Письма в ЖЭТФ, том 43, вып. 3, стр. 126 –128 *10 февраля 1986 г.*

ЭКСИТОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ КРИСТАЛЛАХ С СИНГУЛЯРНЫМ СПЕКТРОМ (ПРОБЛЕМА УРБАХА)

Ф.В.Кусмарцев, В.А.Шукин

Обнаружено, что в неупорядоченных кристаллах с сингулярным спектром экситонов при $k = 0$ хвосты плотности состояний проявляют урбаховское поведение $\ln\rho(E) \propto E$. К этому приводит повышение размерности пространства, возникающее из-за сингулярного члена в спектре.

Пекар показал [1], что дальнодействующие дипольные силы в одноосных и двуосных кристаллах всегда приводят к неаналитичному члену в спектре экситонов. Для изолированной экситонной зоны спектр при малых k имеет вид

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m} + \delta\cos^2\theta \tag{1а}$$

или

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m} + \delta\sin^2\theta , \tag{1б}$$

где θ — угол между волновым вектором $\mathbf{k}$ и осью симметрии z. Первая формула справедлива для зоны, в которой дипольный момент перехода $\mathbf{P}$ поляризован вдоль z (т. е. $\mathbf{P} \parallel z$), вторая при $\mathbf{P} \perp z$. Здесь m — эффективная масса, а δ — величина продольно-поперечного расщепления.

Неаналитичный второй член в формулах (1а, б) приводит к эффективному увеличению размерности пространства [2, 3]. Было показано [4], что это свойство спектра изменяет частотную зависимость примесного поглощения в эффекте Рашба. В настоящей работе показано, что эффективное увеличение размерности пространства изменяет спектральную зависимость хвостов поглощения и обеспечивает выполнение правила Урбаха для неупорядоченных полупроводников.

Рассмотрим твердый раствор с учетом флуктуаций концентрации n. Будем изучать гауссовы флуктуации, вероятность которых $W[n]$ равна

$$W[n] \propto \exp\left[-\int \frac{n^2 d^3r}{2n_0 x(1-x)}\right], \tag{2}$$

где x — индекс состава твердого раствора, а n_0 — полная концентрация атомов.

Для вычисления хвоста плотности состояний будем использовать метод оптимальной флуктуации (ОФ) [5 – 7]. Тогда уравнение Шредингера для экситона Френкеля со спектром (1а) имеет вид

$$-\frac{\Delta\Psi}{2m} + \delta\partial_{zz}W - \frac{\alpha n(\mathbf{r})}{n_0}\Psi = -E\Psi \tag{3}$$

где $\Delta W = \Psi$

$$n(r) = \beta\alpha x(1-x)\Psi^2 \equiv \frac{n_0\gamma}{\alpha}\Psi^2,$$

где $\alpha = dE_g/dx$, E_g – ширина запрещенной зоны твердого раствора, $\beta = \beta(E)$ – множитель Лагранжа.

Сделаем замену переменных $\Psi \to Bp^{1/2}\Psi$, $W \to B^{-1}p^{1/2}W$, $E = (B^2/2m)\epsilon$, $\rho \to B\rho$, ρ – полярный радиус, $z \to pz$, где $B = (\delta/2m\gamma^2)^{1/4}$, $2p = 1/m\gamma$. Вместо (3) получим:

$$-(\Delta_2\Psi + \mu\partial_{zz}\Psi) + \partial_{zz}W - \Psi^3 = -\epsilon\Psi, \tag{4}$$

где $\Delta_2 W + \mu\dfrac{\partial^2 W}{\partial z^2} = \Psi$

$$\mu = 1/\gamma(2m)^{3/2}\delta^{1/2} \tag{5}$$

– малый параметр теории. (Ниже показано, что он равен: $\mu \propto [\ln(4\delta/E)]^{-1}$). Вычислим $\epsilon = \epsilon(\mu)$, из которого определим $\beta = \beta(E)$. Применение вириальной теоремы показывает, что при $\mu = 0$ значение $\epsilon = 0$. Поэтому здесь нужно использовать метод двухмасштабного разбиения [8]. В k-представлении при k_ρ, $k_z \ll 1$ решение (4) имеет вид

$$\Psi = C_1[\epsilon + k_\rho^2 + \mu k_z^2 + k_z^2/(k_\rho^2 + \mu k_z^2)]^{-1}, \tag{6}$$

где число C_1 находится из условия нормируемости Ψ:

$$C_1 = [16\pi\ln^{-1}(4/(\epsilon\mu))]^{1/2}.$$

С другой стороны при $k_z \gg \mu$, $k_\rho \gg \mu^{1/2}$, ввиду того, что ϵ мало по параметру μ, волновая функция Ψ должна удовлетворять уравнению

$$-\Delta_2\Psi - \mu\partial_{zz}\Psi + \partial_{zz}W - \Psi^3 = 0, \tag{7}$$

$$\Delta_2 W + \mu\partial_{zz}W = \Psi.$$

Его решение:

$$\Psi(\mathbf{k}) = \int \Psi^3(\mathbf{r})e^{i\mathbf{kr}}d^3r[k_\rho^2 + \mu k_z^2 + k_z^2/(k_\rho^2 + \mu k_z^2)]^{-1} \tag{8}$$

сшивается с (6) в области $\mu \ll k_z \ll 1, \mu^{1/2} \ll k_\rho \ll 1$. Условие сшивки имеет вид

$$\int\Psi^3(\mathbf{r})d^3r = [16\pi/\ln(4/\mu\epsilon)]^{1/2}. \tag{9}$$

Исключив μ из (9), получим вместо (9)

$$C_3\mu^{1/2} = [16\pi/\ln(4/\mu\epsilon)]^{1/2}, \tag{10}$$

где $C_3 = \int\varphi^3(\mathbf{r})d^3r$, а $\varphi(\mathbf{r})$ удовлетворяет обезразмеренному уравнению

$$-\Delta\varphi + \partial_{zz}\Phi - \varphi^3 = 0, \tag{11}$$

$$\Delta\Phi = \varphi.$$

Из (9) находим ϵ:

$$\epsilon = \frac{4}{\mu}\exp\left(-\frac{16\pi}{\mu C_3^2}\right). \tag{12}$$

Из (12) и (5) определим $\beta = \beta(E)$, которое нужно подставить в общее выражение для хвоста плотности состояний $\rho(E)$ (см. например [9]). Окончательно получим

$$\rho(E) \propto \exp\left[-\frac{\delta^{1/2} n_0}{\alpha^2 x(1-x)(2m)^{3/2}}\left(\frac{C_4}{2} + \frac{C_3^2}{16\pi}\,\frac{E}{\delta}\ln\left(\frac{4\delta}{E}\right)\right)\right] \qquad (13)$$

где $C_4 = 33{,}48$; $C_3 = 40{,}37$.

Аналогичное рассмотрение экситона, отвечающего спектру (1б) приводит к уравнениям ОФ

$$\begin{gathered} -\partial_{zz}\Psi - \lambda\Delta_2\Psi + \Delta_2 W - \Psi^3 = -\epsilon\Psi, \\ \partial_{zz} W + \lambda\Delta_2 W = \Psi, \end{gathered} \qquad (14)$$

где λ – малый параметр. При $\lambda = 0$ уравнение (14) не имеет решений с $\epsilon > 0$ [10].

Процедуру двухмасштабного разбиения применять здесь нельзя, так как нормировочный интеграл садится на малый масштаб. Существует критическое значение $\lambda = \lambda_c$, такое что $E(\lambda_c) = 0$. При $\lambda < \lambda_c$ уравнение (14) не имеет решений. Вблизи λ_c при $\lambda \geqslant \lambda_c$ энергия $\epsilon \propto (\lambda - \lambda_c)^2$ – как энергия слабосвязанного состояния. Значение λ_c определяется из решения уравнения (14) с $\epsilon = 0$. Решив это уравнение и подставив λ_c в общее выражение для $\rho(E)$ [9], найдем, что плотность состояний в хвосте равна

$$\rho(E) \propto \exp\left[-\frac{\delta^{1/2} n_0}{\alpha^2 x(1-x)(2m)^{3/2}}\left(\frac{C_4}{2} + \frac{30E}{\delta}\right)\right], \qquad (15)$$

где $C_4 \approx 18{,}4$.

Коэффициент экситонного поглощения $k(\epsilon)$ определяется формулами (13) и (15): $k(\epsilon) \propto \rho(\epsilon)$. Без учета сингулярности в спектре получается обычная зависимость $\rho(\epsilon) \propto \exp(-\epsilon/\epsilon_0)^{1/2}$ [5–7].

Отметим, что при малых дефицитах Δ энергии фотона будут важны поляритонные эффекты. В этом случае масштабы оптимальных флуктуаций сравниваются с длиной волны света L. Поэтому формулы (13) и (15) применимы при $\Delta \gg 1/mL^2$.

Авторы благодарны И.П.Ипатовой, Э.И.Рашба и А.В.Субашиеву за полезные обсуждения.

Литература

1. *Пекар С.И.* ЖЭТФ, 1958, **35**, 522.
2. *Ларкин А.И., Хмельницкий Д.Е.* ЖЭТФ, 1969, **56**, 2087.
3. *Ипатова И.П., Субашиев А.В., Щукин В.А.* ЖЭТФ, 1985, **88**, 1263.
4. *Рашба Э.И.* ФТТ, 1962, **4**, 3301.
5. *Halperin B.I., Lax M.* Phys. Rev., 1966, **148**, 722.
6. *Zittarz J., Langer J.S.* Phys. Rev., 1966, **148**, 741.
7. *Лифшиц И.М.* ЖЭТФ, 1967, **53**, 743.
8. *Кусмарцев Ф.В., Мешков С.В.* ЖЭТФ, 1983, **85**, 1500.
9. *Kusmartsev F.V. Rashba E.I.* J.Stat. Phys., 1985, **85**, 313.
10. *Kusmartsev F.V.* Physica Scripta 1984, **29**, 7.

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
18 декабря 1985 г