

ЭЛЕКТРОН-ЭКСИТОННОЕ РАССЕЯНИЕ В УСЛОВИЯХ
ЭКРАНИРОВКИ КУЛОНОВСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Р.Ф. Набиев, Ю.М. Попов

Решена квантовомеханическая задача рассеяния электрона на экситоне в модели одного состояния с учетом обмена электронами в условиях экранировки кулоновского потенциала свободными носителями заряда. Исследовано влияние экранировки на вириальный коэффициент системы электроны+экситоны.

Рассеяние носителей на экситонах и примесях оказывает влияние на такие явления в полупроводниках, как перенос и ионизационное равновесие в системе электроны+дырки+экситоны (нейтральные примеси) /1,2/. Задача рассеяния сводится к нахождению фаз рассеяния взаимодействующих частиц. При высоких концентрациях носителей заряда становится существенной экранировка кулоновского потенциала. В отсутствие экранировки задача рассеяния электрона на нейтральном атоме водорода решена в различных приближениях /3/. Наиболее плодотворными были метод возмущенных стационарных состояний и вариационный метод. При экранировании кулоновского потенциала, начиная с некоторого значения параметра экранировки ($\kappa > 0,3/a_B$, где a_B — боровский радиус 1s-орбиты водородоподобного атома), в атоме остается только одно связанное состояние — 1s-уровень. При этом в задаче рассеяния становится справедливой модель одного состояния с учетом обмена электронами.

Волновое уравнение для системы электрон + экситон имеет вид:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + E - U(r_1) - U(r_2) + U(r_{12}) \right] \Psi = 0, \quad (1)$$

где $U(r) = - (e^2/\epsilon_0 r) e^{-\kappa r}$; $\kappa = [(4\pi e^2/\epsilon_0)(\partial n/\partial \mu_e + \partial p/\partial \mu_h)]^{1/2}$; индексы 1 и 2 относятся к координатам электронов; r_{12} — расстояние между электронами; n, p — концентрации электронов и дырок; μ_e, μ_h — их химические потенциалы; ϵ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость. Решение уравнения (1) будем искать в виде

$$\Psi = (1/\sqrt{2}) [\Phi(r_1)\psi(r_2) + a\Phi(r_2)\psi(r_1)]. \quad (2)$$

Здесь $a = \pm 1$ соответствуют симметричной и антисимметричной волновой функции; $\Phi(r)$ описывает движение электрона в экситоне и является решением уравнения

$$\left\{ \nabla^2 + (2m_e/\hbar^2) [-\tilde{\lambda}_0^2 - U(r)] \right\} \Phi(r) = 0, \quad (3)$$

где $\tilde{\lambda}_0^2$ — энергия связи экситона. Подставив (2) в (1) с учетом (3), получим уравнение для $\psi(r)$:

$$(\nabla^2 + 2q)\psi^a(r_2) = 2 \int [U(r_2) - U(r_{12})]\Phi^2(r_1) d^3 r_1 \psi(r_2) - 2a \int \psi^a(r_1) [\lambda_0^2 + q^2 + U(r_{12})]\Phi(r_1)\Phi(r_2) d^3 r_1, \quad (4)$$

где $\lambda_0^2 = \tilde{\lambda}_0^2/Ry$; $q^2 Ry$ — энергия налетающего на экситон электрона; $Ry = m_e e^4 / 2\epsilon_0^2 \hbar^2$ — экситонный Ридберг (здесь и далее потенциал $U(r)$ также нормирован на Ry). Перейдя к сферическим координатам $\psi^a(x) = \sum (2l+1) P_l(\cos\theta) g_l^a(x)$ (θ — угол между вектором x и заданной осью), получим для функции $g_l^a(x) = x \psi_l^a(x)$ следующее уравнение:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} + 2q^2 \right) g_l^a(x_2) = 2 \int \Phi^2(x_1) d^3 x_1 g_l^a(x_2) [U(x_2) - U(x_{12})] - 8\pi a \int \Phi(x_1)\Phi(x_2) x_1 x_2 dx_1 V_l(x_1, x_2) g_l^a(x_1), \quad (5)$$

где $V_l(x_1, x_2) = \delta_{0l}(\lambda_0^2 + q^2) + 2U_l(x_1, x_2)$,

$$U_l(x_1, x_2) = \frac{2l+1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\exp(-\kappa r_{12})}{r_{12}} P_l(\cos\theta) d(\cos\theta),$$

с начальным условием $g_l^a = 0$ и асимптотикой $g_l^a \sim \sin(\kappa r - l\pi/2 + \delta_l^a)$ (δ_l^a — фаза рассеяния). Первое слагаемое в правой части (4) и (5) отвечает рассеянию на среднем поле экситона, второе учитывает обменные эффекты. В качестве функции $\Phi(x)$ и λ_0^2 воспользуемся вариационными решениями уравнения (3) на классе функций $\Phi(x) = [\exp(-x/a)]/\sqrt{\pi a_0^3}$ (a_0 — радиус экситона). В этом случае

$$U_{00}(x_2) = \int \Phi^2(x_1) d^3 x_1 [U(x_2) - U(x_{12})] = \frac{e^{-\kappa x_2}}{x_2} \left[1 - \frac{1}{(1 - a_0^2 \kappa^2 / 4)} \right] + \frac{e^{-2x_2/a_0}}{a_0} \times \\ \times \left[\frac{a_0}{(1 - a_0^2 \kappa^2 / 4)^2 x_2} + \frac{1}{1 - a_0^2 \kappa^2 / 4} \right].$$

Для гармоник экранированного потенциала $U_l(x_1, x_2)$ не удастся получить общего аналитического выражения, но для низших гармоник это возможно:

$$U_0(x_1, x_2) = \frac{1}{2x_1 x_2 \kappa} [e^{-\kappa|x_1-x_2|} - e^{-\kappa(x_1+x_2)}], \\ U_1(x_1, x_2) = \frac{3}{4\kappa x_1^2 x_2^2} \left\{ (x_1^2 + x_2^2 - 2/\kappa^2) (-e^{-\kappa|x_1-x_2|} - e^{-\kappa(x_1+x_2)}) - \right. \\ \left. - e^{-\kappa|x_1-x_2|} (|x_1-x_2|^2 + 2|x_1-x_2|/\kappa) + e^{-\kappa(x_1+x_2)} ((x_1+x_2)^2 + 2(x_1+x_2)/\kappa) \right\}.$$

Для $\kappa = 0$ уравнение (5) обычно решают методом итераций /4/. Алгоритм, предложенный в /4/, не сходится при $a = -1$, $l = 0$, $\kappa > 0,2$. При $l = 1$ для получения фаз рассеяния необходимо интегрировать уравнение (5) до значений $x \gtrsim 20$, что требует большого количества машинного времени и памяти. Это связано с тем, что центробежный потенциал $l(l+1)/x^2$ затухает на расстоянии как $\sim x^{-2}$, в то время как остальные потенциалы в уравнении (5) затухают экспоненциально. В связи с этим для решения интегродифференциального уравнения (5) используем итерационный процесс в совокупности с методом фазовых функций /5/. Для этого запишем уравнение (5) в виде:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{l(l+1)}{x_1^2} + \kappa^2 \right) g_l^a(x_1) = \tilde{U}_{00}(x_1) g_l^a(x_1) + \alpha K_l(g_l^a(x)),$$

где $\kappa^2 = 2q^2$; $\tilde{U}_{00}(x) = 2U_{00}(x)$; K_l — интегральный оператор с ядром

$$R(x_1, x) = -4\pi\Phi(x_1)\Phi(x)x_1x\tilde{V}_l(x_1, x); \quad \tilde{V}_l(x_1, x) = \delta_{0l}(2\lambda_0^2 + \tilde{q}^2) + 2\tilde{U}_l(x_1, x); \quad \tilde{U}_l = 2U_l.$$

Итерационное уравнение запишем в виде:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \kappa^2 \right) g_l^{\alpha(n)} = \tilde{U}_{00}(x) g_l^{\alpha(n)} + \alpha K_l(g_l^{\alpha(n-1)}). \quad (6)$$

Представив $g_l^{\alpha(n)}$ в виде $g_l^{\alpha(n)} = A_l(x) [j_l(\kappa x) \cos\delta_l(x) - \sin\delta_l(x) n_l(\kappa x)]$ (n_l, j_l — функции Рикатти — Бесселя, $\delta_l(\infty)$ — искомая фаза рассеяния), при дополнительном условии $g_l' = A_l(x) [\cos\delta_l(x) \frac{d}{dx} j_l(\kappa x) - \sin\delta_l(x) \frac{d}{dx} n_l(\kappa x)]$ приведем уравнение (6) к системе:

$$\delta_l'(x) = - [U_{00}(x)/k] [j_l(kx) \cos \delta_l(x) - n_l(kx) \sin \delta_l(x)]^2 + [T(x)/kA(x)] [j_l(kx) \cos \delta_l(x) - n_l(kx) \sin \delta_l(x)], \quad (7a)$$

$$A_l'(x) = - [U_{00}(x)A_l(x)/k] [j_l(kx) \cos \delta_l(x) - n_l(kx) \sin \delta_l(x)] [j_l(kx) \sin \delta_l(x) + n_l(kx) \cos \delta_l(x)] + [T(x)/k] [j_l(kx) \sin \delta_l(x) + n_l(kx) \cos \delta_l(x)], \quad (7b)$$

где $T(x) = aK_l(g_l^{\alpha(n-1)})$, с граничными условиями $\delta_l(0) = 0$, $|A_l(\infty)| < \infty$. Можно показать, что в начале координат $A(x)$ при интересующих нас $l = 0; 1$ ведет себя как $A(x) \sim a(2l+1)!!x^3/(kx)^{l+1}$, если $T(x) \sim ax$.

Система уравнений (7) интегрировалась на ЭВМ до значений $x_{\max} \approx 8$, при этом $\delta_l(x)$ выходило на стационарное значение. Это связано с таким выбором вида функции $g_l(x)$, при котором в уравнениях (7) центробежный потенциал отсутствует. На первом шаге итераций, когда $T(x) = 0$, использовалось начальное условие $A(0) = 1$, при каждой итерации $T(x)$ вычислялось по формуле

$$T(x) = \int_0^{x_{\max}} R(x, x_1) A_l(x_1) [j_l(kx_1) \cos \delta_l(x_1) - n_l(kx_1) \sin \delta_l(x_1)] dx_1.$$

Значения фаз рассеяния при различных энергиях налетающих частиц и параметрах экранировки приведены в табл. 1. Значения δ_l при $k = 0$ с большой точностью ($\sim 10^{-3}$) совпадают с известными значениями фаз рассеяния медленных электронов на атоме водорода $/4/$.

Фазы электрон-экситонного рассеяния

Таблица 1

$a=1, l=0$										
$q^2 R_{yB}$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
0.005	2.593	2.572	2.508	2.388	2.142	1.663	0.921	0.456	0.218	0.075
0.010	2.395	2.361	2.317	2.167	1.939	1.557	1.071	0.643	0.336	0.146
0.020	2.151	2.115	2.052	1.932	1.745	1.477	1.142	0.804	0.521	0.309
0.050	1.773	1.748	1.691	1.603	1.485	1.337	1.166	0.990	0.826	0.711
0.100	1.459	1.439	1.397	1.339	1.267	1.183	1.092	1.003	0.926	0.879
0.200	1.134	1.121	1.096	1.062	1.023	0.979	0.934	0.888	0.850	0.809
0.400	0.825	0.817	0.803	0.787	0.770	0.750	0.730	0.708	0.688	0.675
0.500	0.737	0.730	0.719	0.707	0.695	0.681	0.667	0.653	0.642	0.642
0.800	0.589	0.584	0.578	0.573	0.569	0.566	0.566	0.570	0.583	0.616
1.000	0.543	0.539	0.534	0.531	0.531	0.534	0.540	0.552	0.576	0.620
1.500	0.506	0.502	0.500	0.502	0.507	0.516	0.531	0.553	0.586	0.634
2.000	0.509	0.507	0.506	0.509	0.515	0.527	0.544	0.567	0.597	0.638
2.500	0.521	0.519	0.518	0.521	0.528	0.540	0.555	0.576	0.603	0.635
3.500	0.539	0.537	0.537	0.539	0.544	0.552	0.564	0.578	0.596	0.619
5.000	0.545	0.543	0.542	0.543	0.545	0.550	0.557	0.566	0.577	0.591

$a=-1, l=0$										
0.005	2.977	2.973	2.967	2.962	2.956	2.950	2.940	2.675	2.655	2.627
0.010	2.909	2.904	2.896	2.888	2.880	2.871	2.859	2.843	2.455	2.414
0.020	2.815	2.808	2.796	2.785	2.774	2.762	2.746	2.715	2.692	2.631
0.050	2.631	2.620	2.603	2.587	2.571	2.552	2.529	2.496	2.458	2.402
0.100	2.431	2.418	2.398	2.377	2.355	2.330	2.300	2.261	2.209	2.153
0.200	2.167	2.156	2.134	2.108	2.079	2.046	2.003	1.951	1.879	1.774
0.400	1.844	1.835	1.813	1.785	1.751	1.709	1.657	1.590	1.498	1.360
0.500	1.733	1.724	1.702	1.674	1.638	1.595	1.541	1.471	1.374	1.229
0.800	1.502	1.492	1.469	1.438	1.401	1.358	1.307	1.246	1.171	1.073
1.000	1.395	1.387	1.366	1.388	1.304	1.263	1.216	1.158	1.088	1.003

$\frac{\kappa_{\text{ЭВ}}}{q^2 R_{\text{Э}}}$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
1.500	1.204	1.195	1.175	1.147	1.113	1.074	1.027	0.973	0.911	0.842
2.000	1.070	1.060	1.039	1.009	0.973	0.929	0.875	0.808	0.723	0.604
2.500	0.981	0.972	0.950	0.921	0.884	0.839	0.784	0.714	0.619	0.473
3.500	0.879	0.872	0.853	0.828	0.799	0.766	0.730	0.693	0.660	0.648
5.000	0.755	0.747	0.728	0.702	0.668	0.628	0.580	0.519	0.439	0.322

$\alpha=1, l=1$

0.05	-0.011	-0.015	-0.020	-0.022	-0.023	-0.023	-0.023	-0.023	-0.024	-0.025
0.10	-0.027	-0.034	-0.043	-0.048	-0.050	-0.051	0.000	-0.051	-0.053	-0.056
0.20	-0.057	-0.066	-0.077	-0.086	-0.090	-0.092	0.051	-0.095	-0.096	-0.100
0.40	-0.098	-0.104	-0.113	-0.121	-0.127	-0.131	-0.093	-0.134	-0.134	-0.132
0.50	-0.109	-0.113	-0.122	-0.130	-0.135	-0.139	-0.133	-0.140	-0.138	-0.132
1.00	-0.106	-0.111	-0.116	-0.121	-0.123	-0.123	-0.140	-0.113	-0.102	-0.082
1.50	-0.065	-0.068	-0.073	-0.076	-0.077	-0.074	-0.120	-0.060	-0.042	-0.018
2.00	-0.018	-0.021	-0.025	-0.028	-0.027	-0.024	-0.017	-0.006	0.010	0.035
3.50	0.087	0.085	0.081	0.079	0.080	0.082	0.088	0.096	0.109	0.127
5.00	0.143	0.142	0.139	0.137	0.136	0.138	0.142	0.147	0.156	0.170

$\alpha=-1, l=1$

0.05	0.023	0.017	0.009	0.004	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.10	0.058	0.047	0.030	0.018	0.011	0.007	0.005	0.004	0.004	0.004
0.20	0.135	0.119	0.092	0.069	0.053	0.041	0.034	0.029	0.027	0.026
0.40	0.250	0.236	0.207	0.177	0.150	0.128	0.110	0.097	0.088	0.082
0.50	0.287	0.272	0.245	0.214	0.186	0.162	0.142	0.126	0.114	0.106
1.00	0.358	0.348	0.327	0.302	0.277	0.253	0.230	0.210	0.193	0.178
1.50	0.365	0.358	0.341	0.321	0.300	0.280	0.260	0.241	0.224	0.209
2.00	0.360	0.353	0.340	0.323	0.306	0.288	0.270	0.254	0.239	0.226
3.50	0.336	0.332	0.323	0.311	0.299	0.287	0.275	0.263	0.253	0.244
5.00	0.319	0.316	0.309	0.300	0.290	0.281	0.272	0.263	0.255	0.250

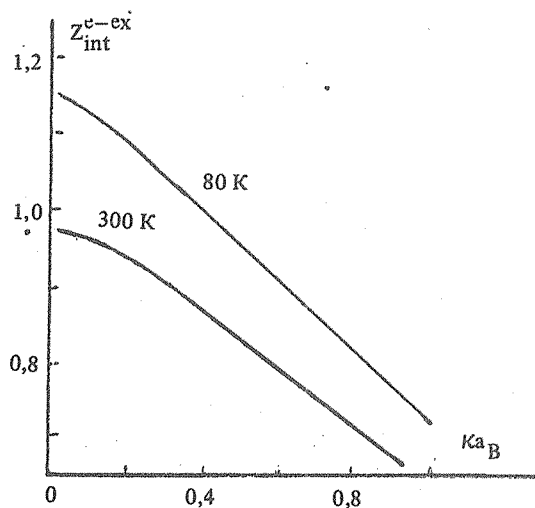


Рис. 1. Зависимость вириального коэффициента электрон-экситонной системы от параметра экранировки κ .

Вириальный коэффициент взаимодействующих частиц определяется соотношением /6/

$$B = -4 \left(\frac{\pi \hbar^2 (m_e + m_{ex})}{m_e m_{ex} T} \right)^{3/2} Z_{int}^{e-ex},$$

где $Z_{int}^{e-ex} = \frac{1}{\pi} \sum_{l,a} (2l+1) (d\delta_l^a/d\epsilon) e^{-\epsilon/T} d\epsilon = \frac{1}{\pi T} \sum_{l,a} (2l+1) \delta_l^a(\epsilon) e^{-\epsilon/T} d\epsilon$. На рис. 1 приведена зависимость вириального коэффициента системы электроны+экситоны для CdS ($E_B = 28$ мэВ) при 80 и 300 К. При экранировании кулоновского потенциала происходит монотонное уменьшение вириального коэффициента, что соответствует ослаблению эффективного взаимодействия между экситонами и электронами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Эбелинг В., Крефт В., Кремп Д. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. М., Мир, 1979., с. 264.
2. Инсепов З. А. и др. ЖЭТФ, 71, 1960 (1976); ФТП, 13, 1463 (1979).
3. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. М., Мир, 1969.
4. John T. L. Proc. Phys. Soc., 76, 532 (1960).
5. Бабиков В. В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М., Наука, 1976.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статическая физика. М., Наука, 1964.

Поступила в редакцию 10 апреля 1987 г.