

Щелевой кинематический биэкситон Френкеля

© О.А. Дубовский

Физико-энергетический институт,
249020 Обнинск, Россия

(Поступила в Редакцию 30 июня 1999 г.)

Получено общее дисперсионное уравнение, определяющее зависимость энергии от волнового вектора в кристаллах произвольной симметрии для обнаруженного автором ранее связанного кинематического биэкситона Френкеля. Решение этого дисперсионного уравнения показало, что в кристаллах определенной симметрии существуют щелевые связанные биэкситоны Френкеля, изолированные термы которых находятся в щели между компонентами давидовского мультиплета двухэкситонных несвязанных состояний. Эти термы в кристаллах с двумя мономерами в элементарной ячейке находятся в щели между двумя низкочастотными компонентами давидовского триплета, а не резонируют с полосой центрального компонента, как это наблюдалось для исследованных ранее кристаллов более высокой симметрии. Кроме того, обнаруженные биэкситоны в отличие от изученных ранее имеют конечную, а не нулевую дисперсию. Найденная дисперсионная зависимость отличается чрезвычайно малой шириной зоны связанных биэкситонов и имеет ряд других характерных особенностей.

Работа выполнена при поддержке Российской государственной научно-технической программы "Актуальные направления в физике конденсированных сред", грантов РФФИ и INTAS.

В настоящее время проводятся экспериментальные и теоретические исследования спектров связанных многочастичных комплексов элементарных возбуждений — биэкситонов, бифононов, трифононов и т.д. [1–5]. При экспериментальном изучении спектров неупругого рассеяния света, нейтронов и электронов в ряде ионных и молекулярных кристаллов, в гидридах переходных металлов вблизи широких полос диссоциированных двухчастичных состояний были обнаружены узкие резонансные пики, которые идентифицировались как связанные с возбуждением многочастичных комплексов. Отметим, что в некоторых случаях эти пики вплотную примыкали к зоне диссоциированных состояний, находясь на крыльях соответствующих экспериментально наблюдаемых полос таких состояний [6]. В большинстве теоретических работ этого направления элементарные возбуждения — составляющие компоненты связанных комплексов — рассматривались как квазичастицы Бозе-типа. Вместе с тем в ряде работ [7–10] в рамках теории нелинейной поляризуемости применительно к экспериментально исследуемым технологически перспективным J -агрегатам изучались спектры оптических возбуждений в области суммарной энергии двух квазичастиц — экситонов Френкеля, являющихся квазичастицами Паули-типа [11].

Теоретические проблемы электронных биэкситонов Френкеля в молекулярных кристаллах обсуждались неоднократно [12–14]. Интерес к этой проблеме обусловлен ролью, которую, как это имеет место для экситонов Ванье–Мотта в полупроводниках [15], могли бы играть биэкситоны Френкеля в молекулярных кристаллах в процессах фотолюминесценции, рамановского гиперрассеяния, двухфотонного поглощения и четырехволнового смешивания. Однако пока неизвестны эксперименты, свидетельствующие о наблюдении биэкситонов Френкеля. Поэтому представляются весьма актуальными поиск возможной позиции термов этих состояний в области

двухчастичных возбуждений и выявление спектральных особенностей, которые позволили бы идентифицировать такие состояния. Этому вопросу и посвящена настоящая работа.

В [12–14] при изучении возможности образования связанных биэкситонов Френкеля в молекулярных кристаллах основным фактором, принципиально определяющим связывание экситонов в пары, считалось динамическое экситон-экситонное взаимодействие. В [16] это взаимодействие определялось, как и в случае сверхпроводимости, экситон-фононным взаимодействием. В [12–14] соответствующие константы ангармонического взаимодействия определялись матричными элементами операторов межмолекулярного и внутримолекулярного взаимодействий. В соответствии со знаком константы ангармонизма изолированный терм биэкситона отщеплялся от зоны двухэкситонных диссоциированных состояний в высокочастотную или низкочастотную области. Следует однако отметить, что эти матричные элементы более высокого порядка теории возмущений, чем тот, который определяет константы разрушающего биэкситон трансляционного движения экситонов, в частности ширину экситонных зон. Поэтому обнаружение биэкситонов такого типа будет, по-видимому, затруднительно.

В работах [17,18] было показано, однако, что даже и при отсутствии указанного выше динамического экситон-экситонного взаимодействия в кристаллах типа антрацена со сложной структурой, с несколькими, что принципиально, молекулами в элементарной ячейке вследствие паулионного типа экситонов Френкеля, т.е. кинематического запрета локализации двух экситонов на одном и том же узле, возможно образование биэкситонов нового типа — связанных кинематических биэкситонов Френкеля (КБФ). Характерные величины энергетических спектральных параметров, типичные для молекулярных кристаллов, можно оценить исходя из параметров ан-

трацена, обладающего в области одночастичных состояний с энергией ~ 3.3 eV зоной синглетных экситонов, в которую разрешен сильный дипольный оптический переход. Характерная энергия диполь-дипольного межмолекулярного взаимодействия составляет ~ 5.4 meV, расщепление давидовского дублета — ~ 100 meV и ширина экситонных зон дублета в зависимости от направления волнового вектора — $\sim 50 - 5$ meV. Связывание экситонов Френкеля в идеальных кристаллах такого типа осуществляется, как было показано в [17,18], за счет того же кинематического эффекта, который приводит к локализации экситонов в неидеальных кристаллах вблизи дефектов — вакансий [11]. Как известно, проблема двух тел — двух экситонов — может быть сведена к одночастичной задаче с соответствующей эффективной частицей с приведенной массой в поле, определяемом взаимодействием исходных частиц. При этом вследствие кинематического запрета локализации двух паулионов на одном узле волновая функция эффективной частицы равна нулю при нулевом радиусе, что и соответствует присутствию вакансии в одноэкситонной задаче. Локализация экситона на вакансии возможна только при наличии нескольких близких экситонных зон [11], например давидовского мультиплета, и соответственно КБФ могут существовать только в кристаллах с такой структурой экситонного спектра.

Спектральные термы КБФ [17,18] находились в одной из полос давидовского мультиплета двухэкситонных несвязанных состояний, и в спектрах нелинейных процессов вследствие этого соответствующие резонансные линии КБФ имели уширение из-за резонансного взаимодействия с этой полосой, а интенсивность линии соответственно понижалась. При этом в [17] аналитическое исследование проводилось в рамках теории парного контактного взаимодействия Бозе-частиц с предельно большой константой ангармонизма и учитывалось только смещение молекул в элементарной ячейке без изменения ориентации дипольных переходов в них. В [18] в рамках аналитического подхода рассматривались кристаллические системы с высокой симметрией расположения и ориентации дипольных оптических переходов в мономерах молекулярных кристаллов, которые только и доступны для полного теоретического анализа с конечным определением энергии КБФ. В [17] для исследованных КБФ только с нулевым волновым вектором, как следствие определенной ориентации дипольных переходов, пик КБФ находился в полосе центрального компонента давидовского мультиплета, но был все-таки несколько смещен относительно центра полосы. В [18] вследствие высокой симметрии кристалла компоненты давидовского триплета двухэкситонных несвязанных состояний в фазовой плоскости располагались абсолютно симметрично, и, как ясно теперь, именно из-за этой симметрии термы КБФ находились в центре средней полосы этого триплета и не имели дисперсии. По результатам работ [17,18] можно было предполагать, что в кристаллических структурах более общего вида с более низкой симметрией

и несимметричным расположением компонент давидовского мультиплета в фазовой плоскости возможно и другое, не столь симметричное расположение термов КБФ, и возникал вопрос о возможности существования КБФ вне полос давидовского мультиплета. Отметим, что в [18] при определении энергии КБФ соответствующее аналитическое решение было получено применительно только к исследуемым высокосимметричным кристаллическим системам и оно не могло быть использовано в общем случае кристаллов произвольной симметрии.

В настоящей работе в целях решения этих вопросов было проведено аналитическое исследование КБФ в кристаллических системах общего вида. Получено общее дисперсионное уравнение для зависимости энергии от полного волнового вектора КБФ в кристаллах произвольной симметрии. Частный случай этого общего уравнения и исследовался в [18]. Аналитическое решение полученного общего уравнения с определением соответствующей дисперсионной зависимости КБФ для кристаллов низкой симметрии общего типа весьма затруднительно. Поэтому для молекулярных кристаллов с двумя молекулами в элементарной ячейке при определенной ориентации дипольных переходов в молекулах было проведено численное решение полученного дисперсионного уравнения на PC PENTIUM. При этом, развивая результаты [17,18], был проведен дополнительный учет межмолекулярного взаимодействия в координационной сфере более высокого порядка, чем в [17,18]. Расчеты показали, что в исследуемой кристаллической структуре в щели между двумя низкочастотными компонентами давидовского триплета двухэкситонных несвязанных состояний существует изолированная зона щелевых кинематических биэкситонов Френкеля (ЩКБФ). Эта зона ни при каких волновых векторах не перекрывается с ближайшими компонентами давидовского триплета, и поэтому в спектрах нелинейных процессов различного типа соответствующая резонансная линия будет интенсивной и узкой, не уширенной вследствие резонансного взаимодействия с этими компонентами. Зона ЩКБФ имеет несколько характерных особенностей дисперсионной зависимости. Во-первых — чрезвычайно малую, но конечную ширину, и в связи с этим интересно сравнение с отмеченным в [1] эффектом сужения бифононной зоны при сильном ангармонизме, принимая во внимание, что для ЩКБФ не существует параметра ангармонизма, разложение по обратной величине которого существенно (оно использовалось в [1] для бифононов). Во-вторых, отметим, что существует инвертирование знака эффективной массы ЩКБФ относительно знака эффективной массы одночастичных состояний, что можно сопоставить с эффектом независимости знака эффективной массы бифонона от знака эффективной массы оптических фононов [1].

Для кристаллов произвольной симметрии с σ молекулами в элементарной ячейке в узельном представлении вторичного квантования гамильтониан имеет

следующий вид [11]:

$$\hat{H} = \sum_{n\alpha} E_0 P_{n\alpha}^+ P_{n\alpha} + \sum_{n\alpha \neq m\beta} V_{nm}^{\alpha\beta} P_{n\alpha}^+ P_{m\beta}. \quad (1)$$

В (1) E_0 — энергия возбуждения изолированной молекулы, $P_{n\alpha}^+$, $P_{n\alpha}$ — Паули-операторы рождения, уничтожения возбуждения в молекуле в узле n в позиции $\alpha = 1, 2, \dots, \sigma$, $V_{nm}^{\alpha\beta}$ — энергия соответствующего межмолекулярного взаимодействия. Решение уравнения Шредингера

$$\hat{H}|2\rangle = E|2\rangle \quad (2)$$

для двухчастичных бипаулионных состояний

$$|2\rangle = \sum_{n\alpha \neq m\beta} \Psi_{nm}^{\alpha\beta} P_{n\alpha}^+ P_{m\beta}^+ |0\rangle \quad (3)$$

с энергией E приводит к следующим секулярным уравнениям для волновых функций $\Psi_{nm}^{\alpha\beta}$:

$$(E - 2E_0)\Psi_{nm}^{\alpha\beta} = \sum_{p\gamma} (V_{np}^{\alpha\gamma} \Psi_{pm}^{\gamma\beta} + V_{mp}^{\beta\gamma} \Psi_{np}^{\alpha\gamma}), \quad (4a)$$

$$\Psi_{pp}^{\gamma\gamma} = 0, \quad \delta_{\alpha\beta} \delta_{nm} = 0. \quad (4b)$$

Уравнение (4a) составлены, во-первых, только для недиагональных $\Psi_{nm}^{\alpha\beta}$ в соответствии со вторым условием в (4b), определяющим возможные наборы α, β, n, m , для которых это условие выполняется, и, во-вторых, диагональные $\Psi_{pp}^{\gamma\gamma}$ в правой части (4a) отсутствуют, т.е. равны нулю (первое условие в (4b)).

Не приводя в деталях достаточно сложную процедуру решения (4), представим конечный результат и соответствующую проверку результата. Решение уравнений (4) с суммарным волновым вектором биекситона K имеет следующий вид:

$$\Psi_{nm}^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\gamma\mu\nu, k+q=K} \frac{R_\gamma u_{\mu k}^\alpha u_{\nu q}^\beta (u_{\mu k}^\gamma)^* (u_{\nu q}^\gamma)^* e^{i(kn+qm)}}{E - 2E_0 - \varepsilon_{\mu k} - \varepsilon_{\nu q}}, \quad (5)$$

где $\varepsilon_{\mu k}$, $\varepsilon_{\nu q}$ — зонные составляющие энергии одночастичных состояний в зонах $\mu\nu$ с волновыми векторами k, q и $u_{\mu k}^\alpha$ — соответствующие ортонормированные собственные функции одночастичной задачи. При этом энергия $E = E(K)$ и коэффициенты $R_\gamma = R_\gamma(K)$, определяющие волновые функции двухчастичных состояний (5), находятся как решения следующей системы σ уравнений

$$\sum_{\beta} T_{\alpha\beta}(E, K) R_\beta(E, K) = 0, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, \sigma, \quad (6)$$

где матрица $T_{\alpha\beta}(E, K)$ имеет следующий вид:

$$T_{\alpha\beta}(E, K) = \frac{1}{N} \sum_{\mu\nu, k+q=K} \frac{u_{\mu k}^\alpha u_{\nu q}^\beta (u_{\mu k}^\alpha)^* (u_{\nu q}^\beta)^*}{E - 2E_0 - \varepsilon_{\mu k} - \varepsilon_{\nu q}}, \quad (7)$$

т.е. дисперсионное уравнение имеет вид

$$|T_{\alpha\beta}(E, K)| = 0. \quad (8)$$

При этом $R_\beta(E, K)$ являются соответствующими собственными функциями системы уравнений (6).

Действительно, подстановка (5) в (4a) при учете соответствующих соотношений для одночастичных состояний

$$\sum_{p\gamma} V_{np}^{\alpha\gamma} u_{\mu k}^\gamma e^{ikp} = e^{ikn} \varepsilon_{\mu k} u_{\mu k}^\alpha, \quad (9a)$$

$$\sum_{p\gamma} V_{mp}^{\beta\gamma} u_{\nu q}^\gamma e^{iqp} = e^{iqm} \varepsilon_{\nu q} u_{\nu q}^\beta, \quad (9b)$$

дает следующее соотношение:

$$(E - 2E_0)\Psi_{nm}^{\alpha\beta} - \sum_{p\gamma} (V_{np}^{\alpha\gamma} \Psi_{pm}^{\gamma\beta} + V_{mp}^{\beta\gamma} \Psi_{np}^{\alpha\gamma}) = \frac{1}{N} \sum_{\gamma\mu\nu, k+q=K} R_\gamma u_{\mu k}^\alpha u_{\nu q}^\beta (u_{\mu k}^\gamma)^* (u_{\nu q}^\gamma)^* e^{i(kn+qm)}. \quad (10)$$

Поскольку из условий ортонормированности

$$\sum_{\mu} u_{\mu k}^\alpha (u_{\mu k}^\gamma)^* = \delta_{\alpha\gamma}, \quad \sum_{\nu} u_{\nu q}^\beta (u_{\nu q}^\gamma)^* = \delta_{\beta\gamma}, \quad (11)$$

находим

$$(E - 2E_0)\Psi_{nm}^{\alpha\beta} - \sum_{p\gamma} (V_{np}^{\alpha\gamma} \Psi_{pm}^{\gamma\beta} + V_{mp}^{\beta\gamma} \Psi_{np}^{\alpha\gamma}) = R_\alpha e^{iKn} \delta_{\alpha\beta} \delta_{nm} = 0, \quad (12)$$

что согласуется с (4a). Система же уравнений (6) совпадает с (4b)

$$\Psi_{nm}^{\alpha\alpha} = \frac{1}{N} e^{iKn} \sum_{\gamma\mu\nu, k+q=K} \frac{R_\gamma u_{\mu k}^\alpha u_{\nu q}^\alpha (u_{\mu k}^\gamma)^* (u_{\nu q}^\gamma)^*}{E - 2E_0 - \varepsilon_{\mu k} - \varepsilon_{\nu q}} = 0. \quad (13)$$

Таким образом, решения дисперсионных уравнений (6) с собственными функциями (5) дают энергии и волновые функции связанных двухчастичных состояний.

Решение системы уравнений (4) было получено численными расчетами на PC PENTIUM для представленного схематического на рис. 1 одномерного молекулярного кристалла с двумя молекулами в элементарной ячейке. Две молекулы в позициях 1 и 2 элементарной ячейки удалены на расстояние d , постоянная кристаллической решетки a , соответствующие векторы \mathbf{d} и \mathbf{a} ортогональны. Направления дипольных моментов оптических переходов в молекулах 1 и 2 определяются тессеральными углами θ_1, φ_1 и θ_2, φ_2 в соответствующей сферической системе координат с расположением кристалла в плоскости xu , \mathbf{d} вдоль x и \mathbf{a} вдоль u . В отличие от рассматривавшихся в предыдущих расчетах полностью симметричных кристаллических решеток для данных расчетов было выбрано аналогичное антрацену [11] асимметричное относительно ориентации кристалла направление дипольных переходов $\theta_1 = \theta, \varphi_1 = \varphi, \theta_2 = \theta, \varphi_2 = \pi - \varphi, \theta = 0.1, \varphi = 0.1$. В расчетах учитывалось кулоновское диполь-дипольное взаимодействие ближайших соседей

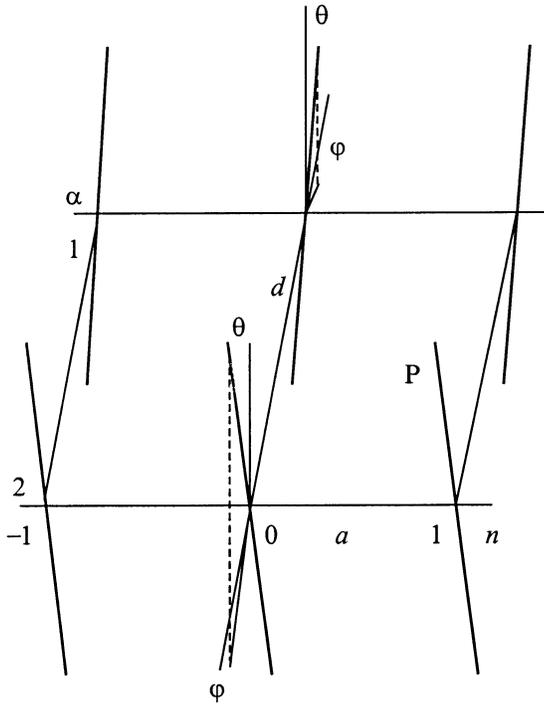


Рис. 1. Структура кристалла с двумя молекулами в элементарной ячейке.

с тремя последовательно возрастающими по величине межмолекулярными расстояниями

$$V_{nm}^{12} = [(\mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2) d^2 - 3(\mathbf{P}_1 \mathbf{d})(\mathbf{P}_2 \mathbf{d})] d^{-5},$$

$$V_{n,n\pm 1}^{\alpha\alpha} = [(\mathbf{P}_\alpha)^2 a^2 - 3(\mathbf{P}_\alpha a)^2] a^{-5}, \quad \alpha = 1, 2,$$

$$V_{n,n\pm 1}^{\alpha\beta} = [(\mathbf{P}_\alpha \mathbf{P}_\beta)(d^2 + a^2) - 3(\mathbf{P}_\alpha(\mathbf{d} + \mathbf{a}))(\mathbf{P}_\beta(\mathbf{d} + \mathbf{a}))] \times (d^2 + a^2)^{-5/2}, \quad \alpha \neq \beta. \quad (14)$$

В расчетах было использовано условие цикличности с числом элементарных ячеек в основном объеме $N = 25$. Дальнейшее увеличение N приводило только к излишней на данном этапе детализации полученных результатов. С целью достаточного сближения в спектре компонентов давидовского мультиплета использовалось значение определяющего параметра $d/a = 0.4$, близкое к реальному отношению для антрацена. Все расчеты проводились для безразмерных энергетических величин в единицах $V = P^2/a^3$, $P \equiv |\mathbf{P}_\alpha|$, для волновых векторов — в единицах $1/a$.

Решение одночастичной задачи с помощью диагонализации матрицы V в волновом представлении для компонент давидовского дублета дает соответствующие дисперсионные зависимости $\varepsilon_{\mu k}$ известного общего вида с отрицательной эффективной массой при нулевом волновом векторе. Аналитическая зависимость $\varepsilon_{\mu k}$ для

данного кристалла имеет следующий вид:

$$\varepsilon_{\mu k} = \frac{V_k^{11} + V_k^{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{V_k^{11} - V_k^{22}}{2}\right)^2 + (V_{00}^{12} + W_k')^2 + (W_k'')^2},$$

$$V_k^{\alpha\beta} = \sum_m V_{nm}^{\alpha\beta} e^{ik(n-m)}, \quad V_k^{12} = (V_k^{21})^* \equiv W_k' - iW_k''. \quad (15)$$

Соответствующие ортонормированные собственные волновые функции имеют в аналитическом представлении следующий вид:

$$u_{1k}^1 = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\delta_k}{D_k}\right)} \exp(i\xi_k/2),$$

$$u_{1k}^2 = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\delta_k}{D_k}\right)} \exp(-i\xi_k/2),$$

$$u_{2k}^1 = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\delta_k}{D_k}\right)} \exp(i\xi_k/2),$$

$$u_{2k}^2 = -\sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\delta_k}{D_k}\right)} \exp(-i\xi_k/2), \quad (16)$$

где фаза ξ_k и вспомогательные величины δ_k , D_k определяются соотношениями

$$\operatorname{tg} \xi_k = -\frac{W_k''}{V_{00}^{12} + W_k'}, \quad \delta_k \equiv \frac{1}{2}(V_k^{11} - V_k^{22}),$$

$$D_k \equiv \sqrt{\delta_k^2 + (V_{00}^{12} + W_k')^2 + (W_k'')^2}. \quad (17)$$

Соотношения (15)–(17) использовались в компьютерной программе, проводящей определение спектра двухчастичных состояний. При этом численно находились нули энергетической зависимости детерминанта $T(E, K)$ матрицы $T_{\alpha\beta}(E, K)$ в (6), (7) при фиксированных K

$$T(E, K) \equiv T_{11}(E, K) T_{22}(E, K) - |T_{12}(E, K)|^2. \quad (18)$$

Расчеты показали, что, как и следовало ожидать, в трех энергетических областях $\varepsilon_{\mu k} + \varepsilon_{\nu K-k}$ несвязанных рассеивающихся двухчастичных состояний $(\mu, \nu) = (1, 1), (1, 2), (2, 2)$ функция $T(E, K)$ при фиксированном K имеет осцилляторную зависимость с переходами через нулевое значение при перенормированных суммарных энергиях таких рассеивающихся состояний. Основной интерес представляет однако то обстоятельство, что $T(E, K)$ проходит через нуль при определенной энергии $E = E(K)$ в щели между зонами (1,1) и (1,2). На рис. 2, демонстрирующем этот эффект, представлена энергетическая зависимость $T(E, 0)$ при $K = 0$ между зонами (1,1) и (1,2). Изолированный щелевой терм $E = E(0)$ при $T(E(0), 0) = 0$ (жирная точка на рис. 2) представляет связанный ЩКБФ, отличный от исследованных в предыдущих работах [178] бипаулионов, термы которых были погружены в полосу (1,2), и соответственно возникал вопрос о их взаимодействии

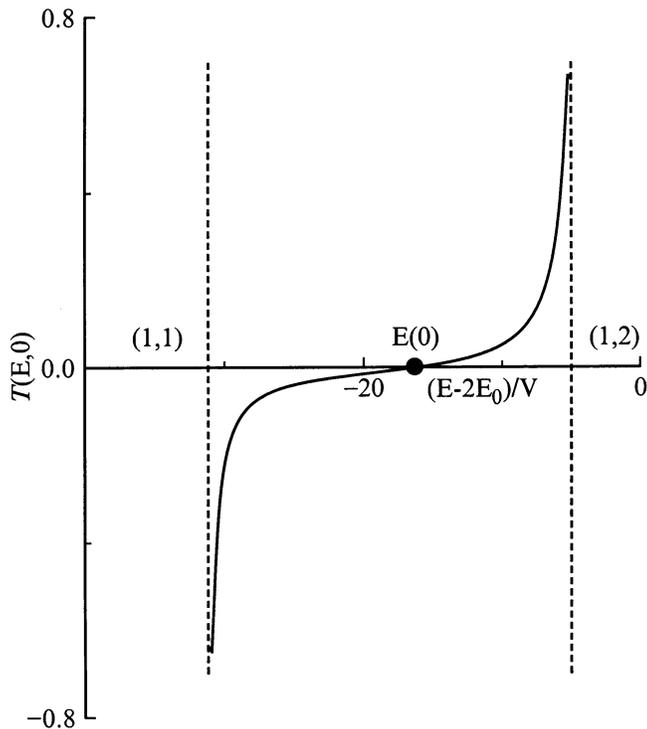


Рис. 2. Энергетическая зависимость детерминанта секулярного уравнения.

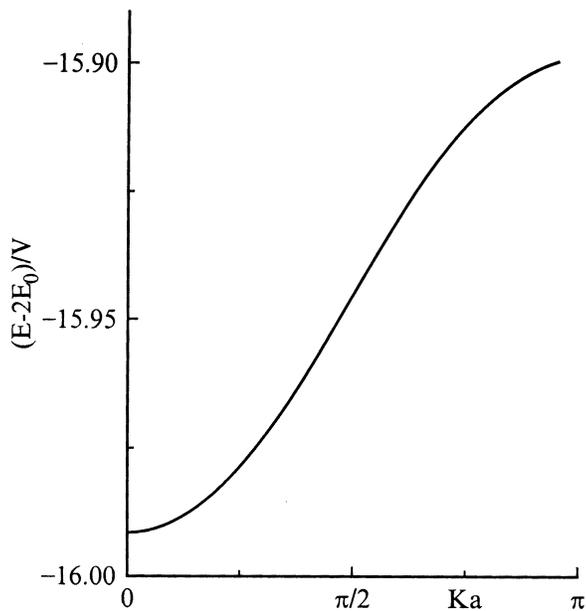


Рис. 3. Дисперсионная зависимость щелевого кинематического бикситона Френкеля.

с этой полосой, о соответствующем уширении и т.д. Аналогичные приведенной на рис. 2 зависимости $T(E, K)$ были получены для всего набора волновых векторов K в зоне Бриллюэна, и по нулям $T(E, K)$ для ЩКБФ была определена дисперсионная зависимость $E(K)$. Эта зависимость приведена на рис. 3. Отметим, во-первых,

инвертирование зоны ЩКБФ, имеющей вблизи волнового вектора $K = 0$ положительную эффективную массу, в то время как одночастичные зоны $\varepsilon_{\mu k}$ имеют отрицательную эффективную массу при нулевом волновом векторе. Отметим также чрезвычайно малую, но конечную ширину зоны ЩКБФ, что видно по числовым значениям на оси ординат. Это же обстоятельство проявляется на рис. 4, где в более крупном масштабе представлена дисперсионная зависимость всего набора собственных значений кристаллической системы, причем для заштрихованных полос (2,2), (1,2) и (1,1) приведены только края полос. В этом масштабе дисперсионная зависимость $E(K)$ ЩКБФ (рис. 2, 3) вообще не видна. Заметим, что в данном случае проявляется аналогия с бифонами, для которых также отмечалось уменьшение ширины зоны, составляющей при большой константе ангармонизма $A > V$ малую величину V^2/A по сравнению с шириной фоновых зон V . При этом для бипаулионов такого параметра ангармонизма как A не существует, и аналитическое определение ширины зоны ЩКБФ представляет интересную самостоятельную задачу.

С помощью найденных значений энергии $E = E(K)$ ЩКБФ легко определяется волновая функция этих состояний. Из соотношений (7) находится матрица $T_{\alpha\beta}(E(K), K)$, затем из соотношений (6) — величины $R_{\alpha}(E(K), K)$ и, наконец, из (5) определяется волновая функция $\Psi_{nm}^{\alpha\beta}(K)$. Общий вид волновой функции ЩКБФ, не приводящийся для краткости, в основном совпада-

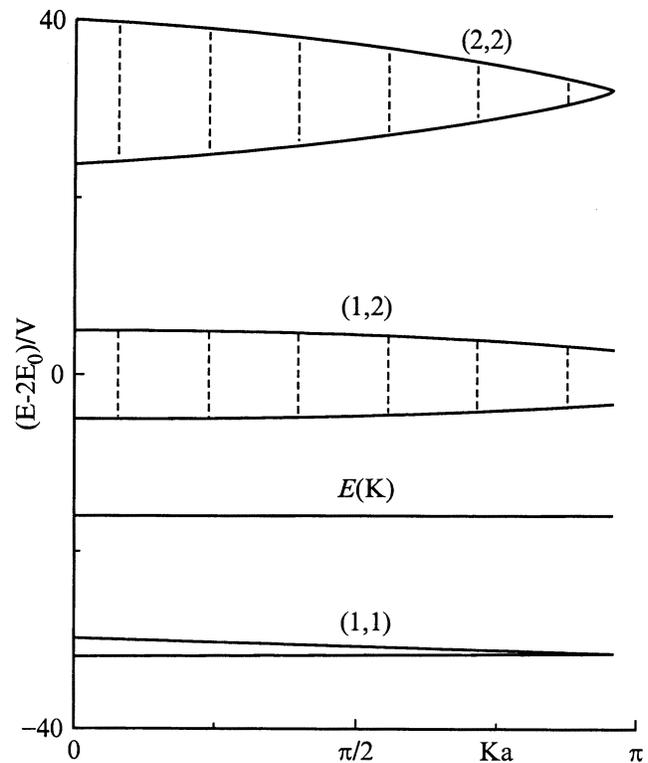


Рис. 4. Дисперсионная зависимость щелевого кинематического бикситона Френкеля $E(K)$ и несвязанных двухэкситонных состояний (1,1), (1,2) и (2,2).

ет с полученной в [17,18] пространственной зависимостью волновой функции КБФ с исключением эффектов, определяющих влияние зонных состояний полосы (1,2) на КБФ.

Несомненно, представляют интерес дальнейшие теоретические исследования и экспериментальные поиски биэкситонных резонансов в реальных двумерных и трехмерных кристаллах, которые, как это теперь ясно, находятся где-то внутри давидовских мультиплетов в двухчастичной области спектра. Представляет интерес исследование бинарных состояний обсуждавшегося выше типа и применительно к более низкочастотным возбуждениям, например оптическим колебаниям атомов водорода в гидридах металлов [1–5].

В заключение автор считает своим долгом выразить искреннюю признательность В.М. Аграновичу за полезные замечания.

Список литературы

- [1] V.M. Agranovich, O.A. Dubovsky. Optical Properties of Mixed Crystals. North-Holland, Amsterdam (1988). P. 297.
- [2] I.S. Anderson, J.J. Rush, T. Uvodic, J.M. Rowe. Phys. Rev. Lett. **57**, 22, 2822 (1986).
- [3] A.I. Kolesnikov, M. Prager, J. Tomkinson, I.O. Bashkin, V.Yu. Malyshev, E.G. Ponyatovskii. J. Phys.: Condens. Matter. **3**, 6, 5297 (1991).
- [4] R. Bini, P.R. Salvi, V. Schettino. J. Chem. Phys. **98**, 1, 164 (1993).
- [5] I.J. Richter, T.A. Germer, J.P. Sethna, W. Ho. Phys. Rev. **B38**, 15, 10403 (1988).
- [6] В.М. Агранович, О.А. Дубовский, К.Ц. Стойчев. ФТТ **21**, 10, 3012 (1979).
- [7] F.C. Spano, S. Mukamel. Phys. Rev. **A40**, 6, 5783 (1989).
- [8] J. Knoester, S. Mukamel. Phys. Rep. **205**, 1, 1 (1991).
- [9] J. Knoester, F.C. Spano. Phys. Rev. Lett. **74**, 6, 2780 (1995).
- [10] *J-aggregates* / Ed. by T.A. Kobayashi. World Scientific, Singapore (1996).
- [11] В.М. Агранович. Теория экситонов. Наука, М. (1968). 382 с.
- [12] V.M. Agranovich, M.D. Galanin. Electronic Excitation Energy Transfer in Condensed Matter. North-Holland, Amsterdam (1982).
- [13] V.M. Agranovich, S. Mukamel. Phys. Lett. **A147**, 2, 155 (1990).
- [14] F.S. Spano, V.M. Agranovich, S. Mukamel. J. Chem. Phys. **95**, 2, 1400 (1991).
- [15] M. Ueta, H. Kanzaki, K. Kobayashi, Y. Toyozawa, E. Hanamura. Excitonic Processes in Solids. Springer Series in Solid-State Sciences. Vol. 60. Springer, Berlin (1986).
- [16] O.A. Dubovsky, S. Mukamel. J. Chem. Phys. **95**, 11, 7828 (1991).
- [17] О.А. Дубовский. ФТТ **41**, 3, 423 (1999).
- [18] V.M. Agranovich, O.A. Dubovsky, D.M. Basko, G.C. La Rocca, F. Bassani. Appl. Phys. Lett. (1999), in press.