

- [5] М. В. Волькенштейн, Л. А. Грибов, М. А. Ельяшевич, Б. И. Степанов. Колебание молекул. «Наука», М., 1972.  
 [6] А. Я. Цауне, Н. Г. Сторчий, Л. В. Белявская, В. П. Морозов. Опт. и спектр., 26, 923, 1969.  
 [7] Ю. И. Пономарев, М. Р. Расовский, Г. В. Ховрин. Опт. и спектр., 42, 856, 1977.

Поступило в Редакцию 26 ноября 1979 г.  
 В окончательной редакции 4 декабря 1980 г.

УДК 539.184+548.4

## СТРОГАЯ ОЦЕНКА ЭНЕРГИИ СВЯЗИ ЭКСИТОНА С АНИЗОТРОПНЫМИ ЭФФЕКТИВНЫМИ МАССАМИ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК В ОДНОСНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Е. Д. Гутлянский

Энергия связи экситона и примесного центра с учетом анизотропии эффективной массы вычислялась вариационным методом в работах [1-3]. В работе [3] энергия связи вычислялась с учетом анизотропии диэлектрической проницаемости.

Существенным недостатком вариационного метода является невозможность получать этим методом оценки энергии связи сверху. В случае же, когда экспериментальное значение превышает теоретическое, не всегда ясно, погрешность ли это вариационной процедуры или используемая модель (ниже речь идет о приближении эффективной массы) в принципе не позволяет получить это значение. Поэтому представляют интерес методы, которые позволяют находить оценки энергии связи не только снизу, но и сверху.

В настоящей работе, используя теорему Гельмана—Фейнмана и теорему работ [4, 5], мы получим строгие оценки сверху и снизу для энергии ионизации экситона с анизотропными эффективными массами электронов и дырок в кристаллах с анизотропной диэлектрической проницаемостью. В частности, в качестве оценки снизу получается известная формула для энергии связи экситона с изотропными массами носителей, полученными усреднением анизотропных масс.

Уравнение Шредингера экситона в атомных единицах энергии  $E_0 = e^4 m_0 / \epsilon_0^2 \hbar^2$  и длины  $r_0 = \hbar^2 \epsilon_0 / e^2 m_0$  имеет вид

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = -B_0 \psi, \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{m_{e\perp}} \left( \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}_e^2} \right) + \frac{1}{m_{e\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}_e^2} + \frac{1}{m_{h\perp}} \left( \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}_h^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}_h^2} \right) + \frac{1}{m_{h\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}_h^2} \right],$$

$$\hat{V} = [(\tilde{x}_e - \tilde{x}_h)^2 + (\tilde{y}_e - \tilde{y}_h)^2 + \eta^{-1} (z_e - z_h)^2]^{-1}, \quad \epsilon_0 = (\epsilon_{\parallel} \epsilon_{\perp})^{1/2}, \quad \eta = \frac{\epsilon_{\parallel}}{\epsilon_{\perp}}.$$

Здесь  $B_0$  — энергия связи основного состояния экситона,  $m_e$ ,  $m_h$  — эффективные массы электронов и дырок. Диэлектрические постоянные  $\epsilon$ , параллельные  $S$  оси кристалла, обозначены  $\parallel$ , а перпендикулярные  $\perp$ . Модальный гамильтониан такого типа рассматривается в [3].

Введем новые переменные

$$\tilde{X}_{\text{н.м.}}, \tilde{Y}_{\text{н.м.}} = \frac{m_{e\perp} \tilde{x}_e, \tilde{y}_e + m_{h\perp} \tilde{x}_h, \tilde{y}_h}{2m_{e\perp} + 2m_{h\perp} + m_{e\parallel} + m_{h\parallel}}; \quad \tilde{Z}_{\text{н.м.}} = \frac{m_{e\parallel} z_e + m_{h\parallel} z_h}{2m_{e\perp} + 2m_{h\perp} + m_{e\parallel} + m_{h\parallel}};$$

$$x', y' = \tilde{x}_e, \tilde{y}_e - \tilde{x}_h, \tilde{y}_h; \quad z' = \eta^{-1/2} (z_e - z_h). \quad (2)$$



Отбрасывая член, описывающий движение центра масс, получим

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{\mu_{\perp}} \left( \frac{1}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} \right) + \frac{1}{\mu_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right] - \frac{1}{r'} \right\} \psi = -B_0 \psi, \quad (3)$$

где  $\mu_{\perp} = \frac{m_{e\perp} m_{h\perp}}{m_{e\perp} + m_{h\perp}}$ ,  $\mu_{\parallel} = \frac{m_{e\parallel} m_{h\parallel}}{m_{h\parallel} + \eta m_{e\parallel}}$  — приведенная поперечная и продольная составляющая эффективной массы соответственно.

Масштабным преобразованием  $r = \frac{1}{\mu_{\perp}} r'$  и делением обеих частей уравнения на  $\mu_{\perp}$  приводим (3) к каноническому виду

$$\hat{H}(\alpha) \psi = -B_0(\alpha) \psi, \quad (4)$$

где

$$\hat{H}(\alpha) = -\frac{1}{2} \left[ \alpha \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] + \frac{1}{r}, \quad \alpha = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}}, \quad B_0(\alpha) = \frac{B_0}{\mu_{\perp}}.$$

Очевидно, что  $B_0(\alpha)$  в точке  $\alpha = 1$  совпадает с энергией связи трехмерного атома водорода  $B_0(1) = 1/2$ .

Чтобы получить оценку энергии связи сверху, введем вспомогательную  $\mathcal{F}(\alpha) = \alpha B_0(\alpha)$ . Производная этой функции по  $\alpha$  есть

$$\frac{d\mathcal{F}(\alpha)}{d\alpha} = B_0(\alpha) + \alpha \frac{dB_0(\alpha)}{d\alpha}.$$

Воспользовавшись теоремой Гельмана—Фейнмана  $\frac{dB_0}{d\alpha} = -\langle \psi | -\frac{1}{2} \times \frac{\partial^2}{\partial z^2} | \psi \rangle$ , теоремой Вириала  $B_0(\alpha) = \langle \psi | -\frac{1}{2} \left( \alpha \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) | \psi \rangle$  и положительной определенностью оператора кинетической энергии, перепишем (5) следующим образом:

$$\frac{d\mathcal{F}}{d\alpha} = \langle \psi | -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) | \psi \rangle. \quad (6)$$

Откуда следует, что  $\mathcal{F}(\alpha) < \mathcal{F}(1)$  при  $\alpha < 1$  или, что то же самое,

$$B_0(\alpha) < \frac{B_0(1)}{\alpha} \quad \text{при } \alpha < 1. \quad (7)$$

Кроме того, поскольку  $\frac{dB_0(\alpha)}{d\alpha} < 0$ , то

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} B_0(\alpha) > B_0(\alpha) \quad \text{при любых } \alpha > 0. \quad (8)$$

Покажем теперь, что  $\lim_{\alpha \rightarrow 0} B_0(\alpha)$  существует и равен энергии связи двумерного атома водорода  $B_0(0)$ .

Функция  $B_0(\alpha)$  монотонно растет при убывании  $\alpha$ , кроме того, она ограничена сверху, как следует из неравенств

$$B_0(\alpha) = -\langle \psi | \hat{H}(\alpha) | \psi \rangle \leq -\langle \psi | \hat{H}(\alpha=0) | \psi \rangle \leq \max B_0(z), \quad (9)$$

где  $B_0(z) = B_0(\alpha=0)$  (при  $\alpha=0$   $B_0$  зависит от  $z$  как от параметра).

Следовательно,  $\lim_{\alpha \rightarrow 0} B_0(\alpha)$  существует и мы можем перейти в (9) к пределу

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} B_0(\alpha) \leq \max B_0(z). \quad (10)$$

С другой стороны, при любых нормированных на единицу пробных функциях  $\tilde{\psi}$  справедливо неравенство  $B_0(\alpha) \geq -\langle \tilde{\psi} | \hat{H}(\alpha) | \tilde{\psi} \rangle$ . Переходя далее в этом неравенстве к пределу  $\alpha \rightarrow 0$ , получаем

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} B_0(\alpha) \geq -\langle \tilde{\psi} | \hat{H}(\alpha=0) | \tilde{\psi} \rangle. \quad (11)$$



Выберем теперь  $\bar{\psi}$  в виде  $\bar{\psi} = f(z)\varphi(z, x, y)$ , причем  $f(z)$  — некоторая произвольная функция, ненарушающая нормировки  $\bar{\psi}$ , а  $\varphi(z, x, y)$  — точное решение уравнения (4) при  $\alpha = 0$ , нормированное по  $x$  и  $y$  на единицу, и перепишем (11) следующим образом:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} B_0(\alpha) \geq \int |f(z)|^2 B_0(z) dz. \quad (12)$$

Откуда в силу произвольности  $f(z)$  имеем

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} B_0(\alpha) \geq \max B_0(z). \quad (13)$$

Сравнивая (10) с (13), получаем

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} B_0(\alpha) = \max B_0(z). \quad (14)$$

Найдем теперь максимум функции  $B_0(z)$ . Для этой цели запишем ее производную

$$\frac{dB_0(z)}{dz} = - \left\langle \psi \left| \frac{d\hat{H}(\alpha=0)}{dz} \right| \psi \right\rangle = - \left\langle \psi \left| \frac{z}{r^2} \right| \psi \right\rangle. \quad (15)$$

Из этого выражения в силу положительной определенности оператора  $\left\langle \psi \left| \frac{1}{r^2} \right| \psi \right\rangle$  следует, что при любых  $z < 0$   $B_0(z)$  всегда растет, а при  $z > 0$  всегда убывает; в точке же  $z = 0$  она принимает конечное значение  $B_0(0) = 2$  [1], следовательно, в этой точке функция имеет максимум. Это и означает, что, увеличивая анизотропию, мы в пределе получаем двумерный атом водорода.

Объединяя теперь (7) и (8) и подставляя значения  $B_0(1)$  и  $\lim_{\alpha \rightarrow 0} B_0(\alpha)$ , получим для энергии ионизации следующие неравенства;<sup>1</sup>

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2\alpha} > B_0(\alpha) \quad \text{при} \quad 1 > \alpha \geq \frac{1}{4}, \\ 2 > B_0(\alpha) \quad \text{при} \quad 0 < \alpha < \frac{1}{4}. \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Эту оценку можно улучшить, используя теорему, доказанную нами в [4], теорема позволяет также получить и оценку снизу. В теореме утверждается, что

$$\left( \frac{\alpha_1 + A}{\alpha + A} \right)^{n/(2-n)} B_0(\alpha_1) > B_0(\alpha) > \left( \frac{\alpha_2 + A}{\alpha + A} \right)^{n/(2-n)} B_0(\alpha_2), \quad (17)$$

где

$$A = \frac{\left\langle \psi \left| -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right| \psi \right\rangle}{\left\langle \psi \left| -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right| \psi \right\rangle}, \quad \alpha_1 < \alpha < \alpha_2,$$

$n$  — степень однородности потенциала. В нашем случае потенциал кулоновский  $n = 1$ ,  $\alpha_1 = 0$ ,  $\alpha_2 = 1$ , тогда учитывая, что при  $\alpha_2 = 1$

$$\left\langle \psi \left| -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \left| -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \left| -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right| \psi \right\rangle, \quad (18)$$

получим  $A = 2$ , и неравенство (17) примет вид

$$\frac{4}{\alpha + 2} > B_0(\alpha) > \frac{3}{2} \frac{1}{\alpha + 2} \quad \text{при} \quad 0 < \alpha < 1. \quad (19)$$

<sup>1</sup> Отметим, что (как следует из вышеприведенных рассуждений) (16) справедливы также и для возбужденных состояний.



Окончательную оценку сверху дает совместное решение системы неравенств (16) и левой части (19)

$$\left. \begin{aligned} B_0(\alpha) &< \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha} \quad \text{при} \quad \frac{2}{7} \leq \alpha < 1, \\ B_0(\alpha) &< \frac{4}{\alpha + 2} \quad \text{при} \quad 0 < \alpha < \frac{2}{7}. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Резюмируем теперь полученные результаты в размерном виде. Оценка снизу

$$B_0 > \frac{1}{2} \frac{\mu_{\text{ср.}} m_0 e^4}{\epsilon_0^2 \hbar^2}, \quad (21)$$

где  $\mu_{\text{ср.}} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{\mu_{\parallel}} + \frac{2}{\mu_{\perp}} \right)$ . Оценка сверху

$$\left. \begin{aligned} B_0 &< \frac{4}{3} \frac{\mu_{\text{ср.}} m_0 e^4}{\epsilon_0^2 \hbar^2} \quad \text{при} \quad 0 < \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} < \frac{2}{7}, \\ B_0 &< \frac{1}{2} \frac{\mu_{\parallel} m_0 e^4}{\epsilon_0^2 \hbar^2} \quad \text{при} \quad \frac{2}{7} \leq \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} < 1. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Например, для известных значений параметров зонной структуры CdS  $m_{e\perp} = 0.171$ ,  $m_{e\parallel} = 0.153$ ,  $m_{h\perp} = 0.7$ ,  $m_{h\parallel} = 5$ ,  $\epsilon_{\perp} = 9.35$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 10.33$  из формулы (22) получим, что энергия связи экситона не превосходит 20.8 мэВ.

Автор благодарен В. Е. Харциеву за обсуждение результатов работы.

#### Литература

- [1] W. Kohn, J. Luttinger. Phys. Rev., 98, 915, 1955.
- [2] R. A. Folkner. Phys. Rev., 184, 713, 1969.
- [3] А. И. Ансельм, Л. И. Коровин. ЖТФ, 25, 2044, 1955.
- [4] Е. Д. Гутлянский, В. Е. Харциев. ЖЭТФ, 7, 1345, 1976.
- [5] Е. Д. Гутлянский. В сб.: Молодежь и наука, 285. Ростов-на-Дону, 1976.

Поступило в Редакцию 8 января 1980 г.  
В окончательной редакции 5 февраля 1980 г.

УДК 535.37 : 535.34

### К ТЕОРИИ РЕАБСОРБЦИИ СВЕТА В ПЛОСКОПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПЛАСТИНКАХ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ТОЛЩИНЫ

В. М. Агранович, С. А. Дарманян и В. И. Рупасов

В средах, где спектры испускания и поглощения света перекрываются, при нахождении макроскопических характеристик люминесценции (спектрального состава, времени затухания, угловых распределений и т. д.) важную роль играет учет процессов реабсорбции. Теории реабсорбции посвящено значительное число работ [1] и в настоящее время для кристаллов большой оптической толщины можно констатировать довольно хорошее согласие теории и опытных данных.

В тонких пленках перепоглощение усиливается из-за многократных отражений света люминесценции от внутренних границ кристалла. Однако учет этих процессов, требующий обобщения уравнений реабсорбции, был выполнен лишь для некоторых частных случаев. В частности,