Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 1 — 1971

УДК 539.293.2.011

А. П. ТРУБИЦЫН

К ТЕОРИИ ЭКСИТОНА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С УЗКОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ (II)

В двухзонном приближении эффективной массы рассчитывается энергия нижнего состояния экситона для кристалла без центра симметрии. Применен модифицированный вариационный метод.

В статье [1] показано, что применение двухзонного приближения эффективной массы в двухчастичной модели экситона приводит к следующему уравнению для относительного движения электрона и дырки при $K=0$ (K — волновой вектор экситона):

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2M}\begin{pmatrix}1 & ib\\ -ib & -1\end{pmatrix}\nabla^2+\frac{e^2}{\varepsilon r}+\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 2\Delta\end{pmatrix}+E\right\}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=0, \qquad (1)$$

где M — приведенная эффективная масса, Δ — ширина запрещенной зоны. Величина b связана с междузонным взаимодействием D_{12}, D_{21} соотношением

$$ib=\frac{2M}{\hbar^2}(D_{12}-D_{21}) \qquad (2)$$

и в случае кристалла без центра симметрии отлична от нуля.

Отделив в (1) угловые координаты и проведя обычное асимптотическое исследование оставшегося радиального уравнения, можно убедиться, что уравнение (1) имеет непрерывные спектры собственных значений $E\geqslant 0$ и $E\leqslant -2\Delta$. Относительно значений $E\leqslant -2\Delta$ сохраняют силу замечания, приводившиеся в [1] для случая кристалла с центром симметрии. Попытка решения радиального уравнения в степенных рядах приводит к трехчленным рекуррентным формулам, из-за чего для нахождения дискретного спектра известный метод обрыва рядов неприменим (см., например, [2]). Вообще говоря, для такого случая существует метод непрерывных дробей, однако удобнее получить оценку нижнего значения энергии вариационным методом.

Непосредственная минимизация интеграла

$$\int \psi^{+}H\psi d\vec{r},$$

где H — гамильтониан уравнения (1) не приведет к желаемому результату из-за влияния собственных значений $E\leqslant -2\Delta$. Однако можно, оставаясь в рамках принятой модели, преобразовать вариационный метод так, чтобы исключить это влияние (ср. [3]). Для этого достаточно варьировать интеграл

$$\dot I = \int (H'\psi)(H'\psi)^{+} d\vec{r}, \tag{3}$$

где $H' = H + \Delta$. Искомое нижнее значение энергии E_1 определится из формулы

$$E_1 + \Delta = (\min \dot I)^{1/2}, \tag{4}$$

где минимум отыскивается при условии

$$\int \psi^{+}\psi d\vec{r} = 1. \tag{5}$$

(Действительно, раскладывая ψ по полной системе собственных функций оператора H, легко показать, что $\dot I \geqslant (E_1+\Delta)^2$, причем равенство достигается, когда ψ совпадает с точной собственной функцией уровня E_1.)

Для удобства вычислений перейдем к безразмерным величинам

$$\vec{\rho} = \frac{\vec{r}}{a}, \quad w = \frac{E}{E_0}, \quad g = \frac{\Delta}{E_0}, \tag{6}$$

где

$$a = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{Me^2}; \quad E_0 = \frac{Me^4}{\hbar^2 \varepsilon^2}, \tag{7}$$

тогда (1) примет вид

$$\left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & ib \\ -ib & -1 \end{pmatrix} \nabla^2 + \frac{1}{\rho} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2g \end{pmatrix} + w \right\} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0. \tag{8}$$

Пробную функцию возьмем в форме

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \begin{pmatrix} u \\ ve^{i\gamma} \end{pmatrix} e^{-\alpha\rho}, \tag{9}$$

где u, v, γ, α — вещественны, u, $v \geqslant 0$; $\alpha > 0$. Вычисление интеграла (3) дает

$$\dot I = \xi u^2 + \eta v^2 + 6buv \sin\gamma, \tag{10}$$

где

$$\xi(\alpha) = \frac{5}{4}(1+b^2)\alpha - 3 + \frac{2+g}{\alpha} - \frac{2g}{\alpha^2} + \frac{g^2}{\alpha^3},$$

$$\eta(\alpha) = \frac{5}{4}(1+b^2)\alpha + 3 + \frac{2+g}{\alpha} + \frac{2g}{\alpha^2}\,\frac{g^2}{\alpha^3}. \tag{11}$$

Если учесть условие (5) в форме $u^2+v^2=\alpha^3$ и неравенство $\xi<\eta$, то после минимизации (10) по параметрам γ, u, v величина $\dot I$ сводится к выражению

$$\dot I = \alpha^3 \left[\frac{\xi+\eta}{2} - \sqrt{\left(\frac{\xi-\eta}{2}\right)^2 + 9b^2} \right] =$$

$$= \frac{5}{4}(1+b^2)\alpha^4 + (2+g)\alpha^2 + g^2 - \alpha\sqrt{(3\alpha^2+2g)^2 + 9b^2\alpha^4}. \tag{12}$$

Условие $d\dot{I}/d\alpha = 0$ дает

$$[5(1+b^2)\alpha^3 + (4+2g)\alpha]\sqrt{(3\alpha^2+2g)^2+9b^2\alpha^4} -$$
$$-27(1+b^2)\alpha^4 - 24g\alpha^2 - 4g^2 = 0. \qquad (13)$$

При $b=0$ это уравнение имеет корень $\alpha = 1$, что следовало ожидать. При $b \ll 1$ можно искать α с точностью до членов порядка b^2 в виде $\alpha \simeq 1 + \lambda b^2$. Из (13)

$$\lambda = -\frac{40g^2+30g+9}{16g^3+56g^2+60g+18}.$$

Отрицательность λ показывает, что существование междузонного взаимодействия приводит к увеличению радиуса экситона. Вычисление w_1 дает выражение

$$w_1 = -\frac{1}{2}\left[1 - \frac{10g-3}{2(2g-1)(2g+3)}b^2\right]. \qquad (14)$$

Использование величины $-1/2$ в качестве нулевого приближения для w_1 имеет смысл, очевидно, только при $g > 1/2$. Поэтому абсолютный сдвиг уровня под влиянием междузонного взаимодействия, даваемый (14), положителен. В предельном случае $g \gg 1$

$$w_1 = -\frac{1}{2}\left(1 - \frac{5}{4}\frac{b^2}{g}\right). \qquad (15)$$

В размерных величинах (14) имеет вид

$$E_1 = -\frac{E_0}{2}\left[1 - \frac{2E_0(10\Delta - 3E_0)}{(2\Delta - E_0)(2\Delta + 3E_0)}\frac{M^2}{\hbar^4}|D_{12} - D_{21}|^2\right], \qquad (16)$$

а (15) соответственно

$$E_1 = -\frac{E_0}{2}\left[1 - \frac{5E_0}{\Delta}\frac{M^2}{\hbar^4}|D_{12} - D_{21}|^2\right]. \qquad (17)$$

В заключение благодарю В. Л. Бонч-Бруевича за внимание к этой работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Трубицын А. П. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., **11**, № 6, 1970.
2. Зомерфельд А. Строение атома и спектры, т. 2. М., ГИТТЛ, 1956.
3. Морс Ф. М., Фешбах Г. Методы теоретической физики, т. 2. М., ИЛ, 1960.

Поступила в редакцию
27.2 1970 г

Кафедра
полупроводников