

МАТРИЧНЫЙ ЭЛЕМЕНТ МЕЖЗОННОГО ОПТИЧЕСКОГО ПЕРЕХОДА ПРИ ЭКРАНИРОВКЕ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Р.Ф. Набиев, Ю.М. Попов

УДК 621.315.592

Показано, что при учете экранировки кулоновского взаимодействия между носителями матричный элемент межзонного оптического перехода претерпевает значительные изменения по сравнению с известным результатом Эллиота [1]. Это объясняется возникновением новых связанных состояний в потенциале Дебая – Хюккеля.

Матричный элемент оптического перехода пропорционален вероятности обнаружить в одной точке пространства электрон и дырку $|\psi(0)|^2$ [1]. При кулоновском взаимодействии между носителями [2]

$$|\psi(0)|^2 = (2\pi/x)/(1 - e^{-2\pi/x}), \quad x = \sqrt{E/E_B}, \quad (1)$$

где E – энергия относительного движения электрона и дырки; E_B – энергия связи экситона. Учет $|\psi(0)|^2$ в коэффициенте поглощения существенно модифицирует спектр поглощения полупроводника при энергии кванта больше ширины запрещенной зоны. При приближении энергии кванта к ширине запрещенной зоны коэффициент поглощения стремится к ненулевой константе, хотя плотность состояний при этом стремится к нулю корневым образом [1].

При наличии свободных носителей заряда взаимодействие между электроном и дыркой описывается потенциалом Дебая – Хюккеля:

$$V(r) = - \left(\frac{e^2}{\epsilon_0 r} \right) e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \left(\frac{4\pi e^2}{\epsilon_0} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu_e} + \frac{\partial p}{\partial \mu_h} \right) \right)^{1/2}, \quad (2)$$

где n , p – концентрации; μ_e , μ_h – квазиуровни Ферми электронов и дырок соответственно.

Общее решение для уравнения Шредингера с потенциалом (2) неизвестно. В работах [3, 4] были аналитически решены задачи об оптических свойствах полупроводника при различных аппроксимациях потенциала Дебая – Хюккеля.

Уравнение для функции $\chi(r) = rR(r)$, где $R(r)$ — радиальная часть S -компоненты волновой функции, имеет вид:

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left(k^2 + \frac{1}{r} e^{-\kappa r}\right) \chi = 0 \quad (3)$$

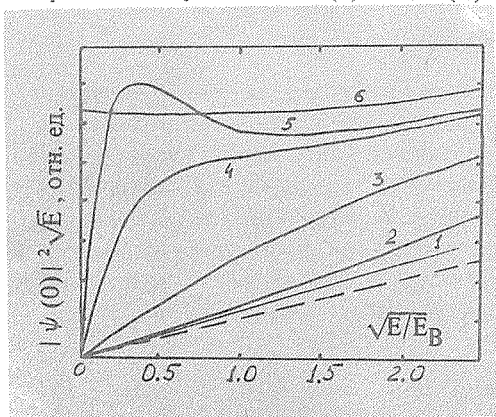
с граничными условиями $\chi(0) = 0$, $\chi(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} \frac{1}{k} \sin(kr + \delta)$, где δ — фаза рассеяния.

Для решения уравнения (3) воспользуемся методом фазовых функций [5]. Представим $\chi(r)$ в виде: $\chi(r) = A(r) \sin(kr + \delta(r))$. Тогда при дополнительном условии $\chi'(r) = A(r) k \cos(kr + \delta(r))$ уравнение (3) преобразуется в систему:

$$\delta'(r) = \frac{1}{kr} e^{-\kappa r} \sin^2(kr + \delta(r)), \quad (4)$$

$$A'(r) = -\frac{A}{2kr} e^{-\kappa r} \sin[2(kr + \delta(r))]$$

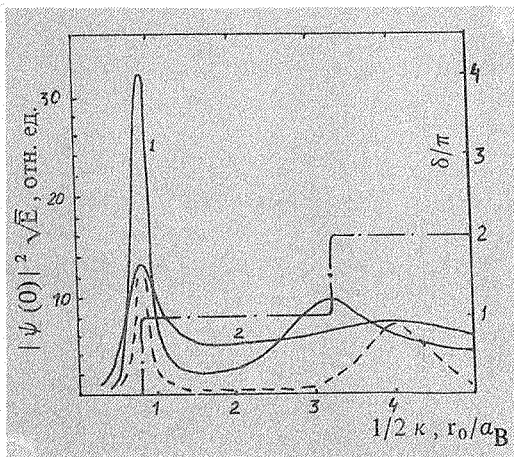
с граничными условиями $\delta(0) = 0$, $A(\infty) = 1$.



Р и с. 1. Зависимость $|\psi(0)|^2 \sqrt{E}$ от \sqrt{E}/E_B при различных значениях параметра $\kappa = 10$ (1), 5(2), 2(3), 1(4), 0,8(5), 0,001(6).

Уравнения (4) решались численно. На рис. 1 приведены зависимости $|\psi(0)|^2 \sqrt{E}$, пропорциональной коэффициенту поглощения, от \sqrt{E}/E_B при различных значениях параметра κ . Значение $E = 0$ соответствует энергии кванта, равной ширине запрещенной зоны. Штриховая линия отвечает отсутствию взаимодействия ($\kappa = \infty$). Кривая 6 соответствует $\kappa = 0,001$, т.е. кулоновскому взаимодействию практически без экранирования. С точностью $\pm 2\%$

эта кривая совпадает с аналитической формулой, полученной из (1). Кривая 5 ($\kappa = 0,8$) ведет себя немонотонным образом. В работе /3/ была также обнаружена немонотонная зависимость коэффициента поглощения от параметра обрезания кулоновского потенциала r_0 .



Р и с. 2. Зависимость $|\psi(0)|^2\sqrt{E}$ (сплошные линии) при различных значениях E и фазы рассеяния медленных частиц δ (штрих-пунктирная линия) от величины $1/2\kappa$ при $E = 10^{-4} E_B$ (1), $10^{-2} E_B$ (2). Для сравнения приведена зависимость $|\psi(0)|^2\sqrt{E}$ (штриховая линия) от параметра обрезания кулоновского потенциала для $E = 10^{-2} E_B$ (из /3/).

На рис. 2 представлена зависимость $|\psi(0)|^2\sqrt{E}$ от $1/2\kappa$ при различных значениях E . Для сравнения приведены результаты работы /3/ (штриховая линия). На рисунке также представлена зависимость фазы рассеяния δ медленных частиц ($E = 0$), которая пропорциональна (с коэффициентом π) числу связанных состояний в потенциальной яме, на которой происходит рассеяние /2/. Видна корреляция между максимумами величины $|\psi(0)|^2\sqrt{E}$ и возникновением новых связанных состояний. Кривые сглаживаются при увеличении энергии частиц и (или) уменьшении параметра экранировки.

Для объяснения этой корреляции рассмотрим регулярное решение $\varphi(k, r)$ уравнения Шредингера, удовлетворяющее начальным условиям $\varphi(k, 0) = 0$, $\varphi'(k, 0) = 1$, и решения Йоста $f_{\pm}(k, r)$, которые удовлетворяют граничным условиям $\lim_{r \rightarrow \infty} e^{\mp ikr} f_{\pm}(k, r) = 1$. Из свойств этих решений /6/ следует, что, во-первых, наше физическое решение пропорционально регулярному решению, а, во-вторых, $\varphi(k, r) = (1/2ik) [f_{-}(k) f_{+}(k, r) - f_{+}(k) f_{-}(k, r)]$, где функции Йоста $f_{\pm}(k) = W(f_{\pm}(k, r), \varphi(k, r))$ (W – вронскиан). Чтобы определить коэффициент пропорциональности между φ и ψ , рассмотрим их поведение на бесконечности. В этой области

$$\varphi(k, r) \sim (1/2ik) (f_-(k)e^{ikr} - f_+(k)e^{-ikr}), \quad (5)$$

$$\psi_k(r) \sim (i/2kr) (e^{-ikr} - S_0 e^{ikr}), \quad (6)$$

где $S_0 = e^{2i\delta}$. Сравнивая (5) с (6) находим, что $S_0 = f_-(k)/f_+(k)$, а $\psi = \varphi/rf_+(k)$. Отсюда $\psi_k(0) = 1/f_+(k)$. Нули функции Йоста $f_+(k)$ в верхней полуплоскости комплексной переменной k — простые нули, они лежат на мнимой оси и соответствуют связанным состояниям с энергией $\hbar^2 k^2/2m/6$. Поэтому при возникновении нового связанного состояния $|\psi(0)|^2 \sqrt{E} \sim |\psi(0)|^2 k \sim 1/k$ при $k \rightarrow 0$.

Таким образом, немонотонное поведение величины $|\psi(0)|^2 \sqrt{E}$ объясняется возникновением новых связанных состояний в потенциальной яме (2).

Поступила в редакцию 31 октября 1984 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Elliott R.J. Phys. Rev., **103**, 1384 (1957); Нокс Р. Теория экситонов. М., Мир, 1966.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М., Наука, 1973.
3. Бир Г.Л., Пикус Г.Е., Скал А.С. ФТП, **8**, 1096 (1974).
4. Белова И.М., Колковский Ю.В., Осипов В.В. ФТП, **17**, 1752 (1983).
5. Бабиков В.В. Методы фазовых функций в квантовой механике. М., Наука, 1976.
6. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М., Мир, 1969.