

УДК 548.053.7

## РЕНТГЕНОВСКИЙ ЭКСИТОН В МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА

К. И. КАРАХАНЯН, И. С. ГАСПАРОВА

Ереванский политехнический институт

(Поступила в редакцию 6 июня 1984 г.)

В атомном приближении вычислены потенциал электронно-дырочного взаимодействия и энергия связи рентгеновского К-экситона в модели переноса. Показано, что свойства этих экситонов более существенным образом зависят от структуры кристалла, чем свойства аналогичных экситонов в модели возбуждения.

Известно, что в рентгеновской спектроскопии уделяется большое внимание изучению тонкой структуры спектров вблизи краев поглощения, так как они дают богатую информацию об электронной структуре данного вещества. При этом в начальной области спектров поглощения неметаллических твердых тел происхождение некоторых максимумов тонкой структуры часто связывается с рентгеновским экситоном (РЭ) [1—5].

Рентгеновский экситон—это связанное состояние дырки и электрона. Дырка возникает на внутренних оболочках атомов или ионов, когда под действием рентгеновских лучей из этих оболочек вырывается электрон. Такой возбужденный атом или ион оказывается неустойчивым: вслед за поглощением рентгеновского кванта происходит перестройка электронных оболочек, приводящая к заполнению возникающей дырки. При этом дырка переходит из данной оболочки на более высокую. Если дырка переходит из одного состояния в другое в данном атоме (ионе), то возникает экситон в модели возбуждения, а если дырка переходит из данного атома (иона) к другому, то возникает экситон в модели переноса [1—4].

В работах [2, 3] было показано, что по своей структуре РЭ сходен с оптическим экситоном Мотта-Ваннье, а уравнение Шредингера имеет вид

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) \right] \Phi(r) = E\Phi(r), \quad (1)$$

$$V_{n,l,m} = -\frac{e^2}{\epsilon r} - \sum_{n',l',m'} \int \psi_{n,l,m}(r_1, \vartheta_1, \varphi_1) \frac{e^2}{\Delta r} \psi_{n',l',m'} dr_1. \quad (2)$$

Здесь  $n, l, m$ —набор квантовых чисел, характеризующих первоначальное состояние, откуда вырывается электрон (образуется дырка), а  $n', l', m'$ —набор квантовых чисел, характеризующих конечное состояние дырки,  $r, r_1$ —радиусы-векторы соответственно электрона и дырки относительно ядра,  $\Delta r = |r - r_1|$ —расстояние между ними,  $M$ —масса экситона.

В настоящей работе сделана попытка на основе предложенной модели вычислить потенциал электронно-дырочного взаимодействия и энергию

связи экситона в модели переноса. В этом случае  $n=1$ ,  $l=m=0$ , и волновая функция начального состояния дырки будет иметь вид

$$\psi_{10} = \frac{R_{10}(r_1)}{4\pi}. \quad (3)$$

Здесь  $R_{10}(r_1)$ —радиальная функция водородоподобного атома для К-состояния.

Для нахождения волновой функции дырки конечного состояния совместим начало координат с ядром атома (иона), в котором возникла дырка. Тогда положения остальных ядер можно представить с помощью вектора трансляции  $\mathbf{R}$ . Если радиус-вектор дырки есть  $\mathbf{r}_1$ , то расстояние между данной дыркой и ядром с радиусом-вектором  $\mathbf{R}$  будет равно  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}|$ . Тогда волновую функцию дырки конечного состояния в кристалле, удовлетворяющую трансляционному условию, в первом приближении можно записать в виде

$$\psi_{n', l', m'}(\mathbf{r}_1) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \psi_{n', l', m'}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}), \quad (4)$$

где  $\mathbf{k}$ —волновой вектор, а  $\psi_{n', l', m'}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R})$ —волновая функция дырки в атоме с радиусом  $\mathbf{R}$ :

$$\psi_{n', l', m'}(\mathbf{r}_1) = Y_{l', m'}(\vartheta', \varphi') R_{n', l'}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}|). \quad (5)$$

Здесь  $\vartheta'$ ,  $\varphi'$ —углы, определяющие направление вектора  $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R})$ .

Разлагая  $1/|\Delta r|$  по сферическим функциям и используя, как и в работах [2, 3], правила отбора для дипольных переходов, получим выражение потенциала взаимодействия между электроном и дыркой в следующем виде:

$$V_{100} = -\frac{e^2}{\varepsilon r} - \frac{A}{r^2} (V\sqrt{2} \sin \vartheta \cos \varphi + \cos \vartheta), \quad (6)$$

$$A = \frac{V\sqrt{3}}{3} e^2 \sum_{n', R} \int \frac{r_1^2 + R^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}|^3} R_{10}(r_1) R_{n', 1}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}|) d\mathbf{r}_1 \cos(\widehat{\mathbf{k}\mathbf{R}}). \quad (7)$$

Подставив потенциал (6) в уравнение (1), нетрудно найти энергию связи рентгеновского К-экситона в модели переноса [2, 3]:

$$E = -\frac{4E_0}{\varepsilon^2} \left(\frac{M}{m_0}\right) \left[1 + \sqrt{1 + \frac{16}{3} \left(\frac{M}{m_0}\right) A^2}\right]^{-2}. \quad (8)$$

Здесь  $E_0 = 13,6$  эВ,  $m_0$ —масса свободного электрона.

Как и следовало ожидать, выражения для потенциала (6) и энергии связи (8) совпадают с аналогичными выражениями для К-экситона в модели возбуждения при  $\mathbf{R} = 0$ .

Из (7) и (8) видно, что в отличие от РЭ в модели возбуждения энергия связи РЭ в модели переноса является периодической функцией. Энергия связи этих экситонов, оцененная по формуле (7) для К-спектра поглощения  $Li$  в кристаллах  $LiF$ ,  $LiCl$  и  $LiBr$ , составляет величину порядка 1 эВ, в соответствии с экспериментальными данными [5]. Отсюда можно заключить о существовании обоих типов РЭ в этих кристаллах.

Исследования формул (7) и (8) показывают, что свойства РЭ в модели переноса более существенным образом зависят от расположения атомов или ионов в данном кристалле, чем свойства аналогичных экситонов в модели возбуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Мазалов Л. Н. Автореферат кандидатской диссертации, Ростов на Дону, 1967.
2. Караханян К. И., Казарян Э. М., Безиргянц П. А. ФТТ, 18, 511 (1976); 19, 539 (1977).
3. Караханян К. И. Автореферат кандидатской диссертации, Аштарак, 1979.
4. Караханян К. И. Изв. АН АрмССР, Физика, 19, 301 (1984).
5. Майсте А. А., Саар А. М. Э., Эланто М. А. ФТТ, 16, 1720 (1974).

#### ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԷՔՍԻՏՈՆԸ ՏԵՂԱՓՈՒՄԱՆ ՄՈԴԵԼՈՒՄ

Կ. Ի. ԿԱՐԱԽԱՆՅԱՆ, Ի. Ս. ԳԱՍՊԱՐՈՎԱ

Ատոմային մոտավորությամբ հաշվված են ռենտգենյան տեղափոխման X-էքսիտոնի էլեկտրոն-իստոշ փոխազդեցության պոտենցիալը և կապի էներգիան: Ցույց է տրված, որ այդ էքսիտոնների հատկությունները ավելի խիստ են կախված տվյալ բյուրեղի հատկություններից, քան համանման զրգոման էքսիտոններից:

#### X-RAY EXCITON IN THE TRANSFER MODEL

K. I. KARAKHANYAN, I. S. GASPAROVA

In the atomic approximation the potential of electron-hole interaction and the binding energy of X-ray excitons in the transfer model has been calculated. It was shown that the properties of these excitons more essentially depend on the structure of a given crystal, than those of analogous excitons in the excitation model.