

О волновых функциях горячих экситонов в полупроводниках с вырожденными зонами

© А.В. Ефанов[¶]

Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, 630090 Новосибирск, Россия

(Получена 12 июля 2007 г. Принята к печати 10 октября 2007 г.)

Рассмотрены горячие экситоны в прямозонных кубических полупроводниках с вырожденной валентной зоной. Найдены поправки к модели независимых экситонных ветвей по малому параметру \hbar/Ka_B , где K — импульс экситона, a_B — боровский радиус. Рассматриваемые поправки обусловлены внутренними движениями частиц в экситоне. Показано, что они приводят к смешиванию состояний легких и тяжелых дырок в экситонной волновой функции. Вследствие этого становятся разрешенными процессы рассеяния экситонов на нулевой угол с переходами между разными экситонными ветвями. В работе рассмотрена область кинетических энергий, не превышающих величину спин-орбитального расщепления в валентной зоне. Закон дисперсии дырок описан в сферической модели Кона–Латтинджера (матрица 4×4).

PACS: 71.35.Cc, 78.66.Fd

1. Введение

В алмазоподобных полупроводниках потолок валентной зоны является четырехкратно вырожденным. Соответственно экситонная дисперсия в центре зоны Бриллюэна также оказывается вырожденной. В связи с этим в теории экситонов Ванье существуют известные трудности с описанием закона дисперсии экситонов. В случае матричного гамильтониана валентной зоны классическое преобразование к системе центра масс не приводит к разделению поступательного и относительного движений. Для получения экситонной дисперсии и волновых функций обычно используют различные приближения по величине импульса экситона.

При малом импульсе экситона \mathbf{K} применяется теория возмущений по отношению к состоянию экситона с нулевым импульсом [1,2]. В теории предполагается выполнение условия $Ka_B \ll 1$, где a_B — боровский радиус экситона (используется система единиц с постоянной Планка $\hbar = 1$). В этом приближении получаются аналитические выражения для закона дисперсии и волновых функций. Численными методами удается описать область энергий порядка нескольких единиц боровской энергии E_B как в объемных полупроводниках [3], так и в квантовых ямах [4].

При большом импульсе, $K \gg a_B^{-1}$, задача оказывается более простой. В этом случае разность энергий между экситонными ветвями существенно превышает энергию E_B . Вследствие этого экситон представляет собой связанное состояние частиц с обычным квадратичным законом дисперсии. Поступательное и внутреннее движения экситона оказываются независимыми друг от друга. В лабораторной системе отсчета направления векторов импульсов электрона и дырки приблизительно совпадают по направлению с импульсом экситона \mathbf{K} . Волновая функция экситона характеризуется определенным значением проекции момента дырки на импульс экситона [5].

Цель данной работы состоит в нахождении поправки к высокоэнергетической асимптотике по параметру $p/K \ll 1$, где p — типичный импульс частиц в системе центра масс. Учет таких поправок позволяет описать промежуточную область между указанными выше асимптотиками. Рассмотрение проводится для случая алмазоподобных полупроводников с достаточно большим спин-орбитальным расщеплением в валентной зоне Δ . Поправки вычисляются в области кинетических энергий экситонов $E_B \ll E \ll \Delta$. Гамильтониан валентной зоны записывается в сферической модели Кона–Латтинджера (матрица размерности 4×4) [6].

Для нахождения промежуточной асимптотики в качестве нулевого приближения берутся состояния с определенным значением проекции момента дырки на направление движения экситона. В таких состояниях ортогональность полных волновых функций экситонов с заданным импульсом обеспечивается целиком за счет дырочной компоненты функции. Ортогональность нарушается при учете неопределенности импульса дырки в экситоне. Вектор импульса дырки оказывается не параллельным вектору \mathbf{K} . Это приводит к смешиванию состояний разных ветвей дырок в волновой функции экситона.

Формальной причиной для рассматриваемого смешивания является наличие недиагональных по проекциям момента дырки матричных элементов оператора кинетической энергии. В работе проведено устранение соответствующих недиагональных вкладов с помощью унитарного преобразования гамильтониана. Выведен однозонный эффективный гамильтониан. По форме такой гамильтониан совпадает с обычным гамильтонианом электронно-дырочной пары с квадратичным законом дисперсии. Преобразованные волновые функции экситона приобретают вклады от различных дырочных зон. Величины таких вкладов являются малыми по параметру $(Ka_B)^{-1} \ll 1$. В работе показано, что роль таких вкладов может быть существенной в процессах рассеяния экситонов с низкими кинетическими энергиями.

[¶] E-mail: efanov@isp.nsc.ru

План статьи следующий. В разд. 2 выписан гамильтониан системы. В разд. 3 выведен однозонный эффективный гамильтониан экситона. В разд. 4 выписан явный вид волновых функций основных состояний легкого и тяжелого экситонов.

2. Гамильтониан экситона

В работе рассматривается экситонный гамильтониан кубического полупроводника с четырехкратно вырожденным потолком валентной зоны. Вклад спин-орбитально отщепленной валентной зоны не учитывается. Зона проводимости считается двукратно вырожденной по электронному спину. Малое обменное взаимодействие в экситоне не учитывается. Для простоты рассматривается сферическая модель зонного спектра.

В методе эффективной массы гамильтониан экситона имеет вид

$$H_{ex} = H_e - H_h + U(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h), \quad (1)$$

где H_e и H_h — кинетические энергии электрона и дырки, \mathbf{r}_e и \mathbf{r}_h — их координаты, $U(\mathbf{r}) = -e^2/\epsilon r$ — энергия кулоновского взаимодействия, ϵ — диэлектрическая проницаемость. Экситонная волновая функция $\Psi_{\sigma m}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ имеет электронные спиновые индексы $\sigma = \pm 1/2$ и дырочные индексы $m = \pm 1/2, \pm 3/2$ для момента $3/2$.

Гамильтонианы свободных носителей даются выражениями

$$H_e = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m^*},$$

$$-H_h = \frac{1}{2m_0} \left\{ \gamma_1 \mathbf{p}_h^2 - 2\bar{\gamma} \left[(\mathbf{j}\mathbf{p}_h)^2 - \frac{5}{4} \mathbf{p}_h^2 \right] \right\}. \quad (2)$$

В этих выражениях \mathbf{j} — оператор момента дырки $j = 3/2$, m_0 — масса свободного электрона, m^* — масса электрона в зоне проводимости. Величины $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — параметры, введенные Латтинджером [6]; параметр $\bar{\gamma}$ является некоторым усредненным значением указанных параметров. В сферической модели обычно выбирают $\bar{\gamma} = \gamma_2$ или $\bar{\gamma} = (2\gamma_2 + 3\gamma_3)/5$ [7].

Введем новые координаты:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h, \quad \mathbf{R} = \alpha \mathbf{r}_e + \beta \mathbf{r}_h, \quad (3)$$

где α и β являются числами. Переменная \mathbf{r} здесь является координатой относительного движения частиц. Переменная \mathbf{R} имеет смысл координаты центра масс. В новых переменных операторы импульсов частиц принимают вид

$$\mathbf{p}_e = -i\nabla_{\mathbf{r}_e} = -i(\alpha\nabla_{\mathbf{R}} + \nabla_{\mathbf{r}}),$$

$$\mathbf{p}_h = -i\nabla_{\mathbf{r}_h} = -i(\beta\nabla_{\mathbf{R}} - \nabla_{\mathbf{r}}). \quad (4)$$

Необходимым условием того, чтобы координата центра масс \mathbf{R} и полный импульс экситона $\mathbf{P} = \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_h$ были канонически-сопряженными переменными, является равенство $\alpha + \beta = 1$. При этом условии оператор импульса экситона принимает вид $\mathbf{P} = -i(\nabla_{\mathbf{r}_e} + \nabla_{\mathbf{r}_h})$

$= -i(\alpha + \beta)\nabla_{\mathbf{R}} = -i\nabla_{\mathbf{R}}$. Соответственно формулы (4) переписываются в виде

$$\mathbf{p}_e = \alpha\mathbf{P} + \mathbf{p},$$

$$\mathbf{p}_h = \beta\mathbf{P} - \mathbf{p}, \quad (5)$$

где $\mathbf{p} = -i\nabla_{\mathbf{r}}$ — оператор импульса для относительного движения частиц в экситоне.

Ввиду того что импульс экситона является интегралом движения, волновая функция экситона $\Psi_{\sigma m}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ является собственной функцией оператора импульса \mathbf{P} :

$$\Psi_{\sigma m}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi_{\sigma m \mathbf{K}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}}, \quad (6)$$

где \mathbf{K} — собственное значение оператора импульса. Подстановка функции $\Psi_{\sigma m}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ в уравнение Шредингера с гамильтонианом (1) дает уравнение для волновой функции $\psi_{\sigma m \mathbf{K}}(\mathbf{r})$. Соответствующий ей гамильтониан H имеет вид

$$H = \frac{1}{2m_0} \left\{ \gamma(\alpha\mathbf{K} + \mathbf{p})^2 + \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\bar{\gamma} \right) (\beta\mathbf{K} - \mathbf{p})^2 - 2\bar{\gamma} [(\beta\mathbf{K} - \mathbf{p})\mathbf{j}]^2 \right\} + U(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где $\gamma = m_0/m^*$. Электронный спиновый индекс в волновой функции $\psi_{\sigma m \mathbf{K}}(\mathbf{r})$ может быть опущен, так как обменное взаимодействие между электроном и дыркой не учитывается.

Из-за сложного вида оператора кинетической энергии в гамильтониане (7) не удастся полностью разделить относительное и поступательное движения электронно-дырочной пары. Для преодоления этих трудностей применяют теорию возмущений по импульсу относительного движения частиц \mathbf{p} [1,2]. В настоящей работе она применяется по отношению к состояниям свободных частиц с импульсами $K \gg a_B^{-1}$.

Разложение исходного гамильтониана (7) в степенной ряд по импульсу \mathbf{p} имеет вид

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + U(\mathbf{r}), \quad (8)$$

где

$$H_0 = \frac{1}{2m_0} \left\{ \left[\gamma\alpha^2 + \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\bar{\gamma} \right) \beta^2 \right] \mathbf{K}^2 - 2\bar{\gamma}\beta^2 (\mathbf{K}\mathbf{j})^2 \right\}, \quad (9)$$

$$H_1 = \frac{1}{m_0} \left\{ \left[\gamma\alpha - \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\bar{\gamma} \right) \beta \right] \mathbf{K}\mathbf{p} + \bar{\gamma}\beta [(\mathbf{K}\mathbf{j})(\mathbf{p}\mathbf{j}) + (\mathbf{p}\mathbf{j})(\mathbf{K}\mathbf{j})] \right\},$$

$$H_2 = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\gamma + \gamma_1 + \frac{5}{2}\bar{\gamma} \right) \mathbf{p}^2 - 2\bar{\gamma}(\mathbf{p}\mathbf{j})^2 \right].$$

Гамильтониан H_0 в формуле (9) далее рассматривается в качестве гамильтониана нулевого приближения, дающего закон дисперсии экситона при высоких энергиях. Остальные слагаемые учитываются как поправки. В силу оценки $p \sim a_B^{-1}$ указанные слагаемые пропорциональны степеням параметра $(Ka_B)^{-1}$. Потенциал U является величиной 2-го порядка, так как в кулоновском поле ки-

нетическая и потенциальная энергии имеют одинаковый порядок.

Для проведения дальнейших преобразований в разд. 3 перепишем уравнения в импульсном представлении. Разложим волновую функцию $\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ в ряд Фурье:

$$\psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} c_{m\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (10)$$

где V — объем кристалла. В этом выражении предполагается, что на границе кристалла выполняются периодические граничные условия на волновую функцию. Суммирование ведется по дискретному набору волновых векторов \mathbf{k} . Подстановка выражения (10) в уравнение Шредингера с гамильтонианом (8) приводит к уравнению для коэффициентов $c_{m\mathbf{k}}$:

$$\sum_{m'} \langle jm | H_0(\mathbf{k}) + H_1(\mathbf{k}) + H_2(\mathbf{k}) | jm' \rangle c_{m'\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} c_{m'\mathbf{k}'} = E c_{m\mathbf{k}}. \quad (11)$$

Здесь для собственных функций оператора j_z используется обозначение $|jm\rangle$. Суммирование ведется по всем допустимым значениям векторов \mathbf{k}' и проекциям момента дырки m' на ось z . Фурье-образ потенциала $U_{\mathbf{k}}$ определяется формулой

$$U_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V} \int d^3r U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (12)$$

3. Эффективный гамильтониан

Выведем однозонный эффективный гамильтониан экситона. Для этого представим гамильтониан (8) в виде суммы диагональных и недиагональных по номерам m и m' слагаемых:

$$H_{m\mathbf{k}, m'\mathbf{k}'} = H_{m\mathbf{k}, m'\mathbf{k}'}^{(d)} + H_{m\mathbf{k}, m'\mathbf{k}'}^{(nd)}. \quad (13)$$

Диагональная часть гамильтониана дается выражением

$$H_{m\mathbf{k}, m'\mathbf{k}'}^{(d)} = \delta_{mm'} \{ \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} E_m(\mathbf{k}) + U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \}, \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} E_m(\mathbf{k}) = & \frac{1}{2m_0} \left\{ \left[\gamma \alpha^2 + \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \bar{\gamma} \right) \beta^2 - 2\bar{\gamma} \beta^2 m^2 \right] K^2 \right. \\ & + 2 \left[\gamma \alpha - \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \bar{\gamma} \right) \beta + 2\bar{\gamma} \beta m^2 \right] K k_z \\ & + \left(\gamma + \gamma_1 - \frac{5}{2} \bar{\gamma} + \bar{\gamma} m^2 \right) (k_x^2 + k_y^2) \\ & \left. + \left(\gamma + \gamma_1 + \frac{5}{2} \bar{\gamma} - 2\bar{\gamma} m^2 \right) k_z^2 \right\}. \quad (15) \end{aligned}$$

Слагаемое $E_m(\mathbf{k})$ в выражении (14) играет роль кинетической энергии относительного движения частиц

в экситоне. Легким дыркам (l) соответствуют проекции момента $|m| = 1/2$, тяжелым дыркам (h) — числа $|m| = 3/2$.

Недиагональный матричный элемент $H_{m\mathbf{k}, m'\mathbf{k}'}^{(nd)}$ определяется гамильтонианами H_1 и H_2 . В нем достаточно удержать только линейные по \mathbf{k} члены из оператора H_1 :

$$\begin{aligned} H_{m\mathbf{k}, m'\mathbf{k}'}^{(nd)} = & \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{2m_0} \bar{\gamma} \beta K (k_+ \langle jm | j_- | jm' \rangle \\ & + k_- \langle jm | j_+ | jm' \rangle) (m + m'), \quad (16) \end{aligned}$$

где $k_{\pm} = k_x \pm i k_y$, $j_{\pm} = j_x \pm i j_y$. Эти матричные элементы связывают состояния дырок с разностями номеров $|\Delta m| = |m - m'| = 1$. Такие переходы соответствуют разным дырочным зонам, так как матричные элементы между состояниями $m = \pm 1/2$ тождественно равны нулю. Квадратичные по импульсу и недиагональные по номерам m члены гамильтониана H_2 могут быть опущены. Во втором порядке теории возмущений такие члены приводят к появлению поправок четвертого порядка по \mathbf{k} в гамильтониане экситона.

Рассмотрим подробнее выражение (15) для кинетической энергии. Из-за наличия линейных по \mathbf{k} членов минимумы энергий $E_m(\mathbf{k})$ при фиксированном полном импульсе экситона \mathbf{K} находятся при импульсах $\mathbf{k}^0 \neq 0$. Выбрав надлежащим образом параметры α и β , можно устранить линейные члены в кинетической энергии относительного движения частиц одной выделенной экситонной зоны. Для подзоны с дыркой определенного сорта, $s = l$ или $s = h$, линейные члены исчезают при значениях параметров

$$\alpha = \frac{m^*}{m^* + m_s}, \quad \beta = \frac{m_s}{m^* + m_s}, \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_l} &= \frac{1}{m_0} (\gamma_1 + 2\bar{\gamma}), \\ \frac{1}{m_h} &= \frac{1}{m_0} (\gamma_1 - 2\bar{\gamma}). \quad (18) \end{aligned}$$

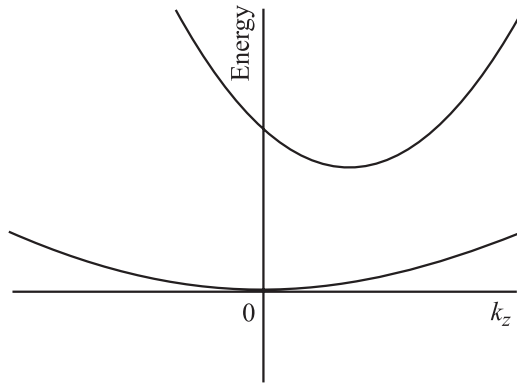
Легко убедиться, что такой выбор дает выражение для координаты центра масс \mathbf{R} в формуле (3), совпадающее с формулами классической механики. Для зоны с номером $t \neq s$ минимум кинетической энергии находится при импульсе

$$\mathbf{k}_t^0 = \frac{\beta/m_t - \alpha/m^*}{1/m_t + 1/m^*} \mathbf{K}. \quad (19)$$

Величина этого импульса оказывается сравнимой с импульсом экситона \mathbf{K} .

Зависимость $E_m(k_z)$ при $k_x = k_y = 0$ полностью совпадает с формулой для кинетической энергии системы из электрона и дырки сорта m в системе центра масс. Так, например, для электрона и тяжелой дырки импульсы даются формулами (5)

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_e &= \frac{m^*}{m^* + m_h} \mathbf{K} + \mathbf{k}, \\ \mathbf{p}_h &= \frac{m_h}{m^* + m_h} \mathbf{K} - \mathbf{k}. \quad (20) \end{aligned}$$



Зависимости кинетических энергий частиц $E_{3/2}(k_z)$ и $E_{1/2}(k_z)$ при $k_x = k_y = 0$.

Соответственно кинетическая энергия тяжелой зоны имеет вид

$$E_{3/2}(k_z) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{m^* + m_h} K^2 + \left(\frac{1}{m^*} + \frac{1}{m_h} \right) k_z^2 \right]. \quad (21)$$

Для легкой зоны выбор импульсов (20) не соответствует переходу в систему центра масс. По этой причине кинетическая энергия содержит линейные члены:

$$E_{1/2}(k_z) = \frac{1}{2} \left[\frac{m^* + m_h^2/m_l}{(m^* + m_h)^2} K^2 + \left(\frac{1}{m^*} + \frac{1}{m_l} \right) k_z^2 - 2 \frac{m_h/m_l - 1}{m^* + m_h} K k_z \right]. \quad (22)$$

На рисунке изображен примерный ход соответствующих зависимостей. При $k_x \neq 0$ и $k_y \neq 0$ зависимости кинетических энергий от поперечных импульсов остаются квадратичными (см. (15)). Однако они характеризуются массами, не соответствующими классическим формулам типа (21) и (22).

Зафиксировав параметры преобразования, перейдем к нахождению экситонных уровней вблизи $\mathbf{k} = 0$. В рассматриваемой задаче оказывается применимым подход, аналогичный методу эффективной массы [7]. В этом методе двухзонная задача для частицы в кулоновском потенциале стандартным образом сводится к однозонной, если речь идет об уровнях энергии, близких к определенному минимуму. Для этого выполняется необходимое условие — энергетическое расстояние между экситонными зонами (15) при $\mathbf{k} = 0$ существенно превышает боровскую энергию: $|E_s(0) - E_r(0)| \gg E_B$. Соответственно применимость метода эффективной массы обеспечивается малым параметром вида $1/Ka_B$.

Подход в духе \mathbf{kr} -метода нуждается в одном существенном уточнении. Как можно видеть из рисунка, часть экситонных состояний, построенных из импульсов вблизи минимума $\mathbf{k} = 0$, попадает в область энергий другой ветви экситонов. Это означает, что существуют процессы переходов из выделенной экситонной ветви в состояния другой ветви. Это обстоятельство отмечалось

ранее в работе [1]. Можно ожидать, что указанный эффект будет относительно слабым. Дело в том, что величина импульса бокового экстремума $k^0 \sim K$ велика по сравнению с импульсами частиц в экситоне. Соответственно фурье-гармоника кулоновского потенциала (12) с таким импульсом мала по сравнению с боровской энергией. По этой причине должна быть также мала амплитуда переходов между ветвями спектра.

Приведение задачи к однозонному гамильтониану производится с помощью канонического преобразования вида [7]

$$H' = e^{-S} H e^S \quad (23)$$

с антиунитарной матрицей S . Это преобразование устраняет недиагональные элементы (16). В новом представлении волновая функция ψ' выражается через функции ψ с помощью равенства

$$\psi' = e^{-S} \psi. \quad (24)$$

Явное выражение для матрицы S находится путем разложения ее в ряд по степеням недиагонального гамильтониана $H^{(nd)}$ (16):

$$S = S_1 + S_2 + S_3 + \dots \quad (25)$$

Матрицы S_n подбираются таким образом, чтобы устранить с заданной точностью недиагональные элементы.

Обозначим для краткости индексами 1 и 2 состояния с проекциями моментов $|m| = 1/2$ или $|m| = 3/2$. Для определенности будем рассматривать ветвь спектра с номером 1. Параметры α и β для этой ветви должны быть подобраны таким образом, чтобы минимум кинетической энергии находился при $\mathbf{k} = 0$. В низшем приближении по недиагональным матричным элементам $H_{21}(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ эффективный гамильтониан получается в виде

$$H'_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[E_1(\mathbf{k}) - \frac{H_{12}(\mathbf{k})H_{21}(\mathbf{k})}{E_2^0 - E_1^0} \right] + U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}, \quad (26)$$

где $E_1^0 = E_1(0)$ и $E_2^0 = E_2(0)$ — значения кинетических энергий (15) при $\mathbf{k} = 0$. Данный гамильтониан действует на волновую функцию $c_1(\mathbf{k})$ только одной зоны. При этом полная (многозонная) волновая функция содержит добавку от волновой функции другой зоны вида

$$c_2(\mathbf{k}) = \frac{H_{21}(\mathbf{k})c_1(\mathbf{k})}{E_1^0 - E_2^0}. \quad (27)$$

В координатном представлении эффективный гамильтониан экситона сорта $s = l, h$ записывается в виде суммы кинетической энергии экситона как целого, кинетической энергии относительного движения частиц и потенциальной энергии:

$$H'_s = \frac{\mathbf{K}^2}{2M_s} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu_s} + U(\mathbf{r}), \quad (28)$$

где $M_s = m^* + m_s$ — полная масса экситона, $\mu_s = m^*m_s/(m^* + m_s)$ — приведенная масса. Массы дырок m_s даются формулами (18). Полученное выражение полностью совпадает с гамильтонианом, используемым в модели с независимыми экситонными ветвями.

4. Волновые функции

Напишем явный вид поправок к волновым функциям. Предварительно заметим, что недиагональные матричные элементы в формуле (16) содержат только поперечные по отношению к вектору \mathbf{K} составляющие импульсов частиц в экситоне \mathbf{k} . Это свойство имеет очевидный физический смысл. Именно за счет поперечных составляющих импульсов направление импульса дырки (5) в лабораторной системе отсчета не совпадает с направлением импульса экситона $\mathbf{K} \parallel z$. По этой причине дырочная часть экситонной функции содержит вклады различных проекций момента дырки.

Волновая функция тяжелого экситона, описываемая эффективным гамильтонианом (28), имеет вид $\psi_h^0 = c_h^0(\mathbf{k})|3/2, 3/2\rangle$. Формула (27) дает для исходной многозонной волновой функции сумму

$$\psi_h = c_h^1(\mathbf{k})|3/2, 1/2\rangle + c_h^0(\mathbf{k})|3/2, 3/2\rangle, \quad (29)$$

в которой „легкая“ компонента $c_h^1(\mathbf{k})$ равна

$$c_h^1(\mathbf{k}) = -\frac{\sqrt{3}}{2} \left(1 + \frac{m^*}{m_h}\right) \frac{k_+}{K} c_h^0(\mathbf{k}). \quad (30)$$

Первый член в (29) получается в результате действия оператора j_- из гамильтониана (16) на дырочную волновую функцию $|3/2, 3/2\rangle$.

Аналогично, волновой функции легкого экситона $\psi_l^0 = c_l^0(\mathbf{k})|3/2, 1/2\rangle$ в эффективном гамильтониане соответствует многозонная функция

$$\psi_l = c_l^0|3/2, 1/2\rangle + c_l^1(\mathbf{k})|3/2, 3/2\rangle. \quad (31)$$

Добавка $|c_l^1| \ll |c_l^0|$ к легкой компоненте равна

$$c_l^1(\mathbf{k}) = \frac{\sqrt{3}}{2} \left(1 + \frac{m^*}{m_l}\right) \frac{k_-}{K} c_l^0(\mathbf{k}). \quad (32)$$

Волновые функции экситонов с отрицательными проекциями момента $m = -1/2, -3/2$ получаются из формул (30) и (32) путем замены импульсов k_{\pm} на k_{\mp} .

Отметим, что оба слагаемых в формулах типа (29) и (31) имеют одно и то же значение проекции полного момента. Это свойство является общим, так как в силу структуры матричного элемента (16) проекция момента сохраняется. Действительно, в координатном представлении множитель k_{\pm} преобразуется в оператор $p_{\pm} = p_x \pm p_y$. Последний повышает (понижает) проекцию углового момента L_z в координатной части волновой функции. В свою очередь оператор j_{\mp} понижает (повышает) проекцию момента дырки. В результате проекция момента $L_z + j_z$ не меняется. В то же время значения углового момента L для функций c_s^0 и c_s^1 соответствующего сорта экситона s могут быть разными. Оператор p_{\pm} вызывает переходы $L \rightarrow L, L \pm 1$ (при $L \neq 0$).

Рассмотрим в качестве примера волновую функцию основного $1s$ -состояния тяжелого экситона. Эффективный гамильтониан дает водородоподобную функцию

$$c_h^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_h^3}} e^{-r/a_h}, \quad (33)$$

где $a_h = \epsilon/\mu_h e^2$ — боровский радиус тяжелого экситона. Поправка $c_h^1(\mathbf{r})$ получается с помощью формулы (30). Действуя оператором $p_+ = p_x + ip_y$ на функцию $c_h^0(\mathbf{r})$, получаем выражение

$$c_h^1(\mathbf{r}) = -\frac{\sqrt{3}i}{2} \frac{1}{K a_h} \left(1 + \frac{m^*}{m_h}\right) \frac{1}{\sqrt{\pi a_h^3}} e^{-r/a_h} e^{i\varphi} \sin \vartheta, \quad (34)$$

где φ и ϑ — углы сферической системы координат с полярной осью z , параллельной вектору \mathbf{K} . Угловая зависимость здесь содержит пропорциональность сферической функции $Y_{11}(\vartheta, \varphi)$ для полного момента $L = 1$ и проекции момента $L_z = 1$.

Найденные поправки к волновым функциям проявляются в процессах рассеяния экситонов на нулевой угол с переходом между разными экситонными ветвями. Правила отбора для такого рассеяния определяются фактором вида $\langle \psi_l | \psi_h \rangle$. В модели независимых экситонных ветвей этот фактор точно равен нулю из-за ортогональности дырочных функций $|3/2, 1/2\rangle$ и $|3/2, 3/2\rangle$. Это свойство не зависит от номера возбужденного состояния экситона. С учетом поправок, даваемых формулами (29) и (31), фактор принимает вид

$$\langle \psi_l | \psi_h \rangle = \int d^3 r [c_l^{0*}(\mathbf{r}) c_h^1(\mathbf{r}) + c_l^{1*}(\mathbf{r}) c_h^0(\mathbf{r})]. \quad (35)$$

Из этого выражения следует, что переходы между основными $1s$ -состояниями разных ветвей экситонов по-прежнему остаются запрещенными. Это правило отбора непосредственно следует из угловой зависимости волновых функций (33) и (34). В то же время переходы, например, между $1s$ - и $2p$ -состояниями разных ветвей экситонов уже оказываются разрешенными. В общем случае правила отбора по угловому моменту определяются матричным элементом вида $\langle c_l^0 | p_{\pm} | c_h^0 \rangle$.

5. Заключение

В работе получены волновые функции и законы дисперсии экситонов в полупроводниках с вырожденными зонами при высоких кинетических энергиях. Показано, что в модели независимых экситонных ветвей существует смешивание волновых функций легких и тяжелых дырок. Такое смешивание обусловлено поправками на движение частиц в системе центра масс. Возможным проявлением этого эффекта является изменение правил отбора для переходов между разными ветвями

экситонов. Явление смешивания состояний приводит к снятию запрета на переходы с сохранением направления импульса экситона.

Данная работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 04-02-16774-а.

Список литературы

- [1] E.O. Kane. Phys. Rev. B, **11**, 3850 (1975).
- [2] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. ФТТ, **18**, 220 (1976).
- [3] M. Altarelli, N.O. Lipari. Phys. Rev. B, **15**, 4898 (1977).
- [4] A. Siarkos, E. Runge, R. Zimmermann. Phys. Rev. B, **61**, 10 854 (2000).
- [5] *Экситоны*, ред. Э.И. Рашба, М.Д. Стердж (М., Наука, 1985) гл. 6.
- [6] J.M. Luttinger. Phys. Rev., **102**, 1030 (1956).
- [7] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).

Редактор Л.В. Шаронова

About the wave functions of hot excitons in semiconductors with degenerate bands

A.V. Efanov

Institute of Semiconductors Physics,
Russian Academy of Sciences, Siberian Branch,
630090 Novosibirsk, Russia

Abstract Hot excitons are considered in direct band gap semiconductors with a degenerate valence band. The corrections to the model of decoupled exciton bands are derived over the parameter \hbar/Ka_B , where K is an exciton momentum, a_B is the Bohr radius. The corrections under consideration are due to moving of the particles in the exciton. It is shown that the corrections lead to a mixing of heavy and light hole states in the exciton wave function. As a result, the processes of exciton scattering at zero angle and with the transition between exciton branches became allowed. In the work, the range of the kinetic energies less than the spin-orbit splitting in the valence band has been considered. The hole dispersion has been described by means of the spherical model of the type of Kohn-Luttinger Hamiltonian (matrix 4×4).