

**СИСТЕМЫ СО МНОГИМИ ПОЗИТРОНАМИ И ЭЛЕКТРОНАМИ. ОБЗОР
I. ПОЗИТРОНЫ И ПОЗИТРОНИЙ, ПОЗИТРОННЫЕ И ПОЗИТРОНИЕВЫЕ
КОМПЛЕКСЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ**

Е.П.Прокопьев

: НИЦ «Курчатовский институт», ФГБУ «ГНЦ РФ ИТЭФ».

Адрес: ул. Б.Черемушкинская, 25, Москва, Россия, 117218

Аннотация

Важнейшей проблемой физики медленных позитронов является построение строгой теории аннигиляции в кристаллических твердых телах. В данном обзорном исследовании проанализирована проблема многих электронов и позитронов в твердом теле с помощью перехода от вторичного квантования к конфигурационному представлению по методу Фока. Рассмотрены методы расчетов стационарных состояний систем из n электронов и m позитронов во внешнем поле и поле кристаллической решетки и вероятностей аннигиляционных переходов в этих внешних полях. Для этого в приближении метода Хартри-Фока рассмотрена задача электронов и позитронов в поле кристаллической решетки. Сформулирована проблема многих электронов и позитронов в твердом теле с помощью метода вторичного квантования. Рассмотрены свойства блоховских состояний электронов, позитронов и дырок в поле кристаллической решетки с учетом их взаимодействия. Особое внимание уделено проблемам экситонов, атома Ps и позитрон-экситонных комплексов.

Введение

Важнейшей проблемой физики медленных позитронов является построение строгой теории аннигиляции в кристаллических твердых телах (см., например, [1]). Поэтому в данном исследовании сформулируем проблему многих электронов и позитронов в твердом теле с помощью перехода от вторичного квантования к конфигурационному представлению по методу Фока [2], использованного в работах [3-7].

Вначале приведем методы расчетов стационарных состояний систем из n электронов и m позитронов во внешнем поле и поле кристаллической решетки [4] и вероятностей аннигиляционных переходов в этих внешних полях [3,8].

1. Квантовополевая теория системы многих электронов и позитронов в твердом теле

Известно, что связь между конфигурационным пространством и вторичным квантованием по Фоку [2] дается следующим образом. Гамильтониан с неопределенным числом частиц в рамках метода вторичного квантования имеет вид [4]

$$H = \int \psi^+(x)H(x)\psi(x)dx + \frac{1}{2} \int \psi^+(x)\psi^+(x')G(x,x')\psi(x)\psi(x')dx dx' , \quad (1)$$

где $\psi(x)$ и $\psi^+(x)$ - операторы уничтожения и рождения фермиевского поля. Они удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям

$$\psi(x')\psi^+(x') - \varepsilon\psi^+(x)\psi(x') = \delta(x - x') \quad (2)$$

$$\psi(x')\psi(x) - \varepsilon\psi(x)\psi(x') = 0$$

Здесь $\varepsilon = +1$ соответствует случаю бозонов, а $\varepsilon = -1$ - фермионов. В том случае, если оператор числа частиц

$$\hat{n} = \int \psi^+(x)\psi(x)dx \quad (3)$$

диагонален, то операторы ψ и ψ^+ имеют не равные нулю матричные элементы $(n | \psi | n+1)$ и $(n+1 | \psi^+ | n)$, где

$$\psi(x) = \begin{vmatrix} 0 \dots (0 | \psi | 1) \dots 0 \dots 0 \dots 0 \dots \\ 0 \dots 0 \dots (1 | \psi | 2) \\ 0 \dots 0 \dots 0 \dots (2 | \psi | 3) \dots \\ 0 \dots 0 \dots 0 \dots 0 \dots \end{vmatrix} \quad (4)$$

$$\psi(x) = \begin{vmatrix} \dots 0 \dots 0 \dots 0 \dots 0 \\ (1 | \psi^+ | 0) \dots 0 \dots 0 \dots 0 \\ \dots 0 \dots (2 | \psi^+ | 1) \dots 0 \dots 0 \\ \dots 0 \dots 0 \dots (3 | \psi^+ | 2) \dots 0 \\ \dots \end{vmatrix} \quad (5)$$

Вектор состояния по Фоку, на который действуют операторы рождения и уничтожения частиц ψ и ψ^+ имеет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} const \\ \psi(x_1) \\ \psi(x_1, x_2) \\ \psi(x_1, \dots, x_n, \dots) \end{array} \right\}, \quad (6)$$

где каждый элемент столбца представляет собой волновую функцию Шредингера в пространстве с определенным числом частиц

Выпишем действие операторов $(n | \psi | n+1)$ и $(n+1 | \psi^+ | n)$ по Фоку на волновую функцию $\psi(x_1, x_2, \dots, x_n)$

$$(n-1 | \psi | n) \psi(x_1, \dots, x_n) = \sqrt{n} \psi(x_1, \dots, x_{n-1}), \quad (6)$$

$$(n+1 | \psi^+ | n) \psi(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^{n-1} \varepsilon^{n+1} \delta(x_k - x) \psi(x_1, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_n), \quad (7)$$

$$(n | \psi^+(x) \psi(x') | n) \psi(x_1, \dots, x_n) = \sum_{k=1}^n \delta(x_k - x) \psi(x_1, \dots, x_{k-1}, x', x_{k+1}, \dots, x_n), \quad (8)$$

$$(n | \psi(x') \psi^+(x) | n) \psi(x_1, \dots, x_n) = \delta(x' - x) \psi(x_1, \dots, x_n) + \varepsilon \sum_{k=1}^n \delta(x_k - x) \psi(x_1, \dots, x_{k-1}, x', x_{k+1}, \dots, x_n), \quad (9)$$

Квантованное уравнение движения имеет вид

$$H(x) \psi(x) = [H^0(x) + V(x)] \psi(x) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (10)$$

Здесь $H(x) = H^0(x) + V(x)$.

Именно из этого уравнения можем получить уравнение Шредингера в конфигурационном пространстве для системы с определенным числом частиц. Гамильтониан взаимодействия электронов во внешнем поле равен

$$H = \int \psi^+(x) H(x) \psi(x) dx + \frac{e^2}{2} \iint \psi^+(x) \psi^+(x') \frac{1}{|\bar{r} - \bar{r}'|} \psi(x') \psi(x) dx dx' \quad (11)$$

Из выражения (11) находим энергию системы с определенным числом частиц n .

$$W = \langle W_n | H | W_n \rangle = \int \psi^+(x_1, \dots, x_n) (n | H | n) \psi(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n \quad (12)$$

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left\| \begin{array}{l} \varphi_1(x_1) \dots \varphi_1(x_2) \dots \varphi_1(x_3) \dots \\ \varphi_2(x_1) \dots \varphi_2(x_2) \dots \varphi_2(x_3) \dots \\ \varphi_3(x_1) \dots \varphi_3(x_2) \dots \varphi_3(x_3) \dots \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\| = \frac{1}{\sqrt{n!}} \|\varphi_i(x_k)\|_{i,k=1,2,\dots,n} \quad (13)$$

Таким образом

$$\bar{W} = \int \sum_{i=1}^n \varphi_i^+ H(x) \varphi dx + \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho(x, x) \rho(x', x') - |\rho(x, x')|^2}{|r - r'|} dx dx' \quad (14)$$

Минимизируя функционал $\delta W = 0$ с учетом ортонормированности

$$\int \varphi_i^+(x) \varphi_j(x) dx = \delta_{ij} \quad (15)$$

получаем уравнения Фока

$$\left[H(x) + e^2 \sum_{j=1}^n \frac{1}{|\bar{r} - \bar{r}'|} \varphi_j^+(x') \varphi_j(x') dx' \right] \varphi_i(x) - \sum_{j=1}^n \left(e^2 \int \frac{1}{|\bar{r} - \bar{r}'|} \varphi_j^+(x') \varphi_i(x') dx' \right) \varphi_j(x) =$$

$$= \sum_{j=1}^n \lambda_{ij} \varphi_j(x), j = 1, 2, \dots, n \quad (16)$$

Выражение (16) и есть уравнения Фока в конфигурационном пространстве в произвольном внешнем поле. Использование этих уравнений (наиболее строгих) в проблеме твердого тела чрезвычайно затруднено. Полезно изложить основные черты математического формализма получения этих уравнений для систем со многими позитронами и электронами в конденсированных средах и твердом теле в приближении метода Хартри-Фока [5].

Для этого изложим формализм вторичного квантования, обычно проводимый в два этапа. Для этого вначале рассмотрим «классическое поле», а затем его квантование. В качестве классического волнового уравнения выбираем уравнение Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right\} \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (17)$$

и комплексно сопряженное ему уравнение

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right\} \psi^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \quad (18)$$

Выпишем функцию Лагранжа, а также уравнение Лагранжа, которые приводят к уравнениям (17) и (18)

$$L = \int \psi^* \left\{ i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} - V(x)\psi + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \right\} dx \quad (19)$$

Отсюда следует

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}^*} - \frac{\delta L}{\delta \psi^*} = - \left\{ i\hbar \dot{\psi} - V(\bar{x})\psi + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \right\} = 0, \quad (20)$$

то есть это просто уравнения (17) и (18).

Канонически сопряженный импульс π введем как произвольную функцию Лагранжа

$$\pi = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}} = -\frac{\hbar}{i} \dot{\psi}^*, \quad (21)$$

Таким образом, получаем функцию Гамильтона из функции Лагранжа посредством соотношения

$$H = \int (\pi \dot{\psi} - L) d^3x = \int \left\{ i\hbar \psi \dot{\psi}^* - i\hbar \dot{\psi}^* \psi - \psi^* \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \psi^* V \psi \right\} d^3x \quad (22)$$

Отсюда находим явный вид первично квантованной функции Гамильтона

$$H = \int \psi^+(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right\} \psi(x) d^3x, \quad (23)$$

Заметим, что в данном случае волновые функции ψ и ψ^* представляют собой «классические поля». Разложим амплитуду поля по собственным функциям волнового уравнения Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right\} \psi_\mu = i\hbar \frac{\partial \psi_\mu}{\partial t} \quad (24)$$

Эти функции записываются в виде

$$\psi_\mu = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_\mu t\right) \varphi_\mu(\bar{x}) \quad (25)$$

Отметим, потенциал V не зависит от времени.

Разложим теперь волновую функцию $\psi(x)$ по этим собственным функциям φ_μ . Запишем временной множитель в виде

$$a_\mu(t) = a_\mu(0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} t\right) \quad (26)$$

Отсюда разложение волновых функций ψ и ψ^* принимают следующие значения

$$\psi(\bar{x}) = \sum_\mu b_\mu \varphi_\mu(\bar{x}) , \quad (27)$$

$$\psi^*(\bar{x}) = \sum_\mu b_\mu^+ \varphi_\mu^*(\bar{x}) , \quad (28)$$

Полезно напомнить, как получаются перестановочные соотношения для амплитуд a . Для этого введем вакуумное состояние Φ_0 и a_μ^+ - оператор рождения. Тогда формально можно создать две частицы в одном и том же состоянии μ через $a_\mu^+ a_\mu^+ \Phi_0$. Естественно, что

$$a_\mu^+ a_\mu^+ \Phi_0 = 0 \quad (29)$$

Требование (29) должно соблюдаться не только для Φ_0 , но и для любого Φ , так что

$$a_\mu^+ a_\mu^+ = 0 \quad (30)$$

Отсюда легко постулируются перестановочные соотношения для ферми-частиц для амплитуд поля

$$a_{\mu}^{+}a_{\nu}^{+} + a_{\nu}^{+}a_{\mu}^{+} = 0, \quad (31)$$

$$a_{\mu}^{+}a_{\nu} + a_{\nu}^{+}a_{\mu} = \delta_{\mu\nu}, \quad (32)$$

$$a_{\mu}a_{\nu} + a_{\nu}a_{\mu} = \delta_{\mu\nu}, \quad (33)$$

Так как полевые операторы $\psi(\bar{x})$ и $\psi^{+}(\bar{x})$ связаны с операторами a_{μ} и a_{μ}^{+} через разложения (27), (28), то перестановочные соотношения (31)-(33) имеют своим следствием перестановочные соотношения для ψ и ψ^{*} вида (2) и наоборот.

Таким образом, оператор Гамильтона оказывается равным

$$H = \int \psi^{+} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right\} \psi d^3x \equiv \sum_{\mu} E_{\mu} a_{\mu}^{+} a_{\mu} \quad (34)$$

При этом уравнение Шредингера для квантованного состояния имеет вид

$$H\Phi = E\Phi, \quad (35)$$

причем

$$a_{\mu}\Phi_0 = 0 \quad (36)$$

и

$$\Phi_{(n)} = \prod_{\mu} (a_{\mu}^{+})^{n_{\mu}} \Phi_{\mu} \quad (37)$$

Энергия E дается выражением

$$E = \sum_{\mu} E_{\mu} n_{\mu}, \text{ где } n_{\mu} = 0 \text{ или } 1 \quad (38)$$

Полное число частиц равно

$$N = \sum_{\mu} n_{\mu} \quad (39)$$

Далее рассмотрим наиболее общее одночастичное состояние, задаваемое суперпозицией одночастичных состояний

$$\Phi = \sum_{\mu} C_{\mu} a_{\mu}^{+} \Phi_0 \quad (40)$$

причем $\sum_{\mu} |C_{\mu}|^2 = 1$ является еще произвольным. Перейдем вновь к представлению состояния Φ .

Очевидно, что

$$a_{\mu}^{+} = \int \varphi_{\mu}(\bar{x}) \psi^{+}(\bar{x}) d^3 \bar{x} \quad (41)$$

Подставляя (41) в (40), получаем

$$\Phi = \int \sum_{\mu} C_{\mu} \varphi_{\mu}(\bar{x}) \psi^{+}(\bar{x}) d^3 \bar{x} = \int f(x) \psi^{+}(x) d^3 x \Phi_0 \quad (42)$$

Функция $f(x)$ удовлетворяет обычному одночастичному уравнению Шредингера. Далее подставим одночастичные функции (42) во вторично квантованное уравнение Шредингера (35). Имеем

$$H\Phi = \int \psi^{+}(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi(x) \int f(x') \psi^{+}(x') d^3 x' \Phi_0 \quad (43)$$

С учетом перестановочных соотношений

$$\psi^{+}(x) \psi(x) \Phi_0 = \psi^{+}(x) \delta(x - x') \Phi_0 = \psi^{+}(x') \delta(x - x') \Phi_0$$

получаем из (43)

$$H\Phi = \iint f(x') \left\{ \psi^{+}(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi(x) \right\} \delta(x - x') d^3 x d^3 x' \Phi_0 \quad (44)$$

Это выражение преобразуется к виду

$$H\Phi = \int \psi^+(x)\Phi_0 \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x) \right) f(x) d^3x \quad (45)$$

Легко видеть, что

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x) \right) f(x) = Ef(x) \quad (46)$$

Теперь рассмотрим наиболее общее состояние двух частиц

$$\Phi = \sum_{\mu_1\mu_2} C_{\mu_1} C_{\mu_2} a_{\mu_1}^+ a_{\mu_2}^+ \Phi_0 \quad (47)$$

Как и ранее

$$\Phi = \iint \sum_{\mu_1\mu_2} C_{\mu_1} C_{\mu_2} \varphi_{\mu_1}(\bar{x})\varphi_{\mu_2}(\bar{x}')\psi^+(\bar{x})\psi^+(\bar{x}')\Phi_0 d^3\bar{x}d^3\bar{x}' = \int f(x,x')\psi^+(\bar{x})\psi^+(\bar{x}')d^3\bar{x}d^3\bar{x}'\Phi_0 \quad (48)$$

Причем

$$f(x,x') = -f(x',x) \quad (49)$$

Выберем

$$H = \int \psi^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x) \right) \psi(x) d^3x + \frac{1}{2} \iint \psi^+(x)\psi^+(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \psi(x')\psi(x) d^3x d^3x' \quad (50)$$

Тогда нетрудно показать, что функция $f(x,x')$ удовлетворяет уравнению Шредингера для двух частиц

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{x_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{x_2}^2 + V(x_1) + V(x_2) + \frac{e^2}{|x_1-x_2|} \right) f(x,x') = Ef(x,x') \quad (51)$$

Можно легко обобщить этот результат для n частиц

$$\sum_{j=1}^n \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{x_j}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{x_2}^2 + V(x_j) + V(x_2) + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|x_i - x_j|} \right) f(x_1, x_2, \dots, x_n) = E f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (52)$$

Развитый выше формализм позволяет нам сформулировать задачу и для системы m нерелятивистских позитронов.

Рассмотрим теперь систему из n электронов и m позитронов в кристаллической решетке твердого тела в приближении Хартри-Фока.

2. Электроны и позитроны в кристаллической решетке: формулировка проблемы многих тел. Приближение Хартри-Фока

Сформулируем проблему многих электронов и позитронов в твердом теле с помощью метода вторичного квантования. Представим себе следующую картину: электроны и позитроны движутся в строго периодической решетке, ионы которой имеют бесконечно тяжелые массы. Иными словами можно считать, что они находятся в состоянии покоя. Принимаем далее, что электроны внутренних атомных оболочек учитываются в целом тем, что они вместе с положительно заряженными атомными ядрами создают эффективный, периодический с периодом решетки потенциал V .

Естественно, что позитроны в основном движутся по периферии атомов кристалла в силу электростатического отталкивания ядер. Оператор Гамильтона для электронов и позитронов состоит из четырех частей: кинетической энергии электронов (позитронов), потенциальной энергии взаимодействия между электронами (позитронами), кулоновской энергии взаимодействия между электронами (позитронами) и кулоновского взаимодействия электронов с позитронами. Соответствующее уравнение Шредингера будет иметь вид

$$\left[\begin{aligned} & \psi^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) \right) \psi(x) d^3x + \frac{1}{2} \iint \psi^+(x) \psi^+(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \psi(x') \psi(x) d^3x d^3x' - \\ & - \iint \psi^+(x) \psi(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \chi^+(x) \chi(x') d^3x d^3x' \end{aligned} \right] \Phi = E \Phi \quad (53)$$

$$\left[\begin{array}{l} \chi^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) \right) \chi(x) d^3x + \frac{1}{2} \iint \chi^+(x) \chi^+(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \chi(x') \chi(x) d^3x d^3x' - \\ - \iint \chi^+(x) \chi(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \psi^+(x) \psi(x') d^3x d^3x' \end{array} \right] \Phi = E_+ \Phi \quad (54)$$

Причем функции $\psi^+(x), \psi(x), \chi^+(x), \chi(x)$ являются операторами, удовлетворяющими ферми-перестановочным соотношениям типа (31)-(33). Разложим эти операторы по собственным функциям $\varphi_{k_-}, \varphi_{k_-}^*, \varphi_{k_+}, \varphi_{k_+}^*$

$$\psi(x) = \sum_{k_-} a_{k_-} \varphi_{k_-}(x); \chi(x) = \sum_{k_+} a_{k_+} \varphi_{k_+}(x) \quad (55)$$

$$\psi^+(x) = \sum_{k_-} a_{k_-}^+ \varphi_{k_-}^*(x); \chi^+(x) = \sum_{k_+} a_{k_+}^+ \chi_{k_+}^*(x) \quad (56)$$

Принимаем, что собственные функции $\varphi_{k_-}, \varphi_{k_-}^*, \varphi_{k_+}, \varphi_{k_+}^*$ образуют полный набор ортонормированных функций, но их следует оптимизировать так, чтобы они являлись решениями уравнения Шредингера. Для этого используем метод Хартри-Фока, уже описанный выше.

Создадим некоторое состояние Φ электронов и позитронов кристалла. Для этого следует расположить электроны и позитроны один за другим по состояниям $k_{-1}, k_{-2}, k_{-3} \dots k_{-n}$ и $k_{+1}, k_{+2}, k_{+3} \dots k_{+m}$. Таким образом

$$\Phi = a_{k_{+1}}^+ a_{k_{+2}}^+ \dots a_{k_{+m}}^+ a_{k_{-1}}^+ a_{k_{-2}}^+ \dots a_{k_{-n}}^+ \Phi_0 \quad (57)$$

Используем эту функцию для построения среднего значения оператора Гамильтона $H = H_- + H_+$ (см.(53) и (54)) с дополнительным условием, что функция состояния нормирована. Далее требуем условия

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \langle \Phi | H_- + H_+ | \Phi \rangle = \min \quad (58)$$

с дополнительным условием

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1 \quad (59)$$

и вычислим выражение (58) как функционал $\varphi_{k_-}, \varphi_{k_+}$. Затем определяем $\varphi_{k_-}, \varphi_{k_+}$ с помощью варьирования.

Для этого подставим (55) и (56) в (53) и (54). Поскольку операторы a^+ и a не зависят от интегрирования, волновые функции $\varphi_{k_-}, \varphi_{k_+}$ коммутируют с операторами, то операторы можно вынести за знак интеграла. Тогда выражение для оператора Гамильтона принимает вид

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{l, m_-} a_{l_-}^+ a_{m_-} \int \varphi_{l_-}^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) \right\} \varphi_{m_-}(x) d^3x + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{l, m_-, l', m'_-} a_{l_-}^+ a_{m_-}^+ a_{m'_-} a_{l'_-} \int \varphi_{l_-}^*(x) \varphi_{m_-}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{m'_-}(x') \varphi_{l'_-}(x) d^3x d^3x' - \\
& - \sum_{l_+, m_+, l_-, m_-} a_{l_+}^+ a_{m_+} a_{l_-}^+ a_{m_-} \int \varphi_{l_+}(x) \varphi_{m_+}(x') \varphi_{m'_-}(x') \varphi_{m_-}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{l'_-}^*(x') \varphi_{m_-}(x) d^3x d^3x' + \\
& + \sum_{l_+, m_+} a_{l_+}^+ a_{m_+} \int \varphi_{l_+}^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) \right\} \varphi_{m_+}(x) d^3x + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{l_+, m_+, l'_+, m'_+} a_{l_+}^+ a_{m_+}^+ a_{m'_+} a_{l'_+} \int \varphi_{l_+}^*(x) \varphi_{m_+}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{m'_+}(x') \varphi_{l'_+}(x) d^3x d^3x' - \\
& - \sum_{l_-, l'_+, m_+, m'_-} a_{l_-}^+ a_{m_-} a_{l'_+}^+ a_{m'_-} \int \varphi_{l_-}^*(x) \varphi_{m_-}(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{l'_+}(x') \varphi_{m'_-}(x) d^3x d^3x'
\end{aligned} \tag{60}$$

$$\begin{aligned}
& \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) \right\} \varphi_{k_-}(x) + \sum_{k_-j} \int \varphi_{k_-j}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_-j}(x') d^3x' \varphi_{k_-}(x) - \\
& - \sum_{k_-j} \int \varphi_{k_-j}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_-j}(x') d^3x' \varphi_{k_-}(x) - \sum_{k_+j} \int \varphi_{k_+j}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_+j}(x') d^3x' \varphi_{k_-}(x) = E_- \varphi_{k_-}(x),
\end{aligned}$$

Далее следует построить среднее значение этого Гамильтониана на функциях состояния (55), (56). Используя метод Хакена [4], сразу же получаем

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | H | \Phi \rangle = & \sum_{k_{-j}} \int \varphi_{k_{-j}}^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) \right\} \varphi_{k_{-j}}(x) d^3x + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_{-j}, k_{-i}} \iint \varphi_{k_{-j}}^*(x) \varphi_{k_{-i}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{-i}}(x') \varphi_{k_{-j}}(x) d^3x d^3x' - \\
& - \frac{1}{2} \sum_{k_{-j}, k_{-i}} \iint \varphi_{k_{-j}}^*(x) \varphi_{k_{-i}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{-i}}(x') \varphi_{k_{-j}}(x) d^3x d^3x' + \\
& + \sum_{k_{+j}, k_{+i}} \iint \varphi_{k_{+j}}^*(x) \varphi_{k_{+i}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{+i}}(x') \varphi_{k_{+j}}(x) d^3x d^3x' + \\
& + \sum_{k_{+j}} \int \varphi_{k_{+j}}^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) \right\} \varphi_{k_{+j}}(x) d^3x + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_{+j}, k_{+i}} \iint \varphi_{k_{+j}}^*(x) \varphi_{k_{+i}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{+i}}(x') \varphi_{k_{+j}}(x) d^3x d^3x' - \\
& - \frac{1}{2} \sum_{k_{+j}, k_{+i}} \iint \varphi_{k_{+j}}^*(x) \varphi_{k_{+i}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{+i}}(x') \varphi_{k_{+j}}(x) d^3x d^3x' + \\
& + \sum_{k_{-i}, k_{+j}} \iint \varphi_{k_{-i}}^*(x) \varphi_{k_{+j}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{+j}}(x') \varphi_{k_{-i}}(x) d^3x d^3x'
\end{aligned} \tag{61}$$

Здесь суммирование распространяется только на занятые состояния $k_{-1}, k_{-2}, k_{-3} \dots k_{-n}$ и $k_{+1}, k_{+2}, k_{+3} \dots k_{+m}$.

Условие нормировки используется, как обычно, в качестве дополнительного условия

$$\int \varphi_{k_{-}}^* \varphi_{k_{-}} d^3x = 1; \quad \int \varphi_{k_{+}}^* \varphi_{k_{+}} d^3x = 1 \tag{62}$$

Для этого применим обычным образом параметр Лагранжа, который обозначим через E .

Проведение варьирования $\delta / \delta \varphi_{k_{-}}^*$ и $\delta / \delta \varphi_{k_{+}}^*$ приводит сразу же к уравнениям

$$\begin{aligned}
& \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) \right\} \varphi_{k_{-}}(x) + \sum_{k_{-j}} \int \varphi_{k_{-j}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{-j}}(x') d^3x' \varphi_{k_{-}}(x) - \\
& - \sum_{k_{-j}} \int \varphi_{k_{-j}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{-j}}(x') d^3x' \varphi_{k_{-}}(x) - \sum_{k_{+j}} \int \varphi_{k_{+j}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{+j}}(x') d^3x' \varphi_{k_{-}}(x) = E_- \varphi_{k_{-}}(x),
\end{aligned} \tag{63}$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) \right\} \varphi_{k_+}(x) + \sum_{k_{+j}} \int \varphi_{k_{+j}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{-j}}(x') d^3x \varphi_{k_-}(x) -$$

$$- \sum_{k_{+j}} \int \varphi_{k_{+j}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{+j}}(x') d^3x' \varphi_{k_+}(x) - \sum_{k_{-j}} \int \varphi_{k_{-j}}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_{-j}}(x') d^3x' \varphi_{k_+}(x) = E_+ \varphi_{k_+}(x), \quad (64)$$

Для интерпретации уравнений самосогласованного поля (63) и (64) рассмотрим входящие в него отдельные члены.

Первые члены в фигурных скобках в уравнениях (63), (64) представляют потенциальную и кинетическую энергию электронов и позитронов в периодической решетке кристалла соответственно. Следующие выражения в уравнениях (63), (64) представляют произведения искомым функций $\varphi_{k_-}, \varphi_{k_+}$ и сумм по k_{-j}, k_{+j}

$$\varphi_{k_-}(x) \cdot \tilde{V}_-(x), \varphi_{k_+}(x) \cdot \tilde{V}_+(x) \quad (65)$$

Здесь

$$V_-(x) = \sum_{k_{-j}} \int |\varphi_{k_{-j}}(x')|^2 \frac{e^2}{|x-x'|} d^3x' - \sum_{k_{+j}} \int |\varphi_{k_{+j}}(x')|^2 \frac{e^2}{|x-x'|} d^3x' \quad (66)$$

$$V_+(x) = \sum_{k_{+j}} \int |\varphi_{k_{+j}}(x')|^2 \frac{e^2}{|x-x'|} d^3x' - \sum_{k_{-j}} \int |\varphi_{k_{-j}}(x')|^2 \frac{e^2}{|x-x'|} d^3x' \quad (67)$$

Так как $|\varphi_{k_{-j}}(x')|^2$ и $|\varphi_{k_{+j}}(x')|^2$ имеют смысл плотности заряда для электронов и позитронов, то суммы по k_{-j}, k_{+j} имеют смысл электростатических потенциалов электронов и позитронов в состояниях k_{-j}, k_{+j} .

Предпоследние члены в уравнениях (63), (64) имеют вид

$$V_-(x) = \sum_{k_{-j}} \varphi_{k_{-j}}(x') A_{k_{-j}, k_-}(x) \quad (68)$$

$$V_+(x) = \sum_{k_{+j}} \varphi_{k_{+j}}(x') A_{k_{+j}, k_+}(x) \quad (69)$$

где

$$A_{k_-,k_-}(x) = \int \varphi_{k_-}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_-}(x') d^3x', \quad (70)$$

$$A_{k_+,k_+}(x) = \int \varphi_{k_+}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{k_+}(x') d^3x' \quad (71)$$

Выражения (68)-(71) характеризуют так называемое обменное кулоновское взаимодействие .

Таким образом, можем записать уравнения (63), (64) в виде

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) + \tilde{V}_-(x) \right\} \varphi_{k_-}(x) - \sum_{k_-j} A_{k_-,k_-} \varphi_{k_-j}(x) = E_- \varphi_{k_-}(x) \quad (72)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V_p(x) + \tilde{V}_+(x) \right\} \varphi_{k_+}(x) - \sum_{k_+j} A_{k_+,k_+} \varphi_{k_+j}(x) = E_+ \varphi_{k_+}(x) \quad (73)$$

В реальных условиях экспериментов концентрация позитронов составляет величину $\sim 1 \text{ см}^{-3}$, поэтому уравнение (73) существенно упрощается

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) + \tilde{V}_+(x) \right\} \varphi_{k_+}(x) = E_+ \varphi_{k_+}(x) \quad (74)$$

Здесь

$$\tilde{V}_+(x) = - \sum_{k_-j} |\varphi_{k_-j}(x')|^2 \frac{e^2}{|x-x'|} d^3x' \quad (75)$$

Уравнение Шредингера вида (72) и (73) можно записать в краткой форме

$$H_{eff}^- \varphi_{k_-}(x) \equiv \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}^-(x) \right\} \varphi_{k_-}(x) = E_- \varphi_{k_-}(x) \quad (76)$$

$$H_{eff}^+ \varphi_{k_+}(x) \equiv \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}^+(x) \right\} \varphi_{k_+}(x) = E_+ \varphi_{k_+}(x) \quad (77)$$

В общем случае можно утверждать, что потенциалы $V_{eff}^-(x)$ и $V_{eff}^+(x)$ являются функциями, периодическими с периодом решетки кристалла.

Выше мы никак не уточняли, насколько заполнены получившиеся электронная и позитронная зоны. Приведенный формализм может быть применен для случая полностью заполненной

валентной зоны и соседней зоны проводимости с одним электроном или позитроном. Например, для функции избыточного электрона имеем

$$\Phi_- = a_{k_-L_-}^+ \{a_{k_+L_+}^+ (a_{k_-1V}^+ a_{k_-2V}^+ \dots a_{k_-nV}^+ \Phi_0)\} \approx a_{k_-L_-}^+ \Phi_V^- \quad (78)$$

Функция избыточного позитрона в свою очередь имеет вид

$$\Phi_+ \approx a_{k_+L_+}^+ \Phi_V^+ \quad (79)$$

Здесь L_-, L_+, V индексы, относящиеся к электронной и позитронной зонам проводимости и валентной зоны соответственно. Принимаем, что $\Phi = \Phi_- \Phi_+ = a_{k_-L_-}^+ a_{k_+L_+}^+ \Phi_V^- \Phi_V^+ = a_{k_-L_-}^+ a_{k_+L_+}^+ \Phi_V$. Из этого уравнения следует вывод о том, что электронная дырка в твердом теле (или просто дырка) никоим образом не идентична позитрону, как реальной частице.

3. Электроны и позитроны в кристаллической решетке. Теорема Блоха

В выражениях (76) и (77) введем обозначения $V_{eff}^-(x) = V_-(x)$; $V_{eff}^+(x) = V_+(x)$, $H_{eff}^- = H_-$, $H_{eff}^+ = H_+$. Тогда $V_{\pm}(x+l) = V_{\pm}(x)$, где l - один из векторов решетки, т.е. вектор, проведенный из одной точки решетки к следующей. Имеем

$$H_- \varphi_{k_-} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_-(x) \right\} \varphi_{k_-}(x) = E_- \varphi_{k_-}(x) \quad (80)$$

$$H_+ \varphi_{k_+} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_+(x) \right\} \varphi_{k_+}(x) = E_+ \varphi_{k_+}(x)$$

Далее

$$\varphi_{k_-}(x+l) = \exp(ik_-l) \varphi_{k_-}(x); H_-(x+l) = H_-(x) \quad (81)$$

$$\varphi_{k_+}(x+l) = \exp(ik_+l) \varphi_{k_+}(x); H_+(x+l) = H_+(x)$$

Отсюда

$$\varphi_{k_-}(x) = \exp(ik_-l) u_{k_-}(x); \varphi_{k_+}(x) = \exp(ik_+l) u_{k_+}(x) \quad (82)$$

Подстановка (83) в (82) дает

$$u_{k_{\pm}}(x+l) = u_{k_{\pm}}(x) \quad (83)$$

Соотношения (82) и (83) и представляют собой теорему Блоха.

Подставляя (82) в уравнения (80), получаем

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (k_{\pm}^2 - 2ik_{\pm} \text{grad} \Delta_{\pm}) + V_{\pm}(x) \right\} u_{k_{\pm}}(x) = E_{k_{\pm},j} u_{k_{\pm}}(x) \quad (84)$$

Энергию E_{\pm} на краю зон можно разложить по k_{\pm} и при малых k_{\pm} представить в виде

$$E_{k_{\pm},j\pm} = E_{0,j_{\pm}} + \frac{\hbar^2 k_{\pm}^2}{2m_{\pm}^*} \quad (85)$$

4. Метод эффективной массы

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\pm}(x) \right\} \varphi_{k_{\pm}}(x) = E_{k_{\pm}} \varphi_{k_{\pm}}(x) \quad (86)$$

Здесь

$$\varphi_{k_{\pm}} = \exp(ik_{\pm}l) \frac{1}{\sqrt{N}} u_{k_{\pm}}(x)$$

Так как

$$E_{k_{\pm},j\pm} = E_{0,j_{\pm}} + \frac{\hbar^2 k_{\pm}^2}{2m_{\pm}^*} + (\text{члены высокого порядка, которыми пренебрегаем}), \text{ уравнение}$$

Тогда уравнение типа (86)

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\pm}(x) + W_{\pm}(x) \right\} \varphi_{\pm}(x) = E_{k_{\pm}} \varphi_{\pm}(x)$$

сводится к более простой проблеме

$$\left\{ E_0^\pm - \frac{\hbar^2}{2m_\pm^*} \nabla^2 + V_\pm(x) + W_\pm(x) \right\} \psi_\pm(x) = E_\pm \psi_\pm(x)$$

С учетом сдвига по энергии это уравнение переходит в

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_\pm^*} \nabla^2 + W_\pm(x) \right\} \psi_\pm(x) = E_\pm \psi_\pm(x) \quad (87)$$

5. Функции Ванье: волновые пакеты из функций Блоха электронов и позитронов

Согласно [5], функции Ванье строятся из блоховских волн

$$\omega_\pm(x-l) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_\pm} \exp(-ik_\pm l) \exp(ik_\pm l) u_{k_\pm}(x) \quad (88)$$

Здесь суммирование распространяется на все значения k_\pm внутри данной энергетической зоны, N - число элементарных ячеек.

Функции Ванье обладают рядом важных свойств:

1. Функции Ванье описывают, например, локализацию позитрона в окрестности точки \bar{l} на протяжении примерно одной постоянной решетки.

Докажем это, приняв, что $u_{k_\pm}(x)$ не зависит от k_\pm , то есть $u_{k_\pm}(x) = u_0(x)$. В данном случае суммирование и (88) сразу же выполняется для всего кристалла (с точностью до фазового множителя)

$$\omega_+(\bar{x} - \bar{l}) = \frac{1}{\sqrt{N}} u_0(x) \frac{\sin(x-l_x) \frac{\pi}{a} \cdot \sin(y-l_y) \frac{\pi}{a} \cdot \sin(z-l_z) \frac{\pi}{a}}{\left\{ \sin(x-l_x) \frac{\pi}{L} \right\} \cdot \left\{ \sin(y-l_y) \frac{\pi}{L} \right\} \cdot \left\{ \sin(z-l_z) \frac{\pi}{L} \right\}}$$

Здесь a - постоянная решетки кристалла, L - линейный размер кристалла. В знаменателе синусы можно заменить на их аргументы. Тогда

$$\omega_+(\bar{x} - \bar{l}) = \frac{1}{\sqrt{N}} u_0(x) \left(\frac{a}{\pi} \right)^3 \frac{\sin\left\{ (x-l_x) \frac{\pi}{a} \right\}}{(x-l_x)} \cdot \frac{\sin\left\{ (y-l_y) \frac{\pi}{a} \right\}}{(y-l_y)} \cdot \frac{\sin\left\{ (z-l_z) \frac{\pi}{a} \right\}}{(z-l_z)}. \quad (89)$$

Из этого выражения легко видеть, что функция (89) действительно локализована в области пространства с размером a .

2. Важным свойством функций Ванье является их ортогональность, т.е. функции Ванье, локализованные в различных точках \bar{l}, \bar{l}' или принадлежащих разным значениям μ, μ' взаимно ортогональны.

$$\int \omega_{\mu}^*(\bar{x} - \bar{l}) \omega_{\mu'}^*(\bar{x} - \bar{l}') d^3x = \delta_{\mu\mu'} \delta_{\bar{l}\bar{l}'} \quad (90)$$

6. Электроны, позитроны, дырки в кристалле

6.1 Электронные дырки в кристалле

Формализм вторичного квантования позволяет очень элегантно ввести понятие дырки как квазичастицы и описать ее свойства. Исходя из заполненной валентной зоны, из которой удален электрон в состоянии \bar{k}_- . Это незаполненное состояние ведет себя как частица, но уже с положительным зарядом. Этот процесс математически выглядит следующим образом

$$\Phi_{k_-} = a_{k_-v} \Phi_v \quad (91)$$

Здесь Φ_v - волновая функция заполненной валентной зоны, a_{k_-v} - оператор уничтожения, а Φ_{k_-} - волновая функция дырки. Вводим

$$a_{k_-v} = d_{k_-}^+, \quad a_{k_-}^+ = d_{k_-} \quad (92)$$

Причем

$$d_{k_-} \Phi_v = a_{k_-}^+ \Phi_v = 0 \quad (93)$$

Таким образом состояние Φ_v для оператора d_{k_-} представляет вакуумное состояние. С учетом (31)-(33) имеем

$$d_l d_m^+ = \delta_{lm} - d_m^+ d_l \quad (94)$$

В свою очередь повторное применение этих перестановочных соотношений дает нам

$$\begin{aligned}
d_l d_m^+ &= \delta_{lm} - d_m^+ d_l d_m d_l^+ d_m^+ = \delta_{mm'} \delta_{ll'} - \delta_{mm'} d_l^+ d_l - \\
&- \delta_{m'l} \delta_{ml} + \delta_{m'l} d_m^+ + \delta_{m'l} d_l^+ d_m - d_m^+ d_m + d_m^+ d_l^+ d_l d_m
\end{aligned} \tag{95}$$

Подставляя (94) и (95) в электронную часть Гамильтониана, соответствующую электронам (индексы l и m), получаем последовательно: во-первых, у нас появляются члены, которые не зависят от операторов дырок, а именно символы Кронекера δ_{lm} . Отсюда для энергии имеем некоторое постоянное значение

$$\begin{aligned}
E_v &= \sum_l a_l^+ a_{m-} \int \varphi_l^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p(x) \right\} \varphi_l(x) d^3 x + \frac{1}{2} \sum_{lm} \iint \varphi_l^*(x) \varphi_m^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_m(x') \varphi_l(x) d^3 x d^3 x' - \\
&- \frac{1}{2} \sum_{lm} \iint \varphi_l^*(x) \varphi_m^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_l(x') \varphi_m(x) d^3 x d^3 x'
\end{aligned} \tag{96}$$

Здесь E_v - энергия электронов валентной зоны кристаллов.

Во-вторых, рассмотрим члены в (60), содержащие пары операторов $d_m^+ d_l$. Имеем

$$\begin{aligned}
&- \sum_{lm} d_m^+ d_l^+ \iint \varphi_l^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right\} \varphi_m(x) d^3 x + \\
&+ \left\{ \int \sum_{m'} \varphi_{m'}^*(x') \varphi_m^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_m(x') d^3 x' \varphi_m(x') - \int \sum_{m'} \varphi_{m'}^*(x') \varphi_m^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_m(x') d^3 x' \varphi_{m'}(x') \right\} d^3 x
\end{aligned} \tag{97}$$

Здесь суммы по индексам l, m, m' относятся ко всей валентной зоне. Можем записать (97) в виде

$$- \sum_{l,m} d_m^+ d_l \int \varphi_l^*(x) H_{eff} \varphi_m(x) d^3 x \tag{98}$$

или иначе

$$- \sum_{l,m} d_m^+ d_l E_m \int \varphi_l^*(x) \varphi_m(x) d^3 x \tag{99}$$

В виду ортогональности волновых функций выражение (97) приводится к виду

$$-\sum_{k_-} d_{k_-}^+ d_{k_-} E_{k_-,v} \quad (100)$$

В третьих, как следует из (95), имеются еще операторы, содержащие производные четырех операторов дырок, соответствующие кулоновскому взаимодействию между дырками

$$H_{g-g} = \frac{1}{2} \sum_{lm,l'm'} d_m^+ d_l^+ d_l d_m W(l,m | m'l'), \quad (101)$$

где

$$W(l,m | m'l') = \int \varphi_l^*(x') \varphi_m^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{m'}(x') \varphi_{l'}(x') d^3x d^3x' \quad (102)$$

Теперь, объединяя (96), (100) и (101), получаем оператор Гамильтона дырок

$$H = E_v - \sum_{k_-} d_{k_-}^+ d_{k_-} E_{k_-,v} + \frac{1}{2} \sum_{k_{-1},k_{-2},k_{-3},k_{-4}} d_{k_{-1}}^+ d_{k_{-2}}^+ d_{k_{-3}} d_{k_{-4}} W(k_{-3},k_{-4} | k_{-1},k_{-2}) \quad (103)$$

Опуская кулоновское взаимодействие между дырками и производя разложение энергии вблизи точки $k = 0$ в ряд, получаем

$$E_{k_-,v} = E_{0,v} - \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m_v}, m_v > 0 \quad (104)$$

Таким образом, оператор Гамильтона для дырок имеет вид

$$H = \sum_{k_-} d_{k_-}^+ d_{k_-} \left(\frac{\hbar^2 k_-^2}{2m_v} - E_{0,v} \right) \quad (105)$$

Отсюда следует, что дырки ведут себя как частицы с положительной эффективной массой m_v .

6.2 Взаимодействие между электронами, дырками и позитронами

Рассмотрим полупроводниковый кристалл, в основном состоянии которого валентная зона полностью занята электронами, а зона проводимости пустая. Исследуем вопрос о том, какие эффективные взаимодействия следует учитывать, если удалить некоторые электроны из валентной зоны, то есть создать в ней дырки, в зону проводимости. Причем не обязательно число дырок

равно числу электронов в зоне проводимости. Их число при комнатной температуре может быть значительно больше за счет ионизации мелких примесных центров. Позитрон вводится в кристалл, например, из β^+ - радиоактивного источника – изотопа ^{22}Na и образует в кристалле позитронную зону проводимости. Пусть такого рода систему описывает уравнение Шредингера

$$H\Phi = E\Phi \quad (106)$$

с оператором Гамильтона

$$H = \int \psi_-(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right\} \psi_-(x) d^3x + \frac{1}{2} \iint \psi_-(x) \psi_-(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \psi_-(x') \psi_-(x) d^3x d^3x' +$$

$$+ \int \psi_+(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right\} \psi_+(x) d^3x - \iint \psi_-(x') \psi_-(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \psi_+(x) \psi_+(x) d^3x d^3x' \quad (107)$$

Так как мы хотим рассмотреть состояния в валентной зоне и электроны и позитрон в зонах проводимости в явном виде, разложим операторы поля по собственным функциям валентной зоны и зон проводимости

$$\psi_-(x) = \sum_{k_-} a_{k_-,v}^+ \varphi_{k_-,v}^*(x) + \sum_{k_-} a_{k_-,L_-}^+ \varphi_{k_-,L_-}^+(x) \quad (108)$$

$$\psi_-(x) = \sum_{k_-} a_{k_-,v} \varphi_{k_-,v}(x) + \sum_{k_-} a_{k_-,L_-} \varphi_{k_-,L_-}(x) \quad (109)$$

$$\psi_+(x) = \sum_{k_+} a_{k_+,L_+}^+ \varphi_{k_+,L_+}^*(x) \quad (110)$$

$$\psi_+(x) = \sum_{k_+} a_{k_+,L_+} \varphi_{k_+,L_+}(x) \quad (111)$$

При этом предполагаем, что волновые функции $\varphi_{L_-,v}, \varphi_{L_-}$ определяются с помощью эффективных Гамильтонианов

$$H_{eff}^- \cdot \varphi_-(x) = E_- \cdot \varphi_-(x); H_{eff}^+ \cdot \varphi_+(x) = E_+ \cdot \varphi_+(x), \quad (112)$$

где

$$H_{eff}^{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{eff}^{\pm} \quad (113)$$

Условия ортонормированности имеют вид

$$\int \varphi_{\bar{k}_-,i}^*(x)\varphi_{\bar{k}',j}(x)d^3x = \delta_{\bar{k}_-\bar{k}'}\delta_{ij}; \int \varphi_{\bar{k}_+,i}^*(x)\varphi_{\bar{k}',j}(x)d^3x = \delta_{\bar{k}_+\bar{k}'}; \quad (114)$$

В соответствии со слагаемыми, входящими в (107), разложим оператор Гамильтона на отдельные части

$$H = H_0^- + H_0^+ + H_{int}^- + H_{int}^{+-} \quad (115)$$

Подставляя разложения (108)-(111) в соответствующие разложения, получаем выражения для H_0^-, H_0^+

$$H_0^- = \sum_{\bar{k}_-, \bar{k}', i, j} a_{\bar{k}_-, i}^+ a_{\bar{k}', j}^- \int \varphi_{\bar{k}_-, i}^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right\} \varphi_{\bar{k}', j}(x) d^3x, \quad (116)$$

$$H_0^+ = \sum_{\bar{k}_+, \bar{k}', L_+, L_+} a_{\bar{k}_-, i}^+ a_{\bar{k}', j}^- \int \varphi_{\bar{k}_+, L_+}(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right\} \varphi_{\bar{k}', L_+}(x) d^3x$$

Заметим, что ввиду трансляционной симметрии задачи, двойное суммирование по k_{\pm}, k'_{\pm} переходит в однократное. Третье слагаемое, стоящее в (115), после подстановки разложений (108)-(111) принимает вид

$$H_{int}^- = \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_-, \bar{k}_-, \bar{k}_-, \bar{k}_-} a_{\bar{k}_-, j_1}^+ a_{\bar{k}_-, j_2}^+ a_{\bar{k}_-, j_3}^+ a_{\bar{k}_-, j_4}^+ \iint \varphi_{\bar{k}_-, j_1}^*(x) \varphi_{\bar{k}_-, j_2}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{\bar{k}_-, j_3}^*(x') \varphi_{\bar{k}_-, j_4}^*(x) d^3x d^3x', \quad (117)$$

$$H_{int}^+ = \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_+, \bar{k}_+, \bar{k}_+, \bar{k}_+} a_{\bar{k}_+, L_+}^+ a_{\bar{k}_+, L_+}^+ a_{\bar{k}_+, j_1}^+ a_{\bar{k}_+, j_2}^+ \iint \varphi_{\bar{k}_+, L_+}^*(x) \varphi_{\bar{k}_+, L_+}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{\bar{k}_+, j_1}^*(x') \varphi_{\bar{k}_+, j_2}^*(x) d^3x d^3x'$$

В дальнейшем вместо электронных операторов валентной зоны вводим операторы дырок

$$a_{\bar{k}_-,v}^- = d_{\bar{k}_-}^+, a_{\bar{k}_-,v}^+ = d_{\bar{k}_-}^- \quad (118)$$

Далее несколько упростим наши обозначения, а именно, опустим у операторов, относящихся к электронам проводимости и позитрону, индексы L_- и L_+ :

$$a_{\bar{k}_-,L_-}^- \equiv a_{\bar{k}_-}^-; a_{\bar{k}_-,L_-}^+ \equiv a_{\bar{k}_-}^+; a_{\bar{k}_+,L_+}^- \equiv a_{\bar{k}_+}^-; a_{\bar{k}_+,L_+}^+ \equiv a_{\bar{k}_+}^+$$

Сделаем необходимое допущение о сохранении количества дырок, электронов и позитронов, то есть рассмотрим стационарные состояния системы. Акты аннигиляции позитронов и дырок на начальном этапе не учитываем. К тому же пренебрегаем виртуальными переходами, обусловленными перекрыванием волновых функций валентной зоны и зоны проводимости (так называемые поляризационные эффекты). Дальнейший формализм расчета состоит в том, что согласно (118), вводятся операторы дырок, затем оператор Гамильтона преобразуется таким образом, чтобы операторы уничтожения стояли справа. Проведем в H_0^-, H_0^+ следующие опрощения и преобразования:

$$\text{для } i = j = L_- : a_{\bar{k}_-,L_-}^+ a_{\bar{k}_-,L_-}^- \equiv a_{\bar{k}_-}^+ a_{\bar{k}_-}^- \quad (119)$$

$$\text{для } i = j = v : a_{\bar{k}_-,v}^+ a_{\bar{k}_-,v}^- \equiv 1 - d_{\bar{k}_-}^+ d_{\bar{k}_-}^- \quad (120)$$

$$\text{для } i = j = v : a_{\bar{k}_+,L_+}^+ a_{\bar{k}_+,L_+}^- \equiv a_{\bar{k}_+}^+ a_{\bar{k}_+}^- \quad (121)$$

В $H_{\text{int}}^-, H_{\text{int}}^+$ необходимо учесть все возможные комбинации индексов, таких как:

1. Все индексы принадлежат электронной зоне проводимости

$$j_1 = j_2 = j_3 = j_4 = L_- \quad (122)$$

2. Все индексы принадлежат валентной зоне

$$j_1 = j_2 = j_3 = j_4 = v \quad (123)$$

3. Все индексы принадлежат валентной зоне и два – зоне проводимости, то есть

$$j_1 = j_4 = \nu; j_1 = j_4 = L_-; j_2 = j_3 = L_-; j_2 = j_3 = \nu, \quad (124)$$

а также следующие комбинации индексов

$$j_1 = j_3 = \nu; j_1 = j_3 = L_-; j_2 = j_4 = L_-; j_2 = j_4 = \nu, \quad (125)$$

которые дают равным образом одинаковые вклады. Введем краткое обозначение матричного элемента, описывающего кулоновское взаимодействие

$$\iint \varphi_{\bar{k}_{-1}, j_1}^*(x) \varphi_{\bar{k}_{-2}, j_2}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{\bar{k}_{-3}, j_3}(x') \varphi_{\bar{k}_{-4}, j_4}(x) d^3x d^3x' = W_- \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline j_1 j_2 & j_3 j_4 \end{array} \right\rangle \quad (126)$$

Верхний ряд индексов в W_- и W_+ относятся к векторам k_{\pm} , а нижний ряд W_- к индексам зоны проводимости или валентной зоны. Индексы j_1, j_2 принимают естественно значения L_-, L_- , либо ν, ν .

Рассмотрим матричный элемент кулоновского взаимодействия для позитрона

$$\iint \varphi_{\bar{k}_{+1}, L_+}^*(x) \varphi_{\bar{k}_{+1}, L_+}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{\bar{k}_{-3}, j_3}(x') \varphi_{\bar{k}_{-4}, j_4}(x) d^3x d^3x' = W_+ \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1} \bar{k}_{+2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline j_3 & j_4 \end{array} \right\rangle \quad (127)$$

Опять-таки индексы j_3, j_4 принимают естественно значения L_-, L_- , либо ν, ν .

Согласно комбинации индексов имеются разные вклады в операторы взаимодействия $H_{\text{int}}^-, H_{\text{int}}^+$, а именно: взаимодействия в зоне проводимости и взаимодействия между зоной проводимости и валентной зоной

$$H_{\text{int}}^- = H_{L_- L_-} + H_{L_- L_+} + H_{L_- \nu} + H_{\nu \nu} \quad (128)$$

$$H_{\text{int}}^{+-} = H_{L_+ L_-} + H_{L_+ \nu} \quad (129)$$

Итак, в соответствии с (128) и (129) получаем следующие вклады:

1. Взаимодействие между электронами проводимости

$$H_{L_-L_-} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_{-1} \dots \bar{k}_{-4}} a_{\bar{k}_{-1}}^- a_{\bar{k}_{-2}}^- a_{\bar{k}_{-3}}^- a_{\bar{k}_{-4}}^- W_- \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline L_- L_- & L_- L_- \end{array} \right\rangle \quad (130)$$

2. Взаимодействие между электронами проводимости и позитроном

$$H_{L_-L_+} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_{-1} \dots \bar{k}_{-2} \bar{k}_{+3} \bar{k}_{+4}} a_{\bar{k}_{-1}}^+ a_{\bar{k}_{-2}}^- a_{\bar{k}_{+3}}^+ a_{\bar{k}_{+4}}^- W_- \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline L_- L_- & L_+ L_+ \end{array} \right\rangle \quad (131)$$

3. Взаимодействие между дырками в валентной зоне

$$H_{v v} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_{-1} \dots \bar{k}_{-2} \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4}} d_{\bar{k}_{-1}}^- d_{\bar{k}_{-2}}^- d_{\bar{k}_{-3}}^+ d_{\bar{k}_{-4}}^+ W_+ \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline v v & v v \end{array} \right\rangle \quad (132)$$

Перенесем в данном выражении операторы уничтожения направо и проведем соответствующие преобразования. Тогда $H_{v v}$ можно представить в виде

$$H_{v v} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_{-1} \dots \bar{k}_{-2} \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4}} (\delta_{\bar{k}_{-2} \bar{k}_{-3}}^- \delta_{\bar{k}_{-1} \bar{k}_{-4}}^- \delta_{\bar{k}_{-1} \bar{k}_{-3}}^- \delta_{\bar{k}_{-2} \bar{k}_{-4}}^- \delta_{\bar{k}_{-2} \bar{k}_{-3}}^- d_{\bar{k}_{-4}}^- d_{\bar{k}_{-1}}^- + \delta_{\bar{k}_{-1} \bar{k}_{-3}}^- d_{\bar{k}_{-4}}^+ d_{\bar{k}_{-2}}^- + \delta_{\bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4}}^- d_{\bar{k}_{-3}}^+ d_{\bar{k}_{-1}}^- + \delta_{\bar{k}_{-1} \bar{k}_{-4}}^- d_{\bar{k}_{-3}}^+ d_{\bar{k}_{-2}}^- + \\ + d_{\bar{k}_{-3}}^+ d_{\bar{k}_{-4}}^+ d_{\bar{k}_{-1}}^- d_{\bar{k}_{-2}}^- W_+ \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline v v & v v \end{array} \right\rangle \quad (133)$$

Рассмотрим отдельные члены в выражении (133) от А до G, причем для этого необходимо вычислить множитель W в (133). Член А дает кулоновское взаимодействие в заполненной валентной зоне и экспериментально не наблюдаем. Член В характеризует кулоновское обменное взаимодействие в заполненной валентной зоне, в то время как член С дает взаимодействие дырок с валентными электронами, а Д представляет соответствующее кулоновское обменное взаимодействие. Последние члены совпадают с предыдущими: E=D и F=C. Члены С и Д, как видели ранее, участвуют в определении волновых функций зоны с помощью метода самосогласованного поля, т.е. в данном случае они для нас не интересны, за исключением члена G. Тогда имеем

$$H_{VV} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_{-1}, \bar{k}_{-2}, \bar{k}_{-3}, \bar{k}_{-4}} d_{\bar{k}_{-3}}^+ d_{\bar{k}_{-4}}^+ d_{\bar{k}_{-1}}^- d_{\bar{k}_{-2}}^- W_+ \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline VV & VV \end{array} \right\rangle \quad (134)$$

4. Взаимодействие между электронами проводимости и дырками

Согласно табличкам (128) и (129) в них присутствуют два разнородных члена. Исследуем выражение,

$$H_{LV} = \frac{1}{2} \sum a_{\bar{k}_{-1}j_1}^- a_{\bar{k}_{-2}j_2}^- a_{\bar{k}_{-3}j_3}^- a_{\bar{k}_{-4}j_4}^- W_- \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline j_1 j_2 & j_3 j_4 \end{array} \right\rangle, \quad (135)$$

где на индексы $j_1 \dots j_4$ наложены ограничения (128) и (129). Рассмотрим вклады по следующей схеме

$$L_V V L_- \rightarrow a_{\bar{k}_{-1}}^+ a_{\bar{k}_{-4}}^- d_{\bar{k}_{-2}}^- d_{\bar{k}_{-3}}^+; V L_- L_V \rightarrow a_{\bar{k}_{-1}}^+ a_{\bar{k}_{-4}}^- d_{\bar{k}_{-2}}^- d_{\bar{k}_{-3}}^+ \quad (136)$$

$$L_V L_- V \rightarrow -a_{\bar{k}_{-1}}^+ a_{\bar{k}_{-3}}^- d_{\bar{k}_{-2}}^- d_{\bar{k}_{-4}}^+; V L_- V L_- \rightarrow a_{\bar{k}_{-2}}^+ a_{\bar{k}_{-4}}^- d_{\bar{k}_{-1}}^- d_{\bar{k}_{-3}}^+ \quad (137)$$

Можно легко показать, что вклады в (135) от комбинаций (136) и (137) идентичны внутри себя. Для этого надо изменить в сумме (135) следующим образом: k_{-1} заменим на k_{-2} , k_{-2} на k_{-1} , k_{-3} на k_{-4} и k_{-4} на k_{-3} . Тем самым вторая строка в (135) переходит в новый матричный элемент

$$W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline L_V & V L_- \end{array} \right\rangle \rightarrow W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-2} \bar{k}_{-1} & \bar{k}_{-4} \bar{k}_{-3} \\ \hline V L_- & L_V \end{array} \right\rangle, \quad (138)$$

причем в явном выражении для матричного элемента следует поменять координаты $x \rightarrow x'$.

Таким образом, матричные элементы в (138) равны друг другу. То же самое относится и к (137). Таким образом для дальнейшего, если ограничиться первыми членами в (136) и (137), а оставшиеся комбинации учесть просто введением в сумме (135) множителя 2. Выражение для взаимодействия согласно первой строке (136) можно преобразовать с помощью перестановочных соотношений для дырок. При этом получаем

$$H_{LV}^{(1)} = \sum_{\bar{k}_1 \dots \bar{k}_4} a_{\bar{k}_1}^+ a_{\bar{k}_4}^- \delta_{\bar{k}_2 \bar{k}_3} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_1 \bar{k}_2 & \bar{k}_3 \bar{k}_4 \\ \hline L_V & VL_- \end{array} \right\rangle - \sum_{\bar{k}_1 \dots \bar{k}_4} a_{\bar{k}_1}^+ a_{\bar{k}_4}^- d_{\bar{k}_3}^+ d_{\bar{k}_2}^- \delta_{\bar{k}_2 \bar{k}_3} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_1 \bar{k}_2 & \bar{k}_3 \bar{k}_4 \\ \hline L_V & VL_- \end{array} \right\rangle, \quad (139)$$

Первая сумма в (139) описывает взаимодействие электронов в зоне проводимости с заполненной валентной зоной. Это видно, если несколько преобразовать это выражение, используя стоящие в них символы Кронекера. Тогда для первой части выражения (139) получаем

$$H_{LV}^{(1)} = \sum_{\bar{k}_1 \bar{k}_4} a_{\bar{k}_1}^+ a_{\bar{k}_4}^- \sum_{\bar{K}_-} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_1 \bar{k}_- & \bar{k}_- \bar{k}_4 \\ \hline L_V & VL_- \end{array} \right\rangle, \quad (140)$$

Для того, чтобы сделать это выражение физически ясным, воспользуемся видом W , представленным в (126). После чего получаем

$$\sum_{\bar{K}_-} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_1 \bar{k}_2 & \bar{k}_3 \bar{k}_4 \\ \hline L_V & VL_- \end{array} \right\rangle = \int \varphi_{\bar{k}_-, L_-}^*(x) \left\{ \int \sum_{\bar{K}_-} |\varphi_{\bar{k}_-, V'}(x')|^2 \frac{e^2}{|x-x'|} d^3 x' \right\} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right\} \varphi_{\bar{k}_-, L_-}(x) d^3 x, \quad (141)$$

Как раз это выражение в (135) и определяет собой энергию взаимодействия электронов проводимости с заполненной валентной зоной. Второе выражение в (136), относящееся к (135), описывает уничтожение и последующее рождение дырки и одновременно тем самым уничтожение и последующее рождение электрона и одновременно тем самым уничтожение и последующее рождение электрона. Это выражение таким образом описывает рассеяние электрона на дырке, которое обусловлено кулоновским взаимодействием. Это рассеяние в рамках нашего формализма заключено в выражении W . Аналогичным образом опишем взаимодействие в (135), которое обусловлено (137). Отсюда сразу получаем

$$H_{LV}^{(2)} = \sum_{\bar{k}_1 \dots \bar{k}_4} a_{\bar{k}_2}^+ a_{\bar{k}_4}^- \delta_{\bar{k}_1 \bar{k}_3} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_1 \bar{k}_2 & \bar{k}_3 \bar{k}_4 \\ \hline VL_- & VL_- \end{array} \right\rangle + \sum_{\bar{k}_1 \dots \bar{k}_4} a_{\bar{k}_2}^+ a_{\bar{k}_4}^- d_{\bar{k}_3}^+ d_{\bar{k}_4}^- W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_1 \bar{k}_2 & \bar{k}_3 \bar{k}_4 \\ \hline VL_- & VL_- \end{array} \right\rangle, \quad (142)$$

Первую сумму в этом выражении можно интерпретировать как обменное взаимодействие электронов в зоне проводимости с заполненной валентной зоной, а вторая сумма (наиболее важная) описывает кулоновское взаимодействие (обменное) между электронами в зоне проводимости и дыркой. То, что здесь действительно речь идет об обменном взаимодействии, становится ясным,

если исследовать явное выражение для W . При этом следует, что для равных значений k_- в зоне проводимости, т.е. для $k_{-2} = k_{-4}$, появляется смешанная зарядовая плотность.

5. Взаимодействие позитрона с электронами проводимости и электронами полностью заполненной валентной зоны

Сразу же можем записать

$$H_{L_+L_-} = - \sum_{\bar{k}_{+1} \dots \bar{k}_{+2} \bar{k}_{-4} \dots \bar{k}_{-4}} a_{\bar{k}_{+1}}^+ a_{\bar{k}_{+2}}^- a_{\bar{k}_{-4}}^+ a_{\bar{k}_{-4}}^- W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1} \bar{k}_{+2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline L_+ L_+ & L_- L_- \end{array} \right\rangle; \quad (143)$$

$$H_{L_+V} = \sum_{\bar{k}_{+1} \dots \bar{k}_{+2} \bar{k}_{-4} \dots \bar{k}_{-4}} a_{\bar{k}_{+1}}^+ a_{\bar{k}_{+2}}^- a_{\bar{k}_{-4}}^+ a_{\bar{k}_{-4}}^- W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1} \bar{k}_{+2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline L_+ L_+ & VV \end{array} \right\rangle + \sum_{\bar{k}_{+1} \dots \bar{k}_{+2} \bar{k}_{-4} \dots \bar{k}_{-4}} a_{\bar{k}_{+1}}^+ a_{\bar{k}_{+2}}^- d_{\bar{k}_{-3}}^+ d_{\bar{k}_{-4}}^- W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1} \bar{k}_{+2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ \hline L_+ L_+ & VV \end{array} \right\rangle$$

В выражении (143) первый член соответствует кулоновскому взаимодействию позитрона в зоне проводимости с электронами полностью заполненной валентной зоны, а второй член отвечает кулоновскому взаимодействию позитрона с дырками в валентной зоне.

Для полной ясности объединим полученные выше результаты в общий оператор Гамильтона для электронов, дырок и позитрона в кристалле

$$H = H_0 + H_{\text{int}} = H_e + H_p + H_h + H_{eh} + H_{ep} + H_{ph} + H_{ee} + H_{hh} + W_F \quad (144)$$

Рассмотрим вклады, соответствующие (144)

$$H_e = \sum_{\bar{k}_-} a_{\bar{k}_-}^+ a_{\bar{k}_-}^- \left\{ \int \varphi_{\bar{k}_-, L_-}^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right) \varphi_{\bar{k}_-, L_-}(x) d^3x \right\} + \sum_{\bar{k}'_-} \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_- \bar{k}'_- & \bar{k}'_- \bar{k}_- \\ \hline L_- V & VL_- \end{array} \right\rangle - W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}'_- \bar{k}_- & \bar{k}'_- \bar{k}_- \\ \hline VL_- & VL_- \end{array} \right\rangle \right\}, \quad (145)$$

Этот член описывает энергию электронов в зоне проводимости (однако без учета взаимодействия электронов с электронами, дырками и позитроном). Это выражение обсуждалось уже ранее.

Для позитрона имеем

$$H_p = \sum_{\bar{k}'_+} a_{\bar{k}'_+}^+ a_{\bar{k}'_+}^- \left\{ \int \varphi_{\bar{k}'_+, L_+}^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^+(x) \right) \varphi_{\bar{k}'_+, L_+}(x) d^3x \right\} \quad (146)$$

Этот член описывает энергию позитрона в позитронной зоне проводимости. Для дырок получаем

$$H_h = \sum_{\bar{k}_-} d_{\bar{k}_-}^+ d_{\bar{k}_-}^- \left\{ \int \varphi_{\bar{k}_-,V}^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right) \varphi_{\bar{k}_-,V}(x) d^3x \right\} + \sum_{\bar{k}_-} \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_- \bar{k}'_- & \bar{k}'_- \bar{k}_- \\ \hline VV & VV \end{array} \right\rangle - W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}'_- \bar{k}_- & \bar{k}_- \bar{k}'_- \\ \hline VV & VV \end{array} \right\rangle \right\}, \quad (147)$$

И это выражение мы уже рассматривали ранее.

Взаимодействие между электронами и дырками описывается выражением

$$H_{e-h} = \sum_{\bar{k}_- \dots \bar{k}_-4} (-1) a_{\bar{k}_-1}^+ a_{\bar{k}_-4}^- d_{\bar{k}_-3}^+ d_{\bar{k}_-2}^- W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_-1 \bar{k}_-2 & \bar{k}_-3 \bar{k}_-4 \\ \hline L_- V & V L_- \end{array} \right\rangle + \sum_{\bar{k}_-1 \dots \bar{k}_-4} a_{\bar{k}_-2}^+ a_{\bar{k}_-4}^- d_{\bar{k}_-3}^+ d_{\bar{k}_-1}^- W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_-1 \bar{k}_-2 & \bar{k}_-3 \bar{k}_-4 \\ \hline V L_- & V L_- \end{array} \right\rangle, \quad (148)$$

В свою очередь взаимодействие между электронами и позитроном определяется выражением

$$H_{e-p} = - \sum_{\bar{k}_+1 \dots \bar{k}_+2 \bar{k}_- \dots \bar{k}_-4} a_{\bar{k}_+1}^+ a_{\bar{k}_+2}^- a_{\bar{k}_-}^+ a_{\bar{k}_-4}^- \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_+1 \bar{k}'_+2 & \bar{k}_-3 \bar{k}_-4 \\ \hline L_+ L_+ & L_- L_- \end{array} \right\rangle + W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}'_+1 \bar{k}_+2 & \bar{k}_-3 \bar{k}'_+4 \\ \hline L_+ L_+ & L_- L_- \end{array} \right\rangle \right\} \quad (149)$$

Взаимодействие между позитроном и дырками описывается выражением

$$H_{p-h} = - \sum_{\bar{k}_+1 \dots \bar{k}_+2 \bar{k}_- \dots \bar{k}_-4} a_{\bar{k}_+1}^+ a_{\bar{k}_+2}^- d_{\bar{k}_-}^+ d_{\bar{k}_-4}^- W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_+1 \bar{k}_+2 & \bar{k}_-3 \bar{k}_-4 \\ \hline L_+ L_+ & VV \end{array} \right\rangle \quad (150)$$

Три последних члена в (144) интерпретируются следующим образом.

Во-первых, это электрон-электронное взаимодействие в зоне проводимости

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_-1 \dots \bar{k}_-4} a_{\bar{k}_-1}^+ a_{\bar{k}_-2}^+ a_{\bar{k}_-3}^- a_{\bar{k}_-4}^- W_- \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_-1 \bar{k}_-2 & \bar{k}_-3 \bar{k}_-4 \\ \hline L_- L_- & VV \end{array} \right\rangle \quad (151)$$

Во-вторых, это взаимодействие между дырками в валентной зоне

$$H_{h-h} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_1 \dots \bar{k}_4} d_{\bar{k}_3}^+ d_{\bar{k}_4}^+ d_{\bar{k}_1}^- d_{\bar{k}_2}^- W_- \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_1 \bar{k}_2 & \bar{k}_3 \bar{k}_4 \\ \hline VV & VV \end{array} \right\rangle \quad (152)$$

В- третьих, это постоянный член, который не содержит никаких операторов

$$W_F = \sum_{\bar{k}_-} \left\{ \int \varphi_{\bar{k}_-,V}^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right) \varphi_{\bar{k}_-,V}(x) d^3x \right\} + \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_-, \bar{k}'_-} \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_- \bar{k}'_- & \bar{k}'_- \bar{k}_- \\ \hline VV & VV \end{array} \right\rangle - W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_- \bar{k}_- & \bar{k}_- \bar{k}'_- \\ \hline VV & VV \end{array} \right\rangle \right\}, \quad (153)$$

который описывает энергию валентной зоны.

Отметим, что записанные выше выражения (145), (146) и (147) представляют средние значения энергий электронов, позитрона и дырок: $E_{\bar{k}_-,L_-}, E_{\bar{k}_+,L_+}, E_{\bar{k}_-,V}$. Можно принять для реальных условий экспериментов, что электроны, позитрон и дырки находятся вблизи краев зон. Поэтому используем разложения

$$E_{\bar{k}_-,L_-} = E_{0,L_-} + \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m_{L_-}}, \quad (154)$$

$$E_{\bar{k}_+,L_+} = E_{0,L_+} + \frac{\hbar^2 k_+^2}{2m_{L_+}}, \quad (155)$$

$$E_{\bar{k}_-,V} = E_{0,V} - \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m_V}, \quad (156)$$

В рамках рассмотренной задачи решим проблему экситона, атома позитрония (Ps) и позитрон-экситонного комплекса.

7. Экситоны, атом Ps и позитрон-экситонные комплексы

Рассмотрим вначале проблему позитрон-экситонного комплекса в кристалле, т.е. систему, состоящую из взаимодействующих между собой электрона, позитрона и дырки. Будем исходить из оператора Гамильтона системы электронов, позитрона и дырок в обозначениях Хакена [5]

$$\begin{aligned}
H_{tot} = & W_F + \sum_{\bar{k}_-} \left(E_{0,L_-} + \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m_{L_-}} \right) a_{\bar{k}_-}^+ a_{\bar{k}_-} + \sum_{\bar{k}_-} \left(-E_{0,V} + \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m_V} \right) d_{\bar{k}_-}^+ d_{\bar{k}_-} + \sum_{\bar{k}_+} \left(E_{0,L_+} + \frac{\hbar^2 k_+^2}{2m_{L_+}} \right) a_{\bar{k}_+}^+ a_{\bar{k}_+} - \\
& - \sum_{\bar{k}_- \dots \bar{k}_4} a_{\bar{k}_-}^+ a_{\bar{k}_-} d_{\bar{k}_-}^+ a_{\bar{k}_-} \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_- \bar{k}_- & \bar{k}_- \bar{k}_- \\ \hline L_- V & VL_- \end{array} \right\rangle - W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_- \bar{k}_- & \bar{k}_- \bar{k}_- \\ \hline VV & VV \end{array} \right\rangle \right\} + \\
& \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_- \dots \bar{k}_4} a_{\bar{k}_-}^+ a_{\bar{k}_-} a_{\bar{k}_-}^+ a_{\bar{k}_-} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_- \bar{k}_- & \bar{k}_- \bar{k}_- \\ \hline L_- L_- & L_- L_- \end{array} \right\rangle + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\bar{k}_- \dots \bar{k}_4} d_{\bar{k}_-}^+ d_{\bar{k}_-}^+ d_{\bar{k}_-} d_{\bar{k}_-} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_- \bar{k}_- & \bar{k}_- \bar{k}_- \\ \hline VV & VV \end{array} \right\rangle - \sum_{\bar{k}_+ \bar{k}_- \bar{k}_- \bar{k}_4} a_{\bar{k}_+}^+ a_{\bar{k}_+}^+ a_{\bar{k}_-} a_{\bar{k}_-} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_- \bar{k}_- & \bar{k}_- \bar{k}_- \\ \hline L_- L_- & L_- L_+ \end{array} \right\rangle - \\
& - \sum_{\bar{k}_+ \bar{k}_- \bar{k}_- \bar{k}_4} a_{\bar{k}_+}^+ a_{\bar{k}_+}^+ a_{\bar{k}_-} a_{\bar{k}_-} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_+ \bar{k}_- & \bar{k}_- \bar{k}_+ \\ \hline L_+ V & VL_+ \end{array} \right\rangle + \sum_{\bar{k}_+ \bar{k}_- \bar{k}_- \bar{k}_4} a_{\bar{k}_+}^+ a_{\bar{k}_+}^+ d_{\bar{k}_-} d_{\bar{k}_-} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_+ \bar{k}_- & \bar{k}_- \bar{k}_+ \\ \hline L_+ V & VL_+ \end{array} \right\rangle \quad (157)
\end{aligned}$$

В этом выражении первый член представляет собой энергию полностью заполненной зоны, второй член представляет кинетическую энергию электрона (индекс L_-), третий член – кинетическую энергию дырок в валентной зоне (индекс V), четвертый – кинетическую энергию позитрона в позитронной зоне проводимости (индекс L_+), пятый член описывает взаимодействие между дырками и электронами, шестой член – взаимодействие между электронами в зоне проводимости, седьмой член – взаимодействие между дырками в валентной зоне, восьмой член описывает взаимодействие электронов проводимости (индекс L_-) и позитроном в позитронной зоне проводимости (индекс L_+) и, наконец, девятый представляет энергию взаимодействия позитрона позитронной зоны проводимости (индекс L_+) и дырками в валентной зоне (индекс V).

Следовательно задача позитрон-экситонного комплекса заключается в решении уравнения Шредингера

$$H_{tot} \Phi = E \Phi \quad (158)$$

Приведем это решение в явном виде для случая одного электрона, позитрона и дырки. Волновые функции электрона в состоянии k_- , позитрона в состоянии k_+ и дырки в состоянии k_- можно получить из состояния, описывающего полностью заполненную валентную зону, последовательным действием операторов рождения $a_{\bar{k}_-}^+$, $a_{\bar{k}_+}^+$, $d_{\bar{k}_-}^+$ на функцию заполненной зоны Φ_V

$$a_{\bar{k}_-1}^+ a_{\bar{k}_+1}^+ d_{\bar{k}_-2}^+ \Phi_V \quad (159)$$

Следует отметить, что в общем случае $k_{-1} \neq k_{+1}$.

Из выражения (159) следует, что электрон, дырка и позитрон, пролетая друг относительно друга, испытывают естественно взаимное рассеяние, в результате чего попадают во все возможные различные конечные состояния k_{-1}, k_{+1} . Поэтому следует образовать сумму по всем состояниям k_{-1}, k_{+1} электрона, позитрона и дырки. Исходя из этого соображения, подход к системе позитрон-экситонного комплекса будет основан на волновой функции

$$\Phi = \sum_{\bar{k}_-, \bar{k}_-, \bar{k}_+1} C_{\bar{k}_-, \bar{k}_-, \bar{k}_+1} a_{\bar{k}_-1}^- a_{\bar{k}_+1}^- d_{\bar{k}_-2}^- \Phi_V \quad (160)$$

Теперь Гамильтониан (157) упрощается, т.к. отсутствуют члены, соответствующие взаимодействию электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне.

$$\begin{aligned} H_{tot} = & W_F + \sum_{\bar{k}_-} \left(E_{0,L_-} + \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m_{L_-}} \right) a_{\bar{k}_-}^+ a_{\bar{k}_-}^- + \sum_{\bar{k}_-} \left(-E_{0,V} + \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m_V} \right) d_{\bar{k}_-}^+ d_{\bar{k}_-}^- + \sum_{\bar{k}_+} \left(E_{0,L_+} + \frac{\hbar^2 k_+^2}{2m_{L_+}} \right) a_{\bar{k}_+}^+ a_{\bar{k}_+}^- - \\ & - \sum_{\bar{k}_-, \bar{k}_-4} a_{\bar{k}_-1}^+ a_{\bar{k}_-4}^- d_{\bar{k}_-2}^+ d_{\bar{k}_-3}^- \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_-1 \bar{k}_-2 & \bar{k}_-3 \bar{k}_-4 \\ L_- V & VL_- \end{array} \right\rangle - W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_-2 \bar{k}_-1 & \bar{k}_-3 \bar{k}_-4 \\ VL_- & VL_- \end{array} \right\rangle \right\} + \\ & - \sum_{\bar{k}_+1 \bar{k}_-2 \bar{k}_-3 \bar{k}_-4} a_{\bar{k}_+1}^+ a_{\bar{k}_+4}^- a_{\bar{k}_-#}^- a_{\bar{k}_-2}^- W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_-1 \bar{k}_-2 & \bar{k}_-3 \bar{k}_-4 \\ L_+ L_- & L_- L_+ \end{array} \right\rangle + \sum_{\bar{k}_+1 \bar{k}_-2 \bar{k}_-3 \bar{k}_-4} a_{\bar{k}_+1}^+ a_{\bar{k}_+4}^- a_{\bar{k}_-2}^- a_{\bar{k}_-3}^- W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_+1 \bar{k}_-2 & \bar{k}_-3 \bar{k}_+4 \\ L_+ V & VL_+ \end{array} \right\rangle \end{aligned} \quad (161)$$

Оператор (161) разложим, как обычно, на две части: кинетическую энергию электрона, позитрона и дырки и взаимодействия между ними (при этом, чтобы опустить член W_F в (161) сдвинем соответствующим образом энергию E).

$$H_{tot} = H_k + H_{eh} + H_{ep} + H_{ph} \quad (162)$$

Учитывая явный вид H_k в (161) и волновой функции (160), получаем

$$\Phi = \sum_{\bar{k}_{-1}, \bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}} C_{\bar{k}_{-1}, \bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}} \left(\frac{\hbar^2 k_{-1}^2}{2m_{L_-}} + \frac{\hbar^2 k_{+1}^2}{2m_{L_+}} + \frac{\hbar^2 k_{-2}^2}{2m_V} + const \right) a_{\bar{k}_{-1}}^+ a_{\bar{k}_{+1}}^+ d_{\bar{k}_{-2}}^+ \Phi_V, \quad (163)$$

$$const = E_{0,L_-} + E_{0,L_+} - E_{0,V}$$

В свою очередь запишем правую часть выражения (158) в явном виде

$$E\Phi = E \sum_{\bar{k}_{-1}, \bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}} C_{\bar{k}_{-1}, \bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}} \Phi_V, \quad (164)$$

$$H_{e-h} = \sum_{\bar{k}_{-1} \dots \bar{k}_{-4}} \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ L_V & VL_- \end{array} \right\rangle - W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-2} \bar{k}_{-1} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ VL_- & VL_- \end{array} \right\rangle \right\} \sum_{\bar{k}_{+}, \bar{k}'_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}'_{-2}} C_{\bar{k}_{+}, \bar{k}'_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}'_{-2}} a_{\bar{k}_{-1}}^+ a_{\bar{k}_{-4}}^+ d_{\bar{k}_{-2}}^+ d_{\bar{k}_{-3}}^+ a_{\bar{k}_{-2}}^+ a_{\bar{k}_{-3}}^+ a_{\bar{k}_{-4}}^+ a_{\bar{k}_{+}}^+ \Phi_V$$

С помощью фермиевских перестановочных соотношений можем значительно упростить выражение (164), перетащив все операторы уничтожения направо и учтя также, что действие на Φ_V электронных, позитронных и дырочных операторов дает нуль. Поменяв индексы 3,2,4 местами (2 на 4, 3 на 2, и 4 на 3 – во втором члене (163)), можем записать выражение (164) в виде

$$H_{e-h} \Phi = - \sum_{\bar{k}_{+}, \bar{k}'_{+1}, \bar{k}_{-3}, \bar{k}_{-4}} C_{\bar{k}_{+}, \bar{k}'_{+1}, \bar{k}_{-3}, \bar{k}_{-4}} a_{\bar{k}_{-1}}^+ a_{\bar{k}_{+1}}^+ d_{\bar{k}_{-2}}^+ \Phi_V \sum_{\bar{k}_{-1} \dots \bar{k}_{-4}} \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ L_V & VL_- \end{array} \right\rangle - W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-2} \bar{k}_{-1} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{-4} \\ VL_- & VL_- \end{array} \right\rangle \right\} \quad (165)$$

Далее

$$H_{p-h} \Phi = - \sum_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}, \bar{k}_{-3}, \bar{k}_{+4}} \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{+4} \\ L_+ L_- & VL_- \end{array} \right\rangle \right\} \sum_{\bar{k}_{+}, \bar{k}_{-}, \bar{k}'_{+4}} C_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}, \bar{k}_{-3}, \bar{k}_{+4}} a_{\bar{k}_{-1}}^+ a_{\bar{k}_{-4}}^+ d_{\bar{k}_{-2}}^+ d_{\bar{k}_{-3}}^+ a_{\bar{k}_{+1}}^+ a_{\bar{k}_{-2}}^+ a_{\bar{k}_{-3}}^+ a_{\bar{k}_{+4}}^+ \Phi_V =$$

$$= \sum_{\bar{k}_{-1}, \bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}, \bar{k}_{-3}, \bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-4}} C_{\bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-3}, \bar{k}_{-4}} \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1} \bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3} \bar{k}_{+4} \\ L_+ L_- & L_- L_+ \end{array} \right\rangle \quad (166)$$

И, наконец

$$\begin{aligned}
H_{p-\hbar}\Phi &= - \sum_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}, \bar{k}_{-3}, \bar{k}_{+4}} \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1}\bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3}\bar{k}_{+4} \\ \hline L_{+}V & VL_{+} \end{array} \right\rangle \sum_{\bar{k}_{+}, \bar{k}_{-}, \bar{k}_{\pm}} C_{\bar{k}_{+}, \bar{k}_{-}, \bar{k}_{\pm}} a_{\bar{k}_{-1}}^{+} a_{\bar{k}_{-4}}^{-} d_{\bar{k}_{-2}}^{+} d_{\bar{k}_{-3}}^{-} a_{\bar{k}_{+}}^{+} a_{\bar{k}_{+}}^{-} a_{\bar{k}_{-}}^{+} a_{\bar{k}_{-}}^{-} \Phi_V = \\
&= \sum_{\bar{k}_{-1}, \bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}} C_{\bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-3}, \bar{k}_{-4}} a_{\bar{k}_{-1}}^{+} a_{\bar{k}_{+1}}^{+} d_{\bar{k}_{-2}}^{+} \Phi_V \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1}\bar{k}_{-4} & \bar{k}_{-2}\bar{k}_{+3} \\ \hline L_{+}V & VL_{+} \end{array} \right\rangle
\end{aligned} \tag{167}$$

Можно видеть, что в выражениях (164), (165)-(167) появились линейные комбинации волновых функций, которые имеют вид (159). Причем известно, что функции вида (159) взаимно ортогональны для различных векторов k_{-1}, k_{+1} . Тогда уравнение (158), в левой части которого стоят выражения (163), (165)-(167) может быть удовлетворено, если равны между собой коэффициенты функций (160). Сравнивая коэффициенты, получаем систему уравнений для коэффициентов $C_{\bar{k}_{-1}, \bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}}$

$$\begin{aligned}
&C_{\bar{k}_{-1}, \bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}} \left(\frac{\hbar^2 k_{-1}^2}{2m_{L_-}} + \frac{\hbar^2 k_{+1}^2}{2m_{L_+}} + \frac{\hbar^2 k_{-2}^2}{2m_v} + const \right) - \\
&- \sum_{\bar{k}_{-3}, \bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-4}} C_{\bar{k}_{-3}, \bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-4}} a_{\bar{k}_{-1}}^{+} a_{\bar{k}_{+1}}^{+} d_{\bar{k}_{-2}}^{+} \sum_{\bar{k}_{-1} \dots \bar{k}_{-4}} \left\{ W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1}\bar{k}_{-2} & \bar{k}_{-3}\bar{k}_{-4} \\ \hline L_{-}V & VL_{-} \end{array} \right\rangle - W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-2}\bar{k}_{-1} & \bar{k}_{-3}\bar{k}_{-4} \\ \hline VL_{-} & VL_{-} \end{array} \right\rangle \right\} - \\
&- \sum_{\bar{k}_{-3}, \bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-4}} C_{\bar{k}_{-3}, \bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-4}} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1}\bar{k}_{-4} & \bar{k}_{-2}\bar{k}_{+3} \\ \hline L_{+}L_{-} & VL_{-} \end{array} \right\rangle + \sum_{\bar{k}_{-3}, \bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-4}} C_{\bar{k}_{-3}, \bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-4}} W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1}\bar{k}_{-4} & \bar{k}_{-2}\bar{k}_{+3} \\ \hline L_{+}V & VL_{+} \end{array} \right\rangle EC_{\bar{k}_{-1}, \bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}}
\end{aligned} \tag{168}$$

Можно показать, что система уравнений (168) эквивалентна полностью обычному трехчастичному уравнению Шредингера, причем между электроном, позитроном и дыркой существует кулоновское взаимодействие. Упростим для этого матричные элементы, входящие в (168)

$$W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1}\bar{k}_{-4} & \bar{k}_{-2}\bar{k}_{-3} \\ \hline L_{+}L_{-} & VL_{-} \end{array} \right\rangle = \iint \varphi_{\bar{k}_{-1}, L_{-}}^{*}(x) \varphi_{\bar{k}_{-4}, V}^{*}(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{\bar{k}_{-2}, V}(x') \varphi_{\bar{k}_{-3}, L_{-}}(x) d^3x d^3x' \tag{169}$$

Используем в (169) для волновых функций в зонах явный вид блоховской волны

$$\varphi_{\bar{k}_-,j}(x) = e^{i\bar{k}_-x} u_{\bar{k}_-,j}(x) \quad (170)$$

Разложим функции u , зависящие от \bar{x}, \bar{k}_- в ряд Тейлора по \bar{k}_- (то есть для малых \bar{k}_-). Имеем в этом случае

$$W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{-1}\bar{k}_{-4} & \bar{k}_{-2}\bar{k}_{-3} \\ \hline L_+L_- & VL_- \end{array} \right\rangle \approx \iint e^{i\bar{k}_{-1}\bar{x}} e^{-i\bar{k}_{-4}\bar{x}'} \frac{e^2}{|x-x'|} e^{i\bar{k}_{-2}\bar{x}'} e^{i\bar{k}_{-3}\bar{x}} \{|u_{0,L_-}(x)|^2 |u_{0,V}(x')|^2 +$$

$$+ \bar{k}_{-1} (\nabla_{\bar{k}_{-1}}^* u_{\bar{k}_{-1},L_-}^*(x))_{\bar{k}_{-1}=0} |u_{0,L_-}(x)|^2 |u_{0,V}(x')|^2 + \dots\} d^3x d^3x' \quad (171)$$

Далее делаем следующие предположения: во-первых, играющая заметную роль значения \bar{k}_- настолько малы, что из всего ряда Тейлора сохраним лишь первый член. Таким образом в фигурных скобках выражения (171) оставляем лишь член $|u_{0,L_-}(x)|^2 |u_{0,V}(x')|^2$. Эта функция периодична с периодом решетки, однако внутри элементарной ячейки она может быстро осциллировать. Так мы приняли, что важны только малые значения \bar{k}_- (то есть $|\bar{k}_-| \ll \pi/l_0, l_0$ - постоянная решетки), то экспоненциальные функции в (171) можно вычислить, усреднив его по отдельным элементарным ячейкам. Заметим, что блоховские функции должны быть нормированы в объеме V на единицу. Таким образом, при усреднении появляется множитель $1/V^2$. После этого выражение (171) запишем в виде

$$W \approx \iint e^{i\bar{k}_{-1}\bar{x} - i\bar{k}_{-2}\bar{x}'} \frac{e^2}{|x-x'|} e^{i\bar{k}_{-3}\bar{x} + i\bar{k}_{-2}\bar{x}'} e^{i\bar{k}_{-4}\bar{x}'} d^3x d^3x' \quad (172)$$

Вторым выражением во втором члене формулы (168) пренебрегаем, который описывает обменной взаимодействие.

Рассмотри далее матричный элемент W в третьем члене выражения (168)

$$W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1}\bar{k}_{-4} & \bar{k}_{-2}\bar{k}_{+3} \\ \hline L_+L_- & L_-L_+ \end{array} \right\rangle = \iint \varphi_{\bar{k}_{+1},L_+}^*(x) \varphi_{\bar{k}_{-4},L_-}^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{\bar{k}_{-2},L_-}(x') \varphi_{\bar{k}_{+3},L_+}(x) d^3x d^3x', \quad (173)$$

где

$$\varphi_{\bar{k}_-, L_-}(x) = e^{i\bar{k}_- x} u_{\bar{k}_-, L_-}(x) \quad (174)$$

$$\varphi_{\bar{k}_+, L_+}(x) = e^{i\bar{k}_+ x} u_{\bar{k}_+, L_+}(x)$$

После преобразований, описанных выше, для выражения (169) получаем

$$W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1} \bar{k}_{-4} & \bar{k}_{-2} \bar{k}_{+3} \\ \hline L_+ L_- & L_- L_+ \end{array} \right\rangle \approx \frac{1}{V^2} \iint e^{i\bar{k}_{+1} \bar{x} + i\bar{k}_{-2} \bar{x}'} \frac{e^2}{|x - x'|} e^{i\bar{k}_{+3} \bar{x} - i\bar{k}_{-4} \bar{x}'} d^3 x d^3 x' \quad (175)$$

Матричный элемент, входящий в четвертый член выражения (168), равен

$$W \left\langle \begin{array}{c|c} \bar{k}_{+1} \bar{k}_{-4} & \bar{k}_{-2} \bar{k}_{+3} \\ \hline L_+ V & V L_+ \end{array} \right\rangle \approx \frac{1}{V^2} \iint e^{i\bar{k}_{+1} \bar{x} + i\bar{k}_{-2} \bar{x}'} \frac{e^2}{|x - x'|} e^{i\bar{k}_{+3} \bar{x} - i\bar{k}_{-4} \bar{x}'} d^3 x d^3 x' \quad (176)$$

Можно утверждать, что система уравнений (168) с упрощениями (172), (175) и (176) эквивалентна следующему трехчастичному уравнению

$$\left(\text{const} - \frac{\hbar^2}{2m_{L_-}} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{L_+}} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_v} \nabla_3^2 - \frac{e^2}{|x_1 - x_2|} - \frac{e^2}{|x_1 - x_3|} - \frac{e^2}{|x_2 - x_3|} \right) \Psi(x_1, x_2, x_3) = E_1 \Psi(x_1, x_2, x_3) \quad (177)$$

Для доказательства этого утверждения следует представить волновую функцию $\Psi(x_1, x_2, x_3)$ в виде

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \sum_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}_{-2}} C_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}_{-2}} \frac{1}{V} \exp(i\bar{k}_{+1} x_2 + i\bar{k}_{-1} x_1 - i\bar{k}_{-2} x_3) \quad (178)$$

Умножим (168) на выражение

$$\frac{1}{V} \exp(i\bar{k}_{+1} x_2 + i\bar{k}_{-1} x_1 - i\bar{k}_{-2} x_3) \quad (179)$$

и просуммируем по $\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-2}, \bar{k}_{-1}$.

Вначале рассмотрим члены, относящиеся к кинетической энергии

$$\sum_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}_{-2}} C_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}_{-2}} \frac{1}{V} \exp(i\bar{k}_{+1}x_2 + i\bar{k}_{-1}x_1 - i\bar{k}_{-2}x_3) \left(const + \frac{\hbar^2 k_{-1}^2}{2m_{L_-}} + \frac{\hbar^2 k_{+1}^2}{2m_{L_+}} + \frac{\hbar^2 k_{-2}^2}{2m_v} \nabla_3^2 \right) \quad (180)$$

Так как $k^2 \exp(i\bar{k}x)$ можно представить в виде

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \exp(i\bar{k}x) = -\nabla^2 \exp(i\bar{k}x), \quad (181)$$

то (180) переходит в следующее выражение

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m_{L_-}} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{L_+}} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_v} \nabla_3^2 \right) \sum_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}_{-2}} C_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}_{-2}} \frac{1}{V} \exp(i\bar{k}_{+1}x_2 + i\bar{k}_{-1}x_1 - i\bar{k}_{-2}x_3) \quad (182)$$

Согласно (178) это выражение эквивалентно выражению

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m_{L_-}} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{L_+}} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_v} \nabla_3^2 \right) \Psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3) \quad (183)$$

Часть, описывающая электрон-дырочное взаимодействие (168) с использованием (172) после умножения на (179) принимает вид

$$\sum_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}_{-2}} C_{\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}_{-2}} \frac{1}{V} \exp(i\bar{k}_{-1}x_1 - i\bar{k}_{-1}x_2 - i\bar{k}_{-2}x_3) \sum_{\bar{k}_{-3}, \bar{k}_{-4}, \bar{k}_{+4}} C_{\bar{k}_{-3}, \bar{k}_{-4}, \bar{k}_{+4}} \frac{1}{V^2} \cdot \quad (184)$$

$$\cdot \iint \exp(-i\bar{k}_{-1}x + i\bar{k}_{-2}x') \frac{e^2}{|x - x'|} \exp(i\bar{k}_{-3}x + i\bar{k}_{-1}x_1 - i\bar{k}_{-4}x') d^3x d^3x'$$

Теперь соберем вместе все экспоненциальные функции, содержащие $\bar{k}_{+1}, \bar{k}_{-1}, \bar{k}_{-2}$, и воспользуемся соотношением

$$\frac{1}{V} \exp i\bar{k}(\bar{x}_1 - \bar{x}') = \delta(x_1 - x') \delta(x_2 - x') \delta(x_3 - x') \quad (185)$$

Ввиду появления δ -функций интегрирование в (184) пропадает и выражение (184) переходит (при $\bar{x} = \bar{x}_1, \bar{x}' = \bar{x}_2$) в выражение

$$\frac{1}{V} \sum_{\bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-4}, \bar{k}_{-3}} C_{\bar{k}_{+4}, \bar{k}_{-4}, \bar{k}_{-3}} \exp(i\bar{k}_{-3}x_1 + i\bar{k}_{+4}x_2 - i\bar{k}_{-4}x_3) d^3x d^3x' \frac{e^2}{|x_1 - x_2|} \quad (186)$$

Но это выражение тождественно совпадает с выражением

$$\frac{e^2}{|x_1 - x_3|} \Psi(x_1, x_2, x_3) \quad (187)$$

Аналогично получаем выражения, входящие в уравнение (177)

$$\frac{e^2}{|x_1 - x_2|} \Psi(x_1, x_2, x_3) \quad (188)$$

$$\frac{e^2}{|x_2 - x_3|} \Psi(x_1, x_2, x_3) \quad (189)$$

Заметим далее, что в поляризуемой среде закон Кулона модифицируется с учетом диэлектрической проницаемости. Следовательно, в выражении (177) в феноменологическом приближении надо заменить $\pm \frac{e^2}{|x_i - x_j|}$ на $\pm \frac{e^2}{\varepsilon |x_i - x_j|}$. То обстоятельство, что в нашем рассмотрении ε не появилось, связано со значительным упрощением Гамильтониана, где мы пренебрегли виртуальными переходами.

Тогда трехчастичное уравнение Шредингера с учетом вышесказанного запишется в виде

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{L_-}} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{L_+}} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_v} \nabla_3^2 - \frac{e^2}{\varepsilon |x_1 - x_2|} - \frac{e^2}{\varepsilon |x_1 - x_3|} - \frac{e^2}{\varepsilon |x_2 - x_3|} \right) \Psi(x_1, x_2, x_3) = E_1 \Psi(x_1, x_2, x_3) \quad (190)$$

Уравнение Шредингера представляет собой описание позитрон экситонного комплекса Ванье большого радиуса. Такого рода система является аналогом систем (комплексов) Уилера [9,10] (ионы позитрония). Он был открыт в блестящих экспериментах Миллса [11] относительно недавно. Обзоры теоретических расчетов такого рода систем был дан ранее в работах [12-20].

Сродство к позитрону (электрону) для таких систем составляет величины не менее 0,1 эВ, время жизни относительно двухквантовой аннигиляции - $\tau = 5,02 \cdot 10^{-10}$ с.

Заметим, что уравнение (190) для атома Ps большого радиуса в кристалле принимает вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{L_-}} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{L_+}} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{\varepsilon |x_1 - x_2|} \right) \Psi(x_1, x_2) = E_1 \Psi(x_1, x_2) \quad (191)$$

Его решение подробно анализируется в монографиях по квантовой электродинамике (см., например, [8]) и в ряде конкретных работ [12-20]. Наряду с приближением (191) представляет большой интерес проблема атома Ps малого радиуса в кристалле, которую рассмотрим ниже.

8. Модель Френкеля атома Ps малого радиуса в кристалле

В разделе 7 постулировалось утверждение о том, что расстояние между электроном, позитроном, дыркой велики, так что вполне разумным было разложение операторов поля $\psi^+(x)$ и $\psi(x)$ по блоховским функциям (волнам). В данном разделе рассмотрим противоположный случай, когда позитрон и электрон находятся на одном и том же атоме. При этом разложение будем проводить не блоховским волнам, а по атомным функциям, или по функциям Ванье, свойства которых обсуждались нами ранее. Так мы имеем две зоны – позитронную и электронную зону проводимости, то введем следующие функции Ванье

$$\omega_{\bar{l}, L_+}(x) = \omega_{L_+}(x - \bar{l}) \quad (\text{позитронная зона проводимости}), \quad (192)$$

$$\omega_{\bar{l}, L_-}(x) = \omega_{L_-}(x - \bar{l}) \quad (\text{электронная зона проводимости}), \quad (193)$$

где \bar{l} - радиус-вектор точки локализации частиц.

Разложение электронных и позитронных полевых операторов $\psi_-(x)$, $\psi_+^-(x)$ и $\psi_+(x)$, $\psi_+^+(x)$ по функциям Ванье записывается в виде

$$\psi_-(x) = \sum_{\bar{l}} a_{\bar{l}, L_-} \omega_{L_-}(x - \bar{l}), \quad \psi_+^-(x) = \sum_{\bar{l}} a_{\bar{l}, L_-}^+ \omega_{L_-}(x - \bar{l}) \quad (194)$$

$$\psi_+(x) = \sum_{\bar{l}} a_{\bar{l}, L_+} \omega_{L_+}(x - \bar{l}), \quad \psi_+^+(x) = \sum_{\bar{l}} a_{\bar{l}, L_+}^+ \omega_{L_+}(x - \bar{l}) \quad (195)$$

Операторы $a_{\bar{l}, L_-}^+$ и $a_{\bar{l}, L_+}^+$ рождают электрон и позитрон в электронной и позитронной зонах проводимости, а операторы $a_{\bar{l}, L_-}$ и $a_{\bar{l}, L_+}$ уничтожают их в тех же зонах соответственно.

Так как функции Ванье представляют собой ортогональную систему функций, то согласно выше изложенному a_{l,L_-} и a_{l,L_+} удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned} a_{\bar{l},L_-} a_{\bar{l},L_-} + a_{\bar{l},L_-} a_{\bar{l},L_-} &= 0; a_{\bar{l},L_-}^+ a_{\bar{l},L_-}^+ + a_{\bar{l},L_-}^+ a_{\bar{l},L_-}^+ = 0 \\ a_{\bar{l},L_-} a_{\bar{l},L_-}^+ + a_{\bar{l},L_-}^+ a_{\bar{l},L_-} &= \delta_{ll'} \delta_{L_- L_-} \end{aligned} \quad (196)$$

и

$$\begin{aligned} a_{\bar{l},L_+} a_{\bar{l},L_+} + a_{\bar{l},L_+} a_{\bar{l},L_+} &= 0; a_{\bar{l},L_+}^+ a_{\bar{l},L_+}^+ + a_{\bar{l},L_+}^+ a_{\bar{l},L_+}^+ = 0 \\ a_{\bar{l},L_+} a_{\bar{l},L_+}^+ + a_{\bar{l},L_+}^+ a_{\bar{l},L_+} &= \delta_{ll'} \delta_{L_+ L_+} \end{aligned} \quad (197)$$

Теперь следует выразить оператор Гамильтона H , как уже делали ранее в п. 7, через операторы рождения и уничтожения a^+, a . Разложим H на два члена H_0^\pm - операторы кинетической энергии электрона и позитрона в поле заданного атома и H_{int} - кулоновское взаимодействие между электроном и позитроном. Итак, получаем

$$\begin{aligned} H &= H_0^- + H_0^+ = \int \psi_-^+(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right\} \psi_-(x) d^3x + \int \psi_+^+(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^+(x) \right\} \psi_+(x) d^3x = \\ &= \sum_{l,m} a_{l,L_-}^+ a_{m,L_-}^+ H_{l,m,L_-} + \sum_{l,m} a_{l,L_+}^+ a_{m,L_+}^+ H_{l,m,L_+} \end{aligned} \quad (198)$$

Здесь использованы сокращенные обозначения

$$H_{l,m,L_-} = \int \omega_{L_-}^*(\bar{x} - \bar{l}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right\} \omega_{L_-}(\bar{x} - \bar{m}) d^3x \quad (199)$$

$$H_{l,m,L_+} = \int \omega_{L_+}^*(\bar{x} - \bar{l}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_p^-(x) \right\} \omega_{L_+}(\bar{x} - \bar{m}) d^3x \quad (200)$$

Если сделать предположение о том, что операторы в фигурных скобках (198) не приводят к переходам между электронной и позитронной зонам, то, преобразовывая соответствующим образом выражение

$$H_{\text{int}} = \iint \psi_+^+(x) \psi_+^+(x') \frac{e^2}{|x - x'|} \psi_-^+(x') \psi_-^+(x') d^3x d^3x', \quad (201)$$

получаем

$$H_{\text{int}} = \sum_{L_+, L_+, L_-, l_1 l_2 l_3 l_4} a_{l_1, L_+}^+ a_{l_2, L_+} a_{l_3, L_-}^+ a_{l_4, L_-} W \begin{pmatrix} l_1 l_2 l_3 l_4 \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix}, \quad (202)$$

где

$$W \begin{pmatrix} l_1 l_2 l_3 l_4 \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix} = \int \omega_{L_+}^* (\bar{x} - \bar{l}_1) \omega_{L_+} (\bar{x}' - \bar{l}_2) \frac{e^2}{|x - x'|} \omega_{L_-}^* (\bar{x}' - \bar{l}_3) \omega_{L_-} (\bar{x} - \bar{l}_4) d^3 x d^3 x', \quad (203)$$

Сделаем упрощения, согласно которым можно пренебречь перекрытием волновых функций. В этом случае примем, что $l_1 = l_4 = l$, а $l_2 = l_3 = l'$. При этом уравнение (202) может быть записано в виде

$$H_{\text{int}} = \sum_{l'} a_{l, L_+}^+ a_{l', L_+} a_{l, L_-}^+ a_{l', L_-} W \begin{pmatrix} l l' l l' \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix} + \sum_{l'} a_{l', L_+}^+ a_{l, L_+} a_{l', L_-}^+ a_{l, L_-} W \begin{pmatrix} l l' l l' \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix}, \quad (204)$$

где

$$W \begin{pmatrix} l l' l l' \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix} = \int \omega_{L_+}^* (\bar{x} - \bar{l}) \omega_{L_+} (\bar{x}' - \bar{l}') \frac{e^2}{|x - x'|} \omega_{L_-}^* (\bar{x}' - \bar{l}') \omega_{L_-} (\bar{x} - \bar{l}) d^3 x d^3 x', \quad (205)$$

Таким образом, полный Гамильтониан френкелевской модели атома Ps имеет вид

$$H = \sum_{l, m} a_{l, L_+}^+ a_{m, L_-} H_{l, m, L_-} + \sum_{l, m} a_{l, L_+}^+ a_{m, L_+} H_{l, m, L_+} - \sum_{l, l'} a_{l', L_+}^+ a_{l, L_+} a_{l', L_+} a_{l, L_-}^+ a_{l', L_-} W \begin{pmatrix} l l' l l' \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix} + \quad (206)$$

$$\sum_{l, l'} a_{l, L_+}^+ a_{l', L_+} a_{l, L_-}^+ a_{l', L_-} W \begin{pmatrix} l l' l l' \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix}$$

Каждый член Гамильтониана имеет очень наглядный физический смысл: в первой сумме с членами $a_{l,L_-}^+ a_{m,L_-}$ один электрон в точке m электронной зоны проводимости уничтожается, а в точке l вновь рождается; во второй сумме с членами $a_{l,L_+}^+ a_{m,L_+}$ один позитрон в точке m позитронной зоны проводимости уничтожается, а в точке l вновь рождается. Эти части Гамильтониана, следовательно, описывают движение электрона (позитрона) и дырки.

Третий член Гамильтониана (206) не описывает никакого переноса, позитрон остается в точке \bar{l} , а электрон в точке $-\bar{l}$. Этот член описывает кулоновское взаимодействие электрона и позитрона в атоме Ps . Четвертый член с членами $a_{l,L_+}^+ a_{l',L_+} a_{l,L_-}^+ a_{l',L_-} \equiv a_{l,L_+}^+ a_{l',L_-} a_{l,L_-}^+ a_{l',L_+}$ описывает уничтожение электронно-дырочной пары в точке \bar{l} и последующее рождение в точке \bar{l}' или наоборот, т.е. описывает совместный перенос позитрона и электрона.

Введем теперь явный вид функции состояния полностью заполненной валентной зоны Φ_g . В точке \bar{l} рождается одновременно электрон и позитрон. В силу трансляционной симметрии нашей задачи должны провести суммирование по всем точкам локализации \bar{l} с множителем $\exp(i\bar{k}\bar{l})$. Волновая функции таким образом запишется в виде

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\bar{l}} \exp(i\bar{k}\bar{l}) a_{l,L_+}^+ a_{l,L_-}^+ \Phi_g \quad (207)$$

Здесь

$$B_l^+ = a_{l,L_+}^+ a_{l,L_-}^+ \quad (208)$$

есть оператор рождения локализованного в точке \bar{l} атома Ps . Соответствующий оператор уничтожения атома Ps есть

$$a_{l,L_+}^+ a_{l,L_-}^+ = B_l \quad (209)$$

Выразим полный Гамильтониан (206) через операторы B_l^+ и B_l . Стоящие в последнем члене операторы выражаются через оператор Ps следующим образом

$$a_{l',L_+}^+ a_{l,L_+} a_{l',L_-}^+ a_{l,L_-} = (a_{l',L_+}^+ a_{l',L_-}^+) (a_{l,L_+} a_{l,L_-}) = B_{l'}^+ B_l \quad (210)$$

Таким образом, выражение, описывающее уничтожение P_S в точке \bar{l} и рождение его в точке \bar{l}' описывается выражением

$$\sum_{l,l'} a_{l',L_+}^+ a_{l,L_+} a_{l',L_+} a_{l,L_-}^+ \hat{W} \begin{pmatrix} ll'l \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix} = \sum_{l,l'} B_{l'}^+ B_l \hat{W} \begin{pmatrix} ll'l \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix} \quad (211)$$

Теперь рассмотрим, какой вклад дает третий член в (206). Рассмотрим действие стоящих в нем операторов на локализованное позитрониевое состояние. Получаем

$$a_{l',L_+}^+ a_{l,L_+} a_{l',L_+} a_{l',L_-}^+ a_{l',L_-} | a_{m,L_-}^+ a_{m,L_-}^+ \Phi_g \neq 0, \quad (212)$$

т.е. при $l = m, l' = m, l = l'$.

При использовании волновой функции (207) из третьего слагаемого (206) следует сохранить лишь те члены, для которых индексы l и l' равны

$$\sum_l a_{l,L_+}^+ a_{l,L_+} a_{l,L_+} a_{l,L_-}^+ a_{l,L_-} \hat{W} \begin{pmatrix} ll'l \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix} = \sum_{l,l'} a_{l,L_+}^+ a_{l,L_-}^+ a_{l,L_+} a_{l',L_+}^+ a_{l',L_-} \hat{W} \begin{pmatrix} ll'l \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix} = \sum_{l,l'} B_{l'}^+ B_l \hat{W} \begin{pmatrix} ll'l \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix} \quad (213)$$

Это выражение приводит лишь к изменению энергии локализованного состояния P_S и не может приводить к переходам между различными точками в кристалле. Теперь рассмотрим два первых члена в (206). Рассмотрим действие типичных операторов из первой суммы на локализованной состоянии

$$a_{l,L_-}^+ a_{l',L_-} a_{m,L_+}^+ a_{l',L_+} \Phi_g = a_{l,L_-}^+ a_{m,L_+}^+ \delta_{l'm} \Phi_g \quad (214)$$

Учтем лишь члены с $\bar{l} = \bar{m}$, так как в противном случае позитрон и электрон далеко уходят друг от друга. Следовательно полагаем

$$H_{l,l,L_-} = E_{0,L_-}, \quad (215)$$

$$H_{l,l,L_+} = E_{0,L_+}, \quad (216)$$

Тогда

$$\sum_l H_{l,l,L_-} a_{l,L_-}^+ a_{l,L_-} = E_{0,L_-} \sum_l B_l^+ B_l \quad (217)$$

$$\sum_l H_{l,l,L_+} a_{l,L_+}^+ a_{l,L_+} = E_{0,L_+} \sum_l B_l^+ B_l \quad (218)$$

Таким образом, выражение (206) может быть записано в виде

$$H = \sum_l B_l^+ B_l E_{0,tot} + \sum_{l,l'} B_l^+ B_l \hat{W}(l-l') \quad (219)$$

Здесь введены обозначения

$$\left. \begin{aligned} E_{0,tot} &= E_{0,L_-} + E_{0,L_+} - \hat{W}_0, \\ \hat{W}_0 &= \hat{W} \begin{pmatrix} IIII \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix}, \\ \hat{W}(l-l') &= \hat{W} \begin{pmatrix} II'I' \\ L_+ L_+ L_- L_- \end{pmatrix} \end{aligned} \right\} \quad (220)$$

Покажем теперь, что функция состояния (207) является решением соответствующего Гамильтониана (219) уравнения Шредингера, и определим собственные значения энергии этого уравнения. Так как

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l \exp(i\bar{k}l) B_l^+ B_l \Phi_g$$

Тогда

$$H\Phi = E_{0,tot}\Phi + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l'} \sum_l \hat{W}(l-l') B_{l'}^+ \exp(ik\bar{l}) \Phi_g \quad (221)$$

Второй член в (221) преобразуем так

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l'} \exp(ikl') B_{l'}^+ \sum_l \hat{W}(l-l') \exp(ik(l-l')) \Phi_g = \frac{1}{\sqrt{N}} W(k) \quad (222)$$

Таким образом

$$E(\bar{k}) = E_{0,tot} + W(\bar{k}) \quad (223)$$

Если разложить E по волновому вектору k , то, как обычно получаем

$$E(\bar{k}) = E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (224)$$

Таким образом мы рассмотрели состояния электронов, дырок, экситонов и атома Ps малого и большого радиуса. На основании данного формализма возможно рассмотрение расчетных методов аннигиляционных характеристик этих состояний в различных средах (например, в ионных кристаллах и гидридах щелочных металлов).

Список литературы

1. PHYSICS WITH MANY POSITRONS". INTERNATIONAL SCHOOL OF PHYSICS ENRICO FERMI. 7-17 July – VARENNA –ITALY. Directors: A. P. Mills, A. Dupasquier. 2009.
2. V.A.Fock // Zs. f. Phys. 1932. Vol.75. P.622.
3. Чжан Ли // Диссертация. Л.: ЛГУ, 1956.
4. Г. Хакен. Квантовополевая теория твердого тела. М.: ГИФМЛ, 1980.
5. Прокопьев Е.П. Введение в теорию позитронных процессов в полупроводниках и ионных кристаллах. М., 1979. 384 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2837. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". №27. 1980. Сер."ЭР"
6. Прокопьев Е.П. Позитроны и позитроний в кристаллах. М., 1982. 138 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-3475. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". №8. 1983. Сер."ЭР".

7. Прокопьев Е.П. Исследования позитронных процессов в кристаллах. М., 1982. 60 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-3556. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". 1983. Сер."ЭР".
8. Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1969.
9. J.Wheeler // Ann. N. Y. Acad. Sci, 1946. Vol,48. P.219.
10. Прокопьев Е.П. Комплексы Уилера в полупроводниках. - М., 1979. - 12 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2757. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". - № 28. - 1979. - Сер. "ЭР".
11. Mills A.P. Observation of the Positronium Negative Ion. Phys. Rev. Letters. 1981. Vol. 46, Number 11. P.717-720.
12. Прокопьев Е.П., Кузнецов Ю.Н., Хашимов Ф.Р. Основы позитроники полупроводников. М., 1976. 343 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2073. РИ.77.06.3412.
13. Арефьев К.П., Воробьев С.А., Прокопьев Е.П. Позитроника в радиационном материаловедении ионных структур и полупроводников. М.: Энергоатомиздат, 1983. 88 с.
14. Е.П.Прокопьев, С.П.Тимошенко, В.И.Графутин, Г.Г.Мясищева, Ю.В.Фунтиков. Позитроника ионных кристаллов, полупроводников и металлов. М.: Ред.-изд. отдел МИЭТ (ТУ), 1999. 176 с.
15. В.И.Гольданский. Физическая химия позитронов и позитрония. М.: Наука, 1968.
16. Прокопьев Е.П. Об аномальных свойствах атома позитрония (Ps) в ионных кристаллах и полупроводниках // Физика твердого тела. 1977. Т.19. Вып.2. С.472-475.
17. Прокопьев Е.П. Позитроний и его свойства в полупроводниках и щелочно-галогидных кристаллах // Химия высоких энергий. 1978. Т.12. Вып.2. С.172-174.
18. Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П., Варисов А.З. Основы теории позитронных состояний в ионных кристаллах. - М., 1978. - 292 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника", Р-2382. Сб. ВИМИ "Военная техника и экономика". Сер. общетехническая. - № 14. - 1978.
19. Варисов А.З., Арефьев К.П., Воробьев А.А., Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П. Позитроны в конденсированных средах. - М., 1977. - 489 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2317. Сб. ВИМИ "Военная техника и экономика". Сер. общетехническая. - № 9. - 1978.
20. Прокопьев Е.П. Исследования в области физики медленных позитронов. Позитронная аннигиляция - новый метод изучения строения вещества. - М., 1986. - 86 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-4367. Сб. реф. НИОКР, обзоров, переводов и деп. рукописей. Сер. "ИМ". - №12. - 1987.

ПОЗИТРОНЫ, ПОЗИТРОНИЙ, ПОЗИТРОННЫЕ И ПОЗИТРОНИЕВЫЕ КОМПЛЕКСЫ В КРИСТАЛЛЕ. ОБЗОР

II. ОСОБЕННОСТИ ИХ СВОЙСТВ В АТМОСФЕРЕ ФОНОНОВ

Аннотация

В данной работе на примере ионных кристаллов показано, что поляризация решетки кристалла разноименно заряженными поляронами (атом позитрония (Ps)) вызывает не только изменение энергии связи позитрония, но и приводит к перенормировке эффективных масс электрона и позитрона. Это взаимодействие электрона и позитрона атома позитрония с оптическими фононами приводит к дополнительному отталкивающему взаимодействию помимо кулоновского притягивающего. При этом в атмосфере фононов кристалла возможно существование атома позитрония с большими и малыми радиусами.

Введение

К настоящему времени достигнут значительный прогресс в понимании процессов взаимодействия позитронов с кристаллами, особенно с ионными, полупроводниками и металлами [1-5]. В частности, использование диаграммной техники, использование диаграммной техники уже в первом порядке теории возмущений позволяет найти величину вероятности спонтанного и вынужденного испускания и поглощения фононов позитроном [4,5]. Вычисления дают также значения собственной энергии и перенормированной массы позитронного полярона [3-5].

В данной работе на примере ионных кристаллов показано, что поляризация решетки кристалла разноименно заряженными поляронами (атом позитрония) вызывает не только изменение энергии связи позитрония, но и приводит к перенормировке эффективных масс электрона и позитрона. При этом взаимодействие электрона и позитрона атома позитрония с оптическими фононами приводит к дополнительному отталкивающему взаимодействию помимо кулоновского отталкивающего.

Прежде всего следует учесть факт, что диффузионная длина смещений позитрония в ионном кристалле составляет несколько сотен постоянной решетки. При этом поляризация решетки кристалла оказывает заметное влияние на свойства позитрония в ионных кристаллах [3]. Следует отметить также, что задача аннигиляции атома позитрония в ионных кристаллах очень похожа на аналогичную двухчастичную задачу – экситон в ионных кристаллах [6-10]. Здесь используется для решения задачи позитрония формализм Хакена [11].

Исследование позитронных и позитрониевых состояний в кристалле рамках формализма

Хакена

В предыдущей главе было установлено, что существуют стационарные состояния систем позитрон (атом Ps) - кристалл, так как характерные времена протекания позитронных процессов составляют 10^{-16} с, ионных процессов - 10^{-13} с, а самое короткое время жизни относительно аннигиляции равно примерно 10^{-10} с. Причем позитрон и атом Ps находятся в тепловом равновесии с решеткой кристалла, т.е. они термализованы. В общем случае при облучении позитронами идеального кристалла образуются позитронные состояния следующего типа: электроны, позитроны, дырки, экситоны, атом Ps и комплексы различной природы [12]. Теория таких состояний в полупроводниках и ионных кристаллах анализировалась в рамках известных расчетных моделей квантовой физики твердого тела [1,2,11]. Удалось установить как условие стабилизации этих состояний в кристалле (например, атом Ps в идеальной кристаллической решетке), так и условие их деструкции (например, распад атома Ps при экранировании кулоновского взаимодействия между электроном и позитроном свободными носителями в полупроводниках). Теория этих состояний, однако, нуждается в более строгом обосновании и дальнейшем развитии. Наиболее эффективным методом описания свойств таких состояний является метод квантовополевой теории твердого тела [1,2,11]. Поэтому ниже в рамках этой теории дается описание свойств (эффективные массы, выражение для энергий и т.п.) позитронных состояний в идеальных кристаллах.

2. Общий подход

Изложим метод вторичного квантования для электронов и позитронов в твердом теле. Согласно [11], можем выписать выражение для одночастичных электронных и позитронных состояний в представлении вторичного квантования

$$\Phi = \sum_{\mu} C_{\mu} a_{\mu}^{+} \Phi_0 = \int f(\bar{x}) \psi^{+}(\bar{x}) d^3\bar{x} \Phi_0 . \quad (1)$$

Здесь операторы $\psi^{+}(\bar{x})$ и a^{+} являются операторами рождения и определены в [1,2,11]; C_{μ} - коэффициент разложения, причем $\sum_{\mu} C_{\mu} = 1$; Φ_0 - волновая функция вакуумного состояния; $f(\bar{x})$ - функция, удовлетворяющая общему одночастичному уравнению Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(\bar{x}) \right] f(\bar{x}) = E f(\bar{x}) . (2.)$$

Аналогично может быть рассмотрено общее состояние двух частиц с координатами \bar{x} и \bar{x}'

$$\Phi = \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\mu_1} C_{\mu_2} a_{\mu_1}^{+} a_{\mu_2}^{+} \Phi_0 . \quad (3)$$

Причем, как и выше,

$$\Phi = \iint f(\bar{x}, \bar{x}') \psi^+(\bar{x}) \psi(\bar{x}') d^3\bar{x} d^3\bar{x}' \Phi_0. \quad (4)$$

Выбирая стандартный гамильтониан, получаем уравнение Шредингера для двух частиц

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + v(\bar{x}_1) + v(\bar{x}_2) \right] f(\bar{x}_1, \bar{x}') = E f(\bar{x}_1, \bar{x}'). \quad (5)$$

Эти результаты могут быть обобщены на случай многих частиц: n электронов и m позитронов.

3. Проблема многих электронов и позитронов в твердом теле

Проблема многих электронов и позитронов в рамках метода вторичного квантования может быть сформирована на основании следующей картины: электроны и позитроны движутся в строго периодическом поле решетки, ионы которой имеют бесконечно большие массы и находятся в состоянии покоя. Электроны внутренних атомных оболочек учитываются в целом тем, что они вместе с положительными атомными ядрами создают эффективный периодический решеточный потенциал V . Естественно, что позитроны в основном движутся по периферии атомов кристалла в силу электростатического отталкивания ядрами. Оператор Гамильтона для электронов и позитронов состоит из четырех составляющих: кинетической энергии электронов (позитронов), кулоновской энергии взаимодействия электронов (позитронов) с ядрами, потенциальной энергии взаимодействия электронов (позитронов) друг с другом и кулоновской энергии взаимодействия электронов с позитронами. Согласно [1,2,11], можно записать уравнение Шредингера для электронной и позитронной подсистем через операторы поля $\psi^+(\bar{x})$, $\psi(\bar{x})$, $\chi^+(\bar{x})$, $\chi(\bar{x})$, удовлетворяющие ферми-перестановочным соотношениям [11]. Эти операторы разлагаются по собственным функциям $\phi_{k_-}(x)$, $\phi_{k_-}^*(x)$, $\phi_{k_+}(x)$ и $\phi_{k_+}^*(x)$ следующим образом:

$$\psi(x) = \sum_{k_-} a_{k_-} \phi_{k_-}(x); \quad \psi^+(x) = \sum_{k_-} a_{k_-}^+ \phi_{k_-}^*(x); \quad (6)$$

$$\chi(x) = \sum_{k_+} a_{k_+} \phi_{k_+}(x); \quad \chi^+(x) = \sum_{k_+} a_{k_+}^+ \phi_{k_+}^*(x). \quad (7)$$

Отметим, что операторы поля $a_{k_{\pm}}^+$ и $a_{k_{\pm}}$ также удовлетворяют ферми-перестановочным соотношениям. Считаем, как обычно, что собственные функции $\phi_{k_{\pm}}$, $\phi_{k_{\pm}}^*$ образует полный набор ортонормированных функций, но при этом их следует минимизировать так, чтобы они являлись решениями уравнения Шредингера. Для этого используется метод Хартри - Фока [130, 190, 196].

Создадим некоторое состояние Φ электронов и позитронов кристалла. Для этого расположим электроны и позитроны один за другим по состояниям k_{-1} , k_{-2} , ..., k_{-n} , k_{+1} , k_{+2} , ..., k_{+m} . Таким образом,

$$\Phi = a_{+1}^+ a_{+2}^+ \dots a_{+m}^+; a_{-1}^+, a_{-2}^+, \dots, a_{-n}^+ \Phi_0. \quad (8)$$

Используем волновую функцию (2.8) для построения среднего значения оператора Гамильтона

$$H = H_- + H_+ \quad (9)$$

с дополнительным условием, что функция состояния нормирована.

Далее потребуем условия

$$\langle \Phi / H / \Phi \rangle = \min \quad (10)$$

и вычислим его как функционал φ_{k_-} и φ_{k_+} с дополнительным условием

$$\langle \Phi / \Phi \rangle = 1. \quad (11)$$

Затем определим φ_{k_-} и φ_{k_+} с помощью варьирования, что позволит сразу же получить уравнение Хартри - Фока для одноэлектронных и однопозитронных волновых функций кристалла

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{эфф}}^-(x) \right] \varphi_{k_-}(x) = E_- \varphi_{k_-}(x); \quad (12)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{эфф}}^+(x) \right] \varphi_{k_+}(x) = E_+ \varphi_{k_+}(x). \quad (13)$$

Здесь $V_{\text{эфф}}^{\pm}(x)$ - эффективные хартри-фоковские потенциалы, включающие все виды взаимодействий, в общем случае являются периодическими с периодом решетки кристалла.

Ранее никак не уточнялось, насколько заполнены получившиеся электронные и позитронные зоны. Приведенный формализм может быть применен для случая полностью заполненной валентной зоны и соседних электронных и позитронных зон проводимости с одним электроном и одним позитроном. Имеем для функции избыточного электрона

$$\Phi_- = a_{k_-L_-}^+ \langle a_{k_+L_+}^+ (a_{k_-1v}^+ a_{k_-2v}^+ \dots a_{k_-nv}^+) \rangle \Phi \approx a_{k_-L_-}^+ \Phi_v^-, \quad (14)$$

а для функции избыточного позитрона

$$\Phi_+ \approx a_{k_+L_+}^+ \Phi_v^+, \quad (\Phi_v^+ \approx \Phi_0), \quad (15)$$

где L_- , L_+ , v - индексы, относящиеся к электронным и позитронным зонам проводимости и валентной зоне соответственно. Принимаем, что

$$\Phi = \Phi_- \Phi_+ \approx a_{k_-L_-}^+ a_{k_+L_+}^+ \Phi_v^- \Phi_v^+ = a_{k_-L_-}^+ a_{k_+L_+}^+ \Phi_v. \quad (16)$$

Далее, согласно [190, 196], легко рассмотреть применение теории Блоха к системе электронов и позитронов в кристаллической решетке и дать обоснование МЭМ, позволяющие записать полные энергии

$$E_{k_{\pm}j} = E_{0,j} \pm \hbar^2 k_{\pm}^2 / 2m_{\pm} +$$

+ (члены более высокого порядка, которыми пренебрегаем). (17)

Здесь m_{\pm} - эффективные массы электрона или позитрона. С учетом сдвига по энергии E_0 уравнение Шредингера в блоховском потенциале $W_{\pm}(x)$ записывается в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{\pm}} \nabla^2 + W_{\pm}(x) \right] \psi_{\pm}(x) = E_{\pm} \psi_{\pm}(x). \quad (18)$$

Решение уравнения (18) для позитрона удобнее всего анализировать в приближении Ванье [1,2,11], позволяющем описывать локализацию позитрона в окрестности точки \bar{l} на протяжении примерно постоянной решетки. Важным свойством функций Ванье является их ортогональность, т.е. функции Ванье, локализованные в точках l и l' или принадлежащие различным значениям μ и μ' , взаимно ортогональны

$$\iint \omega_{\mu}^*(\bar{x} - \bar{l}) \omega_{\mu'}(\bar{x} - \bar{l}') d^3\bar{x} = \delta_{\mu\mu'} \delta_{ll'}. \quad (19)$$

4. Электроны, позитроны и дырки в идеальном полупроводниковом кристалле

Формализм вторичного квантования позволяет определить электрон, позитрон и дырку как квазичастицы с эффективными массами m_-, m_+, m_v соответственно. Для этого рассмотрим взаимодействие между электронами, дырками и позитронами на примере полупроводникового кристалла. Исследуем вопрос о форме эффективных взаимодействий при наличии удаленных из валентной зоны в зону проводимости некоторых электронов (т.е. создание в валентной зоне нескольких дырок). Причем не обязательно число дырок равно числу электронов в зоне проводимости. Их число может быть значительно больше в результате ионизации мелких примесных центров даже при комнатной температуре. Позитроны же вводятся в кристаллы, например, из β^+ -радиоактивного источника (Na^{22} , Cu^{64} и т.д.) и образуют позитронную зону проводимости. Система такого типа описывается уравнением Шредингера $H\Phi = E\Phi$. Оператор Гамильтона H , как и ранее, записываем через операторы поля $\psi_{\pm}^{\pm}(x)$ и $\psi_{\pm}(x)$, которые для рассмотрения состояний электронов в валентной зоне v , электронов и позитронов в зоне проводимости разлагаются по собственным функциям валентной зоны $\phi_{k_{-},v}$ и зоны проводимости $\phi_{k_{\pm},L_{\pm}}$.

Вводим операторы рождения $a_{k_{-,v}}^+ = d_{k_-}$; $a_{k_{-,L_-}}$, $a_{k_{+,L_+}}$ и уничтожения $a_{k_{-,v}} = d_{k_-}$; $a_{k_{-,L_-}}$, $a_{k_{+,L_+}}$ дырок, электронов и позитронов соответственно. Из соотношений (2.14), (2.15) и введенных операторов рождения и уничтожения квазичастиц следует, что дырка в валентной зоне не полностью тождественна позитрону как реальной частице. Согласно проведенным расчетам [12,13], оператор Гамильтона

$$H = H_0^- + H_0^+ + H_{вз}^- + H_{вз}^+, \quad (20)$$

где H_0^- и H_0^+ - операторы, описывающие взаимодействие лептонов в зоне проводимости и взаимодействие лептонов зоны проводимости и валентной зоны. В свою очередь

$$H_{вз}^- = H_{L_{-}L_{-}} + H_{L_{-}L_{+}} + H_{L_{-}V} + H_{Vv}; \quad (21)$$

$$H_{вз}^+ = H_{L_{-}L_{+}} H_{L_{+}V}. \quad (22)$$

Здесь $H_{L_{-}L_{-}}$ - взаимодействие электронов в зоне проводимости; $H_{L_{-}L_{+}}$ - взаимодействие электронов с позитронами; H_{Vv} - взаимодействие дырок в валентной зоне; $H_{L_{-}V}$ - взаимодействие дырок валентной зоны и позитронов в позитронной зоне проводимости.

Таким образом, оператор Гамильтона для электронов, дырок и позитронов в кристалле может быть выбран в виде

$$H = H_0 + H_{вз} = H_{эл} + H_{д} + H_{поз} + H_{эл-эл} + H_{эл-д} + H_{поз-д} + H_{эл-поз} + H_{д-д} + W_{зап}, \quad (23)$$

где $W_{зап}$ - энергия валентной зоны.

В работах [1,2,11] были получены выражения для H_{ij} , входящие в гамильтониан (23), через операторы рождения и уничтожения электронов, дырок и позитрона и матричные элементы энергий взаимодействия между соответствующими зонами. Выражения для энергий основного состояния электронов, позитрона и дырок для случая их нахождения вблизи краев зон записываются в виде

$$E_{k_{\pm}L_{\pm}} = E_{0,L_{\pm}} \pm h^2 k_{\pm}^2 / 2m_{L_{\pm}}; \quad (24)$$

$$E_{k_{-,v}} = E_{0,v} - h^2 k^2 / 2m_v. \quad (25)$$

Сравнение (2.24) и (2.25) четко выявляет различие между позитроном и дыркой.

5. Проблема экситона, атома Ps и комплексов Уилера различной природы (позитрон-экситонные комплексы и ионы атома Ps)

С учетом приведенной выше многочастичной модели рассмотрим проблему экситонов, атома Ps и позитрон-экситонных комплексов [14,15]. Задача для общего случая позитрон-экситонного

комплекса заключается опять-таки в решении уравнения Шредингера $H\Phi = E\Phi$, где гамильтониан H описывается выражением (23).

Рассмотрим уравнение (23) для случая одного электрона, одного позитрона и одной дырки. Волновые функции электронов в состоянии k_{-1} , позитрона в состоянии k_{+1} и дырки в состоянии k_{-2} можно получить из состояния, описывающего полностью заполненную валентную зону, последовательным действием операторов рождения $a_{k_{-1}}^+$, $a_{k_{+1}}^+$ и $d_{k_{-2}}^+$ на функцию валентной зоны

$$a_{k_{-1}}^+ a_{k_{+1}}^+ d_{k_{-2}}^+ \Phi_v. \quad (26)$$

Из выражения (26) следует, что электрон, дырка и позитрон, пролетая друг относительно друга, испытывают взаимное рассеяние, в результате чего попадают в различные конечные состояния $k'_{-1}, k'_{-2}, k'_{+1}$. Поэтому следует образовать функцию по всем состояниям k_{-1}, k_{-2}, k_{+1} электрона, позитрона и дырки. Исходя из этого состояния, волновая функция позитрон-экситонного комплекса имеет вид:

$$\Phi = \sum_{k'_{-1}, k'_{-2}, k'_{+1}} C_{k_{-1}, k_{-2}, k_{+1}} a_{k_{-1}}^+ d_{k_{-2}}^+ a_{k_{+1}}^+ \Phi_v. \quad (27)$$

Гамильтониан трехчастичной системы с учетом сдвига по энергии с тем, чтобы опустить $W_{\text{зап}}$ [1,2,11], состоит из выражения для кинетической энергии электрона, позитрона и дырки и взаимодействия между ними

$$H_{\text{общ}} = H_{\text{кин}} + H_{\text{эл-д}} + H_{\text{эл-поз}} + H_{\text{поз-д}}. \quad (28)$$

Действуя оператором $H_{\text{общ}}$ на функцию Φ и выполняя соответствующие преобразования и упрощения, получаем уравнение Шредингера для позитрон-экситонного комплекса

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{L-}} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{L+}} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_v} \nabla_3^2 - \frac{e^2}{\sum |x_1 - x_2|} - \frac{e^2}{\sum |x_1 - x_3|} + \frac{e^2}{\sum |x_2 - x_3|} \right) \times \\ \times \psi(x_1, x_2, x_3) = E\psi(x_1, x_2, x_3). \quad (29)$$

Позитронно-экситонный комплекс (своеобразное соединение Уилера) является аналогом классических полиэлектронных систем Уилера $e^-e^+e^-$ или $e^+e^-e^+$ (ионы позитрония) [16, 17]. Он открыт сравнительно недавно Миллсом [18] в результате изящных экспериментов. Сродство к позитрону (электрону) атома Ps для таких комплексов составляет величину не менее 0,1 эВ, а время жизни относительно аннигиляции, согласно расчетам Ферранте [17], ровно $\tau_{2\gamma} = 5,02 \cdot 10^{-10}$ с. Концепция позитрон-экситонного комплекса [19,20] неоднократно использовалась для объяснения природы позитронной аннигиляции в ионных кристаллах и полупроводниках. Отметим, что из записанного выше трехчастичного уравнения (28) позитрон-экситонного комплекса легко получить уравнение для атома Ps большого радиуса и экситона Ванье в кристалле.

Ранее постулировалось утверждение о том, что расстояние между электроном, позитроном и дыркой велико, следовательно, вполне разумным является разложение операторов поля $\psi^+(x)$ и $\psi(x)$ по блоховским функциям. Можно, однако, рассмотреть и противоположный случай, когда электрон и позитрон находятся на одном и том же атоме - атом Ps малого радиуса или позитроний Френкеля [1,2]. При этом разложение лучше всего проводить по функциям Ванье. Волновая функция Ванье позитрония Френкеля записывается в виде

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\bar{l}} \exp(i\bar{k}\bar{l}) a_{\bar{l},L_+}^+ a_{\bar{l},L_-}^+ \Phi_g. \quad (30)$$

Здесь $B_{\bar{l}}^+ = a_{\bar{l},L_+}^+ a_{\bar{l},L_-}^+$ - оператор рождения локализованного в точке \bar{l} атома Ps. Разумеется, оператор его уничтожения есть $B_{\bar{l}} = a_{\bar{l},L_+} a_{\bar{l},L_-}$. Гамильтониан позитрония Френкеля при помощи этих операторов запишется в виде

$$H = \sum_{\bar{l}} B_{\bar{l}}^+ B_{\bar{l}} \bar{E}_{0,общ} + \sum_{\bar{l},\bar{l}'} B_{\bar{l}'}^+ B_{\bar{l}} W(\bar{l}-\bar{l}'). \quad (31)$$

Действуя этим оператором на волновую функцию Φ и проводя соответствующие упрощения [1,2], получаем выражение для энергии позитрония Френкеля

$$E(\bar{K}) = E(0) + \hbar^2 K^2 / 2m_p^*, \quad (32)$$

где \bar{K} - волновой вектор позитрония; $m_p^* = m_- + m_+$. Выражение (31) представляет собой закон дисперсии для френкелевской позитрониевой зоны в кристалле [1,2].

6. Взаимодействие позитронов и атома Ps с фононами кристалла в рамках методов вторичного квантования и функций Грина

По методу вторичного квантования в [1,2,11] было учтено взаимодействие позитронов и атома Ps с фононами кристалла. Для этого в рамках нестационарной теории возмущений в представлении взаимодействия рассмотрены процессы спонтанного и вынужденного испускания и поглощения фононов позитроном в кристалле.

Квантованный гамильтониан Фрелиха системы записывается, как обычно [1,2,11], в виде суммы $H = H_0 + H_{вз}$, где H_0 - гамильтониан невозмущенной задачи; $H_{вз}$ рассматривается как малое возмущение.

Диаграммная техника первого порядка теории возмущений позволяет вычислить вероятность спонтанного и вынужденного испускания и поглощения фононов позитроном. Расчеты же с использованием диаграммной техники второго порядка теории возмущений позволяют найти

значения собственной энергии и перенормированной массы позитрона в кристалле: $m_+^{**} = m_+^*(1 + \delta)$, где δ - сдвиг по энергии в единицах массы; m_+^* - зонная эффективная масса.

Использование теоремы о точной форме решения для взаимодействия позитрона с колебаниями решетки стационарного уравнения Шредингера $H\Phi = E\Phi$ в полярных кристаллах позволяет получить выражение для энергии позитронного полярона Фрелиха [1,2,11]:

$$E_k = -\hbar\omega\alpha + \hbar^2k^2 / 2m_+^*(1 - \frac{\alpha}{6}) + O(k^4). \quad (33)$$

Откуда следует, что собственная энергия E_0 и перенормированная масса m_+^{**} равны соответственно

$$E_0 = -\alpha\hbar\omega; \quad (34)$$

$$m_+^{**} \approx m_+^*(1 + \frac{\alpha}{6}), \quad (35)$$

где α - константа связи.

Для расчетов позитронных процессов в кристаллах был использован метод функций Грина [1]. Показано, что функция Грина позитрона имеет стандартный вид

$$G_{\bar{k}}(\varepsilon) = C_{\bar{k}}(\varepsilon - \varepsilon_k + i\gamma)^{-1}, \quad (36)$$

и является функцией \bar{k} и ε (здесь ε имеет размерность частоты).

Рассмотрим функцию (36) для фиксированного \bar{k} позитрона, но переменного ε . Так как знаменатель в $G_{\bar{k}}(\varepsilon)$ - комплексная величина, то эта функция отображается на комплексной ε -плоскости. Эта функция имеет на комплексной плоскости один полюс, действительная координата которого равна ε , а мнимая - обратному значению времени жизни. Отсюда приходим к основному понятию: полюс $G_{\bar{k}}(\varepsilon)$ определяет энергию и время жизни позитрона (как квазичастицы) или его взаимодействие с кристаллом (окружением).

Чрезвычайно интересно применение метода функций Грина к проблеме многих электронов и позитронов в кристалле, развитое в [1].

7. Теория атома Ps в полярных кристаллах. Учет взаимодействия с фононами

Ниже показано, что поляризация решетки ионного (полярного) кристалла, не только вызывает изменение собственной энергии и перенормировку масс электрона и позитрона, но и создает дополнительное отталкивающее взаимодействие между электроном и позитроном [1].

Исходный гамильтониан атома Ps, учитывающий взаимодействие электрона и позитрона с колебаниями решетки, записывается в виде

$$H = H_{\text{эл}} + H_{\text{поз}} + H_{\text{ph}} + H_{\text{вз1}} + H_{\text{вз2}} + H_{\text{эл-поз}}. \quad (37)$$

Здесь $H_{эл}$ и $H_{поз}$ - операторы Гамильтона свободных электрона и позитрона,

$$H_{эл} = -\frac{\hbar^2}{2m_-^*} \nabla_1^2; \quad H_{поз} = -\frac{\hbar^2}{2m_+^*} \nabla_2^2, \quad (38)$$

причем в общем случае $m_-^* \neq m_+^*$.

Оператор H_{ph} описывает газ фононов (колебания решетки)

$$H_{ph} = \sum_{\vec{w}} \hbar \omega_{\vec{w}} b_{\vec{w}}^+ b_{\vec{w}}, \quad (39)$$

где $b_{\vec{w}}^+$ и $b_{\vec{w}}$ - операторы испускания (рождения) и поглощения фононов соответственно; ω - частота продольных колебаний; \vec{w} - волновой вектор фонона.

Члены, отвечающие взаимодействию электрона и позитрона с фононами, имеют вид

$$H_{взи} = \hbar \sum_{\vec{w}} (g_{\vec{w}} e^{i\vec{w}x_i} + g_{\vec{w}}^* e^{-i\vec{w}x_i}), \quad i = 1, 2. \quad (40)$$

Гамильтониан

$$H_{эл-поз} = -\frac{e^2}{\epsilon_{\infty} |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}, \quad (41)$$

где ϵ_{∞} - оптическая диэлектрическая проницаемость.

Задача эффективного взаимодействия электрона с позитроном (т.е. поляроном) в изложенных выше приближениях была решена методом Хакена [3-5,11]. В частности, для полной энергии имеем

$$W_{п} = -\frac{e^2}{\epsilon_{\infty} |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} + \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{r} \left[1 - \frac{1}{2} (e^{-u_1 r} + e^{-u_2 r}) \right]. \quad (42)$$

Здесь ϵ_0 - статическая диэлектрическая проницаемость; $r = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$;

$$u_1 = (2m_-^* \omega / \hbar)^{\frac{1}{2}}; \quad u_2 = (2m_+^* \omega / \hbar)^{\frac{1}{2}}. \quad (43)$$

Из анализа выражения для полной энергии (42) следует, что для атома Ps, так же как и для экситонов, в экспериментах можно установить существование перехода от кулоновского взаимодействия с ϵ_{∞} при малых радиусах атома Ps к взаимодействию с ϵ_0 при больших радиусах атома Ps.

Совершим предельный переход, т.е. полагая $r \rightarrow \infty$, получаем выражение для полной энергии позитрония большого радиуса

$$W_f = -e^2 / \epsilon_0 r \quad (44)$$

И соответственно для кинетической энергии электрона и позитрона

$$E_{\bar{k}_-} = -\hbar\omega\alpha_- + \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m_-^{**}}, \quad (45)$$

$$E_{\bar{k}_+} = -\hbar\omega\alpha_+ + \frac{\hbar^2 k_+^2}{2m_+^{**}}, \quad (46)$$

т.е. у электрона и позитрона, согласно Хакену [11], появляются перенормированные поляронные массы m_-^{**} и m_+^{**} и соответственно собственные энергии $-\hbar\omega\alpha_-$ и $-\hbar\omega\alpha_+$, при этом (см. также

$$(35)) m_{\pm}^{**} \approx m_{\pm}^* \left(1 + \frac{\alpha_{\pm}}{6}\right).$$

Напротив, при $r \rightarrow 0$ главный вклад в W_f дают члены

$$W_f = \hbar\omega\alpha_- + \hbar\omega\alpha_- - \frac{e^2}{\varepsilon_{\infty} r} \quad (47)$$

Сравнивая выражения (44), (45), (46) и (47), видим, что для позитрония, так же как и для экситона по Хакену [11], можно установить существование перехода от чисто кулоновского взаимодействия с ε_{∞} при малых радиусах позитрония к взаимодействию с ε_0 при больших расстояниях между электроном и позитроном. В последнем случае можно говорить о существовании квазипозитрония большого радиуса и о наличии перехода в некоторых случаях от квазипозитрония к обычному позитронию. Пользуясь найденными значениями перенормированных масс, путем простых действий можно легко найти характеристики позитрония как большого, так и малого радиуса соответственно. В этом направлении следует провести тщательные экспериментальные исследования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Прокопьев Е.П. Исследования позитронных процессов в кристаллах. М., 1982. 60 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-3556. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". 1983. Сер."ЭР".
2. Прокопьев Е.П. Позитроны и позитроний в кристаллах. М., 1982. 138 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-3475. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". №8. 1983. Сер."ЭР".
3. Прокопьев Е.П., Урбанович С.И. Позитроний в газе фононов // Известия АН БССР. Серия физико-математических наук. 1987. №5. С.92-94.
4. Е.П.Светлов-Прокопьев. Динамика позитронов в идеальных кристаллах. 1. Нестационарная теория возмущений (первый порядок). Подвижность и дрейф позитронов в электрическом поле. Труды XVII Международного совещания "Радиационная физика твердого тела". (Севастополь, 9 - 14 июля 2007 г.), под редакцией заслуженного деятеля науки РФ, д.ф.-м.н., проф. Бондаренко Г.Г. М.: ГНУ «НИИ ПМТ», 2007 г., С.625-636.
<http://www.niipmt.ru/index.php?p=6>
5. Е.П.Светлов-Прокопьев. Динамика позитронов в идеальных кристаллах. 2. Нестационарная теория возмущений второго порядка и более высших порядков. Собственная энергия и перенормировка массы позитрона. Труды XVII Международного совещания "Радиационная физика твердого тела". (Севастополь, 9 - 14 июля 2007 г.), под редакцией заслуженного деятеля науки РФ, д.ф.-м.н., проф. Бондаренко Г.Г. М.: ГНУ «НИИ ПМТ», 2007 г., С. 637-644.
<http://www.niipmt.ru/index.php?p=6>
6. Я.И.Френкель. Избранные труды. Т.2. М.: Наука, 1958.
7. Р.Нокс. Теория экситонов. М: Мир, 1966.
8. В.М.Агранович. Теория экситонов. М: Наука, 1968.
9. В.М.Агранович, В.Л.Гинзбург. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М: Наука, 1979.
10. Е.П.Светлов-Прокопьев. Исследование свойств атома позитрония в кристаллах.Труды XVIII Международного совещания "Радиационная физика твердого тела". (Севастополь, 7 - 12 июля 2008 г.), под редакцией заслуженного деятеля науки РФ, д.ф.-м.н., проф. Бондаренко Г.Г. М.: ГНУ «НИИ ПМТ», 2008 г., С.?. <http://www.niipmt.ru/index.php?p=6>
11. Хакен Х. Квантовая теория твердого тела. М.: Наука, 1982. 262 с.
12. Прокопьев Е.П. Новые представления об аннигиляции позитронов и позитронных состояниях в полупроводниках // Химия высоких энергий. - 1994. - Т. 28, № 5. - С. 426 - 428.
13. Прокопьев Е.П. Введение в теорию позитронных процессов в полупроводниках и ионных кристаллах. - М., 1979. - 384 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2837. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". - № 27. - 1980. - Сер. "ЭР".

14. Прокопьев Е.П. Комплексы Уилера в полупроводниках. - М., 1979. - 12 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2757. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". - № 28. - 1979. - Сер. "ЭР".
15. Арефьев К.П., Прокопьев Е.П., Нурмагамбетов С.Б. Комплексы Уилера в кристаллах // Известия вузов. Физика. - 1981. - № 4.
16. Wheeler J.A. Polyelectron systems // Ann. N.Y. Acad. Sci. - 1946. - Vol. 48, № 1. - P. 219 - 226.
17. Ferrante G. Annihilation from Positronium Negative Ion $e^-e^+e^-$ // Phys. Rev. - 1968. - Vol. 170, № 1. - P. 76 - 80.
18. Mills A.P., Jr. // Phys. Rev. Letters- 1981. - Vol. 46, № 11. - P. 717.
19. Прокопьев Е.П. Аннигиляция позитронов и комплексы Уилера в полупроводниках // Химия высоких энергий. - 1995. - Т. 29, № 5. С. 394 - 396.
20. Арефьев К.П., Воробьев С.А., Прокопьев Е.П. Позитроника в радиационном материаловедении ионных структур и полупроводников. - М.: Энергоатомиздат, 1983. - 88 с.

ПОЗИТРОНЫ, ПОЗИТРОНИЙ, ПОЗИТРОННЫЕ И ПОЗИТРОНИЕВЫЕ КОМПЛЕКСЫ В КРИСТАЛЛЕ. ОБЗОР

III. КОМПЛЕКСЫ УИЛЕРА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Аннотация

Рассмотрены процессы взаимодействия позитронов (e^+) и позитрония (Ps) со свободными носителями (электронами (e^-) и дырками (h), нейтральными (D^0, A^0) и заряженными (D^+, A^-) донорами (D), акцепторами (A) и экситонами (Ex) в полупроводниках. Показано, что эти процессы могут приводить к образованию комплексов Уилера состава (Ps^-), ($Ps h$) и более сложных комплексов $[A^-e^+]$, $[D^+ - Ps]$, $[A^- - Ps]$, $[D^0 - Ps]$, $[A^0 - Ps]$ и $[Ps - Ex]$, $[Ps - Ex^\pm]$, $[Ps h - Ex]$, $[Ps e^- - Ex]$, $[Ps h - Ex^\pm]$ и $[Ps e^- - Ex^\pm]$. Расчеты основных характеристик аннигиляционных спектров комплексов Уилера показали, что времена жизни позитронов несколько "удлиняются", а полуширины кривых УРАФ сужаются, что дает возможность наблюдать их в экспериментах.

Экспериментальные данные по исследованию позитронных временных спектров полупроводников (см., например, [1-3]) показали, что в этих объектах наблюдается, как правило, лишь одно короткое время жизни позитронов τ_1 с интенсивностью I_1 , близкой к 100%. Причем отмечалось, что существенной разницы во временах жизни τ_1 для собственного полупроводника i - типа, полупроводников n - и p - типов не наблюдалось. Впервые разницу в указанных выше различных типах полупроводников удалось установить в [4]. В этой работе были исследованы временные аннигиляционные спектры высокоомных образцов кремния i - типа и низкоомных

образцов кремния n - и p - типов, легированных фосфором и бором. Было показано, что во всех образцах наблюдается лишь одна компонента I_1 со временем жизни τ_1 в пределах от 0,233 нс (собственный полупроводник i - типа) до 0,245 нс (легированный кремний). Из данных этой работы следовало также, что различие в τ_1 практически не наблюдалось между кремнием n - и p - типов. Кроме того величины τ_1 в пределах экспериментальной погрешности совпадали для кристаллов кремния, полученных методом зонной плавки и по методу Чохральского. Величины времен жизни в кремнии с собственной проводимостью (как для метода безтигельной зонной плавки, так и для метода Чохральского) были меньшими, чем в легированных образцах. Это изменение в величинах τ_1 равно примерно $6 \pm 9 \%$ и лежит за пределами экспериментальной погрешности (порядка 2 %).

Этот факт говорит о том, что мелкие примесные центры донорного или акцепторного типа в полупроводниках, являющихся «поставщиками» электронов в зоне проводимости или дырок в валентной зоне, при достаточно высоких концентрациях оказывают существенное влияние на аннигиляционные временные спектры, а следовательно и на свойства квазипозитронных и квазипозитрониевых состояний [1-3]. Поэтому представляет интерес рассмотреть вопрос о процессах взаимодействия квазипозитронов (e^+) и квази- Ps [1-3,5] (Ps - химический символ атома позитрония [6]) с носителями и другими системами в полупроводниках и основные свойства образующихся квазипозитронных и квазипозитрониевых состояний.

Рассмотрим два предельных случая. Первый, когда тепловая энергия позитрона $kT \gg E_{D,A}$, где $E_{D,A}$ - энергия ионизации мелких доноров (D) либо мелких акцепторов (A), k - постоянная Больцмана, T - температура. Рассмотрим процессы, в которых участвуют свободные термализованные позитроны и квази- Ps в этом случае.

В этом случае свободные квазипозитроны естественно взаимодействуют с валентными электронами и свободными носителями (электронами в полупроводниках n - типа и дырками в полупроводниках p - типа): а) $[e^+] + [e^-] \rightarrow Ps$; б) $[e^+] + [e^-] \rightarrow 2\gamma$ (двухквантовая аннигиляция при столкновениях квазичастиц) и в) процесс «*pick-off*» - аннигиляции квази- Ps на валентных электронах, рассмотренный в [7-9].

Сечения процессов образования квази- Ps и аннигиляции позитронов при столкновениях со свободными электронами можно оценить по методу работы [10]. Например, при энергии позитрона равной 13,6 эВ вероятность образования квази- Ps уже в 43 раза больше вероятности аннигиляции при свободных столкновениях. В свою очередь оценки [1] показали, что сечение образования квази- Ps и сечение аннигиляции на валентных электронах также сопоставимы с результатами [10].

В полупроводниках p – типа возможен процесс взаимодействия квазипозитрона с дырками h в валентной зоне, причем взаимодействие этих квазичастиц естественно будет сводиться лишь к упругому рассеянию.

В полупроводниках n – типа квази- Ps может участвовать в следующих основных процессах: а) $[Ps]_{s,t} + e^-(\uparrow) \leftrightarrow [Ps]_{t,s} + e^-(\downarrow)$ (орто-пара конверсия квази- Ps , рассмотренная в [11]; б) $[Ps] + e^- \rightarrow [Pse^-]$ (отрицательный ион квази- Ps , существование и свойства которого были впервые предсказаны Уилером [12]); в) $[Ps]_{s,t} + e^- \rightarrow 2\gamma + e^-$ (процесс «*pick – off*» - аннигиляции квази- Ps на свободных носителях и валентных электронах).

В полупроводниках p – типа возможно также следующих процессов: а) $[Ps] + h \rightarrow [Psh]$ (своеобразный комплекс Уиллера [12], состоящий из электрона, позитрона и дырки); б) $[Ps]_{s,t} + h(\uparrow) \leftrightarrow [Ps]_{t,s} + h(\downarrow)$. Вопрос орто-пара-конверсии Ps на дырках здесь не рассматривается в силу принципа тождественности этих квазичастиц (позитрона и дырки) в кристалле. Действительно, заряд позитрона и дырки одинаков, но эффективные скалярные массы не равны. Интересно отметить, что в образцах p – типа возможен процесс «оптической аннигиляции Ps по схеме: в) $[Ps] + h \rightarrow$ оптические кванты $+ e^+$ и г). Однако, по-видимому, вероятность этого процесса очень мала по сравнению с процессом «*pick – off*» - аннигиляции квази- Ps на свободных носителях и валентных электронах кристалла.

Существование комплексов Уилера $[Pse^-]$ и $[Psh]$ при комнатных температурах вполне реально, ибо энергии их связей составляют величины порядка нескольких десятых долей эВ [12]. Их времена жизни в отношении аннигиляционного распада с учетом процесса «*pick – off*» - аннигиляции близки короткому времени жизни τ_1 , наблюдаемому в полупроводниках [1-3].

В другом предельном случае $kT \ll E_{D,A}$ в полупроводниках n – и p – типа наряду с процессами рассеяния, «*pick – off*» - аннигиляции и орто-пара конверсии возможные процессы захвата квазипозитронов и квази- Ps нейтральными и заряженными донорными и акцепторными состояниями с образованием сложных комплексов Уилера: $[A^- e^+]$, $[D^+ - Ps]$, $[A^- - Ps]$, $[D^0 - Ps]$ и $[A^0 - Ps]$, где $[A]$ - символ акцептора, а $[D]$ - донора.

Таким образом, все квазипозитронные и квазипозитрониевые состояния, а также комплексы Уиллера могут быть разбиты на две основные группы: а) делокализованные состояния и б) локализованные состояния. В табл.1 приведена условная классификация этих состояний и их аналоги, как это, например, было сделано Лампертом [13] для комплексов, включающих в свой состав электрон (e^-), дырки (h) и экситоны Ex .

Возможные типы позитронных и позитрониевых состояний и комплексы Уилера в полупроводниках

| Тип состояния | Аналоги | Возможный температурный интервал наблюдения |
|--|---|--|
| I. Нелокализованные состояния | | |
| $[e^+]$ - квазипозитроны $[Ps](e^-e^+)$ - квазипозитроний Комплексы Уилера $[Ps]^-(e^-e^+e^-)$ - отрицательный ион $[Ps]$ $[Psh]^-(e^+e^-h)$ - положительный ион $[Ps]$ $[Ps - Ex], [Ps - Ex^\pm], [Psh - Ex], [Pse^- - Ex], [Psh - Ex^\pm], [Pse^- - Ex^\pm], [Ps - (Ex)_n]$ | h - дырки $[Ex]$ - экситоны Ионы $[Ex]$ Молекулы $[Ps]$ и $[Ex]$ Ионы молекул $[Ps]$ и $[Ex]$ | Комнатная Комнатная и ниже Комнатная и ниже От комнатной до температуры жидкого гелия |
| II. Локализованные комплексы Уилера | | |
| $[(A^-)e^+]$ $[D^+ - Ps], [A^- - Ps], [D^0 - Ps], [A^0 - Ps],$ | Акцепторные состояния Экситоны, связанные с заряженными и нейтральными донорами и акцепторами | От комнатной до температуры жидкого гелия |

Изложим ниже основные положения теории позитронных состояний в дефектных кристаллах полупроводников. Вначале рассмотрим полупроводники с мелкими примесными центрами с достаточно идеальной кристаллической решеткой (т.е. реальные полупроводники) [1-3, 5, 14-16]. В таких полупроводниках наибольший интерес представляет взаимодействие позитронов e^+ и атома Ps со свободными носителями, локализованными и делокализованными комплексами, такими как нейтральные доноры D^0 ; акцепторы A^0 ; экситоны Ex ; заряженные доноры D^+ и акцепторы A^- ; ионы экситона Ex^- ; биэкситоны Ex_2 ; Ex , связанные с D^0 , A^0 , D^+ , A^- и т.д. В этом случае могут образовываться довольно своеобразные комплексы Уилера [2, 17], включающие в

свой состав e^+ и Ps . Из аннигиляционных характеристик таких комплексов также можно, в принципе, получить полезную информацию об электронно-дырочных комплексах в полупроводниках. Приведем основные сведения о делокализованных комплексах Уилера [2, 17].

Комплексы $[Pse^-]$ и $[Psh]$. Заметим, что e^- и h - символы носителей - электронов и дырок в полупроводниках соответственно. Для оценок свойств этих комплексов можно принять, что $m_p = m_n$, т.е. $m_p/m_n = 1$. Здесь и далее m_n, m_p, m_h - эффективные массы электрона, позитрона и дырки соответственно. Расчеты дают [5,13] для системы $[Pse^-]$ энергию диссоциации относительно распада на e^- и Ps $D_0 = 0,04$ эВ. Время жизни этого комплекса относительно двухквантового аннигиляционного распада по оценкам [1-3] составляет величину $5 \cdot 10^{-10}$ с. Для комплекса $[Psh]$ могут встретиться случаи: а) $m_h/m_n \gg 1$ и $m_h \gg m_p$ (эта система похожа по своим свойствам на квазиатомную систему атом водорода плюс позитрон (He^+) [15]; энергия диссоциации такой системы составляет величину $\leq 0,1$ эВ); б) $m_h/m_n \ll 1$ и $m_h/m_p \ll 1$ (в этом случае можно рассматривать движение легкой дырки в поле неподвижного диполя конечной длины [18-20]; энергия диссоциации такой системы не превышает величину нескольких сотых долей электрон-вольта). Вероятнее всего в обоих случаях время жизни комплекса $[Psh]$ относительно самоаннигиляции не превышает величину порядка $5 \cdot 10^{-10}$ с [15].

Комплексы Уилера $[Ps - Ex]$, $[Ps - Ex^\pm]$, $[Psh - Ex]$, $[Pse^- - Ex]$, $[Psh - Ex^\pm]$ и $[Pse^- - Ex^\pm]$. Существование комплексов Уилера такого типа возможно в интервале температур $1 \div 4$ К в полупроводниках n- и p-типа (Ge, Si, GaAs, CdS и др.) с высокой концентрацией экситонов. Система $[Ps - Ex]$ является аналогом как молекулы (Ps_2) [17,21,22], так и биэкситона $[Ex_2]$ (см., например, [23-25]. В простейшем приближении $m_p = m_h = m_n$. Этот комплекс можно рассматривать как модель из атомов Ps , в которой каждый атом действует, как электрический диполь конечной длины, что приводит к притяжению между диполями [21]. В этом приближении энергия связи такой системы составляет величину 0,55 эВ, а межатомное расстояние - $14,2 \text{ \AA}$. Вариационные расчеты по Оре [26], Хиллерасу и Оре [27] дают энергии связи 0,135 и 0,11 эВ соответственно, а Шармы [22] - 0,948 эВ. Заметим, что время жизни комплекса относительно самоаннигиляции в этом случае также не должно превышать величину порядка 0,5 нс [1]. Таким образом, в этом приближении можно с полной уверенностью говорить о возможности существования комплекса $[Ps - Ex]$ в полупроводниках (по аналогии с работой [23] для случая $m_p = m_h = m_n$).

Рассмотрим некоторые другие случаи, которые могут встретиться для условий существования комплексов $[Ps - Ex]$. Это случай $m_h \sim m_p$ и $m_h \gg m_n$, $m_p \gg m_n$. Такого рода системы ближе по своим свойствам к молекуле водорода H_2 . В другом предельном случае $m_n \gg m_h$ и $m_n \gg m_p$

имеем аналогию с молекулой антиводорода \bar{H}_2 . Ее характеристики примерно такие же, как и молекулы H_2 . Общий случай $m_h \neq m_p \neq m_n$ для комплекса $[Ps - Ex]$ может быть рассмотрен вариационным методом, как это делалось для Ex_2 [24,25]. Расчеты экситонных молекул для случаев анизотропных "легких" электронных масс m_n и "тяжелых" дырок с анизотропной эффективной массой m_h показали возможность существования этих молекул, а следовательно, по аналогии с ними комплексов Уилера $[Ps - Ex]$ для различных величин m_n, m_p и m_h .

Приведем основные результаты для комплексов Уилера $[Ps - Ex]$. Имея значения общей энергии системы E для различных значений $\sigma = m_n / m_p = m_n / m_h$, дадим общий анализ процессов связывания и распада комплексов Уиллера этого типа. В частности, энергия связи комплекса $[Ps - Ex]$ в отношении распада на Ps и Ex будет равна

$$E_{[Ps-Ex]} = -E - E_{Ps} - E_{Ex} = -E - 2E_{Ex}, \quad (1)$$

где $E_{Ps} = E_{Ex} = (1/2)(1 + \sigma)$ - энергия связи атома позитрония и экситона.

Расчеты энергий связи комплексов Уилера $[Ps - Ex^\pm]$, $[Psh - Ex]$, $[Pse^- - Ex]$, $[Psh - Ex^\pm]$ и $[Pse^- - Ex^\pm]$ еще более сложны по сравнению с расчетами комплексов $[Ps - Ex]$. Однако асимптотические случаи $m_p/m_n \gg 1$ и $m_h/m_n \gg 1$ либо, наоборот, $m_n/m_h \gg 1$ и $m_n/m_p \gg 1$ показывают, что такие образования можно рассматривать как квазимолекулярные системы, подобные $H_2, H_2^+, H_2^-, H_2^{2+}$. Сопоставление свойств таких квазимолекулярных систем с обычными молекулярными ионами дает основание полагать, что в некоторых случаях такие системы могут быть динамически стабильными. Далее рассмотрим некоторые локализованные комплексы в полупроводниках, включающие в свой состав позитроны и атом Ps.

Мелкие акцепторные позитронные состояния. Позитроны при низких температурах могут захватываться на мелкие акцепторные уровни. Такого рода состояния обычно рассматриваются в приближении метода эффективной массы (МЭМ) с поправками на ход потенциала в непосредственной близости от примесного центра. В этом случае энергия связи позитрона не превышает, как правило, нескольких сотых долей электрон-вольта.

Комплексы Уилера $[D^0 - e^+]$ или $[D^+ - Ps]$, $[A^0 - e^+]$ или $[A^- - Ps]$, $[D^0 - Ps]$ и $[A^0 - Ps]$. Оценим основные параметры комплексов Уилера такого типа в приближении МЭМ. Вначале проведем оценки для случая комплексов $[D^+ - Ps]$ и $[A^- - Ps]$. Как было показано [17], энергия связи этих комплексов зависит от параметра $\sigma = m_n/m_p$ и описывается выражением

$$E(\sigma) = E_0 \exp(-\sigma/2). \quad (2)$$

Зная экспериментальное значение $E(0) = E(H_2) = -1,20522$ (а.е. МЭМ), можно легко построить зависимость $E(\sigma)$ от σ . Полученные в экспериментах значения энергий связи систем $[D^+ - Ex^-]$ для ряда полупроводников A^2B^6 и GaAs расходятся в области значений энергий, вычисленных по формуле (2) для систем Уилера. При этом из оценок нижней и верхней границ энергий связи критическая величина определяется неравенством $0,462 \leq \sigma \leq 0,576$.

Выражение для энергий систем $[D^0 - Ps]$ и $[A^0 - Ps]$ в приближении МЭМ определяется следующим образом:

$$E(\sigma) = E(0) \cdot \exp(-\sigma/3). \quad (3)$$

Отсюда легко получить зависимость $E(\sigma)$ от σ , если использовать экспериментальные значения $E(0) = E(H_2) = -1,34779$ (а.е. МЭМ). Условия стабильности этого типа комплексов выражаются неравенством $2,15 \leq \sigma_F \leq 12$. Сопоставление расчетных значений E по формуле (4.8) и экспериментальных значений энергий для комплексов $[D^0 - Ex]$, $[A^0 - Ex]$ или $[D^0 - Ps']$, $[A^0 - Ps']$ решает положительным образом возможность их существования в полупроводниках, по крайней мере, при низких температурах. Например, в CdS при $\sigma \cong 0,172$ энергия связи комплексов $E(D^+ - Ps') = 32,1$ мэВ, а $E(D^0 - Ps') = 34,9$ мэВ. Дальнейшее усложнение комплексов Уилера вида $[Ps' - (Ex)_n]$ приводит, по существу, к необходимости расчета аннигиляции позитронов в конденсированных экситонных каплях (Л.В.Келдыш, 1971 г.) [28, 29].

Расчеты основных характеристик аннигиляционных спектров комплексов Уилера показали [2,17], что времена жизни позитронов несколько "удлиняются", а полуширины кривых УРАФ сужаются. Однако эти эффекты не столь значительны и поэтому экспериментальное наблюдение комплексов Уилера представляет собой довольно трудную задачу, так как все измерения следует проводить при температурах жидкого гелия и на установках с максимальным разрешением. Все же проблема комплексов Уилера в полупроводниках и других веществах настолько важна, что будущие эксперименты в этом направлении неизбежны.

Заключение. Рассмотрены два предельных случая взаимодействия позитронов и позитрония со свободными носителями в полупроводниках. Первый, когда тепловая энергия позитрона $kT \gg E_{D,A}$, где $E_{D,A}$ - энергия ионизации мелких доноров (D) либо мелких акцепторов (A), k - постоянная Больцмана, T - температура. В этом случае свободные позитроны естественно взаимодействуют с валентными электронами и свободными носителями (электронами в полупроводниках n - типа и дырками в полупроводниках p - типа): а) $[e^+] + [e^-] \rightarrow Ps$; б)

$[e^+] + [e^-] \rightarrow 2\gamma$ (двухквантовая аннигиляция при столкновениях квазичастиц) и в) процесс «*pick-off*» - аннигиляции позитрония (Ps) на валентных электронах. В полупроводниках p -типа возможен процесс взаимодействия квазипозитрона с дырками h в валентной зоне, причем взаимодействие этих квазичастиц естественно будет сводиться лишь к упругому рассеянию. В полупроводниках n -типа Ps участвовать в следующих основных процессах: а) $[Ps]_{s,t} + e^-(\uparrow) \leftrightarrow [Ps]_{t,s} + e^-(\downarrow)$ (орто-пара конверсия Ps ; б) $[Ps] + e^- \rightarrow [Pse^-]$ (отрицательный ион Ps , существование и свойства которого были впервые предсказаны Уилером); в) $[Ps]_{s,t} + e^- \rightarrow 2\gamma + e^-$ (процесс «*pick-off*» - аннигиляции квази- Ps на свободных носителях и валентных электронах). В полупроводниках p -типа возможно также следующих процессов: а) $[Ps] + h \rightarrow [Psh]$ (своеобразный комплекс Уиллера, состоящий из электрона, позитрона и дырки). Существование комплексов Уилера $[Pse^-]$ и $[Psh]$ при комнатных температурах вполне реально, ибо энергии их связей составляют величины порядка несколько десятых долей эВ. В другом предельном случае $kT \ll E_{D,A}$ в полупроводниках n - и p -типа наряду с процессами рассеяния, «*pick-off*» - аннигиляции и орто-пара конверсии возможные процессы захвата позитронов и Ps нейтральными и заряженными донорами и акцепторами с образованием сложных комплексов Уилера: $[A^-e^+], [D^+ - Ps], [A^- - Ps], [D^0 - Ps]$ и $[A^0 - Ps]$, где $[A]$ - символ акцептора, а $[D]$ - донора. Таким образом, все квазипозитронные и квазипозитрониевые состояния, а также комплексы Уиллера могут быть разбиты на две основные группы: а) делокализованные состояния и б) локализованные состояния. Наряду с этим возможно существование комплексов Уилера $[Ps - Ex], [Ps - Ex^\pm], [Psh - Ex], [Pse^- - Ex], [Psh - Ex^\pm]$ и $[Pse^- - Ex^\pm]$, где Ex - символ экситона. Существование комплексов Уилера такого типа возможно в интервале температур $1 \div 4$ К в полупроводниках n - и p -типа ($Ge, Si, GaAs, CdS$ и др.) с высокой концентрацией экситонов. Расчеты основных характеристик аннигиляционных спектров комплексов Уилера показали, что времена жизни позитронов несколько "удлиняются", а полуширины кривых УРАФ сужаются, что дает возможность наблюдать их в экспериментах.

Список литературы

1. Прокопьев Е.П., Кузнецов Ю.Н., Хашимов Ф.Р. Основы позитроники полупроводников. М., 1976. 343 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2073. РИ.77.06.3412.
2. Прокопьев Е.П. Введение в теорию позитронных процессов в полупроводниках и ионных кристаллах. М., 1979. 384 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2837. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". №27. 1980. Сер."ЭР".

3. Арефьев К.П., Воробьев С.А., Прокопьев Е.П. Позитроника в радиационном материаловедении ионных структур и полупроводников. М.: Энергоатомиздат, 1983. 88 с.
4. P.Sen, C.Sen // J. Phys. 1974. Vol.C7. P.2776.
5. Е.П.Прокопьев, С.П.Тимошенко, В.И.Графутин, Г.Г.Мясищева, Ю.В.Фунтиков. Позитроника ионных кристаллов, полупроводников и металлов. М.: Ред.-изд. отдел МИЭТ (ТУ), 1999. 176 с.
6. В.И.Гольданский. Физическая химия позитронов и позитрония. М.: Наука, 1968.
7. Прокопьев Е.П. Об аномальных свойствах атома позитрония (Ps) в ионных кристаллах и полупроводниках // Физика твердого тела. 1977. Т.19. Вып.2. С.472-475.
8. Прокопьев Е.П. Позитроний и его свойства в полупроводниках и щелочно-галогидных кристаллах // Химия высоких энергий. 1978. Т.12. Вып.2. С.172-174.
9. W.Brandt, J.Reinheimer // Phys. Rev. 1970. Vol.B8. P.3104.
10. Д.Иваненко, А.Соколов // ДАН СССР. 1978. Т.239. С.1082.
11. Варисов А.З., Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П. Почему в полупроводниках наблюдается одно короткое время жизни позитронов // ДАН СССР. 1978. Т.239. №5. С.1082-1085.
12. J.Wheeler // Ann. N. Y. Acad. Sci, 1946. Vol,48. P.219.
13. M.A.Lampert // Phys. Rev. Lett. 1958. Vol.1, P.450.
14. Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П., Варисов А.З. Основы теории позитронных состояний в ионных кристаллах. - М., 1978. - 292 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника", P-2382. Сб. ВИМИ "Военная техника и экономика". Сер. общетехническая. - № 14. - 1978.
15. Варисов А.З., Арефьев К.П., Воробьев А.А., Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П. Позитроны в конденсированных средах. - М., 1977. - 489 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". P-2317. Сб. ВИМИ "Военная техника и экономика". Сер. общетехническая. - № 9. - 1978.
16. Прокопьев Е.П. Исследования в области физики медленных позитронов. Позитронная аннигиляция - новый метод изучения строения вещества. - М., 1986. - 86 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". P-4367. Сб. реф. НИОКР, обзоров, переводов и деп. рукописей. Сер. "ИМ". - №12. - 1987.
17. Прокопьев Е.П. Комплексы Уилера в полупроводниках. - М., 1979. - 12 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". P-2757. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". - № 28. - 1979. - Сер. "ЭР".
18. В.Н.Абакумов, В.И.Перель, И.Н.Ясиевич // ФТП. 1978. Т.12. С.3.
19. В.Н.Абакумов, И.Н.Ясиевич // ЖЭТФ. 1976. Т.71. С.657.
20. В.Н.Абакумов, В.И.Перель, И.Н.Ясиевич // ЖЭТФ. 1977. Т.72. С.674.
21. G.T.Hill // NuovoCimento. 1972. Vol.10B. P.511.
22. R.R.Sharma // Phys. Rev. 1968. Vol.171. P.36.
23. J.R.Haynes // Phys. Rev. Lett. 1966. Vol.17. P.860.

24. O.Akimoto, E.Hanamura // J. Phys. Soc. Japan. 1972. Vol.33. P.1537.
25. O.Akimoto // J. Phys. Soc. Japan. 1973. Vol.35. P.973.
26. A.Ore // Univ. Bergen Arbook. №9, №12. 1949.
27. E.Hylleraas, A.Ore // 1947. Vol.71. P.493.
28. Л.В.Келдыш // УФН. 1970. Т.100. С.514.
29. Л.В.Келдыш // В сб. Экситоны в полупроводниках. М.: Наука, 1971. С.5.