

А. М. ШЕПЕТА, Н. Д. РАРАНСКИЙ, И. Л. КАРЕЛЬСКИХ

**ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМЫ ЭКСИТОННОЙ ПОЛОСЫ
ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕТА С УЧЕТОМ АНГАРМОНИЗМА**

Несмотря на многочисленные исследования [1, 3, 4, 8, 9], теория формы экситонных полос поглощения все еще остается незавершенной, так как в ней учитываются не все механизмы диссипации энергии экситона, в частности взаимодействие с фононами при учете ангармонизма. В настоящей работе изучено влияние ангармонизма оптических фононов на форму экситонной полосы поглощения света в ионных кристаллах. Расчеты проводили для двухатомных кристаллов со структурой Cu_2O .

Рассмотрим ионный кристалл, в котором экситоны слабо взаимодействуют с оптическими фононами. Гамильтониан такой системы запишем в виде

$$H = \sum_k E(k) a_k^+ a_k + \sum_q \Omega(q) \left(b_q b_q^+ + \frac{1}{2} \right) +$$

$$+ \sum_{k, q} \varphi(q) a_{k+q}^+ a_k (b_{q_1} + b_{-q_1}^+) + \sum_{q_1, q_2, q_3, q_4} V_{(q_1, q_2, q_3, q_4)}^{(4)} \prod_{i=1}^4 (b_{q_i} + b_{-q_i}^+) \quad (1)$$

в котором $E(k)$ — энергия экситонов $E(k) = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ — закон дисперсии; $\Omega(q) = \Omega$ — энергия оптических фононов, дисперсии которых пренебрегаем.

$$\varphi(q) = \sqrt{\frac{A}{V}} \cdot \frac{1}{q} \left\{ \frac{1}{(1 + \alpha_1^2 q^2)^2} - \frac{1}{(1 + \alpha_2^2 q^2)^2} \right\}$$

— функция экситон-фононной связи [9],

$$A = 2\pi\hbar e^2 \omega_0 c; \quad \alpha_j = \frac{m_j a_{ex}}{2}; \quad m_j = \frac{\mu_j}{\mu_1 + \mu_2}; \quad j = 1, 2;$$

c — известная константа из теории поляронов; ω_0 — предельная частота фонона; e — заряд электрона; a_{ex} — радиус экситона μ_1, μ_2 — эффективные массы электрона и дырки соответственно

$$V_{(q_1, q_2, q_3, q_4)}^{(4)} = \frac{\hbar^2 \cdot \Delta(q_1 + q_2 + q_3 + q_4)(M_+ + M_-)^2}{48N \omega_0^3} \frac{M_+^2 M_-^2}{M_+^2 M_-^2} \times \left(\Phi_{(r_0)}^{IV} + \frac{5\Phi_{(r_0)}^{III}}{r_0} + \frac{5\Phi_{(r_0)}^{II}}{r_0^2} \right) \quad (2)$$

— функция связи фонов-фононного взаимодействия, определенная для структуры Cu_2O . Здесь из-за центральной симметрии узлов кристаллической решетки при разложении потенциальной энергии в ряд по смещениям ионов члены с нечетными степенями опущены. Очевидно, что $V^{(4)}(q_1, q_2, q_3, q_4)$ отлична от нуля лишь при $q_1 + q_2 + q_3 + q_4 = 0$ или $2\pi Q_m$, где Q_m — вектор обратной решетки; M_+ и M_- — массы положительных и отрицательных ионов; остальные обозначения общеприняты.

При определении $V^{(4)}(q_1, q_2, q_3, q_4)$ использовали методику работы [6]. Потенциальную энергию парного взаимодействия ионов в кристалле аппроксимируем потенциалом Борна—Майера

$$\Phi(r) = -\frac{\alpha e^2}{r} + n_0 V e^{-r/\rho},$$

где r — расстояние между ионами; $r = r_0$ в равновесном состоянии; n_0 — число ближайших соседей; α — постоянная Маделунга; V и ρ — параметры, определяемые из условия равновесия и по коэффициенту изотермического сжатия [7].

Изучение формы полосы поглощения экситонной полосы поглощения сводится к вычислению Фурье-образа двухвременной запаздывающей функции Грина экситонов [3, 8]

$$G(k, \omega') = \frac{1}{\omega' - E(k) - M(k, \omega')}, \quad (3)$$

$$M(k, \omega') = \sum_q |\varphi(q)|^2 \left(\frac{\nu_q}{E_{1[10]}} + \frac{1 + \nu_q}{E_{\bar{1}[01]}} \right) + 12 \sum_{q_1, q_2} |\varphi(q)|^2 \cdot \frac{V_{(q_1, -q_1, q_2, -q_2)}^{(4)}}{\tilde{\Omega}(q_1)} (1 + 2\nu_{q_2}) \left(\frac{1}{E_{1[10]}} - \frac{1}{E_{\bar{1}[01]}} \right) \quad (4)$$

массовый оператор системы; $\omega' = \omega + i\eta$ ($\eta \rightarrow 0$);

$$E_{1[10]} = \omega' - E(k + q_1) + \tilde{\Omega}(q_1);$$

$$E_{\bar{1}[01]} = \omega' - E(k + q_1) - \tilde{\Omega}(q_1)$$

энергетические знаменатели, отвечающие за процесс рождения кситонов под действием поглощенного фотона с поглощением фотона (первый) и излучением (второй).

$$\tilde{\Omega}(q_1) = \Omega(q_1) + 12 \sum_{q_2}^{r, A} V_{(q_1, -q_1, q_2, -q_2)} (1 + 2\nu_{q_2})$$

энергия фотона, учитывающая ангармоническую собственную энергию.

Как известно [3], форма полосы поглощения описывается мнимой частью функции (3)

$$Z(\omega') = -JmG(\omega') = \frac{1/2\Gamma(\omega')}{\{\omega' - E - \Delta(\omega')\}^2 + 1/4\Gamma^2(\omega')}, \quad (5)$$

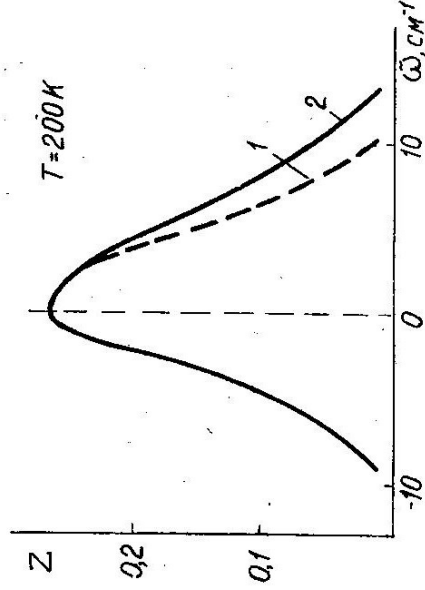
$\Gamma(\omega')$ и $\Delta(\omega')$ — мнимая и действительная части массового оператора (4), которые находим, используя тождество Дирака

$$\Gamma(\omega') = 2\pi \sum_q |\varphi(q)|^2 \{ (1 + \nu_q) \delta(E_{\bar{1}[01]}) + \nu_q \delta(E_{1[10]}) \} + 12\pi \sum_{q_1, q_2} |\varphi(q_1)|^2 \frac{V_{(q_1, -q_1, q_2, -q_2)}^{(4)}}{\tilde{\Omega}(q_1)} (1 + 2\nu_{q_2}) \{ \delta(E_{1[10]}) - \delta(E_{\bar{1}[01]}) \}, \quad (6)$$

$$\Delta(\omega') = P \sum_q |\varphi(q)|^2 \left\{ \frac{\nu_q}{E_{1[10]}} + \frac{1 + \nu_q}{E_{\bar{1}[01]}} \right\} + 6P \sum_{q_1, q_2} |\varphi(q_1)|^2 \frac{V_{(q_1, -q_1, q_2, -q_2)}^{(4)}}{\tilde{\Omega}(q_1)} (1 + 2\nu_{q_2}) \left\{ \frac{1}{E_{1[10]}} - \frac{1}{E_{\bar{1}[01]}} \right\}. \quad (7)$$

Полученные формулы (5), (6), (7), изучались форма полосы поглощения для кристалла типа Cu_2O . Так как при поглощении фотона системой в видимой области спектра рождаются кситоны и кванты фононов, а также вследствие того, что в работе не рассматриваются многофоновые процессы, мы полагаем $k=0$ и

рассматриваем область частот $E - \Omega < \omega < E + \Omega$. Из рисунка следует, что функция формы экситонной полосы $Z(\omega)$ описывается кривой квазилоренцевого типа со слабой асимметрией, которая возрастает при учете ангармонических эффектов. Спектр поглощения имеет форму асимметрической кривой с более пологим спадом в высокочастотную область, чем в низкочастотную. Качественно ход кривой поглощения согласуется с экспериментом [2];



Теоретические кривые, соответствующие гармоническому (1) и ангармоническому (2) приближениям. $T = 200$ К.

однако на эксперименте последняя имеет более выраженный характер. Это связано с тем, что мы пренебрегаем многофононными процессами, которые перенормируют массовый оператор системы и сильно «деформируют» кривую [3, 5, 9].

Список литературы: 1. Гамарник А. Т., Ницович В. М., Ткач Н. В. Особенности экситонных спектров поглощения света в одноосных полупроводниках. — УФЖ, 1980, 25, № 2. 2. Горбань И. С., Тимофеев В. Б. Свойства наиболее длинноволновой линии структурного поглощения Cu_2O . — Оптика и спектроскопия, 1960, 9, с. 482—486. 3. Давыдов А. С. Теория твердого тела. — М.: Наука, 1970. 4. Лубченко А. Ф., Ницович В. М., Ткач Н. В. Исследование спектральных характеристик ионных кристаллов в экситонной области поглощения света. — УФЖ, 1975, 20, № 5. 5. Москаленко С. А., Шмиглюк М. И., Чиник Б. И. О влиянии оптических фононов на форму полос поглощения экситона Ванье-Мота. — ФТТ, 1968, 10, № 2. 6. Ipatova I. P., Maradudin A. A., Wallis R. F. Temperature dependence of the width of the fundamental lattice-vibration absorption peak in ionic crystals. — Phys. Rev., 1967, 155, № 3. 7. Krishnan K. S., Roy K. The frequencies and the anharmonicities of the normal modes of oscillation of alkali halide crystals. — Proc. Roy. Soc. (A), 1951, 207, № 1091. 8. Lubchenko A. F., Nitsovich V. M., Tkach N. V. Temperature genesis of the curves of absorption and dispersion of light by ionic crystals in the exciton region. — Phys. Stat. Sol. (B), 1974, 63, № 2. 9. Toyorawa G. Theory of line-shapes of the exciton absorption bands. — Prog. Theor. Phys., 1958, 20, № 1.

The influence of optical phonons anharmonicity on exciton form of light absorption in ion crystals has been studied. Calculations were done for two-atomic crystals with Cu_2O structure.

Статья поступила в редколлегию 22.06.83