Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 19, вып. 1, 30—34 (1984)

УДК 548.053.7

РАСПАД И ВРЕМЯ ЖИЗНИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭКСИТОНОВ

К. И. КАРАХАНЯН

Ереванский политехнический институт

(Поступила в редакцию 15 мая 1983 г.)

На примере рентгеновского K-экситона рассмотрен процесс распада и оценено время жизни рентгеновских экситонов. Показано, что распад этих экситонов обусловлен рекомбинацией электрона с дыркой на валентной оболочке атома или иона.

Как известно, рентгеновские экситонные состояния существенным образом влияют на край рентгеновского поглощения. Экспериментально обнаруженные изменения края поглощения проявляются в том, что в этих спектрах наблюдается тонкая структура, состоящая из отдельных пиков и полос поглощения.

Для количественной оценки роли экситонных эффектов в формировании структуры краев рентгеновских спектров поглощения в работе [1] предлагается модель рентгеновского экситона (РЭ) типа оптического экситона Ваннье-Мотта. Там показано, что в отличие от последнего одной из существенных особенностей РЭ является относительная подвижность дырки, которая приводит к появлению в гамильтониане взаимодействия электрона и дырки РЭ дополнительного члена к кулоновскому потенциалу, имеющего несферический характер.

Так, например, для K-экситона эффективный потенциал электронно-дырочного взаимодействия имеет вид

$$V_n = -\frac{e^2}{\varepsilon r} - \frac{A_n}{r^2}\left(\sqrt{2}\sin\vartheta\cos\varphi + \cos\vartheta\right), \tag{1}$$

$$A_n = \frac{32\sqrt{3}\,e^2 a_0}{3\left(Z_1 + \frac{Z_n}{n}\right)} Z_1^{3/2}\sqrt{n^2-1}\,F\left(-n+2,\ 5,\ 4,\ \frac{\frac{2Z_n}{n}}{Z_1 + Z\frac{Z_n}{n}}\right). \tag{2}$$

Здесь ε — диэлектрическая проницаемость кристалла, a_0 — боровский радиус, n — набор квантовых чисел n, l, m, характеризующих конечное состояние дырки, Z_1 и Z_n — экранировочные заряды ядра (в единицах заряда электрона), соответствующие случаям, когда дырка находится в состоянии k или n, F — гипергеометрическая функция.

На основе предложенной модели были получены энергии связи РЭ [2] и было рассмотрено влияние экситонных эффектов на коэффициент поглощения рентгеновских лучей [3]. Представляет интерес на основе этой модели оценить время жизни РЭ, являющееся одной из характеристик квазичастиц.

Исходя из квазиатомного характера РЭ [1—4], с хорошей точностью можно вычислить его время жизни τ, применяя известное выражение [4]

$$\frac{1}{\tau} = \frac{32\,\pi^3}{3\hbar\, c^3}\, \nu^3 \sum |er_{nk}|, \tag{3}$$

$$|er_{nk}| = e \int \Psi_n^* \, r \, \Psi_k \, dV, \tag{4}$$

где ν — частота испускаемого фотона, $|er_{nk}|$ — дипольный матричный элемент перехода между состояниями Ψ_k и Ψ_n. В (3) проводится суммирование по конечным состояниям и усреднение по начальным состояниям Ψ_k.

Используя значение $|r_{nk}|$, вычисленное для перехода $1s \to 2p$ в атоме водорода, авторы работы [4] оценили время жизни K-экситонов Li в кристаллах LiF, $Li\,Cl$ и $Li\,Br$. По их оценкам значение τ изменяется в пределах $10^{-11} - 10^{-12}$ с. Насколько нам известно, других оценок в литературе не существует.

В настоящей работе сделана попытка вычислить время жизни для K-экситона модели возбуждения, применяя формулу (3). Согласно этой модели дырка и электрон РЭ связаны с данным атомом или ионом. При вычислении матричных элементов необходимо рассмотреть следующие возможные переходы: переход электрона из экситонного состояния $\Psi_{\text{эк}}$ в состояние Ψ_k (переход $\Psi_{\text{эк.}} \to \Psi_k$), переход электрона ($\Psi_{\text{эк.}} \to \Psi_n$) и переход дырки ($\Psi_k \to \Psi_n$).

В зависимости от времени этих переходов аннигиляция пары дырка-электрон может происходить либо на K, либо на валентном уровне атома. Чтобы решить задачу, необходимо вычислить время жизни этих переходов. Для этой цели сначала определим волновые функции $\Psi_{\text{эк.}}$ и Ψ_n.

Для нахождения волновой функции основного состояния РЭ $\Psi_{\text{эк}} = Y(\vartheta, \varphi)\, R(r)$ решим уравнение Шредингера с потенциалом (1). После подстановки и разделения переменных получим

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m^*_{\text{эк}}}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{\varepsilon r} - \frac{\hbar^2 \lambda}{2m^*_{\text{эк.}}}\right) R = 0, \tag{5}$$

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} + \frac{2m^*_{\text{эк.}}}{\hbar^2} A_n \times$$
$$\times(\sqrt{2}\sin\vartheta\cos\varphi + \cos\vartheta)\, Y + \lambda Y = 0, \tag{6}$$

где λ — величина, подлежащая определению.

Решая (6) по теории возмущений, находим

$$\lambda = \frac{1}{3}\left(\frac{2m^*_{\text{эк.}} A_n}{\hbar^2}\right)^2, \tag{7}$$

$$Y = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left[1 - \frac{\sqrt{3\lambda}}{2}(\sqrt{2}\,\sin\vartheta\cos\varphi + \cos\vartheta)\right]. \tag{8}$$

Радиальную часть волновой функции и энергию основного состояния РЭ находим из (5). В результате решения имеем [3]

$$R = \frac{1}{L+1}\sqrt{\frac{1}{a_0\Gamma(2L+2)}}\,\frac{M_{L+1,\,L+1/2}\left[\dfrac{2r}{a_0(L+1)}\right]}{r}, \tag{9}$$

$$E_L = \frac{E_0}{\varepsilon^2(L+1)},\quad E_0 = 13{,}6\ \text{эВ}. \tag{10}$$

Здесь M — функция Уиттэкера, L — эффективное орбитальное квантовое число основного состояния РЭ, которое связано с λ соотношением

$$L(L+1) = \lambda. \tag{11}$$

Имея в виду, что дырка из K-оболочки совершает дипольный переход ($l = 1$), и принимая, что ее состояния можно описать водородоподобными волновыми функциями [1—4], из (2) для перехода дырки $\Psi_k \to \Psi_n$ получаем

$$\sum x_{nk} = \sum y_{nk} = 0,\quad \sum z_{nk} = \frac{\sqrt{3}}{3}\int R_{10}\, r^3 R_{n1}\, dr. \tag{12}$$

Для электронных переходов $\Psi_{\text{эк.}} \to \Psi_k$ и $\Psi_{\text{эк.}} \to \Psi_n$ соответственно имеем

$$\sum y_{k\text{эк.}} = 0,\quad \sum x_{k\text{эк.}} = \frac{\sqrt{2}}{2}\sum z_{k\text{эк.}} = -\frac{\sqrt{3\lambda}}{6}\int R_{10}\, r^3 R_{1L}\, dr, \tag{13}$$

$$\sum y_{n\text{эк.}} = 0,\quad \sum x_{n\text{эк.}} = \sum z_{n\text{эк.}} = \sqrt{\frac{2}{3}}\int R_{n1}\, r^3 R_{1L}\, dr. \tag{14}$$

Выражая R_{10} и R_{n1} через функции Уиттэкера и используя известный интеграл [5], можно вычислить матричные элементы (12)—(14). Подставляя затем их значения в (2), получим окончательные выражения для времени жизни этих переходов:

$$\frac{1}{\tau_{nk}} = \frac{2^{15}\pi^3 e^2 a_0^2}{9\hbar c^3}\nu^3(n^2-1)\frac{Z_1^3\left(\dfrac{Z_n}{n}\right)^5}{\left(Z_1+\dfrac{Z_n}{n}\right)^{10}}F^2\left(5,\ 2-n,\ 4,\ \frac{2\dfrac{Z_n}{n}}{Z_1+\dfrac{Z_n}{n}}\right), \tag{15}$$

$$\frac{1}{\tau_{k\text{эк.}}} = \frac{2^7\pi^3 e^2 a_0^2}{3\hbar c^3}\nu^3\lambda\,\frac{2^{2L}\Gamma^2(L+4)}{(L+1)\Gamma(2L+2)}\,\frac{Z_1^3\left(\dfrac{1}{L+1}\right)^{2L+3}}{\left(Z_1+\dfrac{1}{L+1}\right)^{2L+8}}, \tag{16}$$

$$\frac{1}{\tau_{n\text{эк.}}} = \frac{2^{10}\pi^3 e^2 a_0^2}{81\hbar c^3}\nu^3(n^2-1)\frac{2^{2L}\Gamma^2(L+5)}{(L+1)\Gamma(2L+2)}\,\frac{\left(\dfrac{Z_n}{n}\right)^5\left(\dfrac{1}{L+1}\right)^{2L+3}}{\left(\dfrac{Z_n}{n}+\dfrac{1}{L+1}\right)^{2L+10}}\times$$

$$\times F^2\left(L+5,\ 2-n,\ 4,\ \frac{\dfrac{2Z_n}{n}}{\dfrac{Z_n}{n}+\dfrac{1}{L+1}}\right). \tag{17}$$

1357—3

Таблица

Кристаллы	ε	L	λ	Ионы или атомы	n	Z_1	Z_n	Переходы $\psi_n \to \psi_k$		Переходы $\psi_{эк.} \to \psi_k$		Переходы $\psi_{эк.} \to \psi_n$	
								$\nu \cdot 10^{15}$, c^{-1}	τ, c	$\nu \cdot 10^{15}$, c^{-1}	τ, c	$\nu \cdot 10^{15}$, c^{-1}	τ, c
NaCl	2,32	0,59	0,94	*Na*	2	10,70	6,85	252,44	$9{,}20 \cdot 10^{-14}$	260,51	$9{,}04 \cdot 10^{-12}$	8,07	$5{,}60 \cdot 10^{-11}$
				Cl	3	16,70	5,75	682,72	$1{,}29 \cdot 10^{-13}$	683,68	$1{,}05 \cdot 10^{-11}$	0,96	$1{,}28 \cdot 10^{-9}$
KCl	2,17	0,70	1,19	*K*	3	18,70	7,40	870,37	$4{,}67 \cdot 10^{-14}$	874,38	$1{,}00 \cdot 10^{-12}$	4,01	$7{,}04 \cdot 10^{-10}$
				Cl	3	16,70	5,75	682,72	$1{,}29 \cdot 10^{-13}$	683,68	$9{,}70 \cdot 10^{-13}$	0,96	$1{,}69 \cdot 10^{-9}$
RbCl	2,18	0,69	1,17	*Rb*	4	36,70	8,90	3687,12	$3{,}13 \cdot 10^{-14}$	3686,18	$1{,}13 \cdot 10^{-11}$	1,06	$9{,}10 \cdot 10^{-10}$
				Cl	3	16,70	5,75	682,72	$1{,}29 \cdot 10^{-13}$	683,68	$1{,}6 \cdot 10^{-11}$	0,96	$1{,}68 \cdot 10^{-9}$

Значения времени жизни этих переходов для некоторых ионных кристаллов приведены в таблице, Величины L и λ вычислены с помощью формул (10) и (11) с учетом того, что для этих кристаллов $E_L \sim 1$ эВ. Значения остальных физических величин, приведенных в таблице, взяты из [6].

Как видно из таблицы, время перехода дырки $\Psi_n \to \Psi_k$ из состояния k в состояние n меньше времени перехода электрона из экситонного состояния в состояние k. Это, с одной стороны, означает, что аннигиляция пары дырка—электрон РЭ происходит на валентном уровне данного атома или иона, а с другой стороны, показывает, что в течение времени жизни РЭ дырка успевает изменить свое состояние. Иными словами, дырка рентгеновского экситона обладает известной подвижностью.

Следовательно, можно заключить, что время жизни РЭ определяется временем перехода электрона из экситонного состояния на валентный уровень атома ($\Psi_{эк.} \to \Psi_л$) и изменяется в широких пределах: 10^{-9}—10^{-11} c.

В заключение выражаю благодарность Э. М. Казаряну за ценные замечания и за неоднократные обсуждения полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Караханян К. И.* Автореферат канд. диссерт. Аштарак, 1979.
2. *Караханян К. И., Казарян Э. М., Безирганян П. А.* ФТТ, 18, 511 (1976); 19, 539 (1977).
3. *Казарян Э. М.* и др. Изв. АН АрмССР, Физика, 13, 179 (1978).
4. *Майсте А. А., Саар А. М.-Э., Эланго М. А.* ФТТ, 16, 1720 (1974).
5. *Градштейн И. С., Рыжик Н. М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Изд. Наука, М., 1971.
6. Таблицы физических величин. Справочник под ред. И. К. Кикоина. Атомиздат, М., 1976.

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԷՔՍԻՏՈՆՆԵՐԻ ՏՐՈՀՈՒՄԸ ԵՎ ԿՅԱՆՔԻ ՏԵՎՈՂՈՒԹՅՈՒՆԸ

Կ. Ի. ԿԱՐԱԽԱՆՅԱՆ

Ռենտգենյան K-էքսիտոնի օրինակի վրա դիտարկվում է ռենտգենյան էքսիտոնների տրոհման պրոցեսը և գնահատվում է նրանց կյանքի տևողությունը։ Ցույց է տրված, որ այդ էքսիտոնների տրոհումը պայմանավորված է էլեկտրոնի ռեկոմբինացիայով խոռոչի հետ ատոմի կամ իոնի վալենտային թաղանթի վրա։

DECAY AND LIFETIME OF *X*-RAY EXCITONS

K. I. KARAKHANYAN

Based on the instance of a K-shell X-ray exciton, the process of X-ray exciton decay is considered and its lifetime is estimated. The decay of these excitons is shown to be due to the electron-hole recombination on the valent shell of an atom or ion.