

- [1] Кристофель Н. Н. ФТТ, 1985, т. 27, № 7, с. 2001—2005.
 [2] Hasegawa A. Sol. St. Ionics, 1985, vol. 15, N 1, p. 81—88.
 [3] Hutchings M. T., Clausen K., Dickens M. N., e. a. J. Phys. C, 1984, vol. 17, № 22, p. 3903—3940.
 [4] Эварестов Р. А. Квантово-химические методы в теории твердого тела. Л.: Изд-во ЛГУ, 1982. 154 с.
 [5] Pool R. T., Leckey R. C., Jenkin J. C., Liesegang J. Phys. Rev. B, 1985, vol. 12, № 12, p. 5872—5877.
 [6] Scrocco M. Phys. Rev. B, 1982, vol. 25, № 3, p. 1535—1539.
 [7] Баженков В. К., Багдасаров Х. С., Тимофеев В. В. ФТТ, 1977, т. 19, № 6, с. 1638—1642.
 [8] Эварестов Р. А., Мурич Н. В., Петров А. В. ФТТ, 1984, т. 26, № 9, с. 2579—2576.
 [9] Catlow C. R. A., Hayes W. J. J. Phys. C, 1982, vol. 15, № 3, p. L9—L13.

Ленинградский государственный
 университет им. А. А. Жданова
 Ленинград

Поступило в Редакцию
 23 июля 1987 г.

УДК 621.315.592 538.971

Физика твердого тела, том 30, в. 1, 1988
 Solid State Physics, vol. 30, № 1, 1988

НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ С ВОЗБУЖДЕНИЕМ ЭКСИТОНОВ В СЛОИСТЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

О. С. Зинец, Я. М. Стрельникер

Методы электронной спектроскопии открывают новые возможности в исследовании возбуждений различного типа как одночастичных, так и коллективных [1, 2]. Экситонные состояния такими методами практически не исследовались. Неупругое рассеяние электронов с возбуждением экситонов Френкеля в молекулярных кристаллах рассмотрено в [3-6]. В настоящей работе изучается неупругое рассеяние электронов с возбуждением экситонов в слоистых кристаллах (типа PbI_2 , с ковалентным или ионным типом связи в плоскости слоев и ван-дер-ваальсовским взаимодействием между слоями), которое в сочетании с оптическими исследованиями может дать дополнительную информацию об энергетическом спектре и законах дисперсии экситонов.

Пусть моноэнергетический пучок электронов падает на поверхность слоистого полупроводника, параллельную плоскости слоев. Гамильтониан системы имеет вид суммы гамильтониана свободного электрона H_0 , экситонного гамильтониана H_{ex} и энергии взаимодействия электрона с кристаллом H_{int} . Волновую функцию системы ищем в виде

$$\psi = \chi(\mathbf{r}) \Phi_0 + \sum_{k,n} f_{k,n}(\mathbf{r}) \Phi_{ex}(n, \mathbf{k}), \quad (1)$$

где Φ_0 и $\Phi_{ex}(n, \mathbf{k})$ — волновые функции основного и возбужденного состояний кристалла; $\mathbf{k} = (K_1, k_3)$, K_1 и k_3 — составляющие волнового вектора экситона в плоскости слоев и в направлении, перпендикулярном слоям; n — номер возбужденного состояния; $\chi(\mathbf{r})$ и $f_{k,n}(\mathbf{r})$ — волновые функции упруго- и неупругорассеянного электрона.

Из уравнения Шредингера можно получить уравнения для функций $\chi(\mathbf{r})$ и $f_{k,n}(\mathbf{r})$. Используя схему расчета сечений неупругого рассеяния электронов, изложенную в [1-5] (связь упругих и неупругих каналов учитывается только в уравнении для $f_{k,n}(\mathbf{r})$, которое решается с помощью функции Грина), и рассчитанные ранее волновые функции и энергии

объемных и поверхностных состояний для модели слоистого кристалла [7-9], можно получить следующее выражение для сечения неупругого рассеяния электрона с возбуждением объемного экситона

$$d^2S^b/d\Omega dE = \sum_n \tau_n \sin^2 k_3 [Q^2 F \xi_2 (d\epsilon_{ex}/dk_3)]^{-1} [\xi_1 Q^2 |\gamma|^2 + F s^2 |\beta|^2 + c s Q], \quad (2)$$

$$Q = \text{ch } K_{\parallel} - \cos k_3, \quad F = [\text{ch } \epsilon - \cos(k_3 - \zeta)] [\text{ch } \epsilon - \cos(k_3 + \zeta)],$$

$$c = -a(t^2 + 2\delta \cos k_3) + \delta t(a \cos \zeta - b \sin \zeta) + (\delta t^{-1} + 2t \cos k_3)(a \cos \zeta + b \sin \zeta) -$$

$$- (a \cos 2\zeta + b \sin 2\zeta), \quad t = \exp \epsilon, \quad s = \delta - \exp K_{\parallel}, \quad \gamma = -2K_{\parallel} \beta (K_{\parallel} + \epsilon - i\zeta)^{-1},$$

$$\beta = -(K_{\parallel} - \epsilon + i\zeta)^{-1}, \quad a = \text{Re}(\gamma \beta^*), \quad b = \text{Im}(\beta^* \gamma),$$

$$\zeta = \bar{x}_0, z - \bar{x}_f, z, \quad \bar{x}_{2,3}^2 = (2m/\hbar^2)(E_i + U_0) - x_{2,3}^2, \quad i = (0, f),$$

$$\tau_n = \sigma(n + 1/2)^{-3} (x_f^3 \cos \vartheta_f/x_0) T^2, \quad T = 2x_{0,3}/(x_{0,3} + \bar{x}_{0,3}),$$

$$\xi_1 = \delta^2 - 2\delta t \cos \zeta + t^2, \quad \xi_2 = \xi_1 \text{ при } t = 1,$$

$\epsilon_{ex} = E_g^i - \hbar^2 K_{\parallel}^2/2M_{\parallel} - R_{ex}(n + 1/2)^{-2} - 2M \cos k_3 d_3$ — энергия экситона [9], $x_i = (x_{i,\parallel}, x_{i,z})$ — волновые векторы упруго- (0) и неупругорассеянных (f)

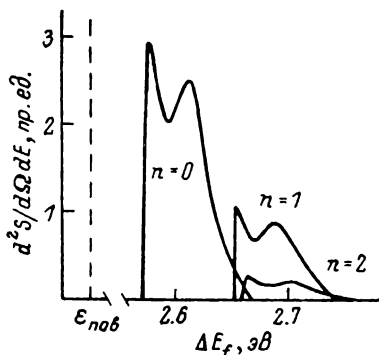


Рис. 1. Спектр энергетических потерь электронов, рассеянных с возбуждением экситонов.

Использованы следующие значения параметров: $E_0 = 5.0$, $E_g^i = 2.0$, $\epsilon_{пов} = 2.317$ эВ; $R_{ex} = 50$ мэВ; $\vartheta_0 = 0.4$, $\vartheta_f = 0.9$ (рад.); $\delta = 1.5$, $M_{\parallel} = 0.2m$.

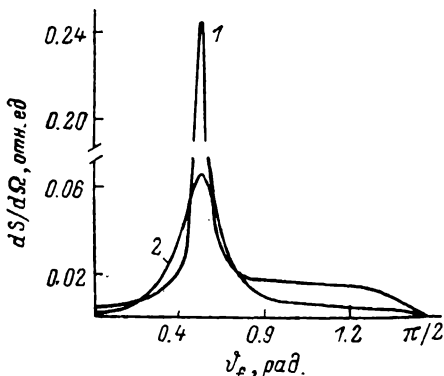


Рис. 2. Угловая зависимость сечения рассеяния электронов при возбуждении объемных (1) и поверхностных (2) экситонов (использованные значения параметров указаны в подписи к рис. 1).

электронов; ϑ_f — полярный угол неупругого рассеяния, ϵ — декремент затухания, характеризующий глубину проникновения электронного пучка в кристалл; U_0 — глубина потенциальной ямы [3]; δ характеризует изменение энергии возбуждения поверхностного слоя [9]; σ — размерный множитель. Используются безразмерные значения векторов: $k_j \rightarrow k_j d_j$, $\zeta \rightarrow \zeta d_3$ и т. д. (d_j — постоянные решетки в направлении соответствующих осей).

Для сечения неупругого рассеяния с возбуждением поверхностного экситона методом, аналогичным использованному в [3-5], можно получить

$$dS^b/d\Omega = \sum_n (2\tau_n \text{sh } x/u \text{sh}^2 z_1) (2|\gamma|^2 \text{sh } z_1 \exp z_2 + u|\beta|^2 \exp 2z_1 + v \text{sh } z_1 \exp z_1), \quad (3)$$

$$u = \text{ch } z_2 - \cos \zeta, \quad v = 2[a \exp z_2 - (a \cos \zeta + b \sin \zeta)], \quad z_1 = (x + K_{\parallel})/2, \quad z_2 = x + \epsilon.$$

Согласно [9], $\delta = \exp x$ и x характеризуют затухание волновой функции экситона в глубь кристалла. Выражение (3) с точностью до множителя $-\exp x$ совпадает с вкладом, обусловленным вносимым поверхностью кристалла искажением волновой функции экситона в сечение рассеяния $dS^b/d\Omega$. Ситуация аналогична получаемой для рассеяния электронов [6] и электромагнитных волн [10] с возбуждением объемных и поверхностных экситонов в молекулярных кристаллах.

Полученные выражения сечений сложным образом зависят от параметров модели. Зависимость $d^2S/d\Omega dE$ от потерь энергии ΔE_f иллюстри-

рует рис. 1. Сечение рассеяния имеет вид широких полос, соответствующих возбуждению объемных экситонов с различными квантовыми числами, и узких пиков, соответствующих возбуждению поверхностных экситонов (для $n=0$ положение отмечено штриховой линией). Спецификой слоистого кристалла является убывание интенсивности полос пропорционально $(n+1/2)^{-3}$. При выбранных значениях параметров полосы с $n > 1$ перекрываются. Наблюдаемые максимумы в сечении рассеяния $d^2S/d\Omega dE$ в зависимости от потерь энергии позволяют определить закон дисперсии экситонов, используя соотношение $k_z = \pm d_3 (\hbar^2/2m)^{1/2} [(E_0 \cos^2 \vartheta_0 + U_0)^{1/2} - (E_f \cos^2 \vartheta_f + U_0)^{1/2}]$. Угловая зависимость сечения рассеяния $dS/d\Omega$ при возбуждении экситонов представлена на рис. 2.

Выражения (3), (4) получены без учета сил электростатического изображения для экситонов, которые обуславливают потенциал отталкивания для экситона вблизи поверхности. Приведенные результаты справедливы, если глубина проникновения электронов в кристалл больше минимальной глубины z_m , на которой возможно возбуждение экситонов. Последнюю можно оценить из условия $E_0 = E_f + e_{\text{ex}} + V_i(z_m)$, где $V_i(z)$ — потенциальная энергия экситона в поле сил изображения [11–13]. При неслишком малых энергиях пучка электронов (обычно $E_0 \geq 5$ эВ) условие $z_m < l$ можно легко удовлетворить. z_m оказывается меньше глубины «мертвого» слоя для экситонов у поверхности, который может проявляться в отражении света. Сечение рассеяния чувствительно, в частности, к изменению энергии возбуждения в поверхностном слое (параметр δ). Таким образом, возможно получение информации о состоянии поверхности.

Л и т е р а т у р а

- [1] Evans E., Mills D. L. Phys. Rev. B, 1972, vol. 5, N 10, p. 4126—4139.
- [2] Ibach H., Mills D. L. Electron Energy Loss Spectroscopy and Surface Vibrations. N. Y.: Academic Press, 1982. 366 p.
- [3] Стрельникер Я. М. ФТТ, 1983, т. 25, № 7, с. 2230—2232.
- [4] Дяков В. А., Стрельникер Я. М. УЖФ, 1985, т. 30, № 10, с. 1550—1556.
- [5] Стрельникер Я. М. ФТТ, 1986, т. 28, № 8, с. 2582—2584.
- [6] Nuyts R., Phariseau P. Physica. 1978, vol. 90A, p. 260—272.
- [7] Зинец О. С., Сугаков В. И., Супрун А. Д. ФТП, 1976, т. 10, № 4, с. 712—715.
- [8] Зинец О. С. УФЖ, 1977, т. 22, № 8, с. 1340—1345.
- [9] Зинец О. С. ФТП, 1977, т. 11, № 7, с. 1388—1391.
- [10] Сугаков В. И. ФТТ, 1963, т. 5, № 9, с. 2682—2687.
- [11] Hopfield J. J., Thomas D. G. Phys. Rev., 1963, vol. 132, N 2, p. 563—572.
- [12] Зинец О. С., Супрун А. Д. Вестник Киевского университета. Физика, 1982, № 23, с. 50—52.
- [13] Зинец О. С. ФТТ, 1985, т. 27, № 7, с. 2231—2233.

Винницкий медицинский институт им. Н. И. Пирогова
Винница

Поступило в Редакцию
27 апреля 1987 г.
В окончательной редакции
27 июля 1987 г.

ДЫРОЧНО-ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ МЕХАНИЗМ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В КЕРАМИКАХ «ОДИН—ДВА—ТРИ»

Е. В. Холопов

Последние месяцы интенсивно обсуждается явление высокотемпературной сверхпроводимости, открытое в керамиках купрата лантана, частично замещенного барием, со структурой K_2NiF_4 [1, 2]. Значительное повышение критической температуры было достигнуто заменой лантана