



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 104 за 2020 г.](#)



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

[В.Д. Лахно](#)

Трансляционно-инвариантные ЭКСИТОНЫ

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Лахно В.Д.
Трансляционно-инвариантные экситоны // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 104. 14 с.
<https://doi.org/10.20948/prepr-2020-104>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-104>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

В.Д. Лахно

Трансляционно-инвариантные экситоны

Москва — 2020

В.Д. Лахно

Трансляционно-инвариантные экситоны

Экситоны большого радиуса в полярных кристаллах. Показано, что трансляционно-инвариантное описание экситонов, взаимодействующих с фононным полем, приводит к отличному от нуля вкладу фононов в энергию основного состояния экситона только в случае слабой или промежуточной силы электрон-фононного взаимодействия. Сделан вывод о невозможности существования самозахваченных экситонов в пределе сильной связи. Обсуждаются особенности спектров поглощения и излучения трансляционно-инвариантных экситонов в фононном поле. Найдены условия, при которых водородоподобная модель экситона остается справедливой в условиях электрон-фононного взаимодействия.

Ключевые слова: бозе-конденсат, электрон-фононное взаимодействие, водородоподобная модель, полярон.

V.D. Lakhno

Translational-invariant excitons

Large-radius excitons in polar crystals are considered. It is shown that translation invariant description of excitons interacting with a phonon field leads to a nonzero contribution of phonons into the exciton ground state energy only in the case of weak or intermediate electron-phonon coupling. A conclusion is made that self-trapped excitons cannot exist in the limit of strong coupling. Peculiarities of absorption and emission spectra of translation invariant excitons in a phonon field are discussed. Conditions when the hydrogen-like exciton model remains valid in the case of electron-phonon interaction are found.

Key words: bose-condensate, electron-phonon interaction, hydrogen-like model, polaron.

Оглавление

1	Введение	3
2	Гамильтониан экситона в полярном кристалле	4
3	Основное состояние экситона в полярном кристалле в случае слабого и промежуточного электрон-фононного взаимодействия	5
4	Основное состояние экситона в полярном кристалле в случае сильного электрон-фононного взаимодействия	6
5	Спектр ТИ-экситона	8
6	Особенности поглощения и излучения света ТИ-экситонами	10
7	Заключение	11
8	Литература	12

1. Введение

Теория экситонов представляет обширную главу современной физики конденсированных сред [1]-[5]. Одним из ее разделов является теория экситонов в полярных средах [6]-[7]. Как и в случае поляронов, описание свободных экситонов в однородной и изотропной полярной среде должно быть трансляционно-инвариантным (ТИ). Это приводит к многочисленным следствиям. Будучи бозонами, экситоны, как и биполярны, способны образовывать бозе-конденсат. Однако экспериментальное подтверждение такой возможности было получено совсем недавно [8]. Ряд теорий сверхпроводимости также основан на участии экситонов в образовании бозе-конденсата.

Обширная литература по экситонам подробно освещает многочисленные явления, связанные с экситонами. По этой причине мы остановимся только на некоторых качественных отличиях, к которым приводит трансляционно-инвариантная теория электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) от теории самозахваченных экситонов в полярных средах.

В большинстве современных работ по экситонам при интерпретации их спектральных линий наличие окружения, в частности полярной среды (в случае полярных кристаллов), попросту игнорируется (см. обзор [9] и цитированную в нем литературу). Если влияние среды учитывать, то четкая картина спектральных линий экситонов должна была бы отсутствовать. На опыте же отчетливо видны хорошо различимые пики, соответствующие переходам в высоковозбужденные состояния с очень большим энергетическим номером. Представляется совершенно необъяснимым, каким образом наличие окружения и сильного ЭФВ, которые должны приводить к сдвигам и уширениям линий перехода экситона, а также к искажениям формы его спектра, оставляют близлежащие линии переходов в высоковозбужденные состояния различимыми.

В результате многочисленных теоретических исследований этого вопроса сформировалось представление о существенном вкладе ЭФВ в энергию связи экситона, выразившееся в замене простой водородоподобной модели на модифицированную, в которой учет поляризационного облака, окружающего электрон и дырку, то есть поляронного эффекта, достигается заменой кулоновского взаимодействия на экранированное. Наиболее популярными потенциалами взаимодействия, используемыми при интерпретации экспериментальных наблюдений, являются потенциалы Хакена [10], Баджаджа [11] и Поллмана-Баттнера [12]. В подавляющем же большинстве работ более эффективным оказывается использование простейшей водородоподобной модели.

Можно дать следующее объяснение неудаче модельных потенциалов [10]-[12]. Дело в том, что модельные потенциалы [10]-[12] были получены для

аппроксимации энергии связи экситона в основном состоянии, а затем использованы для расчета уровней энергии в таком потенциале. В действительности правильным был бы подход, в котором каждому возбужденному состоянию сопоставлялся бы свой (самосогласованный) потенциал, например так, как это было сделано в работе [13] для F-центров. Такая задача, однако, ввиду ее большой сложности решена не была. Как будет показано в данной работе, в действительности решение такой задачи и не требуется, поскольку в случае сильного ЭФВ и наличия трансляционной инвариантности точный спектр экситона является водородоподобным. Этим и объясняется успех его повсеместного применения.

Таким образом, главный результат состоит в том, что в ТИ системах самозахваченные (самосогласованные) состояния экситонов, вызванные ЭФВ, невозможны, так же как невозможны самозахваченные состояния полярона и биполярона [14]-[18]. В то же время, как будет показано ниже, наличие трансляционной инвариантности приводит к важным особенностям в спектрах ТИ-экситонов.

2. Гамильтониан экситона в полярном кристалле

Гамильтониан экситона в полярном кристалле представляет собой гамильтониан Пекара-Фрелиха, который описывает взаимодействие электрона и дырки друг с другом и оптическими фононами:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_{r_2} + \sum_k \hbar\omega_0(k)a_k^\dagger a_k - \frac{e^2}{\varepsilon_\infty|r_1 - r_2|} + \sum_k (V_k e^{ikr_1} a_k - V_k e^{ikr_2} a_k + H.c.), \quad (1)$$

$$V_k = \frac{e}{|k|} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0(k)}{V\tilde{\varepsilon}}}, \quad \omega_0(k) = \omega_0, \quad \tilde{\varepsilon}^{-1} = \varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1},$$

где e – заряд электрона, m_1 и m_2 – масса электрона и дырки, ε_∞ и ε_0 – оптическая и статическая диэлектрические проницаемости, r_1 и r_2 – координаты электрона и дырки, $\omega_0(k)$ – фононная частота, которая в случае оптических фононов не зависит от k и равна ω_0 .

Гамильтониан (1) соответствует случаю непрерывной полярной среды, то есть случаю экситона Ванье-Мотта в полярной среде. Разные знаки в гамильтониане взаимодействия (1) соответствуют разным знакам заряда электрона и дырки.

После перехода в гамильтониане (1) от r_1 и r_2 к координатам центра масс R и относительным координатам r

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= \mathbf{R} + \frac{m_2}{M} \mathbf{r}, & \mathbf{r}_2 &= \mathbf{R} - \frac{m_1}{M} \mathbf{r}, & M &= m_1 + m_2, \\ \mu &= \frac{m_1 m_2}{M} \end{aligned} \quad (2)$$

получим:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + \sum_k \hbar \omega_0(k) a_k^+ a_k - \frac{e^2}{\varepsilon_\infty |\mathbf{r}|} + \\ &+ \sum_k V_k a_k [e^{ik(\mathbf{R}+m_2\mathbf{r}/M)} - e^{ik(\mathbf{R}-m_1\mathbf{r}/M)}] + H. c. \end{aligned} \quad (3)$$

После устранения в (3) координат центра масс экситона посредством оператора Гейзенберга $S = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum \hbar \mathbf{k} \mathbf{R} a_k^+ a_k\right)$ и усреднения полученного гамильтониана по волновой функции относительного движения $\psi(\mathbf{r})$ получим:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2M} \left(\sum_k \mathbf{k} a_k^+ a_k \right)^2 + \sum_k \hbar \omega_0(k) a_k^+ a_k + \sum_k [\bar{V}_k a_k + H. c.] + \bar{T} + \bar{U}, \\ \bar{T} &= -\frac{\hbar^2}{2M} \int \psi^* \Delta_r \psi d^3r, \quad \bar{U} = -\frac{e^2}{\varepsilon_\infty} \int \psi^* \frac{1}{|\mathbf{r}|} \psi d^3r, \\ \bar{V}_k &= V_k \langle \psi | \exp i \mathbf{k} \mathbf{r} m_2 / M - \exp(-i \mathbf{k} \mathbf{r} m_1 / M) | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Рассмотрим разные предельные случаи для этого гамильтониана.

3. Основное состояние экситона в полярном кристалле в случае слабого и промежуточного электрон-фононного взаимодействия

Вклад ЭФВ в энергию экситона в случае слабой силы связи при $m_1 \neq m_2$ отличен от нуля и приводит к понижению энергии экситона. Это автоматически следует из выражения (4), которое отличается от случая полярона заменами $V_k \rightarrow \bar{V}_k$; $m_1, m_2 \rightarrow \mu, M$ и добавлением к гамильтониану постоянных \bar{T} и \bar{U} . В результате для энергии основного состояния покоящегося экситона в случае слабой и промежуточной силы связи, согласно Ли, Лоу и Пайнсу [19], получим:

$$E = \bar{T} + \bar{U} - \sum_k \frac{|\bar{V}_k|^2}{\hbar \omega_0(k) + \hbar^2 k^2 / 2M}. \quad (5)$$

Согласно [20], величина энергии основного состояния в этом пределе равна:

$$E = -(\alpha_1 + \alpha_2)\hbar\omega_0 - R_0 \frac{\mu_p}{\mu}, \quad (6)$$

$$R_0 = \mu e^4 / 2\hbar^2 \varepsilon_0^2, \quad \mu_p = \frac{m_1^p m_2^p}{m_1^p + m_2^p}, \quad m_i^p = (1 + \alpha_i/6),$$

$$\alpha_i = \frac{1}{2} \frac{e^2 u_i}{\hbar \omega_0 \tilde{\varepsilon}}, \quad u_i = \left(\frac{2m_i \omega_0}{\hbar} \right)^{1/2},$$

где $\alpha_i, i = 1, 2$ имеют смысл констант ЭФВ для электрона и дырки соответственно.

Из (6) следует, что в отсутствие статического кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой ($\varepsilon_0 = \infty$) имеет место обычный поляронный сдвиг в энергии электрона и дырки, движущихся независимо. В другом предельном случае, когда ЭФВ отсутствует $\tilde{\varepsilon} = \infty$, из (6) следует обычное выражение для эффективного атома водорода в основном состоянии.

4. Основное состояние экситона в полярном кристалле в случае сильного электрон-фононного взаимодействия

Гамильтониан (4) не зависит от координат центра масс экситона \mathbf{R} . Отсюда следует, что самозахват экситона, то есть образование локализованного в \mathbf{R} -пространстве экситона, невозможно. Это является следствием того, что полный импульс экситона коммутирует с гамильтонианом, соответственно, собственные волновые функции гамильтониана одновременно являются собственными волновыми функциями оператора полного импульса $\hat{\mathcal{P}}$ (§5), то есть плоскими волнами в \mathbf{R} -пространстве.

Другой важный вывод, вытекающий из вида (4), состоит в том, что в пределе сильной связи с фононами экситон не является поляризующимся. Другими словами, в пределе сильного ЭФВ экситон ведет себя как свободный экситон в неполярной среде.

Покажем это в случае, когда $\omega_0(k)$ не зависит от k . В этом случае гамильтониан (4) совпадает по структуре с биполяронным, рассмотренным в [14]-[18]. Повторяя расчет, проведенный в этих работах для биполярона в пределе сильной связи, для энергии основного состояния из (4) получим:

$$E = \Delta E + 2 \sum_k \bar{V}_k f_k + \sum_k f_k^2 + \bar{T} + \bar{U}, \quad (7)$$

$$|\psi(r)|^2 = (2/\pi l^2)^{3/2} \exp(-2r^2/l^2), \quad (8)$$

$$f_k = \pm c(V_k/\hbar\omega_0) \exp(-k^2/a^2), \quad (9)$$

где знак «+» в (9) f_k относится к случаю $m_1 < m_2$, а знак «-» к случаю $m_1 > m_2$; a, l, c – вариационные параметры, входящие в вариационные функции ψ и f_k , ΔE – так называемая энергия отдачи [14]-[18].

Подставляя (8), (9) в (7), для энергии основного состояния получим выражение:

$$E = 0,633 \frac{\hbar^2 a^2}{M} - \frac{e^2}{\sqrt{2\pi\epsilon}a} \left(\frac{1}{\sqrt{\frac{l^2 m_2^2}{8M^2} + \frac{1}{a^2}}} - \frac{1}{\sqrt{\frac{l^2 m_1^2}{8M^2} + \frac{1}{a^2}}} \right)^2 + \frac{3\hbar^2}{2\mu l^2} - 2 \sqrt{\frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\epsilon_\infty l}}, \quad (10)$$

в котором минимизация по c уже проведена.

Отметим, что выражение (10) дает решение двухчастичной задачи с разными массами и в случае отталкивания между частицами, если изменить знак «-» на «+» в круглой скобке в (10) и перед последним членом в правой части (10). В этом случае при $m_1 = m_2$ и $a = 8/(\sqrt{2} l)$ это выражение перейдет в полученное для биполярона в работе [14].

Выражение (10) получено для случая сильной связи, когда $a \rightarrow \infty$. Можно, однако, показать, что $E = E(l, a)$ не имеет минимума в этом пределе. Единственный минимум, который имеет $E(l, a)$ соответствует значениям

$l = \frac{3}{\mu e^2} \sqrt{\frac{\pi \hbar^2 \epsilon_\infty}{8}}$, $a = 0$, $E_{min} = -(4/3\pi)\mu e^4/\hbar^2 \epsilon_\infty^2$, которые отвечают случаю свободного экситона.

Таким образом, наше исходное предположение, сделанное при выводе (10), о существовании фононного вклада в энергию экситона в случае сильного ЭФВ оказалось ошибочным. Полученный результат свидетельствует о том, что искомый фононный вклад в энергию экситона, что соответствует поляризующемуся экситону, может быть отличным от нуля только при конечных значениях a , то есть при конечных значениях константы ЭФВ (§3).

Отсюда следует, что при достаточно больших значениях констант ЭФВ электронов и дырок, когда энергия поляронного экситона близка к энергии свободного экситона, энергетически более выгодным может стать распад экситона на два отдельных полярона с энергиями E_p^e и E_p^h для электрона и дырки соответственно.

Условием устойчивости экситонов относительно такого распада является выполнение неравенства:

$$|E^{экс}| \geq |E_p^e| + |E_p^h|. \quad (11)$$

В случае сильной связи с использованием выражений для энергии свободного экситона $E^{\text{экс}} = -\mu e^4 / 2\varepsilon_\infty^2 \hbar^2$ и ТИ-поляронов: $E_p^{e,h} = -0,06286 m_{1,2} e^4 / \varepsilon_\infty^2 \hbar^2$ [14]-[18] область устойчивости экситона, согласно (11), будет определяться условием:

$$0,5 - 0,5\sqrt{1 - 0,5\varepsilon_\infty^2 / \tilde{\varepsilon}^2} < m_{1,2} / M < 0,5 + 0,5\sqrt{1 - 0,5\varepsilon_\infty^2 / \tilde{\varepsilon}^2}. \quad (12)$$

5. Спектр ТИ-экситона

Для нахождения спектра гамильтониана (3) будем искать решение задачи (3) в виде:

$$\Psi = |\psi(r)\rangle |X(R, \{a_k\})\rangle. \quad (13)$$

Тогда среднее по $|\psi(r)\rangle$ значение гамильтониана (3) будет иметь вид:

$$\hat{H} = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R + \sum_k \hbar \omega_0(k) a_k^\dagger a_k + \sum_k \bar{V}_k [e^{ikR} a_k + \text{H. c}] + \bar{T} + \bar{U}, \quad (14)$$

который с точностью до постоянных \bar{T} и \bar{U} и замены V_k на \bar{V}_k , определяемой (4), совпадает с гамильтонианом полярона. Ниже будем полагать $\hbar=1$.

Следуя [21], выберем волновую функцию $|X\rangle$, входящую в (13), в трансляционно-инвариантном виде:

$$\left| X(\mathcal{P}) \right\rangle = \left[c_{\mathcal{P}} e^{i\mathcal{P}R} + \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{k_1, \dots, k_N} c_{\mathcal{P}, k_1, \dots, k_N} \cdot e^{i(\mathcal{P} - k_1 - k_2 - \dots - k_N)R} a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger \dots a_{k_N}^\dagger \right] |0\rangle, \quad (15)$$

где $c_{\mathcal{P}}$ и $c_{\mathcal{P}, k_1, \dots, k_N}$ – нормировочные постоянные, $|0\rangle$ – вакуумная волновая функция, \mathcal{P} – вектор собственных значений оператора полного импульса:

$$\hat{\mathcal{P}} = -i\partial / \partial R + \sum_{i=1}^{\infty} k_i a_{k_i}^\dagger a_{k_i}. \quad (16)$$

Так как оператор полного импульса (16) коммутирует с гамильтонианом \hat{H} , то волновая функция $|X(\mathcal{P})\rangle$ одновременно является их собственной функцией:

$$\hat{H}|X(\mathcal{P})\rangle = E(\mathcal{P})|X(\mathcal{P})\rangle, \quad (17)$$

$$\hat{\mathcal{P}}|X(\mathcal{P})\rangle = \mathcal{P}|X(\mathcal{P})\rangle.$$

Пусть $|X(\mathcal{P})\rangle$ является волновой функцией основного состояния. Тогда, согласно [21], волновая функция однофононного возбужденного состояния $|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle$

$$|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle = a_{k_j}^+ |X(\mathcal{P})\rangle, \quad (18)$$

где \mathbf{K}_j имеет смысл полного импульса в j -ом возбужденном состоянии, будет обладать свойствами:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle &= \mathbf{K}_j|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle = (\mathcal{P} + \mathbf{k}_j)|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle, \\ \hat{H}|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle &= \varepsilon(\mathbf{K}_j)|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle = \left(E(\mathcal{P}) + \omega_{k_j}\right)|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle = \\ &= \left(E(\mathbf{K} - \mathbf{k}_j) + \omega_{k_j}\right)|\psi(\mathbf{K}_j)\rangle. \end{aligned} \quad (19)$$

Таким образом, спектр возбужденных состояний имеет вид:

$$\varepsilon(\mathbf{K}) = E(\mathbf{K}_j - \mathbf{k}_j) + \omega_0(\mathbf{k}_j), \quad \omega_0(\mathbf{k}_j) = \omega_{k_j}. \quad (20)$$

Относительно величины $E(\mathbf{K}_j - \mathbf{k}_j)$ в [21] было показано:

$$E(\mathbf{K}_j - \mathbf{k}_j) \leq E(0) + \frac{(\mathbf{k}_j - \mathbf{k}_j)^2}{2M}. \quad (21)$$

В действительности, согласно [22], в этом случае вместо неравенства в (21) имеет место точное равенство, и при $\mathbf{K}_j = 0$ спектр имеет вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}_j) = E(0) + \omega_0(\mathbf{k}_j) + \mathbf{k}_j^2/2M. \quad (22)$$

Отметим, что в общем случае волновая функция возбужденного состояния, содержащего N фононов, имеет вид:

$$|\psi_{k_1, \dots, k_N}\rangle = a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ \dots a_{k_N}^+ |X(\mathcal{P})\rangle, \quad (23)$$

для неё выполняется неравенство:

$$\varepsilon(k_1, \dots, k_N) \leq E(0) + \sum_{i=1}^N \omega_0(\mathbf{k}_i) + \frac{(\mathbf{K} - \mathbf{k}_1 - \dots - \mathbf{k}_N)^2}{2M}, \quad (24)$$

где \mathbf{K} – полный импульс, соответствующий N -фононным возбуждениям.

Отметим также, что в случае экситона, когда имеется набор электронных возбуждений, нумеруемых индексом n (под n можно понимать набор квантовых чисел), вместо (22) получим:

$$\varepsilon_1(\mathbf{k} = 0) = E_1(0) = E^{\text{экс}} \quad (25)$$

$$\varepsilon_n(\mathbf{k} \neq 0) = E_n(0) + \omega_0(\mathbf{k}) + \mathbf{k}^2/2M, \quad n = 1, 2, \dots$$

6. Особенности поглощения и излучения света ТИ-экситонами

Рассмотрим случай оптических фононов, когда $\omega_0(\mathbf{k})$ не зависит от \mathbf{k} , то есть случай полярных кристаллов. Для прямых экситонов, согласно (25), помимо обычного дискретного спектра $E_n(0)$ имеется квазинепрерывный спектр с энергиями $E_n(0) + \omega_0 + k^2/2M$, который делает различимым спектр $E_n(0)$ только при условии $\omega_0 > |E_1(0) - E_2(0)|$. При выполнении условия

$$|\varepsilon_1 - \varepsilon_{n_c+1}| > \omega_0 > |\varepsilon_1 - \varepsilon_{n_c}| \quad (26)$$

различимыми будут только n_c первых уровней экситона. Этот результат можно использовать для исследования мягких фононных мод, связанных со структурными фазовыми переходами в кристаллах, например в купратных сверхпроводниках. Так, если вдали от фазового перехода условие (26) выполняется для $n_c = 2$, то оптический переход экситона из основного в первое возбужденное состояние будет давать вклад в поглощение. В точке фазового перехода, когда $\omega_0 \approx 0$, этот вклад будет отсутствовать, поскольку все дискретные уровни экситона $E_n(0)$ попадают в квазинепрерывный спектр.

Как указано в [14]-[18], спектр возбуждений (25) можно трактовать как спектр перенормированных ЭФВ фононов, которые представляют собой исходный фонон, с которым связаны электрон и дырка. Рассеяние такими фононами света с частотой ν будет приводить к появлению в рассеянном свете сателлитных частот $\nu_{n,k,+}^3 = \nu + |\varepsilon_n(k)|$ и $\nu_{n,k,-}^3 = \nu - |\varepsilon_n(k)|$. Таким образом, в зависимости от величин входящих в эти выражения параметров возможен более сложным образом устроенный спектр поглощения и излучения ТИ-экситона по сравнению со спектром свободного экситона. Так, например, при выполнении условия (26) с $n_c = 2$ возможно поглощение (испускание) света без изменения главного квантового числа экситона n . В этом случае кривая поглощения (излучения) будет иметь характерное двугорбое распределение интенсивности с максимумом при $\nu_{1,\pm}^{\text{экс}} \approx \nu \pm \omega_0$ [23].

Как и биполярны, ТИ-экситоны, будучи бозонами, могут испытывать бозе-конденсацию, которая была предсказана в работах [24, 25]. В отличие от биполяронного бозе-газа, к которому применимо статистически равновесное описание, для экситонного газа, находящегося в квазиравновесном фотовозбужденном состоянии, такое описание может быть применимо только для долгоживущих экситонных состояний, которые могут реализоваться в полуметаллах, бесщелевых полупроводниках, системах наноточек или в непрямых полупроводниках.

В работе [8] экситонную конденсацию, по-видимому, удалось наблюдать в полуметаллическом соединении TiSe_2 . Ввиду того что ТИ-экситонный гамильтониан (4) аналогичен ТИ-биполяронному, все результаты, полученные при статистическом описании ТИ-биполяронного газа, применимы к случаю ТИ-экситонного газа. В частности, для температуры бозе-конденсации ТИ-экситонного газа получим [22]:

$$T_c(\omega_0) = \left(F_{3/2}(0)/F_{3/2}(\omega_0/T_c) \right)^{2/3} T_c(0),$$

$$T_c(0) = 3,31\hbar^2 n_{exc}^{2/3}/M, \quad F_{3/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{t^{1/2} dt}{e^{t+x} - 1},$$

где n_{exc} – концентрация ТИ-экситонов. Соответственно, фазовый переход в бозе-конденсатную экситонную фазу должен быть второго рода со скачком теплоемкости при переходе.

7. Заключение

В данной работе дан ответ на фундаментальный вопрос о роли поляронных эффектов в физике экситонов. Несмотря на то что важная роль ЭФВ для экситонов в полярных средах была установлена в большом числе экспериментов, вопрос, почему в этих условиях водородоподобная модель оказывается справедливой, вплоть до настоящего времени оставался открытым [26]. В настоящей работе показано, что в случае экситон-фононного взаимодействия, описываемого гамильтонианом Фрелиха, водородоподобная модель оказывается применимой, если энергия перехода в возбужденное состояние не превышает энергию оптического фонона.

Модель полярона Пекара-Фрелиха является неизменным компонентом широкого круга проблем, связанных с описанием свойств частицы, взаимодействующей с бозонным резервуаром. Исходно введенная для описания поведения электронов, взаимодействующих с фононами в кристаллах, эта модель нашла применение в таких разных областях, как сильно коррелированные электронные системы, квантовая информация, физика высоких энергий. В последнее время она активно используется для описания примесных атомов. Полученные в работе результаты, в частности, объясняют четко различимую структуру высоковозбужденных (ридберовских) атомов в окружении бозе-конденсата [27].

В заключение отметим, что как в теории полярона, так и в теории экситона, взаимодействующего с фононами, широко распространено мнение о возможности samozахваченных поляронных или экситонных состояний. Так, например, по аналогии с полароном, samozахваченные экситонные состояния рассматривались в работах [28]-[34]. В них считалось, что при превышении константами ЭФВ некоторого критического значения экситон захватывается создаваемым им самосогласованным потенциалом, приводя к возможности аннигиляции электрона и дырки и исчезновению экситона. Считалось также, что в случае очень сильного ЭФВ энергия деформированной экситоном решетки может превосходить энергию экситонов в жесткой решетке. Изменение энергии таких деформированных экситонов, будучи отрицательным по отношению к экситонам в жесткой решетке, может сделать выгодным самопроизвольное образование экситонов в кристаллах с малой величиной

щели, например в бесщелевых полярных полупроводниках (экситонная материя [5], [35]).

Полученные в работе результаты исключают возможность образования самозахваченных экситонных состояний в трансляционно-инвариантных системах. Выводы же о возможности в них самозахваченных экситонов основаны либо на плохом выборе пробных вариационных функций, либо на ошибочных вычислениях с использованием таких функций.

Литература

- [1]. Р. Нокс, Теория экситонов, М.: Наука, (1966), с. 220.
- [2]. В.М. Агранович, Теория экситонов, М.: Наука, (1968), с. 384.
- [3]. А.С. Давыдов, Теория молекулярных экситонов, М.: Наука, (1968), с. 296.
- [4]. Э.И. Рашба, М.Д. Стредж (ред.), Экситоны, М.: Наука, (1985), с. 534.
- [5]. M. Veta, H. Kanzaki, K. Kobayashi, Y. Toyozawa, E. Hanamura, Excitonic Processes in Solids, Springer, Berlin, (1986).
- [6]. C.G. Kuper, G.D. Whitfield (Eds.), Polarons and Excitons, Edinburg: Oliver and Boyd, (1963).
- [7]. J.T. Devreese, F. Peeters (Eds.), Polarons and Excitons in Polar Semiconductors and Ionic Crystals, New York: Plenum Press, (1984).
- [8]. A. Kogar, M.S. Rak, S. Vig (Eds), Signatures of exciton condensation in a transition metal dichalcogenide , Science, 358, (2017), 1314-1317.
DOI:10.1126/science.aam 6432
- [9]. M. Aßmann, M. Bayer, Semiconductor Rydberg Physics, Adv. Quantum Technol, (2020), 1900134.
DOI:101002/qute.201900134
- [10]. H. Haken, Fortschr., Die Theorie des Exzitons in festen Körper, Phys., (1958), 6, 271.
- [11]. K. Bajaj, Effect of electron-phonon interaction on the binding energy of a Wannier exciton in polarizable medium, Solid State Commun., 15, (1974), 1221-1224.
[https://doi.org/10.1016/0038-1098\(74\)90055-6](https://doi.org/10.1016/0038-1098(74)90055-6)
- [12]. J. Pollmann, H. Büttner, Effective Hamiltonians and bindings energies of Wannier excitons in polar semiconductors, Phys. Rev., (1977), 16, 4480.
DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.16.4480>
- [13]. В.Д. Лахно, Н.К. Балабаев, Самосогласованные решения в континуальной модели F-центра и проблема релаксированного возбужденного состояния // Оптика и спектроскопия, т.55, (1983), с.308-312.
- [14]. В.Д. Лахно, Энергия и критическое значение параметра ионной связи трехмерного полярона большого радиуса // ЖЭТФ, 137, 926, (2010).
DOI:10.1134/S106 3776110050122

- [15]. V.D. Lakhno, Translation-invariant bipolarons and the problem of high temperature superconductivity // *Solid State Comm.* 152, 621, (2012).
<http://dx.doi.org/10.1016/J.SSC.2012.07.019>
- [16]. В.Д. Лахно, Трансляционно-инвариантная теория полярона (биполярона) и проблема квантования в окрестности классического решения // *ЖЭТФ*, 143, 1033, (2013).
DOI:10.7868/S0044451013060025
- [17]. Н.И. Каширина, В.Д. Лахно, А.В. Тулуб, Теорема вириала и проблема основного состояния в теории полярона // *ЖЭТФ*, 141, 994, (2012).
DOI:10.1134/S106377112030065
- [18]. В.Д. Лахно, Анзац Пекара и проблема сильной связи в теории полярона // *УФН*, 185, с. 318-331, (2015).
DOI:10.3367/UFNr.0185.201503d.0317
- [19]. T.D. Lee, F. Low, D. Pines, The motion of electrons in polar crystal // *Phys. Rev. B*, 90, 297, (1953).
- [20]. B. Gerlach, Ground-State energy of an exciton-(L0) phonon system in two and three dimensions: General outline and three dimensional case // *Phys. Rev. B*, 54, p. 12841-12851, (1996).
DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.12841>
- [21]. B. Gerlach, F. Kalina, Energy spectrum of the optical polaron at finite total momentum // *Phys. Rev. B*, v. 60, p. 10886-10897, (1999).
DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.10886>
- [22]. V.D. Lakhno, Superconducting properties of 3D low-density translation-invariant bipolaron gas // *Adv. Cond. Mat. Phys.*, (2018), 1380986.
<https://doi.org/10.1155/2018/1380986>
- [23]. D.Snoke, G.M. Kavoulakis, Bose-Einstein condensation of excitons in Cu_2O : progress over 30 years // *Reports on Progress in Physics*, 77, p. 116501, (2014).
DOI:10.1088/0034-4885/77/11/116501
- [24]. Л.В. Келдыш, Ю.В. Копаев, Возможная неустойчивость полуметаллического состояния относительно кулоновского взаимодействия // *ФТТ*, т. 6, с. 2791-2803, (1964).
- [25]. Л.В. Келдыш, А.Н. Козлов, Коллективные свойства экситонов в полупроводниках // *ЖЭТФ*, т.54, с. 978-993, (1986).
- [26]. M. Baranovski, P. Plochocka, Excitons in Metal-Halide Perovskites // *Adv. Energy Mater.*, (2020), 1903659.
DOI:10.1002/aehm.201903659
- [27]. F. Camargo, R.Schmidt, J.D. Whalen (Eds), Creation of Rydberg Polarons in Bose Gas // *Phys. Rev. Lett.*, 120,083401, (2018).
DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.083401>
- [28]. И.М. Дыкман, С.И. Пекар, Экситоны в ионных кристаллах / С.И. Пекар, Избранные труды, Изд-во АН УССР, Институт полупроводников, Киев: Наукова Думка, (1988), 512 с.

- [29]. И.М. Дыкман, С.И. Пекар, Экситоны в ионных кристаллах // Труды Института Физики АН УССР, (1953), вып. 4.
- [30]. И.М. Дыкман, С.И. Пекар, Экситоны в ионных кристаллах // ДАН СССР, т.83, (1952), с. 852.
- [31]. С.И. Пекар, Э.И. Рашба, В.И. Шека, Свободный и автолокализованный экситон Ванье-Мотта в ионных кристаллах и энергия активации их теплового перехода друг в друга // ЖЭТФ, 76, (1979), с. 251-256.
- [32]. A.Sumii, Phase Diagram of an Exciton in the phonon Field // J. Phys. Soc. Jpn., 43, 1286-1294, (1977).
[https://doi.org/10.1143.JPSJ.43.1286](https://doi.org/10.1143/JPSJ.43.1286)
- [33]. S. Shimamura, M. Matura, Internal-motion dependence of self-trapping of a Wannier exciton // Solid State Communications, 45, p. 547-550, (1983).
[https://doi.org/10.1016/0038-1098\(83\)90133-3](https://doi.org/10.1016/0038-1098(83)90133-3)
- [34]. K.S. Song, R.T. Williams, Self-Trapped Excitons, (second edition), Springer, (1996), 401 p.
- [35]. Х. Хакен, Квантовополевая теория твердого тела, М.: Наука, (1980), с. 341.