Физика низких температур, 1995, т. 21, № 3, с. 316–323 УДК 538.9

# Затухание экситона в атомарном кристалле

Н. И. Григорчук

*Институт химии поверхности НАН Украины, Украина, 252022, г. Киев, пр. Науки, 31*

Статья поступила в редакцию 14 июля 1994 г., после переработки 29 сентября 1994 г.

Получены аналитические выражения для определения затухания экситона произвольного радиуса в атомарном кристалле в зависимости от температуры решетки и скорости экситона с учетом его волнового вектора. Подробно проанализирован ход этих зависимостей для предельных случаев высоких и низких температур (включая $T = 0$), медленных и быстрых экситонов, больших и малых экситонных радиусов. В ряде из них найдено совпадение с ранее известными результатами. Расчет выполнен в однофононном приближении при линейной зависимости энергии акустического фонона от квазиимпульса.

Одержано аналітичні вирази для визначення згасання екситона довільного радіуса в атомарному кристалі в залежності від температури гратки і швидкості екситона з урахуванням його хвильового вектора. Докладно проаналізовано хід цих залежностей для граничних випадків високих і низьких температур (включно $T = 0$), повільних і швидких екситонів, великих та малих екситонних радіусів. Для ряду з них знайдено збіг з раніше відомими результатами. Обчислення виконано в однофононному наближенні при лінійній залежності енергії акустичного фонона від квазіімпульсу.

## Введение

Рассеяние экситонов на фононах привлекает большое внимание в связи с изучением механизмов ВТСП, температурных зависимостей коэффициента диффузии и длины свободного пробега, особенностей оптических и динамических характеристик кристаллов. Общие вопросы теории в этих направлениях хорошо развиты в работах Тойозавы [1,2], монографиях Давыдова [3] и Аграновича [4]. В случае рассеяния на акустических колебаниях решетки результаты этих работ преимущественно применимы для экситонов, скорость которых меньше скорости звуковой волны в кристалле. Пренебрежение волновым вектором экситона по сравнению с волновым вектором фонона приводило, однако, к возникновению особенностей при вычислении массового оператора МО экситонов [5,6]. Попытки устранения этих особенностей путем подбора соответствующей функции связи для молекулярных кристаллов хорошо известны [6]. Если такое пренебрежение может быть полностью оправданно для процессов с участием оптических фононов, энергия которых в слабой мере зависит от волнового вектора, то для кристаллов с наличием одних лишь акустических ветвей колебания (как, например, атомарные кристаллы [7]), энергия которых стремится к нулю с понижением волнового числа, такое пренебрежение ведет к нарушению законов сохранения и, как следствие, к сингулярностям при вычислении МО. В таком случае необходим последовательный учет волновых векторов экситона и фонона [8,9]. В работах Фуголь [10], Фуголь и Тарасовой [11,12] проведен подробный анализ затухания экситонов с учетом их квазиимпульса, когда взаимодействие экситонов с решеткой является настолько слабым, что их можно рассматривать как газ свободных частиц с «хорошими» квантовыми числами k. При этом для радиусов экситона $r_{ex}$ должно выполняться условие

$$r_{ex}\, q \ll 1 \,, \qquad (1)$$

где $q$ — значение фононного волнового вектора, не превышающее дебаевской величины $q_D$ ($q_D = (6\pi^2/V_0)^{1/3}$, $V_0$ — объем элементарной ячейки). Это условие хорошо выполняется для кристаллов инертных газов, в которых экситонные радиусы не превышают нескольких ангстрем, однако для кристаллов, в которых экситоны имеют радиусы ~ 10 Å и больше, близкие к дебаевским квазиимпульсы дают вклад, при котором условие (1) уже не выполняется.

В настоящей работе изучено затухание экситонов при однофононном рассеянии на акустических фононах с учетом квазиимпульса экситона, когда его взаимодействие с фононом не ограничено выше упомянутым условием и может быть описано функцией [1]

$$G_q = \left(\frac{2\hbar q}{9\rho s}\right)^{1/2} \left[\frac{C_c}{(1+\alpha_e^2 q^2)^2} - \frac{C_v}{(1+\alpha_h^2 q^2)^2}\right] , \qquad (2)$$

где $\alpha_i = \frac{r_{ex}}{2}(m_i/m)$, $m = m_e + m_h$, $i = e, h$; $m_e$ — масса экситона; $m_h$ — масса дырки; $r_{ex}$ — радиус

© Н. И. Григорчук, 1995

экситона; $s$ — скорость продольной звуковой волны в кристалле; $\rho$ — плотность кристалла; $C_v$ и $C_c$ — деформационные потенциалы валентной зоны и зоны проводимости соответственно.

Получены аналитические выражения для определения затухания в атомарном кристалле в зависимости от скорости экситона и температуры решетки при произвольных экситонных радиусах. Проведен анализ ряда предельных по температуре и квазиимпульсу ситуаций для медленных (разд. 3) и быстрых (разд. 4) экситонов больших и малых радиусов, при отличных и совпадающих эффективных массах электрона и дырки. При низких температурах найдено точное аналитическое выражение для затухания экситонов.

## 1. Общие выражения

Экситон-фононную систему будем описывать простой моделью с одной акустической фононной ветвью, которая применима для кубических кристаллов с изотропным экситонным спектром, и экситонами, взаимодействующими только с продольными колебаниями решетки, обусловленными изменением объема при деформации.

Тогда в однофононном приближении затухание экситона с волновым вектором k при произвольных температурах и частотах может быть записано в виде [8,9]:

$$\Gamma_k(\omega, T) = \frac{1}{9\pi\rho s V_k} \begin{cases} \int\limits_{q_1(-k)}^{q_1(k)} F(q, T)\, dq + \int\limits_{q_3(k)}^{q_3(-k)} F(q, T) e^{\beta q}\, dq, & \hbar\omega - E_0 \geq \dfrac{mV_k^2}{2},\ V_k \gtrless s, \\ \int\limits_{q_1(-k)}^{q_1(k)} F(q, T)\, dq + \int\limits_{q_2(k)}^{q_2(-k)} F(q, T)\, dq, & \hbar\omega - E_0 \leq \dfrac{mV_k^2}{2},\ V_k < s, \\ \int\limits_{q_2(k)}^{q_1(k)} F(q, T)\, dq + \int\limits_{q_3(k)}^{q_4(k)} F(q, T) e^{\beta q}\, dq, & \hbar\omega - E_0 \leq \dfrac{mV_k^2}{2},\ V_k > s, \end{cases} \tag{3}$$

где

$$F(q, T) = f(q)[e^{\beta q} - 1]^{-1};\ \beta = \frac{\hbar s}{k_B T};\ f(q) = q^2[C_c(1 + \alpha_e^2 q^2)^{-2} - C_v(1 + \alpha_h^2 q^2)^{-2}]^2; \tag{4}$$

$$q_{1,2}(\pm k) = \frac{2m}{\hbar}\left[(s + V_{\pm k}) \pm \sqrt{s^2 + 2sV_{\pm k} + 2(\hbar\omega - E_0)/m}\right];$$

$$q_{3,4}(\pm k) = \frac{2m}{\hbar}\left[-(s - V_{\pm k}) \pm \sqrt{s^2 - 2sV_{\pm k} + 2(\hbar\omega - E_0)/m}\right];\ V_{\pm k} = \pm\frac{\hbar k}{m}; \tag{5}$$

$E_0$ — дно экситонной зоны; $V_k$ — скорость экситона с квазиимпульсом $|\mathbf{k}|$. Пределы интегрирования в интегралах (3) возникают после предварительного интегрирования по всевозможным углам между волновыми векторами экситона и фонона с использованием $\delta$-функции, отражающей закон сохранения энергии участвующих во взаимодействии квазичастиц. Члены с экспонентой в (3) соответствуют процессам с излучением (рождением) фонона ($\Gamma^+$), остальные — процессам с его поглощением ($\Gamma^-$). Очевидно, что при энергиях фотона $\hbar\omega$, меньших энергии экситона, и при его скорости, меньшей скорости звука в кристалле, процесс излучения фонона не возможен. Это отражает вторая строка формулы (3).

При энергии фотонов $\hbar\omega = E_0 + mV_k^2/2$, превышающей энергию дна экситонной зоны на величину кинетической энергии экситонов, пределы в формуле (3) принимают значения:

$$q_2(\pm k) = q_3(\pm k) = 0,$$
$$q_1^{\pm} = \frac{2m}{\hbar}(s + V_{\pm k}),\ q_4 = \frac{2m}{\hbar}(V_k - s). \tag{6}$$

Перейдем теперь к рассмотрению ряда предельных ситуаций, позволяющих получить аналитические выражения, описывающие процесс затухания при таких энергиях фотонов. При этом удобно размежевать затухание при нулевой температуре на виртуальных фононах и затухание при конечных

температурах на тепловых фононах, положив $\Gamma_k = \Gamma_k^+(0) + \Gamma_k^\pm(T)$.

### 2. Затухание экситонов при $T = 0$

При отсутствии тепловых фононов и при условии (6) рассеяние существенно только для экситонов, движущихся со скоростью, превышающей скорость звуковой волны в кристалле (так называемых [12] быстрых экситонов), которые при столкновении с решеткой отдают ей кванты своей энергии. В этом случае (3) сводится к выражению

$$\Gamma_k^+(0) = \frac{1}{9\pi\rho s V_k}\int_0^{q_4} f(q)\,dq =$$

$$= \frac{1}{9\pi\rho s V_k}\sum_{i=1}^{2}\left\{\frac{C_i^2}{6\alpha_i^2}q_4\left[-\frac{1}{(1+\alpha_i^2 q_4^2)^3}+\frac{1}{4(1+\alpha_i^2 q_4^2)^2}+\frac{1}{8(1+\alpha_i^2 q_4^2)}+\frac{3}{8\alpha_i q_4}\operatorname{arctg}\alpha_i q_4\right]-\right.$$

$$\left.-\frac{C_1 C_2}{(\alpha_2^2-\alpha_1^2)^2}\left[\left(\alpha_i\operatorname{arctg}\alpha_i q_4-\frac{\alpha_i^2 q_4}{1+\alpha_i^2 q_4^2}\right)-\frac{4\alpha_1^2\alpha_2^2}{\alpha_2^2-\alpha_1^2}\left(\frac{(-1)^{i-1}}{\alpha_i}\operatorname{arctg}\alpha_i q_4\right)\right]\right\}, \qquad (7)$$

$C_1 \equiv C_c$; $C_2 \equiv C_v$ и $q_4$ определено формулой (6).

При $\alpha_i q_4 \ll 1$ отсюда, в частности, получаем выражение (9) работы [12], а следовательно, при $V_k \gg s$ и подтверждение результатов работы [13]. Рассмотрим (7) для случая, когда выполняется соотношение

$$\alpha_i q_4 \gg 1 . \qquad (8)$$

Тогда

$$\Gamma_k(0) \simeq \frac{2}{9r_{ex}^3\rho s V_k}\left[C_c^2\left(\frac{m}{2m_e}\right)^3 + C_v^2\left(\frac{m}{2m_h}\right)^3 - 2C_c C_v\right], \qquad (9)$$

и в случае $m_e \simeq m_h \equiv m/2$ выражение (9) упрощается:

$$\Gamma_k(0)\Big|_{m_e = m_h} \approx \frac{2(C_c - C_v)^2}{9r_{ex}^3\rho s V_k} . \qquad (10)$$

Если в первом предельном случае (1) затухание при нулевой температуре растет квадратично с ростом квазиимпульса экситонов [11], то в другом — (8) оно линейно падает. Здесь экситоны перестают быть «хорошими» квазичастицами, так как при $k \to 0$ отношение $\Gamma_k(0)/\varepsilon_k$ (где $\varepsilon_k$ — энергия свободных экситонов) становится больше единицы. Из (9), (10) также следует, что затухание существенно зависит от величины экситонного радиуса (оно больше в кристаллах с относительно малыми радиусами экситонов и уменьшается для кристаллов с экситонами больших радиусов). Для кристаллов с $r_{ex} \approx a$ ($a$ — постоянная решетки) $\Gamma_k(0)$ может быть оценено при больших $k$ как

$$\Gamma_{k\to q_D}(0) \approx 2\tilde{G}^2/\omega_D , \qquad (11)$$

где $\tilde{G}^2$ — квадрат константы экситон-фононного взаимодействия.

### 3. Затухание медленных ($V_k < s$) экситонов на тепловых фононах

В этом случае рассеяние экситонов происходит лишь с поглощением фононов (процесс $\Gamma^-$). При условии (1) и высоких температурах, когда бозевская функция распределения заменяется линейной по температуре асимптотикой, затухание медленных экситонов становится независимым от волнового вектора и прямо пропорционально температуре. Соответствующие выражения совпадают с полученными в [1,12]. Поэтому рассмотрим подробно случай низких температур ($T_{low}$). Пренебрегая в функции $F(q, T)$ (4) единицей по сравнению с экспонентой и следуя (6), выражение (3) перепишем в виде

$$\Gamma_k^-(T_{low}) = \frac{1}{9\pi\rho s V_k}\int_{2m(s-V_k)/\hbar}^{2m(s+V_k)/\hbar} f(q)e^{-\beta q}\,dq . \qquad (12)$$

Используя значения интегралов (П.1), (П.2), приведенных в Приложении, получаем точное выражение для затухания медленных экситонов произвольного радиуса

$$\Gamma_k^-(T_{\text{low}})\big|_{\text{slow}} = \frac{1}{9\pi\rho s V_k}\sum_{j=1}^{2}\left\{\frac{1}{6}\left(\frac{C_j}{\alpha_j}\right)^2 e^{-\beta q}\left[-\frac{q}{(1+\alpha_j^2 q^2)^3}+\frac{q+\beta/\alpha_j^2}{4(1+\alpha_j^2 q^2)^2}+\frac{q(3+\beta^2/\alpha_j^2)-\beta/\alpha_j^2}{8(1+\alpha_j^2 q^2)}\right]+\right.$$

$$+\frac{qC_1C_2\alpha_j^2 e^{-\beta q}}{(\alpha_2^2-\alpha_1^2)^2(1+\alpha_j^2 q^2)}-$$

$$\left.-\operatorname{Re}\left[\frac{C_j^2\beta}{48\alpha_j^4}\left(3+\frac{\beta^2}{\alpha_j^2}+\frac{3i\alpha_j}{\beta}\right)-\frac{C_1C_2}{(\alpha_2^2-\alpha_1^2)^2}\left(-\beta+i\alpha_j-\frac{4i\alpha_1^2\alpha_2^2}{\alpha_2^2-\alpha_1^2}\frac{(-1)^{j-1}}{\alpha_j}\right)e^{i\beta/\alpha_j}E_1\left(\beta q+\frac{i\beta}{\alpha_j}\right)\right]\right\}_{2m(s-V_k)/\hbar}^{2m(s+V_k)/\hbar},$$

(13)

где $E_1(z)=\int_z^\infty (e^{-t}/t)\,dt$ — интегральная показательная функция.

Проанализируем выражение (13). Если устремить температуру к нулю ($\beta\to\infty$), то затухание медленных экситонов на фононах исчезает, что очевидно и должно происходить, поскольку, согласно (7), оно определяется рассеянием быстрых экситонов на фононах. В противном случае (в рассматриваемой области температур это приближение в действительности использовать некорректно) при $\beta\to 0$ подынтегральные функции (12) и (7) совпадают, и, следовательно, без учета пределов интегрирования результат (13) можно проверить на совпадение с выражением (7). Совпадение имеет место при учете значения предела выражения (П.3).

В случае, когда $V_k\to 0$, раскрытие неопределенности типа 0/0 в (13) дает

$$\Gamma_{k\to 0}^-(T_{\text{low}})\to 0\ . \qquad (14)$$

Это означает, что с уменьшением значения волнового вектора затухание не становится существенным, и экситоны остаются «хорошими» квазичастицами.

Рассмотрим далее затухание в кристаллах, для которых выполняются неравенства $\alpha_i q_{1,4}\gg 1$ или $\alpha_i q_{1,4}\ll 1$ для экситонов большого и малого радиусов соответственно. В первом случае, согласно (13), находим

$$\Gamma_k^-(T_{\text{low}})\big|_{\text{slow}}\cong\frac{2}{9\pi\rho s V_k r_{\text{ex}}^3}\times$$

$$\times\left[\sum_{i=1}^{2}C_i^2\left(\frac{m}{2m_i}\right)^3\left(1+\frac{2m^2}{m_i^2}\rho_T^2\right)-2C_1C_2\left(1+\frac{2m^2}{m_e m_h}\rho_T^2\right)\right], \qquad (15)$$

где

$$\rho_T=\frac{\hbar s}{r_{\text{ex}}k_B T}\ ,$$

и мы использовали только первый член в разложении (П.4) интегральной экспоненты в (13).

Согласно (15), затухание экситонов больших радиусов растет как с уменьшением их волнового вектора, так и с понижением температуры кристаллической решетки. При этом температура должна подчиняться неравенству

$$T\ge T_c=2ms\hbar/k_B m_i r_{\text{ex}}\ , \qquad (16)$$

при достаточно больших $r_{ex}$ обеспечивающих вместе с $q_1$ или $q_4$ выполнение неравенства (1). Это означает, что при низких температурах взаимодействие с кристаллической решеткой экситонов с большими радиусами и малыми волновыми векторами больше нельзя рассматривать как слабое.

Интересной особенностью является также проявление яркой зависимости затухания от отношения эффективных масс экситона и дырки, следующее из формул (9), (15). Затухание оказывается сильнее для кристаллов, в которых отношение $m_e/m_h$ значительно отличается от единицы.

Затухание экситонов малых радиусов на фононах определяется выражением

$$\Gamma_k^-(T_{\text{low}})\big|_{\text{slow}}\simeq\frac{k_B T(C_c-C_v)^2}{9\pi\rho\hbar s^2 V_k}\exp(-2ms^2/k_B T)\times$$

$$\times\left\{\exp(2msV_k/k_B T)\left[\frac{k_B T}{\hbar s}+\frac{2m}{\hbar}(s-V_k)\right]^2-\right.$$

$$\left.-\exp(-2msV_k/k_B T)\left[\frac{k_B T}{\hbar s}+\frac{2m}{\hbar}(s+V_k)\right]^2\right\}, \qquad (17)$$

которое в предельном случае $V_k \to 0$ является конечной величиной, совпадающей со значением величины затухания (19) работы [12] с точностью до численного коэффициента. Поскольку при температуре абсолютного нуля рассеяние медленных экситонов на тепловых фононах отсутствует, т.е. экситоны с малыми $k$ являются незатухающими возбуждениями, такое поведение $\Gamma_k^-$ может предполагать существенную перестройку экситонного спектра. Это достаточно очевидно, поскольку медленные экситоны должны сильно затухать на фононах, средняя тепловая энергия которых много больше $\varepsilon_k$.

Термализованные экситоны даже при низких температурах обладают скоростями $V_k > s$ [7], поэтому рассмотрим далее затухание экситонов с $k > ms/\hbar$.

### 4. Затухание быстрых ($V_k > s$) экситонов на тепловых фононах

В этом случае наряду с поглощением энергии кристаллической решетки экситонами становятся возможными процессы с отдачей энергии решетке. Тогда, согласно (3), и при условии (6)

$$\Gamma_k(T)\Big|_{\text{fast}} = \frac{1}{9\pi\rho s V_k}\left[\int_0^{2m(V_k+s)/\hbar} F(q,T)\,dq + \int_0^{2m(V_k-s)/\hbar} F(q,T)e^{\beta q}\,dq\right], \tag{18}$$

где первое слагаемое соответствует поглощению, а второе — испусканию фононов. При скоростях экситонов, превышающих значение $\mp s + \hbar q_D/2m$, верхние пределы интегрирования по $q$ в (18) заменяются на $q = q_D$.

Как и выше рассмотрим два предельных случая по температуре.

1. $2ms(s + V_k) \ll k_B T$. Расчет $\Gamma_k(T)$ с функцией связи типа (2) выполнен в [1]. Однако там учтены только процессы с поглощением фонона, т.е. процессы $\Gamma^-(T)$. Учитывая также и вклад процессов с излучением фононов ($\Gamma^+(T)$), находим для высоких температур ($T_{\text{high}}$) и при выполнении условия (1)

$$\Gamma_k(T_{\text{high}})\Big|_{\text{fast}} = \Gamma_k^+(0) + \frac{k_B T}{18\pi\rho\hbar s^2 V_k}\sum_{j=1}^{2}\left\{\frac{1}{3}\sum_{i=1}^{2}\frac{C_i^2}{\alpha_i^2}\left[1 - \frac{1}{(1+\alpha_i^2 q_j^2)^3}\right] - \right.$$
$$\left. - \frac{2C_1C_2}{(\alpha_2^2-\alpha_1^2)^2}\left[\sum_{i=1}^{2}\alpha_i^2\left(1 - \frac{1}{1+\alpha_i^2 q_j^2}\right) + \frac{2\alpha_1^2\alpha_2^2}{\alpha_2^2-\alpha_1^2}\ln\frac{1+\alpha_1^2 q_j^2}{1+\alpha_2^2 q_j^2}\right]\right\}, \tag{19}$$

где $\Gamma_k^+(0)$ определено формулой (7) и $q_{j=2} \equiv q_4$ (формула (6)). Если в (19) полагать $V_k \gg s$, то $q_1 = q_4 \equiv 2mV_k/\hbar$, и суммирование по $j$ дает двойку.

При $r_{ex}$ из (18), (19) можно получить результаты, известные по работам [1,6,12], с функцией связи типа $|G_q| = C(\hbar q/2ms)^{1/2}$, $C = C_c - C_v$. В противоположном случае, когда $r_{ex} \to \infty$, затухание быстрых экситонов становится равным

$$\Gamma_k(T_{\text{high}})\Big|_{\text{fast}} = \Gamma_k^+(0) + \frac{4m^2 k_B T}{9\pi\rho\hbar s^2 r_{ex}^2 V_k}\left[\frac{1}{4}\left(\frac{C_c^2}{m_e^2} + \frac{C_v^2}{m_h^2}\right) - \frac{2C_c C_v}{(m_h^2-m_e^2)^2}\left(m_e^2 + m_h^2 + \frac{4m_e^2 m_h^2}{m_h^2-m_e^2}\ln\frac{m_e}{m_h}\right)\right], \tag{20}$$

где первый член представлен формулой (9). Если при нулевой температуре затухание быстрых экситонов уменьшалось как $r_{ex}^{-3}$ для кристаллов с большими экситонными радиусами, то учет тепловых фононов ослабляет зависимость от экситонного радиуса ($\Gamma \approx r_{ex}^{-2}$). При $m_e = m_h \equiv m/2$, с учетом (10), выражение (20) редуцируется до

$$\Gamma_k(T_{\text{high}})\Big|_{\substack{\text{fast}\\ m_e=m_h}} = \frac{2(C_c - C_v)^2}{9\pi\rho r_{ex}^2 s V_k}\left(\frac{1}{r_{ex}} + \frac{k_B T_{\text{high}}}{2\hbar s}\right). \tag{21}$$

Здесь наглядно сопоставлены вклады в затухание виртуальных и тепловых фононов. Видно, что первое слагаемое (радиус экситона) в борновском приближении теории рассеяния может соответствовать длине рассеяния Ферми, тогда как второе — фактору Дебая—Валлера при высоких температурах. При этом температуры не должны превышать значение $\hbar\omega_D$. Сумму этих членов можно тогда трактовать как длину диффузного рассеяния.

Таким образом, затухание быстрых экситонов при высоких температурах является линейной функцией как температуры, так и квазиимпульса в обоих пределах по радиусу экситонов.

2. $2ms(s + V_k) >> k_B T$. Для тепловых фононов вклад процессов с излучением или поглощением фонона в данном случае формально определяется лишь пределами интегрирования. Поэтому здесь в полной мере можно воспользоваться результатами проведенного выше расчета затухания для медленных экситонов при низких температурах, а также значениями $\Gamma^+(0)$ при нулевой температуре. Тогда можно записать

$$\Gamma_k(T_{\text{low}})\Big|_{\text{fast}} = \Gamma_k^+(0) + \Gamma_k^-(T_{\text{low}})\Big|_{\text{slow}}\Big|_0^{2m(V_k+s)/\hbar} + \\ + \Gamma_k^-(T_{\text{low}})\Big|_{\text{slow}}\Big|_0^{2m(V_k-s)/\hbar}. \qquad (22)$$

Подставив (7), (13) в (22), определим затухание быстрых экситонов при низких температурах в явном виде. Проанализируем (22) для ряда предельных случаев. В частности, из (22) видно, что при скоростях экситонов, незначительно превышающих скорость звука в кристалле или совпадающих с ней, экситоны могут излучать фононы все с меньшей вероятностью, и вклад последнего слагаемого в затухание становится исчезающе малым. При скоростях экситонов, значительно превышающих скорость звука, процессы с поглощением и излучением тепловых фононов становятся равновероятными, и в результате слагаемое, описывающее температурную часть затухания, удваивается. Аналогичная ситуация может возникать и при не очень больших скоростях экситонов, если их радиусы можно считать большими (при выполнении в целом условия (8)). Тогда, рассматривая для простоты случай $m_e = m_h \equiv m/2$, согласно (9), (15), находим

$$\Gamma_k(T_{\text{low}})\Big|_{\substack{\text{fast}\\ m_e=m_h}} = \frac{4(C_c - C_v)^2}{9\rho s r_{\text{ex}}^3 V_k}\left[1 + 8\left(\frac{\hbar s}{r_{\text{ex}} k_B T}\right)^2\right]. \qquad (23)$$

В этом пределе затухание обратно пропорционально квадрату температуры, которая, однако, не должна быть меньше $T_c$ (условие (16)). Из этой формулы также видно, что экситоны с большими радиусами отдают меньшую энергию кристаллической решетке, т.е. рассеиваются все меньше, однако при более низкой температуре решетки теряют все большую энергию, что естественно, так как их скорости превышают скорость звука. При этом уменьшение скорости экситонов также увеличивает вероятность их рассеяния.

В пределе экситонов малых радиусов затухание перестает зависеть от радиуса экситонов и, согласно формуле (17), а также (9) работы [12], имеем

$$\Gamma_k(T_{\text{low}})\Big|_{\text{fast}} = \frac{(C_c - C_v)^2}{9\pi\rho s V_k} \times \\ \times \left\{\frac{1}{3}\left(\frac{2m}{\hbar}\right)^3 (V_k - s)^3 V_k + \frac{k_B T}{\hbar s}\left[2\left(\frac{k_B T}{\hbar s}\right)^2 - \right.\right. \\ \left.\left. - \exp\left(2ms(V_k - s)/k_B T\right)\left(\frac{k_B T}{\hbar s} + \frac{2m}{\hbar}(V_k - s)\right)^2\right]\right\}, \qquad (24)$$

где мы отбросили малый член, отвечающий за поглощение фононов быстрыми экситонами. По мере уменьшения радиуса экситонов их частота столкновения с атомами решетки увеличивается. Поэтому затухание таких экситонов на тепловых колебаниях решетки сильнее растет с увеличением амплитуды колебаний атомов, пропорциональной температуре. Особенно ясно это видно при скоростях экситонов, сравнимых со скоростью звука. Тогда

$$\Gamma(T_{\text{low}})\Big|_{\substack{\text{fast}\\ V_k=s}} = \frac{(C_c - C_v)^2}{9\pi\rho\hbar^3 s^5}(k_B T)^3, \qquad (25)$$

и затухание становится пропорциональным кубу температуры, что также соответствует выводу [12].

## 5. Обсуждение результатов

В качестве иллюстрации на рис. 1 представлены зависимости затухания от величины волнового вектора экситона, рассчитанные по формулам (7), (13), (19) при следующих значениях параметров кубического кристалла: $C_c - C_v = 2$ эВ; $\rho = 1$ г/см$^3$; $s = 10^5$ см/с; $a = 3{,}9$ Å; $m = 1{,}16 m_0$. Сплошные кривые *1–3* отличаются значениями экситонного радиуса. Штриховой линией изображен ход зависимости $\hbar^2 k^2/2m$, которая разделяет слабо и сильно затухающие состояния, введенные Рашбой [13]. Пунктиром показаны те же зависимости при граничных температурах (кривая *4*

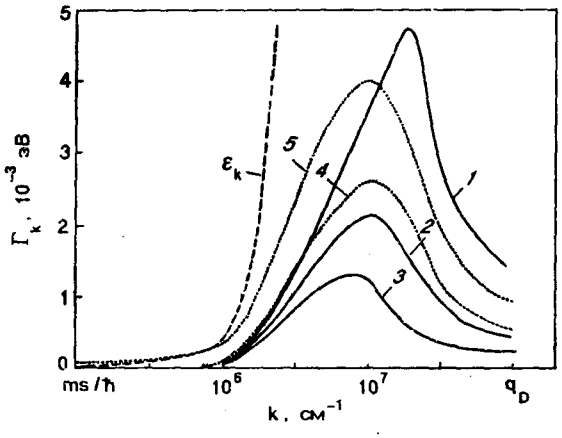


*Рис. 1.* Зависимость затухания от волнового вектора экситона при разных температурах $T$, K: 0 (*1–3*); 20 (*4*); 77,3 (*5*) и радиусах экситона, $r_{ex}$, Å: 10 (*1*); 15 (*2*, *4*, *5*); 20 (*3*). Штриховой линией отмечена зависимость $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2/2m$

($T$ = 20 K) и кривая *5* ($T$ = 77,3 K)) для экситонов с радиусом $r_{ex}$ = 15 Å. Интервал изменения квазиимпульса ограничен пределами $ms/\hbar \le k \le q_D$. Экситоны с импульсами $ms/\hbar$ являются незатухающими при нулевой температуре. Вследствие линейного масштаба на рисунке фактически отражена только область быстрых экситонов.

Кривая $\hbar^2 k^2/2m$ не пересекается ни в одной точке с кривыми $\Gamma_k$ вплоть до температур ~ 60 K, поэтому экситоны при меньших температурах рассматриваются как возбуждения, слабо взаимодействующие с решеточными фононами. Из равенства $\Gamma_k(T) = \hbar^2 k^2/2m$ можно в каждом из рассматриваемых случаев точно определить ту граничную температуру $T_{lim}$, при которой кривые $\Gamma_k(T)$ и $\varepsilon_k$ пересекаются [7]. При более высоких температурах $T > T_{lim}$ в нижней части зоны Бриллюэна находятся экситоны с импульсами $k > k_{lim}$, пересекающими кривую $\hbar^2 k^2/2m$, и тогда их нельзя больше рассматривать как возбуждения слабо взаимодействующие с решеткой.

С ростом $k$ как при нулевой, так и при отличных от нуля температурах, зависимости $\Gamma_k$ имеют максимум, который растет по абсолютной величине и смещается в сторону предельного дебаевского импульса по мере уменьшения радиуса экситона.

При расчетах проиллюстрированных зависимостей $\Gamma_k(0)$ и $\Gamma_k(T)$ мы полагали эффективные массы электрона и дырки равными друг другу. Необходимо отметить, что при этом не возникает особенностей в знаменателях (7), (13), (19) при $\alpha_1 = \alpha_2$, более того, члены с разностью $\alpha_2^2 - \alpha_1^2$ в знаменателях этих выражений после суммирования по $i$ свертываются к виду $(C_c - C_v)^2$. Так например, для быстрых экситонов произвольных радиусов в случае высоких температур

$$\Gamma_k(T_{high})\Big|_{\substack{fast \\ m_e = m_h}} = \frac{8(C_c - C_v)^2}{9\pi\rho s r_{ex}^2 V_k} \times$$

$$\times \left\{ q_4 \left( -\frac{1}{3Q^3} + \frac{1}{12Q^2} + \frac{1}{8Q} + \frac{1}{2q_4 r_{ex}} \operatorname{arctg} \frac{q_4 r_{ex}}{\ldots} \right) + \right.$$

$$\left. + \frac{k_B T}{3\hbar s} \left[ 2 - \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{1 + 1/16 r_{ex}^2 q_i^2} \right] \right\}, \qquad (26)$$

где $Q = 1 + r_{ex}^2 q_4^2/16$, $q_{i=1} = q_1^+$, $q_{i=2} = q_4$.

Случай равных эффективных масс электрона и дырки интересен прежде всего тем, что затухание экситонов становится минимальным не только при рассеянии на продольных акустических фононах в атомарном кристалле (как это следует в данном случае из формул (9), (15)), но также и при их рассеянии на продольных оптических колебаниях в многоатомном кристалле.

В заключение отметим, что рассмотренный здесь линейный закон дисперсии LA-фононов для фононных волновых векторов, близких к дебаевскому, для некоторых кристаллов с малыми экситонными радиусами является достаточно натянутым предположением. Однако для ряда кристаллов с большими радиусами экситона выполнение неравенства $\alpha q >> 1$ (которое мы здесь использовали) может наступать и при квазиимпульсах, относящихся к середине и даже нижней части зоны Бриллюэна. Такое первоначальное предположение необходимо, но более последовательным было бы описание дисперсии LA-фононов, например, выражением типа $\hbar\omega(q) = A \sin(\hbar s q/A)$, где $A$ — размерная величина не зависимая от $q$.

## Приложение

Ниже приведены четыре математических выражения, необходимых при расчете затухания экситонов на акустических фононах в кристалле

$$\int \frac{x^2\,dx}{(1+ax^2)^4}\,e^{-\beta x} = e^{-\beta x}\left[-\frac{x}{6a(1+ax^2)^3}+\frac{x+\beta/a}{24a(1+ax^2)^2}+\frac{x(3+\beta^2/a)-\beta/a}{48a(1+ax^2)}\right]-$$
$$-\frac{\beta}{48a^2}\,\mathrm{Re}\left[\left(3+\frac{\beta^2}{a}+\frac{3i\sqrt{a}}{\beta}\right)e^{i\beta/\sqrt{a}}E_1(\beta x+i\beta/\sqrt{a})\right]. \qquad (\Pi.1)$$

$$\int \frac{x^2e^{-\beta x}\,dx}{(a_1+b_1x^2)^2(a_2+b_2x^2)^2} = \frac{-1}{2(a_1b_2-a_2b_1)^2}\times$$

$$\times\sum_{j=1}^{2}\left\{\frac{xb_je^{-\beta x}}{a_j+b_jx^2}+\mathrm{Re}\left[\left(-\beta+i\sqrt{\frac{b_j}{a_j}}-\frac{4ib_1b_2}{a_1b_2-a_2b_1}\sqrt{\frac{a_j}{b_j}}\,(-1)^{j-1}\right)e^{i\beta(a_j/b_j)^{1/2}}E_1\left(\beta x+i\beta\sqrt{\frac{a_j}{b_j}}\right)\right]\right\}. \qquad (\Pi.2)$$

$$\lim_{\beta\to 0}\mathrm{Re}\left[ie^{i\beta/\alpha_j}E_1(\beta x+i\beta/\alpha_j)\right] = -\operatorname{arctg}\alpha_j x. \qquad (\Pi.3)$$

$$E_1(x+iy) = \frac{\pi}{2}+E_1(x)+e^{-x}\sum_{n=0}^{\infty}n!(-x)^{-n-1}\left[1-e^{-iy}\sum_{m=0}^{n}\frac{(iy)^m}{m!}\right],\quad |y|<<|x|. \qquad (\Pi.4)$$


1. Y. Toyozawa, *Prog. Theor. Phys.* **20**, 53 (1958).
2. Y. Toyozawa, *Prog. Theor. Phys.* **27**, 89 (1962).
3. А. С. Давыдов, *Теория твердого тела*, Наука, Москва (1976).
4. В. М. Агранович, *Теория экситонов*, Наука, Москва (1968).
5. A. Suna, *Phys. Rev.* **135**, A111 (1964).
6. А. С. Давыдов, Б. М. Ницович, *ФТТ* **9**, 2230 (1967).
7. *Криокристаллы*, Б. И. Веркин, А. Ф. Прихотько (ред.), Наукова думка, Киев (1983).
8. Н. И. Григорчук, А. Ф. Лубченко, Н. В. Ткач, *УФЖ* **21**, 1555 (1976).
9. Н. И. Григорчук, *УФЖ* **23**, 470 (1978).
10. I. Ya. Fugol, *Adv. Phys.* **27**, 1 (1978).
11. И. Я. Фуголь, Е. И. Тарасова, *ФНТ* **3**, 366 (1977).
12. И. Я. Фуголь, Е. И. Тарасова, *ФНТ* **7**, 1325 (1981).
13. Э. И. Рашба, *Изв. АН СССР, Сер. физ.* **40**, 1793 (1976).


## Exciton damping in a monoatomic crystal

N. I. Grigorchuck

The analytical expressions have been obtained for defining decay of exciton in a monoatomic crystal as a function of the velocity of the exciton of an arbitrary radius, its wave vector being taken into account and the lattice temperature. The run of the curves obtained has been studied thoroughly for the limiting cases, i.e. high and low temperatures (including $T = 0$), slow and fast excitons, large and small exciton radii. For some of them, there has been found a satisfactory agreement with the results known earlier. Calculations have been made in one-phonon approximation for a linear dependence of acoustic phonon energy upon the wave vector.