

СИЛА ОСЦИЛЛЯТОРА ЭКСИТОНА ПРИ ЭКРАНИРОВКЕ
КУЛОНОВСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Р.Ф. Набиев, Ю.М. Попов

Определена сила осциллятора экситона при экранировке кулоновского потенциала. Решено уравнение Шредингера относительного движения электрона и дырки в дебаевском потенциале. Показано, что сила осциллятора, определенная из вариационного решения уравнения Шредингера, существенно отличается от точного значения при параметре экранировки $\kappa a_b > 0,1$.

Сила осциллятора экситона, определяющая поглощение света, интенсивности спектральных пиков отражения, коэффициент оптического усиления при непрямых экситонных переходах, пропорциональна квадрату абсолютной величины волновой функции относительного движения электрона и дырки U_{nl} в начале координат (n и l – главное и орбитальное квантовые числа) $|U_{nl}|$:

$$f = \frac{2}{mE_0} |P_{cv}|^2 |U_{nl}(0)|^2,$$

где m – масса электрона; E_0 – энергия экситона; P_{cv} – матричный элемент межзонного оптического перехода; $U_{nl}(0)$ отлична от нуля только для S-состояний и зависит от квантового числа n :

$$|U_{nl}(0)|^2 = 1/n^3. \quad (1)$$

В легированном или сильно возбужденном полупроводнике кулоновский потенциал взаимодействия между электроном и дыркой экранируется, и выражение $-e^2/r$ следует заменить на $v(r) = -(e^2/r) \exp(-\kappa r)$, где $\kappa = (4\pi e^2 (n+p)/kT)^{1/2}$, n , p – концентрации свободных электронов и дырок, e – заряд электрона, T – температура. Учет экранировки кулоновского взаимодействия приводит к значительному изменению оптического матричного элемента межзонных оптических переходов $|2|$ и, очевидно, должен отразиться на законе (1).

Для нахождения $U_{no}(0)$ необходимо найти связанные состояния уравнения

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left(E + \frac{1}{r} e^{-\kappa r}\right) \chi = 0, \quad \chi = U_{no}/r \quad (2)$$

при нормировке $\int |\chi(r)|^2 dr = 1$. Обычно энергию связанного состояния E находят из вариационного принципа, используя водородоподобные функции $\psi = 2\gamma^{3/2} \exp(-\gamma r)$; при этом $|\psi(0)|^2 = 4\gamma^3$. Однако, как будет видно из дальнейшего, вариационный принцип дает хорошее приближение для E , но амплитуду волновой функции определяет с большой ошибкой. В работе $|3|$ численно решена задача о нахождении спектра собственных значений уравнения (2), но амплитуды волновых функций не приведены. Решения уравнения (2), соответствующие дискретному спектру, находились по методу, изложенному в $|4|$, с тем отличием, что для интегрирования дифференциального уравнения (2) использовался метод фазовых функций $|5|$. Для проверки правильности решения таким же методом были получены энергии и амплитуды волновых функций для атома водорода. Вычисленные значения E_n отличались от $-1/n^2$ не более, чем на $2 \cdot 10^{-4}\%$, а $|U_{no}(0)|^2$ от $1/n^3$ – не более, чем на $10^{-3}\%$. В табл. 1 приведены значения E_n и $|U_{no}(0)|^2$ при различных значениях κ . Для сравнения приведены данные для основного состояния, вычисленные на пробных водо-

Таблица 1

Спектр связанных состояний и амплитуды волновых функций уравнения (2)

п \ κ		0,0	0,02	0,04	0,06	0,08	0,10	0,12
1	E	-1,000	-0,9223	-0,8491	-0,7801	-0,7150	-0,6536	-0,5958
	E_V	-1,000	-0,922	-0,849	-0,780	-0,715	-0,653	-0,595
	$ U(0) ^2$	1,000	0,9977	0,9912	0,9810	0,9674	0,9508	0,9315
	$ U(0) _V^2$	1,000	0,997	0,987	0,972	0,952	0,929	0,902
2	E	-0,2500		-0,1229		-0,4727 (-1)		-0,9352 (-2)
	$ U(0) ^2$	0,1250		0,1106		0,7847 (-1)		0,3770 (-1)
3	E	-0,1111		-0,1555 (-1)				
	$ U(0) ^2$	0,3704 (-1)		0,2042 (-1)				
4	E	-0,6250 (-1)		-0,1192 (-1)				
	$ U(0) ^2$	0,1562 (-1)		0,9815 (-2)				
5	E	-0,4000 (-1)		-0,1181 (-2)				
	$ U(0) ^2$	0,8000 (-2)		0,2127 (-2)				

п \ κ		0,16	0,20	0,24	0,28	0,32	0,36	0,40
1	E	-0,4901	-0,3968	-0,3150	-0,2440	-0,1830	-0,1317	-0,8491 (-1)
	E_V	-0,489	-0,395	-0,312	-0,239	-0,176	-0,122	-0,077
	$ U(0) ^2$	0,8852	0,8303	0,7677	0,6986	0,6236	0,5437	0,4592
	$ U(0) _V^2$	0,839	0,766	0,687	0,603	0,517	0,429	0,342

п \ κ		0,44	0,48	0,52	0,56	0,58	0,59
1	E	-0,5574 (-1)	-0,3031 (-1)	-0,1276 (-1)	-0,2769 (-2)	-0,5173 (-3)	-0,6197 (-4)
	E_V	-0,040	-0,011				
	$ U(0) ^2$	0,3709	0,2793	0,1850	0,8972 (-1)	0,4146 (-1)	0,1977 (-1)
	$ U(0) _V^2$	0,255	0,169				

родоподобных функций (E_V , $|U(0)|_V^2$). Связанные состояния задачи (2) исчезают при $\kappa = 0,595$; для водородоподобных функций связанные состояния исчезают при $\kappa = 0,5$. Видно, что значения $|U(0)|^2$, вычисленные из вариационного принципа, значительно отличаются от точных при $\kappa > 0,1$. Снижение $|U_{\text{по}}(0)|^2$, а следовательно, силы осциллятора f может быть причиной уменьшения пика отражения в возбужденных кристаллах CdS [6].

ЛИТЕРАТУРА

1. Нокс Р. Теория экситонов. М.: Мир, 1966, с. 220.
2. Набиев Р.Ф., Попов Ю.М. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 2, 31 (1985).
3. Rogers F.J., Graboske H.C., Jr., Harwood D.H. Phys. Rev., 1A, № 6, 1577 (1970).
4. Blatt J.M. J.Comput. Physics; 1, 382 (1967).
5. Бабиков В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М., Наука, 1976, с. 288.
6. Klingshirn C., Haug H. Physics Reports, 70, № 5, 315 (1981).

Поступила в редакцию 26 февраля 1987 г.