

С УДК 534.266  
1990

## СПЕКТР ЛОКАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ НОСИТЕЛЯ ЗАРЯДА В УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ СРЕДАХ

*Н. А. Ефремов, С. И. Покутний*

Вариационным методом и методом ВКБ исследован спектр состояний носителя заряда локализованного над сферической поверхностью раздела двух сред под действием сил электростатического изображения.

1. В последние годы возрастает интерес к изучению электронных состояний в ультрадисперсных средах (УДС) с размерами малых частиц вплоть до  $\sim 10 \div 100 \text{ \AA}$ . Такие размеры сравнимы с характерными размерами объемных или поверхностных состояний в целом ряде веществ, в частности полупроводниках. В этих условиях становится существенным влияние границы малой частицы на ее электронный спектр. Это может быть обусловлено размерными квантовыми эффектами, связанными как с чисто пространственным ограничением области квантования [1, 2], так и с поляризационным взаимодействием заряда с поверхностью частицы [3-5]. Такие изменения наблюдались в электронных спектрах малых частиц, имеющих сферическую форму, ряда полупроводников в различных средах [6-8].

С другой стороны, представляет интерес влияние малой нейтральной диэлектрической частицы (ДЧ) на внешние электронные состояния той среды, в которой она находится. В работе [9] указывалось на возможность образования диэлектрического иона — макроскопического аналога отрицательного иона, в котором электрон связан с нейтральной ДЧ поляризационным взаимодействием  $U(r)$ , а в [10, 11] рассматривались кластерные атомы, в которых электрон связан кулоновским взаимодействием с обычным ионом, окруженным оболочкой из гелия. Уменьшение в плотных парах подвижности электронов [12] связывалось в [13] с их локализацией на молекулярных кластерах, а диэлектрические ионы и кластерные атомы [9-11] рассматривались как возможные источники излучения космической пыли.

Особый интерес представляет локализация носителей заряда в конденсированных УДС на микронеоднородностях, которые в ряде случаев можно рассматривать как малые ДЧ, погруженные в среду с другой диэлектрической проницаемостью. В [14-17] экспериментально изучена локализация носителей заряда и экситонов в изоэлектронных твердых растворах  $A_2B_6$ . Установлено, что в твердых растворах  $ZnSe_{1-x}Te_x$ ,  $ZnS_{1-x}Se_x$ ,  $CdS_{1-x}Se_x$  на кластерах из атомов, образующих узкозонную компоненту раствора, возникает связанное состояние дырки [14].

Условия локализации заряда в окрестностях сферической ДЧ проанализированы нами в [3, 4], где решена в конечном виде электростатическая задача о поле, индуцируемом зарядом в окрестности ДЧ радиуса  $a$ , и найдены простые аналитические выражения для  $U(r, a)$ . В [3, 4], в частности, показано, что с уменьшением  $a$  возникает размерный квантовый эффект, препятствующий локализации заряда на достаточно малых ДЧ. Наименьший критический размер  $a_c$ , при котором появляется локальное состоя-

ние,<sup>1</sup> близок к величине  $b_1$  — среднему расстоянию заряда, локализованного над плоской поверхностью в основном состоянии

$$a_c \sim b_1 = 6 |(\varepsilon_2 + \varepsilon_1)/(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)| a_B^*, \quad (1)$$

где  $a_B^* = \varepsilon_1 \hbar^2 / me^2$  — боровский радиус заряда в среде  $\varepsilon_1$  ( $\varepsilon_2, \varepsilon_1$  — диэлектрические проницаемости ДЧ и окружающей среды;  $m$  — эффективная масса носителя заряда в среде  $\varepsilon_1$ ). Там же было указано и на возможность возникновения квазистационарных состояний (КСС) благодаря образованию положительного потенциального барьера из-за вклада центробежной энергии. Область значений орбитального квантового числа  $l$ , в которой существует КСС, зависит от размера ДЧ  $a$ .

Позже идентичные результаты воспроизведены в [5] для частного случая  $\varepsilon_1, \varepsilon_2 \approx 1$ , соответствующего локализации электрона над каплей слабополярной жидкости.

К настоящему времени отсутствует анализ общей картины спектра для произвольных значений всех параметров задачи. Такое состояние дела сдерживает экспериментальные исследования. В этой связи в настоящей работе подробно исследуется спектр  $E_{n,l}(S)$  внешних связанных состояний носителя заряда над поверхностью ДЧ в зависимости от ее радиуса  $S = a/b_1$  при произвольных значениях главного  $n$  и орбитального  $l$  квантовых чисел.

2. Для простоты мы рассматриваем здесь без потери общности случай, когда  $\varepsilon_2 \gg \varepsilon_1$ . Как показано в [3, 4], при произвольных  $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$  функциональный вид потенциала  $U(r, a)$ , обеспечивающего притяжение заряда к поверхности, слабо зависит от величины  $\varepsilon_2/\varepsilon_1$ , которая влияет лишь на величину  $b_1$ .

В указанных условиях гамильтониан радиального движения в безразмерных переменных имеет вид [3, 4]

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V_l(x, S),$$

$$V_l(x, S) = \begin{cases} -\frac{6S^3}{x(x+S)^2(x+2S)} + \frac{\hbar^2 L^2}{(x+S)^2}, & x > 0, \\ \infty, & x \leq 0, \end{cases} \quad (2)$$

$L^2 = l(l+1)$ ,  $x = (r-a)/b_1$  — расстояние заряда до поверхности ДЧ в единицах  $b_1$ . Здесь и далее используются единицы энергии  $Ry^*/36 = \hbar^2/2mb_1^2$  и длины  $b_1$ . При  $l \neq 0$  вклад центробежной энергии в эффективный потенциал  $V_l(x, S)$  создает положительный потенциальный барьер, максимальная величина которого

$$V_m(l, S) = L^2 S^{-2} (\sqrt{1+\beta^2} - \beta)^2 \quad (3)$$

достигается при

$$x = x_m = S [\sqrt{\sqrt{1+\beta^2} (\sqrt{1+\beta^2} + \beta)} - 1], \quad \beta = \sqrt{6S/L^2}. \quad (4)$$

Образование такого барьера означает, что наряду со стационарными состояниями (СС)  $E_{n,l}(S) < 0$  у поверхности ДЧ могут возникнуть и КСС  $E_{n,l}(S) > 0$  [3, 4]. С ростом  $S$ , начиная с величины  $S$  больше некоторого критического размера  $S_c^*(n, l)$ , сначала должны появляться КСС. При еще больших  $S > S_c(n, l) > S_c^*(n, l)$  они должны переходить в СС.<sup>2</sup> Из существования критического радиуса следует, что для ДЧ заданного размера  $S$  спектр  $E_{n,l}(S)$  ограничен сверху максимальным значением  $l_m(n, S)$ , образуя зону поверхностных состояний, часть которой имеет квазистационарный характер.

<sup>1</sup> Предполагаем, что на поверхности ДЧ имеется высокий потенциальный барьер  $V \rightarrow \infty$ , препятствующий проникновению носителя заряда внутрь ДЧ.

<sup>2</sup> При  $S \rightarrow \infty$  СС переходят в состояния носителя, локализованного над плоской поверхностью раздела двух сред [18].

Определим энергию основного ( $n=1$ ) состояния гамильтониана (2) при произвольных значениях  $S$  и  $l$  вариационным методом. Вводя стандартную замену радиальной волновой функции  $R(r) = \chi_l(r)/r$  и переходя к безразмерным переменным, вариационную функцию  $\chi_l(x)$  зададим в виде

$$\chi_l(x) = Ax(x+S) \exp(-\mu x/S), \quad (5)$$

$\mu$  — вариационный параметр. Среднее значение гамильтониана (2) на функциях (5) имеет вид

$$E_{1,l}(\mu, S) = -\frac{\mu^2/S^2}{\mu^2 + 3\mu + 3} [-48S\mu^3 \varepsilon_1(4\mu) e^{(4\mu)} + (12S - 1)\mu^2 - \mu - L^2 - 1], \quad (6)$$

$\varepsilon_1(x)$  — интегральная показательная функция. При  $S \rightarrow \infty$  выражение (6) переходит в  $E_{1,l} = -(3\mu S - \mu^2)/S^2$ , минимизация которого дает  $\mu =$

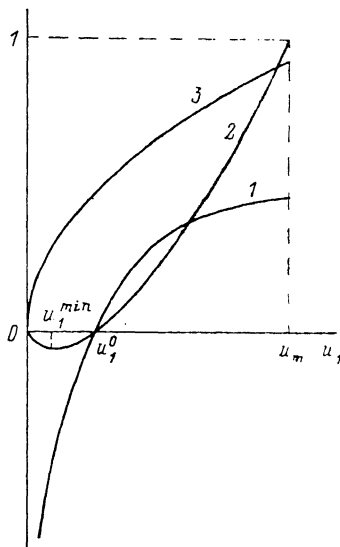
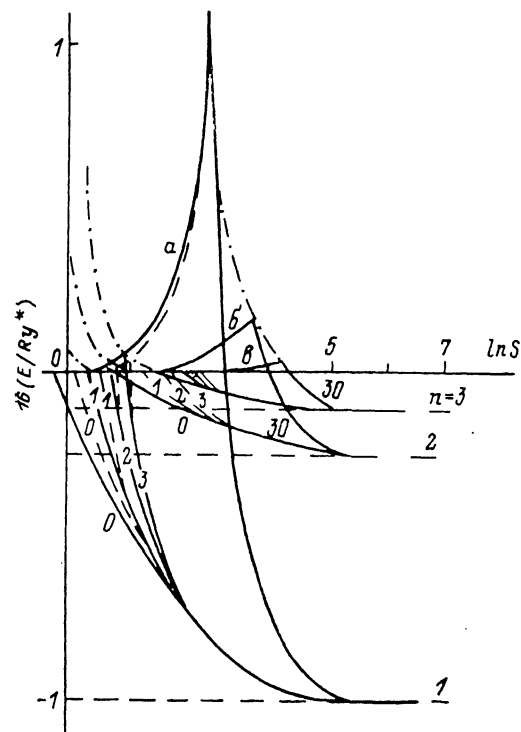


Рис. 1. Энергетический спектр заряда, локализованного над сферической диэлектрической частью  $E_{nl}(S)$ , и высота барьера эффективного потенциала (2)  $V_m(l, S)$  как функции радиуса  $S$ .

Сплошные линии —  $E_{nl}(S)$  в приближении ВКБ, штриховые —  $E_{nl}(S)$  в вариационном методе, штрихпунктир —  $V_m(l, S)$ . Цифры у кривых — значения  $l$ . Кривые  $a, b, c$  — границы спектра квазистационарных состояний  $E_n^{\max}(S)$  соответственно для  $n = 1, 2, 3$ .

Рис. 2. Схематическое изображение функций (21), (22).

1 —  $E(u_1)$ , 2 —  $u_1/u_2(u_1)$ , 3 —  $F(u_1)$ .  
Здесь  $u_1^{\min} = \sqrt{1 + 6S/L^2} - 1$ ,  $u_1^0 = 6S/L^2$ ,  
 $u_m = (6S/L^2)(1 + \sqrt{1 + L^2/6S})$ .

$= 3S/2$ , при котором  $E_{1,l}$  совпадает с энергией  $E = -Ry^*/16$  (в обычных единицах) основного состояния над плоской поверхностью раздела [18].

Следует отметить, что значению  $S = S_c^*(1, l)$  соответствует наибольшее допустимое значение энергии основного состояния при фиксированном  $l$ . Это максимальное значение энергии совпадает с  $V_m(l, S = S_c^*(1, l))$  (3). На рис. 1 изображена зависимость  $E_{1,l}(S)$  при  $l = 0, 1, 2, 3, 30$  вместе с  $V_m(l, S)$  (3). Полученные результаты ясно иллюстрируют обсуждавшиеся выше качественные особенности рассматриваемых зависимостей, подтверждая также качественные результаты работ [3, 4], относящиеся к СС с  $l = 0, 1$ . Критические размеры для указанных  $l$  имеют соответственно значения:  $S_c^*(1, l) = 1.67, 2.39, 2.86, 12.8$ ;  $S_c(1, l) = 1.18, 1.9, 2.6, 3.0, 19.1$ .

3. Зависимость  $E_{nl}(S)$  можно легко проанализировать для тех состояний, размер локализации которых значительно меньше размера ДЧ. В этом случае в потенциальной энергии (2) основную роль играют значения  $(x/S) \ll 1$ . Поэтому оставляя в разложении

$$V_l(x) = \frac{1}{S} \left[ -3 \frac{S}{x} + 6 \left( \frac{L^2}{6S} + \frac{5}{4} \right) - 12 \left( \frac{L^2}{6S} + \frac{17}{16} \right) \frac{x}{S} + \dots \right] \quad (7)$$

ведущие члены, получим кулоновские состояния с энергией вида

$$E_{n,l}(S) = -\frac{9}{4} \frac{1}{n^2} + \frac{L^2}{S^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8)$$

Средний размер таких состояний  $\langle nl | x | nl \rangle = n^2$ , поэтому критерием применимости (8) является условие

$$n^2/S \ll 1. \quad (9)$$

Вместе с тем размер этих состояний не может превышать величину  $x_m$  (4), а их энергия (8) — величину  $V_m(S, l)$

$$n^2/S \leq \frac{x_m}{S} = [1 + \beta^2(1 + \sqrt{1 + \beta^{-2}})]^{1/2} - 1 \approx \beta, \quad (10)$$

$$E_{nl}(S) \leq (L^4/6S^3)(1 + \sqrt{1 + \beta^{-2}})^{-2}. \quad (11)$$

При выполнении (9) условия (10), (11) позволяют определить минимальную величину параметра  $\beta = \sqrt{6S/L^2}$ , соответствующего максимальному значению энергии КСС. При этом в отличие от (10), которое определяет его по порядку величины, условие (11) позволяет найти величину этого параметра достаточно точно. Для этого в энергии, кроме основного члена (8), необходимо учесть в первом порядке теории возмущений вклад отброшенных членов  $\sim x/S$  в разложении (7), который дает поправку первого порядка по  $n^2/S$

$$E_{nl}(S) = -\frac{9}{4} \frac{1}{n^2} + \frac{L^2}{S^2} - 2 \frac{L^2 n^2}{S^3} + \frac{15}{2S}. \quad (12)$$

После разложения правой части (11) по параметру  $\sqrt{6S/L^2}$  до первого порядка включительно получим в согласии с (10)

$$4n^2/S \leq \sqrt{\frac{6S}{L^2}} \ll 1. \quad (13)$$

Отсюда определяется верхняя граница КСС  $l \leq l_m(n, S)$

$$l_m(n, S) \simeq L_m(n, S) = (3/8)^{1/2} (S^{3/2}/n^2) \gg n, \quad (14)$$

$$E_{n,l}^{max}(S) = E_{n,l_m(n,S)}(S) = (3/8)(S/n^4). \quad (15)$$

Для фиксированных значений  $n, l$  условие (13) определяет также критический размер  $S_c^*(n, l)$

$$S \geq S_c^*(n, l) = 2 \cdot 3^{-1/2} n^4 l^2 \gg n^2, \quad (16)$$

при котором образуются КСС при  $l \gg n$ .

При тех же условиях, используя (8), можно определить критический радиус  $S_c(n, l)$  для образования  $E_{nl}(S) \leq 0$

$$S \geq S_c(n, l) = (2/3)nL, \quad L \gg n. \quad (17)$$

Таким образом, выражение (8) определяет спектр внешних поверхностных состояний во всей области энергий вплоть до верхней границы существования КСС (15) при любых размерах  $S > S_c^*$  для всех состояний, для которых, как следует из (16),  $(l/n)^{2/3} \gg 1$ . В то же время и при  $l \leq n$  выражение (8) остается еще справедливым при  $S \gg S_c(n, l)$ , что также эк-

вивалентно условию (9), если учесть, что при  $l \leq n$   $S_c(n, l) \geq n^2$  (см. ниже). Однако в области КСС  $S_c^*(n, l) \leq S < S_c(n, l)$ , а также вблизи критического размера КС  $S \geq S_c$  зависимость  $E_{nl}(S)$  в этом случае отличается от (8).

4. Картина спектра в последнем случае может быть исследована методом ВКБ для произвольных  $n$  и  $l$ , который может давать правильные результаты для произвольных значений  $n$  и  $l$  [19].

Для того чтобы получить из условия квантования предельный переход к точному кулоновскому спектру (8) в области его применимости, необходимо для нахождения фазы в квазиклассической волновой функции использовать точное решение уравнения Шредингера при  $x \rightarrow 0$ , где потенциал  $V_l(x, S)$  в (2) имеет кулоновский вид. В результате легко получить правило квантования [19]

$$F(u_1) \equiv \frac{2}{\pi u_1^{1/2}} \int_0^1 \frac{dt}{u_1^{-1} + t^2} \sqrt{(1-t^2)\left(1 - \frac{u_1}{u_2} t^2\right)} = \sqrt{\frac{2}{3} \frac{n^2}{S}}, \quad n=1, 2, \dots \quad (18)$$

где  $u_{1,2}$  связаны с точками поворота  $x_{1,2} = S(\sqrt{1+u_{1,2}} - 1)$  (при  $E < 0$   $u_1 < -1$  и  $x_1$  принимает комплексное значение, при  $E > 0$   $u_1, u_2 > 0$ ) и определяются соотношениями

$$E_{nl}(S) = \frac{6}{S} \frac{(L^2/6S) u_1 - 1}{u_1(1+u_1)} \leq V_m(l, S),$$

$$\frac{u_1}{u_2} = \frac{SE_{nl}u_1^2}{6} = \frac{(L^2/6S) u_1 - 1}{1+u_1} u_1 \leq 1, \quad (19)$$

изображенными схематически на рис. 2 вместе с функцией  $F(u_1)$ . При  $|u_1/u_2| \ll 1$  легко найти решение (18) для  $u_1$  и соответствующее ему по (18)  $E_{nl}(S)$

$$u_1^{1/2} = (8n^2/3S)^{1/2} B_{nl} / (B_{nl}^2 - 2n^2/3S) > 0,$$

$$B_{nl} = 1 - \frac{n^2/3S}{(1-2n^2/3S)^2} \left[ \frac{(L^2/6S)(8n^2/3S)}{(1-2n^2/3S)^2} - 1 \right], \quad (20)$$

$$E_{nl} = \left[ \frac{L^2}{S^2} - \frac{9}{4n^2} \left( B_{nl}^2 - \frac{2}{3} \frac{n^2}{S} \right)^2 / B_{nl}^2 \right] \left[ 1 + \frac{(8n^2/3S) B_{nl}^2}{(B_{nl}^2 - 2n^2/3S)^2} \right]^{-1}. \quad (21)$$

Из (19) следует (рис. 2), что при  $E_{nl}(S) < 0$  решение (21) справедливо во всей области КС, где  $u_1 \leq \beta^2 = 6S/L^2$ , если  $\beta \leq 1$ , когда  $|u_1/u_2| \leq \beta^{-2}(\sqrt{1+\beta^2}-1)^2 \ll 1$ . Первому из этих неравенств отвечает с учетом (20) условие существования КС

$$S > S_c(n, l) = (2/3)(n^2 + nL), \quad (22)$$

а второе налагает при этом условие на квантовые числа

$$L \geq n. \quad (23)$$

В пределе  $n/L \ll 1$ , соответствующем  $\sqrt{6S/L^2} \ll 1$ , из условия  $1 \geq S_c/S \approx 2nL/3S \geq 2n^2/3S$ , совпадающего с (9), следует переход (22) в (17) и (21) в (12). В выделенном же случае  $l=0$  легко получить вид  $E_{n,0}(S)$  при  $E_{n,0}(S) \rightarrow 0$ . Как следует из (19), это соответствует  $u_1 \rightarrow \infty$ . В этом пределе из (18) можно получить  $E_{n,0}(S) = -(\pi/4)^4 (6/S) (1 - \sqrt{2n^2/3S})^4$ , откуда следует, что критический радиус  $S_c(n, 0)$  и при  $l=0$  описывается формулой (22).

Другой предельный случай, обратный (23),  $n/L \gg 1$  не представляет интереса, поскольку относится к КС с  $E_{nl} \rightarrow 0$ .<sup>3</sup>

<sup>3</sup> Строго говоря, в случае  $l=0$  и  $l \ll n$  при  $E_{nl}(S) \rightarrow 0$  метод ВКБ, по-видимому, дает лишь незначительную численную ошибку, но что указывают близкие результаты при сравнении вариационного расчета и ВКБ (рис. 1).

Рассмотрим теперь спектр КСС  $E_{nl}(S) > 0$  при  $l > 0$ , который представляет собой наибольший интерес в условиях выполнения неравенства (23), когда энергетический интервал таких состояний достаточно велик. Для того чтобы убедиться в последнем, достаточно рассмотреть величину максимального значения энергии  $E_{nl}^{\max}(S)$  таких состояний и условия их возникновения. Как следует из (19), при  $E_{nl}(S) = V_m(S, l)$  величина  $u_l$  достигает максимального значения  $u_1 = u_2 = u_m = \beta^2 (1 + \sqrt{1 + \beta^{-2}})$ , которое удовлетворяет уравнению, следующему из (18) при  $u_1/u_2 = 1$

$$(2/\pi u_m) [(u_m + 1) \operatorname{arctg} \sqrt{u_m} - \sqrt{u_m}] = \sqrt{2n^2/3S}. \quad (24)$$

Решение этого уравнения дает критическое значение параметра  $\sqrt{6S/L^2} = u_m/\sqrt{2u_m+1}$ , при котором возникает КСС, и его энергию  $E_{nl}^{\max}(S) = 6/Su_m^3$ .

В условиях, противоположных (23), когда  $\sqrt{u_m} \gg 1$ , приближенное решение уравнения (24) и соответствующие ему значения для  $E_{nl}^{\max}(S)$  и  $6S/L^2$  имеют вид

$$u_m = 2 \frac{6S}{L^2} = \left(\frac{4}{\pi}\right)^2 \left(1 - \sqrt{\frac{2n^2}{3S}}\right)^{-2} \gg 1, \quad E_{n,l}^{\max}(S) = \frac{6}{S} \left(\frac{\pi}{4}\right)^4 \left(1 - \sqrt{\frac{2n^2}{3S}}\right)^4. \quad (25)$$

Первое равенство (25) является уравнением для критического радиуса  $S_c^*(n, l)$ , при котором появляется КСС с заданными значениями  $n$  и  $l$ . Решение этого уравнения и соответствующее ему значение  $E_{n,l}^{\max}(S)$  при указанном ограничении есть

$$S_c^*(n, l) = \frac{1}{2} (n + (\sqrt{2}/\pi)L)^2, \quad L/n \ll 1, \quad (26)$$

$$E_{n,l}^{\max}(S_c^*) = \frac{1}{16} \left(\frac{L}{n}\right)^4 \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{L}{n}\right)^{-6} \frac{9}{4n^2} \ll |E_n(S \rightarrow \infty)| \ll |E_{1,0}(\infty)|. \quad (27)$$

Из (27) следует, что указанные состояния при  $L/n \ll 1$  обладают пренебрежимо малыми энергиями. Сравнение  $S_c^*(n, l)$  (26) с  $S_c(n, l)$  (22) показывает также, что с уменьшением параметра  $(L/n)$  вместе с уменьшением  $E_{nl}^{\max}(S)$  сужается и область  $S_c^*(n, l) < S < S_c(n, l)$  существования КСС,  $(S_c - S_c^*)/S_c \ll 10^{-1}$   $(L/n) \ll 1$ .

В наиболее интересном случае  $L/n \gg 1$ , ограничиваясь в (24) первым членом разложения по  $\sqrt{u_m} \ll 1$ , получим решение

$$\sqrt{\frac{6S}{L^2}} \approx u_m = \frac{3\pi^2}{32} \frac{4n^2}{S} \ll 1, \quad E_{n,l}^{\max}(S) = \left(\frac{32}{3\pi^2}\right)^2 \frac{3}{8} \frac{S}{n^4}, \quad (28)$$

которому соответствует

$$S_c^*(n, l) = 2 \cdot 3^{-1/3} (3\pi^2/32)^{2/3} n^{4/3} L^{2/3}, \quad (29)$$

$$E_{n,l}^{\max}(S_c^*) = \left(\frac{3}{8}\right)^{2/3} \left(\frac{32}{3\pi^2}\right)^{4/3} \left(\frac{L}{n}\right)^{2/3} \frac{1}{n^2} \gg |E_n(S \rightarrow \infty)|, \quad (30)$$

$$(L/n)^{2/3} \gg 1.$$

Очевидно, при заданных  $S$  и  $n$  выражение (28) отвечает максимальному значению  $L_{\max} = (3/8)^{1/2} (32/3\pi^2)^{1/2} S^{3/2} n^{-2}$ . Эти результаты практически совпадают с (14)–(16) с точностью до множителя  $32/3\pi^2 = 1.08$ . Как следует из (28), с увеличением размера шарика ширина энергетической зоны КСС при заданном  $n$  растет линейно по  $S$ , причем с ростом  $S$  эта зона обогащается состояниями с возрастающими значениями  $n$  в соответствии с условием  $S > S_c(n, 0)$ .

Таким образом, приближение ВКБ позволяет получить аналитические выражения для спектра практически при всех параметрах задачи, совпадающие с точным решением в области его применимости. Лишь в области КСС при  $l \gg n$  не удается получить аналитическое выражение для энергии,

которая может быть найдена лишь численно из формул (18) и (19) (интеграл в (18) может быть выражен через табулированные эллиптические интегралы). На рис. 1 приведена часть спектра, иллюстрирующая полученные результаты. Там же приведены результаты вариационного расчета, которые достаточно близки к результатам метода ВКБ.

Используя результаты для  $S_c(n, l)$  (22) и  $S_c^*(n, l)$  (29), легко оценить общее число уровней  $N$  и число стационарных уровней  $N_c$ , возникающих на ДЧ достаточно большого размера

$$N = \sum_{n=0, l=1}^{\infty} \theta(S - S_c^*(n, l)) + \sum_{n, l}^{\infty} \theta(S - S_c(n, l)) \sim S^{3/2} \gg \\ \gg N_c = \sum_{n=0, l=0}^{\infty} \theta(S - S_c(n, l)) \theta(S_c^*(n, l) - S) \sim S,$$

где  $\theta(x)$  — функция Хевисайда. С учетом вырождения по магнитному квантовому числу полное число состояний

$$\bar{N} = \sum_{n=0, l=1}^{\infty} (2l+1) \theta(S - S_c^*(n, l)) + \sum_{n, l}^{\infty} (2l+1) \theta(S - S_c(n, l)) \sim \\ \sim S^2 \gg N_c = \sum_{n=0, l=0}^{\infty} (2l+1) \theta(S - S_c(n, l)) \theta(S_c^*(n, l) - S) \sim S^2,$$

откуда общее число КСС  $\sim \bar{N} \sim S^3$ , что отличается от результатов работы [5] в связи с ошибкой, допущенной при определении  $V_m(L, S)$  (3) при  $l \gg n \gg 1$ .

В [20] исследована зависимость уширения квазистационарных состояний от параметров задачи  $S$ ,  $n$  и  $l$ . Показано, что такие состояния в широкой области спектра имеют достаточно малую ширину.

5. В заключение кратко обсудим возможные физические ситуации, для которых актуальны полученные результаты. Приведем оценки характерных размеров  $b_1 = 6(\epsilon_2 + \epsilon_1)/(\epsilon_2 - \epsilon_1) \epsilon_1 (m_0/m) \cdot 0.53 \text{ \AA}$ , энергии связи плоскостного состояния  $E_n(\infty) = (16\epsilon_1^2 n^2)^{-1} ((\epsilon_2 - \epsilon_1)/(\epsilon_2 + \epsilon_1))^2 (m/m_0) \times \times 13.6 \text{ эВ}$  и критических размеров ДЧ  $a_c(n, l) = S_c(n, l) b_1$ . В таблице приведены типичные параметры полупроводниковых матриц и диспергированных в них малых частиц вместе с оценками параметров СС электрона и дырки.

В [21] экспериментально исследована подвижность носителей тока в германии  $n$ -типа, легированного сурьмой. Атомы сурьмы в матрице  $n$ -Ge образуют кластеры размером  $a \sim 50 \div 10^2 \text{ \AA}$ . Наблюдавшееся уменьшение подвижности носителей заряда в такой неоднородной системе можно, по-видимому, связать с локализацией электронов на кластерах сурьмы. Предположим, что кластеры сурьмы имеют сферическую форму. Анализируя зависимость спектра  $E_{nl}(S)$  от размера частицы  $S$  (рис. 1), получим, что электрон может связаться в основном состоянии ( $n=1, l=0$ ) на кластере сурьмы радиусом  $a > a_c^e(1, 0) = 38 \text{ \AA}$ . Более того, в условиях эксперимента [21] электрон может находиться в СС с квантовыми числами  $n=1$  и  $l=0, 1, 2, 3$  (например, состоянию  $n=1, l=3$  соответствует кластер сурьмы размером  $a > a_c^e(1, 3) = 97 \text{ \AA}$ ). Энергия связи электрона в матрице  $n$ -Ge может достигать  $\sim 5.3 \text{ мэВ}$ , что соответствует температуре  $T \sim 62 \text{ К}$ .

Рассмотренная нами локализация носителей заряда может также быть обнаружена в твердых растворах  $A_3B_5$  [22]. Из оценок (см. таблицу) следует, что в матрицах со сравнительно большой  $\epsilon_1$  (GaP, AlSb, GaN) при  $T \sim 10 \text{ К}$  носители могут находиться в основном состоянии ( $n=1, l=0$ ), причем в зависимости от отношения  $m_e/m_h$  для электронов и дырок условия локализации различны: в GaN связываются только дырки, а в GaP и AlSb связываются как электроны, так и дырки.

На достаточно больших частицах  $a \sim 10^3 \text{ \AA}$  ( $S \sim 10^2$ ) возможна также и реализация рассмотренных КСС. Обычно длина свободного пробега но-

Параметры связанных состояний электронов и дырок, локализованных на диспергированных малых частицах в полупроводниковых матрицах

	Матрица			Частица		Дырка			Электрон			
	$\epsilon_1$	$\frac{m_h}{m_0}$	$\frac{m_e}{m_0}$	$\epsilon_2$	$b_1^h, \text{Å}$	$a_0^h(1, 0), \text{Å}$	$E_1^h(\infty), \text{МэВ (К)}$	$b_1^e, \text{Å}$	$d_0^e(1, 0), \text{Å}$	$a_0^e(2, 0), \text{Å}$	$E_1^e(\infty), \text{МэВ (К)}$	$E_2^e(\infty), \text{МэВ (К)}$
Ge	16	0.34	1.58	$\geq \epsilon_1$	150	177	1.13 (12.3)	32.2	38	86	5.3 (62)	1.33 (16)
GaP	10	0.8	0.35	18	139	164	0.56 (6.2)	318	375		0.24 (2.7)	
AlSb	11	0.5	0.4	18	290	342	0.21 (2.3)	362	428		0.16 (1.8)	
GaN	10	0.6	0.19	18	186	219	0.42 (5)	586	691		0.13 (1.6)	
				1.78				11.3	13.3	30	67 (790)	17 (197)
	1		1	1.25				29	34	76	10.5 (122)	2.6 (30)
				1.06				105	124	280	0.65 (7.6)	0.16 (2)

$E_n^{e(h)}$  — энергии связи;  $b_1^{e(h)}$  — размер локализации над плоской поверхностью электрона (дырки);  $a_0^{e(h)}(n, 0)$  — критический размер частицы, при котором электрон (дырка) связываются в состоянии  $(n, l=0)$ . При этом  $a_0^e(1, 0) = 1.18b_1^e(1)$  (вариационный расчет), а  $a_0^e(h)(2, 0) = (8/3)b_1^e(h)$  (расчет методом ВКБ).



сителей в полупроводниках значительно больше таких размеров. Как следует из (14), (15), для таких значений  $S$  существует значительное число КСС, квантовые числа  $(n, l)$  которых удовлетворяют неравенству  $S_c^*(n, l) \leq S$ . Верхняя граница таких КСС определяется условием  $l_n(1, 10^2) \approx 600$ ,  $E_{1\max}(10^2) \approx 10^{-1}$  эВ.

Отметим также, что такие высокие КСС могут оказаться существенными в процессах рассеяния носителей на частицах достаточно большого размера и приводить к сильному подавлению подвижности. В связи с этим заметим, что захват носителей на КСС возможен и без изменения их полной энергии. Таким образом, так же как и в плотных парах [12], локализация носителей заряда на микронеоднородностях может резко подавлять подвижность в полупроводниках [21].

Другими интересными объектами для локализации электронов являются аэрозоли [12] и микрочастицы в вакууме ( $\epsilon_1 = 1$ ) [10, 11]. Для веществ с положительной работой проникновения электрона — твердого водорода, воды (льда) и He — характерные энергии лежат в области  $\sim 10^{-2} \div 10^{-1}$  эВ. При таких энергиях возможно наблюдение и состояний с  $n > 1$ .

Наиболее простыми методами обнаружения и изучения рассматриваемых состояний в полупроводниках могут быть исследования межзонного поглощения света с образованием одного из носителей в связанном состоянии. Благодаря сильному различию в энергиях связи и критических размерах для разных носителей энергия кванта для таких переходов  $\hbar\omega = E_g + E_{nl}(S) < E_g$  ( $E_g$  — энергия запрещенной зоны), поскольку в таком процессе имеются условия для локализации только одного из носителей. Зависимость  $E_{nl}(S)$  от размера ДЧ  $S$  и ее пороговый характер дают возможность селективировать методами лазерной спектроскопии микронеоднородности в полупроводниках.

Для тех УДС, где  $E_{nl} \gg kT$ , их исследование возможно в процессах поглощения (и излучения) на переходах с частотами  $(E_{nl}(S) - E_{n'l'}(S))/\hbar$ , лежащими в зависимости от объекта в диапазоне от СВЧ до ИК. На частицах малых размеров  $a < a_c(n, l)$  такие процессы отсутствуют. На частицах больших размеров  $a > a_c(n, l)$  в поглощении будут давать вклад новые состояния  $(n, l)$  начиная с  $(1, 0)$  при  $a > a_c(1, 0)$ . Поэтому спектроскопически можно контролировать, например, зарождение новой фазы в полупроводниках с размерами  $\sim b_1$  или зарождение тумана, фиксируя стадию образования микрокапель начиная с размеров  $\sim 10$  Å.

Следует подчеркнуть, что большая величина  $b_1$ , характеризующая размер состояния ( $\geq n^2 b_1$ ), обеспечивает малую чувствительность к деталям структуры границы и незначительным отклонением от сферичности.

Авторы надеются, что настоящая работа будет стимулировать экспериментальные исследования.

Авторы признательны В. М. Аграновичу, Е. Л. Ивченко, А. Н. Резницкому за полезное обсуждение полученных результатов.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Эфрос Ал. Л., Эфрос А. Л. // ФТП. 1982. Т. 16. № 7. С. 1209—1214.
- [2] Екимов А. И., Онущенко А. А., Плюхин А. Г., Эфрос Ал. Л. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 4. С. 1490—1501.
- [3] Ефремов Н. А., Покутний С. И. // Препринт ИСАН. 1984. № 1. С. 34.
- [4] Ефремов Н. А., Покутний С. И. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 1. С. 48—56; Моделирование на ЭВМ кинетики дефектов в кристаллах. Л., 1985. С. 138—139.
- [5] Набутовский В. М., Романов Д. А. // ФНТ. 1985. Т. 11. № 5. С. 508—516.
- [6] Екимов А. И., Онущенко А. А. // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 34. № 6. С. 363—366.
- [7] Rosetti R., Nakahara S., Brus L. // J. Chem. Phys. 1983. V. 79. N 2. P. 1086—1088.
- [8] Екимов А. И., Онущенко А. А. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 40. № 8. С. 337—340.
- [9] Хайкин М. С. // Письма в ЖЭТФ. 1978. Т. 27. № 12. С. 706—709.
- [10] Манькин Э. А., Ожован М. И., Полуэктов П. П. // Письма в ЖТФ. 1982. Т. 8. № 3. С. 172—174.
- [11] Манькин Э. А., Ожован М. И., Полуэктов П. П. // УФЖ. 1983. Т. 28. № 9. С. 1383—1388.
- [12] Antoniewicz P., Bennet G., Thompson J. // J. Chem. Phys. 1982. V. 77. N 9. P. 4573—4575.

- [13] Krebs P., Girand V., Wanschik M. // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 44. N 3. P. 211—213.
- [14] Permogorov S., Reznitsky A., Travnikov V. // Phys. St. Sol. (b). 1981. V. 106. N 1. P. K57—K60.
- [15] Permogorov S., Reznitsky A., Verbin S. // Phys. St. Sol. (b). 1982. V. 113. N 2. P. 589—600.
- [16] Пермогоров С. А., Резницкий А. Н., Вербин С. Ю. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1985. Т. 49. № 10. С. 2019—2025.
- [17] Резницкий А. Н., Пермогоров С. А., Наумов А. Ю. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1988. Т. 52. № 4. С. 694—696.
- [18] Шякин В. Б. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. № 5. С. 1748—1756.
- [19] Мигдал А. Б. Качественные методы в квантовой теории. М., 1975. С. 336.
- [20] Ефремов Н. А., Покутний С. И. // Препринт ИСАН. 1988. № 25. С. 41.
- [21] Шаховцов В. И., Шаховцова С. И., Шпинар Л. И., Ясковец И. И. // ФТП. 1977. Т. 11. № 10. С. 1967—1971.
- [22] Твердые растворы в полупроводниковых системах. Справочник. М., 1978. С. 197.

Криворожский государственный  
педагогический институт

Поступило в Редакцию  
25 января 1990 г.