

Заметим, однако, что уравнение (5) может быть переписано в виде $(H_2 - E_0)\Phi - \frac{1}{r^3}|n_0, 0\rangle = 0$, $\Phi = \chi|n_0, 0\rangle$.

Функция Φ должна быть квадратично интегрируема, поэтому мы должны отбросить общее решение однородного уравнения, приводящее к расходящимся $\langle \Phi | \Phi \rangle$. При этом неоднозначность пропадает.

Для атома водорода частное решение неоднородного уравнения (5) может быть найдено точно. Подставляя χ в (5) в виде $\chi = a/r + b$, находим, что $a = -1/3$, $b = -1/9$. Для атомов рубидия и цезия поступим следующим образом. Учтем, что в соответствии с (4) необходимо знать $\chi(r)$ лишь для r порядка межатомного расстояния R . Это позволяет без потери точности использовать в (5) вместо функции $|n_0, 0\rangle$ ее асимптотическое приближение для больших r : $|n_0, 0\rangle_{a,s} = Cr^{1/\kappa-1}e^{-\kappa r}$, где $\kappa = \sqrt{2I}$, I — потенциал ионизации. При этом уравнение (5) удается решить так же, как и в случае водорода: $\chi_{Rb, Cs} = a/r + b$,

$$a = -\frac{\kappa_{Rb, Cs}}{2\kappa_{Rb, Cs} + 1}, \quad b = -\frac{\kappa_{Rb, Cs}^2}{2\kappa_{Rb, Cs} + 1}, \quad C = \text{const.}$$

Сравнение $\delta\omega_{g-g}$, полученного в данной работе, с результатами расчета $\delta\omega$, выполненного с учетом лишь контактного взаимодействия Ферми [2] показывает, что в случае водорода вклад диполь-дипольного взаимодействия в величину локального сдвига не превышает 2%. При переходе к более тяжелым активным атомам Rb и Cs абсолютная величина этого вклада возрастает, что является естественным следствием того, что электронные оболочки Rb и Cs сильнее искажаются при столкновениях в силу большей поляризуемости данных атомов по сравнению с водородом. В то же время относительный вклад $\delta\omega_{g-g}$ в $\delta\omega$ для рубидия и цезия меньше и является величиной $\sim 1\%$.

Столь малую величину вклада неконтактного взаимодействия и уменьшение относительной величины этого вклада при переходе от H к Rb и Cs, на наш взгляд можно объяснить тем, что любое искажение волновых функций излучающего атома даст вклад при учете контактного члена, в то время как диполь-дипольное взаимодействие существенно только тогда, когда сильно примешиваются состояния с $l=2$. При увеличении поляризуемости активного атома искажение волновой функции увеличивается, что ведет к увеличению сдвига, однако, относительный вес состояний с $l=2$ уменьшается, а следовательно, уменьшается и отношение $\delta\omega_{g-g}/\delta\omega$.

Л и т е р а т у р а

- [1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Релятивистская квантовая теория, ч. 1. «Наука», М., 1968.
- [2] В. В. Батыгин, М. Б. Горный. ЖТФ, 48, 2472, 1978.
- [3] И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. «Наука», М., 1977.
- [4] В. В. Батыгин, М. Б. Горный, А. Н. Иванов, Б. Г. Матисов. ЖТФ, 47, 2414, 1977.

Поступило в Редакцию 2 апреля 1981 г.

УДК 535.37 : 548.0

СПОНТАННЫЙ РАСПАД БИЭЛЕКТРОНА

М. П. Шепилов

В работе [1] предполагалась возможность существования в кристаллах связанных состояний двух одноименно заряженных частиц, имеющих отрицательную приведенную эффективную массу, например, двух электронов — биэлектрона. Спектр энергии относительного движения такой системы имеет обратный водородоподобный характер. В работе [2] предложена схема зон, при наличии которой состояния биэлектронного типа могли бы реализоваться: один электрон помещался в зону проводимости C_1 ($m_1 > 0$), а другой — в бо-

лее высокую зону C_2 с отрицательной эффективной массой $-m_2 < 0$. При $m_1 > m_2$ выполнено необходимое условие устойчивости биэлектрона, а именно, его приведенная масса $\mu = -m_1 m_2 / (m_1 - m_2)$ отрицательна, а суммарная масса $M = m_1 - m_2$ положительна и обеспечивает положительность кинетической энергии движения квазичастицы как целого. Далее [3] было теоретически изучено оптическое возбуждение биэлектрона.

В данной работе теоретически рассмотрен наиболее простой и существенный канал распада биэлектрона — спонтанный распад на два электрона зоны C_1 , приводящий к линиям резонансной флуоресценции. Вычислено время жизни относительно такого распада, которое оказалось достаточно большим ($\tau \geq 10^{-9}$ с). Вычисление формы линии резонансной люминесценции привело к полуширине линии порядка 10^{-3} эВ, что позволяет ответить на замечание, высказанное ранее [4] по поводу характера биэлектронной люминесценции. А именно, отмечалось, что спектр конечных состояний при спонтанном распаде является сплошным, что могло бы привести к сплошному бесструктурному спектру биэлектронной люминесценции. Этот вывод, однако, оказывается неправомерным в силу того, что поведение матричного элемента перехода существенно ограничивает область конечных состояний, в которые могут происходить переходы, ограничивая тем самым и ширину линии люминесценции.

Итак, рассмотрим спонтанный распад биэлектрона, характеризуемого волновым вектором \mathbf{K} и квантовыми числами $(nlm) \equiv \nu$ относительного движения, на два электрона зоны C_1 с волновыми векторами $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ и фотон с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией $\xi_{q\alpha}$ ($\alpha = 1, 2$)

$$(\nu \mathbf{K}) \rightarrow \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, (q \xi_{q\alpha}). \quad (1)$$

Волновая функция биэлектрона большого радиуса для случая невырожденных зон по аналогии с экситоном [5] может быть представлена в виде суммы по узлам решетки Браве

$$\Psi_{\nu \mathbf{K}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sqrt{\frac{\Omega}{N}} \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2} \exp \left\{ i \mathbf{K} \frac{m_1 \mathbf{R}_1 - m_2 \mathbf{R}_2}{m_1 - m_2} \right\} \Phi_{\nu}(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1) a_{1\mathbf{R}_1}(\mathbf{r}_1) a_{2\mathbf{R}_2}(\mathbf{r}_2). \quad (2)$$

Здесь Ω — объем элементарной ячейки, N — число таких ячеек в кристалле объема $V = \Omega N$, $\Phi_{\nu}(\beta)$ — водородоподобная волновая функция относительного движения, $a_{j\mathbf{R}}(\mathbf{r})$ — функция Ванье зоны j , центрированная на ячейке \mathbf{R} .

В качестве конечного состояния электронной подсистемы рассмотрим состояние двух невзаимодействующих электронов зоны C_1

$$\Psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2} \exp \{ i \mathbf{k}_1 \mathbf{R}_1 + i \mathbf{k}_2 \mathbf{R}_2 \} a_{1\mathbf{R}_1}(\mathbf{r}_1) a_{2\mathbf{R}_2}(\mathbf{r}_2). \quad (3)$$

Зона-зонный переход $C_1 \rightarrow C_2$ будем предполагать разрешенным, что позволит использовать одноцентровое приближение при вычислении матричного элемента перехода

$$\langle a_{1\mathbf{R}'} | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \mathbf{p} | a_{2\mathbf{R}} \rangle = e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} p_{12} \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}, (p_{12} \equiv \langle a_{1,0} | \mathbf{p} | a_{2,0} \rangle). \quad (4)$$

Учитывая тождественность и спин электронов в рассматриваемой двухэлектронной системе, можно на основе выражений (2), (3) построить синглетные и триплетные волновые функции начального и конечного состояний. В работе [3] было показано, что при оптическом возбуждении в случае низких температур образуется преимущественно синглетный биэлектрон. Принимая во внимание сохранение мультиплетности при спонтанном распаде, ограничимся в дальнейшем рассмотрением только синглетных состояний.

Вероятность спонтанного перехода (1) в единицу времени можно привести к виду

$$W = \frac{(2\pi)^5}{\omega} \left(\frac{e}{mV n_n} \right)^2 |\xi_{q\alpha} p_{12}|^2 \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{K}} |\tilde{\Phi}_{\nu}(\mathbf{x}_1) + \tilde{\Phi}_{\nu}(\mathbf{x}_2)|^2 \delta(E_{\text{нач}} - E_{\text{кон}}), \quad (5)$$

$$\mathbf{x}_1 = \frac{m_1 \mathbf{k}_1 + m_2 \mathbf{k}_2}{m_1 - m_2}, \quad \mathbf{x}_2 = \frac{m_1 \mathbf{k}_2 + m_2 \mathbf{k}_1}{m_1 - m_2}. \quad (6)$$

$$\bar{\Phi}_\nu(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3\beta e^{-i\beta\mathbf{x}} \Phi_\nu(\beta) = (-i)^l F_{nl}(\mathbf{x}) Y_{lm}(\theta_x, \varphi_x), \quad (7)$$

$$E_{\text{нач}} = E_0 + \frac{G}{n^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2M}, \quad E_{\text{кон}} = \hbar\omega + \frac{\hbar^2 (k_1^2 + k_2^2)}{2m_1}, \quad (8)$$

ω — частота фотона, n_n — показатель преломления среды, E_0 — расщепление зон C_1, C_2 при $\mathbf{k}=0$, $G = |\mu| e^4 / 2\hbar^2 \varepsilon^2$ — ридберг для биэлектрона. При выводе формулы (5) было использовано приближение (4) и предполагалось выполнение условия $q \ll 1/a_\nu$ (a_ν — радиус биэлектрона), которое позволило в силу свойств фурье-образа $\bar{\Phi}_\nu(\mathbf{x})$ пренебречь волновым вектором света.

Подробное рассмотрение показывает, что фурье-образ $\bar{\Phi}_\nu(\mathbf{x}_i)$, а следовательно и величина W , существенно отличны от нуля только для значений

$$k_1, k_2 \lesssim \frac{1}{a_\nu} + \frac{m_1}{m_1 - m_2} K. \quad (9)$$

Это условие ограничивает область $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ -пространства, в которую могут происходить переходы. Соответственно ограничивается и энергия излучаемого фотона, то есть ширина линии люминесценции.

Для нахождения полной вероятности спонтанного распада в единицу времени $P_{\nu\mathbf{K}}$ биэлектрона с квантовыми числами $(\nu\mathbf{K})$ просуммируем выражение (5) по конечным состояниям электромагнитного поля и электронной подсистемы. В результате вычислений с учетом нормировки $\bar{\Phi}_\nu(\mathbf{x})$ на единицу получим¹

$$P_{\nu\mathbf{K}} = \frac{4e^2 n_n \omega_n}{3c^3 m^2 \hbar} |\mathbf{r}_{12}|^2 \left\{ 1 + \int d^3\mathbf{k} \bar{\Phi}_\nu^*(\mathbf{k}) \bar{\Phi}_\nu\left(\frac{m_1 + m_2}{m_1 - m_2} \mathbf{K} - \mathbf{k}\right) \right\} \lesssim \frac{8e^2 n_n \omega_n}{3c^3 m^2 \hbar} |\mathbf{r}_{12}|^2 \approx \frac{8e^2 n_n \omega_n^3}{3c^3 \hbar} |\mathbf{r}_{12}|^2. \quad (10)$$

В формуле (10) мы перешли от матричного элемента импульса к матричному элементу дипольного момента [5] и использовали обозначение

$$\hbar\omega_n \equiv E_0 + \frac{G}{n^2} \approx E_0 \equiv \hbar\omega_0. \quad (11)$$

Например, для значений $E_0 = 2$ эВ, $r_{12} = 3 \cdot 10^{-8}$ см, $n_n = 2$, использованных для оценок в работе [3], получим $P_{\nu\mathbf{K}} \lesssim 10^9$ с⁻¹. Таким образом, время жизни биэлектрона относительно спонтанного распада велико ($\tau \gtrsim 10^{-9}$ с) и соответствующая естественная ширина линии мала ($\hbar\Delta\omega_\tau \lesssim 10^{-6}$ эВ).

Для вычисления контура линии люминесценции, обусловленного наличием сплошного спектра конечных и начальных состояний, следует умножить вероятность перехода W (5) на энергию кванта, плотность состояний электромагнитного поля и функцию теплового распределения для биэлектронов, а затем просуммировать полученное произведение по значениям волновых векторов $\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$. При оптическом возбуждении образуется преимущественно биэлектрон с s -типом относительного движения $\nu = (n, 0, 0)$ [3], люминесценцию которого мы и рассмотрим. Ограничимся рассмотрением предела низких температур, когда характерный волновой вектор теплового распределения мал $\bar{K} \ll 1/a_\nu$, что позволяет пренебречь зависимостью W от \mathbf{K} . В этом случае форма линии люминесценции не зависит от теплового распределения биэлектронов, определяется только характером зависимости W от $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ и может быть получена в аналитическом виде

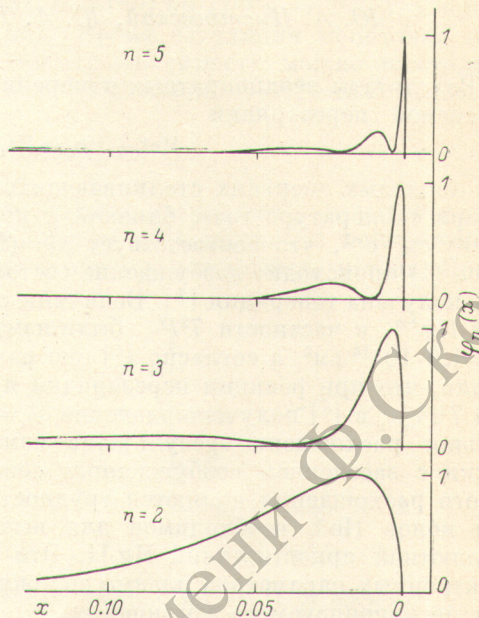
$$f_{n0}(\omega) = \begin{cases} \sqrt{x} [a^{-3/2} F_{n0}(a^{-1}\sqrt{x})]^2, & x = \frac{a^2 m_1}{\hbar} (\omega_n - \omega) > 0 \\ 0, & \omega > \omega_n. \end{cases} \quad (12)$$

Здесь $a = \hbar^2 \varepsilon / e^2 |\mu|$ — радиус Бора для биэлектрона, $F_{n0}(x)$ — радиальная часть фурье-образа (7), выражающаяся через полиномы Гегенбауэра $C_{n-1}^1(y)$ [6]

$$a^{-3/2} F_{n0}(a^{-1}\sqrt{x}) = \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \frac{4n^2}{(n^2 x + 1)^2} C_{n-1}^1\left(\frac{n^2 x - 1}{n^2 x + 1}\right). \quad (13)$$

¹ Зона C_1 предполагалась пустой.

Таким образом, форма линии люминесценции определяется главным квантовым числом n и параметрами m_1, a . В силу свойств фурье-образа полуширина линии уменьшается при возрастании n , составляя по порядку величины $\hbar \Delta \omega_n \approx \hbar^2/m_1 a^2 \approx \hbar^2/m_1 a^2 n^4$. Например, для $m_1 \approx m, a_s = 10^{-6}$ см получим $\hbar \Delta \omega_n \approx 10^{-3}$ эВ $\gg \hbar \Delta \omega_s$, то есть учет естественного уширения, отвечающего спонтанному распаду, не может существенно повлиять на полученный результат (12). Из формулы (12) следует, что положение максимума линии люминесценции смещено в низкочастотную сторону по отношению к частоте ω_n . На рисунке изображены контуры линий (12). Отметим наличие низкочастотных крыльев у линий и приближение положений их максимумов к значениям ω_n при возрастании n .



Контурсы линий люминесценции, отвечающей спонтанному распаду биэлектрона ($n=2 \div 5$).

По осям отложены значения величин $x = \sigma^2 m_1 \times (\omega_n - \omega)/\hbar$, $\varphi_n(x) = f_n(\omega)/f_{n0}(\omega_{nm})$ (см. 12). Положения максимумов ω_{nm} линий люминесценции аппроксимируются выражением $a^2 m_1 (\omega_n - \omega_{nm})/\hbar \approx 1/4n^4$.

Было показано также, что вероятность спонтанного перехода биэлектрона из состояния (νK) в состояние ($\nu' K'$) в единицу времени, просуммированная по конечным состояниям, значительно меньше вероятности спонтанного распада (10). В дальнейшем для вычисления времени жизни биэлектрона и полного уширения линий необходимо рассмотреть другие каналы распада и рассеяния.

Полученные в данной работе теоретические результаты не противоречат данным экспериментального исследования спектров люминесценции кристалла BiJ_3 [7-9].

Л и т е р а т у р а

- [1] Е. Ф. Гросс, В. И. Перель, Р. И. Шехмаметьев. Письма ЖЭТФ, 13, 320, 1971.
- [2] Е. Ф. Гросс, Н. В. Старостин, Р. И. Шехмаметьев. ФТТ, 13, 3393, 1971.
- [3] Н. В. Старостин, М. П. Шепилов. Укр. физ. ж., 25, 1707, 1980.
- [4] Р. И. Шехмаметьев, Н. В. Старостин. Письма ЖЭТФ, 16, 528, 1972.
- [5] Р. Нокс. Теория экситонов. «Мир», М., 1966.
- [6] Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, М., 1960.
- [7] R. I. Shekhametev. Phys. stat. sol. (b), 66, 371, 1974.
- [8] Н. О. Крылова, Р. И. Шехмаметьев, М. Ю. Гургенбеков. Опт. и спектр., 38, 947, 1975.
- [9] М. П. Лисица, Ф. В. Мощный. Укр. физ. ж., 21, 1025, 1976.

Поступило в Редакцию 9 апреля 1981 г.