ЭКСИТОННЫЙ ПЕРЕХОД МОТТА В КРИСТАЛЛАХ CdTe

EXCITONIC MOTT TRANSITION IN CdTe SINGLE CRYSTALS

Александр КЛЮКАНОВ, ORCID: 0000-0002-4175-5261
Денис НИКА, ORCID: 0000-0002-3082-3118
Александр ВАРЗАРЬ, ORCID: 0000-0002-3391-6723
Серджиу ВАТАВУ, ORCID: 0000-0001-7328-126X
Молдавский государственный университет

CZU: 530.145 + 531.19

e-mail: alexandr.cliucanov@usm.md
e-mail: denis.nica@usm.md
e-mail: alexandru.varzari@usm.md
e-mail: sergiu.vatavu@usm.md

Квантовомеханическое описание системы многих тел на языке чистых состояний не редко противопоставляют статистическому, считая его менее подробным. Однако, как известно, статистическое описание точнее определяет многочастичные эффекты по сравнению с квантовомеханическим. Экспериментальные и теоретические величины необходимо сравнивать в рамках одного и того же подхода. Если в эксперименте измеряется спектр, который описывается продольной диэлектрической функцией $\varepsilon(q,\omega)$ (спектр потерь энергии, спектр рассеяния, поглощения и излучения света), то измеряемые частоты переходов необходимо сравнивать с соответствующими частотами ω_{lm}, ω_{qj}, вычисленными в полюсах именно продольной диэлектрической функции. Квантовомеханический спектр квазичастиц можно определить полюсами одночастичной полевой функции Грина (Бонч-Бруевич), но температурная зависимость таких величин, как ширина запрещенной зоны $E_g(T)$, эффективная масса квазичастиц $m*(T)$, частота фононов $\omega_{qj}(T)$, а также спектр энергий и экранировка может быть найдена только в рамках расчета температурных функций Грина [1-8]. В работе рассмотрена статистическая двухчастичная проблема [1-8] связанных состояний квазичастиц с учетом корреляционных и температурных эффектов поляризации и экранировки из первых принципов в рамках метода температурных функций Грина, уравнений движения Гейзенберга и инфинитиземальных возмущений [3] и проведено сравнение с экспериментом по люминесценции экситонов в теллуриде кадмия. Уравнение Ванье относительного движения экситона в импульсном представлении имеет вид:

$$(\varepsilon_l(k_l)-\varepsilon_m(k_m)-\hbar\omega)\varphi_{lm}+\sum_q V_q e_{ll'}^{-iqr}\left(n_{l'}(\omega_{ll'})-n_{m'}(\omega_{mm'})\right)\varphi_{l'm'}e_{m'm}^{-iqr}=0, \varepsilon_l(k_l)=h_{ll}^C-\sum_m\frac{|h_{lm}^C|^2}{h_{mm}^C-\varepsilon_l(k_l)} \quad (1)$$

Здесь $\varepsilon_l(k_l)$- решение уравнений Хартри-Фока, а $\hbar\omega$ - решение уравнений (1) с учетом связанных состояний квазичастиц. Задача сводится к совместной диа-

гонализации вершинной функции Γ_{lm} и матрицы Хартри-Фока h_{lm}^{c}. а также определения волновых функций относительного движения квазичастиц φ_{lm}. Уравнение экситона в общем виде (1) может быть использовано для численного решения задачи об экситонном спектре энергий произвольной системы электронов полупроводника в зависимости от уровня накачки, температуры, экранировки, взаимодействия с фононами и размерного квантования [3]. В рамках вариационного приближения показано, что энергия связи экситона максимальна при значениях экситонного радиуса, который определяется комплексным уравнением

$$a(x)=\frac{2x(2-x)}{x^3}-\frac{2^{1/3}(1+i\sqrt{3})}{3^{2/3}x^3}b(x)-\frac{(1-i\sqrt{3})(144x^2-120x^3)}{12\cdot 6^{1/3}x^3b(x)},b(x)=\Big(36x^3-45x^4+9x^5+\sqrt{3(27x^{10}-20x^9-9x^8)}\Big)^{1/3},x=\kappa_B \quad (2)$$

Величина радиуса экситона зависит от параметра $\kappa_B=a_B/\lambda_D$. Этот параметр определяет и величину частоты экситонного перехода. Как следует из формулы (2) при $\kappa_B\approx 1$ радиус состояния резко возрастает. В этой же области $\kappa_B>1.057$ радиус состояния становится комплексной величиной. Так при $\kappa_B=1.06, a=2.9+0.3i$ длина экранировки меньше боровского радиуса, а радиус экситона в три раза больше. Определим моттовский переход по точке $\kappa_B=1.057$, в которой радиус состояния экситона становится комплексной величиной и принимает значение $a=2.927+0.141i$. В этой точке концентрация плазмы равна $0.638\cdot 10^{-16}n/T=1.057^2, n_c=T\cdot 1.75\cdot 10^{16}cm^{-3}$. Критерий Мотта [9] $a_B n_c^{1/3}\cong 0.25$ дает $n_c=6.4\cdot 10^{17}cm^{-3}$, что совпадает с нашей оценкой при температуре $T=36.6K$. Энергия связи экситона $E_1(\kappa_B)=\frac{2}{a(\kappa_B)}(1+\kappa_B a(\kappa_B)/2)^{-2}-\frac{1}{a(\kappa_B)^2}$ обращается в ноль в точке $\kappa_B=1, a(\kappa_B)=2$, что практически не меняет значение концентрации плазмы в точке моттовского перехода $n_c=T\cdot 1.57\cdot 10^{16}cm^{-3}$. При температуре $T=4.7K$ находим $n_c=7.38\cdot 10^{16}cm^{-3}$. С учетом заселенности зон энергии $f<1$ ионизация экситона происходит при концентрации в два раза меньшей $n_c=3.6\cdot 10^{16}cm^{-3}$. Отметим, что экранировка обменного взаимодействия является динамической, но в общем случае зависит не только от qq, как было использовано здесь, но и от частоты перехода $\omega_{1m}\omega_{1m}$. При низких концентрациях и высоких температурах $\frac{2}{a}(1+a\kappa_B/2)^{-2}=\frac{2}{a}-2\kappa_B+\frac{3}{2}a\kappa_B^2$. В этом приближении сдвиги $2\kappa_B$ энергии связи и E_g в результате экранировки погашаются в частоте перехода не полностью. При фиксированной температуре частота перехода уменьшается с ростом концентрации зонной плазмы. С ростом заселенно-

сти энерегия связи экситона уменьшается, однако, учет заселенности зон энергии пренебрежим в области невырожденного состояния полупроводника. При постоянной величине E_g это должно привести к увеличению энергии кванта излучения $\hbar\omega$ при моттовском переходе. Но и ширина запрещенной зоны также падает с ростом концентрации плазмы зонных носителей заряда. В частоте перехода эти изменения частично компенсируются [3,6,7]. Численный расчет показывает, что с ростом концентрации зонной плазмы при постоянной температуре частота перехода уменьшается В случае термодинамического равновесия температура плазмы выше температуры кристалла, но лазерная накачка может привести к повышению температуры и самого кристалла. В результате повышения температуры и повышения концентрации плазмы их отношение также частично компенсируются в κ_B, так как $\kappa_B^2 \propto n/T$. Ширина запрещенной зоны также с температурой падает. Все эти механизмы, несмотря на частичное погашение приводят к пренебрежимому уменьшению частоты перехода. Эксперимент показывает, что при низких уровнях возбуждения энергия фотона не зависит от уровня возбуждения. Расчеты находятся в согласии с экспериментом, так как красный сдвиг пренебрежимо мал (порядка десятой доли meV). Однако в области максимального уровня возбуждения наблюдается синий сдвиг (порядка нескольких meV). Рост частоты перехода с ростом уровня возбуждения обусловлен моттовским переходом экситонного газа в электрон-дырочную плазму, при котором происходит и переход от экситонного механизма излучательной рекомбинации к междузонной, сопровождающийся синим сдвигом энергии фотона от значения $\hbar\omega = E_g - E_1(a)$ к величине энергии $\hbar\omega = E_g + k_B T_e/2$ в соответствии с экспериментом. Температуру плазмы можно оценить по величине синего сдвига. Показано, что представленные в работе результаты находятся в согласии с экспериментом и со специальной литературой

***Литература*:**

1. ЛИФШИЦ Е.М., ПИТАЕВСКИЙ Л.П. Статистическая физика. Часть II теория конденсированного состояния. Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., Москва. 1978, vol. IX, 448 p.
2. КЛЮКАНОВ, А., НИКА, Д., ВАТАВУ, С. *Квазичастицы в физике конденсированного состояния.* În: Conferința științifică națională cu participare internațională „Integrare prin cercetare și inovare”, USM, 10-11 noiembrie 2020. Rezumate ale comunicărilor. Ştiinţe ale naturii şi exacte. USM, 2020, pp.267-271.
3. КЛЮКАНОВ, А., НИКА, Д. *Намагниченность насыщения и теплоемкость ферромагнетика*. În: Studia Universitatis Moldaviae. Seria Științe Exacte și Economice, 2016, nr.7 (97), pp.156-161.
4. KANAZAWA, H., MISAWA, S., FUJITA, E. *Green Function Method for Electron Gas. II: Dispersion Relation of Plasmons*. În: Progress of Theoretical Physics, 1960, vol.23 (3), pp.426-432, doi.org/10.1143/PTP.23.426

5. PLATZMAN, P.M., WOLFF, P.A. *Waves and Interactions in Solid State Plasmas*. Academic Press, New York, 1973, 304 pp., ISBN 10: 0126077738 / ISBN 13: 9780126077735
6. ZIMMERMANN, R., KILIMANN, K., KRAEFT, W. D., KREMP, D., RÖPKE G. *Dynamical screening and self-energy of excitons in the electron-hole plasma*. În: Phys. Stat. Sol. B, 1978, vol. 90, nr.1, p.175-187, doi.org/10.1002/pssb.2220900119.
7. MANZKE, G., SEMKAT, D., STOLZ, H. *Mott transition of excitons in GaAs-GaAlAs quantum wells*. În: New Journal of Physics, 2012, vol.14, 095002, doi.org/10.1088/1367-2630/14/9/095002
8. KLYUKANOV, A.A., VARZARI, A., VATAVU, S. *Quasiparticle bound states in the solid state physics: a CdTe case study*. In: European Materials Research Society (EMRS-2022) Spring Meeting Symposium K, K.11.8: Thin film chalcogenide photovoltaic materials, May 30- June 03, 2022, Strasbourg, France (virtual conference)
9. MOTT, N.F. *The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals*. În: Proceedings of the Physical Society, 1949, Series A. vol. 62 (7), pp.416–422.

Данная работа выполнена при поддержке грантов PM: 20.80009.5007.12 и 20.80009.5007.02.