ і $\bar{W}(\vec{q})$ - фактори Дебая-Валлера; A_j - амплітуда квазіпотенціалу Фермі, що відповідає взаємодії нейтрона з ядром, незалежному від спінових змінних нейтрона і ядра; $\bar{A}_j$ - ізотопічне середнє, $\sigma^M(\vec{q})$ - переріз магнітного розсіяння на збудження молекули з електронним спіном $S \neq 0$ (припускається, що основний стан є синглетним),

$$\sigma^M(\vec{q}) = \frac{2}{3} r_0^2 \gamma_n^2 \chi^2(\vec{q}) S(S+1), \quad (36)$$

r_0 - електромагнітний радіус електрона, $\gamma_n = -1,913$ - магнітний момент нейтрона в ядерних магнетонах, $\chi(\vec{q})$ - магнітний формфактор молекули.

Для енергії передачі нейтрона $E \sim 0,1$ еВ і концентрації екситонів $N/\pi \sim 5 \cdot 10^{-3}$ ядерний канал непружного розсіяння на екситонах у широкозонному кристалі становить $10^{-4} + 10^{-5}$ від повного перерізу пружного ядерного розсіяння. У випадку дуже малих енергій передачі $E < 10^{-4}$ еВ переріз магнітного розсіяння на триплетних екситонах ($S=1$) у розрахунку на одну молекулу кристала дорівнює $\sim 0,4$ (N/π) барн, що при $N/\pi \sim 5 \cdot 10^{-3}$ становить декілька мб, з ядерним розсіянням у випадку дуже повільних нейтронів можна нехтувати. При $E \geq 10^{-3}$ еВ магнітне розсіяння є практично відсутнім внаслідок малості магнітного формфактора $\chi(\vec{q})$ і суттєвим є тільки ядерне розсіяння нейтронів на екситонах.

У § 3.1.2 досліджено розсіяння нейтронів у молекулярних кристалах з урахуванням екситон-фононої взаємодії. Розглянуто процеси, умовно зображені на діаграмах



де а) відповідає непружному розсіянню нейтрона при "безфононному" народженні екситона за рахунок неадіабатичної частини екситон-фононної взаємодії V_{nd} ; б) - народженню у кінцевому стані поряд з екситоном реального фонона завдяки діагональній частині V_d екситон-фононної взаємодії і в) - внутрішньозонним екситонними переходами при розсіянні нейтронів.

Подвійний диференціальний переріз когерентного розсіяння нейтронів з безфононним народженням і знищенням екситонів (діаграма а) дорівнює

$$\frac{d^2 \Sigma^c}{dE_p^2 d\Omega} = \pi \frac{1}{\pi} \frac{p_2}{p_1} \frac{\omega_k^2 |\gamma(\mathbf{k})|^2}{(\Gamma_k^2 - \omega_k^2)^2} \Pi^c(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \left((2\sigma + \bar{n}_k) \times \right. \\ \left. \times (\Gamma_k; E - E_k - \Delta_k) + \bar{n}_k (\Gamma_k; E + E_k + \Delta_k) \right), \quad (37)$$

$$\Pi^c(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \left| \sum_j \sqrt{\sigma_j^c} \mathbf{q} \cdot \vec{u}_j(\mathbf{k}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_{0,j}} e^{-i\vec{u}_j(\mathbf{q})} \right|^2, \quad (38)$$

$$\mathbf{k} = \mathbf{q} - 2\pi\mathbf{g},$$

E_k і ω_k - енергія екситона і фонона, $\gamma(\mathbf{k})$ - константа неадіабатичної екситон-фононної взаємодії, σ_j^c - повний переріз когерентного розсіяння нейтрона на ядрі j , $\vec{u}_j(\mathbf{k})$ - коефіцієнти розкладу зміщення J^0 ядра за фононними операторами, $\tilde{W}_j(\mathbf{q})$ - фактор Дебая-Валлера для

перенормованих фононів, $2\sigma = 1 - 2N/\pi$ (як і в теорії магнетизму, можна ввести параметр впорядкованості σ , який характеризує ступінь збудження системи при даному рівні оптичного накачування і температурі T); $\zeta(x; y) = \frac{1}{x} \frac{x}{x^2 + y^2}$; $\bar{n}_k$ - функція розподілу екситонів,

Δ_k і Γ_k - дійсна і уявна частини масового оператора для одноекситонної функції Гріна, знайдені у розділі I дисертації.

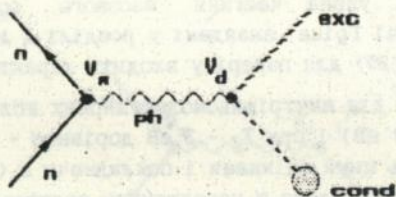
У формулу (37) для перерізу входить характерний множник $\omega_k^2 |\gamma(R)|^2 / E_k^4$, який для внутрішньомолекулярних коливань ($\omega_k \sim 0,1$ еВ, $|\gamma(R)| \sim 0,1$ еВ) і при $E_k \sim 3$ еВ дорівнює $\sim 10^{-6}$; добуток $q \cdot \eta \sim 1$. Користуючись цими оцінками і покладаючи в (37) $p_2 \sim p_1$, одержимо, що переріз розсіяння з народженням екситона становить $\sim 10^{-6}$ від перерізу пружного ядерного розсіяння нейтронів у кристалі. При цьому внесок в (37) від другого доданка, що відповідає знищенню екситона, дорівнює $\sim 10^{-6} \bar{n}_k$ від перерізу пружного ядерного розсіяння. Оскільки при когерентному непружному розсіянні імпульс передачі $\vec{q}$ з точністю до вектора оберненої ґратки співпадає з квазіімпульсом екситона, а енергія передачі E відповідає енергії екситона E_k , виникає можливість незалежного (від оптичних методів) визначення закону дисперсії молекулярних екситонів.

У частинному випадку нульової концентрації екситонів і при заміні функції ширин екситонних рівнів на δ -функції отримані результати переходять у відповідні вирази роботи Кривоглаза і Рашби³⁾.

В § 3.1.3 розглянуто непружне розсіяння нейтронів в умовах бозе-конденсації молекулярних екситонів. Показано, що магнітне розсіяння з народженням і загибеллю екситонів є суттєвим при високих енергіях нейтронів ≥ 1 кеВ і малих значеннях імпульсу передачі $q \leq 10^8$ см⁻¹ (тоді як при низьких енергіях ним можна нехтувати). Частина непружного (магнітного) розсіяння нейтронів, пов'язана з поглинанням і народженням екситона у бозе-конденсаті, має резонансний характер і може бути використана для виявлення конденсату і знаходження числа екситонів в ньому. Основним типом переходів, що виникають при непружному розсіянні нейтронів в умовах бозе-конденсації, є переходи з народженням надконденсатних елементарних збуджень, і маємо принципову можливість визначення їхнього енергетичного спектра за даними непружного розсіяння.

3) Кривоглаз М.А., Рашба Э.И. // ФТТ.-1979.-Т.21.-№10.-С.2692-2699.

Переріз магнітного розсіяння з народженням надконденсатного збудження (в розрахунку на одну молекулу кристала) становить у сприятливих умовах $\sim (10^{-2}+10^{-3})$ б. Переріз для переходу у надконденсатний стан при непружному розсіюванні нейтрона внаслідок екситон-фононної взаємодії, яке умовно зображено на діаграмі



для низькочастотних оптичних фононів (орієнтаційні коливання молекул) становить $\sim (10^{-4}+10^{-5})$ від перерізу пружного ядерного розсіяння.

У § 3.2 обговорюється можливість прямого вивчення екситон-фононної взаємодії за допомогою досліджень екситонного поглинання ультра- і гіперзвуку. Проведено розрахунок коефіцієнта поглинання гіперзвуку екситами Ваньє-Мотта в напівпровідниках з п'єзоелектричною і деформаційною електрон-фононною взаємодією при відносно невеликих концентраціях екситонів, коли можна нехтувати колективними ефектами. Враховано: складну структуру зон (анізотропію, багатодолиність, виродження, спин-орбітальну взаємодію); присутність багатьох сортів носіїв заряду і екранування електрон-фононної взаємодії; можливість зміни внутрішнього стану екситона, включаючи його дисоціацію і зв'язування пари в екситон; можливість виродження і бозе-конденсації екситонного газу. Показано принципову можливість підсилення гіперзвуку екситонним газом, зокрема, завдяки його дезбуджуванню і - електронно-дірковим газом - завдяки зв'язуванню пари в екситон (при достатньо низьких температурах). Остання можливість нагадує вже практично реалізовану генерацію високочастотних когерентних фононів у надпровідних системах за рахунок куперівських пар. Резонансний характер поглинання гіперзвуку екситонним бозе-конденсатом може бути методом виявлення конденсату. Вимірювання частот поглинання і випромінювання дають можливість визначити енергію зв'язку екситона і головні значення його тензора ефективної маси.

Теоретично досліджено поглинання екситами Ваньє-Мотта у

сильному, квантовому, магнітному полі, коли радіус циклотронної орбіти є малим порівняно з борівським радіусом екситона і хвиля гіперзвуку поширюється перпендикулярно напрямку магнітного поля. Особливості екситонного поглинання гіперзвуку у сильному магнітному полі зумовлені характерними властивостями динаміки екситонів (напр., можливістю поперечного руху центра інерції екситона і квазіодновимірним внутрішнім, відносним, рухом). При нехтуванні згасанням екситонів отримано скінченну ширину екситонних піків поглинання гіперзвуку (на відміну від акустичного циклотронного резонансу вільних електронно-діркових пар, скінченна ширина якого одержується тільки при урахуванні згасання електронних і діркових станів). Магнітне поле має слабший вплив на поглинання гіперзвуку екситами, ніж на поглинання вільними носіями. У магнітному полі полегшується відокремлення екситонного механізму від електронного.

У § 3.2.4 розглянуто вплив далекодіючих полів заряджених домішкових центрів і гвинтових дислокацій на поглинання гіперзвуку вільними носіями заряду для випадку невідродженої статистики і невеликих концентрацій дефектів і носіїв, коли екранування можна нехтувати. Припускається, що середня довжина вільного пробігу електрона є набагато більшою за довжину гіперзвукової хвилі. Розрахунок проведено з точними хвильовими функціями неперервного спектра електрона кулонівської задачі (у тривимірному і двовимірному випадках). Показано, що поглинання гіперзвуку вільними носіями у далекодіючих полях притягання дефектів може бути більшим за відповідне поглинання в ідеальному кристалі. Крім того, відмінність у частотних залежностях може допомогти виявленню розглянутого механізму і притягуючих дефектів кристала.

В § 3.3 проведено розрахунок процесу генерації швидкими електронами екситонів Ванье-Мотта та екситонно-домішкових комплексів (ЕДК), пов'язаних із зарядженими домішковими центрами, у напівпровідниках. Встановлені правила відбору при електронному збудженні у процесах без обміну і з обміном. Отримані формули для імовірностей відповідних переходів. На відміну від екситонів оптичного походження, коли у прямих переходах народжуються лише екситони з хвильовим вектором $\mathbf{k} \approx 0$, при електронному збудженні можуть виникати екситони з довільним хвильовим вектором $\mathbf{k}$, тобто "непрямі" екситони генеруються без залучення фононої підсистеми. Екситони та ЕДК у триплетному стані народжуються лише за обмінним механізмом, в той час як при оптичному збудженні і невеликих

інтенсивностях світла вони народжуються лише у синглетному стані. В області малих кутів інтенсивність розсіяння електронів з народженням екситона - σ^{-2} , що підтверджується експериментально⁴. Кутівий розподіл розсіяних електронів у випадку збудження ЕДК відрізняється від випадку збудження вільних екситонів і суттєво залежить від поведінки хвильової функції ЕДК. Остання визначає "формфактор" узагальненої сили осцилятора, розрахунок якої проведено для різних варіаційних функцій ЕДК і чисельно для кристалів CdS і GaAs. Отримані при електронному збудженні результати підтверджують гігантські значення сил осциляторів ЕДК, відомі з оптичних даних. Сильно розвинута в останні роки техніка електронної спектроскопії і спектроскопія оптичного поглинання все більше стають взаємно доповнючими методами дослідження збуджених станів кристалів.

У четвертому розділі вивчається вплив динаміки екситон-фононої релаксації на кінетику екситон-фотонної системи у молекулярних кристалах при малих густинах збуджень. Використовується запропонована в роботах Серікова⁵ методика дослідження взаємодії електромагнітного поля з кристалом в екситонному діапазоні частот, яка ґрунтується на узагальненому представленні діраківських векторів стану з розширеним базисом, що містить одночасно кет- і бра-компоненти. У додатку до розд. IV розвинуто формалізм статистичної матриці густини в рамках "бра-кет-базису" (з індефінітною метрикою). Показано, що узагальнена матриця густини задовольняє рівняння типу Ліувілля. Визначені середні значення фізичних величин за допомогою цієї матриці при відповідному узагальненні операцій S_r на бра-кет-базисі. Отримані формули для густини і моментів розподілу, а також кореляційних функцій поля, які визначаються через матрицю густини.

В § 4.1 розглянуто екситон-фотонну систему у фононному термостаті молекулярного кристала. Одержано рівняння еволюції для узагальненої матриці густини екситон-фотонного поля (на бра-кет-базисі станів системи) при явному врахуванні динаміки екситон-фононої релаксації, непрямих переходів і скінченного часу життя збуджень. Безвипромінювальні процеси загибелі екситонів у кристалі (з відповідним оберненим часом життя екситонів (τ^{-1})) і вихід випромінювання (фотонів) з кристала (з оберненим часом життя фотона

4) Sueoka O. // J. Phys. Soc. Japan. - 1965. - V. 20. - № 5. - P. 877-880.

5) Серіков А.А. Препринт ИТФ-79-12Р., К., 1979, 38с.; ИТФ-79-18Р., К., 1979, 34с.; ИТФ-79-28Р., К., 1979, 49с.

у кристалі γ^{ph}) враховано феноменологічно. Останнє дає можливість в рамках просторово-однорідної постановки задачі розглянути люмінесценцію. Детально досліджено релаксацийну взаємодію екситонів з оптичною модою Ω , низькочастотних коливань у резонансній екситон-фотонній області і при не дуже великих силах осцилятора:

$$\lambda_j \ll \Omega_j \ll 2L, \quad \omega_0 - \Omega_j < \Omega_k^2 < \omega_0 + \Omega_j, \\ |f| \ll \lambda_j, \quad (39)$$

де λ_j - обернення час встановлення термодинамічної рівноваги коливальної моди j , ω_0 відповідає дну найнижчої екситонної зони шириною $2L$, Ω_k^2 - частота фотона у кристалі, f - константа екситон-фотонної взаємодії ($\hbar = 1$). Схематичне зображення спектра системи і процесів релаксації подано на рис. 3. Оскільки не припускається малість енергії резонансної екситон-фотонної взаємодії порівняно з константами релаксації динамічної системи екситонів і фотонів, отримано прояв в її кінетиці поляритонних ефектів (напр., типу нутація), модульованих динамікою екситон-фононної релаксації з урахуванням скінченного часу життя збуджень.

У § 4.2 досліджено загасання просторово-однорідних збуджень екситон-фотонної системи у наближенні часів релаксації. При початкових умовах, що відповідає нормуванню на одиницю гармоніки фотонного поля у кристалі (і відсутності екситонних збуджень), знайдено лаплас-образи часових залежностей елементів матриці густини екситон-фотонної системи, які описують зміну норм $\mathbf{R}$ -гармонік фотонного і екситонного полів (а в однорідному випадку і просторові густини полів в кожен момент часу), і часову зміну взаємної когерентності фотонів і екситонів кристала. Визначені ефективні, інтегральні, характеристики часового загасання полів та їхні частотні залежності. Так, ефективний коефіцієнт часового загасання електромагнітного поля у кристалі

$$\gamma_{eff} = 2 (\gamma^{ph} + \lambda^{ph}), \\ \lambda^{ph} = \frac{\gamma^2 \gamma^{ex} \alpha^2}{\delta^2 + \gamma^2 (1 + \alpha^2)}, \quad (40)$$

де

$$\delta = |\Omega^2 - \omega^2 + f^2 + \gamma^2| / 2\omega, \\ \gamma = \gamma^{ph} + \gamma^{ex}, \quad \alpha^2 = f^2 / (4\gamma\gamma^{ex}), \quad (41)$$

$$\gamma^{\text{ex}} = \zeta^{\text{ex}} + \lambda^{\text{ex}} + \zeta^{\text{ex}},$$

λ^{ex} і ζ^{ex} - обернені часи релаксації екситонів, які явно визначаються відповідно конкретною динамікою екситон-фононної релаксації і непрямих переходів. Параметр $2\lambda^{\text{ph}}$ визначає загасання фотонів за рахунок перетворення їх в екситонні збудження кристала. Він являє собою лоренцеву функцію змінної α^2 (у межах області резонансу залежністю від хвильового числа величин ω_k^2 , f_k^2 , γ_k^2 можна нехтувати) з максимумом у точці $\alpha_m^2 = \omega^2 - f^2 - \gamma^2$, відповідна частота

$$\Omega_m \approx \omega - \frac{f^2 + \gamma^2}{2\omega} \quad (42)$$

є близькою до резонансної. Інші параметри, які характеризують частотну залежність $2\lambda^{\text{ph}}(\alpha)$, визначаються такими виразами:

$$2\lambda^{\text{ph}}(\alpha_m) = \frac{2\gamma^{\text{ex}}\alpha^2}{1 + \alpha^2} \quad (43)$$

максимальне значення, напівширина

$$\Gamma_{1/2} \approx \gamma \sqrt{1 + \alpha^2}, \quad (44)$$

інтегральне загасання

$$\Sigma = 2 \int_0^\infty d\alpha \lambda^{\text{ph}}(\alpha) \approx 2 \frac{\pi \gamma \gamma^{\text{ex}} \alpha^2}{\sqrt{1 + \alpha^2}} = \frac{\pi f^2}{2\sqrt{1 + \alpha^2}}. \quad (45)$$

Отримані результати є уточненням і узагальненням відповідних результатів робіт Давидова і Серікова^{5,6}, де використовувалося наближення "оберткових хвиль" при відсутності процесів виходу випромінювання з кристала, а параметри взаємодії і релаксації вводились феноменологічно.

У цьому ж параграфі знайдено вирази для квантових виходів "висвічування" і "поглинання" фотона у кристалі, залежні від температури, параметрів екситон-фотонної та екситон-фононної взаємодії. Розглянуто також еволюцію екситон-фотонного поля при початкових умові, що відповідає нормованому на одиницю просторово-однорідному екситонному збудженню, і визначено, зокрема, квантовий вихід резонансного "висвічування" екситона.

В § 4.3 для розгляду, що виходить за межі наближення часів релаксації, проведено математичний аналіз рівнянь кінетики для

6) Давидов А.С., Сериков А.С. В сб.: Современные проблемы спектроскопии молекулярных кристаллов. - К.: Наук. думка, 1976. - С.3-15.

матриці густини системи екситонів і резонансних (з частотами Ω_k в області (39)) фотонів кристала. Показано, що задачу про визначення нерівноважної еволюції екситон-фотонної системи можна звести до рівняння для лаплас-образу спектральної функції густини екситонних збуджень $G(\omega; p)$. У наближенні сталої в межах зони середньої густини екситонних станів отримано ланцюжок рівнянь для дискретного набору "парціальних" функцій $G_n(\theta; p)$, що відповідають окремим ізоенергетичним поверхням екситонів $\omega = \omega(p, \theta) = \omega_{00} + (n + \theta) \Omega_j$, ($n = 0, 1, 2, \dots, M$; $0 \leq \theta < 1$; $2L = (M + 1) \Omega_j$); причому вільними членами рівнянь виявляються залежні від початкових умов функції $G_n^0(\theta; p)$, знайдені у наближенні часів релаксації. Одержано загальні вирази для лаплас-образів часової зміни повного числа резонансних фотонів кристала, а також - фотонів, що народжуються внаслідок непрямих переходів.

В §§ 4.4, 4.5 на основі попереднього аналізу кінетичних рівнянь проведено дослідження кінетики спонтанної і вимушеної екситонної люмінесценції. Знайдено лаплас-зображення часових залежностей процесів люмінесценції і безвипромінювальної загибелі екситонів. Визначені інтегральні характеристики вказаних процесів для різних співвідношень між часом життя збуджень і часом екситон-фононної релаксації.

Постановці задачі про спонтанну екситонну люмінесценцію відповідає початкова умова, при якій реалізується стан, що описується екситонною матрицею густини. Певний квантовий вихід резонансної люмінесценції при додатній ефективній масі екситона визначається виразом

$$w = \frac{X_0}{1 + X_0}, \quad (46)$$

$$X_0 = \frac{x_0(\theta) \rho_0^T}{\zeta^{ex} + \zeta^{ex}}, \quad \rho_0^T = (\nu + 1)^{-1} \left[1 - \left(\frac{\nu}{\nu + 1} \right)^{M+1} \right]^{-1},$$

$$\nu = (e^{\beta \Omega_j} - 1)^{-1}, \quad (47)$$

$x_0(\theta)$ має резонансну частотну залежність і визначається ефективним параметром екситон-фотонної взаємодії (з урахуванням процесів релаксації). Найбільше можливе значення $x_0(\theta) \approx \gamma^{ph}$ в умовах резонансу і сильної екситон-фотонної взаємодії ($f^2 \gg 4 \gamma^{ph} \gamma_0^{ex}$), що відповідає максимуму X_0 і повного квантового виходу резонансного висвічування (46). Сумарний квантовий вихід за рахунок непрямих переходів

$$w' = \frac{\zeta^{ex}}{(\zeta^{ex} + \zeta^{ex})(1 + X_0)} \quad (48)$$

Спектральний розподіл квантового виходу спонтанної екситонної люмінесценції має резонансний характер (як для прямих, так і для непрямих переходів). Із збільшенням температури квантовий вихід "прямого" випромінювання (46) монотонно спадає, що обумовлено як зростанням констант релаксації, так і зниженням рівноважної заселеності ρ_0^T екситонних станів у резонансній області. Квантовий вихід безвипромінювальної загибелі екситонів

$$w'' = \frac{\zeta^{ex}}{(\zeta^{ex} + \zeta^{ex})(1 + X_0)} \quad (49)$$

Квантові виходи (46), (48) і (49) задовольняють умові нормування

$$w + w' + w'' = 1. \quad (50)$$

При постановці задачі про вимушену екситонну люмінесценцію за початкову умову приймається стан, який описується фотонною матрицею густини у кристалі в резонансним хвильовим вектором. Якщо час життя екситонів перевищує характерний час екситон-фононної релаксації, квантовий вихід резонансного випромінювання визначається двома доданками: перший - пов'язаний з безпосереднім "випромінюванням" вихідного фотона, а другий, пропорційний коефіцієнту поглинання, відповідає люмінесценції, зумовленій "повертанням" у резонансну область екситонів внаслідок процесів екситон-фононного розсіяння. Спектральний розподіл "прямой" вимушеної люмінесценції має резонансний характер. Частотна залежність квантового виходу люмінесценції, обумовленої непрямыми переходами, у розглянутому випадку наближено визначається рівноважною заселеністю екситонних станів.

При малому часі життя екситонів порівняно з часом екситон-фононної релаксації, незалежно від знака ефективної маси, практично вся поглинута енергія вихідного фотона витрачається у процесах безвипромінювальної загибелі екситонів.

У п'ятому розділі наведено результати досліджень деяких динамічних ефектів, пов'язаних з фотоелектричними, акустичними і акустооптичними властивостями широкозонних напівпровідникових кристалів. Найбільша увага приділяється зіставленню теоретичних і експериментальних результатів для випадку твердих розчинів телуридів цинку і кадмію (типових представників сполук $A^{II}B^{VI}$). Можливість

плавної зміни у достатньо широкому інтервалі основних параметрів сполук, що утворюють неперервний ряд твердих розчинів, забезпечує сприятливі умови для спостереження і дослідження ряду цікавих фізичних явищ.

В §§ 5.1-5.4 проведені систематичні дослідження ефектів від'ємної фотопровідності (ВФП) "динамічної" природи, пов'язаної з механізмом⁷⁾ розсіяння електронних збуджень на оптично перезаряджених локальних центрах ізменшення рухливості носіїв заряду при освітленні кристала. Сукупність стаціонарних і кінетичних властивостей ВФП високоомних кристалів $Zn_{1-x}Cd_xTe$ вдається пояснити на основі вищезгаданого механізму в рамках однорекомбінаційної моделі напівпровідника р-типу з двома ефективними глибокими рівнями прилипання: R-для основних і M-для неосновних носіїв струму. Припускається існування рекомбінаційних рівнів S, які забезпечують постійний час життя пари електрон-дірка, що співпадає у даному випадку з часом життя електронів τ_n в зоні провідності.

Нерівноважна рухливість дірок, у припущенні незалежності розсіяння на різних домішкових центрах

$$\mu_p = \mu_{op} (1 + \alpha_p^{(m)} \Delta n + \alpha_p^{(r)} \Delta g)^{-1}, \quad (5I)$$

де Δn і Δg -концентрації електронів і дірок, захоплених на рівні M і R відповідно; μ_{op} -рівноважна рухливість дірок ($n_0 \ll p_0$, $n_0 \ll g_0$); $\alpha_p^{(m,r)}$ -сталі, сильно залежні від температури і природи центрів розсіювання. Аналогічний вираз має місце і для рухливості електронів μ_n . Проведено розрахунок стаціонарної ВФП при власному і домішковому збудженні, яке викликає оптичну перезарядку локальних центрів і відповідне зменшення рухливості носіїв струму. При невеликій абсолютній зміні рухливості стаціонарна ВФП є можливою, якщо тільки сильне зростання числа захоплених носіїв на M- і R-центри при освітленні призводить до незначного збільшення концентрації вільних носіїв порівняно з їхньою сумарною темною концентрацією. Визначена область існування стаціонарної ВФП при кімнатних температурах в "координатах" M,R,I, де M і R -концентрації M- і R-центрів, I -інтенсивність світла.

Кінетику власної і домішкової ВФП розглянуто у припущенні

7) Карагеоргій-Алкалаєв П.М. // Изв.АН УзССР, сер.физ.-мат.наук.-1958.-Т.6.-№1.-С.13-26; Парицкий Л.Г., Рывкин С.М. // ФТП.-1967.-Т.1.-№5.-С.718-723.

однократності прилипання рівня M , що підтверджується експериментально. При власному збудженні релаксація $\Delta n(t)$ відбувається в основному за малий час порядку τ_n . Характерним є те, що в області ВФП довгочасова релаксація $\Delta n(t)$ визначається темпом зміни $\Delta n(t)$ і обидва процеси заповнення (або звільнення) уловлювачів M і R відбуваються зі спільною сталою часу θ , пов'язаною з властивостями рівня M . При наростанні і спаді для часу θ маємо:

$$\theta_n = \frac{1}{\gamma_n (N_{cm} + I \tau_n)}, \quad (52)$$

$$\theta_c = \frac{1}{\gamma_n N_{cm}}, \quad (53)$$

де γ_n - коефіцієнт захоплення електронів на M -центри; N_{cm} - ефективна густина станів в c -зоні, приведена до рівня M ; $I = \beta kI$, β - квантовий вихід, k - коефіцієнт поглинання світла. При достатньо слабких освітленостях, коли $\alpha_{p,n}^{(m)} \Delta n + \alpha_{p,n}^{(r)} \Delta r \ll 1$, перехід до ВФП характеризується лінійною комбінацією експонент з сталими часу θ і $\theta/2$. Покладаючи у цьому випадку, що рухливості електронів і дірок приблизно однаково залежать від перезарядки M - і R -центрів ($\alpha_{p,n}^{(m)} \approx \alpha_{p,n}^{(r)} = \alpha_p$), одержимо для кривої спаду при $t \gg \tau_n$:

$$\Delta n(t) \approx -A \exp(-\frac{t}{\theta_c}) - B \exp(-\frac{t}{\theta}), \quad (54)$$

$$A = e \mu_{op} (\Delta n_{ст.} + \Delta r_{ст.}) (\Delta n_{ст.} - \Delta r_{ст.}), \quad (55)$$

$$B = e \mu_{op} \{ \alpha_p (\Delta n_{ст.} + \Delta r_{ст.}) p_0 - (\Delta n_{ст.} - \Delta r_{ст.}) \}, \quad (56)$$

$$(\tau_n \ll \theta_c/2).$$

У моменти включення і вимикання світла (після встановлення власної стаціонарної ВФП) спостерігаються короткочасні "викиди" провідності уверх і вниз відповідно, і тільки після цього відбувається плавне наростання або спадання ВФП. "Викиди" зумовлені швидкою рекомбінацією вільних електронно-діркових пар, коли перезарядка M - і R -центрів ще не встигає виявитись і залишається незмінною. Величина цих "викидів" при малих освітленостях зростає лінійно із збільшенням інтенсивності світла. На рис. 4 показані експериментальні залежності обернених часів наростання $1/\theta_n$ і спадання $1/\theta_c$ ВФП від

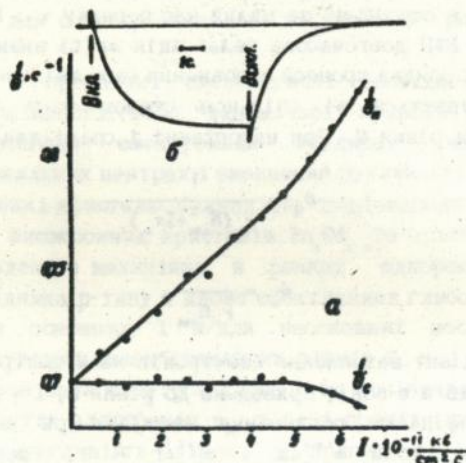


Рис.4. Залежність обернених часів наростання і спаду ВФП від інтенсивності світла (а) і релаксаційна крива ВФП (б) (при власному збудженні $\text{Zn}_{0.53}\text{Cd}_{0.47}\text{Te}$).

інтенсивності світла та крива релаксації власної ВФП для одного із зразків, що містить 53% ZnTe . При достатньо малих інтенсивностях ці залежності відповідають формулам (52)-(54). Характерний час заповнення рівнів M і R при домішкові ВФП

$$\theta_n^{(u)} = \frac{1}{\theta_n q_1 + \gamma_n N_{cm}}, \quad (57)$$

де q -переріз захоплення фотона M -центром; звільнення уловлювачів відбувається з часом θ_c (53). Як і у випадку власного збудження, процес наростання і спаду домішкової ВФП при $t \gg \tau_n$ характеризується лінійною комбінацією експонент з часами θ і $\theta/2$, причому крива спадання при слабких освітленостях визначається формулами (54)-(56). На відміну від власної ВФП, при домішковому збудженні наростання вільних носіїв у зоні провідності є довгочасовим процесом, який відбувається за час порядку $\theta_n^{(u)}$. Цим пояснюється відмінність в експериментальних кривих кінетики домішкової і власної ВФП. При

включенні світла не спостерігається "викид" вгору при домішковому збудженні, провідність зразка зразу зменшується. При вимиканні світла криві кінетики домішкової і власної ВФП є подібними.

На основі досліджень кінетики ВФП (із залученням даних стаціонарних властивостей) для різних складів твердих розчинів $Zn_xCd_{1-x}Te$ оцінено ряд важливих параметрів локальних центрів і динаміки розсіювання на них електронних збуджень.

У § 5.3 докладно вивчена низькочастотна електрична нестійкість, виявлена в області ВФП $Zn_xCd_{1-x}Te$ при власному збудженні, яка тісно пов'язана з механізмом ВФП, має пороговий характер і зумовлена періодичними змінами рухливості носіїв струму внаслідок коливань концентрації локалізованих зарядів на глибоких рівнях M і R (центрах перезарядки).

В рамках механізму, пов'язаного з рухливістю, проведено в § 5.4 теоретичний розгляд ефекту ВФП з участю екситонів типу Ванье-Мотта. Порівняльне детальне вивчення кінетики екситонної ВФП і кінетики ВФП при власному збудженні кристала створює можливості для визначення характерних параметрів динаміки екситонів.

З'ясовано, що в n - $CdSe$ в ефекті ВФП, спостережувальній у вузькому спектральному діапазоні біля краю власної смуги поглинання, визначальну роль відіграють збудження світлом ЕДК та їх наступний швидкий розпад з перезарядкою локальних центрів. Уявлення про ЕДК дозволяє також пояснити походження ефекту ВФП в ZnO на основі концентраційно-рекомбінаційного механізму.

У § 5.5.1 для різних складів твердих розчинів $Zn_xCd_{1-x}Te$ з акустичних досліджень знайдені динамічні параметри кристалічної ґратки. Визначені пружні модулі другого порядку c_{11} , c_{12} , c_{44} та їх температурні залежності, які свідчать про суттєвий фоновий ангармонізм в системі. Розраховані температури Дебая T_D^{np} , а також залежності T_D^{np} і середньої дебаєвської швидкості $\bar{v}$ від складу твердих розчинів. Проведено дослідження пружних властивостей в залежності від характеру хімічного зв'язку і виявлена чітка кореляція між ними. Так, із зростанням ступеня іонності (в напрямку до $CdTe$) "приведені" модулі зсуву $c_{11}^* = c_{11} / c_0$, $c_{44}^* = c_{44} / c_0$, об'ємний модуль $B^* = B / c_0$ (де $c_0 = (c_{11} - c_{12})/2$, $B = (c_{11} + 2c_{12})/3$, $c_0 = e^2/\gamma^*$, e -заряд електрона, γ -відстань між найближчими атомами) і температура Дебая зменшуються, але зростає коефіцієнт пружності анізотропії $A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}}$, при зменшенні внеску

нецентральної взаємодія і зростанні міжатомної відстані, коли спадає міцність ковалентних зв'язків.

У § 5.5.2 вивчені особливості поглинання ультразвуку в кристалах $Zn_xCd_{1-x}Te$ у діапазоні частот 100-1200 МГц в інтервалі температур від азотної до кімнатної. Досліджені частотні і температурні залежності загасання поздовжніх і поперечних хвиль, а також залежності загасання цих хвиль від складу твердих розчинів. Для поздовжнього звуку має місце чіткий перехід від квадратичної до лінійної частотної залежності загасання α , який при азотній температурі зміщується в область більш низьких частот. Такий хід залежності пояснюється переходом від низькочастотного механізму загасання звуку Ахієзера до високочастотного механізму Ландау-Румера. Загасання повільної поперечної хвилі є подібним до випадку поздовжньої, але перехід від квадратичної залежності до лінійної відбувається лише при азотній температурі, оскільки час релаксації характерних фононів, взаємодіючих зі звуком, задовольняє співвідношенню: $\tau_L \approx 1.5 \tau_T$. Для швидкої поперечної хвилі зберігається частотна залежність виду $\alpha \sim \omega^{1.75}$ при кімнатній і азотній температурі, зумовлена особливостями внеску домішок у поглинання звуку. Концентрація домішок (другої компоненти) у твердих розчинах відіграє суттєву роль у загасанні пружних хвиль. Поглинання поперечних хвиль в $Zn_xCd_{1-x}Te$ при азотній температурі для складу $x = 0,7+0,8$ зменшується до 20 разів порівняно з поглинанням у бінарному складі $ZnTe$. При цьому вирішальне значення має домішкове розсіяння дотеплових фононів. Для повільної поперечної хвилі суттєвим стає також вплив фононного ангармонізму. Асиметричну залежність α від складу x можна пов'язати з істотним спотворенням силового поля навколо атома домішки, залежним від сорту домішки; максимальна зміна α відповідає заміні атомів менших розмірів на атоми більших розмірів ($R_{\text{ат.}}(Zn)=1,33 \text{ \AA}$, $R_{\text{ат.}}(Cd)=1,49 \text{ \AA}$, $R_{\text{іон.}}(Zn)=0,83 \text{ \AA}$, $R_{\text{іон.}}(Cd)=1,03 \text{ \AA}$). Зменшення загасання поздовжнього звуку для того ж самого складу досягає всього 30%, оскільки, крім чисто в'язкісного внеску, у поглинання входять доданки термопружної природи.

У розглянутих кристалах можна нехтувати взаємодією пружних хвиль з носіями заряду, і основні механізми поглинання ультразвуку пов'язані з фонон-фононними і фонон-домішковими взаємодіями.

У § 5.5.3 досліджено фотопружність твердих розчинів телуридів цинку і кадмію; отримані залежності фотопружних коефіцієнтів від складу, а також дисперсійні залежності від довжини хвилі світла (при

кімнатних температурах). Фотопружність твердих розчинів $Zn_xCd_{1-x}Te$ обумовлена впливом деформації звукової хвилі на електронну поляризованість кристала.

Залежність фотопружних коефіцієнтів від складу зразків пояснюється тим, що характерні резонансні частоти, сили осциляторів, об'єм елементарної комірки та інші параметри, які визначають діелектричну проникність (у відповідній спектральній області світла), як і їхні модуляції звуковою хвилею, залежать, взагалі кажучи, від складу x . Коефіцієнт $|p_{44}|$ із збільшенням x монотонно зростає, а $|p_{12}|$ зменшується. $|p_{11}|$, як і $|p_{12}|$, зменшується при переході від телуриду кадмію до телуриду цинку, але в області складів $x = 0,7-0,8$ для $|p_{11}|$ спостерігається мінімум. Аналогічну особливість в залежності від складу має і $|p_0|$, де $p_0 = (p_{11} + 2p_{12}) / 3$. На основі напівфеноменологічного розгляду для випадку сполук $A^{II}B^{VI}$ отримано, що

$$p_0 = \frac{n^2 - 1}{n^4} \cdot \frac{n^2 + 2}{3} (1 - S), \quad (58)$$

де

$$S = \frac{1}{\kappa \omega_r} \cdot \frac{\partial \omega_r}{\partial P} \cdot \frac{2 \omega^2}{\omega_r^2 - \omega^2}, \quad (59)$$

n - показник заломлення; $\kappa = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$ - ізотермічна стисливість, яка визначається пружними сталими кристала ($\kappa = B^{-1} = 3/(c_{11} + 2c_{12})$); ω_r - характерна резонансна частота; ω - частота фотона; $\partial \omega_r / \partial P$ - коефіцієнт зміни ω_r (або ширини забороненої зони $\hbar \omega_r$) з тиском P . Формула (58) не пов'язана з припущенням про адитивність рефракції компонент розчину і може бути використана для аналізу експериментальної залежності $p_0(x)$, якщо відомі значення показника заломлення n і функції S в (58) для різних складів. Знак p_0 визначається знаком множника $1-S$ в (59). Особливість поведінки $p_0(x)$ в області складів $x = 0,7-0,8$ пов'язана з мінімумом функції $S(x)$. Проведений розгляд дозволяє також визначити за акустичними і акустооптичними даними коефіцієнти зміни ширини забороненої зони з тиском для різних складів твердих розчинів $Zn_xCd_{1-x}Te$.

У заключному розділі дисертації сформульовані основні результати і висновки з проведених досліджень, короткий виклад яких є на початку автореферату.

1. Рувинский М.А. Энергия основного состояния экситонного газа и жидкости в молекулярных кристаллах // ФТП.-1979.-Т.21.-В.1.-С.147-154.
2. Ruvinskii M.A. Coherent states of molecular excitons and Davydov splitting // Phys. Stat. Sol.(b).-1981.-V.107.-№1.-Р.К43-К46.
3. Каплан И.Г., Рувинский М.А. Коллективные свойства молекулярных экситонов //ЖЭТФ.-1976.-Т.71.-В.6(12).-С.2142-2157;-1977.-Т.72.- В.4.-С.1630.
4. Рувинский М.А. К теории бозе-эйнштейновской конденсации молекулярных экситонов // Физическая электроника. Респ. межвед. науч.-техн. сб.-Львов, ЛГУ,1980.-В.20.-С.10-12.
5. Гаевский А.Ю., Каплан И.Г., Рувинский М.А. Корреляционная функция плотность-плотность системы молекулярных экситонов // ТМФ.-1981.-Т.48.-№1.-С.129-136.
6. Glauberma A.E., Ruvinskii M.A. Effect of excitons on the scattering of neutrons by crystals // Phys.Stat.Sol.(b).-1966.-V.13.-№1.-Р.233-238.
7. Гаевский А.Ю., Каплан И.Г., Рувинский М.А. Рассеяние нейтронов в молекулярных кристаллах при высоком уровне оптической накачки экситонов // ЖЭТФ.-1981.-Т.80.-В.3.-С.1149-1162.
8. Гаевский А.Ю., Каплан И.Г., Рувинский М.А. Рассеяние нейтронов в молекулярных кристаллах в условиях мощной лазерной накачки.-В сб.:Вопросы атомной науки и техники. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение.-Харьков.:ХГУ,1982.-№4/23.-С.79-80.
9. Глауберман А.Е., Рувинский М.А. Влияние экситонов на поглощение ультразвука в пьезоэлектрических полупроводниках // ФТП.-1966.-Т.8.-В.11.-С.3335-3338.
10. Липник А.А., Рувинский М.А. Поглощение и усиление гиперзвука экситонами Мотта в полупроводниках с пьезоэлектрическим и деформационным электрон-фононным взаимодействием // ФТП.-1968.-Т.2.-В.5.-С.754-755.
Phys.Stat.Sol.(b).-1968.-V.28.-№1.-Р.75-81.
11. Ruvinskii M.A., Glauberma A.E. Exciton attenuation of hypersound in a strong magnetic field // Phys.Stat.Sol.(b).-1970.-V.37.-№1.-Р.95-99.
12. Рувинский М.А., Синицын А.М. О влиянии точечных заряженных

- примесей на поглощение ультразвука в полупроводнике // Физическая электроника.Респ.межвед.науч.-техн.сб.-Львов, ЛУ, 1974.-В.9.-С.22-25.
13. Glauberman A.E., Ruvinskii M.A., Synitsyn A.M. Influence of linear and point defects on the hypersonic attenuation by free carries in semiconductors // Phys.Stat.Sol.(b).-1973.-V.58.-№1.-P.K89-K91.
 14. Glauberman A.E., Ruvinskii M.A., Punduk A.V. Excitation of Wannier-Mott excitons by fast electrons // Phys.Stat.Sol.-1966.-V.13.-№2.-P.K115-K117.
 15. Глауберман А.Е., Рувинский М.А., Пундук А.В. Генерация нелокализованных экситонов Ванье-Мотта быстрыми электронами.-В сб.:Взаимодействие материалов высокотемпературного назначения со средой.-К.:Наук. думка,1968.-С.87-94.
 16. Glauberman A.E., Pundik A.V., Kozitskii S.V., Ruvinskii M.A. Generation of the exciton-impurity complex by fast electrons // Phys.Stat.Sol.(b).-1969.-V.32.-№1.-P.61-66.
 17. Сериков А.А., Рувинский М.А. Кинетика неравновесной экситов фотонной системы и экситонная люминесценция.-К.-1982.-57с.-(Препринт/АН УССР, ИТФ; ИТФ-82-125Р).
 18. Рувинский М.А., Старый В.Г., Григорович Г.М. Отрицательный фотоэффект.-В сб.:Доклады и материалы межвузовской научной конференции, посвященной 130-летию со дня рождения А.Г.Столетова.-Владимир,1970.-С.191-202.
 19. Григорович Г.М., Рувинский М.А., Шнейдер А.Д. Отрицательная фотопроводимость при собственном возбуждении в системе $ZnTe-CdTe$ // ФТП. -1969. -Т.3. -В.7. -С.1071-1073.
 20. Григорович Г.М., Рувинский М.А. Отрицательная фотопроводимость при собственном и примесном возбуждении $ZnTe-CdTe$ // ФТП. -1970. -Т.4. -В.2. -С.355-356.
 21. Григорович Г.М., Рувинский М.А. Кинетика отрицательной фотопроводимости при собственном возбуждении высокоомных кристаллов $ZnTe-CdTe$ // ФТП. -1971. -Т.5. -В.4. -С.742-744.
 22. Григорович Г.М., Рувинский М.А. Кинетика отрицательной фотопроводимости при примесном возбуждении высокоомных кристаллов $ZnTe-CdTe$ //Изв.вузов.Физика-1971.-№3.-С.141-143.
 23. Григорович Г.М., Рувинский М.А. Блашкив В.С. Отрицательная фотопроводимость твердых растворов $ZnTe-CdTe$ // Укр.физ.ж.-1972. -Т.17. -№3. -С.489-491.

24. Григорович Г.М., Рувинский М.А. Электрическая неустойчивость в области отрицательной фотопроводимости ZnTe-CdTe // ФТП. -1971. -Т.5. -В.6. -С.1232-1235.
25. Григорович Г.М., Рувинский М.А. Об электрической неустойчивости при отрицательной фотопроводимости. // Изв. вузов. Физика. -1972. -№1. -С.137-138.
26. Григорович Г.М., Рувинский М.А. Влияние электрического поля на отрицательную фотопроводимость высокоомных кристаллов ZnTe-CdTe // Физическая электроника. Респ. межвед.науч.-техн. сб. -Львов, ЛГУ,1972. -В.5. -С.28-32.
27. Григорович Г.М., Рувинський М.А. Польові залежності від'ємної фотопровідності твердих розчинів ZnTe-CdTe // Укр. фіз.ж. -1973. -Т.17. -№9. -С.1413-1418.
28. Глауберман А.Е., Рувинский М.А. Отрицательная фотопроводимость при экситонном поглощении света // ФТП. -1974. -Т.8. -В.10. -С.2051-2053.
29. Григорович Г.М., Рувинский М.А. Методика получения твердых растворов ZnTe-CdTe и их фотоэлектрические свойства.-В сб.: Процессы роста и синтеза полупроводниковых кристаллов и пленок, ч. II.- Новосибирск.: Наука,1975. -С.17-19.
30. Григорович Г.М., Рувинский М.А. Явление отрицательной фотопроводимости и коротковолнового гашения положительной фотопроводимости в смешанных кристаллах ZnTe-CdTe . -В кн.: Проблемы физики соединений $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$, т. II.-Вильнюс, Каунас: Raide, 1972. -С.45-49.
31. Рувинский М.А. Особенности отрицательной фотопроводимости в монокристаллах n-CdSe и $\text{p-Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ при собственном возбуждении // ФТП.-1976. -Т.10. -В.7. -С.1385-1387.
32. Рувинский М.А. О механизме отрицательной фотопроводимости ZnO // Укр.физ.ж.-1978. -Т.23. -№12. -С.2000-2002.
33. Григорович Г.М., Рувинский М.А., Щетинин В.П. Акустические и фотоэлектрические явления в соединениях теллуридов цинка и кадмия.-В кн.:Химическая связь в кристаллах и их физические свойства, т. I.-Минск:Наука и техника.-1976.-С.235-239.
34. Андрусив И.И., Григорович Г.М., Илизавский Ю.В., Рувинский М.А., Щетинин В.П. Упругие постоянные твердых растворов теллуридов цинка и кадмия // ФТП.-1983.-Т.25.-В.1.-С.252-254.
35. Григорович Г.М., Илизавский Ю.В., Рувинский М.А., Щетинин В.П. Затухание звука в твердых растворах теллуридов цинка и кадмия

// ФТТ.-1983.-Т.25.-В.12.-С.3671-3679.

36. Григорович Г.М., Илисавский Ю.В., Рувинский М.А., Щетинин В.П. Низкотемпературное поглощение поперечного звука в твердых растворах теллуридов цинка и кадмия // ФТТ.-1985.-Т.27.-В.8.-С. 2496-2498.
37. Илисавский Ю.В., Рувинский М.А., Щетинин В.П. Фотоупругость твердых растворов теллуридов цинка и кадмия // ФТТ.-1989.-Т.31.-В.12.-С.181-183.
38. Рувинський М.А. Енергетичний спектр поляритонів у сильно збуджених кристалах. -В зб.:Фізика і хімія твердих тіл. Вісник Івано-Франківського крайового відділення. Укр.фіз.тов. №1, 1993.-С.5-9. Поляритони у сильно збуджених молекулярних кристалах // Матеріали IV міжнародної конференції з фізики і технології тонких плівок. Частина I.-Івано-Франківськ, 1993 -С.67.

14

РУВІНСЬКИЙ Марк Аунович

**КОЛЕКТИВНІ І ДИНАМІЧНІ ЕФЕКТИ КВАЗІЧАСТИНОВИХ ЗБУДЖЕНЬ
У НЕМЕТАЛІЧНИХ КРИСТАЛАХ**

Підписано до друку 24.12.93. Формат паперу 60x84/16.

Папір офсетний 72 гр/м². Офсетний друк. Ум. - друк. арк. 2,48.

Ум. - вид. арк. 2,05. Тираж 100. Зам. II6. Безкоштовно.

Інститут фізики АН України, ВНТІ.

252650, Київ-22, ДСП, проспект Науки, 46

459621

Безкоштовно

AB 29.086