EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 20. KÖIDE
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA. 1971, NR. 2

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 20
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1971, № 2

https://doi.org/10.3176/phys.math.1971.2.07

УДК 537.226 + 537.311.33.01

В. ФЕДОСЕЕВ

ТОНКАЯ СТРУКТУРА УРОВНЕЙ ЭКСИТОНА БОЛЬШОГО РАДИУСА В ИЗОТРОПНОМ ИОННОМ КРИСТАЛЛЕ

1. Введение

В настоящее время существует обширная литература, посвященная проблеме экситона Ванье—Мотта в ионном кристалле. (Обзор работ, выполненных до 1962 года, дан в книге Р. Нокса [1]).

Наиболее подробно рассмотрены два предельных случая — сильной и слабой связи электрона и дырки с колебаниями решетки. Нас будет интересовать последний случай, детальное исследование которого содержится в работах Х. Хакена [2].

Согласно Х. Хакену, относительное движение электрона и дырки в изотропном ионном кристалле описывается уравнением Шредингера с эффективным потенциалом

$$V_H(r) = -\frac{e^2}{r}\left[\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right)\left(1 - \frac{1}{2}\left(e^{-\frac{r}{r_e}} + e^{-\frac{r}{r_h}}\right)\right)\right], \qquad (1)$$

где e — заряд электрона; ε_∞ и ε_0 — высокочастотная и низкочастотная диэлектрические проницаемости; r_e и r_h — радиусы поляризационных ям электрона и дырки. Потенциал $V_H(r)$ учитывает прямое кулоновское взаимодействие между частицами и обмен фононом между ними. Использование потенциала $V_H(r)$ обосновано только в случае, когда радиус экситона много больше радиусов поляризационных ям. При этом условии отклонение на малых расстояниях потенциала $V_H(r)$ от экранированного кулоновского потенциала $V_C(r) = -\frac{e^2}{\varepsilon_0 r}$ можно рассматривать как возмущение, которое, в частности, приводит к снятию вырождения по орбитальному квантовому числу.

Нужно, однако, заметить, что условие, при котором получен потенциал $V_H(r)$, эквивалентно предположению о неподвижности частицы, испускающей фонон. Как будет показано, это приводит к утере важных членов в операторе взаимодействия. Мы получим уравнение для функции относительного движения электрона и дырки, не прибегая к такому предположению.

2. Уравнение Шредингера для системы из электрона и дырки в изотропном ионном кристалле

Будем рассматривать одну валентную зону и одну зону проводимости. Пусть электрон и дырка взаимодействуют с одной ветвью продольных оптических колебаний [3], учтем также кулоновское взаимодействие между ними. Тогда гамильтониан системы будет иметь вид

$$H = H_e + H_h + H_L + H_{eh} + H_{eL} + H_{hL}, \tag{2}$$

где

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} E_c(\mathbf{k})\, b_e^+(\mathbf{k})\, b_e(\mathbf{k}), \tag{2а}$$

$$H_h = -\sum_{\mathbf{k}} E_v(\mathbf{k})\, b_h^+(\mathbf{k})\, b_h(\mathbf{k}), \tag{2б}$$

$$H_L = \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} a^+(\mathbf{q})\, a(\mathbf{q}), \tag{2в}$$

$$H_{eh} = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_\infty} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{q}} q^{-2} b_e^+(\mathbf{k}_1)\, b_h^+(\mathbf{k}_2)\, b_e(\mathbf{k}_1 - \mathbf{q})\, b_h(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}), \tag{2г}$$

$$H_{eL} = -ig \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} q^{-1} b_e^+(\mathbf{k})\, b_e(\mathbf{k} - \mathbf{q})\, [a(\mathbf{q}) - a^+(-\mathbf{q})], \tag{2д}$$

$$H_{hL} = ig \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} q^{-1} b_h^+(\mathbf{k})\, b_h(\mathbf{k} - \mathbf{q})\, [a(-\mathbf{q}) - a^+(\mathbf{q})]. \tag{2е}$$

Здесь $E_v(\mathbf{k})$ и $E_c(\mathbf{k})$ — энергия электрона в валентной зоне и в зоне проводимости (зоны будем считать параболическими при малых $\mathbf{k}$) $E_c(\mathbf{k}) = E_c(0) + \mathbf{k}^2/2m_e$, $E_v(\mathbf{k}) = E_v(0) - \mathbf{k}^2/2m_h$, $m_{e,h} > 0$; $b_e^+(\mathbf{k})$ $(b_e(\mathbf{k}))$ и $b_h^+(\mathbf{k})$ $(b_h(\mathbf{k}))$ — операторы рождения (уничтожения) электрона и дырки с волновым вектором $\mathbf{k}$; $a^+(\mathbf{q})$ $(a(\mathbf{q}))$ — операторы рождения (уничтожения) фонона с волновым вектором $\mathbf{q}$; ω_0 — частота фонона; $g = (2\pi e^2 \omega_0 \varkappa)^{1/2}$, $\varkappa = (\varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1})$; $\hbar \equiv 1$; объем кристалла взят равным единице. В H_L не учитывается энергия нулевых колебаний. Температура кристалла считается равной нулю.

Предположим, что в кристалле имеется один электрон и одна дырка. Будем искать волновую функцию состояния с полным импульсом $\mathbf{K}$ в виде

$$|\mathbf{K}, \Psi\rangle = \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{n} \Big(\prod_{\mathbf{q}} \sum_{n_{\mathbf{q}}}\Big) \Psi^{(n)}(\mathbf{K}; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \ldots, n_{\mathbf{q}}, \ldots)\, \delta_{n, \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}} \times$$
$$\times\, \delta_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} \mathbf{q}}\, |\mathbf{k}_1 + p_h \mathbf{K},\ \mathbf{k}_2 - p_e \mathbf{K};\ \ldots,\ n_{\mathbf{q}},\ \ldots\rangle, \tag{3}$$

где $|\mathbf{k}_1 + p_h\mathbf{K},\ \mathbf{k}_2 - p_e\mathbf{K};\ \ldots,\ n_{\mathbf{q}},\ \ldots\rangle$ — вектор состояния, содержащего один электрон с импульсом $\mathbf{k}_1 + p_h\mathbf{K}$ и одну дырку с импульсом $\mathbf{k}_2 - p_e\mathbf{K}$; фононное поле в этом состоянии задается числом колебательных квантов $n_{\mathbf{q}}$ для каждого волнового вектора $\mathbf{q}$; $p_e + p_h = 1$, конкретный вид этих величин мы определим в дальнейшем; δ — символ Кронекера. Условие нормировки состояния $|\mathbf{K}, \Psi\rangle$ приводит к соотношению между функциями $\Psi^{(n)}(\mathbf{K};\ \mathbf{k}_1,\ \mathbf{k}_2;\ \ldots,\ n_{\mathbf{q}},\ \ldots)$

$$\sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \sum_{n} \Big(\prod_{\mathbf{q}} \sum_{n_{\mathbf{q}}}\Big) |\Psi^{(n)}(\mathbf{K};\ \mathbf{k}_1,\ \mathbf{k}_2;\ \ldots,\ n_{\mathbf{q}},\ \ldots)|^2 \delta_{n, \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}}\, \delta_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} \mathbf{q}} = 1. \tag{3а}$$

Функция $|\mathbf{K}, \Psi\rangle$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$(H - E)\,|\mathbf{K}, \Psi\rangle = 0. \tag{4}$$

Будем рассматривать случай слабого взаимодействия частиц с оптическими колебаниями

$$\alpha_e = \frac{e^2\varkappa}{2r_e\omega_0} \ll 1, \tag{5а}$$

$$\alpha_h = \frac{e^2\varkappa}{2r_h\omega_0} \ll 1, \tag{5б}$$

где $r_{e,h} = (2m_{e,h}\omega_0)^{-1/2}$.
Тогда из (4) получим во втором порядке по $\alpha_{e,h}$ уравнение для $\Psi^{(0)}(\mathrm{K}; \mathbf{k})$

$$\Big[\frac{(\mathbf{k}+p_h\mathrm{K})^2}{2m_e} + \frac{(\mathbf{k}-p_e\mathrm{K})^2}{2m_h} - (E - E_c(0) + E_v(0)) + + g^2\sum_{\mathbf{q}} q^{-2}(G_e(\mathrm{K},\mathbf{k},\mathbf{q};E) + G_h(\mathrm{K},\mathbf{k},\mathbf{q};E))\Big]\Psi^{(0)}(\mathrm{K};\mathbf{k}) - \tag{4а}$$

$$-\sum_{\mathbf{q}} q^{-2}\Big[\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_\infty} + g^2(G_e(\mathrm{K},\mathbf{k},\mathbf{q};E) + G_h(\mathrm{K},\mathbf{k},\mathbf{q};E))\Big]\Psi^{(0)}(\mathrm{K};\mathbf{k}-\mathbf{q}) = 0.$$

В формуле (4а) введены трехчастичные пропагаторы

$$G_e(\mathrm{K},\mathbf{k},\mathbf{q};E) = = \Big[E - E_c(0) + E_v(0) - \frac{(\mathbf{k}+p_h\mathrm{K}-\mathbf{q})^2}{2m_e} - \frac{(\mathbf{k}-p_e\mathrm{K})^2}{2m_h} - \omega_0\Big]^{-1}, \tag{6а}$$

$$G_h(\mathrm{K},\mathbf{k},\mathbf{q};E) = = \Big[E - E_c(0) + E_v(0) - \frac{(\mathbf{k}+p_h\mathrm{K})^2}{2m_e} - \frac{(\mathbf{k}-p_e\mathrm{K}-\mathbf{q})^2}{2m_h} - \omega_0\Big]^{-1}. \tag{6б}$$

Последние два члена в первой квадратной скобке (4а) описывают «одевание» частиц. Эффекты «одевания» могут быть учтены перенормировкой энергий и эффективных масс электрона и дырки, если волновые векторы частиц малы по сравнению с обратными радиусами поляризационных ям $r_{e,h}$, т. е. если

$$|\mathbf{k}|r_{e,h} \ll 1, \tag{7а}$$

$$|\mathrm{K}|r_{e,h} \ll 1. \tag{7б}$$

При выполнении условий (5а, б), (7а, б) мы можем разложить пропагаторы в первой квадратной скобке формулы (4а) в ряд по величинам $(E - E_c(0) + E_v(0))\,\omega_0^{-1}$, $\mathbf{k}^2 r^2_{e,h}$, $(\mathbf{k}-\mathrm{K})^2 r^2_{e,h}$, ограничившись первыми членами. В членах, описывающих обменное взаимодействие, выделим главную часть, заменив в первом приближении пропагаторы во второй квадратной скобке на их значения при $\mathbf{k} = \mathbf{q} = \mathrm{K} = 0$.

Поделив все члены в (4а) на $\left(1 + \frac{\alpha_e}{2} + \frac{\alpha_h}{2}\right)$, получим с точностью до $\alpha_{e,h}$

$$\Big[\frac{(\mathbf{k}+p_h\mathrm{K})^2}{2m_e^*} + \frac{(\mathbf{k}-p_e\mathrm{K})^2}{2m_h^*} - x\Big]\Psi^{(0)}(\mathrm{K};\mathbf{k}) - \tag{4б}$$

$$-\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0^*}\sum_{\mathbf{q}} q^{-2}\Psi^{(0)}(\mathrm{K};\mathbf{k}-\mathbf{q})=0,$$

где
$$(\varepsilon_0^*)^{-1}=(\varepsilon_\infty^*)^{-1}-\varkappa^*,$$

$$m_{e,h}^*=m_{e,h}\left(1+\frac{\alpha_{e,h}}{6}\right),\qquad \varepsilon_\infty^*=\varepsilon_\infty\left(1+\frac{\alpha_e}{2}+\frac{\alpha_h}{2}\right),$$

$$\varkappa^*=\varkappa\left(1-\frac{3}{2}\alpha_e-\frac{3}{2}\alpha_h\right),\qquad x=E-E_c(0)+E_v(0)+(\alpha_e+\alpha_h)\,\omega_0.$$

Теперь можно определить величины

$$p_{e,h}=\frac{m_{h,e}^*}{m_e^*+m_h^*}.$$

В члене взаимодействия мы приняли $x=0$, считая $|x|\ll \ll(\alpha_e+\alpha_h)\,\omega_0$ *.

Таким образом, в первом приближении пропагаторы во второй квадратной скобке формулы (4а) мы взяли равными

$$G_{e,h}(0,0,0;E_c(0)-E_v(0)-(\alpha_e+\alpha_h)\,\omega_0)=G^{(0)}.$$

Это приближение соответствует предположению об адиабатическом следовании эффективных зарядов поляризации за движением электрона и дырки, причем учитываются перенормировки энергий отдельных частиц, но не учитывается энергия их связывания. Заметим еще, что появление эффективной диэлектрической постоянной в формуле (4б) также учитывает тот факт, что взаимодействуют «одетые» электрон и дырка, в которых вес «голых» частиц составляет $\left(1+\frac{\alpha_{e,h}}{2}\right)^{-1}\cong 1-\frac{1}{2}\alpha_{e,h}$.

Вводя фурье-образ функции $\Psi^{(0)}(\mathrm{K};\,\mathbf{k})$

$$\Psi^{(0)}(\mathrm{K};\mathbf{r})=N^{-1/2}\sum_{\mathbf{k}}\exp\left(i(\mathbf{kr})\right)\Psi^{(0)}(\mathrm{K};\mathbf{k})$$

и используя соотношение [2]

$$N^{-1}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\mathbf{r}}\exp[i(\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}'))]f(\mathbf{k})\Psi(\mathbf{r}')=f\left(-i\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\right)\Psi(\mathbf{r}),\tag{8}$$

получаем для $\Psi^{(0)}(\mathrm{K};\,\mathbf{r})$ уравнение Шредингера с кулоновским потенциалом **

$$\left[-\frac{1}{2\mu}\nabla^2+\frac{\mathrm{K}^2}{2M^*}-\frac{e^2}{\varepsilon_0^* r}-x\right]\Psi^{(0)}(\mathrm{K};\mathbf{r})=0,\tag{4в}$$

дискретные уровни которого имеют вид

$$x_n(\mathrm{K})=-\frac{\mu^* e^4}{2n^2(\varepsilon_0^*)^2}+\frac{\mathrm{K}^2}{2M^*}.\tag{9}$$

* Выполнение этого условия сразу вытекает из формул (5а, б) и (9).

** Нормировка функции $\Psi^{(0)}(\mathrm{K};\mathbf{r})$ определяется соотношением (3а). Мы будем считать эту функцию нормированной на единицу. Это не приведет к существенному изменению полученных результатов.

В формулах (4а), (9) $(\mu^*)^{-1}=(m_e^*)^{-1}+(m_h^*)^{-1}$, $M^*=m_e^*+m_h^*$, $\nabla=\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$.

Заметим теперь, что для нижних состояний среднее значение волнового вектора относительного движения частиц составляет величину порядка R^{-1}, где $R=\frac{\overset{\bullet}{\varepsilon}_0}{\mu^* e^2}$ — радиус экситона. Поэтому условия (7а, б) приводят к требованию

$$R \gg r_{e,h}. \tag{10}$$

В противном случае не будет справедливо приближение эффективных масс в уравнении (4в). Это обстоятельство заставляет с самого начала ограничиться случаем больших радиусов экситонов.

3. Отклонение эффективного оператора взаимодействия электрона и дырки от экранированного кулоновского потенциала. Снятие вырождения по орбитальному квантовому числу

Рассмотрим теперь, как отличается истинный оператор взаимодействия электрона и дырки от экранированного кулоновского потенциала $V_c=-\frac{e^2}{\overset{\bullet}{\varepsilon}_0 r}$. Для этого мы должны рассмотреть отличие функций $G_{e,h}(\mathbf{K},\ \mathbf{k},\ \mathbf{q};\ E)$ во второй квадратной скобке уравнения (4а) от их значений в первом приближении ($G^{(0)}$). В следующем приближении положим энергию пары частиц равной энергии экситона с импульсом $\mathbf{K}$ (9).

При выполнении условий (7б) и (10) функции $G_{e,h}(\mathbf{K},\ \mathbf{k},\ \mathbf{q};\ E_c(0)-E_v(0)-(\alpha_e+\alpha_h)\omega_0+x_n(\mathbf{K}))$ можно разложить в ряд по $\mathbf{K}$ и $\mathbf{k}-\mathbf{q}$. Ограничимся членами четвертой степени в разложении. Затем, воспользовавшись соотношением (8), в котором произведем замену $\mathbf{k}\to\mathbf{k}-\mathbf{q}$, получим дополнительные операторы взаимодействия.

Операторы взаимодействия, обусловленные членом, не зависящим от $\mathbf{K}$ и $\mathbf{k}-\mathbf{q}$, а также бинарными членами в разложении, будут иметь следующий вид:

$$\hat{V}=\hat{V}_{\text{д}}+\hat{V}^{(0)}_{\text{б}}+\hat{V}^{(2)}_{\text{б}}+\hat{V}^{(2)}_{\text{бK}}, \tag{11}$$

$$\hat{V}_{\text{д}}=\frac{e^2\varkappa}{2\mu\omega_0}\left[\frac{1}{r}\nabla^2-\frac{1}{r^3}(\mathbf{r}\nabla)\right], \tag{11а}$$

$$\hat{V}^{(0)}_{\text{б}}=-\frac{e^2\varkappa}{2r}\left(e^{-\frac{r}{r_e}}+e^{-\frac{r}{r_h}}\right), \tag{11б}$$

$$\hat{V}^{(2)}_{\text{б}}=-\frac{e^2\varkappa}{\omega_0 r^3}\left[\frac{1}{m_e}\left(1+\frac{r}{r_e}+\frac{r^2}{2r_e^2}\right)e^{-\frac{r}{r_e}}+\frac{1}{m_h}\left(1+\frac{r}{r_h}+\frac{r^2}{2r_h^2}\right)e^{-\frac{r}{r_h}}\right](\mathbf{r}\nabla), \tag{11в}$$

$$\hat{V}^{(2)}_{бК} = -i\frac{e^2\varkappa(\mathbf{K}\mathbf{r})}{M\omega_0 r^3}\left[\left(1+\frac{r}{r_e}-\frac{r^2}{2r_e^2}\right)e^{-\frac{r}{r_e}} - \left(1+\frac{r}{r_h}-\frac{r^2}{2r_h^2}\right)e^{-\frac{r}{r_h}}\right]. \tag{11г}$$

При выводе формул (11а)—(11г) мы пренебрегли отличием эффективных масс от затравочных и величиной $\mu^* e^4[2n^2(\varepsilon_0^*)^2]^{-1}$ по сравнению с ω_0 ***.

Из формул (11а)—(11г) видно, что дополнительный оператор взаимодействия может быть разбит на две части: короткодействующую $\hat{V}_б$ и дальнодействующую $\hat{V}_д$. Потенциал Хакена включает только первый (локальный) член короткодействующей части $\hat{V}_б$, соответствующий диэлектрическому экранированию неподвижного заряда. Анализ показывает, что по порядку величин $\alpha_{e,h}$ и $r_{e,h}R^{-1}$ для S-состояний оператор $\hat{V}_б$ дает такой же вклад, что и оператор $\hat{V}_д^{(0)}$, и меньший вклад по порядку величины $r_{e,h}R^{-1}$ для состояний с $l > 0$. Кроме того, для состояний с $l > 0$ в короткодействующей части некоторые члены, содержащие операторы дифференцирования, дают вклад того же порядка малости, что и локальный член.

Дальнодействующая часть взаимодействия возникает благодаря искажению поляризационной ямы во время движения частицы. При этом, во-первых, индуцируется дополнительный заряд, знак которого противоположен знаку эффективного заряда, наведенного около неподвижной частицы. Величины этих зарядов относятся как кинетическая энергия относительного движения частицы и частота фонона (или средняя кинетическая энергия виртуальной частицы). Иными словами, при движении заряда происходит его частичная деполяризация.

Во-вторых, наводится дипольный момент. Его величину можно оценить следующим образом. Относительное искажение линейного размера поляризационной ямы должно быть пропорционально отношению импульса частицы к среднему импульсу виртуальной частицы, равному обратному радиусу ямы, т. е. $\frac{\Delta r_{e,h}}{r_{e,h}} \sim r_{e,h}\nabla$. В первом приближении величина дипольного момента $\mathbf{p}$ пропорциональна заряду, индуцированному вокруг неподвижной частицы $e^2\varkappa$, умноженному на абсолютное искажение, т. е. $\mathbf{p} \sim e^2\varkappa r_{e,h}^2\nabla$.

Операторы $\hat{V}_д$, $\hat{V}_б^{(0)}$ и $\hat{V}_б^{(2)}$ обладают сферической симметрией. Они сдвигают уровни с одинаковыми главными n и различными орбитальными l квантовыми числами на различную величину, не перепутывая их при этом. Оператор $\hat{V}^{(2)}_{бК}$ вызывает перепутывание таких уровней. Величину сдвига уровня с квантовыми числами n и l под действием оператора $\hat{V}$ мы будем обозначать $(V)_{nl}$.

Согласно условию (7б) перепутыванием уровней в первом приближении можно пренебречь. Для сдвигов уровней получаем

*** Учет величины $\mu^* e^4[2n^2(\varepsilon_0^*)^2\omega_0]^{-1}$ приводит к сдвигам уровней, сравнимым с рассматриваемыми (формулы (12а, б)), но не оказывает существенного влияния на расщепление уровней (12в).

$$(V_{д})_{nl} = \frac{e^2\varkappa}{2\mu\omega_0 R^3}\frac{1}{n^3}\left(2\delta_{l0} + \frac{1}{n} - \frac{2}{l+\frac{1}{2}}\right) \tag{12а}$$

$$(V_{б})_{n0} = -\frac{e^2\varkappa}{\mu\omega_0 R^3}\frac{1}{n^3}. \tag{12б}$$

(Матричные элементы $(\overset{(2)}{V_б})_{nl}$ и $(\overset{(0)}{V_б})_{nl}$ при $l \neq 0$ малы по порядку величины $r_{e,h}R^{-1}$ в сравнении с рассматриваемыми). Величина l-расщепления уровней $\Delta E^{(n)}_{l_1 l_2} = E_{nl_1} - E_{nl_2} = (V_д + \overset{(0)}{V_б})_{nl_1} - (V_д + \overset{(0)}{V_б})_{nl_2}$ составляет ****

$$\Delta E^{(n)}_{l_1 l_2} = -\frac{e^2\varkappa}{\mu\omega_0 R^3}\frac{1}{n^3}\frac{l_2 - l_1}{\left(l_1+\frac{1}{2}\right)\left(l_2+\frac{1}{2}\right)}. \tag{12в}$$

Величину расщепления можно выразить через постоянную Ридберга экситона $Ry = \frac{\mu e^4}{\varepsilon_0^2}$, что есть расстояние (с точностью до $\alpha_{e,h}$) нижнего уровня ($1S$) от дна зоны проводимости

$$\Delta E^{(n)}_{l_1 l_2} = -\frac{4}{n^3}\frac{l_2 - l_1}{\left(l_1+\frac{1}{2}\right)\left(l_2+\frac{1}{2}\right)}\tilde{\alpha}^2\left(\frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_0} - 1\right)^{-1} Ry, \tag{12г}$$

где $\tilde{\alpha} = (\alpha_e^{-2} + \alpha_h^{-2})^{-1/2}$.

Нужно отметить, что в реальных кристаллах существуют причины расщепления уровней, отличные от рассмотренных [4, 5].

4. Потенциал, зависящий от полного импульса экситона. Частичное снятие вырождения по магнитному квантовому числу

Рассмотрим теперь операторы, зависящие от полного импульса экситона. Эти операторы не обладают сферической симметрией. Линейный по K оператор дается формулой (11г). Соответствующие ему диагональные по l матричные элементы обращаются в нуль. Анализ показывает, что наиболее существенны по порядку параметров $r_{e,h}R^{-1}$ члены, зависящие от K квадратично,

$$\hat{V}^{(4)}_{K} = \hat{V}^{(4)}_{дK} + \hat{V}^{(4)}_{бK}, \tag{13}$$

$$\hat{V}^{(4)}_{дK} = -\frac{e^2\varkappa K^2}{M^2\omega_0^2 r^3}(3\cos^2\theta - 1), \tag{13а}$$

$$\hat{V}^{(4)}_{бK} = \frac{e^2\varkappa K^2}{16M^2\omega_0^2}[I(\mathbf{r}, r_e) + I(\mathbf{r}, r_h)], \tag{13б}$$

**** Отметим, что поправки к собственной энергии частиц, которые возникают при разложении функций $G_{e,h}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{q}; E)$ в первой квадратной скобке формулы (4а) до членов $\sim k^4$, дают дополнительный сдвиг энергии, величина которого меньше рассматриваемого по порядку параметров $r_{e,h}R^{-1}$.

$$I(\mathbf{r}, r_{e,h}) = \frac{1}{r_{e,h}^3} e^{-\frac{r}{r_{e,h}}} \left[\cos^2\theta \left(1 + \frac{r}{r_{e,h}} \right) + \left(3\cos^2\theta - 1 \right) \times \right.$$

$$\left. \times \left(1 + \frac{4r_{e,h}}{r} + \frac{8r_{e,h}^2}{r^2} + \frac{8r_{e,h}^3}{r^3} \right) \right], \tag{13в}$$

где θ — угол между вектором $\mathbf{K}$ и радиус-вектором $\mathbf{r}$.

Потенциал $\hat{V}^{(4)}_{дК}$ обусловлен появлением индуцированного квадрупольного момента. Потенциал $\hat{V}^{(4)}_{К}$ приводит к частичному снятию вырождения уровней по магнитному квантовому числу ν. Поправка к энергии произвольного уровня, обусловленная этим потенциалом, будет следующая:

$$(V^{(4)}_{К})_{hl\nu} = \frac{2e^2\varkappa K^2}{M^2\omega_0^2R^3}\frac{1}{n^3}\left[\frac{1}{3}\delta_{l0} - \frac{l^2+l-3\nu^2}{(2l+3)(l+1)\left(l+\frac{1}{2}\right)l(2l-1)}\right], \tag{14}$$

а разность поправок для уровней с одинаковыми n и l, но разными ν, определяет величину ν-расщепления уровней

$$\Delta E^{nl}_{\nu_1\nu_2} = E_{nl\nu_1} - E_{nl\nu_2} =$$

$$= \frac{6e^2\varkappa K^2}{M^2\omega_0^2R^3}\frac{1}{n^3}\frac{\nu_1^2-\nu_2^2}{(2l+3)(l+1)\left(l+\frac{1}{2}\right)(2l-1)}. \tag{14а}$$

Обратим внимание также на то, что поправку к энергии, даваемую формулой (14), можно рассматривать как небольшое изменение эффективной массы экситона, которая оказывается теперь зависящей от его внутреннего состояния. Эта зависимость существенна для рассмотрения формы полос поглощения и излучения при переходах между различными уровнями экситона.

Выводы

1. При учете «одевания» частиц приближение эффективных масс обосновано только в том случае, если радиус экситона много больше размеров поляризационных ям электрона и дырки. При этом условии отличие оператора взаимодействия частиц от кулоновского потенциала с низкочастотной диэлектрической проницаемостью можно рассматривать как возмущение. В противном случае ($r_{e,h} > R$), по-видимому, имеет смысл вначале решить кулоновскую задачу для «голых» частиц и рассматривать взаимодействие с колебаниями экситона как целого.

2. Поправки к кулоновскому взаимодействию можно разделить на дальнодействующие и короткодействующие. Первые связаны с искажением поляризационных ям движущимися частицами, наведением дополнительных зарядов и мультипольных моментов.

3. При пренебрежении полным импульсом экситона поправки приводят к снятию вырождения по орбитальному квантовому числу.

4. Учет полного импульса экситона приводит к частичному снятию вырождения по магнитному квантовому числу, при этом уровни с $\nu = 0$ оказываются невырожденными, а уровни с $\nu \neq 0$ — двукратно вырожденными.

5. Поправки к кулоновскому взаимодействию, пропорциональные K^2, приводят к зависимости эффективной массы экситона от его внутреннего состояния.

Автор выражает глубокую благодарность К. Ребане за руководство работой и В. Хижнякову за обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Нокс Р., Теория экситонов, М., 1966.
2. Haken H., Z. Phys., **146**, 527 (1957); Fortschr. Phys., **6**, 271 (1958); Polarons and Excitons, Plenum Press, Inc. N. Y., 1963, p. 295.
3. Fröhlich H., Advances Phys., **3**, 325 (1954).
4. Москаленко С. А., Фотоэлектрические и оптические явления в полупроводниках, Киев, 1959, с. 121; Москаленко С. А., Толпыго К. Б., ЖЭТФ, **36**, 149 (1959).
5. Hopfield J. J., Thomas D. G., Phys. Rev., **122**, 35 (1961).

Институт физики и астрономии
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
26/VIII 1970

V. FEDOSSEJEV

SUURE RAADIUSEGA EKSITONI NIVOODE PEENSTRUKTUUR ISOTROOPSES IOONKRISTALLIS

Leiti elektroni ja augu vahelise efektiivse interaktsiooni operaator, kusjuures osakeste seos optiliste võnkumistega loetakse nõrgaks. Selle operaatori erinevust ekraneeritud kulonisest potentsiaalist vaadeldakse häiritusena. Näidatakse, et häiritusoperaatori võib jaotada kahte ossa: lähismõju- ja kaugmõjuoperaatoriks. On arvutatud nivoode l- ja m-lähenemise suurus.

V. FEDOSEYEV

THE FINE STRUCTURE OF THE LEVELS OF A LARGE RADIUS EXCITON IN AN ISOTROPIC IONIC CRYSTAL

The operator of the effective interaction of electron and hole is found in the weak coupling approximation. The difference between the found operator and the Coulomb potential is considered as perturbation. It is shown that the operator of perturbation may be divided into short-range and long-range parts. The l- and m-splitting of excitonic levels are calculated.