

## ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭКСИТОНА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ПРЯМОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ И ВЫРОЖДЕННОЙ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНОЙ

Нгуен Ай Вьет\*, Нгуен Куэ Хьонг\*, Нгуен Тоан Тханг\*

Изучается тонкая структура экситонов в кубических полупроводниках с прямой запрещенной зоной. Выведены общие выражения обменной энергии для любых экситонных состояний.

Работа выполнена в Институте теоретической физики, Ханой, СРВ.

### Exchange Interaction of Exciton in Direct Band Gap Semiconductors with Degenerate Valence Bands

Nguyen Ai Viet, Nguyen Que Huong, Nguyen Toan Thang

Fine structure of excitons in direct band gap cubic semiconductors is studied. The general formulae for exchange energy of any excitonic states were given.

The investigation has been performed at the Institute of Theoretical Physics, Hanoi, Viet-Nam.

Проблема структуры экситонного спектра была рассмотрена во многих работах<sup>/1-9/</sup>. В<sup>/1/</sup> она решается методом возмущения, при помощи которого получают общие выражения для энергетических уровней и волновых функций в любом порядке теории возмущения. Это позволяет провести дальнейшее изучение тонкой структуры экситона, а также эффектов тонкой структуры в оптических процессах с участием экситона.

При изучении тонкой структуры экситона необходимо учитывать электронно-дырочное обменное взаимодействие, которое было рассмотрено в некоторых теоретических и экспериментальных работах<sup>/2-8/</sup>. В частности, Фишман<sup>/8/</sup> получил обменную энергию для 1S-экситона, считая волновую функцию экситона как произведение электронной и дырочной функций.

В настоящей работе мы обобщаем результаты предыдущих авторов и выводим общее выражение обменной энергии для любых экситонных состояний.

---

\*Институт теоретической физики, Национальный центр научных исследований, Ханой, Вьетнам.

Используем систему единиц, в которой  $\hbar = c = 1$ .

Полный гамильтониан дырочно-электронной системы состоит из кинетической энергии  $\mathcal{H}_{\text{kin}}$  и потенциальной энергии  $\mathcal{H}_{\text{int}}$

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_{\text{exch}}, \quad (1)$$

где  $\mathcal{H}_c$  — прямое кулоновское дырочно-электронное взаимодействие,  $\mathcal{H}_{\text{exch}}$  — их обменное взаимодействие. Уравнение Шредингера с гамильтонианом  $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_c$  решено в [1], в результате получены энергетические уровни и соответствующие волновые функции. Здесь мы изучим эффект обменного взаимодействия на структуру экситонного спектра.

Матричный элемент обменной энергии имеет вид:

$$\begin{aligned} \epsilon_{N'N} = & \frac{1}{V} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \phi_N(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) S_{\sigma}(\vec{r}_1) P_M(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \times \\ & \times P_M(\vec{r}_1) S_{\sigma'}(\vec{r}_2) \phi_N(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  — координаты электрона и дырки,  $\sigma$  и  $\sigma'$  — спин электрона ( $\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$ ),  $M$  и  $M'$  — проекции момента дырки ( $M, M' = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$ ),  $N = \{n, \ell, m\}$ .  $\phi_N(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  — водородоподобная функция экситона, которая разделяется на радиальную и сферическую функции:

$$\phi_N(\vec{r}) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad (3)$$

$S_{\sigma}(\vec{r})$  и  $P_M(\vec{r})$  соответственно представляют собой векторные состояния электрона и дырки, которые можно написать в виде:

$$S_{\sigma}(\vec{r}) = f_S(r) \left| \frac{1}{2}, \sigma \right\rangle, \quad (4)$$

$$P_M(\vec{r}) = f_P(r) \left| \frac{3}{2}, M \right\rangle,$$

где  $f_S(r)$  и  $f_P(r)$  — радиальные функции, а  $|\frac{1}{2}, \sigma\rangle$  и  $|\frac{3}{2}, M\rangle$  — спиновые функции электрона и дырки соответственно.

Вводя обозначения

$$I_{n\ell k}(p) = \int R_{n\ell}^2(r) j_k(pr) \frac{1}{r} r^2 dr,$$

$$g_t(k) = \int_{\Omega} f_P(r) f_S(r) j_t(kr) r^2 dr, \quad (5)$$

$$J_{n\ell}(k) = \int I_{n\ell k}(p) g_1^2(p) p^2 dp,$$

$$\eta_{\sigma', M} = (-1)^{1+\sigma'-M} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \\ -\sigma'+M' & \sigma' & -M \end{pmatrix},$$

где  $j_k(p)$  — функция Бесселя, и проводя стандартные вычисления, мы получим следующее общее выражение для матричных элементов обменной энергии экситона:

$$\begin{aligned} \epsilon_{NN} = & \frac{24}{V\pi} (-1)^{1-\sigma'+\ell-m'} (2\ell+1) \sum_{k,q} (i^k)^* (-1)^{k-q} (2k+1) J_{n\ell}(k) \eta_{\sigma', M} \eta_{\sigma M}^* \times \\ & \times \begin{pmatrix} \ell & \ell & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & \ell & k \\ -m' & m & -q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & k \\ \sigma'-M & -\sigma+M & q \end{pmatrix} \quad (6) \end{aligned}$$

В полупроводнике с прямой запрещенной зоной и валентной зоной, четырехкратно-вырожденной в центре  $\Gamma$  зоны Бриллюэна, без обменного взаимодействия неподвижный  $nS$ -экситон имеет только один уровень энергии, который расщепляется на два уровня энергии тяжелого и легкого экситонов, когда экситон движется. В<sup>1,9/</sup> авторы получили волновые функции  $nS$ -экситона в любом порядке теории возмущения. Функция нулевого порядка имеет вид произведения электронных и дырочных функций  $|S, \sigma\rangle | \frac{3}{2}, M\rangle$ . Сферические и кубические поправки (с параметрами возмущения  $\kappa$  и  $\theta$ ) первого порядка смешивают состояния легкого и тяжелого экситонов. Здесь мы вычисляем обменную энергию на базисе волновых функций нулевого и первого порядков.

Составляем матрицу обменной энергии для  $nS$ -состояния. После диагонализации этой матрицы получим следующий результат: неподвижный  $nS$ -экситон расщепляется на два уровня со значениями обменной энергии  $\epsilon_{ex} = 0$  ( $J = 2$ ) и  $\epsilon_{ex} = -\frac{4}{3}\lambda$  ( $J = 1$ ), а два уровня  $E_H$  и  $E_L$  движущегося экситона расщепляются на пять уровней:

$$\begin{aligned} E_H, E_L, E_L - \frac{4}{3}\lambda, \frac{1}{2} \left\{ -\frac{4}{3}\lambda + E_H + E_L \pm \right. \\ \left. \pm \left[ \left( \frac{4}{3}\lambda - E_H + E_L \right)^2 + \frac{4}{3} (E_H - E_L) \lambda \right]^{1/2} \right\} \quad (7) \end{aligned}$$

с соответственными функциями  $|J, J_z\rangle$  :

$|2, \pm 2\rangle, |2, 0\rangle, |1, 0\rangle, |2, \pm 1\rangle, |1, \pm 1\rangle,$

где  $\lambda$  — некоторый обменный параметр.

С учетом поправок функций первого порядка все вырождения неподвижного и движущегося  $nS$ -экситонов расщепляются.

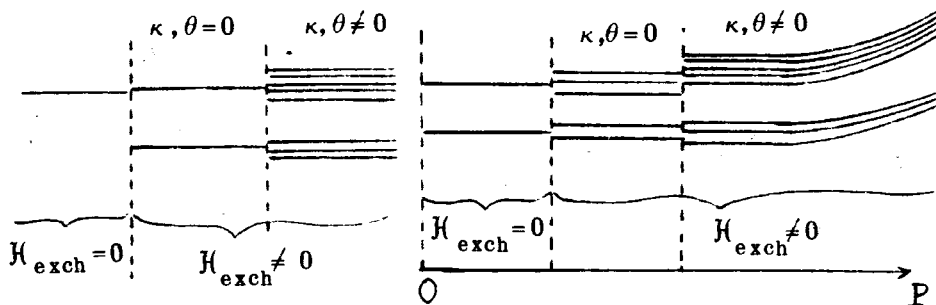


Рис. 1. Схема расщепления энергетических уровней  $nS$ -экситона: а) — неподвижный  $nS$ -экситон, б) — движущийся  $nS$ -экситон.

$nP$ -экситон имеет 24 состояния, характеризующихся следующими квантовыми числами:

$$j = \frac{3}{2}, \quad M = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$$

$$l = 1, \quad m = 0, \pm 1$$

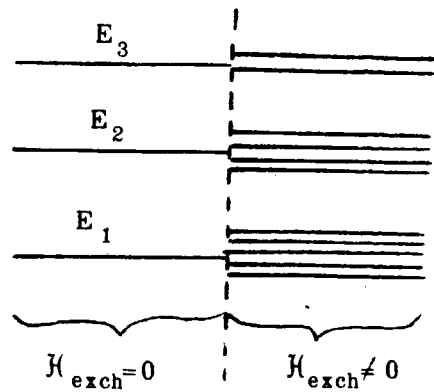
$$s = \frac{1}{2}, \quad \sigma = \pm \frac{1}{2}.$$

Без обменного взаимодействия неподвижный  $nP$ -экситон имеет три уровня энергии  $E_1 (F = \frac{5}{2})$ ,  $E_2 (F = \frac{3}{2})$  и  $E_3 (F = \frac{1}{2})$ , здесь  $\vec{F} = \vec{j} + \vec{l}$ . С учетом обменного взаимодействия после диагонализации матрицы  $H_0 + H_{\text{exch}}$  видим, что  $nP$ -экситон расщепляется на 12 уровней с соответственными функциями, являющимися комбинациями функций  $|J, J_z(F, F_z)\rangle$ , где  $\vec{J} = \vec{s} + \vec{F}$ .

Итак, в этой работе мы получили схемы расщепления энергетических уровней экситона в состояниях  $\{nS\}$  и  $\{nP\}$  из-за обменного взаимодействия.

Рис. 2. Схема расщепления уровней энергии  $nR$ -экситона.

Авторы выражают благодарность академику Нгуену Ван Хьеу за постановку задачи и помощь при выполнении этой работы.



### Л и т е р а т у р а

1. Hoang Ngoc Cam, Nguyen Van Hieu, Nguyen Ai Viet. — Ann.Phys., 1985, 164, 172.
2. Cho K. Exciton, Springer-Verlag, Berlin — Heidelberg — New York, 1979.
3. Skettrup T., Balslev I. — phys.stat.sol., 1970, 40, 93.
4. Cho K., Suga S., Dreybroat W., Willmann F. — Phys.Rev., 1975, B11, No.4, 1512.
5. Suffczynski M., Swierkowski L., Wardzynski W. — Phys.C, Solid State Phys., 1975, 8, L52.
6. Kiselev V.A., Zhilics A.G. — Sov.Phys. — Solid State, 1972, 13, No.8, 2008.
7. Suffczynski M., Swierkowski L. — Optics Com., 1976, 17, 184.
8. Fishman G. — Ann.Phys., (Paris), 1980, 5, 5.

Рукопись поступила 13 апреля 1988 года.