

О ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЯХ НЕПРЯМОГО ЭКСИТОНА В ГЕРМАНИИ

В. Н. Мурзин

УДК 505.349 - 537.311.33

На основании теории групп рассмотрены типы симметрии основных и возбужденных состояний непрямого экситона в германии. Из сопоставления с ранее предложенной приближенной моделью непрямого экситона в германии сделаны выводы о том, какие переходы в спектре могут оказаться особенно важными.

Субмиллиметровая спектроскопия экситонов в диапазоне волн, соответствующем их энергии связи /1,2/, позволяет получить наиболее полную информацию об энергетическом спектре экситонов в таких полупроводниках, как германий. Предложенная с целью идентификации наблюдаемых линий экситонного поглощения приближенная модель непрямого экситона в Ge /1/ удовлетворительно описала в главных чертах экспериментальные результаты /1 - 3/. Однако, использованное в этой модели пренебрежение недиагональными членами в дырочном гамильтониане привело к искусственному повышению симметрии системы и к появлению дополнительного вырождения уровней.

В настоящей работе дан анализ энергетического спектра непрямого экситона в Ge, основанный на теории симметрии. В результате сопоставления с приближенной моделью /1/ высказаны соображения о том, какие из переходов могут оказаться наиболее важными в эксперименте.

Группой симметрии уравнения Шредингера для непрямого экситона в Ge

$$H_{ex} \Psi_{ex} = E \Psi_{ex}, \quad \text{где } H_{ex} = H_e(\vec{p}_e) - H_h(\vec{p}_h) - \frac{e^2}{x(\vec{r}_e - \vec{r}_h)} \quad (I)$$

является пересечение группы D_{2d} гамильтониана электрона $H_e(\vec{p}_e)$ вблизи дна зоны проводимости в германии и группы O_h гамильтониана дырки $H_h(\vec{p}_h)$ вблизи верха валентной зоны (e - заряд

электрона, κ - диэлектрическая проницаемость германия) /4 - 6/. Поскольку группа D_{3d} является подгруппой группы O_h , то она и определяет симметрию всего уравнения.

Экситонные волновые функции, определяемые в приближении эффективной массы собственные решения системы в группе D_{3d} , имеют вид

$$\psi_{ex} = \sum_{i=1}^4 \varphi_e(\vec{r}_e) \varphi_h^{(i)}(\vec{r}_h) F_{eh}^{(i)}(\vec{r}_e - \vec{r}_h), \quad (2)$$

где φ_e и φ_h - блоховские функции электрона и дырки вблизи экстремумов, i - индекс вырождения валентной зоны, F_{eh} - огибающая функция. Нижняя ветвь валентной зоны Ge, отщепленная в результате спин-орбитального взаимодействия, не учитывается. Количество и тип симметрии собственных состояний экситона определяются прямым произведением неприводимых представлений блоховских и огибающей функций /7/:

$$D(\psi_{ex}) = D(\varphi_e) \times D(\varphi_h) \times D(F_{eh}). \quad (3)$$

Как известно /4 - 6/, блоховские функции электрона вблизи минимума [III] в Ge преобразуются в группе D_{3d} по представлению L_4^* . Представление Γ_8^+ дырок в группе O_h оказывается приводимым в группе D_{3d} и распадается на два неприводимых представления L_6^+ и $(L_4^+ + L_5^+)$, что соответствует двум разным типам дырочных волновых функций. Функции L_4^+ и L_5^+ являются крамерсово-сопряженными относительно инверсии времени и объединены в одно "физически" неприводимое представление. Далее рассматриваются так называемые s- и p-состояния экситона, в том смысле, что огибающая функция F_{eh} для них записывается в виде ряда сферических гармоник атомных функций четности, начинающегося соответственно либо с функций s-типа ($l = 0$), либо с функций p-типа ($l = 1$). Такое разбиение состояний экситона оправдано особенностями задачи /4 - 6/, а сами собственные решения, с точки зрения их симметрии, могут быть легко определены по первому члену разложения, так как при приме-

*) Здесь и далее применяются обозначения, используемые в работах /9, 10/.

нени операций симметрии каждый из членов разложения Ψ_{ex} должен преобразовываться точно так же, как и полная функция $\Psi_{\text{ex}}/8/$.

Такой расчет по формуле (3) был выполнен, причем учитывалось, что атомные функции s- и p-типов в группе D_{3d} преобразуются по неприводимым представлениям $D(F^S) = L_1$ и $D(F^P) = L_2^-(z) + L_3^-(x, y)$ /7/. В скобках указаны базисные функции. В результате для экситонов, образованных дырками типа L_6^+ , получено, что основное (s-типа) и возбужденные (p-типа) состояния описываются представлениями:

$$D_{L_6}(\Psi_{\text{ex}}^S) = D(\varphi_e) \times D(\varphi_h^{L_6}) \times D(F^S) = L_1 \times L_6^+ \times L_1 = L_6^+$$

$$D_{L_6}(\Psi_{\text{ex}}^P) = D(\varphi_e) \times D(\varphi_h^{L_6}) \times D(F^P) = L_1 \times L_6^+ \times [L_2^-(z) + L_3^-(x, y)] =$$

$$= L_6^-(z) + L_6^-(x, y) + (L_4^- + L_5^-)(x, y), \quad (4)$$

а для экситона, образованного дырками типа $(L_4^+ + L_5^+)$ - представлениями:

$$D_{(L_4+L_5)}(\Psi_{\text{ex}}^S) = D(\varphi_e) \times D(\varphi_h^{L_4+L_5}) \times D(F^S) = L_1 \times (L_4^+ + L_5^+) \times L_1 = (L_4^+ + L_5^+)$$

$$D_{(L_4+L_5)}(\Psi_{\text{ex}}^P) = D(\varphi_e) \times D(\varphi_h^{L_4+L_5}) \times D(F^P) =$$

$$= L_1 \times (L_4^+ + L_5^+) \times [L_2^-(z) + L_3^-(x, y)] = (L_4^- + L_5^-)(z) + 2L_6^-(x, y). \quad (5)$$

Индексы базисных представлений гибких функции сохранены в соответствующих производных представлениях. Таким образом, видно, что каждый из этих двух типов экситонов имеет одно основное и три возбужденных (p-типа) состояний. Все уровни без учета спина электрона дважды вырождены (см. рис. 1).

Из соображений симметрии нетрудно показать, что s-p переходы между этими уровнями разрешены правилами отбора. Однако, в результате сопоставления с приближенной моделью /1/ можно сделать некоторые выводы о том, какие из этих переходов могут оказаться в эксперименте наиболее важными. Согласно приближенной модели уравнение Шредингера для непрямого экситона в Ge распадается на

а уравнения, каждое из которых определяется своим типом дырок эффективными поперечной и продольной массами: $m_{1h}^T = m_0/(\gamma_1 - \gamma_3)$, $m_{2h}^T = m_0/(\gamma_1 + 2\gamma_3)$ и $m_{2h}^L = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma_3)$.

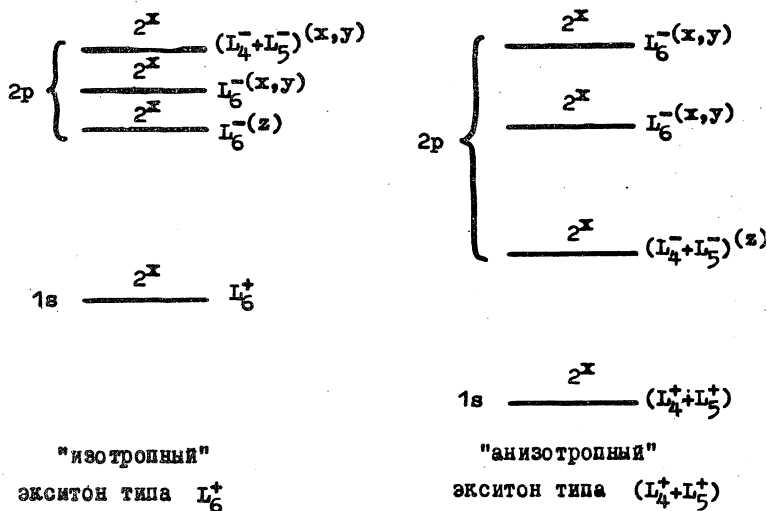


Рис. I

и двум уравнениям соответствует два набора уровней для двух типов экситонов, условно названных "изотропным" и "анизотропным", которые различаются разными трансляционными и приведенными массами м. табл. I) /I, II/. Поскольку это приближение с точки зрения ориентации симметрии эквивалентно тому, что блоховским функциям для дырок приписывается более высокая симметрия типа L_1 , такая же, как у электронов, то нетрудно установить соответствие между уровнями $2p_1$ и $2p_1^{\pm 1}$ приближенной модели /I/ и возбужденными уровнями, соответственно, с индексами (z) и (x, y) настоящего анализа (см. выражения (4) и (5)). Видно, что уровни $2p_1^{\pm 1}$ приближенной модели оказываются дублетно расщепленными. Естественно полагать, что переходы на возбужденные состояния, соответствующие уровням типа $2p_1^{\pm 1}$, как и в случае мелких донорных примесей, должны быть наиболее интенсивными.

Наконец, можно высказать еще одно соображение, связанное с тем, что "изотропный" и "анизотропный" экситоны имеют различные транслационные массы, т.е. характеризуются разной диспер-

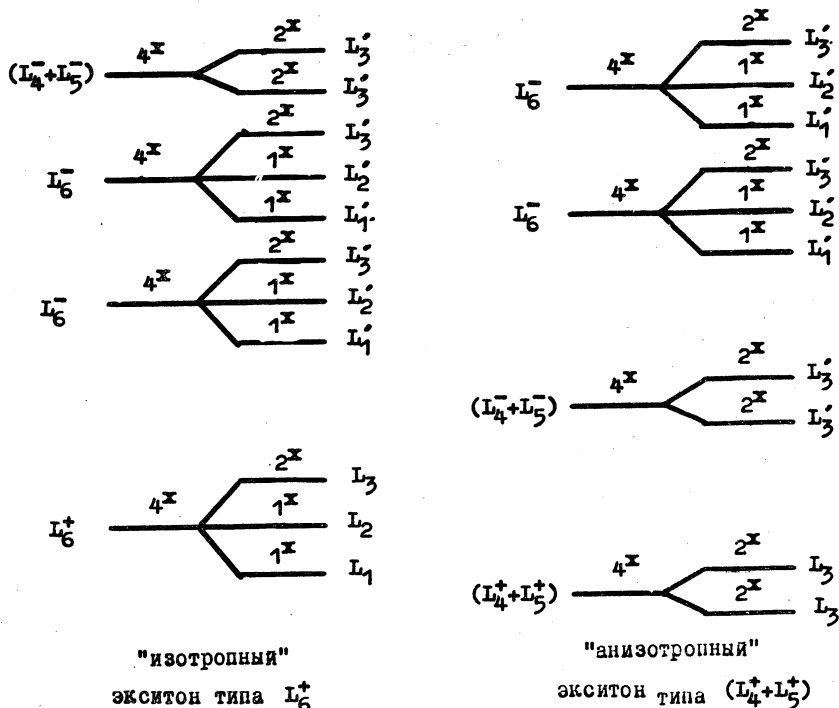


Рис. 2

сий $E(\vec{p})$ энергетических зон /I, II/ (см. табл. I). Можно думать, что линии, обусловленные перекрестными переходами, должны быть размазаны по спектру при конечных температурах и используемых уровнях возбуждения, и экситонные спектры поглощения должны определяться в первую очередь переходами внутри каждой из серий уровней "изотропного" и "анизотропного" экситонов. Возможно, некоторые из перекрестных переходов могут проявиться при понижении температуры.

Таблица I

Параметры приближенной модели непрямого
экситона в германии /1/

Тип экситона	Эффективная масса дырок		Эффективная масса экситонов			
			транзиционная масса $M_{ex} = m_e + m_h$		приведенная масса $m_{ex}^{-1} = m_e^{-1} + m_h^{-1}$	
	m_h^T	m_h^L	M_{ex}^T	M_{ex}^L	m_{ex}^T	m_{ex}^L
изотропный" экситон типа L_6^+	0,130	0,04	0,211	1,628	0,050	0,039
анизотропный" экситон типа $(L_4^+ + L_5^+)$	0,052	0,500	0,134	2,088	0,032	0,380

Учет спина электрона, как известно, приводит к расщеплению
основной экситона в результате обменного взаимодействия. Это
расщепление в случае Ge весьма незначительно /6, 12/. На
рис. 2 приведена качественная схема обменного расщепления для
возбужденных состояний экситона в Ge. В расчетах использовались
функции $\psi_e = L_4$ для электронной блоховской функции заменялось представ-
лением $D(\psi_e) = L_6^+$ в соответствующей двойной группе симметрии,
активирующей спин электрона /10/.

Автор признателен Л. А. Шелепину, В. С. Виноградову и
Л. Кононенко за обсуждение результатов работы.

Поступила в редакцию
30 июля 1976 г.

Л и т е р а т у р а

1. Н. В. Гузеев, В. А. Заяц, В. Л. Кононенко, Т. С. Манделъштам, В. Н. Мурзин. ФТП, 9, 1633 (1974).
2. Е. М. Гершензон, Г. Н. Гольцман, Н. Г. Птицына. ЖЭТФ, 70, 224 (1976).
3. В. И. Гавриленко, В. Л. Кононенко, Т. С. Манделъштам, В. Н. Мурзин. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 12, 9 (1975).
4. T. P. McLean, R. Loudon. J. Phys. Chem. Sol., 13, 1 (1960).
5. N. O. Lipari, A. Baldereschi. Phys. Rev., B3, 2497 (1971).
6. Г. А. Зверева, В. П. Макаров. ФТТ, 17, 3270 (1975).
7. В. Хейне. Теория групп в квантовой механике, ИЛ, Москва, 1963 г.
8. D. Schecter. J. Phys. Chem. Sol., 23, 237 (1962).
9. G. F. Koster. Sol. St. Phys., 5, 174 (1957).
10. R. J. Elliott. Phys. Rev., 96, 280 (1954).
11. A. Frova, G. A. Thomas, R. E. Miller, E. O. Kane. Phys. Rev. Lett., 34, 1572 (1975).
12. Y. Abe. J. Phys. Soc. Japan, 19, 818 (1964).