

СПЕКТР РЕНТГЕНОВСКОГО ЭКСИТОНА В СИЛЬНОМ
МАГНИТНОМ ПОЛЕ

С. К. АВЕТИСЯН, К. И. КАРАХАНИЯН, Э. М. КАЗАРЯН, П. А. БЕЗИРГАНЯН

Теоретически изучен вопрос о влиянии «подвижности» дырки на энергетический спектр и волновые функции рентгеновского экситона в сильном магнитном поле. Показано, что волновые функции не обладают определенной четностью и переходы разрешены в каждое из состояний дублетов.

Интерес к теоретическим исследованиям поведения экситона в сильном магнитном поле в определенной степени обусловлен необходимостью детальной интерпретации спектров магнитопоглощения в полупроводниках [1, 2]. Уже в первых работах, посвященных этому вопросу, высказывалось предположение относительно необходимости учета экситонных состояний, связанных с диамагнитными подзонами Ландау, при исследовании межзонного магнитооптического поглощения [3]. Вычисление энергии связи оптических экситонов (а также более сложных электронно-дырочных комплексов [4, 5]) в сильном магнитном поле представляет также самостоятельный научный интерес в связи с возможностью получения необходимых сильных магнитных полей в лабораторных условиях. Действительно, для решения указанных задач в известном адиабатическом приближении условие сильного поля для многих полупроводников выполняется уже при $H \geq 10^5$ э.

С другой стороны, экспериментально было установлено, что экситонные состояния играют существенную роль также при формировании края рентгеновского поглощения [7]. При этом, как показано в работах [8, 9], одной из существенных особенностей рентгеновского экситона в отличие от оптического является относительная «подвижность» дырки. Учет последнего обстоятельства приводит к появлению в гамильтониане электронно-дырочного взаимодействия дополнительного члена, не обладающего сферической симметрией. В связи с этим представляет интерес рассмотрение поведения рентгеновского экситона в сильном магнитном поле с учетом вышеуказанной особенности.

Пользуясь результатами [8, 10], уравнение Шредингера для рентгеновского экситона в сильном магнитном поле в цилиндрической системе координат можно представить в следующем виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{i\omega_H}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{\mu\omega_H^2}{8} \rho^2 \psi + V(\rho, \varphi, z) \psi = E\psi, \quad (1)$$

* В недавно появившейся работе [6] вариационным методом вычислена энергия основного состояния оптического экситона в промежуточных полях.

где V — потенциал взаимодействия электрона и дырки с учетом «подвижности» дырки для K -края [8]:

$$V(\rho, \varphi, z) = -\frac{e^2}{\varepsilon(\rho^2 + z^2)^{1/2}} - \frac{A_{n'}}{(\rho^2 + z^2)^{3/2}} (\sqrt{2} \rho \cos \varphi + z), \quad (2)$$

$$A_{n'} = \frac{32 \sqrt{3} e^2 a_B}{3 \left(z_1 + \frac{z_{n'}}{n'} \right)^5} z_1^{3/2} \left(\frac{z_{n'}}{n'} \right)^{5/2} \sqrt{(n')^2 - 1},$$

$\phi_H = e\hbar H/\mu c$, H — напряженность магнитного поля, μ — приведенная масса экситона.

Решение уравнения (1) будем искать для случая сильного магнитного поля, удовлетворяющего условию

$$\lambda \ll a_{ex} \quad (\lambda > a_B), \quad (3)$$

где $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar c}{eH}}$ — циклотронный радиус, $a_{ex} = \frac{e\hbar^2}{\mu e^2}$, ε — диэлектрическая проницаемость кристалла. Поскольку уравнение (1) с потенциалом (2) точно не решается, то при выполнении условия (3), следуя работе [2], будем считать, что потенциал V меняет только зависящую от z часть волновой функции, а движение в плоскости (ρ, φ) не меняется и по-прежнему описывается известными осцилляторными решениями $\psi_0(\rho, \varphi)$ [10], т. е.

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \psi_0(\rho, \varphi) W(z), \quad (4)$$

где $W(z)$ — неизвестная функция.

Подставляя (4) в (1) и усредняя по $\psi_0(\rho, \varphi)$, для $W(z)$ получаем уравнение

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dz^2} + V_{nm}(z) \right] W(z) = E_{nm} W(z). \quad (5)$$

Здесь E_{nm} есть энергия связанного состояния, n, m — квантовые числа, принимающие значения $n = 0, 1, 2, \dots$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$,

$$V_{nm}(z) = \int |\psi_0(\rho, \varphi)|^2 V(\rho, \varphi, z) \rho d\rho d\varphi; \quad (6)$$

в частности,

$$\begin{aligned} V_{00} = & -\frac{e^2}{\varepsilon\lambda} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{\frac{z^2}{2\lambda^2}} \left[1 - \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2}\lambda}\right) \right] \mp \\ & \mp \frac{A_{n'}}{\lambda^3} \left\{ 1 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{z}{\lambda} e^{\frac{z^2}{2\lambda^2}} \left[1 - \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2}\lambda}\right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$V_{10} = -\frac{e^2}{\varepsilon\lambda} \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{\frac{z^2}{2\lambda^2}} \left(\frac{3}{4} + \frac{z^2}{2\lambda^2} + \frac{z^4}{4\lambda^4} \right) \left[1 - \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2}\lambda}\right) \right] - \right.$$

$$-\frac{z}{4\lambda} - \frac{z^3}{4\lambda^3} \Big\} \mp \frac{A_{n'}}{\lambda^2} \left\{ 1 + \frac{5z^2}{4\lambda^2} + \frac{z^4}{4\lambda^4} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{z}{\lambda} e^{\frac{z^2}{2\lambda^2}} \left[1 - \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2}\lambda}\right) \right] \left(\frac{7}{2} + \frac{3z^2}{\lambda^2} + \frac{z^4}{2\lambda^4} \right) \right\},$$

где $\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$ — интегральная функция ошибок, под z понимается $|z|$, а знаки $\mp$ соответствуют положительным и отрицательным значениям z .

Уравнение (5) с потенциалами типа (7) точно не решается. Будем аппроксимировать V_{nm} следующим потенциалом:

$$V(z) = - \frac{e^2}{\varepsilon (a + |z|)}. \quad (8)$$

Величина a выбирается так, чтобы поведения (6) и (8) были близки, а также чтобы был учтен эффект несферичности. Это достигается приравнением (6) и (8) в точке $z = \lambda$.

Несферичность (2) приводит к тому, что значения $a_{1,2}$ соответственно для $z > 0$ и $z < 0$ будут различными:

$$a_{1,2} = \lambda \left[\left(\frac{1}{I_1} - 1 \right) \mp \frac{\varepsilon A_{n'}}{e^2 \lambda} \frac{I_2}{I_1^2} \right], \quad (9)$$

где

$$I_1 = \frac{(|m| + n)!}{(|m|!)^2 n!} \int_0^\infty \frac{e^{-\sigma} \sigma^{|m|}}{(1 + 2\sigma)^{1/2}} [F_1(-n, |m| + 1, \sigma)]^2 d\sigma, \quad (10)$$

$$I_2 = \frac{(|m| + n)!}{(|m|!)^2 n!} \int_0^\infty \frac{e^{-\sigma} \sigma^{|m|}}{(1 + 2\sigma)^{3/2}} [F_1(-n, |m| + 1, \sigma)]^2 d\sigma. \quad (11)$$

Легко видеть, что $I_2 < I_1 < 1$.

Подставляя (8) со значениями (9) в (5) и введя для дискретного спектра обозначения

$$E_n = - \frac{\hbar^2}{2 \mu a_{ex}^2 \alpha^2}, \\ x = \frac{2(a_1 + z)}{\alpha} \quad \text{при } z > 0, \\ y = \frac{2(a_2 - z)}{\alpha} \quad \text{при } z < 0,$$

получаем уравнение

$$W'' - \left(\frac{1}{4} - \frac{\alpha}{x} \right) W = 0, \quad (12)$$

решением которого является функция Уиттекера $W_{a, \frac{1}{2}}(x)$ [11]:

$$W = \begin{cases} A W_{a, \frac{1}{2}}(x), & z > 0, \\ B W_{a, \frac{1}{2}}(y), & z < 0, \end{cases} \quad (13)$$

где A, B — нормировочные множители, $a = n_0 + \delta n$, $\delta n/n_0 \ll 1$, $n_0 = 1, 2, \dots$; $\delta n \ll 1$, $n_0 = 0$, а энергия принимает вид

$$E_a^{n,m} = \frac{e\hbar H}{2\mu c} (2n + m + |m| + 1) - \frac{\hbar^2}{2\mu a_{ex}^2} \frac{1}{(n_0 + \delta n)^3}. \quad (14)$$

Как видно из (13), несферичность потенциала (2) приводит к разным решениям для $z > 0$ и $z < 0$ и, следовательно, полная волновая функция не обладает определенной четностью. Мерой несферичности является величина $\Delta/a \ll 1$, где

$$\Delta = \frac{\epsilon A_{n'}}{e^2} \frac{I_2}{I_1^2}, \quad a = \lambda \left(\frac{1}{I_1} - 1 \right). \quad (15)$$

При $\Delta \rightarrow 0$ решение (13) совпадает с решением [2] для волновой функции, а состояния имеют определенную четность. Слова «четные» и «нечетные» будем использовать в этом смысле.

Из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции в точке $z = 0$ при использовании разложения функции Уиттекера при $x \ll 1$ [11] для квантовых дефектов δn получаем выражения

$$\frac{1}{\delta n} = \begin{cases} 2 \ln \left(\frac{a_{ex}}{2a} \right) + \frac{\Delta^2}{a^2}, & n_0 = 0, \\ \frac{a_{ex}}{2a} + \frac{\Delta^2}{a^2}, & \text{«нечетные»}, \\ \ln \left(\frac{a_{ex}}{2a} \right) + \frac{\Delta^2}{2a^2}, & \text{«четные», } n_0 \neq 0. \end{cases} \quad (16)$$

В случае непрерывного спектра (теперь $E_a = \frac{\hbar^2}{2\mu a_{ex}^2 a^2}$) решение уравнения Шредингера запишется в виде [10]

$$\psi = \frac{A}{a a_{ex}} (a_1 + z) \left(1 - \frac{(a_1 + z)}{a_{ex}} \right) \cos \vartheta + \frac{\sin \vartheta}{A} \left\{ 1 - \frac{2(a_1 + z)}{a_{ex}} \left[\ln \frac{2(a_1 + z)}{a_{ex}} + 2c - 1 + \operatorname{Re} h(ia) \right] \right\} \quad (17)$$

при $z > 0$, а при $z < 0$ $(a_1 + z)$ заменяется на $(a_1 - z)$. Здесь

$$A^2 = \frac{2\pi a}{1 - e^{-2\pi a}}, \quad h(x) = \psi(x) - \frac{1}{x} - \ln(ix), \quad \psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)},$$

c — постоянная Эйлера, а $\vartheta \approx \sin \vartheta \ll 1$ — фазовый дефект.

Поступая аналогично случаю дискретного спектра, для фазовых эффектов получаем

$$\epsilon = \begin{cases} \frac{A^2}{2\alpha \ln\left(\frac{2a}{a_{ex}}\right)} + \frac{A^2}{4\alpha \ln^2\left(\frac{2a}{a_{ex}}\right)} \frac{\Delta^2}{a^2}, & \text{„четные“,} \\ -\frac{A^2 a}{2a_{ex}} + \frac{A^2 \Delta^2}{2a_{ex}^2}, & \text{„нечетные“.} \end{cases}$$

Как указывалось в работе [12], аналогично должны вести себя квантовые дефекты для рентгеновского экситона и для размерно-квантованной проволоки.

Расчеты для $LiCl$ при условии $\lambda = 10 a_B$, $a_{ex} \approx 25 \text{ \AA}$ для $n_0 = 0$ при учете асимметрии дают поправку 14%, а при $n_0 \neq 0$ получается поправка в несколько процентов.

Таким образом, из (13), (14) и (16) видно, что спектр рентгеновского экситона в сильном магнитном поле аналогичен спектру диамагнитного экситона [1, 3], т. е. энергия основного состояния рентгеновского экситона в сильном магнитном поле также становится конечной, двукратное вырождение снимается и уровни имеют дублетную структуру. Но из-за подвижности дырки волновые функции больше не обладают определенной четностью, поэтому в отличие от оптического экситона [3] переходы разрешены в каждое из состояний, что должно привести к возникновению обеих линий в спектре рентгеновского поглощения.

Ереванский политехнический
институт
Ереванский государственный
университет

Поступила 25.II.1978

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Г. Жилич, Б. С. Монозон. ФТП, 1, 673 (1967).
2. R. J. Elliott, R. Loudon. J. Phys. Chem. Solids, 15, 196 (1960).
3. Б. П. Захарченя, Р. П. Сейсян. УФН, 97, 193 (1969).
4. Б. Б. Кадошцев, В. С. Кудрявцев. Письма ЖЭТФ, 13, 15 (1971).
5. Н. Э. Саркисян, Р. Л. Энфиаджян, Э. М. Казарян. Доклад на Международной конференции «Экситоны в полупроводниках», Л., 1977.
6. В. П. Долгопольский и др. ФТП, 12, 337 (1978).
7. А. М. Саар, А. А. Майсте, М. А. Эланго. ФТТ, 15, 2505 (1973).
8. К. И. Караханян, Э. М. Казарян, П. А. Безиригян. ФТТ, 18, 511 (1976).
9. К. И. Караханян, Э. М. Казарян, П. А. Безиригян. ФТТ, 19, 539 (1977).
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, М., 1974.
11. М. С. Градштейн, И. М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Изд. Наука, М., 1971.
12. С. Л. Арутюнян, Э. М. Казарян. Изв. АН АрмССР, Физика, 12, 16 (1977).

ՌԵՆՏԳԵՆՈՎՍԿՈՅԵ ԷԿՍԻՏՈՆԻ ՄՊԵԿՏՐԸ ՈՒՃԵՂ ՄԱԳՆԻՏԱԿԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ

Ս. Կ. ԱՎԵՏԻՍՅԱՆ, Կ. Ի. ԿԱՐԱԽԱՆՅԱՆ, Է. Մ. ԴԱԶԱՐՅԱՆ, Պ. Ա. ԲԵԶՐԳԱՆՅԱՆ

Ուսումնասիրված է խոռոչի «շարժունության» ազդեցությունը ուժեղ մագնիսական դաշտում ռենտգենյան էքսիտոնի էներգետիկ սպեկտրի և ալիքային ֆունկցիաների վրա: Ցույց է տրված, որ ալիքային ֆունկցիաները շունեն որոշակի դուպլետային և տրիպլետային երկու վիճակներում էլ անցումները թույլատրելի են:

X-RAY EXCITON SPECTRUM IN A STRONG MAGNETIC FIELD

S. K. AVETISYAN, K. I. KARAKHANYAN, E. M. KAZARYAN,
P. A. BEZIRGANYAN

The effect of hole "mobility" on the energy spectrum and wave functions of an X-ray exciton in a strong magnetic field is discussed. The wave functions are shown to have no definite parity, and transitions to be allowed into each doublet states.