

ТОРОИДНЫЕ ЭКСИТОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Ю.В.Конаев, Н.В.Корняков

Указано на возможность существования в твердом теле нового типа квазичастиц – тороидных экситонов, характеризующихся отличной от нуля величиной тороидного момента та. Вычислена в приближении эффективной массы их волновая функция.

1. Экситонные состояния могут быть классифицированы по их отношению к преобразованиям группы пространственных и временных инверсий. Считается ¹, что в немагнитных центросимметричных кристаллах волновая функция экситона должна быть либо инвариантна относительно указанных преобразований, либо менять знак при пространственной или при временной инверсиях. В последних двух случаях экситон может обладать соответственно электрическим или магнитным дипольным моментами. Между тем известно ², что, кроме электрического и магнитного, существует третье независимое семейство электромагнитных мультиполей – тороидное. Мы покажем, что этому семейству соответствует связанное состояние электрона и дырки, обладающее тороидным моментом, – тороидный экситон. Волновая функция этого состояния меняет знак как при пространственной, так и при временной инверсиях.

Гамильтониан системы электронов и дырок запишем в виде

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{p}} (\epsilon_1(\mathbf{p}) a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} + \epsilon_2(\mathbf{p}) b_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}}) -$$

$$\sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{Q}} \left\{ \frac{1}{2} [V_1(\mathbf{p} - \mathbf{p}') - 2V_2'(\mathbf{Q})] a_{\mathbf{p}'}^+ + \mathbf{Q}/2 b_{-\mathbf{p}'}^+ + \mathbf{Q}/2 b_{-\mathbf{p} + \mathbf{Q}/2} a_{\mathbf{p} + \mathbf{Q}/2} + \right.$$

$$\left. + [V_2(\mathbf{p} - \mathbf{p}') - 2V_2(\mathbf{Q})] a_{\mathbf{p}'}^+ + \mathbf{Q}/2 b_{-\mathbf{p}'}^+ + \mathbf{Q}/2 b_{-\mathbf{p} + \mathbf{Q}/2} a_{\mathbf{p} + \mathbf{Q}/2} + \text{э. с.} \right\}, \quad (1)$$

где $a_{\mathbf{p}}, b_{\mathbf{p}}$ – фермиевские операторы уничтожения электрона в зоне проводимости и дырки валентной зоне. Закон дисперсии квазичастиц $\epsilon_1(\mathbf{p}) = \epsilon_2(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m^* + E_g/2$, где m^* – эффективная масса, E_g – ширина запрещенной зоны кристалла. Кроме прямого кулоновского взаимодействия $V_1(\mathbf{p}) = 4\pi e^2/\kappa p^2$ (e – заряд электрона, κ – диэлектрическая проницаемость), гамильтониан (1) учитывает обменное взаимодействие $V_2'(\mathbf{p})$ и межзонные переходы $V_2(\mathbf{p})$ электронов и дырок. Далее везде $\hbar = 1$.

Спектр экситонов определяется полюсами двухчастичной функции Грина $K(p, p', Q)$, где $Q = \{Q, \Omega\}$ – суммарные квазиимпульс и энергия, а $p = \{p, \omega\}$ и $p' = \{p', \omega'\}$ – относительные квазиимпульсы и энергии электрона и дырки. Наличие в гамильтониане слабого, связанного с межзонными переходами, приводит к необходимости рассматривать наряду с $K(p, p', Q)$ еще функцию $\tilde{K}(p, p', Q)$, описывающую рождение двух электронно-дырочных пар с равным нулю суммарным квазиимпульсом ³. Система уравнений для этих функций графически может быть представлена диаграммами рисунка. Кружком на диаграммах обозначена сумма неприводимых диаграмм данного типа. При этом $\Sigma(p, Q) = V_1(\mathbf{p}) - 2V_2'(\mathbf{Q})$, а $\tilde{\Sigma}(p, Q)$ учитывает межзонные переходы.

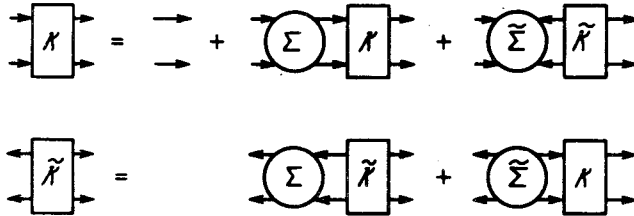
Система уравнений решается с помощью функции Грина кулоновской задачи ⁴. Вблизи наименьшего полюса

$$\Omega(Q) = Q^2/2M + E_g - E_1 + 2V_2'(\mathbf{Q}) \pm V_2(\mathbf{Q}), \quad (2)$$

где $M = 2m^*$, $E_1 = me^4 / 2\kappa^2$ — энергия связи экситона при учете только взаимодействия $V_1(\mathbf{p})$, $m = m^*/2$ — приведенная масса электрона и дырки. При этом имеет место соотношение

$$K(p, p', Q) = \pm \tilde{K}(p, p', Q). \quad (3)$$

Наличие двух типов полюсов у двухчастичной функции Грина указывает на существование двух типов синглетных связанных состояний электрона и дырки (мы не рассматривали спиновую степень свободы).



2. Решение (2) было получено без учета зависимости блока $\tilde{\Sigma}(p, Q)$ от $K(p, p', Q)$, что соответствует приближению среднего поля. Волновые функции экситона вычислим, принимая во внимание указанную зависимость. Представим волновую функцию в виде

$$\Phi(\mathbf{p}, \mathbf{Q}) = \phi(\mathbf{p}, \mathbf{Q}) a_{\mathbf{p}+}^+ + Q/2 b_{-\mathbf{p}+}^+ + Q/2 \Phi_0, \quad (4)$$

где Φ_0 — волновая функция основного состояния кристалла. Подействовав на (4) гамильтонианом (1), после усреднения по внутреннему движению получим для огибающей

$$\phi(\mathbf{Q}) = \int \phi_1(\mathbf{p}) \phi(\mathbf{p}, \mathbf{Q}) \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \quad (5)$$

($\phi_1(\mathbf{p})$ — собственная функция наинизшего состояния для кулоновской задачи) уравнение

$$[\Omega - Q^2/2M - E_g + E_1 - 2V_2'(\mathbf{Q})] \phi(\mathbf{Q}) \pm V_2(\mathbf{Q}) |\phi(\mathbf{Q})|^2 \phi(\mathbf{Q}) = 0, \quad (6)$$

где знак плюс относится к случаю действительной, а знак минус — к случаю чисто мнимой функции $\phi(\mathbf{Q})$.

Уравнение (6) имеет вид нелинейного уравнения Шредингера, описывающего систему с переменным числом частиц. В одномерном случае это уравнение имеет решения солитонного типа, осциллирующие в пространстве и во времени. В координатном представлении ⁵

$$|\phi(x, t)| = \frac{1}{2} (Mg)^{1/2} \exp [i(Qx - \Omega t)] / \text{ch} [\frac{1}{2} Mg(x - Qt/M)] \quad (7)$$

$$\Omega = Q^2/2M + E_g - E_1 - (Mg^2/8)$$

для точечного взаимодействия $V_2(Q) \cong g$, носящего характер притяжения.

3. Таким образом, учет межзонных переходов электронов и дырок приводит в меру взаимодействия $V_2(\mathbf{Q})$ к снятию вырождения по фазе волновой функции, т. е. вырождения экситонных состояний по отношению к временной инверсии. Поскольку при этом $V_2(\mathbf{Q}) \neq 0$ только для состояний зоны проводимости и валентной зоны разной четности, то одновременно снимается вырождение по отношению к пространственной инверсии.

Вычисляя диагональные матричные элементы оператора тороидного момента

$$\hat{T} = \frac{-i}{20 m^* c} [(\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \nabla)) - 2r^2 \vec{\nabla}] , \quad (8)$$

где c — скорость света, на функциях (4), можем убедиться, что для состояний, характеризующихся чисто мнимой антисимметричной в пространстве волновой функцией, плотность тороидного момента отлична от нуля.

● Правила отбора для переходов в тороидные экситонные состояния существенно отличаются от правил отбора для переходов в экситонные состояния другой симметрии, что представляет хорошую возможность для экспериментального обнаружения и идентификации тороидных экситонов в кристаллах.

Литература

1. Нокс Р. Теория экситонов. М.: Мир, 1966.
2. Дубовик В.М., Тосунян Л.А. ЭЧАЯ, 1983, 14, 1193.
3. Гусейнов Р.Р., Келдыш Л.В. ЖЭТФ, 1972, 63, 2255.
4. Келдыш Л.В., Козлов А.Н. ЖЭТФ, 1968, 54, 987.
5. Тахтаджян Л.А., Фаддеев Л.Д. Гамильтонов подход в теории солитонов. М.: Наука, 1986.

Институт микроэлектроники
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
17 октября 1988 г.