

# ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ТА ТЕОРЕТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ

УДК 537.311.33

О.А. Бурій, О.О. Данилевич

Національний університет "Львівська політехніка",  
кафедра лазерної техніки і оптоелектронних систем

## РОЗРАХУНОК ЕКСИТОННИХ СТАНІВ У КРИСТАЛАХ ІЗ ФІВАЗІВСЬКИМ ЗАКОНОМ ДИСПЕРСІЇ НОСІЇВ ЗАРЯДІВ

О.А. Buryy, O.O. Danilevich

National university "Lvivska Polytechnica"

## THE EXITONS STATES CALCULATIONS FOR THE CRYSTALS WITH THE CHARGE CARRIERS FIVAS DISPERSION LAW

© Бурій О.А., Данилевич О.О., 2001

Розглянуто екситонні стани у шаруватому напівпровіднику, електронний та дірковий спектри якого описуються законами дисперсії Фіваза. Показано, що це завдання зводиться до розв'язання диференціального рівняння, яке містить операторні ланцюгові дроби. Розглянуто часткові випадки цього рівняння.

Exiton states are considered for the layer semiconductor with Fivas dispersion laws for electrons and holes. It is shown, that the problem of the exciton spectrum calculation for these crystals come to the differential equation with operators chain fractions. The special cases of this equation are also considered.

**Вступ.** Розрахунок спектра екситонів великого радіуса (екситонів Ван'є–Мотта) у шаруватих кристалах розглядається в багатьох теоретичних роботах, результати яких співставляються в [1]. Енергетичний спектр та хвильові функції екситона згідно з Ван'є [2], визначаються з рівняння

$$\left[ \varepsilon_c \left( -i\vec{\nabla} + \frac{\vec{K}}{2} \right) - \varepsilon_v \left( -i\vec{\nabla} - \frac{\vec{K}}{2} \right) - \frac{e^2}{\sqrt{\varepsilon_{\perp}\varepsilon_{\parallel}\beta_{\perp}^2 + \varepsilon_{\perp}^2\beta_{\parallel}^2}} \right] U(\vec{\beta}) = EU(\vec{\beta}), \quad (1)$$

де  $U(\vec{\beta})$  та  $E$  – хвильова функція та енергія екситона;  $\varepsilon_c(\vec{p})$ ,  $\varepsilon_v(\vec{p})$  – закони дисперсії електронів та дірок;  $\vec{K}$  – квазіхвильовий вектор екситона;  $\beta_{\perp}^2 = \beta_x^2 + \beta_y^2$ ,  $\varepsilon_{\perp}$ ,  $\varepsilon_{\parallel}$  – значення діелектричної проникності в площині шарів та в перпендикулярному до неї напрямку.

За умови параболічності електронного та діркового спектрів рівняння (1) зводиться до рівняння, аналогічного тому, яке описує стани однозарядних донорів в одновісних кристалах:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}} \left( \frac{\partial^2}{\partial \beta_x^2} + \frac{\partial^2}{\partial \beta_y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial \beta_{\parallel}^2} - \frac{e^2}{\sqrt{\varepsilon_{\perp}\varepsilon_{\parallel}\beta_{\perp}^2 + \varepsilon_{\perp}^2\beta_{\parallel}^2}} \right] U(\vec{\beta}) = EU(\vec{\beta}), \quad (2)$$

де  $\mu_{\perp}$ ,  $\mu_{\parallel}$  – зведені ефективні маси екситона в площині шару та у перпендикулярному до неї напрямку,  $\frac{1}{\mu_{\perp}} = \frac{1}{m_{c\perp}^*} + \frac{1}{m_{v\perp}^*}$ ,  $\frac{1}{\mu_{\parallel}} = \frac{1}{m_{c\parallel}^*} + \frac{1}{m_{v\parallel}^*}$ ,  $m_{c\perp}^*$ ,  $m_{v\perp}^*$  – відповідно ефективні маси електронів та дірок в площині шарів,  $m_{c\parallel}^*$ ,  $m_{v\parallel}^*$  – ефективні маси електронів та дірок в напрямку [001] (перпендикулярному до шару).

Анізотропію властивостей кристала характеризують параметром  $\gamma = \frac{\varepsilon_{\perp} \mu_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel} \mu_{\parallel}}$ . При  $\gamma = 1$  спектр екситона є воднеподібним. За умови граничної анізотропії властивостей електронної підсистеми ( $\gamma = 0$ ) рівняння (2) має аналітичний розв'язок (двовимірний екситон), тоді як в загальному випадку розрахунок екситонного спектра вимагає застосування варіаційного методу або теорії збурень [1].

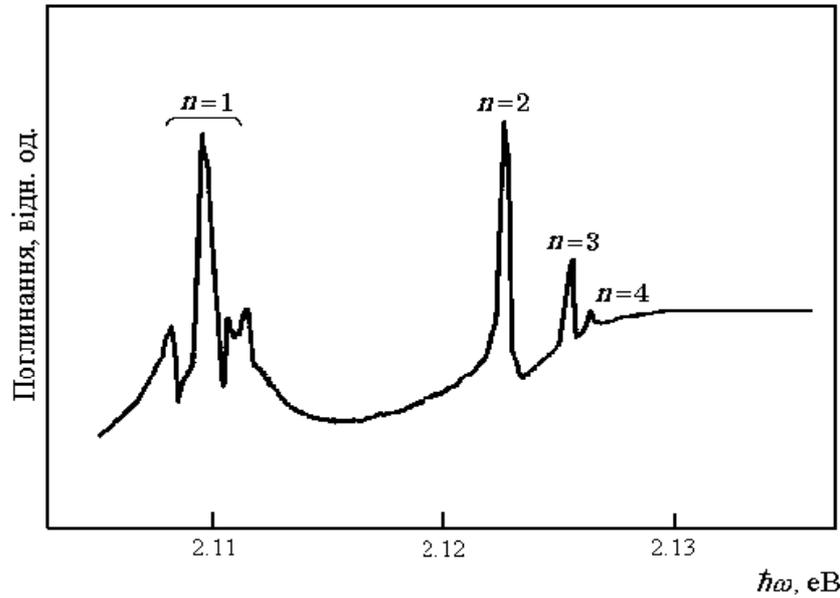


Рис. 1. Спектральна залежність коефіцієнта поглинання у GaSe (складна структура основного стану зумовлена дефектами упаковки сусідніх шарів [1])

Проте, хоча для шаруватих кристалів параметр анізотропії  $\gamma \neq 1$  (так, для GaSe найбільш розповсюдженою оцінкою є  $\gamma = 1,57$ ), експериментальні дослідження спектральної залежності коефіцієнта поглинання у шаруватих кристалах, зокрема у GaSe (рис. 1), вказують на те, що їх екситонний спектр може цілком задовільно описуватися воднеподібною моделлю. Одним з можливих пояснень такої неузгодженості теоретичних та експериментальних досліджень є наближений характер рівняння (1). Дійсно, при отриманні (1), вважалося, що енергетичний спектр електронів та дірок є анізотропним параболічним, тоді як більш коректним є використання модельних законів дисперсії, запропонованих Фівазом [3, 4]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_c(\vec{k}) &= E_c + \frac{\hbar^2}{2m_{c\perp}^*} (k_x^2 + k_y^2) + 2I_c(1 - \cos k_z d), \\ \varepsilon_v(\vec{k}) &= E_v - \frac{\hbar^2}{2m_{v\perp}^*} (k_x^2 + k_y^2) + 2I_v(1 - \cos k_z d), \end{aligned} \quad (3)$$

де  $I_c$ ,  $I_v$  – параметри шаруватості;  $d$  – стала ґратки вздовж нормалі до шарів.

Закони дисперсії (3) дають можливість описувати як закриті (при  $\varepsilon_{c,v} < 4I_{c,v}$ ), так і відкриті ( $\varepsilon_{c,v} > 4I_{c,v}$ ) за напрямком  $k_z$  ізоенергетичні поверхні. Характерною особливістю кристалів, спектри носіїв струму яких описуються фізавізькими залежностями, є те, що густина станів, починаючи з точки  $\varepsilon_{c,v} = 4I_{c,v}$  (точки переходу Ліфшиця), не залежить від енергії стану [4].

Підставляючи вирази (3) в (1), після перетворень можна отримати рівняння для екситона у шаруватому кристалі [5]:

$$\hat{A}F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel}) + (a+ib)F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} + d) + (a-ib)F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} - d) = \varepsilon F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel}), \quad (4)$$

$$\text{де } \hat{A} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}} \nabla_{\perp}^2 - \frac{e^2}{\sqrt{\varepsilon_{\perp}\varepsilon_{\parallel}\beta_{\perp}^2 + \varepsilon_{\perp}^2\beta_{\parallel}^2}}, \quad F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel}) = e^{-i\alpha K_{\perp}\beta_{\perp}} U(\vec{\beta}), \quad \alpha = \frac{1}{2} \frac{m_{c\perp}^* - m_{v\perp}^*}{m_{c\perp}^* + m_{v\perp}^*},$$

$$a = -(I_c + I_v) \cos \frac{K_z d}{2}, \quad b = -(I_c - I_v) \sin \frac{K_z d}{2},$$

$$\varepsilon = E - E_g - 2(I_c + I_v) - \frac{\hbar^2 K_{\perp}^2}{2(m_{c\perp}^* + m_{v\perp}^*)},$$

де  $E_g = E_c - E_v$  – ширина забороненої зони.

Рівняння (4) містить зміщення за аргументом функції  $F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel})$  на величину сталої ґратки (другий та третій доданки у лівій частині (4)), що істотно ускладнює його розв'язання.

У цій роботі аналізується рівняння (4), а також деякі його часткові випадки, при цьому розрахунки здійснювалися для кристала  $\varepsilon$ -GaSe з такими параметрами [1]:  $\varepsilon_{\perp} = 10,2$ ,  $\varepsilon_{\parallel} = 7,6$ ,  $d = 15,95 \text{ \AA}$ , стала ґратки в площині шару  $a = 3,755 \text{ \AA}$ ,  $\mu_{\perp} = 0,12m_0$ ,  $m_0$  – маса електрона,  $I_c = \frac{\hbar^2}{2m_{c\parallel}^*d^2} = 0,099 \text{ eV}$ ,  $I_v = \frac{\hbar^2}{2m_{v\parallel}^*d^2} = 0,027 \text{ eV}$ .

**Загальний аналіз рівняння.** Припустимо, що віддаль між електроном та діркою вздовж напрямку [001] не перевищує сталої ґратки, тобто  $F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} \pm md) = 0$ , якщо  $m > 0$ . За такої умови доданки із зміщеннями у рівнянні (4) дорівнюють нулю, і відповідно (4) зводиться до рівняння:

$$(\hat{A} - \varepsilon)F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel}) = 0. \quad (5)$$

Припустимо далі, що електрон та дірка розділені віддаллю, не більшою, ніж  $2d$ . Здійснюючи у (4) заміну змінних  $\beta_{\parallel} \rightarrow \beta_{\parallel} + d$  та враховуючи, що  $F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} + 2d) = 0$ , отримаємо:

$$\hat{A}_{+d}F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} + d) + (a-ib)F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel}) = \varepsilon F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} + d), \quad (6)$$

$$\text{де } \hat{A}_{+d} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}} \nabla_{\perp}^2 - \frac{e^2}{\sqrt{\varepsilon_{\perp}\varepsilon_{\parallel}\beta_{\perp}^2 + \varepsilon_{\perp}^2(\beta_{\parallel} + d)^2}}.$$

За допомогою заміни  $\beta_{\parallel} \rightarrow \beta_{\parallel} - d$  отримаємо аналогічне рівняння для  $F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} - d)$ :

$$\hat{A}_{-d}F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} - d) + (a+ib)F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel}) = \varepsilon F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} - d), \quad (7)$$

$$\text{де } \hat{A}_{-d} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}} \nabla_{\perp}^2 - \frac{e^2}{\sqrt{\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel} \beta_{\perp}^2 + \varepsilon_{\perp}^2 (\beta_{\parallel} - d)^2}}.$$

Рівняння (4), (6) та (7) утворюють систему, виключивши з якої функції із зміщеннями за аргументом, отримаємо:

$$\left\{ (\hat{A} - \varepsilon) + \frac{c^2}{\varepsilon - \hat{A}_{+d}} + \frac{c^2}{\varepsilon - \hat{A}_{-d}} \right\} F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel}) = 0, \quad (8)$$

де  $c^2 = a^2 + b^2 = I_c^2 + I_v^2 + 2I_c I_v \cos(K_z d)$ ,  $\frac{1}{\varepsilon - \hat{A}_{\pm d}} \equiv (\varepsilon - \hat{A}_{\pm d})^{-1}$  – оператор, зворотний до  $\varepsilon - \hat{A}_{\pm d}$ .

Послідовно приймаючи далі, що  $m=2, 3, \dots$  та узагальнюючи за індукцією отримані результати, можна довести, що (4) подається у вигляді диференціального рівняння без зміщень, яке містить нескінченні ланцюгові операторні дроби:

$$\left\{ \hat{\varepsilon}_0 + \frac{c^2}{\hat{\varepsilon}_{+1} - \frac{c^2}{\hat{\varepsilon}_{+2} - \frac{c^2}{\hat{\varepsilon}_{+3} - \dots}}} + \frac{c^2}{\hat{\varepsilon}_{-1} - \frac{c^2}{\hat{\varepsilon}_{-2} - \frac{c^2}{\hat{\varepsilon}_{-3} - \dots}}} \right\} F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel}) = 0, \quad (9)$$

де позначено  $\hat{\varepsilon}_{\pm n} = \varepsilon - \hat{A}_{\pm nd}$ .

Обриваючи дроби у (9) на першому, другому тощо кроках, розв'язуючи отримані рівняння та аналізуючи збіжність одержаної послідовності розв'язків, можна визначити хвильові функції та енергію екситона у шаруватому кристалі.

**1. Часткові випадки.** Розглянемо випадок, коли віддаль між електроном та діркою у площині шару є набагато більшою за віддаль між ними у напрямку [001],  $\beta_{\perp} \gg \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel}} \beta_{\parallel}$ . Знехтувавши за такої умови доданком із  $\beta_{\parallel}^2$  у виразі, що описує кулонівську взаємодію між електроном та діркою, та подавши функцію  $F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel})$  у вигляді добутку  $F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel}) = F_{\perp}(\beta_{\perp}) \Omega(\beta_{\parallel})$ , рівняння (4) можна розділити на два:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}} \nabla_{\perp}^2 - \frac{e^2}{\sqrt{\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel} \beta_{\perp}}} \right\} F_{\perp}(\beta_{\perp}) = \varepsilon_1 F_{\perp}(\beta_{\perp}) \quad (10)$$

та

$$(a + ib) \Omega(\beta_z + d) + (a - ib) \Omega(\beta_z - d) = \varepsilon_2 \Omega(\beta_z), \quad (11)$$

де  $\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ .

Рівняння (11) за допомогою підходу, аналогічного до використаного при отриманні (9), зводиться до алгебраїчного рівняння для  $\varepsilon_2$ , яке містить ланцюговий дріб:

$$\varepsilon_2 = \frac{2c^2}{\varepsilon_2 - \frac{c^2}{\varepsilon_2 - \frac{c^2}{\varepsilon_2 - \dots}}}. \quad (12)$$

За теоремою Ворпітського [6], дріб у правій частині (12) є збіжним, якщо  $\varepsilon_2^2 \geq 4c^2$ . Позначивши значення цього дробу через  $t$ , одержимо:

$$t = \frac{c^2}{\varepsilon_2 - \frac{c^2}{\varepsilon_2 - t}}, \quad (13)$$

звідки  $t_{1,2} = \frac{\varepsilon_2 \pm \sqrt{\varepsilon_2^2 - 4c^2}}{2}$ , і, оскільки  $\frac{\varepsilon_2}{2} = t$ , то отримаємо розв'язок (12):

$$\varepsilon_2 = \pm 2c = \pm 2\sqrt{I_c^2 + I_v^2 + 2I_c I_v \cos(K_z d)} \quad (14)$$

(порівняння з результатами експериментальних досліджень екситонного спектра GaSe [1] вказує на те, що перед коренем у цьому виразі необхідно обрати нижній знак).

Рівняння (10) за виглядом збігається з рівнянням, отриманим в наближенні двовимірного кристала [7]. Його розв'язки виражаються через вироджену гіпергеометричну функцію, а величина  $\varepsilon_1$  приймає дискретний спектр значень:

$$\varepsilon_1 = -\frac{R}{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2}, \quad n=0, 1, 2, \dots, \quad (15)$$

де  $R = \frac{\mu_{\perp} e^4}{2\hbar^2 \varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel}}$  – ефективний Рідберг; для GaSe  $R=0,021 \text{ eV}$ .

Враховуючи (14), (15), для енергії екситона  $E$  отримаємо:

$$E = \varepsilon + E_g + 2(I_c + I_v) + \frac{\hbar^2 K_{\perp}^2}{2(m_{c\perp}^* + m_{v\perp}^*)} = E_0 + E(\vec{K}), \quad (16)$$

де  $E_0$  – енергія утворення екситона,

$$E_0 = E_g - \frac{R}{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2}, \quad (17)$$

де  $E(\vec{K})$  – закон дисперсії екситонів,

$$E(\vec{K}) = \frac{\hbar^2 K_{\perp}^2}{2(m_{c\perp}^* + m_{v\perp}^*)} + 2\left\{I_c + I_v - \sqrt{I_c^2 + I_v^2 + 2I_c I_v \cos(K_z d)}\right\}. \quad (18)$$

Подавши корінь у (18) як

$$\sqrt{I_c^2 + I_v^2 + 2I_c I_v \cos(K_z d)} = (I_c + I_v) \sqrt{1 - 2 \frac{I_c I_v}{(I_c + I_v)^2} (1 - \cos(K_z d))}$$

та скориставшись відомим співвідношенням  $\sqrt{1-2x} \approx 1-x$ , якщо  $x^2 \ll 1$  (для GaSe  $\frac{I_c I_v}{(I_c + I_v)^2} = 0,168$ ), отримаємо:

$$E(\vec{K}) = \frac{\hbar^2 K_{\perp}^2}{2(m_{c\perp}^* + m_{v\perp}^*)} + 2 \frac{I_c I_v}{I_c + I_v} (1 - \cos(K_z d)). \quad (19)$$

Таким чином, в прийнятих нами наближеннях енергетичний спектр екситона описується фізичною залежністю із параметром шаруватості  $I_e = \frac{I_c I_v}{I_c + I_v}$ . Як і у випадку законів дисперсії електронів та дірок (3), зміні топології ізоенергетичної поверхні відповідає значення енергії  $E = 4I_e$ ; проте, аналіз більш загального виразу для енергії екситона вказує на складнішу структуру ізоенергетичних поверхонь, ніж це має місце у випадку фізичної залежності. Дійсно, поклавши в (18)  $K_{\perp} = 0$ , можна отримати

$$\cos(K_z d) = \frac{(E/2 - I_c + I_v)^2 - I_c^2 - I_v^2}{2I_c I_v}. \quad (20)$$

Відкрита ізоенергетична поверхня реалізується за умови  $\left| \frac{(E/2 - I_c + I_v)^2 - I_c^2 - I_v^2}{2I_c I_v} \right| > 1$ .

Розкриваючи модуль, знаходимо, що ця умова виконується в областях  $4I_v < E < 4I_c$  та  $E > 4(I_v + I_c)$  (якщо для параметрів шаруватості електронного та діркового спектра виконуватиметься співвідношення  $I_c < I_v$ , то у першій із записаних нерівностей потрібно змінити знаки; надалі вважатимемо, що  $I_c > I_v$ , як це має місце, зокрема, для GaSe). Відповідно при  $E < 4I_v$  ізоенергетичні поверхні будуть закритими. В інтервалі  $4I_c < E < 4(I_v + I_c)$  у межах першої зони Бріллюена існує три різні поверхні, що відповідають одному й тому самому значенню енергії: одна відкрита з центром всередині зони та дві закриті з центрами у точках  $K_z = \pm \pi/d$ ; при переході до області  $E > 4(I_v + I_c)$  ці поверхні розкриваються. Усі чотири можливі випадки показано на рис. 2.

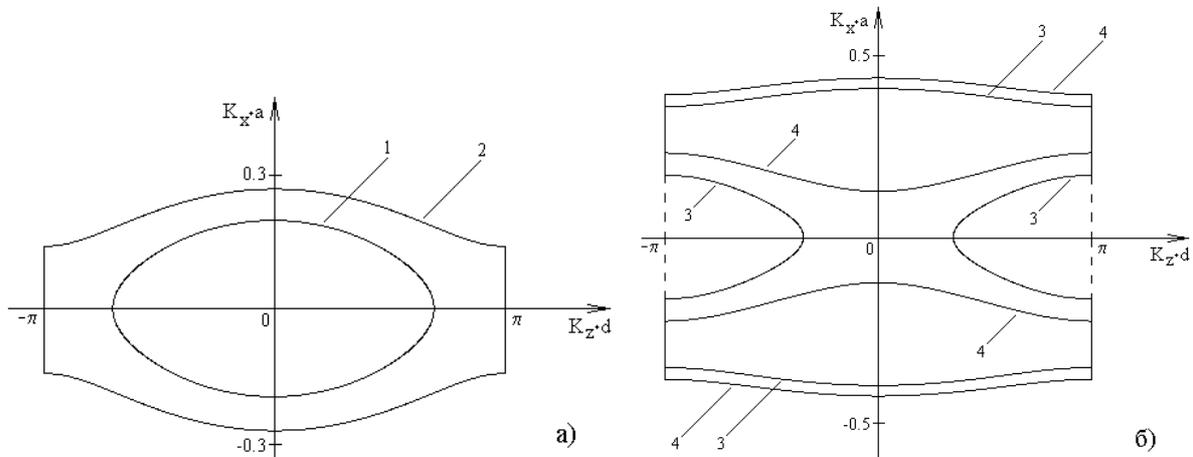


Рис. 2. Перерізи екситонних ізоенергетичних поверхонь GaSe площиною  $K_y=0,1$ :

–  $E=0,08$  eV (область  $E < 4I_v$ ); 2 –  $E=0,15$  eV (область  $4I_v < E < 4I_c$ );

3 –  $E=0,48$  eV (область  $4I_c < E < 4(I_v + I_c)$ ); 4 –  $E=0,55$  eV (область  $E > 4(I_v + I_c)$ )

Для екситона із нульовою складовою швидкості вздовж [001] з (14) отримуємо:

$$E = E_g - \frac{R}{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2} + \frac{\hbar^2 K_{\perp}^2}{2(m_{c\perp}^* + m_{v\perp}^*)}. \quad (21)$$

Співвідношення (21) визначає енергію двовимірного екситона [7].

Вираз для енергії утворення екситона (15) збігається з отриманим у двовимірній моделі. Необхідно зазначити, що енергія екситона, розрахована за (15), тільки якісно узгоджується із результатами експерименту [1]. Так, для перших чотирьох рівнів в моделі двовимірного екситона відповідно отримуємо значення енергій  $E=2,045, 2,120, 2,126, 2,128$  eV (у воднеподібній моделі ті самі величини дорівнюють  $2,108, 2,124, 2,127, 2,128$  eV). Порівняння цих значень із абцисами максимумів на рис. 1 вказує на те, що для двох нижніх рівнів результати розрахунку в моделі двовимірного екситона тільки якісно узгоджуються з експериментальними даними. Це пов'язано, очевидно, із наближенням, прийнятим при одержанні рівняння (10).

2. Кращу узгодженість з експериментальними даними можна отримати, якщо розглянути екситон, віддаль між електроном та діркою у якому є меншою за сталу ґратки вздовж нормалі до шарів, тобто розв'язати рівняння (9) у нульовому наближенні. За такої умови, перейшовши у (9) до циліндричних координат, отримуємо:

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \beta_{\perp}^2} - \frac{1}{\beta_{\perp}} \frac{\partial}{\partial \beta_{\perp}} - \frac{1}{\beta_{\perp}^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{2}{\sqrt{\beta_{\perp}^2 + z^2}} - \varepsilon \right\} F(\beta_{\perp}, \varphi, z) = 0, \quad (22)$$

де  $\varphi$  – полярний кут,  $z = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel}}} \beta_{\parallel}$ , а за одиниці вимірювання енергії та довжини прийняті

ефективний Рідберг та борівський радіус екситона  $a_0 = \frac{\hbar^2 \sqrt{\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel}}}{\mu_{\perp} e^2}$  (для GaSe  $a_0 = 33 \text{ \AA}$ ).

Положення нижнього екситонного рівня можна визначити з (22) за допомогою прямого варіаційного методу Рітца, прийнявши як варіаційну функцію

$$F(\beta_{\perp}, \varphi, z) \equiv F(\beta_{\perp}, z) = A \exp\left\{-\alpha(\beta_{\perp}^2 + z^2)^{1/2}\right\}, \quad (23)$$

де  $\alpha$  – варіаційний параметр;  $A$  – коефіцієнт нормування.

При  $\alpha=2$  ця функція є точним розв'язком рівняння (22) для  $z=0$ .

Вважатимемо, що електрон та дірка локалізовані в шарі товщиною  $h$  ( $h \leq 2 \cdot d$ ). За такої умови для коефіцієнта нормування та значення енергії основного стану отримуємо:

$$A = \sqrt{\frac{2\alpha^3}{\pi(2 - 2 \exp(-\alpha h^*) - \alpha h^* \exp(-\alpha h^*))}}; \quad (24)$$

$$E(\alpha, h^*) = \alpha^3 \frac{\left(\frac{4}{3} - 2\right) \left(e^{-\alpha h^*} - 1\right) - \alpha h^* e^{-\alpha h^*} + \frac{1}{3} (\alpha h^*)^3 \text{Ei}(\alpha h^*) - \frac{1}{3} (\alpha h^*)^2 e^{\alpha h^*} + \frac{2}{3} \alpha h^* e^{\alpha h^*} - \frac{2}{3} \alpha h^*}{2 - 2e^{-\alpha h^*} - \alpha h^* e^{-\alpha h^*}}. \quad (25)$$

Тут  $h^* = \sqrt{\frac{\epsilon_{\perp}}{\epsilon_{\parallel}}}h$ ,  $Ei(\alpha h^*) = \int_{-\infty}^{\alpha h^*} \frac{\exp(t)}{t} dt = C + \ln|\alpha h^*| + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha h^*)^n}{n \cdot n!}$  – інтегральна експонента;  $C$  – стала Ейлера,  $C=0,577216$ .

З умови мінімуму  $E(\alpha)$  можна визначити енергію нижнього рівня екситона при заданій товщині області локалізації  $h$ . Відповідну залежність  $E=E(h)$  показано на рис. 3. Потрібно зазначити, що подібна задача розв'язувалася в [8], де величина  $z$  розглядалася як параметр, а не як змінна інтегрування. Це було зумовлено тим, що інтеграл  $\int F^* \hat{A} F d\vec{r}$  незбігається, якщо межами інтегрування за  $z$  прийняти  $\pm\infty$ . В розрахунках цієї роботи межі інтегрування безпосередньо визначаються прийнятою умовою  $F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} \pm d) = 0$  (область локалізації є меншою, ніж  $2d$ ). Наші результати в цілому узгоджуються з результатами [8].

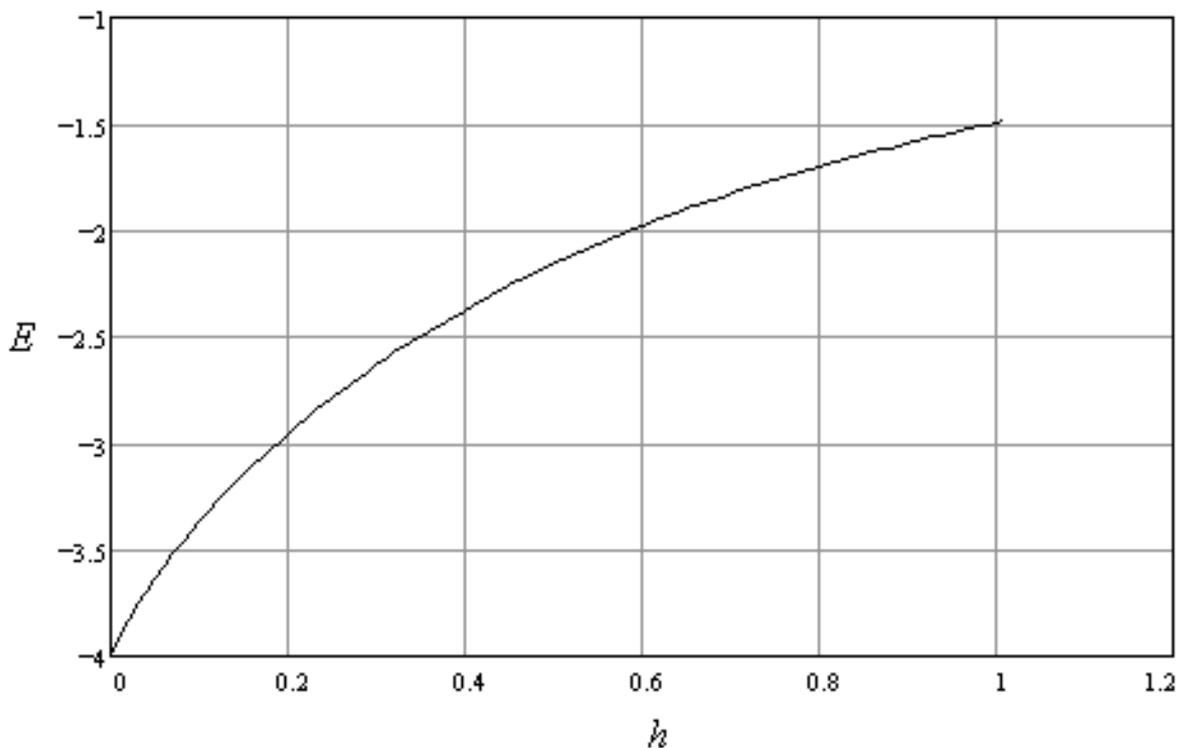


Рис. 3. Залежність енергії найнижчого екситонного рівня від товщини області локалізації  $h$

Як видно з рис. 3, при збільшенні товщини області локалізації енергія нижнього рівня зростає, при цьому при  $h=0$ ,  $\epsilon=-4$ , що відповідає розв'язку рівняння (10) для двовимірного кристала. Проте, оскільки в шаруватих кристалах ефективний борівський радіус є досить великий (для GaSe він є приблизно вдвічі більший за період ґратки в напрямку нормалі до шарів), отриманий розв'язок є коректним тільки для вузьких областей локалізації (інакше умова  $F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} \pm d) = 0$  не виконуватиметься). Для одержання розв'язків, коректних при будь-яких достатньо великих віддальх між електроном та діркою, потрібно розв'язати рівняння (9) без накладання обмежень за  $\beta_{\parallel}$ .

**Висновки.** У цій роботі розглянуто рівняння, що описує екситонні стани у кристалі, спектри носіїв струму якого визначаються фізичними залежностями. Характерною особ-

лівістю цього рівняння є наявність зміщень за аргументом хвильової функції. Показано, що таке рівняння може бути зведене до рівняння без зміщень, яке містить ланцюгові операторні дроби. Перехід до такого подання вихідного диференціального рівняння виправданий тим, що збіжність ланцюгових дробів є, як правило, кращою за збіжність відповідних рядів [9] (у протилежному випадку зручніше для аналізу було б розкласти функції  $F(\beta_{\perp}, \beta_{\parallel} \pm d)$  у (4) до тейлорівського ряду за зміщеннями).

Проаналізовано два часткові випадки цього рівняння. За умови  $\beta_{\perp} \gg \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel}} \beta_{\parallel}$  змінні у цьому рівнянні розділяються, при цьому одне з отриманих в результаті такого розділення рівнянь визначатиме набір енергетичних рівнів екситона (воно є аналогічним до рівняння, отриманого у двовимірній моделі екситона), а друге – його закон дисперсії. Одержаний у цій роботі закон дисперсії екситона, так само як і закон дисперсії Фіваза, дає змогу описувати як закриті, так і відкриті за  $K_z$  ізоенергетичні поверхні. Проте, на відміну від фівазівського, отриманий закон дисперсії вказує на складнішу структуру ізоенергетичних поверхонь, яка має місце за достатньо великих значень енергії екситона. Цей закон дисперсії екситонів може бути використаний, зокрема, для розрахунку коефіцієнта поглинання та показника заломлення кристала [10].

За допомогою варіаційного методу в роботі розглянуто нульове наближення для рівняння з ланцюговими операторними дробами. На прикладі нижнього екситонного рівня показано, що врахування можливості знаходження електрона та дірки в шарі певної скінченної товщини за напрямком [001], робить результати теоретичного аналізу більш відповідними даним експерименту.

1. Беленький Г.Л., Стопачинский В.Б. // УФН, 1983. – 140. – С. 233. 2. Нокс Р. Теория экситонов. – М., 1966. 3. Fivas R., Mosser E. // Phys. Rev., 1964. – 136, 3A. – P. 833. 4. Fivas R. // J. Phys. and Chem. Solids., 1967. – 28, 4. – P. 839. 5. Данилевич-Товстюк К.К., Лукіянець Б.А. // ЖЭТФ, 1981. – 48, №3. – С. 428. 6. Jacobsen L., Thron W.J., Waadeland H. // Analytic theory of continued fractions III, Springer-Verlag., 1989. – P. 25–47. 7. Shinada M., Sugano S. // J. Phys. Soc. Japan, 1966. – 21, – P.1936. 8. Зинец О.С., Сугаков В.И., Сунпрун А.Д. // ФТП, 1976. – 10, №4. – С. 712. 9. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. – М., 1963. 10. Григорчук Н.И. Форма экситонных полос поглощения и дисперсии света для кристаллов типа CdS. – К., 1976.