

**ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ В КРИСТАЛЛООПТИКЕ  
 С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИЕЙ  
 ДЛЯ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО ПОТЕНЦИАЛА  
 С НУЛЕВЫМ РАДИУСОМ ДЕЙСТВИЯ <sup>1</sup>**

*И. Б. Тампель, В. Л. Шехтман, О. Е. Широкоброд, А. Ф. Якубов*

Получены граничные условия в кристаллооптике с учетом пространственной дисперсии для сингулярного переходного пограничного слоя. Показано, что они характеризуются тремя независимыми параметрами. Обсужден физический смысл параметров в граничных условиях. Вычислены матрица рассеяния, фаза и длина рассеяния механического экситона в полуограниченном кристалле с дефектной поверхностью. Рассмотрены случаи квазистационарного, связанного и локализованного на центрах поверхностных экситонов. Энергия связи выражена через длину рассеяния. Результаты сравниваются с данными опыта.

Метод граничных условий (ГУ) в кристаллооптике с пространственной дисперсией (КПД) является традиционным [1, 2]. ГУ отражают в себе структуру ПП в более явной и непосредственной форме, чем наблюдаемые амплитуды светорассеяния. Кроме того, задача об отражении и пропускании света тонкой кристаллической пластинкой с помощью ГУ эффективно сводится к решению задачи для полуограниченного кристалла. В этом заключается целесообразность использования ГУ.

В работе [3] было показано, что светоотражение представляет собой своеобразное многоканальное рассеяние на границе раздела кристалл—вакуум, что обусловлено наличием добавочных световых волн — поляритонов. Это рассеяние происходит, кроме того, на нелокальном потенциале — поляризуемости, последняя определяется функцией Грина механической задачи полуоднородного рассеяния экситона на ПП. Из основных принципов симметрии матрицы рассеяния в работе [3] был найден общий вид ГУ в случае нормального падения света на поверхность

$$\Delta B = -i(F_1 E_- + F_2 E_+) + 4\pi(F_3 + F_4)P(0), \quad (1a)$$

$$F_3 \Delta E = -i(F_2 B_- + F_1 B_+) + 4\pi(F_2 F_3 - F_1 F_4)P(0), \quad (1b)$$

$$F_6 P(0) = \lambda P'(0) + \frac{\lambda^2}{a^2} \frac{1}{\mu} (F_3 E_- + F_4 E_+), \quad (1в)$$

где  $F_i(\omega)$  — шесть независимых параметров ГУ, число  $\mu$  дано ниже в выражении (4).

В данной работе исследованы ГУ для ПП с нулевым радиусом действия, когда электрическое поле неразрывно на границе  $\Delta E = 0$ , т. е. параметр  $F_5^{-1} = 0$  в ГУ (1б). В этом случае ГУ имеют не более трех отличных от нуля

<sup>1</sup> В контексте данной работы слова «приповерхностный потенциал» (ПП) понимаются в общем смысле как переходный пограничный слой, т. е. как светоекситонное возмущение на поверхности. Там, где это не вызывает сомнений, термин ПП используется для частной механической экситонной задачи. Понятие переходного пограничного слоя в кристаллооптике впервые ввел фон Алькемаде в 1883 г.

параметров, а именно:  $F_{12}=F_1+F_2$ ,  $F_{34}=F_3+F_4$  и  $F_6$ . Соответствующие ГУ определяют ПП с нулевым радиусом действия. Они имеют вид

$$\Delta E = 0, \quad \Delta B = -iF_{12}E(0) + 4\pi i F_{34}P(0), \quad F_6 P(0) = \lambda P'(0) + \frac{\lambda^2}{\mu a^2} F_{34}E(0). \quad (2)$$

### 1. Микроскопический смысл феноменологических параметров ГУ

Многими авторами рассматривалась проблема ГУ для модели кристалла с дефектной поверхностью и оптическим откликом на экситонах Френкеля. Основная трудность исследования подобных моделей заключается в том, что сразу четыре физически различных микропараметра являются величинами одного порядка малости. Это радиус экситона и межмолекулярного взаимодействия, а также постоянная решетки  $a$  и радиус ПП, причем в континуальном пределе длинных волн  $a/\lambda \rightarrow 0$ .

В работе [4] было получено точное решение нелокального волнового уравнения Максвелла для кристалла с дефектной поверхностью с учетом изменения энергии перехода, силы осциллятора и межмолекулярного взаимодействия в приповерхностном слое. Амплитуда светотражения в обозначениях [4] дается формулой

$$\alpha(\omega) = \frac{4\kappa\mu \sin \frac{Q_1 - Q_0}{2} \sin \frac{Q_2 - Q_0}{2} [e^{-i(Q_1 + Q_2 + Q_0)} + 2(\cos Q'_{ex} - \cos Q_{ex})] + \varphi(\omega)}{4\kappa\mu \sin \frac{Q_1 + Q_0}{2} \sin \frac{Q_2 + Q_0}{2} [e^{-i(Q_1 + Q_2 - Q_0)} + 2(\cos Q'_{ex} - \cos Q_{ex})] + \varphi(\omega)}, \quad (3a)$$

где

$$\varphi(\omega) = 2i(\eta - 1) \left[ e^{-i \frac{Q_1 + Q_2}{2}} - i(\eta - 1) \sin \frac{Q_1 + Q_2}{2} \right]. \quad (3b)$$

В соответствии с [4] параметры  $\eta$ ,  $\kappa$  и  $\mu$  определены как

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{\mathcal{L}d'_f}{\mathcal{L}'d_f}, \quad \kappa = (4\pi Q_0 \sin Q_0)^{-1}, \quad \mu^{-1} = \frac{d_f^2}{\mathcal{L}\hbar a^3} = \\ &= \frac{M a^2 \omega_{LT}}{2\pi\hbar} \varepsilon_0 = - \frac{a^2 (N_1^2 - \varepsilon_0) (N_2^2 - \varepsilon_0)}{4\pi}. \end{aligned} \quad (4)$$

В данной модели ПП характеризуется величинами  $\eta$  и  $\cos Q'_{ex}$ . В приближении Гайтлера—Лондона

$$\cos Q'_{ex} = - \frac{\omega^2 - \tilde{\omega}_f'^2}{4\omega_f' \mathcal{L}'^2} \mathcal{L} \simeq - \frac{\omega - \omega_f'}{2\mathcal{L}'^2} \mathcal{L}, \quad \cos Q_{ex} = - \frac{\omega^2 - \tilde{\omega}_f^2}{4\omega_f \mathcal{L}} \simeq - \frac{\omega - \tilde{\omega}_f}{2\mathcal{L}}. \quad (5)$$

В длинноволновом пределе  $Q_{1,2} = N_{1,2}(a/\lambda) \ll 1$ ,  $Q_{ex} = N_{ex}(a/\lambda) \ll 1$  из (3) получаем

$$\begin{aligned} \alpha(\omega) &= \frac{(N_1 - 1)(N_2 - 1) \left[ 1 + i \frac{A}{\lambda} (N_1 + N_2 + 1) \right] - X}{(N_1 + 1)(N_2 + 1) \left[ 1 + i \frac{A}{\lambda} (N_1 + N_2 - 1) \right] - X}, \\ X &= \frac{8\pi}{\mu} \frac{A}{a} (\eta - 1) \left[ 1 - i \frac{N_1 + N_2}{2} (\eta - 1) \frac{a}{\lambda} \right], \end{aligned} \quad (6)$$

где величина  $A(\omega)$  представляет собой обобщенную длину рассеяния экситона на ПП (см. раздел 2). Она равна

$$A(\omega) = a[\cos Q_{ex}(\omega) - 2 \cos Q'_{ex}(\omega)]. \quad (7)$$

В данной задаче имеет место случай ПП нулевого радиуса действия  $\Delta E = 0$  ввиду равенства амплитуд  $1 - \alpha = \beta_1 + \beta_2$  в [4]. Чтобы найти связь

параметров ГУ (2) с микропараметрами, сопоставим аналитический вид (6) с выражением амплитуды, соответствующим этим ГУ

$$\alpha(\omega) = \frac{(N_1 - 1)(N_2 - 1)[F_6 - i(N_1 + N_2 + 1)] + (\varepsilon_0 - 1)(F_6 - i) + X(\omega)}{(N_1 + 1)(N_2 + 1)[F_6 - i(N_1 + N_2 - 1)] + (\varepsilon_0 - 1)(F_6 + i) + X(\omega)}, \quad (8a)$$

где

$$X(\omega) = iF_{12}[F_6(N_1 + N_2) - i(N_1^2 + N_2^2 + N_1N_2 - \varepsilon_0)] + \frac{8\pi}{\mu} \frac{\lambda^2}{a^2} F_{34} \left(1 - i \frac{N_1 + N_2}{2} F_{34}\right). \quad (8b)$$

Из сравнения (6) и (8) при  $\varepsilon_0 = 1$  в случае  $\mathcal{L}' = 0$  получаем ДГУ Пекара  $P(0) = 0$  и ГУ Друде—Борна  $\Delta B = 4\pi i \chi' a / \lambda E(0)$ , где  $\chi'$  имеет смысл поляризуемости «мертвого» слоя, а именно  $\chi' = -\frac{d'f^2}{v\hbar} \left[\omega - \bar{\omega}'_f + i \frac{\Gamma}{2}\right]$ ,  $v = a^3$ . Если же  $\mathcal{L}' \neq 0$ , то в данной модели  $F_{12} = 0$ , а остальные два параметра ГУ равны  $F_6 = -\lambda/A(\omega)$ ,  $F_{34} = (a/\lambda)(\eta - 1)$ .

Таким образом, параметр  $F_6$  связан непосредственно с длиной рассеяния  $A$ , параметр  $F_{12}$  характеризует мощность «мертвого» слоя, а  $F_{34}$  определяется изменением силы осциллятора и эффективной массы экситона в пределах ПП, так как  $\eta = \mathcal{L}d'_f/\mathcal{L}'d_j$ . Полученные результаты существенно уточняют и обобщают результаты предшествующих работ. В частности, при  $\mathcal{L}' \ll \mathcal{L}$  — случай слабой связи объемных экситонов с поверхностью — возникает, как мы увидим, квазистационарный приповерхностный экситон (КПЭ). При  $\mathcal{L}' \geq \mathcal{L}$  — случай сильной связи — от сплошного экситонного спектра может отщепиться дискретный уровень, соответствующий механическому поверхностному экситону (МПЭ) таммовского типа. Оптические спектры отражения (ОСО) имеют в этих случаях совершенно различный вид.

## 2. Квазистационарный и таммовский приповерхностные экситоны

В данной работе мы вычислили также амплитуду  $S_{\text{ex}} = e^{2i\delta_{\text{ex}}}$  и фазу  $\delta_{\text{ex}}$  для вспомогательной задачи об отражении механического экситона от поверхности (это полудномерное рассеяние, эквивалентное в пределе длинных волн радиальной задаче  $s$ -рассеяния)

$$S_{\text{ex}} = \frac{e^{-i\varrho_{\text{ex}}} - 2 \cos Q'_{\text{ex}}}{e^{i\varrho_{\text{ex}}} - 2 \cos Q'_{\text{ex}}}, \quad \text{tg } \delta_{\text{ex}} = \frac{\sin Q_{\text{ex}}}{\cos Q_{\text{ex}} - 2 \cos Q'_{\text{ex}}}. \quad (9)$$

Отсюда для обобщенной длины рассеяния получаем

$$-A^{-1} = q_{\text{ex}} \text{ctg } \delta_{\text{ex}} = 2q_{\text{ex}} \frac{\omega - \omega_r(\omega)}{\Gamma_r(\omega)}, \quad (10)$$

где  $\omega_r = \bar{\omega}'_f + \Delta_r(\omega)$  — частота резонанса, т. е. его спектральное положение, величины  $\Gamma_r$  и  $\Delta_r$  равны следующим выражениям:

$$\Gamma_r(\omega) = 2 \frac{\mathcal{L}'^2}{\mathcal{L}} \sin Q_{\text{ex}}(\omega), \quad \Delta_r(\omega) = -\frac{\mathcal{L}'^2}{\mathcal{L}} \cos Q_{\text{ex}}(\omega). \quad (11)$$

В случае слабой связи  $\mathcal{L}' \ll \mathcal{L}$ , когда  $\Delta_r$  и  $\Gamma_r \ll \bar{\omega}'_f - \omega_0$ , мы имеем задачу с дискретным уровнем  $\bar{\omega}'_f$  на фоне сплошного спектра состояний объемных экситонов; при этом  $\Gamma_r(\bar{\omega}'_f)$  является константой затухания этого уровня, а  $\Delta_r(\omega'_f)$  его сдвигом. В данном случае плотность состояний сплошного спектра пропорциональна  $\sin Q_{\text{ex}} \sim q_{\text{ex}} \sim \sqrt{\omega - \omega_0}$ .

Таким образом, в этом случае квазистационарного приповерхностного экситона длина рассеяния имеет характерную резонансную зависимость от частоты  $A(\omega) = (\Gamma_r/2)/q_{\text{ex}}(\omega - \omega_r)$  (см. [5, с. 233]), соответственно  $S$ -матрица равна  $S_{\text{ex}} = 1 + T_{\text{ex}}$ , где  $T_{\text{ex}} = -i\Gamma_r[\omega - \omega_r + i\Gamma_r/2]^{-1}$ .

Рассмотрим теперь случай сильной связи  $\mathcal{L}' \geq \mathcal{L}$ . В этой ситуации наибольший интерес представляет случай так называемого низкоэнергетического рассеяния (см., например, [6]), когда применимо приближение, не зависящее от формы потенциала, а именно

$$-A^{-1} = g_{\text{ex}} \operatorname{ctg} \delta_{\text{ex}} = -A_0^{-1} + \frac{1}{2} r_0 g_{\text{ex}}^2, \quad (12)$$

где  $A_0$  — длина рассеяния Ферми,  $r_0$  — эффективный радиус действия.

Для данной модели  $r_0 = \frac{a}{3} \left[ 1 + 2 \frac{\mathcal{L}^2}{\mathcal{L}'^2} \left( \frac{\tilde{\Delta}'_f}{\mathcal{L}} - 1 \right) \right]$  он может быть отрицательным из-за дискретности задачи, но в континуальном пределе  $a \rightarrow 0$  он равен нулю. Длина рассеяния  $A_0$  равна в данном случае

$$A_0 = a \frac{(\mathcal{L}'/\mathcal{L})^2}{(\mathcal{L}'/\mathcal{L})^2 - 2 - \tilde{\Delta}'_f/\mathcal{L}}, \quad (13)$$

где  $\tilde{\Delta}'_f = \tilde{\omega}'_f - \tilde{\omega}_f$  — дефект резонанса. В частном случае  $\mathcal{L}' = \mathcal{L}'' = \mathcal{L}$  и  $d'_f = d_f$  отсюда вытекает механическое ДГУ  $P(0) + A_0 P'(0)$ , которое согласуется с [7]. Как известно, в случае потенциала нулевого радиуса действия положительная длина рассеяния  $A_0 > 0$  отвечает связанному состоянию, в данном случае механическому приповерхностному экситону (МПЭ). Если же  $A_0 < 0$ , то  $S$ -матрица имеет полюс на нефизическом листе, который обычно называют «виртуальным» уровнем.

Рассмотрим вопрос об энергии МПЭ методом  $S$ -матрицы. Если  $S_{\text{ex}}$  имеет полюс  $\omega_c$  ниже края сплошного спектра  $\omega_c < \omega_0$ , то волновая функция  $\psi_{\text{ex}} \sim e^{-iq_{\text{ex}}x} - S_{\text{ex}} e^{iq_{\text{ex}}x}$  имеет, очевидно, затухающую внутрь кристалла асимптотику  $\psi_{\text{ex}} \sim e^{-\tilde{q}_{\text{ex}}x}$ , где  $\tilde{q}_{\text{ex}} = -iq_{\text{ex}} > 0$ . Это и является признаком локализованного состояния (МПЭ). В частности, при  $\mathcal{L}' = \mathcal{L}$  из (9) легко находим  $\omega_c = \tilde{\omega}'_f + \mathcal{L}^2/\tilde{\Delta}'_f$ , что совпадает с [8], причем  $\omega_c < \omega_0$  при условии  $\tilde{\omega}'_f < \omega_0 + \mathcal{L}$ , когда  $A_0 > 0$ . В общем случае задача решается следующим образом. Так как актуальной является область достаточно малых энергий связи  $\omega_0 - \omega_c \ll \mathcal{L}$ , то  $2 \cos Q'_{\text{ex}} \simeq 1 - a/A_0$ . Кроме того,  $e^{-iq_{\text{ex}}} \simeq 1 - a\tilde{q}_{\text{ex}}$ , где  $q_{\text{ex}} = \sqrt{2M(\omega_0 - \omega)}/\hbar$ . В результате получаем формулу Бете—Пайерлса, связывающую  $\omega_c$  и  $A_0$  (впервые это соотношение было получено Вигнером [6]). В последующей формуле учтено (13)

$$\omega_0 - \omega_c = \frac{\hbar}{2MA_0^2} = \mathcal{L} \frac{a^2}{A_0^2} = \mathcal{L} \left[ \frac{(\mathcal{L}'/\mathcal{L})^2 + |\tilde{\Delta}'_f/\mathcal{L} - 2|^2}{(\mathcal{L}'/\mathcal{L})^2} \right],$$

$$\frac{|\tilde{\Delta}'_f/\mathcal{L}|}{\mathcal{L}} > 2 - \frac{\mathcal{L}'^2}{\mathcal{L}^2}. \quad (14)$$

Надо сказать, что в отличие от задачи бесконечной цепочки с дефектным атомом в полубесконечной цепочке значения частоты  $\tilde{\omega}'_f$ , при которых происходит отщепление дискретного уровня МПЭ, находятся глубоко в зоне, где уже существенна дискретность модели. Поэтому вывод формулы Бете—Пайерлса в данном случае был действительно необходим. Отметим также, что в теории низкоэнергетического рассеяния отрицательные энергии являются нефизическими. В противовес этому в КПД частоты  $\omega < \omega_0$  вполне реальны — это просто частота падающего света. Поэтому виртуально рассеяние экситонов с отрицательными энергиями на ПП действительно происходит, что представляет интерес с точки зрения теории рассеяния.

Обсудим теперь вопрос о проявлении МПЭ в ОСО (см. также [9, 10]). Из формулы Бете—Пайерлса вытекает, что волновое число экситона на частоте  $\omega_c$  равно  $i/A_0$ , т. е.  $N_{\text{ex}}(\omega_c) = i\tilde{\kappa}/A_0$ . Кроме того, как следует из общих соображений (см. ниже), оптически активной является поляритонная частота  $\omega_p$ , на которой  $\operatorname{Im} N_2(\omega_p) = \operatorname{Im} N_{\text{ex}}(\omega_c)$ , и коэффициент отражения имеет максимум, равный единице в простейшем случае механического ДГУ при  $\epsilon_0 = 1$ . Действительно,  $\alpha(\omega_p) = (1 + iA_0/\tilde{\kappa})/(1 - iA_0/\tilde{\kappa})$ ,

так как при  $\omega = \omega_p$  мы имеем  $1 + i \frac{A_0}{\lambda} (N_1 + N_2 \pm 1) = i \frac{A_0}{\lambda} (N_1 \pm 1)$ . Следовательно,  $|\alpha(\omega_p)|^2 = 1$ .

Учитывая закон дисперсии поляритонов, нетрудно получить следующее соотношение между частотой  $\omega_c$ ,  $\omega_p$  и длиной рассеяния  $A_0$ :

$$(\omega_p - \omega_c)/\omega_{LT} = A_0^2/(A_0^2 + \lambda^2), \quad (15)$$

Для объяснения различия частот  $\omega_c$  и  $\omega_p$  следует учитывать, что, с одной стороны, стационарными состояниями рассеяния света частоты  $\omega$  в кристалле являются поляритоны с той частотой  $\omega$ , а, с другой стороны, поляритон в глубине кристалла представляет собой суперпозицию состояний фотона и экситона с одинаковыми значениями импульса. Отсюда и возникает условие  $N_2(\omega_p) = N_{ex}(\omega_c)$  (рис. 1). Строго говоря, проекция

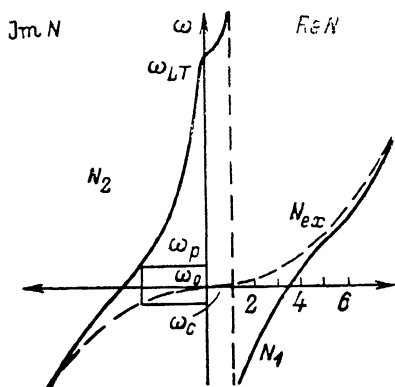


Рис. 1. Иллюстрация соотношения  $\text{Im } N_2(\omega_p) = \text{Im } N_{ex}(\omega_c)$  между частотами  $\omega_p$  и  $\omega_c$ .

$N_{1,2}(\omega)$  — поляритонные ветви,  $N_{ex}(\omega)$  — дисперсия экситона.

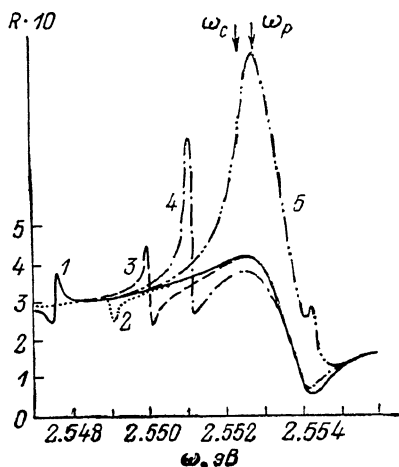


Рис. 2. Деформация («вращение») резонансного контура в спектре отражения, обусловленного механическими поверхностными экситонами, при различных значениях длины рассеяния.

1 —  $A_0/\lambda = 0.038$ , 2 — 0.0455, 3 — 0.0543, 4 — 0.714, 5 — 0.753. В последнем случае показано различие между частотами  $\omega_p$  и  $\omega_c$ . Остальные параметры соответствуют данным рис. 5.

состояния поляритона на состояние экситона даже с учетом ограниченности кристалла и мнимых значений импульса при  $\omega < \omega_0$ , т. е. интеграл

$$\int_0^{\infty} dz \exp\{\text{Im}[q_2(\omega_p) - q_{ex}(\omega_c)]z\}$$

имеет резкий максимум при  $q_2(\omega_p) = q_{ex}(\omega_c)$ . Характерной особенностью резонансов в ОСО, связанных с МПЭ, является их дисперсионный вид, причем амплитуда пика, а также взаимное расположение максимума и минимума жестко скоррелированы с частотой  $\omega_c$  и, следовательно, с длиной рассеяния, так как  $\omega_0 - \omega_c = \hbar/2MA_0^2$ . Форма резонанса также сильно зависит от величины объемного затухания экситонов, причем при изменении частоты  $\omega_c$  резонанс «переворачивается» (рис. 2). Так как  $A_0$  определяется видом ПП, то форма и положение резонанса МПЭ должны при физических воздействиях на поверхность кристалла, например ее электронной бомбардировке, изменяться одновременно, что следует учитывать при интерпретации опыта.

### 3. Экситоны, локализованные на поверхностных центрах

В работах [11, 12] экспериментально исследовано проявление поверхностных локализованных состояний как в ОСО (рис. 3, а), так и в люми-

несценции. Теоретически такие экситоны могут быть описаны в рамках ПП нулевого радиуса действия с помощью коэффициента ГУ

$$F_{12} = F_{12}^{(0)} + f \frac{\gamma/2}{\omega - \omega_1 + i\gamma/2}, \quad (16)$$

причем величина  $F_{12}^{(0)}$  определяется собственным «мертвым» слоем [13], а резонансный член учитывает наличие локальных экситонов в пределах

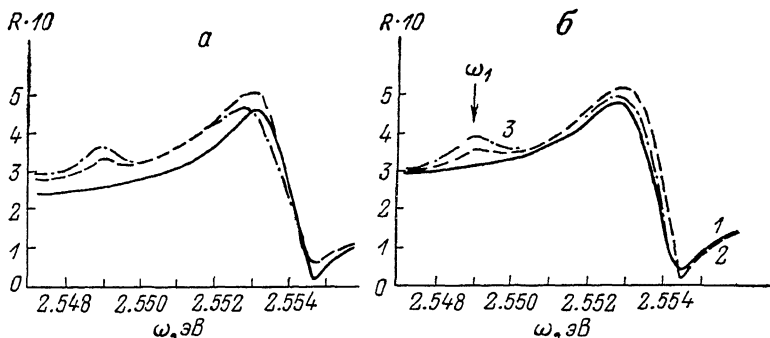


Рис. 3. Экспериментальные спектры отражения CdS при различных дозах засветки, определяющих концентрацию поверхностных центров, на которых локализируются экситоны (а). Теоретические спектры отражения при различных значениях параметра  $f$  (б).

В области  $\omega = 2.549$  эВ видно проявление поверхностных экситонов в виде резонансных пиков с различной амплитудой.

1 —  $f=0$ , 2 — 0.4, 3 — 0.8. Остальные параметры соответствуют данным рис. 5.

этого слоя, где  $f$  учитывает концентрацию поверхностных центров, на которых локализируются экситоны;  $\omega_1$  — частота соответствующего перехода, который проявляется в ОСО и люминесценции [11, 12].

Таким образом, коэффициент  $F_{12}$  в наших ГУ (2) определяется мощностью «мертвого» слоя как одномерного электродинамического дельта-

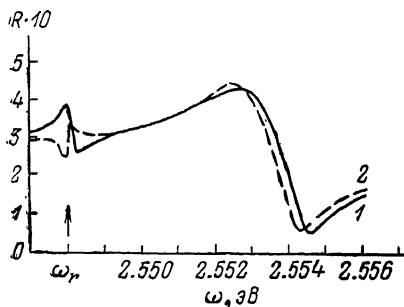


Рис. 4. Теоретический спектр отражения (1) в случае резонансной фоновой диэлектрической проницаемости, согласующийся с данными опытов [15] в легированных кристаллах CdS при  $\epsilon'_0 = 8.3$ ,  $\epsilon''_0 = 10$ ,  $\omega_r = 2.548$  эВ,  $\gamma_r = 2 \cdot 10^{-4}$  эВ,  $F_{12} = 0$ ,  $F_{34} = -0.04$ ,  $A_0/\gamma = 0.03$ ,  $\Gamma_{ex} = 5 \cdot 10^{-4}$  эВ. Резонанс МПЭ в той же спектральной области, имеющий совершенно иной (обращенный) вид (2).

образного потенциала. (Напомним, что как механический ПП «мертвый» слой является бесконечным барьером, непроницаемым для механических экситонов в объеме кристалла). Это позволяет, как мы видим, моделировать поверхностные резонансы, определяемые, в частности, локализованными состояниями экситонов в трехмерных потенциальных ямах, центрированных на поверхностных дефектах в пределах «мертвого» слоя, ширина которого мала по сравнению со световой длиной волны. Эти состояния принципиально отличаются по своей природе от МПЭ таммовского типа, последние локализованы в одномерной потенциальной яме и образуют двумерную приповерхностную экситонную зону. Совершенно различно и их проявление в ОСО. Поверхностные резонансы проявляются в форме колоколообразного пика (рис. 3, б), параметры которого — спектральное положение, амплитуда, ширина — могут изменяться в отличие от резонансов МПЭ независимо.

При обсуждении модели поверхностных резонансов мы не учитывали, во-первых, возможный транспорт энергии поверхностных экситонов, а во-вторых, диффузное отражение объемных экситонов от приповерхностных центров. Очевидно, что в последнем случае в одномерном рассеянии должен проявиться неупругий канал, который тоже может быть резонансным и иметь соответствующее проявление в ОСО.

Отметим, что аналогичным образом можно моделировать объемные резонансы в легированных кристаллах (рис. 4) введением резонансных членов в фоновую диэлектрическую проницаемость [10]

$$\epsilon_0(\omega) = \epsilon'_0 - \epsilon''_0 \frac{\gamma/2}{\omega - \omega_1 + i\gamma/2} \quad (17)$$

Однако в отличие от поверхностных резонансов объемные резонансы теоретически и на опыте (рис. 4) имеют в ОСО дисперсионный вид.

#### 4. Сравнение с опытом

Проведенное обсуждение трехпараметрических ГУ (2) показало, что коэффициенты этих ГУ имеют ясный физический смысл, что облегчает их выбор при описании наблюдаемых ОСО. Сами же ГУ для ПП с нулевым радиусом действия позволяют описать очень большое разнообразие ОСО.

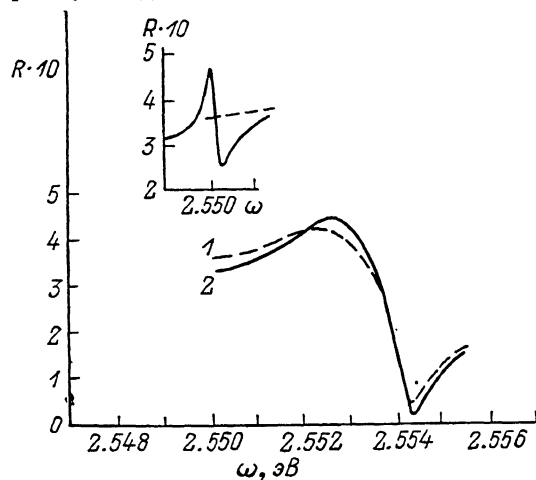


Рис. 5. Экспериментальный спектр отражения CdS по данным [14] (1) и теоретический спектр (2) при  $F_{12} = -0.3$ ,  $F_{34} = -0.04$ ,  $A_0/\hbar = 0.03$ ,  $\Gamma_{ex} = 5 \cdot 10^{-5}$  эВ.

Параметры экситонной зоны соответствуют данным [14]. На вставке — участок спектра в случае ГУ из работы [18] при тех же, что и в [16], значениях параметров.

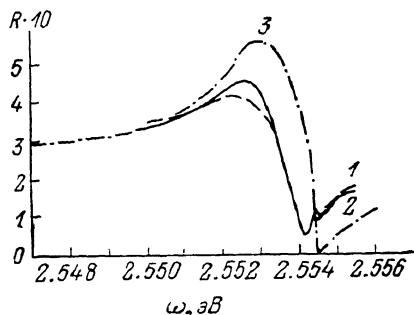


Рис. 6. Экспериментальный спектр отражения при подсветке УФ по данным [14] (1) и теоретический спектр (2), имеющий спайк при  $F_{12} = -0.78$ ,  $F_{34} = -0.0136$ ,  $A_0/\hbar = 0.02$ ,  $\Gamma_{ex} = 6.4 \cdot 10^{-5}$  эВ.

Для сравнения показан спектр (3) в случае ГУ Лоренца—Пекара,  $\Delta E = 0$ ,  $\Delta B = 0$ ,  $P(0) = 0$ .

Одними из наиболее экспериментально изученных систем в отношении ОСО являются кристаллы сульфида кадмия CdS. В [14] были проведены наиболее тщательные измерения ОСО в области экситонного резонанса  $A$  ( $n=1$ ), при этом было обращено внимание на появление спайка при подсветке УФ (рис. 5, 6). Ранее исследовался ОСО легированных кристаллов CdS [15]. Недавно была обнаружена структура в ОСО [10, 11], которая в [12] приписывается локализованным на поверхностных центрах экситонам.

Удовлетворительная теоретическая интерпретация этих экспериментальных данных до сих пор отсутствует. В [16, 17] была предпринята попытка подгонки параметра  $A_0$  в механическом ДГУ, при этом оказалось, что формальное согласие с опытом получается ценой комплексных значений  $A_0$  с положительной мнимой частью. Это отвечает генерации энер-

гии на поверхности и поэтому нереально. В работе [18] рассматривались ГУ с двумя параметрами с учетом разрыва магнитного поля, однако без учета наличия электрического поля в разрыве магнитного, что для экситонов Ванье—Мотта неудовлетворительно ввиду пренебрежения «мертвым» слоем. Согласно с опытом в этой работе отсутствует, так как в области частот 2.5495—2.5510 эВ в расчетном ОСО имеется яркая особенность, не показанная в [18] (см. вставку на рис. 5). Аналогичные непроинтерпретированные пики имеются и в расчетах [16, 17]. Они обусловлены МПЭ тамбовского типа, так как длина рассеяния  $A_0 > 0$ , причем слишком велика. На опыте в этой области никаких особенностей не наблюдается.

Сравнение представленной теории, основанной на ГУ (2) для ПП нулевого радиуса действия, с данными опытов показано на рис. 3—6. Оптимальные параметры ГУ подбирались исходя из физических соображений с использованием метода наименьших квадратов. Видно, что теория находится в количественном согласии с опытом.<sup>2</sup>

## 5. Обсуждение результатов

Цель работы заключалась в обобщении метода потенциала нулевого радиуса, действенность которого в атомной и ядерной физике хорошо известна [6], на случай многоканального рассеяния поляритонов на границе раздела кристалл—вакуум. Полученные ГУ (2) применимы к реальным кристаллам. Эти ГУ учитывают: 1) длину рассеяния объемных экситонов на механическом ПП, 2) тонкий «мертвый» слой; 3) скачок эффективной массы экситона и его силы осциллятора в области ПП.

Сингулярный ПП имеет на самом деле конечную толщину около одного-двух экситонных радиусов; его детальное описание наталкивается на серьезные трудности ввиду нарушения адиабатического приближения, нарушения симметрии матрицы внутреннего поля и неконтролируемых дефектов, зависящих от условий выращивания и обработки поверхности. В этом смысле сингулярный ПП является «черным ящиком». Приближение ГУ (2), которое не зависит от формы ПП, является адекватным при неполноте информации о состоянии поверхности. В этом приближении  $K$ -матрица рассеяния факторизуется на механический и световой каналы, при этом отличными от нуля оказываются всего три ее элемента — в соответствии с тремя каналами в рассеянии. Эти три элемента  $K$ -матрицы есть не что иное, как обобщение длины рассеяния для случая трехканального рассеяния на границе раздела; на языке ГУ это выражается в виде трех параметров  $F_{12}$ ,  $F_{34}$ ,  $F_6$ . Их физический смысл был установлен с помощью модели, основанной на экситонах Френкеля и допускающей точное решение задачи. Важно, что эти параметры имеют простую частотную зависимость, в некоторых случаях они не зависят от частоты падающего света в отличие от общих ГУ (1).

Таким образом, ГУ (2) объективно отражают сложную картину поведения поляритонов вблизи поверхности. Для описания совокупного действия сингулярного и регулярного ПП мы можем заменить первый и них найденными ГУ (2). Справедливость этого утверждения обусловлена тем обстоятельством, что эти ГУ мы получаем, рассматривая поведение решения нелокального волнового уравнения практически на самой поверхности. Поэтому, очевидно, эти ГУ должны удовлетворяться, когда на поляритоны дополнительно действует какой-либо несингулярный аналитический потенциал, например потенциал зеркального изображения, убывающий как  $z^{-3}$ . В таком понимании метод ГУ позволяет решить проблему для произвольного ПП. Отсюда ясно, что выделение сингулярной сердцевинки из полного ПП является конструктивным и необходимым шагом на пути исследования ОСО реальных кристаллов.

<sup>2</sup> Авторы признательны В. В. Травникову, предоставившему в наше распоряжение опытные данные, приведенные на рис. 3, а.



В некоторых случаях наиболее существенным является именно сингулярный ПП. Мы убедились в этом на примере кристаллов CdS. Аналитическая часть ПП является малым возмущением в этих случаях, возможно, из-за ее экранирования заряженными поверхностными центрами.

Авторы выражают благодарность В. А. Киселеву, А. В. Селькину, В. В. Травникову за полезные обсуждения.

### Л и т е р а т у р а

- [1] Агранович В. М., Гинзбург В. Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М., 1979. 432 с.
- [2] Пекар С. И. Кристаллооптика и добавочные световые волны. Киев, 1982. 294 с.
- [3] Шехтман В. Л., Широкоброд О. Е. // Опт. и спектр. 1987. Т. 62. № 3. С. 698—704.
- [4] Шехтман В. Л., Широкоброд О. Е., Якубов А. Ф. // Опт. и спектр. 1987. Т. 63. № 6. С. 1371—1373.
- [5] Бете Г., Моррисон Ф. Элементарная теория ядра. М., 1958. 356 с.
- [6] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1974. 752 с.
- [7] Agranovich V. M., Yudson V. I. // Opt. Commun. 1973. V. 7. N 2. P. 121—124.
- [8] Сугаков В. И. // ФТТ. 1963. Т. 5. № 8. С. 2207—2212.
- [9] Киселев В. А. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 4. С. 1191—1195.
- [10] Киселев В. А., Новиков Б. В., Чередниченко А. Е. Экситонная спектроскопия приповерхностной области полупроводников. Л., 1987. 161 с.
- [11] Травников В. В. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 40. № 7. С. 278—280; 1985. Т. 42. № 9. С. 357—360.
- [12] Травников В. В. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1988. Т. 52. № 4. С. 758.
- [13] Hopfield J. J., Thomas D. G. // Phys. Rev. 1963. V. 132. N 2. P. 563—572.
- [14] Пермогоров С. А., Травников В. В., Селькин А. В. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 12. С. 3642—3649.
- [15] Гросс Е. Ф., Пермогоров С. А., Резницкий А. Н., Усаров Е. Н. // Проблемы физики соединений  $A^{IV}B^{VI}$ . Вильнюс, 1972. Т. 1. С. 38—42.
- [16] Константинов О. В., Сайфулаев Ш. Р. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 6. С. 1745—1751.
- [17] Ахмедпев Н. Н., Яцышев В. В. // ФТТ. 1976. Т. 18. № 6. С. 1679—1751.
- [18] Akhmediev N. N., Yatsyshen V. V. // Sol. St. Commun. 1978. V. 27. N 4. P. 357—361.

Поступило в Редакцию  
30 июня 1988 г.