НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ

На правах рукопису

ГЛУШКО Євген Якович

КВАЗІЧАСТИНКИ В АНІЗОТРОПНИХ І НЕОДНОРІДНИХ КРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУРАХ, МОДЕЛІ, ЯКІ МАЮТЬ ТОЧНИЙ РОЗВ'ЯЗОК

01.04.07 – фізика твердого тіла

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття вченого ступеня
доктора фізико-математичних наук

Київ — 1996

ЛННБ України ім.В.Стефаника
00759843 (-)

Дисертація є рукопис.

Робота виконана в Інституті спектроскопії РАН і Криворізькому державному педагогічному інституті

Офіційні опоненти:

доктор фізико-математичних наук,
чл.-кор. НАН України, професор — Шейнкман Моісей Ківович;

доктор фізико-математичних наук,
професор — Павицький Ернест Анатолійович;

доктор фізико-математичних наук,
професор — Київ Арнольд Ихимович.

Провідна установа - Донецький фізико-технічний інститут

Захист відбудеться "18" квітня 1996 р.
в 15 годин на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 01.96.01 Інституту фізики НАН України
(252650, Київ-22, МСП, пр.Науки 46, ІФ НАН України)

З дисертацією можна ознайомитись в науковій бібліотеці Інституту фізики НАН України

Автореферат розісланий "12" березня 1996 р.

Вчений секретар спеціалізованої Ради
канд. фіз.- мат.наук — Іщук В.Л.

ЛНБ ім. В. Стефаника
АН України

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми.

Властивості квазічастинок в неоднорідних середовищах здавна привертають увагу дослідників завдяки актуальності та важливим прикладним аспектам цих матеріалів. Фізичні явища у цій сфері надзвичайно різноманітні [1-6]. Якісними маловимірними системами слід вважати шаруваті (квазідвовимірні) і ланцюжкові (квазіодновимірні) кристалічні структури : молекулярні та атомні ланцюжки, МДН-структури, кераміки, напівпровідникові супергратки та ін. Зараз ці об'єкти надають широких можливостей для випробування ідей фізики анізотропних та неоднорідних систем.

Явища переносу в конденсованих середовищах: напівпровідниках, молекулярних кристалах, діелектриках, стеклах лежать в основі напівпровідникової електроніки, лазерної техніки, оптоелектроніки, хімічної фізики барвників та люмінофорів. У середині 70-х років сформувались надійні теоретичні методи аналізу фізичних явищ, насамперед в об'ємних матеріалах, що базуються на діаграмній техніці та формалізмові матриць густини. Бум у мікроелектронній технології маловимірних структур шаруватих та інтеркальованих середовищ, який виник у цей час, викликав необхідність більш повного врахування квантових вимірних ефектів у таких неоднорідних середовищах, а також у напівпровідникових каналах та областях вбудованого заряду. Оскільки фізичні об'єкти, про які йдеться, надзвичайно складні, а також за відсутністю обмежених моделей, які мають точний розв'язок, розвиток теоретичних досліджень пішов у напрямі втілення результатів об'ємних теорій у опис неоднорідних систем. Найбільш широко використаними наближеннями тут є наближення ефективної маси, наближення трансляційної інваріантності, наближення ізольованої зони, наближення ефективної частинки та інші.

Дисертація присвячена теоретичному дослідженню квантових динамічних, кінетичних та оптичних властивостей неоднорідних і шаруватих структур , а також напівпровідникових суперграток шляхом вивчення моделей, які мають точний розв'язок.

Одержані в дисертації результати точних моделей містять у собі принципово нову інформацію, що стосується властивостей зонних та локальних електронних станів у обмежених періодичних потенціалах для одно-, дво- та тривимірних структур. Ці результати дозволяють провести оцінку адекватності популярних наближених методів і з іншого боку підійти до розглядання оптичних та кінетичних характеристик обмежених неоднорідних структур. Запропонований у дисертації математичний метод розв'язування задачі на власні значення для обмежених періодичних потенціалів застосовується також у випадку класичних коливальних мод одновимірного обмеженого ланцюжка, власних електромагнітних мод у варуватій структурі та деяких інших.

Основна мета роботи полягає у теоретичному дослідженні неоднорідних фізичних систем: МДП-структур, молекулярних кристалів, напівпровідникових суперграток, дисперсних феролектричних структур за допомогою моделей, що мають точний розв'язок.

Наукова новизна. Результати роботи обґрунтовують новий науковий напрямок, який полягає у використанні точної моделі обмеженого кристалу, складеної на основі одно- дво- та тривимірного потенціалу Кроніга-Пенні для дослідження загальних властивостей реальних матеріалів, а також умов застосування наближень.

У роботі вперше:

1. Знайдено точний розв'язок задачі на власні значення для обмеженого одновимірного потенціалу Кроніга-Пенні. Застосований аналітичний метод надає змогу дослідити в єдиній схемі локальні, поверхневі та зонні стани моделі, їхні енергії та вигляд хвильових функцій у залежності від параметрів потенціалу.

2. Побудовано основи теорії кристалу Кроніга-Пенні - дво- та тривимірної моделі на базі канонічного потенціала Кроніга-Пенні. Показано, що зонна частина енергетичного спектру має асимптотичну $\sim 1/N$ точність. Локальні стани мають розв'язуватися через теорію збурень. Показано також, що поверхневі стани кристалу Кроніга-Пенні локалізуються біля місць зі збільшеною кривизною.

3. Розвинуто теорію електронних станів у супергратках

нового типу - в обмеженій системі сферичних періодичних квантових ям.

4. Знайдено точний розв'язок задачі коливань для обмеженого одновимірного ланцюжка без використання наближення трансляційної інваріантності.

5. Знайдено точний розв'язок задачі про власні моди електромагнітного поля у періодичній шаруватій структурі. Показано, що модовий спектр має зонний характер і анізотропну кутову залежність.

6. Знайдено та досліджено новий тип ортогонального пакетного базису хвильових функцій зонних квазічастинок, який пропонується для аналізу малих неоднорідностей в об'ємі кристалу.

7. Показано наявність ефектів орієнтаційного упорядкування в ультрадисперсній системі сферичних частинок сегнетоелектричного молекулярного кристалу. Фотоелектричний ефект у таких структурах може бути керований зовнішнім електричним полем, що надає можливості для конструювання матеріалів та пристроїв для запису та зберігання інформації.

Наукова та практична цінність. Наукова, а також практична цінність роботи полягає у тому, що одержані результати та розроблений метод точної моделі кристалу зроблять можливими широкі теоретичні та експериментальні дослідження нових властивостей неоднорідних матеріалів, шаруватих структур на основі діелектриків, молекулярних кристалів і напівпровідників. Запропонована точна модель також може служити базовою моделлю для більш спеціальних теорій станів у неоднорідних середовищах.

Автор виносить на захист:

1. Теорію електронних станів в обмежених одно-, дво- та тривимірних системах квантових ям - кристалах Кроніга-Пенні, яка містить вимірні ефекти та їх модуляцію завдяки тепловим коливанням потенціалу.

2. Ортогональний пакетний базис хвильових функцій квазічастинок у неоднорідних структурах.

3. Теорію температурної залежності дифузії екситонів у молекулярних кристалах з неаналітичними зонами.

4. Теорію коливань в обмежених одновимірних ланцюжках.

5. Теорію модового спектру електромагнітного поля в

періодичних шаруватих структурах.

6. Теорію металічного гасіння когерентних молекулярних екситонів.

7. Теорію форми смуги люмінесценції в дипольних та мультипольних молекулярних кристалах, які контактують із металом чи діелектриком та мають неаналітичні енергетичні зони.

8. Теорію гіро-екситонного ефекту пам'яті в дисперсних молекулярних сегнетоелектричних структурах.

Розширене формулювання положень, що захищаються, приведене в заключному розділі автореферату.

Апробація роботи. Матеріали дисертації були представлені і доповідались на:

- семінарах і наукових конференціях Інституту спектроскопії РАН, Інституту хімічної фізики РАН, Інституту атомної енергії РАН ім.Курчатова, Інституту фізики твердого тіла РАН, Інституту фізики НАН України, Інституту фізики напівпровідників НАН України, Дніпропетровського державного університету;

- Української конференції "Матеріалознавство та фізика напівпровідникових фаз змінного складу" (Ніжин, 1993);

- 2-й та 3-й Всеросійській конференції з фізики напівпровідників (Нижній Новгород, 1993, 1995);

- 3-му Всесоюзному симпозіумі з світлової луни та когерентної спектроскопії (Харків, 1985);

- 3-й Всесоюзній конференції "Проблеми оптичної пам'яті" (Єреван, 1987);

- всесоюзних нарадах з молекулярної люмінесценції (Львів, 1978, Харків, 1982);

- Всесоюзній конференції з фізики двовимірних систем (Новосибірськ, 1987);

- Всесоюзних Пекарівських нарадах з теорії напівпровідників (Донецьк, 1989; Львів, 1992; Одеса, 1994);

- 1-му Міжнародному конгресі з адгезійних наук і технології (Амстердам, Нідерланди, 1995);

- європейських конференціях " Дослідження в фізиці конденсованого стану" (Прага, 1992; Регенсбург, 1993);

- 2-му Міжнародному конгресі з просторового заряду в твердому тілі (Антіб, Франція, 1995) ;

- 1-й Міжнародній конференції з матеріалів для оптоелектроніки (Шеффіл, Великобританія, 1995).

Публікації. З теми дисертації опубліковано 48 робіт, список основних робіт наведено в кінці автореферату.

Особиста участь автора. Результати третьої глави (§3), одержані Є.Я.Глушком у співавторстві з М.О.Єфремовим на рівних основах. Результати, викладені в четвертій главі, (§2,§3,§4), одержані Є.Я.Глушком у співавторстві з Аграновичем В.М. та Мальшуковим А.Г. на рівних основах. Усі інші оригінальні результати одержані автором самостійно або під його керівництвом.

Структура та обсяг роботи. Дисертація складається зі вступу, п'яти глав, висновків, заключної частини, чотирьох додатків, списку цитованої літератури з 338 найменувань. Обсяг основного тексту - 242 сторінки. Кількість малюнків - 46; таблиць - 9.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтована актуальність теми дисертації, її практичне значення , зроблено загальний огляд літератури та приведена структура роботи. Огляд літератури подається також у вступі до кожної глави.

Перша глава присвячена теоретичному дослідженню ортогональних пакетних базисів хвильових функцій, які можуть бути використані для опису неоднорідних явищ у напівпровідниках та молекулярних кристалах. Розглянуті та систематизовані типи ортогональних пакетних зображень (ОПП) зонних квазічастинок у кристалах. Досліджено повноту, ортогональність та симетрію базисів. Показано, що використання ОПП (к-пакетів) дозволяє звести задачу промінного зв'язку до задачі теорії збурень. Для екситонів Френкеля ОПП дозволяє дослідити вимірне квантування енергії в кристалічній плівці.

Проблема адекватного базису станів фізичної системи відіграє значну роль у описі енергетичного спектра квазічастинок у неоднорідних структурах, а також в аналізі кінетичних процесів. У стаціонарних задачах неоднорідність системи зумовлена, як правило, дефектами періодичного потенціалу, пов'язаними з межами розподілу середовищ, а

також зі спровокованими інорідними включеннями та об'ємними порушеннями. Роль своєрідного дефекту, як відомо, відіграє також вільна нереконструйована поверхня кристалу. Має місце й інша форма неоднорідності, яка існує навіть у фізично однорідних середовищах, але за нестаціонарних умов: просторово неоднорідною може бути початкова матриця густини (МГ). Зародження і релаксація неоднорідного розподілу частинок у твердому тілі описується за допомогою кінетичних рівнянь за неоднорідних початкових умов. Для ілюстрації можна навести приклад екситонів у молекулярному кристалі, що виникають при дії світла в імпульсному чи стаціонарному режимі. Зокрема, в останньому випадку неоднорідність розподілу пов'язана з процесами поглинання екситонів у середовищі. Характерною ознакою неоднорідності є порушення трансляційної інваріантності (ТІ) розв'язку рівняння Шредінгера. В однорідних нестаціонарних системах такі трансляційно-неінваріантні розв'язки завжди є нерівноважними: вони еволюціонують до рівноважних розв'язків.

Для неоднорідної системи імпульсне зображення базису хвильових функцій (ХФ) $|k^{\rightarrow}\rangle$ не може вважатися за адекватне або зручне зображення, оскільки кінетичне рівняння для діагональної МГ у цьому випадку зовсім не містить інформації щодо ступеня неоднорідності. Така інформація міститься у недіагональній частині МГ. Згідно з добре відомою процедурою розподілу на діагональну та недіагональну еволюції Шванцига-Мори [7,8], за деяких умов внеском недіагональної частини можна знехтувати. Зокрема, при переході до адекватного зображення базису ХФ початкова умова задається діагональною МГ і в подальшій еволюції недіагональні складові МГ участі не беруть.

Аналогічні міркування мають бути наведені і по відношенню до координатного базису $|\vec{n}\rangle$ ($\vec{n}$ - вузол кристалічної гратки).

Пакетне зображення базису ХФ квазічастинок є проміжним між координатним та імпульсним базисами: воно описує стани з розмитими імпульсами та координатами. У певній мірі воно може претендувати на адекватний опис неоднорідної кінетики. Поперед усе, система пакетних ХФ повинна мати всі

властивості базиса: бути повною, ортогональною та нормуємою [9]. Крім того, пакети мають бути стаціонарними, тобто такими, що не розпливаються протягом асимптотично великого часу. Запропонована в I главі процедура формування пакетних зображень містить у собі певний контроль за повнотою, та ортогональністю набору $X\vec{P}$. Показано, що $\vec{R}$-пакетному базису відповідає набір квантових чисел $(\vec{X}, \vec{R})$, де N/Π векторів $\vec{R}$ завдають в зоні Бріллюена центри пакетів кожний об'ємом ΔV, який вміщує Π станів, а Π значень $\vec{X}$ створюють супергратку в координатному просторі. Симетрія супергратки повинна співпадати з симетрією гратки. Хвильова функція базису в одновимірному випадку є

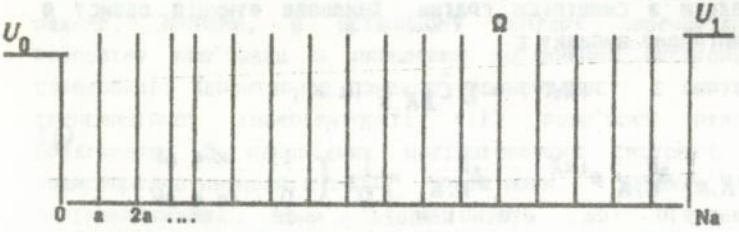
$$|XK\rangle = \sum \hat{C}_{XK,\kappa} |\kappa\rangle ,$$

$$\hat{C}_{XK,\kappa} = \delta^{\Pi}_{\kappa,K} e^{i\kappa X} \quad ; \quad \delta^{\Pi}_{\kappa,K} = \frac{1}{\sqrt{\Pi}} \begin{cases} 1, & \kappa \in \Delta V \\ 0, & \kappa \notin \Delta V \end{cases} \qquad (1)$$

Різні типи квазістаціонарних пакетних зображень розрізняються за способом відбору станів зони Бріллюена в пакеті: E-пакети, ΔE-пакети, Δk-пакети. Тут розглянуто співвідношення невизначеностей в пакетних станах, проаналізовано залежність від координатного квантового числа X та від числа станів у пакеті Π. Ортогональний пакетний базис використано для розв'язку проблеми перенормування спектру зонних квазічастинок у присутності просторових неоднорідностей. Гамільтоніан системи, який містить поряд з процесами переносу також і неоднорідну залежність енергії від координати, за допомогою унітарного перетворення переводиться до пакетного зображення. Така процедура дозволяє звести задачу проміжної сили зв'язку до задачі теорії збурень. При цьому, поряд з основною частиною переносу, діагональні елементи матриці гамільтоніана вміщують і координатну залежність. Зроблено аналіз оптимальних параметрів ОПП. Розглянуто також проблему спектру екситона Френкеля в мезоскопічній плівці. ОПП, яке проведене для поперечного руху, дозволяє врахувати неоднорідність зонної енергії екситона. Інтегрування в повздовжніх напрямках у випадку диполь-дипольного резонансного переносу зроблено точно. Показано, що екситони

відчувають ефективне відштовхування від границь кристалу, а також що мезоскопічний випадок вміщує зародки ефекту неаналітичності зонної енергії дипольних екситонів у нескінченому кристалі.

<u>В другій главі</u> розвинута теорія електронних станів в обмежених системах квантових ям (*MQWS*). У перших параграфах глави розглянута система N одновимірних плоских потенційних ям шириною a, розділених нескінчено тонкими δ-функціональними бар'єрами з коефіцієнтами непрозорості $\Omega(E)$, які залежать від енергії E (мал.1).



Мал.1 δ-потенційна система ям - дираківського гребінця: a-стала гратки; $U_{0,1}$- зовнішні бар'єри; Ω-коефіцієнт непрозорості внутрішніх бар'єрів.

Гамільтоніан такої моделі має вигляд:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{m^*}\left(-\frac{\Delta}{2} + \Omega(E)\sum_{l=1}^{N-1}\delta(x - la)\right) . \quad (2)$$

Енергетичний спектр і власний базис задачі одержано в прямому розв'язку системи $2N+2$ граничних умов для X та її похідної. Матриця системи граничних умов наведена у табл.1. Детермінант цієї матриці має структуру

$$Det = (\lambda_0, -v_0)\begin{bmatrix} \mu & \nu \\ \lambda & \mu \end{bmatrix}^{N-2}\begin{bmatrix} v_1 \\ -\lambda_1 \end{bmatrix} , \quad (3)$$

де $\lambda=(\Omega^2-\kappa^2)\sin\kappa a + 2\Omega\kappa\cos\kappa a$, $\nu=\sin\kappa a$, $\mu=-\Omega\sin\kappa a-\kappa\cos\kappa a$.

$\lambda_0=\kappa(\Omega+\kappa)\cos\kappa a + (\Omega\kappa_0-\kappa^2)\sin\kappa a$, $v_0=\kappa_0\sin\kappa a+\kappa\cos\kappa a$,

$\kappa_0=(2m(U_0-E))^{1/2}/\hbar$; $\kappa=(2mE)^{1/2}/\hbar$.

Параметри правої границі v_1, λ_1 визначаються так само, як і для лівої границі v_0, λ_0, де треба зробити зміну індексу $0 \Rightarrow 1$. $U_0 \Rightarrow U_1$. Завдяки зсувові діагональних елементів у

матриці 2×2 $\hat{A}$, ступені $\hat{A}^m$ виражаються через парні та непарні доданки біномінального розкладу.

ТАБЛ. 1 Матриця системи граничних умов.

$Z_0=1,\ A=Z_1=-1,\ Y_0=\kappa_0,\ Y_1=\kappa_1,\ W=W_1=-i\kappa,\ B=e^{i\kappa a},$

$C=(i\kappa+\Omega)\,e^{i\kappa a},\ D=-i\kappa+\Omega$

	0	1	1	2	2	3	3	4	4	.	.	-3	-3	-2	-2	-1	-1	0
0	Z_0	A	A							.	.							
1	Y_0	W	W^*							.	.							
1		B	B^*	A	A					.	.							
2		C	C^*	D	D^*					.	.							
2			B	B^*	A	A				.	.							
3			C	C^*	D	D^*				.	.							
3				B	B^*	A	A			.	.							
4				C	C^*	D	D^*			.	.							
4						B	B^*			.	.							
										.	.							
										.	.	D	D^*					
										.	.	B	B^*	.				
												.	.					
-3												D	D^*					
-3												B	B^*	A	A			
-2												C	C^*	D	D^*			
-2													B	B^*	A	A		
-1													C	C^*	D	D^*		
-1														B	B^*	Z_1		
0															W_1	W_1^*	Y_1	

$$\hat{A}^m=\frac{1}{\mu^2-\lambda\nu}\begin{bmatrix}(\mu+\sqrt{\lambda\nu})^m+(\mu-\sqrt{\lambda\nu})^m & \xi\sqrt{\frac{\nu}{\lambda}}\left((\mu+\sqrt{\lambda\nu})^m-(\mu-\sqrt{\lambda\nu})^m\right)\\ \left((\mu+\sqrt{\lambda\nu})^m-(\mu-\sqrt{\lambda\nu})^m\right)\xi\sqrt{\frac{\lambda}{\nu}} & (\mu+\sqrt{\lambda\nu})^m+(\mu-\sqrt{\lambda\nu})^m\end{bmatrix}$$

$$\xi=\mathrm{sign}(\nu),\quad \bar{\xi}=\mathrm{sign}(\lambda), \qquad (4)$$

що дозволяє записати детермінант у компактному вигляді. Маючи на увазі, що *Det* повинен дорівнювати нулю, з урахуванням (3) одержуємо дисперсійне рівняння для спектру станів. Аналіз цього співвідношення приводить до висновку,

що поверхневі ізольовані чи локальні рівні існують лише в області $\lambda v > 0$ ($\xi=\xi$). Рівняння локальних станів залежить від знаку μ:

$$\sqrt{\frac{\lambda}{v}} = \zeta \frac{\lambda_1}{v_1}, \quad \lambda = 0,1 \qquad (5)$$

$$\zeta = \xi \, \mathrm{sign}(\mu) .$$

В області $\lambda v < 0$ ($\xi=-\xi$) стани щільно згруповані в енергетичному інтервалі, який обмежений сусідніми нулями λv.

$$\cos\frac{\pi s + \varphi_1 + \varphi_0}{m} = \cos\kappa a + \frac{\Omega}{\kappa}\sin\kappa a \qquad (6)$$

$$\varphi_1 = \arctan\left(\frac{\mu}{\lambda_1}\sqrt{\frac{\lambda}{v}}\right); \quad m = N-2.$$

Завдяки залежності κ від s у (6), область зміни s для різних зон змінює від m до N цілих значень при умові $\varphi(s) = \arccos(-\mu/\kappa)$. Вплив границь φ_0, φ_1 для $m >> 1$, як це видно з (6), відгукується на станах s поблизу від дна чи стелі зони. Роль транслюційного хвильового вектора відіграє величина $\pi s/m$. Число станів в зонах змінюється від $N-2$ до N; недостатні стани визначаються розв'язками (5). Мається на увазі також, що розглянута процедура розв'язування задачі на власні значення допускає залежність параметрів a, Ω від енергії E.

Граничні переходи $\Omega \to \infty$, $\Omega \to 0$ у (5) і (6) дають відомі набори розв'язків для ізольованих потенційних ям шириною a у першому випадку та спектр в ямі шириною Na у другому. Розв'язок рівнянь (5),(6) для конкретного значення Ω в області $E<U_0$ веде до системи дозволених та заборонених зон, що чергуються, з об'ємними і поверхневими локальними станами в заборонених зонах. Сукупність таких результатів для різних Ω, які належать деякій області, дає $E\Omega$-діаграму станів (мал.2). Кінцеві потенціали при цьому фіксовані. $E\Omega$-діаграма дозволяє наочно представити енергетичний спектр систем зі змінною прозорістю внутрішніх бар'єрів $\Omega(E)$. Специфіка δ-виглядних потенціалів з'являється тут у співвідношенні для зонних стель $\kappa_l = \pi l/a$ (нулі v): дно зон задається нулями λ.

Проста δ-потенційна модель дозволяє дослідити феномен енергетичного зсуву зон у присутності об'ємної чи приповерхневої неоднорідності. В даній главі розраховано $E\Omega$-діаграми контакту системи квантових ям при параметрах

GaAs з металом та вакуумом. Розглянуто також вплив параболічної об'ємної потенціальної ями на енергетичний спектр. Одержано точний розв'язок для більш складного

Мал. 2. Діаграма енергетичного спектру симетричної системи плоских потенціальних ям для $a\kappa_0(0)=12$. Дозволені зони енергії заштриховані. Лінія A є границею відокремлення локальних рівнів в заборонених зонах. Поверхневі рівні - неперервні лінії 1-8.

випадку одновимірної канонічної моделі Кроніга-Пенні з бар'єрами, які мають кінцеву товщину. Дисперсійне рівняння тут має вигляд (3)

$$(\tilde{\lambda}_0,\ \nu_0)\ \hat{\Lambda}_1^n \begin{bmatrix} \nu_1 \\ -\tilde{\lambda}_1 \end{bmatrix} = 0 \quad , \quad n=N-1. \qquad (7)$$

де $\tilde{\lambda}_0 = \lambda_0 - \Omega\nu_0$, $\tilde{\nu}_1 = \kappa_1\tilde{\nu} - \tilde{\mu}$, $\tilde{\lambda}_1 = \lambda - \kappa_1\mu$

$\tilde{\mu} = \kappa^2 \sin\kappa a\ \mathrm{sh}\bar{\kappa}b - \bar{\kappa}\kappa\ \cos\kappa a\ \mathrm{ch}\bar{\kappa}a;$

$$\mu = -\bar{\kappa}^2 \sin\kappa a\ \mathrm{sh}\bar{\kappa}b - \bar{\kappa}\kappa\ \cos\kappa a\ \mathrm{ch}\bar{\kappa}a;\quad \hat{\Lambda}_1 = \begin{bmatrix} \tilde{\mu} & \tilde{\nu} \\ \tilde{\lambda} & \mu \end{bmatrix};$$

$$\tilde{\nu} = \bar{\kappa} \sin\kappa a\ \mathrm{ch}\bar{\kappa}b + \kappa\ \cos\kappa a\ \mathrm{sh}\bar{\kappa}a\ ;$$

$$\tilde{\lambda} = \bar{\kappa}\kappa(\bar{\kappa}\ \cos\kappa a\ \mathrm{sh}\bar{\kappa}b - \bar{\kappa}\kappa\ \sin\kappa a\ \mathrm{ch}\bar{\kappa}a); \qquad (8)$$

Граничний перехід $b\to 0$, $\bar{\kappa}^2 b = 2\Omega$, дає розв'язок, який було одержано вище для δ-видного обмеженого потенціального бар'єра. Діагональні елементи матриці $\hat{\Lambda}_1$ не дорівнюють

один одному, то ж використовувати співвідношення (4) неможна. Однак і в цьому випадку спроможність аналітичного розв'язку (7) визначається спроможністю представити ступінь матриці $\hat{A}_1$ через деяку ступінь елементів цієї матриці. Для досягнення мети $\hat{A}_1$ представляється у вигляді суперпозиції двох матриць $\hat{X}_1$, $\hat{X}_2$, які мають репродуктивні властивості : $\hat{X}_1^2=a_1\hat{X}_1$ і, крім того, задовольняють умові ортогональності

$$\hat{X}_1*\hat{X}_2=0.$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{\mu} & \tilde{\nu} \\ \tilde{\lambda} & \mu \end{bmatrix} = \frac{\tilde{\mu}}{2}\left[\begin{bmatrix} 1 & t \\ y & ty \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & z \\ -1/t & -z/t \end{bmatrix}\right] \qquad (9)$$

Розв'язок системи (9) та підстановка ступенів $\hat{A}_1$ в (7) дає загальне дисперсійне рівняння для обмеженого потенціалу Кроніга-Пенні

$$\left[\tilde{\mu}+\sqrt{\lambda_v}\right]^m(\tilde{v}_1-\tilde{\lambda}_1 t)(\tilde{\lambda}_0\tilde{v}-\tilde{v}_0\tilde{\lambda}t)+\left[\tilde{\mu}-\sqrt{\lambda_v}\right]^m* \qquad (10)$$

$$*(\tilde{v}_0+\tilde{\lambda}_0 t)(\tilde{\lambda}_1\tilde{v}+\tilde{v}_1\tilde{\lambda}t)=0, \qquad \tilde{\mu}=(\tilde{\mu}+\mu')/2,\ 4\lambda_v=(\tilde{\mu}-\mu')^2+4\tilde{\lambda}\tilde{v},$$

де нулі круглих дужок визначають поверхневі стани, а нулі λ_v – межі зон. Рівняння для зонних станів має вигляд модифікації канонічного розв'язку Кроніга і Пенні [10], який був одержаний для необмеженої системи в наближенні трансляційної інваріантності. Розраховані у другій главі $E\Omega$-діаграми демонструють повний спектр систем квантових ям в залежності від ширини та висоти внутрішніх та зовнішніх бар'єрів. Для фрагменту ХФ в l-елементарній комірці маємо

$$\Psi_l(x)=\bar{A}\begin{cases}\left[\frac{\mu\alpha_1}{2\kappa R}\right]^{l-1}(v_1'-\lambda_1' t)(\lambda_0' y-v_0'\chi t)+\left[\frac{\mu\alpha_2}{2\kappa R}\right]^{l-1}(v_1'-\lambda_1' t)(\lambda_0' v-v_0'\lambda t) \\ \left[\frac{\tilde{\mu}\alpha_1}{2\kappa R}\right]^{l-1}(v_1-\lambda_1 t)(\lambda_0 y-v_0\chi t)+\left[\frac{\tilde{\mu}\alpha_2}{2\kappa R}\right]^{l-1}(v_1-\lambda_1 t)(\lambda_0 v-v_0\chi t)\end{cases} \qquad (11)$$

де $l=[\frac{x}{a}]+1$, $v_1'=-\sin(\kappa x_1')$, $\lambda_1'=-\kappa\cos(\kappa x_1')$, $v_0'=1$, $\lambda_0'=\kappa_0$, $v_1=-\sinh(Rx_1')$, $\lambda_1=-\kappa\cosh(Rx_1')$, $x_1'=x-la+a$., $\bar{A}$- коефіцієнт нормування. Верхня частина (11) описує вигляд ХФ всередині ями, а нижня – всередині бар'єру. Співвідношення (11) описує як локальні, так і зонні стани.

За допомогою δ-потенціальної моделі розглянуто також

проблему огинаючого руху квазічастинок. Результати аналітичного розрахунку системи *MQWS*, що чергуються, показують, що якщо кількість ям у шарі більша, ніж 10-15, то вплив внутрішніх контактів на зонні рівні та положення країв енергетичних зон є малим. Застосований математичний метод дозволяє одержати точний розв'язок тривимірних *MQWS* нового типу - сферичних, які скомпоновані зі сферичних шарів різних матеріалів, що чергуються. Наведені відповідні ЕЗ-діаграми.

Зроблено аналіз модельних квазіодновимірних структур-низок Кроніга-Пенні. Для обмежених ланцюжків у потенціальній скриньці, а також для циліндричного ланцюжка з фінітними потенціальними ямами одержано, відповідно, точний та асимптотично точний розв'язок задачі на власні значення. Показано, що поперечне вимірне квантування веде до хвилеводного зсуву всієї спектральної картини.

Комбінація одновимірних розв'язків дає змогу розвинути теорію двовимірного та тривимірного кристалів Кроніга-Пенні. З'ясовано, що зонний спектр, а також внутрішні локальні стани в таких моделях одержуються аналітично з асимптотичною точністю. Щодо граничних станів кристалу Кроніга-Пенні, то вони потребують використання теорії збурень.

<u>В третій главі</u> результати перших двох глав використовуються для аналізу кінетики квазічастинок - електронів та екситонів у неоднорідних і анізотропних середовищах. За допомогою формалізму МГ розглянуто деякі загальні проблеми квантової кінетики неоднорідних систем зі слабкою взаємодією. Безпосередній розклад формального розв'язку рівняння Ліувілля-фон Неймана дозволяє без урахування гіпотези про хаотизацію одержати матрицю густини у другому та наступних порядках теорії збурень по взаємодії. Запропоновано діаграмне представлення ряду МГ по взаємодії для результуючого статистичного оператора. Використання у цьому випадку ОПП дозволяє за допомогою процедури Іванціга-Морі одержати розв'язок квантового кінетичного рівняння для неоднорідної системи.

Є декілька ситуацій, коли використання пакетних станів у кінетиці зонних квазічастинок має бути зручним. Насамперед, мова може йти про системи, де порівняно легкі квазічастинки взаємодіють з неоднорідностями типу приповерхневого зсуву

зон, дефектами, домішками та інш. Крім того, навіть у фізично однорідній системі можливі неоднорідні початкові умови для квазічастинки. У главі розглянуто кінетику неоднорідної системи екситонних пакетів, які слабо взаємодіють з фононами. На базі співвідношення для імовірності переходу пакета у фазовому просторі X-K одержано критерій дифузійного наближення. Показано, що процес встановлення рівноваги в однорідній системі екситонів, що взаємодіють тільки з акустичними фононами, можна представити у вигляді накладання концентричних хвиль густини, які розходяться від центру зони Бріллюена зі швидкістю, що наростає, та амплітудою, що зменшується, на фактор Больцмана $\exp(-\varepsilon(K^*)/T)$. Внесок оптичних фононів у еволюцію має вигляд плоских хвиль густини в імпульсному просторі, які рухаються вздовж координатних осей з фазовими швидкостями.

За деякої геометрії неоднорідного збудження екситонів у кристалі заселеність віддаленої частини кристалу обернено пропорційна квадрату відстані до поверхні збудження і лінійно росте з часом. Дисперсія заселеності повторює фононний спектр. У термінах ОПП задача про розсіювання зонних частинок на просторових неоднорідностях зведена до задачі теорії збурень.

Питання прояву анізотропії в міграції енергії електронного збудження в молекулярних кристалах, а також про характер цієї міграції належить до найбільш давніх проблем кінетики. Взаємодія когерентних електронних збуджень з фононами у сильно анізотропному середовищі (молекулярному кристалі) з великою неаналітичністю в дисперсії зонної енергії містить багато нез'ясованостей щодо впливу різних факторів анізотропії на кінетику. Важливим показником характеру міграції у таких середовищах є тип температурної залежності коефіцієнту дифузії (КД). У таблиці 2 наведені загальні взаємозв'язки між характером наближень у розрахунках та температурною залежністю компонент тензора дифузії.

Одночасне врахування різних факторів, які впливають на температурну залежність КД: неаналітичності зонної енергії, анізотропії екситонної маси та екситон-фононної взаємодії, виходу за межі довгохвильового наближення, врахування

геометрії прямої та оберненої граток кристалу, врахування непружності розсіювання та, насамкінець, внеску обертового руху молекул у екситон-фононну взаємодію,- дає змогу оцінити

Таблиця 2

Характер наближення	D_{aa}	D_{bb}	$D_{c'c'}$
Аналітична ізотропна екситонна зона. Довгохвильове і пружне наближення.	$T^{-1/2}$	$T^{-1/2}$	$T^{-1/2}$
Екситонна зона з ізотропною аналітичною частиною та сильною неаналітичністю. Довгохвильове і пружне наближення.	T^{-1}	T^{-2}	T^{-1}
Анізотропна екситонна зона з сильною неаналітичністю. Довгохвильове і пружне наближення.	T^{0}	$T^{-3/4}$	T
Анізотропна зона з сильною неаналітичністю. Вихід за межі довгохвильового і пружного наближення, врахування взаємодії з оберталчими фононами.	$T^{-1/2}$	$T^{-1/2}$	T

роль кожного з цих факторів. Розрахунки вказують на велике значення експериментальних умов спостерігання міграції енергії електронного збудження в анізотропних молекулярних кристалах.

Результати другої глави використані тут для одержання точного розв'язку задачі про коливальні моди обмеженого класичного одновимірного ланцюжка, без урахування відомих періодичних граничних умов та наближення трансляційної інваріантності. Розглянута також взаємодія частинки, яка рухається в модельному 3^d-потенціалі Кроніга-Пенні, з коливаннями цього потенціалу. Показана наявність малого параметра в цьому випадку. Розвинута теорія розсіювання частинок на коливаннях потенціалу квантових ям. Суперграткові фонони лімітують рухливість і дифузію частинок у таких системах.

В четвертій главі розглянуто оптичні прояви взаємодії електронних збуджень з межами розподілу "екситонний кристал - метал", "екситоний кристал - вакуум" з урахуванням анізотропії кристалу і просторової дисперсії в області ізольованого екситонного резонансу. Розв'язана проблема власних електромагнітних мод обмеженої періодичної шаруватої структури без використання наближення трансляційної інваріантності. Розглянута надгратка містить N пар шарів,

що чергуються, з діелектричними проникностями ε_1 та ε_2. Показано, що у неперервному спектрі власних частот при $N \geq 20$ виникають щілини, які мають інтерференційну природу і добре виражену періодичність. Проаналізовано кутову та геометричну залежність зонних параметрів електромагнітного поля, а також локальних мод, які відокремились. Передбачено ефект фокусування торцьового випромінювання надграток. Одержано нормальні електромагнітні моди у анізотропному середовищу (моноклинна сингонія) з просторовою дисперсією. Для випадку ДГУ загального вигляду розглянуто задачу про рух енергії екситонної хвилі через кордон розподілу середовищ. Зроблено розрахунки коефіцієнту пропускання енергії довільно поляризованої хвилі, яка падає з об'єму кристалу на границю з металом. Розрахована також константа швидкості гасіння когерентних екситонів на границі розподілу "метал - напівпровідник". Одержано залежності інтегральної швидкості гасіння екситонних хвиль від температури, типу ДГУ та зазору між поверхнями металу та екситонного кристалу.

Поляритонна люмінесценція дипольного екситонного кристалу, який граничить з металом, розглянута у завершальній частині глави. У спрощеній моделі екситон-фононної взаємодії розраховані дисперсійні залежності коефіцієнта пропускання для різних напрямків. Більш складна модель запропонована для опису спектра люмінесценції в області сінглетного екситона для кристалічного антрацена, який контактує з різними середовищами. Модель впроваджує як деталі фононного спектру кристалу, так і неаналітичність зонної енергії: вона дозволяє провести аналіз походження основних піків смуги люмінесценції. Розглянуто також внесок обертаючих фононних гілок у форму спектра люмінесценції. Розвинуто поляритонну модель і на випадок мультипольного кристалу. Запропонована теорія базується на уявленні про змішані мультипольні моменти, які мають безпосередній експериментальний сенс. Вираз для електростатичної енергії взаємодії двох розповсюджених у просторі зарядів після розкладу у ряд по $1/R$ і факторизації виразу під знаком інтегралу набуває вигляд

$$V=\sum_{m_\alpha^m n_{\beta k=1}}\sum^{\infty}\frac{1}{2R^k}\sum_{\alpha,\beta,\alpha_1,\beta_1} D^{(k)}_{\alpha_1}(\vec{\rho},\vec{n}_\alpha)\langle\alpha_1,\dots\alpha_5|\beta_1,\dots\beta_5\rangle D^{(k)}_{\beta_1}(\vec{\rho},\vec{m}_\beta), \tag{12}$$

де змішані мультипольні моменти (ЗММ):

$$D^{(k)}_{\alpha_1}(\vec{\rho},\vec{n}_\alpha)=\langle r^{2\alpha_1}(\vec{\rho}\,\vec{r})^{\alpha_2} r_x^{\alpha_3} r_y^{\alpha_4} r_z^{\alpha_5}\rangle \tag{13}$$

Коефіцієнти розкладу $\langle\alpha_1,\dots\alpha_5|\beta_1,\dots\beta_5\rangle$ та границі зміни індексів визначаються процедурою розкладу (12). Операція усереднення в правій частині (13) проводиться по координаті $\vec{r}$ молекули $\vec{n}_\alpha$. На відміну від звичайних мультиполів, ЗММ є тензори не більш як п'ятого рангу. Ця обставина поряд з властивістю адитивності істотно полегшує розрахунок ЗММ старших порядків.

<u>В п'ятій главі</u> розглянуто деякі питання фізики об'ємних та дисперсних молекулярних сегнетоелектриків щодо прояву світлової дії на сегнетоелектрик та орієнтаційного упорядкування в дисперсній сегнетоелектричній структурі. Для квазікристалу, який складається з однакових сферичних кристалічних частинок молекулярного сегнетоелектрика, розрахована енергія взаємодії пари сферичних частинок, при цьому використано припущення про панівну квадруполь-квадрупольну взаємодію у такій системі.

$$V_{AB}=-\frac{4\pi^2 a_2^3 a_1^3}{27\varepsilon v_{01}v_{02}R_0^5}\left[16\left(Q^{(1)}_{12}Q^{(2)}_{12}+Q^{(1)}_{13}Q^{(2)}_{13}+Q^{(1)}_{23}Q^{(2)}_{23}\right)+19Q^{(1)}_{11}Q^{(2)}_{11}\right];$$

$$Q^{(1)}_{\gamma\delta}=3a_0P_1\begin{bmatrix}-\cos\chi_1\sin2\theta_1 & \sin\chi_1\sin\theta_1 & -\cos\chi_1\cos2\theta_1\\ \sin\chi_1\sin\theta_1 & 0 & \sin\chi_1\cos\theta_1\\ -\cos\chi_1\cos2\theta_1 & \sin\chi_1\cos\theta_1 & \cos\chi_1\sin2\theta_1\end{bmatrix} \tag{14}$$

Тут v_{01} -об'єм елементарної комірки, θ_1' - сферичний кут диполя $\vec{P}$, кут χ_1 задає орієнтацію площини квадруполя відносно напрямку $\vec{P}_1$. χ_1,χ_2 визначають відносну орієнтацію квадруполів $Q^{(1)}$, $Q^{(2)}$. На основі розрахунку енергії орієнтаційного зв'язку частинок для декількох типів граток робиться висновок про спонтанне орієнтаційне впорядкування таких систем. Розвинуто якісну теорію зміни знаку фотоелектричного відгуку в молекулярних сегнетоелектричних кристалах. Одержані в даній главі результати

ЛНБ ім. В. Стефаника
АН України

використовуються для аналізу ефекту пам'яті в дисперсному середовищі кристалічних сегнетоелектричних кульок - гіроекситонного ефекту пам'яті. Показано, що дисперсна сегнетоелектрична структура має бути ефективним матеріалом для оборотнього запису та збереження інформації, яка може керуватися спільною дією світла та статичного електричного поля.

ВИСНОВКИ

У заключному розділі дисертації сформульовано основні результати дослідження, які виносяться на захист.

1. Знайдено клас ортогональних пакетних зображень (ОПП) зонних квазічастинок. Досліджено типи ОПП, їхні базисні властивості та ортогональність. Досліджено перенормування спектру зонної квазічастинки в присутності неоднорідності. Показано, що в ОПП неоднорідна задача може бути зведена до задачі теорії збурень, якщо просторова розділеність пакету набагато менша за характерний розмір неоднорідності. У випадку об'ємної неоднорідності просторова залежність енергії зумовлена координатним квантовим числом $\Delta E_{XK} \sim 1/K^2$. Для молекулярних плівок з мезоскопічними товщинами за допомогою ОПП розглянуто проблему вимірного квантування зонного спектру разом з проблемою впливу приповерхневого обриву потенціалу гратки.

2. Знайдено точний розв'язок одновимірної обмеженої системи плоских потенційних ям (MQWS), розділених δ-потенційними бар'єрами. Отримано повний спектр цієї системи, який містить зонні, а також поверхневі та об'ємні локальні стани. Одержано дисперсійне рівняння для зонних станів - модифіковане рівняння Кроніга-Пенні, а також рівняння об'ємних та поверхневих локальних станів. Запропоновано наочний засіб представлення картини енергетичного спектру у залежності від проникності бар'єрів за допомогою $E\Omega$-діаграм. Показано, що аналітичний розв'язок існує для сім'ї δ-потенційних надграток і одновимірних потенціалів Кроніга-Пенні - екситалів, для яких стала гратки та інші параметри потенціалу залежать від енергії. У

δ-потенціальній моделі також розглянуто проблему зсуву енергетичних зон в присутності об'ємної чи приповерхневої неоднорідності. $E\Omega$-діаграми для контакту системи квантових ям з металом та вакуумом, а також у випадку зарядженої поверхні, показують виникнення біля країв зон вузької підзони приповерхневих станів. Вплив параболічної об'ємної потенціальної ями на енергетичний спектр проявляється у відщепленні від дна всіх зон системи локальних станів. Розраховано повний спектр систем *MQWS*, що чергують, з δ-виглядними між'ямними бар'єрами. Показано, що для достатньо товстих шарів (N>10-15) вплив внутрішніх контактів на зонні рівні та положення країв зон є малим. Огинаюча модуляція потенціалу може проявитися лише у відщепленні внутрішніх локальних станів.

3. Знайдено точний розв'язок обмеженої одновимірної канонічної моделі Кроніга-Пенні з бар'єрами скінченої товщини без використання наближення трансляційної інваріантності. Отримано $E\Omega$-діаграми повного спектру системи для різних параметрів внутрішніх та зовнішніх бар'єрів.

4. Розглянуто точний розв'язок тривимірних *MQWS* нового типу - сферичних, які складені зі сферичних шарів різних матеріалів, що чергують. Розраховано $E\Omega$-діаграми таких структур. Проведено аналіз розв'язку циліндричної низки потенціальних ям. Показано, що зонні стани, а також внутрішні локальні стани мають асимптотичну точність. Щодо спектру поверхневих станів, то він характеризується параметром малості - відношенням довжини спаду стану зовні до довжини спаду всередині ланцюжка. Розглянуто вплив поперечного розмірного квантування руху в циліндричній квазіодновимірній низці потенціальних ям на енергетичний спектр. На прикладі моделі, яка має точний розв'язок, показано, що в обмеженій ланцюжковій системі квантових ям зовнішні локальні стани зосереджені біля торців ланцюжка.

5. Закладено основи теорії двовимірного та тривимірного кристалу Кроніга-Пенні як надзвичайної моделі твердого тіла, що має точний розв'язок. Показано, що зонний спектр, а також

внутрішні локальні стани цієї моделі можуть бути одержані аналітичними методами з асимптотичною точністю. Для граничних станів розвинута теорія збурень по існуючому малому параметру. Показано, що в двовимірній системі потенційних ям - прямокутовій плівці зовнішні граничні стани локалізовані біля кутів плівки чи інших макроскопічних виступів. Показано, що в обмеженій системі потенційних ям - паралелепіпеді зовнішні поверхневі стани локалізовані поблизу вершин кристалу чи інших макроскопічних виступів.

6. Аналіз одновимірної моделі, яка має точний розв'язок показує, що з ростом N при $N \geq 15$-20 встановлюється асимптотична байдужість енергетичного спектру щодо вигляду хвильової функції (X_Φ) при умові її неперервності і неперервності її похідної. Показано, що точне зонне дисперсійне рівняння обмеженої системи при $N_\Phi \to \infty$ переходить до рівняння Кроніга-Пенні, яке отримано у наближенні трансляційної інваріантності. Показано принципово "неолоховий" характер точних X_Φ обмежених одновимірних, двовимірних та тривимірних потенціалів Кроніга-Пенні.

7. Показано, що внесок акустичних фононів у процес становлення термодинамічної рівноваги в однорідній системі екситонів можна уявити як суперпозицію хвиль густини в імпульсному просторі, які розходяться від центру зони Бріллюена зі зростаючою швидкістю та амплітудою, що зменшується, помноженою на фактор больцмана. Внесок оптичних фононів у становлення термодинамічної рівноваги однорідної системи екситонів можна представити суперпозицією плоских хвиль, які рухаються вздовж осей координат та больцманівського фактору. Для неоднорідного випадку, коли в малій частині екситонного кристалу зовнішніми факторами підтримується постійна густина збуджень, розв'язано квантове кінетичне рівняння. Одержано просторові і часові залежності екситонної густини. Показано, що на початковій стадії еволюції дисперсія заселеності частини кристалу, далекої від зони накачки, повторює фононний спектр кристалу. У задачі про температурну залежність тензора дифузії електронного збудження в молекулярних кристалах з анізотропією та

неаналітичністю зонної енергії екситона виконано послідовне врахування і аналіз різних факторів: анізотропії екситонної маси та екситон-фононної взаємодії, виходу за межі довгохвильового наближення, врахування геометрії прямої та зворотньої гратки, непружності розсіювання, дисперсії фононного спектру та внеску обертальних ступенів свободи. Показано, що з урахуванням усіх цих факторів температурна залежність основних компонент тензора дифузії співпадає з експериментальною.

8. Знайдено точний розв'язок коливальної задачі для обмежених простого та складного ланцюжків без використання періодичних граничних умов. Для простого ланцюжка одержано умови відщеплення локальної акустичної моди, якщо є зовнішня дія на кінцеві атоми. Для складного лінійного ланцюжка розраховано зонну структуру, а також отримані умови відщеплення локальних мод - акустичної та оптичної.

9. Знайдено точний розв'язок задачі про електромагнітні моди обмеженої надгратки, яка містить N пар шарів з проникностями ε_1 і ε_2, що чергуються, без використання наближення трансляційної інваріантності. Показано, що в неперервному спектрі власних частот при $N \geq 20$ виникають щілини, які мають інтерференційну природу та добре виражену періодичність. З аналізу кутових і геометричних залежностей параметрів зон електромагнітного поля передбачено ефект фокусування торцьового випромінювання надграток. Одержані нормальні хвильові розв'язки в анізотропному середовищі з просторовою дисперсією для моноклінної симетрії. Отримано вираз для коефіцієнта пропускання енергії довільно поляризованої екситонної хвилі. Розраховано залежність інтегральної швидкості гасіння екситонних хвиль від температури, типу ДГУ та зазору між поверхнями металу й екситонного кристалу.

10. Запропоновано теорію поляритонної люмінесценції трьохшарової системи, яка містить дипольний екситонний кристал, діелектричний прошарок та шар металу скінченої товщини. В спрощеній моделі екситонної і фононної підсистеми

•розраховано дисперсійні залежності коефіцієнту пропускання для різних напрямків. Розвинуто теорію поляритонної люмінесценції кристалічного антрацена, який контактує з різними середовищами. Модель, яка містить деталі фононного спектра кристалу та неаналітичність зонної енергії, дала змогу провести аналіз природи основних піків смуги люмінесценції. Показано, що положення першого піку люмінесценції кристалу, який має межу з товстим шаром металу, може виконувати роль ідентифікатора частоти екситонного резонансу. Розвинуто теорію поляритонної люмінесценції мультипольного кристалу, яка базується на уявленні про змішані мультипольні моменти. Останні містять у собі різні мультипольні взаємодії з однаковою просторовою залежністю та мають безпосередній експериментальний сенс. Здійснено аналіз відносного внеску поступових та обертаючих фононів, а також статичних та перехідних змішаних мультипольних моментів у форму спектра люмінесценції.

11. Показано, що зміна знаку фотоелектричного відгуку, яка наявна в ряді молекулярних кристалів, може бути спричинена поляризацією екситонних давидовських пізон молекулярного феролектрика. Одержано співвідношення для енергії орієнтаційної взаємодії квадруполя зі сферичною макроскопічною кристалічною частинкою, складеною з елементарних квадруполей; для енергії орієнтаційної взаємодії макроскопічної сферичної частинки, складеної з елементарних квадруполей, з металевою плоскою поверхнею; для енергії орієнтаційної взаємодії двох сферичних макроскопічних кристалічних частинок, складених з елементарних квадруполей. Розраховано орієнтаційну енергію зв'язку для надгратки, складеної зі сферичних частинок молекулярного феролектрика для кубічного та гексагонального пакування. Запропоновано фізичний принцип запису, збереження та зчитування інформації, який базується на фотоелектричних властивостях екситонів Френкеля в диспергованих феролектричних молекулярних кристалах.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ ОПУБЛІКОВАНО В РОБОТАХ

1. Глушко Е.Я., Малышуков А.Г. в книге В.М.Аграновича и М.Д.Галанина Перенос энергии электронными возбуждениями в конденсированных средах.- М.: Наука, 1978.- С.383 (Гл.8, §6, стр.365-368).
2. Глушко Е.Я. Неоднородная кинетика квазичастиц в стационарном пакетном представлении//УФЖ.-1981.-Т.26, №12.-С.2037-2043.
3. Глушко Е.Я. Кинетические параметры экситонных пакетов// Известия вузов, сер.Физика.-1981.-Т.24, №11.-С.127-129.
4. Glushko E.Ya. Nonhomogeneous kinetics of quasi-particles in steady-state packet representation// Phys.Stat.Sol.(b).1982. V.114 .P.685-694..
5. Глушко Е.Я. Рассеяние когерентных квазичастиц на пространственных неоднородностях//ФТТ.-1993.-Т.35, №8.-С.2201-2207.
6. Глушко Е.Я. Движение и люминесценция экситонных пакетов. //ФТТ. 1991.Т.33, №11. С. 3143-3152.
7. Глушко Е.Я. Полный спектр состояний в системе квантовых ям //ФТТ.-1994-Т.35,№8.-С.2417-2422.
8. Глушко Е.Я., Евтеев В.Н. Simulation of semiconductor superlattice spectra.- УФЖ.-1995.-Т.40 ,№7 .-С.719-722.
9. Glushko E.Ya., Efremov N.A. Diffusion of Frenkel excitons in anisotropic crystals //Phys.Stat.Sol.-1983.-v.115, №2.-p.529-538.
10. Glushko E.Ya. Influence of charged surface on the dielectric gap.-II Int.Conference on Space Charge in Solids 2-8 April, 1995, Antibes, France.
11. Агранович В.М., Глушко Е.Я., Малышуков А.Г. Тушение экситонов на плоской границе раздела металл-полупроводник. -ФТТ. -1982.-v.24,№2.-p.534-538.
12. Глушко Е.Я. Металлическое тушение экситонной люминесценции в молекулярных кристаллах.-ФТТ. -1983.-v.25, №3.-p.854-861.
13. Glushko E.Ya. Metallic quenching of exciton luminescence in anthracene. -Phys.Stat.Sol.(b).-1984.-v.122, №2.-p.569-580.
14. Глушко Е.Я. Экситонная люминесценция мультипольного

кристалла, граничащего с металлом и диэлектриком. -Опт. и спектр. -1988. -v.65, №6. -p.1268-1271.

15. Буткевич В.Г., Глушко Е.Я., Морозов Б.В. и др. К механизму фоточувствительности поликристаллических слоев PbS// Электронная техника, сер. Материалы. -1981. - Т.6, №1. -С.32-34.
16. Глушко Е.Я., Синищук И.К., Соловьев В.Н. Оценка энергетических параметров дефектных комплексов в Ge// -ФТП. -1980. -v.14, №8. -p.1641-1644.
17. Глушко Е.Я. Эффект памяти в дисперсной среде с экситонами Френкеля//-Письма в ЖТФ. -1989. -v.15, №2. -p.47-51.
18. Глушко Е.Я. Ориентационное упорядочение в молекулярном дисперсном ферриэлектрике//-ФТТ. -1989. -v.30, №6. -p.95-99.
19. Глушко Е.Я. Поверхностные состояния в точно решаемой модели полупроводниковой пленки. // -ФТТ. -1996. -v.38, №1. -p.323-327.

20. Глушко Е.Я. Способ оптической записи информации// Авт.свид. SU №1451770 от 15.09.88г.
21. Глушко Е.Я. Носитель информации// Авт.свид. SU №1499402 от 08.04.89г.

22. Agranovich V.M., Glushko E.Ya., Efremov N.A. The temperature dependence of exciton diffusion in molecular crystals. Preprint Institute of spectroscopy, Moscow, 1977.
23. Ефремов Н.А., Глушко Е.Я. Температурная зависимость диффузии экситонов в антрацене. Препринт №1, ИСАН СССР, 1984.
24. Глушко Е.Я. Полнота пакетного базиса и процедура пространственного огрубления в кинетике квазичастиц// Институт спектроскопии АН СССР, Троицк, №4746-80, С.12.
25. Глушко Е.Я., Евтеев В.Н. Methods and Aspects of Exact Solvable Models of Quantum Wells Structures. - Препринт КрГПИ, Кривой Рог. - 1994. - С.56.

26. Глушко Е.Я. Неравновесная эволюция экситонов на малых временах//сб.: Тез. докл. на XXV Совещании по люминесценции. -Львов, 1978, стр.53.

27. Глушко Е.Я. Эффект памяти в ультрадисперсной среде с экситонами Френкеля//сб.: Тезисы докладов III Всес. конф. вычислительной оптоэлектронике "Проблемы оптической памяти", часть 2.-Ереван, 1-3 ноября 1987, С.33-34.

28. Glushko E.Ya. The Frenkel Excitons in Thin Films//Materials of 13-th General Conference on the Condenced Matter.-Division European Physical Society.-Regensburg, 29.03-03.04, 1993.

29. Glushko E.Ya. Memory effect in dispersive media with Frenkel excitons//Proc. of the 1-st Int. Conference on Materials for Optoelectronics//Sheffield, GB.- 22-26 August 1995.

30. Глушко Е.Я. Точные решения для потенциалов Кронига-Пенни и моделирование спектра полупроводниковых сверхрешеток// сб.: Тезисы докладов XVI Пекаровского совещания по теории полупроводников.- Одесса, 4-7 октября 1994.-С.36-37.

ЦИТОВАНА ЛИТЕРАТУРА

1. Давыдов А.С. Биология и квантовая механика.-Киев: Наукова думка, 1979.- 296 с.
2. Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем.- М: Мир, 1985.-415 с.
3. Электроника органических материалов// Под ред. А.А.Овчинникова.-М.: Наука, 1985.-416 с.
4. Васько Ф.Т. Электронные состояния и оптические переходы в полупроводниковых гетероструктурах.- Киев : Наукова думка, 1993.
5. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки.-М.:Мир, 1989.-582с.
6. III Всес.конф. по вычислительной оптоэлектронике "Проблемы оптической памяти" Ереван, 1-3 ноября 1987.- Материалы, часть 1-2, 470 с.
7. Zwanzig R. On the identity of three generalized master equations// Physica - 1964.-V.30, №6.- 1109-1128 p.
8. Mori H. Transport, Collective Motion and Brownian Motion// Progr.Theor.Phys.-1965.-V.33, №3.- 423-455 p.
9. И. фон Нейман. Математические основы квантовой механики.- М.:Наука, 1964.- С.367.
10. Ландау Л.Д.,Лифшиц Е.М., Курс теоретической физики. Т.8.- М:Наука, 1984.- С.620.

Глушко Е.Я. Квазичастицы в анизотропных и неоднородных кристаллических структурах. Точно решаемые модели.
Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика твердого тела, Институт физики НАН Украины, Киев, 1996.
Диссертацией является рукопись.

Защищается 28 научных работ и два авторских свидетельства, где проведено теоретическое исследование квантовых динамических, кинетических и оптических свойств неоднородных и слоистых структур, а также полупроводниковых сверхрешеток путем анализа точно решаемых моделей. Предлагаемые в диссертации методы решения задач на собственные значения для частиц, движущихся в ограниченных периодических потенциалах, имеют приложения также для случая классических колебательных мод одномерной конечной атомной цепочки, собственных электромагнитных мод ограниченной слоистой структуры и некоторые другие.

Ключові слова:
базиси хвильових функцій, системи квантових ям, квантова кінетика, поляритонний механізм люмінесценції фотоелектричний ефект у дисперсних середовищах.

Glushko E.Ya. Quasiparticles in anisotropic and inhomogeneous crystal structures. Exact solvable models.
The dissertation on the application for the degree of a Doctor of Physics and Mathematics sciences. Specialization - solid state physics (01.04.07), Institute of Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Kiev, 1996.
The dissertation is a manuscript.

The main results of the dissertation have been published in 28 scientific works and 2 inventions, where theoretical investigations of quantum properties as well as kinetics and optics of inhomogeneous layered structures and semiconductor superlattices were investigated. Methods of exact solving the eigenstate problem for terminated periodic potentials proposed here are also used for analizing 1D lattice vibrations, electromagnetic eigenmodes in layered systems etc.

Ав 34.335

Автореферат.

Підписано до друку 14.03. 96 р. Формат 60x84 1/16.
Папір писальний. Друк офсетний Умовн. друк. арк. 1,50.
Тираж 100. Зам. 1139.
324200, м. Кривий Ріг, ГСП—3, пр. Металургів, 28.