

# **Wpływ oddziaływania coulombowskiego na widmo ekscytonowe w silnie wzbudzonych strukturach półprzewodnikowych**

Mirosław Prywata

Praca doktorska wykonana w Zakładzie Teorii Ciała Stałego  
Instytutu Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Warszawskiego

Promotor: dr hab. Witold Bardyszewski



Warszawa 2000

---

Chciałbym wyrazić szczególne podziękowania  
mojemu promotorowi, dr hab. Witoldowi Bardyszewskiemu,  
za inspirację oraz nieocenioną pomoc przy pisaniu tej pracy

# Spis treści

<b>1</b>	<b>Wprowadzenie</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Formalizm</b>	<b>7</b>
2.1	Efektywny Hamiltonian ekscytonowo-fononowy . . . . .	10
2.1.1	Związek współczynnika absorpcji z funkcjami korelacji . . . . .	10
2.1.2	Propagator ekscytonu . . . . .	11
2.1.3	Równania ruchu na funkcję Greena . . . . .	16
2.2	Jednocząstkowa funkcja korelacji w przybliżeniu kumulantowym . . . . .	19
2.2.1	Rozwinięcie kumulantowe funkcji Greena . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Wpływ fononów LO na kształt i położenie linii spektralnej ekscytonu</b>	<b>27</b>
3.1	Krawędź absorpcji — reguła Urbacha . . . . .	27
3.2	Ekscytonowa funkcja energii własnej . . . . .	29
3.3	Funkcja gęstości spektralnej ekscytonu . . . . .	37
3.4	Rozszerzenie teorii . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Funkcja wzmocnienia w laserach półprzewodnikowych — efekty wielociałowe</b>	<b>44</b>
4.1	Ekranowane oddziaływanie elektron-dziura . . . . .	45
4.2	Plazmony . . . . .	48
4.3	Przybliżenie bieguna plazmowego . . . . .	50
4.4	Jednocząstkowa energia własna . . . . .	53
4.5	Równania na funkcje korelacji . . . . .	55

## *SPIS TREŚCI*

---

4.6	Porównanie z danymi doświadczalnymi . . . . .	62
<b>5</b>	<b>Podsumowanie</b>	<b>69</b>
<b>A</b>	<b>Energia własna dla ekscytonu oddziałującego z fononami LO</b>	<b>71</b>
<b>B</b>	<b>Energia własna dla ekscytonu w studni kwantowej: sprzężenie z fononami LO</b>	<b>75</b>
B.1	Studnia kwantowa o skończonej szerokości . . . . .	75
B.2	Granica dwuwymiarowa . . . . .	81
<b>C</b>	<b>Suma po stanach wodoropodobnych w trzech wymiarach</b>	<b>82</b>
C.1	Suma po stanach z widma dyskretnego . . . . .	82
C.2	Suma po stanach z widma ciągłego . . . . .	85
<b>D</b>	<b>Przybliżone wysumowanie po stanach ekscytonowych w dwóch wymiarach</b>	<b>90</b>
<b>E</b>	<b>Elementy macierzowe ekscytonu w dwóch wymiarach</b>	<b>93</b>
<b>F</b>	<b>Obliczenia numeryczne</b>	<b>98</b>
<b>G</b>	<b>Spis skrótów</b>	<b>100</b>
	<b>Literatura</b>	<b>101</b>

# Rozdział 1

## Wprowadzenie

Badanie silnie wzbudzonych układów półprzewodnikowych od wielu lat przyciąga uwagę fizyków [1]. W ostatnim czasie wraz z rozwojem technologii w nanoskali temat ten wraca, tym razem w kontekście nowych struktur półprzewodnikowych budowanych obecnie.

Historia badań silnie wzbudzonych układów sięga lat pięćdziesiątych. Były to czasy, gdy udało się wyjaśnić zjawisko ekscytonowe w oparciu o teorię wielociałową [2]. Wtedy też po raz pierwszy zasugerowano możliwość tworzenia się bardziej skomplikowanych kwazicząstek, w których skład wchodzi trzy lub cztery składowe. Ekscytony z dodatkowym elektronem lub dziurą nazywane są trionami, natomiast kompleks dwóch ekscytonów to biekscyton<sup>1</sup>.

Pod koniec lat sześćdziesiątych pojawiła się idea, że w silnie wzbudzonych układach gaz ekscytonowy może przechodzić w ciecz elektronowo-dziurową. Wysoka koncentracja swobodnych nośników powoduje, że wzmocnieniu ulegają efekty ekranowania, a stany związane par elektron-dziura przestają być stabilne. Dodatkowym zjawiskiem, obok silnego ekranowania, jest pojawienie się kolektywnego wzbudzenia w formie oscylacji plazmy. Obydwa te efekty opisywane są w ramach wewnątrzprasmowej funkcji dielektrycznej otrzymanej w przybliżeniu RPA za pomocą tzw. wzoru Lindharda.

Jednym z układów półprzewodnikowych, w których mamy do czynienia z bardzo dużą koncentracją swobodnych nośników, są lasery półprzewodnikowe. Wydają się one być naturalnym

---

<sup>1</sup>Inna nazwa to molekula ekscytonowa

miejszem, w którym manifestują się efekty wielociałowe w zjawiskach optycznych. Dlatego też w pracy tej skupię się na opisie zjawisk zachodzących właśnie w laserach półprzewodnikowych.

Pierwsze prace poruszające zagadnienia związane z teorią laserów półprzewodnikowych pochodzą z lat sześćdziesiątych. Jednak w czasach tych nie wiedzano jeszcze wiele na temat wpływu efektów wielociałowych na wzbudzenia elektronowe. Dodatkową trudność stanowił fakt, że nie istniały jeszcze dostatecznie rozwinięte techniki eksperymentalne pozwalające w subtelny sposób te efekty identyfikować. Były to główne przyczyny, dla których większość teorii powstających na początku rozwoju fizyki laserów półprzewodnikowych skupiała się na opisie zjawisk optycznych w jednocząstkowych modelach. Wymienić tu można pracę [3], gdzie autor zauważa niezgodność z doświadczeniem prostego modelu opisu funkcji wzmocnienia. Z pracy tej, jak również i z kolejnych artykułów (np. [4, 5, 6, 7]) wynika, że jednocząstkowe modele nie uwzględniające efektów wielociałowych mają ograniczone zastosowanie w przypadku opisu laserów półprzewodnikowych. Wyniku tego nie daje się poprawić stosując skomplikowane rachunki pasmowe, uwzględniające efekty oddziaływania odległych pasm [8]. Tak więc kluczowe w prawidłowym opisie zjawisk zachodzących w tych strukturach wydaje się być w pierwszym rzędzie uwzględnienie efektów wielociałowych [9] i na tej bazie konstruowanie mikroskopowej teorii opisu laserów półprzewodnikowych. Rozwój tej dziedziny wiedzy w latach osiemdziesiątych doprowadził do ustalenia, że podstawowym czynnikiem mającym wpływ na powstanie nieliniowych zjawisk optycznych w laserach półprzewodnikowych jest oddziaływanie coulombowskie.

Przyjmując ten kierunek badań teoretycznych otrzymano wyniki jakościowo zgodne z doświadczeniem.

Podstawowymi problemami z punktu widzenia teorii uwzględniających efekty wielociałowe w laserach półprzewodnikowych są: właściwe uwzględnienie zmiany kształtu linii widmowej, wzmocnienie absorpcji na skutek efektów oddziaływania coulombowskiego oraz zwięzanie się przerwy energetycznej wraz ze wzrostem koncentracji swobodnych nośników.

Pierwsze z tych zagadnień, związane ze zmianą kształtu pojedynczej linii widmowej, rozważane było na gruncie różnych mechanizmów oddziaływań wewnątrz układu i sprzężenia z otoczeniem. W chwili obecnej wydaje się, że dominujący wpływ na kształt linii spektralnej ekscytonów

ma oddziaływanie z fononami optycznymi podłużnymi. Próby badania wpływu oddziaływania elektron-elektron na szerokość linii zostały przeprowadzone w pracy [10]. Fonony akustyczne, jak wynika to np. z prac [11, 12, 13] mają dużo mniejsze znaczenie, co związane jest z ich relacją dyspersji oraz stałą sprzężenia.

Z doświadczeń wynika, że linie widmowe cechuje wykładniczy zanik w miarę oddalania się od głównego maksimum (patrz np. [14] oraz rozdział 3, gdzie przeprowadzone są rozważania dotyczące reguły Urbacha). Dlatego też w niniejszej rozprawie szczególny nacisk położony został na właściwe uwzględnienie w pierwszym rzędzie efektów oddziaływania ekscyton-fonon optyczny podłużny, nie zamykając drogi do uwzględnienia innych efektów wielociałowych mających także wpływ na kształt linii.

Wzmocnienie coulombowskie [15, 16, 17, 18] (ang. tzw. *Coulomb enhancement*) związane jest bezpośrednio z korelacją między elektronami i dziurami. Podstawową konsekwencją omawianego wzmocnienia jest zwiększenie tempa rekombinacji. Szczególnego znaczenia efekty te nabierają w układach o obniżonej wymiarowości, zwłaszcza w układach tzw. kwazierowymiarowych, np. kropkach kwantowych. Mamy tutaj do czynienia ze zwiększeniem wpływu efektów korelacji, co związane jest z pułapkowaniem nośników w ograniczonym obszarze przestrzeni.

Kolejnym istotnym elementem, który powinna uwzględniać teoria opisu zjawisk wielociałowych w laserach jest zmniejszanie się przerwy energetycznej pod wpływem swobodnych nośników (ang. tzw. *band-gap narrowing*). Dominujący wpływ na omawiany efekt ma duża koncentracja swobodnych nośników. Bardzo dobrą metodą perturbacyjną pozwalającą na uwzględnienie wpływu oddziaływania coulombowskiego na renormalizację przerwy energetycznej jest tzw. przybliżenie GW, które będzie szerzej omówione w dalszym ciągu rozprawy. Świadczy ona triumfy w rachunkach pasmowych, gdzie doskonale poprawia przewidywania teorii funkcjonału gęstości dotyczące wartości przerwy energetycznej w kryształach. [19].

W drugim rozdziale rozprawy zostanie przedstawiony formalizm, który będzie używany do dalszych rachunków w niniejszej pracy. Przedstawione zostaną w nim funkcje korelacji, będące naturalnym narzędziem badania i opisu układów wielu ciał w fizyce statystycznej. Równania różniczkowe na wprowadzone tutaj funkcje będą stanowiły podstawę do kolejnych przybliżeń.

W pracy tej rachunki perturbacyjne na funkcje korelacji przeprowadzane będą w przybliżeniu kumulantowym, które umożliwia uwzględnienie efektów wielociałowych do nieskończonego rzędu w rozwinięciu diagramatycznym [20, 21]. Dokładniejsza analiza samego przybliżenia oraz zalety jego stosowania przedstawione zostaną pod koniec rozdziału.

Trzeci rozdział ma na celu poglądowe przedstawienie działania metodologii wprowadzonej w poprzednim rozdziale, na przykładzie opisu krawędzi absorpcji w półprzewodnikach samostycznych. Porównanie z doświadczeniem pokazuje dużą zgodność przewidywań teoretycznych z mierzonymi wielkościami. Użycie rozwinięcia kumulantowego z retardowaną energią własną w drugim rzędzie rachunku zaburzeń, przy zastosowaniu dokładnego wysumowania po wszystkich pośrednich poziomach ekscytonowych, pozwala na odtworzenie z bardzo dużą dokładnością urbachowskiej zależności krawędzi absorpcji (zależność wykładnicza utrzymuje się przez wiele rzędów wielkości).

Kolejny rozdział zawiera zasadniczą część pracy. Przedstawiona zostanie w nim teoria pozwalająca otrzymać funkcję wzmocnienia w laserach półprzewodnikowych w oparciu o systematyczne uwzględnienie efektów oddziaływania coulombowskiego wraz z uwzględnieniem efektów korelacji i ekranowania. Korzystając z podstaw teoretycznych opisanych szczegółowo w rozdziale trzecim oraz przez analogię z oddziaływaniem ekscyton-fonon LO w sposób przejrzysty przedstawie opis wspomnianych układów. Porównanie teorii z doświadczeniem zostanie przeprowadzone pod koniec czwartego rozdziału.

Model opisu efektów wielociałowych przedstawiony w niniejszej pracy został zastosowany do struktur trójwymiarowych oraz kwazidwuwymiarowych (studni kwantowych). W tych dwóch klasach układów można bez problemu stosować to samo podejście teoretyczne. W przypadku dalszej redukcji liczby wymiarów układu należy liczyć się ze znacznymi różnicami jakościowymi w opisie tych struktur i dlatego układy takie jak druty kwantowe i kropki kwantowe znajdują się obecnie poza obszarem stosowalności modelu w obecnej jego formie.



# Rozdział 2

## Formalizm

Badając własności optyczne materiałów półprzewodnikowych rozważamy układ elektronów pasmowych poruszających się w zewnętrznym fluktuującym potencjale (np. związanym z drganiami sieci). Międzypasmowe oddziaływanie coulombowskie jest m.in. odpowiedzialne za efekty ekscytonowe w absorpcji międzypasmowej. Potencjał fluktuujący z kolei prowadzi do rozmycia widma.

Mamy więc do czynienia ze skomplikowanym układem wielociałowym, a ściśle rozwiązanie takiego zagadnienia jest praktycznie niemożliwe. Dlatego też w tego typu sytuacjach w fizyce stosowane są różnego rodzaju przybliżenia. Polegają one w większości na wyodrębnieniu podstawowych własności układu oraz prowadzenie dalszych obliczeń dla modelowego hamiltonianu, który reprezentuje najsilniejsze efekty wyjściowego problemu manifestujące się w doświadczeniu. Przykładem z innej dziedziny może być teoria nadprzewodnictwa BCS<sup>1</sup>, gdzie mamy do czynienia z silnie skorelowanym układem wieloelektronowym, który można opisać prostym modelem teoretycznym zawierającym mechanizm tworzenia się stanu nadprzewodzącego.

Dodatkowym aspektem badań fizyki teoretycznej jest możliwość doświadczalnej weryfikacji otrzymanych wyników. Wiele danych otrzymanych bezpośrednio w eksperymentach wyraża się poprzez funkcje korelacji, będące naturalnym językiem fizyki statystycznej używanym do opisu układów wielociałowych. Związane z funkcjami korelacji funkcje Greena są najczęściej stosowanym i wygodnym narzędziem do opisu doświadczeń w dziedzinie fizyki materii skondensowanej.

---

<sup>1</sup>nazwa pochodzi od nazwisk twórców — Bardeena, Coopera, Schrieffera

Dlatego też w poniższych rachunkach będę stosował formalizm nierównowagowych funkcji Gre-ena.

Na uwagę zasługuje także problem struktury pasmowej. W realnych materiałach często mamy do czynienia ze skomplikowanymi zależnościami energii poszczególnych pasm od wektora falowego  $k$ . Wielopasmowa struktura, w której każde pasmo posiada inną, niewyrażającą się wzorami analitycznymi, zależność dyspersyjną, zamyka drogę do przeprowadzenia jakichkolwiek rachunków analitycznych. Samo uwzględnienie dokładnej struktury pasmowej nie prowadzi do poprawnych wyników w przypadku, gdy korelacje i efekty wielociałowe stanowią dominujący czynnik wpływający na zachowanie się układu.

Aby uwypuklić znaczenie efektów korelacji w pracy tej zdecydowałem się na potraktowanie struktury pasmowej w sposób przybliżony, zwracając uwagę głównie na efekty wielociałowe. Podejście takie nie wyklucza możliwości dokładniejszego uwzględnienia czynników takich, jak nieparaboliczność pasm, wzięcia pod uwagę bardziej odległych energetycznie podpasem, itp. W większości wypadków będzie to prowadziło jedynie do komplikacji natury technicznej bez większego wpływu na tok rozumowania.

Podobne rozważania do powyższych można zastosować w odniesieniu do układów o obniżonej wymiarowości, takich jak studnie kwantowe, zamieniając odpowiednie funkcje na dwuwymiarowe. Pojawia się tutaj dodatkowa trudność, jaką jest w przypadku studni kwantowej dokładne uwzględnienie jej skończonej szerokości w sposób analityczny. Wymaga to rachunków numerycznych już na samym początku obliczeń. Istnieją jednak różne rodzaje przybliżeń pozwalające na wzięcie pod uwagę tego, że studnia kwantowa nie jest układem całkowicie dwuwymiarowym a funkcje falowe zarówno elektronów jak i dziur rozciągają się także prostopadle do płaszczyzny studni. Przybliżenia zastosowane przeze mnie w takich sytuacjach zostaną omówione w dalszym ciągu pracy. W praktyce teoria trójwymiarowa ulega drobnym modyfikacjom, mającym na celu uwzględnienie redukcji wymiaru układu — zachowuje jednak swoją strukturę.

Omawiając modelowy układ trudno nie wspomnieć o różnych podejściach do zagadnienia absorpcji w półprzewodnikach stosowanych w literaturze. Z uwagi na silne efekty ekscytonowe stosuje się często przejście do reprezentacji ekscytonowej, w której uproszczona jest część zwią-

zana z oddziaływaniem, gdyż wyeliminowane są międzypasmowe sprzężenie coulombowskie elektron-dziura. Ta technika redukcji stopni swobody, polegająca na zrzutowaniu przestrzeni Hilberta na podprzestrzeń dwucząstkową, zostanie zilustrowana w następnym podrozdziale, gdzie wprowadzony zostanie efektywny hamiltonian ekscytonowy.

Stan ekscytonowy definiuje się jako liniową kombinację wzbudzeń typu elektron-dziura dających w efekcie cząstkę o wodoropodobnym widmie wzbudzeń [22, 23, 20, 24]. Tak skonstruowane cząstki nie są w pełni bozonami<sup>2</sup>, gdyż ich relacje komutacji są jedynie w przybliżeniu bozonowe. Komutator operatorów anihilacji i kreacji daje w wyniku deltę z dokładnością do stałej proporcjonalnej do „gęstości ekscytonów” ( $na^3$ , gdzie  $n$  jest gęstością wzbudzeń elektronowych, natomiast  $a$  jest efektywnym promieniem Bohra<sup>3</sup>). Funkcje falowe ekscytonów przy dużej gęstości nakładają się, w grę zaczyna wchodzić zakaz Pauliego i przybliżenie to nie jest uzasadnione. Hamiltonian, w którym ekscytony reprezentowane są przez operatory kreacji i anihilacji wzbudzeń dwucząstkowych, jest w swym założeniu wygodnym modelowym przybliżeniem układu o małej gęstości swobodnych nośników. W układzie silnie wzbudzonym (o dużej koncentracji nośników) podejście takie wymaga więc modyfikacji o czym będzie mowa w rozdziale 4.

Okazuje się, że w obecności nośników swobodnych zamiast definiowania ekscytonu na poziomie operatorów kreacji i anihilacji wygodniej jest badać strukturę spektralną dwucząstkowej funkcji korelacji. Podejście takie pozwala wypracować jednolity sposób opisu zarówno układów o małej jak i dużej koncentracji swobodnych nośników.

Niniejszy rozdział zawiera przedstawienie teorii opisu zjawisk optycznych w półprzewodnikach w oparciu o funkcje korelacji. Na początek korzystając z metody całek funkcjonalnych wyprowadzę efektywny hamiltonian dla ekscytonów sprzężonych z drganiami sieci. Następnie

---

<sup>2</sup>Warto nadmienić, że bozonowy lub fermionowy charakter cząstek może być rozumiany w różny sposób. Jednym z kryteriów może być spełnianie przez operatory kreacji i anihilacji odpowiednich reguł komutacji bądź antykomutacji. Inne podejście, związane z fizyką statystyczną, mówi o statystyce obsadzania poziomów. Przykładem mogą być bozony, znajdujące się na kole o skończonym obwodzie, oddziałujące potencjałem typu delta. Ich funkcja falowa ma nadal symetrię bozonową ze względu na zamianę cząstek jednak obsadzają one stany zgodnie z regułami fermionowymi.

<sup>3</sup> $a = \epsilon_\infty / \mu$ ,  $\epsilon_\infty$  jest wysokoczęstościową stałą dielektryczną,  $\mu$  masą zredukowaną układu elektron-dziura.

wyprowadzone zostaną równania na funkcje korelacji oraz ich rozwiązania perturbacyjne oparte na przybliżeniu kumulantowym. Dyskusja wzorów ogólnych zakończy rozdział 2.

## 2.1 Efektywny Hamiltonian ekscytonowo-fononowy

### 2.1.1 Związek współczynnika absorpcji z funkcjami korelacji

Zachowanie się układu w słabym polu promieniowania elektromagnetycznego dobrze jest opisywane przez teorię reakcji liniowej układu. Stanowi ona standardową metodę fizyki statystycznej stosowaną zarówno w układach równowagowych jak i w przypadku, gdy układ znajduje się niedaleko od stanu równowagi termodynamicznej. Przykładem nierównowagowej metody fizyki statystycznej używanej w podobnych układach są wprowadzone przez Keldysha (patrz np. [25]) funkcje Greena na konturze. Metoda ta rozszerza teorię równowagowych funkcji korelacji na układy znajdujące się w pobliżu stanu równowagi termodynamicznej lub kwazirównowagi.

W przypadku własności optycznych półprzewodników w obszarze przejść między pasmem walencyjnym i pasmem przewodnictwa dzięki teorii reakcji liniowej możemy powiązać współczynnik absorpcji  $\alpha(\omega)$  z retardowaną dwucząstkową funkcją Greena [26]

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{cn_r\omega V} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2} G^{\text{R}}(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2, \omega) p_{cv}(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2) p_{cv}^*(\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2) \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_1} \delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_2}, \quad (2.1)$$

gdzie

$$p_{cv}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \langle c\mathbf{k}_1 | \hat{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | v\mathbf{k}_2 \rangle. \quad (2.2)$$

$\hat{\epsilon}$  jest wektorem wyznaczającym polaryzację światła natomiast  $\hat{\mathbf{p}}$  to operator pędu. Symbole  $c$  i  $v$  oznaczają stany elektronowe odpowiednio z pasma przewodnictwa i walencyjnego. Funkcja  $G^{\text{R}}(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2, \omega)$  jest transformatą Fouriera retardowanej funkcji Greena zależnej od czasu

$$G^{\text{R}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2; \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\omega+i\eta)(t-t_0)} G^{\text{R}}(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2, t, t_0) dt, \quad (2.3)$$

gdzie ta ostatnia zdefiniowana jest jako średnia termodynamiczna ze względu na odpowiedni zespół statystyczny

$$G^R(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2, t, t_0) = -i\Theta(t - t_0) \left\langle \left[ a_{\nu\mathbf{k}_2}^\dagger(t)a_{c\mathbf{k}_1}(t), a_{c\mathbf{k}'_1}^\dagger(t_0)a_{\nu\mathbf{k}'_2}(t_0) \right] \right\rangle. \quad (2.4)$$

W powyższym wzorze symbol  $a_{\nu\mathbf{k}}^\dagger$  oznacza operator kreacji elektronu w paśmie przewodnictwa  $\nu = c$  lub walencyjnym  $\nu = v$ . Ewolucja w czasie powyższych operatorów kreacji  $a_{\nu\mathbf{k}_2}^\dagger(t)$  i anihilacji  $a_{\nu\mathbf{k}_2}(t)$  elektronów wyrażona jest w obrazie Heisenberga, a nawias kwadratowy oznacza komutator. Część urojona retardowanej funkcji Greena we wzorze (2.1) określa dodatnio określoną funkcję gęstości spektralnej opisującą gęstość prawdopodobieństwa, że para elektron dziura o pędach  $\mathbf{k}_1$  i  $-\mathbf{k}_1$  (przejścia proste) w paśmie  $c$  lub  $v$  ma energię  $\omega$ .

Znajomość powyższej funkcji Greena, a co za tym idzie, także funkcji gęstości spektralnej pozwala uzyskać mierzalne bezpośrednio w doświadczeniu wielkości.

Przed wyprowadzeniem wzorów na szukane funkcje korelacji poświęcę trochę miejsca na wyprowadzenie efektywnego hamiltonianu ekscytonowo-fononowego, który będzie stanowił podstawę dalszych rachunków.

### 2.1.2 Propagator ekscytonu

Hamiltonian układu składającego się z elektronów pasmowych w kryształach oraz jonów ma następującą postać

$$H = H_{el} + H_{jony} + H_{el-jon}, \quad (2.5)$$

gdzie odpowiednio część  $H_{el}$  reprezentuje elektrony pasmowe (w niniejszej pracy uwzględnione są jedynie dwa pasma ale możliwe jest rozszerzenie na większą ilość podpasm),  $H_{jony}$  jony sieci krystalicznej oraz potencjał oddziaływania tych dwóch podukładów  $H_{el-jon}$ . Niestety taki hamiltonian ma dosyć skomplikowaną postać, gdyż w ogólnym przypadku mamy do czynienia z dwoma podukładami: fermionowym (elektrony) oraz bozonowym (jony) oddziałującymi między sobą i wzajemnie modyfikującymi swoje własności. Oprócz tego jest to hamiltonian układu wielu ciał, którego nie daje się w sposób ścisły rozwiązać. W związku z tym, że zainteresowani jesteśmy optycznymi własnościami półprzewodnika możemy cały ten wielociałowy, ogólny

hamiltonian rzutować na podprzestrzeń dwucząstkową odpowiadającą międzypasmowym wzbudzeniom elektron-dziura, korzystając z przybliżenia Hartree-Focka. Innymi słowy zredukujemy ogólny hamiltonian do efektywnego modelu, w którym korelacje nieskończonego rzędu zostaną uwzględnione w przybliżeniu Hartree-Focka. W ten sposób nieskończona hierarchia równań zostaje obcięta na poziomie dwucząstkowym. Tak wyprowadzony efektywny hamiltonian może stanowić bazę do uwzględnienia efektów wyższych rzędów oraz ewentualnego włączenia do rachunków innych, dodatkowych zaburzeń.

Należy przy tym wspomnieć, że podobne podejście znane jest bardzo dobrze w literaturze [22, 23, 27, 28], przy czym bardzo często problem ten stawia się w postaci gotowego, efektywnego hamiltonianu ekscytonowego, do którego dopisuje się zaburzenie w postaci np. oddziaływania ekscyton-fonon. Poniższe wyprowadzenie stanowi uzasadnienie dla stawiania problemu właśnie w ten sposób. Rzutowanie na dwucząstkową podprzestrzeń w przestrzeni Focka zostanie dokonane na poziomie średnich termodynamicznych (funkcji korelacji). Pozwala to w podobny sposób traktować układy o niedużej koncentracji swobodnych nośników jak i silnie wzbudzone struktury.

W układzie opisanym przez hamiltonian (2.5) identyfikujemy funkcję falową ekscytonu z termodynamiczną funkcją korelacji [29]

$$\begin{aligned}
 -P(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \tau', \tau) &= \left\langle T \left( a_{c, \mathbf{k}'_1}^\dagger(\tau') a_{v, \mathbf{k}'_2}(\tau') a_{v, \mathbf{k}_2}^\dagger(\tau) a_{c, \mathbf{k}_1}(\tau) \right) \right\rangle = \quad (2.6) \\
 &\equiv \left\langle T \left( a^\dagger(1', \tau') a(2', \tau') a^\dagger(2, \tau) a(1, \tau) \right) \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Operator  $a_{\mathbf{k}_\nu}^\dagger(\tau)$  oznacza operator kreacji elektronu w paśmie walencyjnym ( $\nu = 1$ ) lub przewodnictwa ( $\nu = 2$ ) zależy od  $\tau \in \langle 0, \beta \rangle$ , gdzie  $\beta = 1/kT$ , które parametryzuje urojony czas.  $T$  jest operatorem uporządkowania chronologicznego,  $t = -i\tau$ , a  $\langle \dots \rangle$  jest średnią termodynamiczną w wielkim zespole kanonicznym. Energia liczona jest względem potencjału chemicznego i w związku z tym potencjał chemiczny nie występuje jawnie we wzorach na średnie. Ewolucja czasowa  $a_{\mathbf{k}_\nu}(\tau)$  zadana jest przez hamiltonian (2.5) zgodnie z reprezentacją Heisenberga  $a(\tau) = e^{H\tau} a e^{-H\tau}$ . Dla uproszczenia zastosowany zostanie w poniższych wzorach zapis, w którym symbol (1) będzie oznaczał zmienne w paśmie walencyjnym natomiast (2) zmienne w paśmie przewodnictwa oraz w każdym przypadku odpowiedni czas. Wprowadźmy także operator kreacji

pary elektron dziura zdefiniowany następująco

$$A_H^\dagger(1'2', \tau') = a^\dagger(2', \tau')a(1', \tau') \quad (2.7)$$

oraz odpowiedni operator anihilacji

$$A_H(1'2', \tau') = a^\dagger(1', \tau')a(2', \tau') \quad (2.8)$$

Dolny indeks H został dodany, by podkreślić, że operatory powyższe zapisane są w obrazie Heisenberga. Stosując taką definicję otrzymujemy

$$- P(1'2', \tau'; 12, \tau) = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H} \mathbf{T} A_H(1'2', \tau') A_H^\dagger(12, \tau) \right\} = \quad (2.9)$$

$$= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ \mathbf{T} e^{-\beta H} e^{\tau H} A(1'2', \tau') e^{(\tau' - \tau) H} A^\dagger(12, \tau) e^{-\tau H} \right\}, \quad (2.10)$$

gdzie  $Z$  oznacza sumę statystyczną.

$$Z = \text{Tr} \left\{ \mathbf{T} e^{-\beta H} \right\}. \quad (2.11)$$

Do tej pory rozważania miały dosyć ogólny charakter. Jednak obliczenie propagatora  $P(1'2', \tau'; 12, \tau)$  w ogólnym przypadku, bez zastosowania dalszych uproszczeń i przybliżeń jest praktycznie niemożliwe. Przyjrzyjmy się więc bliżej części opisującej podukład jonów oraz wpływowi na funkcję korelacji ekscytonu. Drgania sieci reprezentowane są przez fonony opisane za pomocą operatorów kreacji i anihilacji  $b_{\mathbf{q}}^\dagger, b_{\mathbf{q}}$ .

Przedstawmy ślad po zmiennych fononowych w reprezentacji fononowych stanów koherentnych operatorów anihilacji fononów, tzn. stanów spełniających równanie [30]

$$\hat{b}_{\mathbf{q}} |b_{\mathbf{q}}\rangle = b_{\mathbf{q}} |b_{\mathbf{q}}\rangle \quad (2.12)$$

unormowanych tak, że  $\langle b_{\mathbf{q}} | b_{\mathbf{q}} \rangle = e^{b_{\mathbf{q}}^* b_{\mathbf{q}}}$ . Wyrażenie na  $P$  przybiera postać

$$- P(1'2', \tau'; 12, \tau) = \frac{1}{Z} \left\{ \int \prod_{\mathbf{q}} \left( \frac{db_{\mathbf{q}}^* db_{\mathbf{q}}}{2\pi i} e^{\sum_{\mathbf{q}} -b_{\mathbf{q}}^* b_{\mathbf{q}}} \right) \times \right. \quad (2.13)$$

$$\left. \times \left\langle b_{\mathbf{q}_1} \dots \left| \text{Tr}_{el} \left\{ \mathbf{T} \left[ e^{\tau' H} A(1'2', \tau') e^{(\tau' - \tau) H} A^\dagger(12, \tau) e^{-\tau H} \right] \right\} \right| b_{\mathbf{q}_1} \dots \right\rangle \right\},$$

gdzie  $\text{Tr}_{el}$  oznacza operację śladu ze względu na zmienne elektronowe.

W dalszych rachunkach wykorzystam metodę całek funkcjonalnych. Jest to bardzo często stosowany środek przy wyprowadzaniu przybliżeń oraz ogólnych wzorów perturbacyjnych. W opisywanym tutaj przypadku zastosowanie reprezentacji stanów koherentnych wraz z całkowaniem funkcjonalnym daje przejrzysty obraz i pozwala na dobrą kontrolę przybliżeń. Przedział  $[0, \beta]$  zostanie podzielony na  $N$  podprzedziałów w punktach  $\tau_j = j\beta/N$ , gdzie  $j = 0, \dots, N$  a w każdym z tych punktów zostanie wstawiona reprezentacja operatora jednostkowego w postaci

$$1 = \int \prod_{\mathbf{q}} \left( \frac{db_{\mathbf{q}}^*(\tau_j) db_{\mathbf{q}}(\tau_j)}{2\pi i} \right) e^{-\sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^*(\tau_j) b_{\mathbf{q}}(\tau_j)} |b_{\mathbf{q}_1}(\tau_j) b_{\mathbf{q}_2}(\tau_j) \dots\rangle \langle b_{\mathbf{q}_1}(\tau_j) b_{\mathbf{q}_2}(\tau_j) \dots|. \quad (2.14)$$

Przy przejściu do granicy z  $N \rightarrow \infty$  i przy zastosowaniu standardowej notacji całek funkcjonalnych wzór na propagator elektron-dziura przybiera postać [30]

$$\begin{aligned} -P(1'2', \tau'; 12, \tau) &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D} [b_{\mathbf{q}}^*(\tau_j) b_{\mathbf{q}}(\tau_j)] \exp \left[ -\int_0^{\beta} d\tau'' \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^*(\tau'') \frac{\partial}{\partial \tau''} b_{\mathbf{q}}(\tau'') + H_{jony} \right] \\ &\times \text{Tr}_{el} \left\{ \text{T exp} \left[ -\int_0^{\beta} d\tau'' (H_{el} + H_{el-jon}(b_{\mathbf{q}}^*(\tau''), b_{\mathbf{q}}(\tau''))) \right] A(1'2'\tau') A^\dagger(12\tau) \right\}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

przy założeniu okresowych warunków brzegowych  $b_{\mathbf{q}}^*(\beta) = b_{\mathbf{q}}^*(0)$ . Na obecnym etapie wygodnie będzie wprowadzić dwucząstkową funkcję Greena zdefiniowaną w następujący sposób

$$-\mathcal{G}(1'2', 12, \tau'\tau, [b_{\mathbf{q}}^* b_{\mathbf{q}}]) = \frac{\text{Tr}_{el} \left\{ \text{T exp} \left[ -\int_0^{\beta} d\tau'' (H_{el} + H_{el-jon}) \right] A(1'2') A^\dagger(12) \right\}}{\text{Tr}_{el} \left\{ \exp \left[ -\int_0^{\beta} d\tau'' (H_{el} + H_{el-jon}) \right] \right\}}. \quad (2.16)$$



Funkcja ta odpowiada wzbudzeniom pary cząstka-dziura poruszającej się w klasycznym, zależnym od czasu potencjale pochodzącym od deformacji sieci krystalicznej i reprezentującym konkretną realizację potencjału. Zależy ona funkcjonalnie od wartości klasycznych zmiennych zespolonych  $b_q^*(\tau)$   $b_q(\tau)$ .

Wprowadźmy efektywne działanie fononowe zdefiniowane następująco

$$S_{fon} = \int_0^\beta d\tau'' \left( \sum_q b_q^*(d\tau'') \partial_{\tau''} b_q(\tau'') + H_{jony}(b^*, b) \right) + \quad (2.17)$$

$$- \ln \left[ \frac{\text{Tr}_{el} \left\{ \text{T} e^{-\int_0^\beta d\tau'' (H_{el} + H_{el-jony})} \right\}}{\text{Tr}_{el} e^{-\beta H_{el}}} \right].$$

Druga część  $S_{fon}$  opisuje wpływ podukładu elektronów na ruch jonów w analogii do standardowego przybliżenia adiabaticznego. W ten sposób funkcja ekscytonu (2.6) została wyrażona przez całkę funkcjonalną po różnych realizacjach potencjału fluktuującego powstałego na skutek wychylenia jonów z położenia równowagi z wagą związaną z funkcją działania  $S_{fon}$  dla konkretnego potencjału.

$$P(1', 2', \tau'; 1, 2, \tau) = \frac{1}{Z'} \int \mathcal{D} [b_q^*(j) b_q(j)] e^{-S_{fon}[b_q^* b_q]} \mathcal{G}(1'2', 12, \tau'\tau, [b_q^* b_q]) \quad (2.18)$$

Symbol  $Z' = Z/\text{Tr}_{el} e^{-\beta H_{el}}$  we wzorze (2.18) oznacza zmodyfikowaną sumę statystyczną. Wziąwszy pod uwagę modyfikację stałych siłowych wywołaną obecnością elektronów pasmowych efektywny hamiltonian fononowy możemy wybrać w przybliżeniu harmonicznym  $H_{fon} = \sum_q \hbar\omega_q (b_q^\dagger b_q + 1/2)$ . Nie przy każdym wyborze reprezentacji stanów koherentnych będzie on diagonalny, jednak możemy zawsze wybrać z nich taką, która diagonalizuje  $H_{fon}$  i w niej przeprowadzić wszystkie rachunki. Wzór ten stanowi punkt wyjścia do wprowadzenia efektywnego hamiltonianu ekscytonowego w obecności fononów.

Powyższe rozważania stanowią uogólnienie przybliżenia adiabaticznego. Polega ono na tym, że obydwa podukłady: jonów sieci krystalicznej oraz gaz elektronowy w inny sposób reagują na

zaburzenie. Ruch ciężkich jąder atomowych jest w porównaniu do ruchu elektronów bardzo wolny i dlatego, gdy jony zostaną wychylone z położenia równowagi, elektrony zdążą dostosować się do nowego rozkładu ładunków nie zmieniając jednocześnie położenia jonów.

### 2.1.3 Równania ruchu na funkcję Greena

Różniczkując po czasie funkcję  $\mathcal{G}$  ze wzoru (2.16) oraz korzystając z równań Heisenberga otrzymujemy

$$-\frac{\partial \mathcal{G}(1'2', 12, \tau' \tau)}{\partial \tau'} = \frac{1}{Z_{el}} \text{Tr}_{el} \left\{ \text{T} \left[ e^{-\int_0^\beta d\tau'' (H_{el} + H_{el-jon})} [H, A(1'2' \tau') A^\dagger(12 \tau)] \right] \right\} + \quad (2.19)$$

$$+\delta(\tau - \tau') \frac{1}{Z_{el}} \text{Tr}_{el} \left\{ \text{T} \left[ e^{-\int_0^\beta d\tau'' (H_{el} + H_{el-jon})} [A(1'2' \tau'), A^\dagger(12 \tau)] \right] \right\}. \quad (2.20)$$

Równoczesowy komutator operatorów  $A$  (dla  $\tau' = \tau$ ) wynosi

$$[A(1'2'), A^\dagger(12)] = \delta_{k_2 k'_2} a_{k'_1}^\dagger a_{k_1} - \delta_{k_1 k'_1} a_{k_2}^\dagger a_{k'_2}. \quad (2.21)$$

Gdyby wartość oczekiwana tego komutatora zniknęła dla różnych stanów i wynosiła 1 dla tych samych mielibyśmy do czynienia ze zwykłymi bozonowymi relacjami komutacji. Jednak, jak widać z powyższego wzoru, wartości te czasem odbiegają od tego, czego byśmy chcieli.

W granicy niewielkich koncentracji możemy jednak zastąpić operatory  $a_{k'_1}^\dagger a_{k_1}$  oraz  $a_{k_2}^\dagger a_{k'_2}$  przez ich wartości oczekiwane, co daje w przybliżeniu

$$[A(1'2'), A^\dagger(12)] = \delta_{k_2 k'_2} \delta_{k_1 k'_1}. \quad (2.22)$$

Gdy koncentracja jest nieduża wzbudzone pary „nie widzą” się nawzajem i pomijalna jest fermionowa natura cząstek, które wchodzi w ich skład. Wraz ze wzrostem koncentracji (i w konsekwencji potencjałów chemicznych) cząstki, które mają fermionową naturę, obsadzają coraz wyższe stany. Energia kinetyczna staje się w ich przypadku czynnikiem dominującym w stosunku do

energii potencjalnej oddziaływania i mamy wtedy do czynienia z cieczą elektronowo-dziurową (patrz np. [23]).

Bozonowe relacje komutacji (2.22) są bardzo wygodne dlatego też w sprzyjających warunkach, gdy tylko jest to możliwe, stosowane jest przybliżenie (2.22). Dyskusję zaczniemy od takiej sytuacji, w której mamy całkowicie wypełnione pasmo walencyjne oraz puste pasmo przewodnictwa. Mamy wtedy do czynienia z „czystymi” ekscytonami oddziałującymi z drganiami sieci. Następnie rozważymy przypadek silnie wzbudzony, gdzie związane stany ekscytonowe przestają istnieć. Mamy wtedy do czynienia raczej z plazmą elektronowo-dziurową zamiast gazu ekscytonowego.

Stosując przybliżenie małej gęstości gazu elektronowego oraz linearyzując równanie (2.19) ze względu na  $\mathcal{G}$  oraz  $b_q^*$  i  $b_q$  otrzymujemy następujący wynik

$$-\frac{\partial \mathcal{G}(1'2', 12, \tau' \tau)}{\partial \tau'} = \delta(\tau' - \tau) \delta(1' - 1) \delta(2' - 2) + \int d1'' d2'' H_x(1'2'; 1''2'', \tau'') \mathcal{G}(1''2''; 12, \tau' \tau), \quad (2.23)$$

gdzie przez  $H_x$  oznaczony został operator efektywnego hamiltonianu ekscytonowego działający w przestrzeni dwucząstkowej

$$\begin{aligned} H_x(1'2'; 1''2'', \tau'') &= H_{el}(2'2'') \delta(1' - 1'') + H_{dz}(1'1'') \delta(2' - 2'') + U(1'2'; 1''2'') + \\ &+ H_{el-fon}(2'2'', \tau'') \delta(1' - 1'') + H_{dz-fon}(1'1'', \tau'') \delta(2' - 2''). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Wyrazy  $H_{el}$  — część elektronowa,  $H_{dz}$  — część dziurowa oraz  $U$  — coulombowskie sprzężenie elektron-dziura stanowią hamiltonian swobodnego ekscytonu,  $H_x^0 = H_{el} + H_{dz} + U$ , natomiast pozostałe dwa,  $H_{el-fon} + H_{dz-fon} = H_{x-fon}$ , opisują oddziaływanie ekscytonu z polem wytworzonym przez jony. Tak więc propagator  $P$  może zostać zapisany w przybliżeniu w następującej postaci

$$P(1'2', 12) = \frac{1}{Z'} \int \mathcal{D} [b_q^*(j) b_q(j)] e^{-S_{fon}[b_q^* b_q]} \mathbf{T} e^{-\int_{\tau'}^{\tau} d\tau'' H_x(\tau'')}. \quad (2.25)$$

Po prawej stronie równania występuje funkcja wykładnicza od macierzy dwucząstkowego operatora  $H_x(\tau'')$ . Aby przeprowadzić rachunek zaburzeń przedstawiamy efektywny hamiltonian ekscytonowy w formie  $H_x = H_x^0 + H_{x-fon}(b^*, b)$ . Korzystając z tego możemy zdefiniować niez-

burzoną funkcję Greena ekscytonu w idealnej sieci jako rozwiązanie równania

$$-\partial_{\tau'} \mathcal{G}_0(1'2'; 12, \tau' \tau) = \delta(\tau' - \tau) \delta(1' - 1) \delta(2' - 2) + \int d1'' d2'' H_x^0(1'2'; 1''2'', \tau'') \mathcal{G}_0(1''2''; 12, \tau'' \tau). \quad (2.26)$$

Za pomocą tej funkcji możemy zapisać równanie na funkcję ekscytonową uwzględniającą oddziaływanie z siecią krystaliczną w formie

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(1'2'; 12, \tau' \tau) &= \mathcal{G}_0(1'2'; 12, \tau' \tau) + \\ + \int_0^\beta d\tau''' \int d1'' d1''' d2'' d2''' \mathcal{G}_0(1'2'; 1''2'') H_{x-fon}(1''2''; 1'''2''', \tau''') \mathcal{G}(1'''2''' ; 12, \tau''' \tau). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Równanie (2.27) może stanowić podstawę rozwinięcia perturbacyjnego względem zaleźnego od czasu oddziaływania z drganiami sieci  $H_{x-fon}$  [20].

Na komentarz zasługują pewne własności dwuczasowej funkcji korelacji  $P$ . Można podzielić ją na dwie części (tzw. część  $P^<$  oraz  $P^>$  odpowiadające różnym uporządkowaniom operatorów kreacji i anihilacji)

$$P(\tau', \tau) = \Theta(\tau' - \tau) P^>(\tau', \tau) + \Theta(\tau - \tau') P^<(\tau', \tau), \quad (2.28)$$

przy czym  $P^>$  istnieje tylko dla  $0 < \tau' - \tau < \beta$  natomiast  $P^<$  dla  $0 < \tau - \tau' < \beta$ . Korzystając z cykliczności śladu można pokazać, że

$$P^>(\tau', \tau) = P^<(\tau', \tau + \beta) = P^<(\tau' - \beta, \tau). \quad (2.29)$$

Możemy więc rozszerzyć definicję  $P$  na dowolne wartości argumentów  $\tau, \tau'$  definiując ją na zewnątrz przedziału określoności jako funkcję periodyczną. Własności powyższe są charakterystyczne dla bozonowych funkcji korelacji, przez co naszym wzbudzeniom możemy przypisać bozonowe własności. Biorąc pod uwagę cykliczność amplitud bozonowych otrzymujemy warunek periodyczności dla ekscytonowej funkcji Greena  $\mathcal{G}(\tau' + \beta, \tau) = \mathcal{G}(\tau', \tau)$  Takie własności funkcji Greena pozwalają także na stosowanie standardowych metod formalizmu dla temperatur skończonych (np. matsubarowskich sum po częstościach [20]).

## 2.2 Jednocząstkowa funkcja korelacji w przybliżeniu kumulantowym

Rozwinięcie kumulantowe jest dobrze znaną metodą klasycznej fizyki statystycznej oraz teorii prawdopodobieństwa. W mechanice kwantowej metoda ta jest nieco rzadziej używana ze względu na komplikacje rachunkowe. Tym niemniej stosowano ją do rachunków perturbacyjnych mających na celu uwzględnienie efektów wielociałowych oraz korelacji w kwantowej fizyce statystycznej. Znalazła zastosowanie np. do problemu polaronu [31], wyznaczenia satelitów plazmonowych w metalach [32], czy zagadnieniach związanych z transportem w układach kwantowych [33, 34, 35].

W podrozdziale 2.1.3 wyprowadzony został efektywny hamiltonian opisujący ruch elektronów w zewnętrznym, zaburzającym potencjale. Zdefiniowany został także propagator pary cząstka-dziura. Poniżej zajmę się przedstawieniem jednego ze sposobów obliczenia funkcji korelacji korzystając z przybliżenia kumulantowego. W celu zilustrowania metody rozwinięcia kumulantowego ograniczę się do jednocząstkowej funkcji Greena. Struktura równań ruchu na dwucząstkową funkcję korelacji pozwala na proste uogólnienie tych wzorów także na funkcję dwucząstkową.

### 2.2.1 Rozwinięcie kumulantowe funkcji Greena

Jednocząstkowe funkcje korelacji są dobrze znane w fizyce wielu ciał. Metody konstrukcji równań ruchu dla funkcji Greena stanowią standardowe procedury fizyki wielu cząstek (patrz np. [29, 30, 20, 36]). Poza nielicznymi przypadkami ściśle rozwiązywalnych modeli mamy do czynienia z równaniami, w których należy zastosować jakąś metodę pozwalającą na uzyskanie rozwiązania przybliżonego. Metodą taką stanowi rozwinięcie kumulantowe.

Równanie ruchu dla jednocząstkowej funkcji Greena dla czasów rzeczywistych można formalnie zapisać za pomocą tzw. funkcji energii własnej  $\Sigma_{\mathbf{k}}(t - t')$  [37]

$$i \frac{\partial G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t)}{\partial t} = \delta(t) + \epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t) + \int_0^t \Sigma_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t - t') G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t'), \quad (2.30)$$

gdzie  $\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}}$  oznacza energię stanu jednocząstkowego w przybliżeniu Hartree-Focka. Funkcja  $\Sigma$  jest nielokalna w czasie i ogólnie prowadzi do renormalizacji widma wzbudzeń jednocząstkowych, co manifestuje się przez przesunięcie i poszerzenie linii widmowych.

Zwykle w układzie wielocząstkowym wzbudzenia jednocząstkowe charakteryzowane są przez wyraźnie odcinające się maksima w funkcji gęstości spektralnej. Odpowiadają one kwazicząstkom o charakterystycznej energii oraz czasie życia. Położenie maksimum określa energię, natomiast jego szerokość związana jest z odwrotnością czasu życia. W wyprowadzeniu przybliżonego wzoru na funkcję Greena istotne będą pewne ogólne własności jakie spełnia funkcja korelacji będąca rozwiązaniem równania (2.30).

Wzbudzenia jednocząstkowe o pędzie  $\mathbf{k}$  i energii  $\omega$  opisuje funkcja gęstości spektralnej zdefiniowanej następująco

$$A_{\mathbf{k}}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{\mathbf{k}}(\omega)]. \quad (2.31)$$

Charakterystyczna zależność od czasu funkcji Greena zdeterminowana obecnością wzbudzenia kwazicząstkowego dana jest przez [29]

$$iG_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t) = \Theta(t)Z_{\mathbf{k}}e^{S_{\mathbf{k}}(t)} \approx \Theta(t)Z_{\mathbf{k}}e^{-i(\epsilon_{\mathbf{k}}+\Gamma_{\mathbf{k}})t}. \quad (2.32)$$

Jest to szybko oscylująca funkcja czasu, ze stałą zaniku  $\Gamma$ . Własność tę możemy wykorzystać w rachunku perturbacyjnym. W tym celu zdefiniujemy następujące funkcje pomocnicze

$$\tilde{\Sigma}_{\mathbf{k}}(t) = e^{i\epsilon_{\mathbf{k}}t} \left( (\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}})\delta(t) + \Sigma_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t) \right), \quad (2.33)$$

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}}(t) = e^{i\epsilon_{\mathbf{k}}t} G_{\mathbf{k}}(t). \quad (2.34)$$

Wtedy równanie (2.30) przyjmuje postać

$$i \frac{\partial \tilde{G}_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t)}{\partial t} = \delta(t) + \int_0^{t^+} \tilde{\Sigma}_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t-t') \tilde{G}_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t'). \quad (2.35)$$

Rozwiązanie tego równania formalnie reprezentowane jest w postaci szeregu perturbacyjnego

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}}(t) = \Theta(t) \text{T exp} \left( -i \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' \tilde{\Sigma}(\tau - \tau') \right), \quad (2.36)$$

Funkcja  $\text{T exp}(\dots)$  jest standardowo określona jako szereg potęgowy, w którym przyjęliśmy następującą definicję  $n$ -tej potęgi uporządkowanej chronologicznie za pomocą operatora  $\text{T}$

$$\begin{aligned} & \text{T} \left[ -i \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' \tilde{\Sigma}(\tau - \tau') \right]^n = \\ & = (-i)^n \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau'_1 \dots \int_0^{\tau'_n} d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau'_n \tilde{\Sigma}(\tau_1 - \tau'_1) \tilde{\Sigma}(\tau_2 - \tau'_2) \dots \tilde{\Sigma}(\tau_n - \tau'_n). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Rozwijając logarytm  $\tilde{G}_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t)$  dla dodatnich czasów w szereg potęgowy względem  $\tilde{\Sigma}$  otrzymujemy wyrażenie

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}}(t) = \Theta(t) \exp \left( \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{C_n}{n!} \right), \quad (2.38)$$

w którym  $C_n$  oznacza kumulant rzędu  $n$ , co można zapisać schematycznie w następujący sposób [37], [38]

$$C_n = \left\langle \left\langle \text{T} \left[ -i \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \tilde{\Sigma}_{\mathbf{k}}(t' - t'') \right]^{(n)} \right\rangle \right\rangle. \quad (2.39)$$

Średnia kumulantowa oznaczona jest symbolem  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ . Podobnie jak w klasycznej teorii prawdopodobieństwa średnią kumulantową można wyrazić przez kombinację momentów rzędu nie wyższego niż rząd danego kumulantu [38]. Na przykład kumulant pierwszego rzędu przedstawić

można jako

$$\left\langle\left\langle \left[ \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \tilde{\Sigma}_{\mathbf{k}}(t' - t'') \right]^{(1)} \right\rangle\right\rangle = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \tilde{\Sigma}_{\mathbf{k}}(t' - t''). \quad (2.40)$$

Powyższe przedstawienie pozwala na systematyczne rozwinięcie zespolonej fazy funkcji  $\tilde{G}_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t)$  w szereg potęgowy względem sprzężenia z fononami. W tej pracy ograniczę się do najniższego rzędu danego wzorem (2.40). Zgodnie z tym wzór na funkcję  $G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t)$  przyjmuje następującą postać

$$G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t) \approx \Theta(t) e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} t} \exp \left[ \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \tilde{\Sigma}_{\mathbf{k}}^{(2)}(t' - t'') \right] = \Theta(t) e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} t} e^{S_{\mathbf{k}}(t)}, \quad (2.41)$$

gdzie  $\Sigma^{(2)}$  jest obliczona w najniższym, tzn. drugim rzędzie względem oddziaływania elektron-fonon.

Funkcja  $G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t)$  została przedstawiona jako iloczyn dwóch funkcji wykładniczych. Pierwsza z nich jest odpowiedzialna za położenie linii, a druga nadaje jej odpowiedni kształt i ewentualnie modyfikuje położenie. Postać ta stanowi bardzo wygodną reprezentację funkcji Greena. Oddzielamy w ten sposób efekty związane z polem średnim i korelacją elektronów w gazie elektronowym.

Czynnik fazowy  $S_{\mathbf{k}}(t)$  występujący we wzorze (2.41) wygodnie jest wyrazić za pomocą gęstości spektralnej funkcji energii własnej równej  $-\frac{1}{\pi} \text{Im} \Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(\omega)$ . Otrzymujemy wtedy

$$S_{\mathbf{k}}(t) = \int_0^{+\infty} d\omega \left( -\frac{1}{\pi} \right) \frac{-1 + i(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta)t + e^{-i(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta)t}}{(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta)^2} \text{Im} \Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(\omega), \quad (2.42)$$

gdzie  $\eta \rightarrow^+$  jest dodatnim czynnikiem uzbieżniającym dążącym do zera. W granicy bardzo dużych czasów można pominąć człon oscylujący w wyrażeniu pod całką. Korzystając z relacji Kramersa-



Kroniga dla funkcji energii własnej

$$\text{Re}\Sigma_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\omega) = \Sigma^{\delta} + \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{(-\frac{1}{\pi})\text{Im}\Sigma_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\omega')}{\omega - \omega'}, \quad (2.43)$$

gdzie  $\Sigma^{\delta}$  oznacza bezdyspersyjną, czyli niezależną od częstości część energii własnej, otrzymujemy w granicy bardzo dużych czasów

$$G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t) \approx \Theta(t)e^{-(i\epsilon_{\mathbf{k}} - \Gamma_{\mathbf{k}})t} e^{-(n_{\mathbf{k}} + i\alpha_{\mathbf{k}})}, \quad (2.44)$$

gdzie

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} + \text{Re}\Sigma_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\omega = \epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (2.45)$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = -\text{Im}\Sigma_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\omega = \epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (2.46)$$

$$n_{\mathbf{k}} = -\left. \frac{\partial \text{Re}\Sigma_{\mathbf{k}}^{\text{R}}}{\partial \omega} \right|_{\omega = E_{\mathbf{k}}} \quad (2.47)$$

$$\alpha_{\mathbf{k}} = -\left. \frac{\partial \text{Im}\Sigma_{\mathbf{k}}^{\text{R}}}{\partial \omega} \right|_{\omega = \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2.48)$$

Część rzeczywista  $\Sigma_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon_{\mathbf{k}})$  jest równa renormalizacji energii kwazicząstki względem przybliżenia Hartree-Focka, a  $\Gamma_{\mathbf{k}}$  jest stałą zaniku. Stały czynnik zespolony  $e^{-n_{\mathbf{k}} + i\alpha}$  prowadzi do renormalizacji natężenia linii kwazicząstki oraz powoduje asymetrię w postaci krzywej Fano.

Wzory (2.45)-(2.48) odtwarzają kwazicząstkowy charakter wzbudzeń, a poszczególne parametry pokazują korespondencję z innymi rachunkami perturbacyjnymi [20].

W celu wyznaczenia pełnej funkcji gęstości spektralnej musimy obliczyć działanie zdefiniowane wzorem (2.42). Zgodnie z zastosowanym przybliżeniem kumulantowym drugiego rzędu względem zaburzenia wielkość ta jest bezpośrednio związana z częścią urojoną retardowanej energii własnej. Poszukiwana gęstość spektralna będzie częścią urojoną następującej transformaty

Fouriera

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \text{Im} \int_0^{+\infty} dt \frac{i}{\pi} e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} t} e^{i\omega t} e^{S_{\mathbf{k}}(t)}. \quad (2.49)$$

Funkcja ta określa gęstość prawdopodobieństwa znalezienia się kwazicząstki o określonym kwazipędzie  $\mathbf{k}$  w przedziale energii  $(\omega, \omega + d\omega)$ . W przypadku absorpcji ekscytonowej interesowała nas będzie głównie gęstość spektralna dla  $\mathbf{k} = 0$  co związane jest z tym, że przejścia ekscytonowe są przejściami prostymi (pęd niesiony przez foton jest bardzo mały). Z uwagi na własność (2.50) może być ona traktowana jako gęstość rozkładu prawdopodobieństwa z funkcją tworzącą  $S(t)$ .

Stosowane przeze mnie przybliżenie (2.42), w którym  $S(0) = 0$ , spełnia regułę sum dla jednocząstkowej gęstości stanów, tzn.:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A_{\mathbf{k}}(\omega) = 1. \quad (2.50)$$

Reguła ta gwarantuje zachowanie liczby cząstek w układzie.

Postać funkcji tworzącej danej wzorem (2.42) jest charakterystyczna dla tzw. nieskończenie podzielnych rozkładów prawdopodobieństwa [39]. Gwarantuje nam to między innymi, że dopóki  $-\text{Im} \sum^{\text{R}}(\mathbf{k}, \omega)$  jest nieujemna, odpowiadająca jej funkcja  $A_{\mathbf{k}}(\omega)$  będzie również nieujemna.

Własności tej nie posiada przybliżony wynik (2.44). Czynniki renormalizacyjny  $Z_{\mathbf{k}} = e^{-n_{\mathbf{k}}}$  określa amplitudę głównego wzbudzenia kwazicząstkowego. Widać to, jeśli przyjrzymy się postaci transformaty Fouriera asymptotycznego przybliżenia  $G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(t)$ .

$$G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\omega) \approx \underbrace{\frac{e^{-n_{\mathbf{k}}}}{(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})^2 + \Gamma^2}}_{\text{lorencjan}} \times \underbrace{[\sin(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})\alpha_{\mathbf{k}} - \Gamma \cos \alpha_{\mathbf{k}} + i(\cos(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})\alpha_{\mathbf{k}} + \Gamma \sin \alpha_{\mathbf{k}})]}_{\text{czynnik modyfikujący}}. \quad (2.51)$$

Wyrażenie w nawiasie kwadratowym jest odpowiedzialne za zmodyfikowanie lorentzowskiego kształtu i powoduje, że funkcja gęstości spektralnej przyjmuje w tym przybliżeniu postać krzywej

Fano. Ze względu na charakter przybliżenia jego dokładność zmniejsza się w miarę oddalania się od głównego maksimum kwazicząstkowego i w dużej odległości funkcja gęstości spektralnej może nawet zmienić znak, co jest niefizycznym rezultatem.

Pozostała część gęstości spektralnej odpowiada tzw. widmu niekoherentnemu, którego proste przybliżenie nie jest w stanie odtworzyć. Za powstanie tej części odpowiedzialny jest czynnik oscylujący w wyrażeniu pod całką (2.42). Wydzielmy we wzorze (2.41) część asymptotyczną i obliczmy transformatę Fouriera

$$G_{\mathbf{k}}^R(\omega) = \int_0^{+\infty} dt e^{i(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + i\Gamma_{\mathbf{k}})t - (n_{\mathbf{k}} + i\alpha_{\mathbf{k}})t} \exp \left[ \int_0^{+\infty} d\omega' \left( \frac{-1}{\pi} \right) \frac{e^{-i(\omega' - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta)t}}{(\omega' - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta)^2} \text{Im}\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(\omega') \right]. \quad (2.52)$$

Możemy teraz rozwinąć w szereg Taylora względem potęg energii własnej część niekoherentną (wyrażenie w nawiasie kwadratowym). Wyraz ten dla małej stałej sprzężenia jest bliski jedności i modyfikuje jedynie maksimum kwazicząstkowe. Oznaczając przez  $G_{\mathbf{k}}^{(\text{FANO})}(t)$  asymptotyczną zależność czasową otrzymujemy

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}}^R(\omega) = & \int_0^{+\infty} dt G_{\mathbf{k}}^{(\text{FANO})}(t) e^{i\omega t} \left( 1 + \right. \\ & + \int_0^{+\infty} d\omega' \left( \frac{-1}{\pi} \right) \frac{e^{-i(\omega' - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta)t}}{(\omega' - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta)^2} \text{Im}\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(\omega') + \\ & + \int_0^{+\infty} d\omega' \int_0^{+\infty} d\omega'' \left( \frac{-1}{\pi} \right)^2 \frac{e^{-i(\omega' - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta)t} e^{-i(\omega'' - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta'')t}}{(\omega' - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta)^2 (\omega'' - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta'')^2} \text{Im}\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(\omega') \text{Im}\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(\omega'') + \\ & \left. + \int_0^{+\infty} d\omega' \int_0^{+\infty} d\omega'' \int_0^{+\infty} d\omega''' \dots + \right) \end{aligned} \quad (2.53)$$

W powyższym wzorze widać wyraźnie jak powstają kolejne repliki fononowe. Każdy wyraz w rozwinięciu daje wkład do powstania splotu krzywej Fano z wielokrotną całką odpowiadającą za wielofononowe procesy. Część urojona funkcji energii własnej w przypadku oddziaływania z fononami optycznymi podłużnymi jest skupiona w pobliżu energii  $\omega = \pm\omega_0$ , gdzie  $\omega_0$  jest częstotliwością fononu i jeśli w pierwszym przybliżeniu zamienimy ostre minima na delty Diraca, to możemy z łatwością wykonać wszystkie wielokrotne całki w szeregu (2.53). Otrzymamy w ten sposób w funkcji gęstości spektralnej kolejne linie będące odbiciem głównego maksimum kwazicząstkowego, mające mniejsze natężenie oraz odległe od głównej linii o wielokrotność energii  $\omega_0$ . W rzeczywistości  $\text{Im}\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(\omega)$  posiada rozmycie wartości wokół charakterystycznych energii, co powoduje modyfikacje kształtu replik fononowych. Tak w uproszczeniu wygląda mechanizm powstawania tzw. satelit odległych o wielokrotność energii wzbudzeń od głównej linii w funkcji gęstości spektralnej [32].

Z powyższych rozważań widać, że rozwinięcie kumulantowe jest bardzo wygodną metodą prowadzenia rachunków perturbacyjnych. Kolejny rozdział będzie stanowił przykład zastosowania tejże metody do wyznaczenia kształtu krawędzi absorpcji w półprzewodnikach.

## Rozdział 3

# Wpływ fononów LO na kształt i położenie linii spektralnej ekscytonu

### 3.1 Krawędź absorpcji — reguła Urbacha

Kształt krawędzi absorpcji widmowej w półprzewodnikach ma bardzo interesujące z fizycznego punktu widzenia cechy. Wynika to stąd, że na tworzenie się krawędzi może mieć wpływ wiele różnych zjawisk fizycznych. Z tego powodu jednym z celów jakie stawia się teoriiom opisu zjawisk optycznych w półprzewodnikach jest prawidłowe odtworzenie krawędzi absorpcji.

Dla nieskończonego czasu życia cząstek krawędź jest ostra i przykładowo w najprostszym, jednocząstkowym modelu bez oddziaływań ma pierwiastkową zależność od energii. Rozmycie widma w wyniku oddziaływania między cząstkami lub wywołane nieporządkiem prowadzi do poszerzenia krawędzi. Najprostsze przybliżenia kwazicząstkowe zakładają lorentzowski kształt pojedynczej linii. Odpowiada to założeniu, że najprostsza funkcja Greena dla kwazicząstki opisywana jest równaniem

$$G(t) \sim \exp(i\epsilon_{\mathbf{k}}t - \Gamma t).$$

Takie założenie, po dokonaniu transformacji Fouriera daje lorentzowski kształt linii spektralnej i w konsekwencji potęgową zależność widma absorpcji międzypasmowej w niskich energiach. Eksperymentalnie jednak gdy oddalamy się od krawędzi zauważamy znacznie szybszy zanik funkcji niż potęgowej. Wyraża to odkryta już w latach pięćdziesiątych reguła Urbacha-Mertienssena ([40]) — mówi ona o wykładniczym zaniku współczynnika absorpcji, co bezpośrednio jest związane z jed-

### ROZDZIAŁ 3. WPŁYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU

---

noczątkową funkcją gęstości spektralnej. Fenomenologiczny wzór opisujący tę regułę zwykle formułowany jest w następujący sposób

$$\alpha(\omega) = \alpha_0 \exp \left[ -\frac{\sigma(T)}{k_B T} (\omega_0 - \omega) \right], \quad (3.1)$$

gdzie  $\omega_0$  jest parametrem o wartości rzędu wielkości przerwy energetycznej,  $\sigma(T)$  jest bezwymiarowym, zależnym od temperatury parametrem określającym szybkość zaniku.

W połowie lat sześćdziesiątych Mahan [41] pokazał teoretycznie, że reguła Urbacha może zostać wyprowadzona z hamiltonianu Fröhlicha (opisującego oddziaływanie elektronu z fononami LO). Wykładniczy zanik funkcji gęstości spektralnej obliczony w tej pracy przekładał się bezpośrednio na regułę Urbacha w absorpcji optycznej. Były to pierwsze rachunki, w których liniowe oddziaływanie pomiędzy elektronami z pasma przewodnictwa a fononami optycznymi prowadziło do powstania wykładniczego charakteru zaniku gęstości spektralnej. Kolejną ważną pracą, w której reguła Urbacha została wyjaśniona na bazie oddziaływania ekscytonów z wibracjami sieci krystalicznej jest artykuł Sumi i Toyozawy [42]. Autorzy obliczyli w nim energię własną ekscytonu oddziałującego z adiabatycznymi potencjałami wibracji sieci krystalicznej, które były wzbudzone w każdym węźle sieci. W podejściu tym ekscyton rozpraszany był niezależnie przez każdą lokalną deformację sieci. W następnych latach pojawiło się wiele prac, w których używając różnych technik teoretycznych badano zanik absorpcji poniżej progu. Wśród licznych publikacji warto wymienić prace Dunna [31], Lieblera i Hauga [22], Hauga i Schmitt-Rinka [27].

W teoretycznych badaniach reguły Urbacha dużo miejsca poświęcono także nieporządkowi [43, 44, 45] i temu jak ten nieporządek wpływa na zanik zależności absorpcji od energii w pobliżu przerwy energetycznej. Wyróżnia się tu kilka obszarów, w których gęstość stanów (bezpośrednio związana z absorpcją) przechodzi od obszaru widma ciągłego poprzez zależność Halperina-Laxa ( $E^{1/2}$ ), następnie omawiany tu obszar urbachowski, aż do zaniku gaussowskiego. Przegląd stosowanych technik teoretycznych używanych do opisu tych zjawisk można znaleźć w przeglądowej pracy [46].

Zastosowanie podobnej metody do omawianej w niniejszym rozdziale można znaleźć w pracy [28], gdzie autorzy policzyli nachylenie krawędzi absorpcji w przybliżeniu kumulantowym w trzech

### ROZDZIAŁ 3. WPLYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU

---

wymiarach biorąc pod uwagę dominujące wyrazy z pierwszych dwóch rzędów rachunku zaburzeń oraz stosując przybliżenie analogiczne do przedstawionego w dodatku D. Natomiast w pracy [37] można znaleźć zastosowanie podobnych rachunków w studni kwantowej.

Korzystając ze standardowego rachunku zaburzeń (np. rozwiązując w najniższym rzędzie równanie Dysona) nie jesteśmy w stanie odtworzyć wykładniczego zaniku funkcji absorpcji. Trzeba wykonać sumowanie do nieskończonego rzędu rachunku zaburzeń, np. za pomocą rozwinięcia kumulantowego. Znalazło ono zastosowanie w fizyce wielu ciał, czego przykładem mogą być obliczenia funkcji gęstości spektralnej polaronu (elektron oddziałujący z fononami LO [31, 41, 42]) czy podobne rachunki w przypadku metali [32]. Przybliżenie kumulantowe jest bardzo specyficznym rachunkiem zaburzeń. Zastosowanie rozwinięcia do pewnego rzędu pozwala wysumować wszystkie diagramy uwzględniające korelacje tego rzędu w sposób ścisły [20, 31]. Okazuje się, że właśnie taka metoda ma szansę na odtworzenie w widmie tzw. satelitów fononowych (kolejnych linii widmowych o charakterze podobnym do linii głównej i odległych od niej o energię związaną z częstością fononową) oraz prawidłowy (wykładniczy) zanik tejże funkcji już w najniższym rzędzie rozwinięcia względem oddziaływania.

Krawędź Urbacha obserwowana jest zarówno w trójwymiarowych półprzewodnikach objętościowych jak i w strukturach kwazidwuwymiarowych. Z uwagi na podobieństwa obu przypadków będę prowadził jednocześnie rozważania zaznaczając w odpowiednich miejscach różnice i konsekwencje redukcji wymiaru układu.

## 3.2 Ekscytonowa funkcja energii własnej

Podobnie jak dla pojedynczych elektronów można wprowadzić ekscytonową funkcję Greena (2.6)(2.16). Równania ruchu dla ekscytonu mają podobną strukturę jak dla pojedynczej cząstki. Przytoczone powyżej rozwiązanie dotyczące przybliżenia kumulantowego dla funkcji Greena pojedynczej cząstki można więc uogólnić na przypadek ekscytonów.

Podobnie jak dla pojedynczych elektronów centralną wielkością w naszym rachunku jest funkcja energii własnej stanu podstawowego ekscytonu  $\lambda_0$ . W przypadku sprzężenia z fononami

### ROZDZIAŁ 3. WPŁYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU

---

w najniższym rzędzie rachunku zaburzeń możemy przedstawić ją w postaci (dokładne wyprowadzenie przedstawione jest w dodatku A)

$$\text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^{\text{R}}(\omega) = -\alpha\omega_0 \sum_{\lambda} [N_0 \mathcal{M}_{\lambda}(\omega_+) \Theta(\omega_+) + (N_0 + 1) \mathcal{M}_{\lambda}(\omega_-) \Theta(\omega_-)], \quad (3.2)$$

gdzie

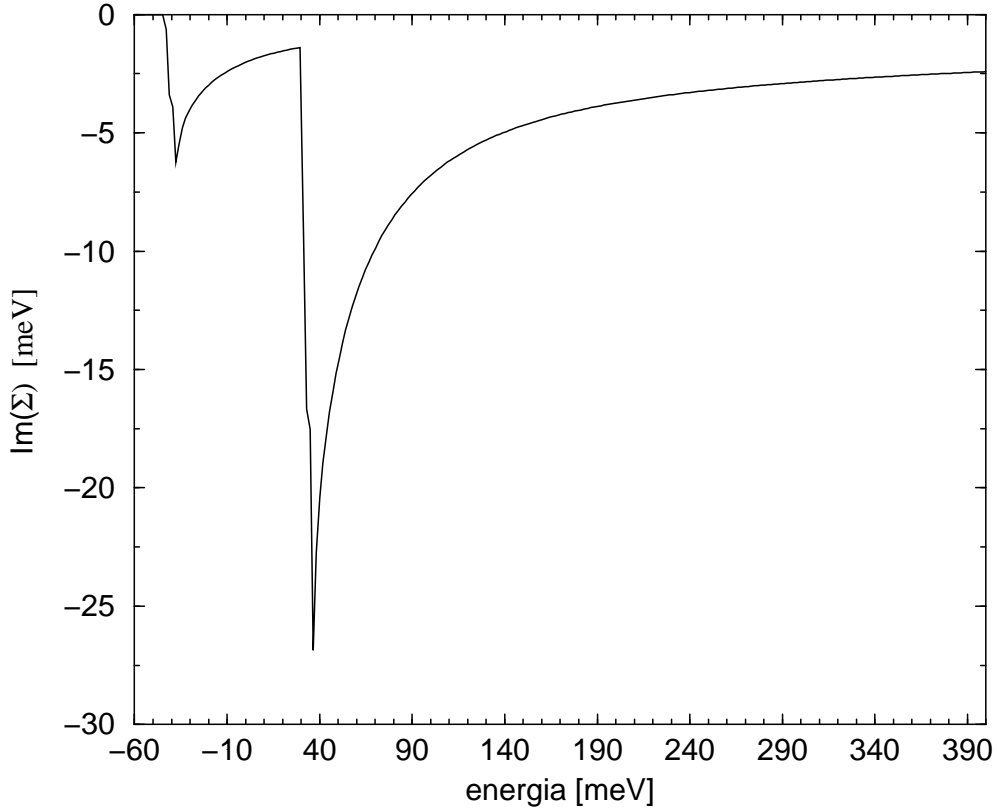
$$\begin{aligned} \omega_{\pm} &= \omega \pm \omega_0 - \epsilon_{\lambda}, \\ \mathcal{M}_{\lambda}(\omega) &= \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega}} \mathcal{M}_{\lambda}^{3\text{D}}(\sqrt{2M\omega}). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Energia ekscytonu w stanie  $\lambda$  oznaczona jest przez  $\epsilon_{\lambda}$ . Sumowanie po stanach  $\lambda$  rozciąga się zarówno na stany z dyskretnego jak i ciągłego widma ekscytonu.  $\mathcal{M}_{\lambda}^{3\text{D}}$  oznacza sumę po podpoziomach ekscytonowych poziomu  $\lambda$  (dokładne rachunki zamieszczone są w dodatku C).

W powyższym wyrażeniu na energię własną występują dwa czynniki, z których jeden jest proporcjonalny do  $N_0$  ( $N_0$  jest rozkładem Bosego-Einsteina dla fononów o częstości  $\omega_0$ ), a drugi do  $(N_0 + 1)$ . Wyraz proporcjonalny do  $N_0$ , opisujący absorpcję fononów, powoduje powstanie minimum  $\text{Im}\Sigma^{\text{R}}(\omega)$  po ujemnej stronie energii i znika w przypadku niskich temperatur. Jest on także pośrednio odpowiedzialny za szerokość linii widmowej. Wynik ten zgodny jest ze standardowym rachunkiem zaburzeń. Stosując pewne przybliżenia (patrz wzory (2.45)(2.46)(2.47)(2.48)) odtwarzamy najniższy rząd zwykłego rachunku zaburzeń. W szczególności na podstawie wzoru (2.46) otrzymujemy szerokość połówkową  $\Gamma_{\mathbf{k}=0} = -\text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^{\text{R}}(0)$ . Wzór ten był wykorzystywany



ROZDZIAŁ 3. WPŁYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII  
SPEKTRALNEJ EKSCYTONU



Rysunek 3.1: Część urojona funkcji energii własnej w trzech wymiarach dla GaAs obliczona przy zastosowaniu następujących parametrów:  $m_e=0,067m_0$ ,  $m_c=0,45m_0$ ,  $\omega_0=36,8\text{meV}$ ,  $\epsilon_0 = 13,1$ ,  $\epsilon_\infty = 11,1$ ,  $T=300\text{K}$ .

do wyznaczenia szerokości linii widmowej przez Rudina i Reinecke w pracy [12] w obliczeniach dla trzech wymiarów oraz w pracy [13] w obliczeniach dla dwóch wymiarów.

Drugi wyraz we wzorze (3.2) związany z minimum po dodatniej stronie energii nie daje wkładu do poszerzenia linii, nie znika w przypadku  $T \rightarrow 0$  i odpowiada za emisję fononów. Wynika to stąd, że ekscyton w stanie podstawowym nie może wyemitować fononu. Część ta stanowi dominujący wkład do przesunięcia linii widmowej danego przez  $\text{Im}\Sigma^R(\omega)$  w wyniku tzw. efektu polaronowego. Otrzymane wyrażenie zgodne jest ze standardowym rachunkiem zaburzeń dla energii.

Rysunek 3.1 przedstawia przykładową funkcję  $\text{Im}\Sigma(\omega)$  dla  $\mathbf{k} = 0$  dla GaAs w temperaturze pokojowej. Na rysunku tym zauważamy dwa charakterystyczne minima, o których była mowa

### ROZDZIAŁ 3. WPŁYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU

---

powyżej. Zauważmy także po lewej stronie lekko odcinający się od głównego minimum wkład pochodzący od przejść elastycznych, bez wzbudzenia stanu wewnętrznego ekscytonu. Minimum występujące po ujemnej stronie energii jest znacznie słabsze mimo, że temperatura, dla której wykonano obliczenia jest dość wysoka ( $T = 300K$ ). Dla niskich temperatur wkład ten zanika wykładniczo z temperaturą.

Zwróćmy uwagę, że charakterystyczne sumy po stanach pośrednich ekscytonu  $\lambda$  występujące we wzorze (3.2) z uwzględnieniem postaci elementu macierzowego dla rozpraszania ekscyton-fonon (dodatek A) przyjmują postać

$$Q(\omega) = \sum_{\lambda} \frac{1}{\sqrt{\omega \pm \omega_0 - \epsilon_{\lambda}}} \left| \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{m_e}{M} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{m_h}{M} | \lambda \rangle \right|^2 \Theta(\omega \pm \omega_0 - \epsilon_{\lambda}). \quad (3.4)$$

Sumowanie po kolejnych, coraz to bardziej odległych od stanu podstawowego poziomach ekscytonowych nie zmieni bardzo naszego wyniku. Zauważmy, że kolejne stany będą dawały bardzo podobny (jeśli chodzi o zależność od energii) wkład przesunięty o energię odpowiadającą różnicy energii poziomów ekscytonowych. Wkład do energii własnej od coraz to wyższych poziomów będzie coraz mniejszy, gdyż całka przekrycia się stanów z kolejnych poziomów ze stanem podstawowym będzie malała. Widać, że największy wpływ na energię własną będzie miało kilka najniższych energetycznie stanów, przy czym dominujący będzie czynnik związany ze stanem podstawowym oraz najniższymi stanami rozproszeniowymi należącymi do widma ciągłego. Wraz z malejącym prawdopodobieństwem przejścia do wyższych stanów związanych z elementem macierzowym wkład do funkcji energii własnej będzie się zmniejszał. Dotyczy to obydwu części funkcji energii własnej, gdyż wpływ kolejnych poziomów będzie się tam manifestował bardzo podobnie, a oba czynniki różnią się jedynie stałą multiplikatywną.

W związku z takim zachowaniem funkcji energii własnej uzasadnione wydaje się przybliżenie zaproponowane w dodatku D, gdzie przedstawiony został sposób wysumowania po stanach ekscytonowych zapewniający dokładne obliczenie wkładu od stanu podstawowego oraz coraz bardziej przybliżone od kolejnych, coraz bardziej odległych poziomów ekscytonowych. Możemy w ten sposób uniknąć liczenia dodatkowo podwójnej całki w energii własnej otrzymując jednocześnie rozsądny wynik, spełniający podstawowe własności, które posiada funkcja obliczona dokładnie.

### ROZDZIAŁ 3. WPLYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU

Przybliżenie podobne do prezentowanego w dodatku D można znaleźć np. w pracy [22]. Autorzy artykułu proponują nie tylko przybliżone wysumowanie ale także zastąpienie wyniku zależności funkcyjną  $2(1 - \exp(-\alpha qa))$ , gdzie  $a$  jest efektywnym promieniem Bohra natomiast  $\alpha$  jest stałą dopasowania. Analogiczna funkcja w przypadku dwuwymiarowym policzona dokładniej ma postać  $2[1 - 1/(qa/4)^2]^{(3/2)}$  (patrz wzór (D.10)). W pracy [28], gdzie autorzy w obliczeniach współczynnika nachylenia krawędzi absorpcji uwzględnili także część wyrazów z kolejnego rzędu rozwinięcia kumulantowego użyto podobnego przybliżenia. Analizę tego przybliżenia przedstawię na przykładzie  $\text{Im}\Sigma^{\text{R}}(\omega)$  w dwóch wymiarach, gdzie mamy do czynienia z analogiczną sumą po poziomach ekscytonowych.

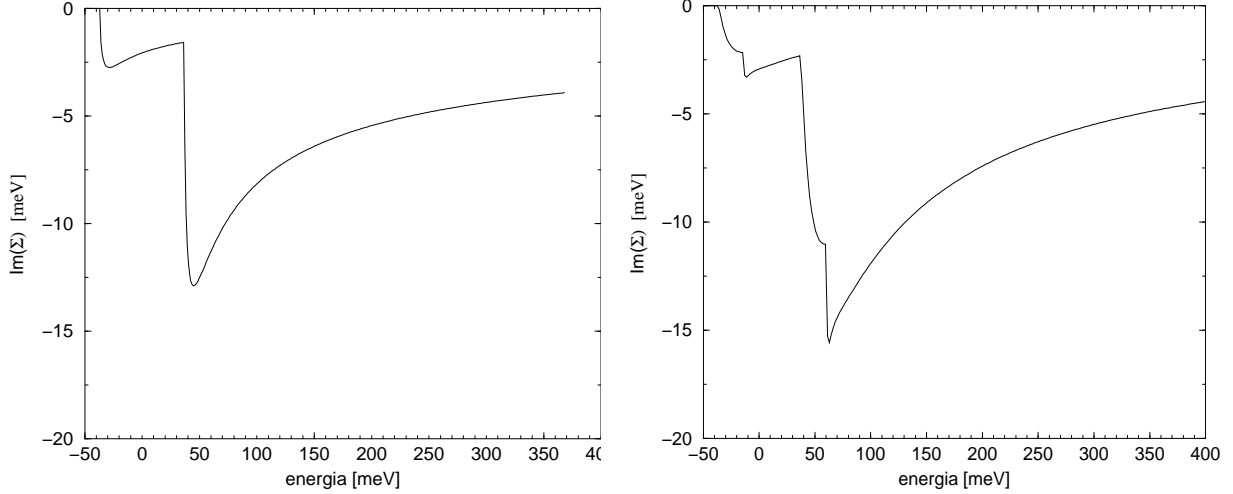
W wyrażeniu przybliżonym  $\epsilon_\lambda$  zostaje wszędzie zastąpione  $\epsilon_{\lambda_0}$ , co powoduje, że suma po stanach we wzorze (3.4) może zostać zapisana w następującej postaci

$$Q(\mathbf{q}, \omega) \approx \sum_{\lambda} \frac{1}{\sqrt{\omega \pm \omega_0 - \epsilon_{\lambda_0}}} \left| \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_e}{M}} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_h}{M}} | \lambda \rangle \right|^2 \Theta(\omega \pm \omega_0 - \epsilon_{\lambda_0}). \quad (3.5)$$

Widać więc, że we wzorze (3.4) dla danej energii  $\omega$  sumowanie kończy się na stanie odpowiadającym energii  $\omega$ . Zapewnia to stojąca w tym wyrażeniu funkcja  $\Theta(\cdot)$ . Natomiast wzór przybliżony (3.5) nie posiada takiego obciążenia i sumowanie przebiega po wszystkich możliwych stanach. Drugą istotną różnicą jest czynnik stojący przy elemencie macierzowym zapewniający, że element macierzowy przekrycia z danym stanem wchodzi do sumy z odpowiednią wagą. Te dwie różnice mają bezpośredni wpływ na zwiększenie wartości  $\text{Im}\Sigma^{\text{R}}(\omega)$  dla dużych  $\omega$ .

Oceniając dokładność tej procedury przyjrzymy się minimum  $\text{Im}\Sigma^{\text{R}}$  (przykładowa przybliżona oraz dokładna funkcja energii własnej przedstawiona jest odpowiednio na rysunku 3.2(a) oraz 3.2(b)). Przypadają one w podobnych miejscach, jednak w wyniku dokładnego wysumowania po poziomach (wzór 3.4) otrzymuje znacznie bogatszą strukturę związaną z dyskretnymi poziomami energetycznymi ekscytonu. W przypadku funkcji przybliżonej mamy do czynienia jedynie z dwoma minimummi odpowiadającymi absorpcji i emisji fononów. Zmieniają się one z temperaturą podobnie do funkcji dokładnej, gdyż mnożone są przez taki sam czynnik obsadzeniowy ( $N_0$ ). Tak więc przybliżenie to nie zmienia zasadniczego charakteru funkcji a także zachowuje zmiany związane z zależnością od temperatury. Uproszczenie sumowania po wysokoenergetycznych sta-

### ROZDZIAŁ 3. WPLYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU



(a) Przybliżone wysumowanie po poziomach ekscytonowych

(b) Wysumowanie po wszystkich poziomach ekscytonowych

Rysunek 3.2: Porównanie przybliżonego i dokładnego wyrażenia na część urojoną funkcji energii własnej dla GaAs ( $m_e=0,067m_0$ ,  $m_h=0,45m_0$ ,  $\omega_0=36,8\text{meV}$ ,  $\epsilon_0 = 13,1$ ,  $\epsilon_\infty = 11,1$ ,  $T=300\text{K}$ ) w przybliżeniu dwuwymiarowym

nach ma jednak zasadniczy wpływ na asymptotyczne zachowanie urojonej części retardowanej energii własnej. W przypadku fononów optycznych podłużnych otrzymujemy  $\text{Im}\Sigma^R(\omega) \approx \frac{1}{\sqrt{\omega}}$  dla dużych energii, czyli pierwiastkowy zanik funkcji. Numerycznie obliczona  $\text{Im}\Sigma^R(\omega)$  przy wykonaniu dokładnej sumy po stanach zanika znacznie szybciej.

W przypadku studni kwantowej o skończonej szerokości we wzorach na energię własną pojawia się dodatkowy czynnik będący konsekwencją przekrywania się funkcji obwiedni elektronu i dziury w kierunku prostopadłym do studni. Tłumi on wysokoenergetyczny ogon  $\text{Im}\Sigma^R(\omega)$ . Można się więc w tym przypadku spodziewać lepszej zgodności z wynikiem ścisłym.

Porównajmy teraz funkcję  $\text{Im}\Sigma^R(\omega)$  w dwóch i trzech wymiarach na przykładzie GaAs. Zauważmy, że w przypadku dwuwymiarowym (patrz rys. 3.2(b)) mamy znacznie wyraźniej odcinający się wkład pochodzący od dyskretnego widma ekscytonowego niż w przypadku trójwymiarowym na rys. 3.1. Wynika to stąd, że w dwóch wymiarach odległość najniższego poziomu ekscytonowego od widma jest czterokrotnie większa niż ma to miejsce w analogicznym przy-

### ROZDZIAŁ 3. WPŁYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU

---

padku w dwóch wymiarach. Przypomnijmy, że energie stanów dyskretnych ekscytonu są dane przez

$$\epsilon_n = \begin{cases} -\frac{Ry^*}{(n + \frac{1}{2})^2} & \text{w dwóch wymiarach } (n = 0, 1, 2, \dots) \\ -\frac{Ry^*}{n^2} & \text{w trzech wymiarach } (n = 1, 2, 3, \dots), \end{cases} \quad (3.6)$$

gdzie  $Ry^*$  oznacza efektywną energię Rydberga.

Różnicę tę widać wyraźnie jeśli przyjrzymy się rysunkom 3.2(b) i 3.1, które przedstawiają  $\text{Im}\Sigma^R(\omega)$  w dwóch i trzech wymiarach dla tych samych wartości parametrów.

Wyznaczenie funkcji energii własnej w studni kwantowej o skończonej szerokości napotka na poważne trudności. Widmo wodoropodobne ekscytonu można wyznaczyć ściśle jedynie w granicy dwuwymiarowej. Nie można natomiast obliczyć tego widma analitycznie dla studni kwantowej o skończonej szerokości. W konsekwencji położenia poziomów ekscytonowych w rzeczywistych studniach nie zgadzają się z wynikami otrzymanymi w granicy ściśle dwuwymiarowej, która jedynie w przybliżeniu może zostać użyta do opisu układów kwazidwuwymiarowych. Zauważmy, że do obliczenia energii własnej nie potrzebujemy wszystkich informacji o stanach ekscytonowych. Należy przypuszczać, że mimo zmian położenia poziomów energetycznych spowodowanych obniżoną wymiarowością, wartości całek przekrycia kolejnych poziomów ekscytonowych z poziomem podstawowym nie będą bardzo się zmieniać w stosunku do przypadku dwuwymiarowego. Powinniśmy natomiast odpowiednio skorygować wartości energii wiązania ekscytonu oraz energie stanów wzbudzonych. Kluczowa wydaje się być energia stanu podstawowego i kilka najniższych poziomów, gdyż stany o większym  $n$  i tak mają energie bardzo bliskie sobie. Wkład od stanów z widma ciągłego jest nieduży w porównaniu z widmem dyskretnym. To wraz z faktem, że wpływ dokładnego uwzględnienia skończonej szerokości studni kwantowej w odniesieniu do tych stanów niewiele zmienia pozwala w tym przypadku pozostać przy analitycznych wzorach opisujących przypadek ściśle dwuwymiarowy.

### ROZDZIAŁ 3. WPLYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU

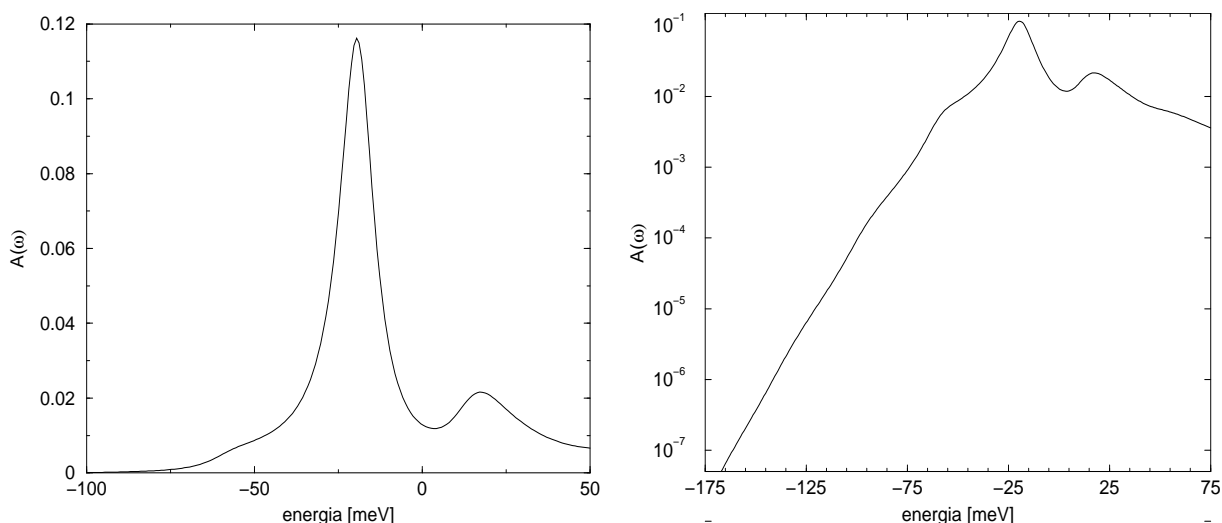
---

Oczywiście energia najniższych poziomów w teorii dwuwymiarowej jest wyraźnie zaniżona w stosunku do wartości doświadczalnej, co będzie miało największy wpływ na dokładność wyznaczenia  $\text{Im}\Sigma^R(\omega)$ . Do tego dochodzi komplikacja związana ze sprzężeniem lekkich i ciężkich dziur. Ten ostatni efekt można uwzględnić w sposób przybliżony w rachunkach. Możemy mianowicie wziąć wartość masy zredukowanej ekscytonu pojawiającej się we wzorach na energie ekscytonowe z rachunków uwzględniających skomplikowaną strukturę pasmową oraz obecność studni kwantowej. Wypisując pełen hamiltonian Luttingera-Kohna możemy wyróżnić w nim część mającą symetrię stanów  $s$ , które mają największy wpływ na widmo ekscytonowe ([47, 48]). Skomplikowana macierz upraszcza się i w ten sposób możemy w pierwszym przybliżeniu otrzymać efektywne masy, poprawiając wartość energii wiązania. Kolejnym krokiem w poprawieniu widma energetycznego byłoby uwzględnienie struktury pasmowej poprzez sformułowanie modelu w języku hamiltonianu Luttingera-Kohna. Prezentowana w tej pracy teoria pozwala na takie uogólnienie, jednak ze względów praktycznych skupię się jedynie na efektach wielociałowych.

Przyjrzyjmy się temperaturowej zależności energii własnej. Będzie miała ona bezpośredni wpływ na zmianę kształtu linii widmowej z temperaturą. Na uwagę zasługuje stosunkowo prosta zależność funkcji energii własnej od  $T$ . Występuje ona pod postacią funkcji obsadzeń Bosego-Einsteina i wpływa na głębokość minimów (rys. 3.2(b)). W przypadku przesunięcia energii wpływ ten nie jest taki duży (część funkcji energii własnej odpowiedzialna za renormalizację energii proporcjonalna jest do  $N_0 + 1$ ) i zmienia się znacząco dopiero w temperaturach w pobliżu 300K. Odwrotnie jest w przypadku szerokości linii, gdzie temperatura jest czynnikiem kluczowym (funkcja  $N_0$  mnoży część funkcji energii własnej, która głównie odpowiedzialna jest za tę szerokość).

Należy pamiętać, że jest to temperaturowa zależność występująca we wzorach *explicite*. Poza tym praktycznie wszystkie parametry, takiej jak masa efektywna, stała dielektryczna itd., wykazują zmiany wraz z temperaturą. Dopóki jednak  $T$  zmienia się w niedużym przedziale możemy uznać zależność występującą w czynnikach obsadzeniowych za jedyną istotnie zmieniającą się własność. W ogólności musielibyśmy zastosować skomplikowane modele uwzględniające np. zmiany fononowej relacji dyspersji, modyfikacje struktury pasmowej, zależność funkcji dielektrycznej od temperatury. W pracy niniejszej modyfikacje te uwzględniane są poprzez stosowanie

### ROZDZIAŁ 3. WPLYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU



(a) Skala liniowa

(b) Skala logarytmiczna

Rysunek 3.3: Funkcja gęstości spektralnej dla arsenku galu ( $m_e=0,067m_0$ ,  $m_c=0,45m_0$ ,  $\omega_0=36,8\text{meV}$ ,  $\epsilon_0 = 13,1$ ,  $\epsilon_\infty = 11,1$ ,  $T=300\text{K}$ ) w przybliżeniu dwuwymiarowym. W rachunkach uwzględnione są wszystkie poziomy ekscytonowe.

parametrów branych z doświadczeń przeprowadzonych w zakresie temperatur, w których wykonywane są rachunki.

### 3.3 Funkcja gęstości spektralnej ekscytonu

Mając energię własną możemy obliczyć funkcję gęstości spektralnej, zgodnie ze wzorami (2.41),(2.42). Istnieje bezpośredni związek pomiędzy mierzoną doświadczalnie zależnością absorpcji od energii padającego światła a funkcją gęstości spektralnej. Dany jest on wzorem (2.1). Oprócz tego znajomość funkcji gęstości spektralnej pozwala obliczyć wiele innych zależności uzyskiwanych w eksperymencie. Dlatego też w moich rozważaniach skupię się na omówieniu własności funkcji gęstości spektralnej.

Gęstość spektralna odpowiadająca  $\text{Im}\Sigma$  z rys. 3.2(b) przedstawiona jest na rys. 3.3. Na rysunku tym widać satelity związane z minimami w funkcji  $\Sigma$ . Nasze rozważania, w których stosujemy rozwinięcie kumulantowe najniższego rzędu stosują się dla materiałów których stała sprzężenia

### ROZDZIAŁ 3. WPLYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU

---

ekscyton-fonon jest nieduża. Wtedy też satelity fononowe są nieduże w porównaniu z głównym maksimum i stanowią oddzielne linie o dużo mniejszym natężeniu, co wyraźnie widać na rys. 3.3(b), gdzie  $A(\omega)$  przedstawione jest w skali logarytmicznej. Z sytuacją taką mamy do czynienia w półprzewodnikach III-V oraz z dobrym przybliżeniem II-VI, gdzie stała sprzężenia (stała Fröhlicha) jest dużo mniejsza od 1. W związku z tym, że wymienione materiały stanowią podstawę do budowania nowoczesnych układów kwantowych takich jak studnie kwantowe oraz są bardzo często używane w optoelektronice, ograniczenie do niewielkich stałych sprzężeń daje bardzo szerokie pole zastosowań opracowanej metody.

Przyjrzyjmy się bliżej rysunkowi 3.3, gdzie została przedstawiona funkcja gęstości spektralnej dla GaAs. Linia ekscytonowa jest bardzo ostra i w pierwszym przybliżeniu w pobliżu maksimum jej przebieg niewiele odbiega od lorentzowskiego kształtu. Widać też drobną asymetrię jaką wprowadza oddziaływanie z fononami LO. Satelity fononowe obecne w widmie są praktycznie niewidoczne i dopiero gdy przyjrzymy się wykresowi w skali logarytmicznej (patrz rys. 3.3(b)) to dostrzeżemy kolejne repliki fononowe. W podanym tutaj przykładzie stała sprzężenia ekscyton-fonon jest bardzo mała<sup>1</sup> dlatego też zarówno przesunięcie jak i poszerzenie funkcji spektralnej nie są duże. Słabe sprzężenie pozwala na pominięcie kolejnych wyrazów w rozwinięciu kumulantomym. Dodatkowe przyczynki wynikające z uwzględnienia kolejnych kumulantów mają niewielkie znaczenie i wprowadzają jedynie drobne zmiany ilościowe, nie zmieniając jakościowego charakteru zależności absorpcji.

Na rysunku 3.4 przedstawiono funkcje gęstości spektralnej dla tego samego materiału (GaAs) oraz różnych temperatur. Na wykresie 3.4(b) widać monotoniczną zależność współczynnika nachylenia krzywych od temperatury. Przy tak małej stałej sprzężenia satelity fononowe widoczne są jedynie w niskich temperaturach, przy czym w zwykłej skali widoczna jest praktycznie tylko replika fononowa po dodatniej stronie energii. Wraz ze wzrostem temperatury satelity fononowe bardzo szybko rozmywają się i znikają.

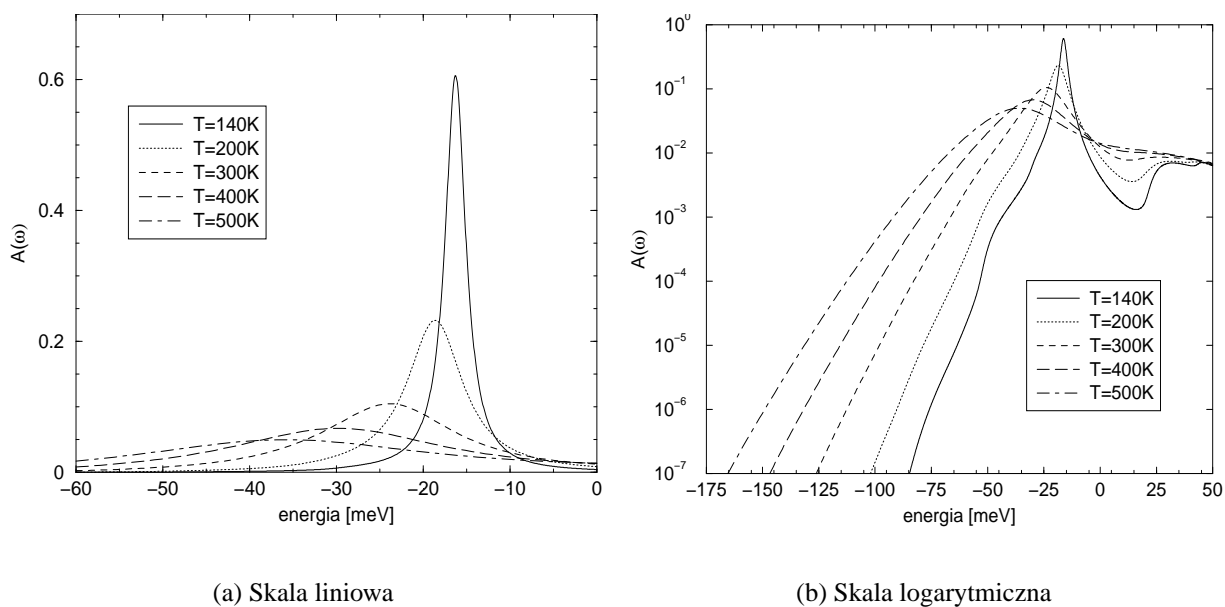
Kolejny rysunek 3.5 przedstawia zależność współczynnika nachylenia  $E_0(T)$  charakteryzującego szybkość wykładniczego zaniku krzywej absorpcji poniżej progu absorpcji dla arsenku galu

---

<sup>1</sup>przykładowo stała Fröhlicha dla ekscytonu w arsenku galu wynosi mniej niż 0,2.

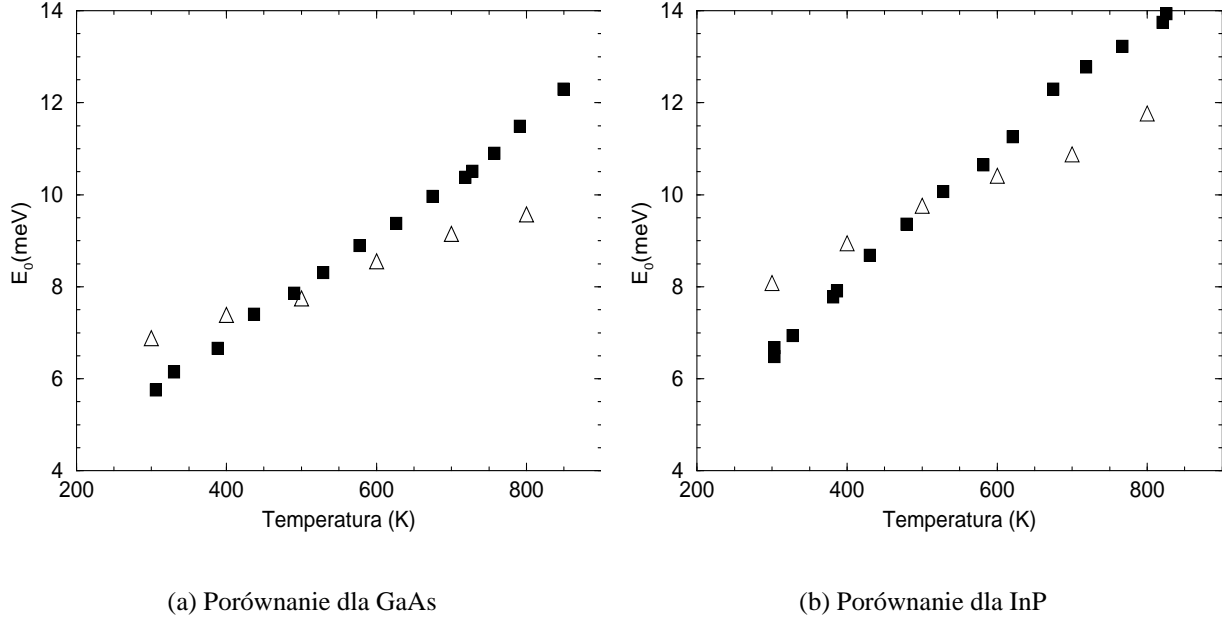


ROZDZIAŁ 3. WPŁYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII  
SPEKTRALNEJ EKSCYTONU



Rysunek 3.4: Porównanie nachylenia ogona absorpcji dla różnych temperatur dla arsenku galu ( $m_e=0,067m_0$ ,  $m_e=0,45m_0$ ,  $\omega_0=36,8\text{meV}$ ,  $\epsilon_0 = 13,1$ ,  $\epsilon_\infty = 11,1$ ) w przybliżeniu dwuwymiarowym. W rachunkach wykonano dokładne sumowanie po poziomach ekscytonowe. Wykresy przedstawiają funkcję gęstości spektralnej dla temperatur  $T = 140, 200, 300, 400, 500\text{K}$ .

ROZDZIAŁ 3. WPŁYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII  
SPEKTRALNEJ EKSCYTONU



Rysunek 3.5: Porównanie przewidywań teoretycznych (trójkąty na powyższych rysunkach) z doświadczeniem (kwadraty) zmiany współczynnika charakterystycznego nachylenia krawędzi Urbacha  $E_0(T)$  z temperaturą dla GaAs oraz InP w trzech wymiarach. Dane doświadczalne pochodzą z pracy [49].

zdefiniowanego następującym wzorem

$$\alpha(\omega) = \alpha_0 \exp \left[ -\frac{\omega_0 - \omega}{E_0(T)} \right]. \quad (3.7)$$

Przedstawiona jest tutaj zależność  $E_0(T)$  w szerokim zakresie temperatur jednak należy sobie zdawać sprawę, że prawidłowe odtworzenie stałej nachylenia ogona absorpcji w wyższych temperaturach wymaga bardziej skomplikowanych rachunków. W zaprezentowanym w niniejszej pracy modelu parametry takie jak masy efektywne czy częstość fononów optycznych-podłużnych przyjmowane są jako niezależne od temperatury. Najprostszą możliwością jest podstawianie eksperymentalnych wartości zmieniających się wraz z temperaturą.

Porównanie zmian  $E_0$  z temperaturą przedstawione jest dla dwóch materiałów, arsenku galu i fosorku indu. Dane odpowiadają objętościowym półprzewodnikom i eksperymentalne wartości zostały wzięte z pracy [49]. Zauważmy dobrą zgodność wartości zmierzonych doświadczalnie z wynikami teoretycznymi. Zgodność ta dotyczy obu prezentowanych związków. W parametrach

### ROZDZIAŁ 3. WPLYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU

---

użytych do obliczeń teoretycznych uwzględniono jedynie zmianę stałej dielektrycznej z temperaturą. Nie wprowadzony został jednak żaden mikroskopowy lub też fenomenologiczny model modyfikacji innych parametrów, po prostu do obliczeń brane były dane z doświadczeń przeprowadzanych w różnych temperaturach. Nie zostały włączone także inne efekty mogące mieć wpływ na szerokość linii w wysokich temperaturach (zauważmy, że temperatura na skali poziomej zmienia się w bardzo szerokim zakresie).

## 3.4 Rozszerzenie teorii

W przyjętym w niniejszej pracy modelu w przypadku opisu zjawisk zachodzących w studniach kwantowych ekscyton opisywany jest ściśle dwuwymiarowym modelem wodoropodobnym. Jedną z konsekwencji takiego przybliżenia jest założenie energii kolejnych poziomów ekscytonowych odpowiadających rozwiązaniu dwuwymiarowemu (dotyczy to przede wszystkim fragmentu wzorów związanego z sumowaniem po wszystkich poziomach ekscytonowych), a co za tym idzie przyjęcie czterokrotnego obniżenia energii stanu podstawowego w porównaniu do przypadku trójwymiarowego. Takie posunięcie nie będzie miało wpływu na wyniki otrzymane dla wąskich studni kwantowych, gdzie stany ekscytonowe bliskie są w dwuwymiarowym. W miarę jak szerokość studni zwiększa się spodziewamy się stopniowego przybliżania poziomów ekscytonowych aż do osiągnięcia trójwymiarowego wyniku dla bardzo szerokich studni kwantowych.

Jednym ze stosowanych sposobów powiązania widma ekscytonowego z szerokością studni jest metoda wariacyjna. Wiadomo jednak, że metoda wariacyjna daje bardzo niedokładne wyniki w odniesieniu do stanów wzbudzonych, a w naszym przypadku nie wystarczy określenie przybliżonej postaci funkcji falowej stanu podstawowego. W celu wykonania sumy po wszystkich stanach należy znać odpowiednie funkcje falowe wszystkich stanów ekscytonowych. W tym celu należałoby użyć numerycznych technik pozwalających na dokładne rozwiązanie równania ekscytonu bez zaburzeń w układzie z pojedynczą studnią kwantową. Następnie należy dokonać numerycznego obliczenia i wysumowania funkcji przekrycia kolejnych poziomów ekscytonowych.

### ROZDZIAŁ 3. WPLYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU

---

Powyższa procedura może mieć jednak sens dopiero wtedy, gdy w rachunkach będziemy mogli oprócz lepszego uwzględnienia skończonej szerokości studni i wpływu tego czynnika na stan ekscytonu także wziąć pod uwagę efekty pasmowe. Właśnie dokładniejsze uwzględnienie struktury pasmowej powinno mieć większe znaczenie. W związku z tym należałoby poszerzyć istniejący model o dodatkowe pasma, a w pierwszej kolejności należałoby uwzględnić złożoną strukturę pasma walencyjnego składającego się w przypadku półprzewodników o strukturze blendy cynkowej z podpasem ciężkich i lekkich dziur. Zauważmy, że uwzględnienie skomplikowanej struktury pasmowej nie wymaga przeformułowania przedstawionej w tej pracy teorii, natomiast wpływa znacząco na praktyczną stronę zastosowania wyników. Rozszerzenie zaprezentowanego modelu na wiele pasm ogranicza możliwości praktycznego zastosowania opisanej metody zmuszając do wykonywania większości rachunków numerycznie.

Nieco inaczej przedstawia się sytuacja w przypadku układów silnie wzbudzonych. Tutaj wysoka koncentracja nośników powoduje zmiany ekscytonowych funkcji falowych i nie dysponujemy żadnymi dokładnymi wzorami analitycznymi opisującymi stany własne nawet w prostym modelu dwupasmowym. Równanie ekscytonu w takim przypadku musi zostać rozwiązane numerycznie. Z drugiej strony wysoka koncentracja nośników powoduje silne ekranowanie oddziaływania coulombowskiego przez co dużo lepiej sprawdza się model niezależnych cząstek.

Zaprezentowaną w niniejszym rozdziale teorię można rozszerzyć także o inne typy oddziaływań. Można bez trudu włączyć oddziaływanie z fononami akustycznymi, uwzględnić statyczny nieporządek itp. Możliwości poszerzenia zaprezentuję na przykładzie oddziaływania elektron-elektron odgrywającego bardzo istotną rolę w silnie wzbudzonych układach.

W pierwszym przybliżeniu wszystkie mechanizmy rozpraszania ekscytonów można potraktować jako niezależne. Wtedy energia własna będzie prostą sumą energii własnych pochodzących od poszczególnych przyczynków, a w konsekwencji działanie  $S(t)$  także będzie sumą działań poszczególnych składowych. W dalszej części rozprawy przedstawię pewien sposób uwzględnienia wpływu wewnątrzpasowego oddziaływania elektron-elektron na własności spektralne ekscytonu. Rachunki te można zastosować także do układu znajdującego się poniżej progu akcji laserowej. Jest to sposób na opisanie układów, w których wpływ swobodnych nośników zaczyna

### *ROZDZIAŁ 3. WPŁYW FONONÓW LO NA KSZTAŁT I POŁOŻENIE LINII SPEKTRALNEJ EKSCYTONU*

---

być istotny, jednak wciąż mamy do czynienia ze stanami ekscytonowymi. Metoda ta opiera się na założeniu, że fluktuacje gęstości ładunku w plazmie elektronowo-dziurowej mogą być opisane za pomocą tzw. potencjałów fluktuujących w analogii do oddziaływania elektron-fonon [50].

## Rozdział 4

# Funkcja wzmocnienia w laserach półprzewodnikowych — efekty wielociałowe

W odróżnieniu od laserów gazowych na działanie laserów półprzewodnikowych w znacznym stopniu mają wpływ efekty wielociałowe w plazmie elektronowo-dziurowej w warunkach odwróconej populacji [51, 52, 53, 54, 55]. Jedną z wielkości istotnych w fizyce laserów, którą otrzymuje się w doświadczeniach jest krzywa wzmocnienia, czyli zależność współczynnika wzmocnienia od energii. W poniższym rozdziale przedstawię model teoretyczny pozwalający uzyskać funkcję kształtu linii wzmocnienia i uwzględniający efekty wielociałowe. Część rachunków związanych z kształtem linii widmowej oraz rozwinięciem kumulantowym zostanie przeprowadzona w analogii do obliczeń przedstawionych w rozdziale 3. Na koniec zamieszczone zostaną przykładowe wyniki obliczeń numerycznych opisujące realny układ.

W laserach półprzewodnikowych mamy do czynienia z sytuacją, w której występuje duża gęstość nośników obydwu typów — elektronów i dziur. Jest to układ w stanie kwazirównowagi termodynamicznej, który można opisać zakładając istnienie dwóch oddzielnych potencjałów chemicznych — dla pasma przewodnictwa  $\mu_c$  oraz dla pasma walencyjnego  $\mu_v$ . Potencjały chemiczne związane są z gęstością nośników obu typów. Przybliżenie to równoznaczne jest założeniu, że każdy z podukładów zdąża osiągnąć lokalnie równowagowy rozkład Fermiego w zakresie własnego pasma. Potwierdziły to już doświadczenia przeprowadzone w latach osiemdziesiątych [56]

z których wynika, że czas relaksacji związanej z rozpraszaniem wewnątrzpasmowymi jest rzędu  $50-100 fs$ .

Jednocząstkowa funkcja energii własnej w takim układzie jest dobrze opisana przy wykorzystaniu tzw. przybliżenia GW w najniższym rzędzie rachunku zaburzeń względem ekranowanego oddziaływania  $W$  (litera  $G$  symbolizuje propagator cząstki w wyrażeniu na energię własną). Zapewnia to właściwe odtworzenie kwazicząstkowych energii wzbudzeń w układzie scharakteryzowanym dużą koncentracją nośników [19, 57].

Postać funkcji energii własnej dla cząstki w gazie elektronowym w przybliżeniu GW jest analogiczna do tej, która odpowiada oddziaływaniu ekscyton-fonon z rozdziału 3. Wykorzystane to zostanie do bardziej przejrzystego przedstawienia teorii, bez wchodzenia w szczegóły rachunkowe, które wyglądają podobnie do przedstawionych w poprzednich rozdziałach na przykładzie oddziaływania z fononami optycznymi podłużnymi.

W bieżącym rozdziale przedstawię teorię pozwalającą na uwzględnienie efektów wielociałowych w silnie wzbudzonych układach jakie stanowią lasery półprzewodnikowe. Zaczę od wprowadzenia związków opisujących ekranowanie oddziaływania między cząstkami. Następnie wprowadzę funkcję energii własnej dla cząstek we fluktuującym potencjale oraz wyprowadzę równania na funkcje korelacji. Przybliżone rozwiązanie tych równań pozwoli obliczyć funkcję wzmocnienia. Porównanie teorii z doświadczeniem zostanie przedstawione na bazie prostego modelu niezależnych cząstek.

## 4.1 Ekranowane oddziaływanie elektron-dziura

Podstawową różnicą pomiędzy rozważanymi w rozdziale 3 układami a silnie wzbudzonymi strukturami jest obecność dużej ilości swobodnych nośników. Powoduje to zwiększenie efektów związanych z korelacjami elektronowymi. Dużego znaczenia nabierają także efekty ekranowania, podobnie jak dzieje się to w metalach [58, 59, 60, 61]. Jedną z konsekwencji jest wzrost znaczenia oddziaływania między cząstkami w tym samym paśmie na widmo w stosunku do interakcji między cząstkami znajdującymi się w różnych pasmach. W przypadku niskich koncentracji to właśnie

**ROZDZIAŁ 4. FUNKCJA WZMOCNIENIA W LASERACH PÓŁPRZEWODNIKOWYCH — EFEKTY WIELOCIAŁOWE**

to drugie oddziaływanie było odpowiedzialne za tworzenie się ekscytonu. Obecnie sytuacja zmienia się i ekranowanie oraz istnienie zakazu Pauliego powodują, że nie tworzą się ekscytony takie, z jakimi mamy do czynienia w przypadku pustego pasma przewodnictwa [1] [62].

Zacznijmy nasze rozważania od postaci ekranowanego potencjału oddziaływania  $W$ . W poniższych wzorach symbol R/A będzie charakteryzował odpowiednio funkcje retardowane/adwansowane. Zgodnie z tymi oznaczeniami ekranowane oddziaływanie coulombowskie ma następującą postać [63]

$$W^R(\mathbf{q}, \omega) = \left(1 - v_q \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)\right)^{-1} v_q, \quad (4.1)$$

gdzie  $\chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)$  oznacza nieredukowalną podatność, natomiast  $v_q$  jest nieekranowanym oddziaływaniem coulombowskim. Podobne wyrażenie na adwansowaną funkcję ekranowanego oddziaływania ma postać

$$W^A(\mathbf{q}, \omega) = v_q \left( (1 - \chi_0^A(\mathbf{q}, \omega) v_q) \right)^{-1}. \quad (4.2)$$

Łącząc oba te związki otrzymujemy wyrażenie na funkcję spektralną  $W^R(\mathbf{q}, \omega)$  w następującej postaci

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} W^R(\mathbf{q}, \omega) = W^A(\mathbf{q}, \omega) \left( -\frac{1}{\pi} \text{Im} \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega) \right) W^R(\mathbf{q}, \omega). \quad (4.3)$$

Funkcja  $-\frac{1}{\pi} \text{Im} W^R(q, \omega)$  reprezentuje gęstość spektralną wzbudzeń typu fluktuacje gęstości plazmy elektronowo-dziurowej. Widmo takie typowo zawiera część odpowiadającą wzbudzeniom indywidualnych par elektron-dziura z morza Fermiego oraz silne rezonanse związane z występowaniem wzbudzeń kolektywnych typu plazmonowego. Wzbudzenia pierwszego typu dają przyczynek do  $\text{Im} \chi^R(q, \omega)$ .

Wykorzystując wzór Lindharda, opisujący ekranowanie w przybliżeniu RPA, otrzymujemy następujący przyczynek do  $\text{Im} \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)$  dla wzbudzeń wewnątrzpasmych

$$\begin{aligned} \text{Im} \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega) &= \sum_{\mathbf{k}} f_c(\epsilon_c(\mathbf{k})) [\delta(\omega - \epsilon_c(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_c(\mathbf{k})) - \delta(-\omega - \epsilon_c(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_c(\mathbf{k}))] + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} f_v(\epsilon_v(\mathbf{k})) [\delta(\omega - \epsilon_v(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_v(\mathbf{k})) - \delta(-\omega - \epsilon_v(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon_v(\mathbf{k}))], \end{aligned} \quad (4.4)$$



**ROZDZIAŁ 4. FUNKCJA WZMOCNIENIA W LASERACH PÓŁPRZEWODNIKOWYCH — EFEKTY WIELOCIAŁOWE**

gdzie funkcje  $f_c$  i  $f_v$  oznaczają odpowiednio rozkłady Fermiego-Diraca dla pasma przewodnictwa i walencyjnego. Należy przy tym zaznaczyć, że istnieje dobrze zdefiniowany obszar na płaszczyźnie  $(q, \omega)$ , poza którym nie występują wzbudzenia cząstka-dziura. Poza tym obszarem możemy mieć do czynienia z innym typem wzbudzeń, a mianowicie dyskretnymi wzbudzeniami plazmonowymi, o dobrze określonej relacji dyspersji, które zachodzą wtedy, gdy

$$\operatorname{Re} \left( 1 - v_q \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega) \right) = 0. \quad (4.5)$$

Wzbudzenia plazmonowe dają następujący przyczynek do spektrum  $W$

$$-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} W^R(q, \omega) = \frac{\delta(\omega - \omega_q^{\text{pl}}) - \delta(\omega + \omega_q^{\text{pl}})}{\left| \frac{\partial \chi_0^R}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_q^{\text{pl}}}}, \quad (4.6)$$

gdzie  $\omega_q^{\text{pl}}$  oznacza energię plazmonu o pędzie  $q$  (patrz rozdział 4.2). W ten sposób możemy zapisać rozkład spektralny  $\operatorname{Im} W^R(\mathbf{q}, \omega)$  jako

$$-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} W^R(q, \omega) = \sum_{\zeta} \sum_{\mathbf{q}} V_q^{\zeta} (V_{-q}^{\zeta})^* \left[ \delta(\omega - \omega_q^{\zeta}) - \delta(\omega + \omega_q^{\zeta}) \right]. \quad (4.7)$$

Indeks  $\zeta$  oznacza różne wzbudzenia o energiach wynoszących odpowiednio

$$\omega_q^{\zeta} = \begin{cases} \epsilon_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_{\nu}(\mathbf{k}) & \text{wzbudzenia cząstka-dziura} \\ \omega_q^{\text{pl}} & \text{wzbudzenia plazmonowe.} \end{cases} \quad (4.8)$$

Mając rozkład spektralny możemy na jego podstawie wprowadzić bozonowe wzbudzenia o dokładnie takim rozkładzie i elementach macierzowych oddziaływania zdefiniowanych następująco [57]

$$V_q^{\zeta} = \begin{cases} W^R(q, \omega_q^{\zeta}) \sqrt{f(\epsilon_{\nu}(\mathbf{k}))} & \text{wzbudzenia elektron-dziura,} \\ \left| \frac{\partial \chi_0^R}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_q^{\text{pl}}}^{-1/2} & \text{plazmony.} \end{cases} \quad (4.9)$$

Mają one różną postać dla każdego z przyczynków  $\zeta$  wchodzących w skład wzbudzeń. Dokładniejsze rachunki związane z przybliżeniem bieguna plazmowego wraz z komentarzem znajdują się sekcji 4.2.

## 4.2 Plazmony

Jak wspomniano, jednocząstkowe wzbudzenia gazu elektronowego można dość dokładnie opisać w ramach tzw. przybliżenia GW<sup>1</sup>. Jest ono stosowane tam, gdzie mamy do czynienia z ekranowaniem długozasięgowego potencjału oddziaływania. Metoda ta polega na stosowaniu rachunku zaburzeń nie tyle względem samego oddziaływania pomiędzy cząstkami, a jego znormalizowanej (czyli efektywnej) postaci wynikającej z efektów wielociałowych.

Ekranowanie oddziaływania uwzględnione jest poprzez wprowadzenie funkcji dielektrycznej w przybliżeniu chaotycznych faz (ang. *Random Phase Approximation*, w skrócie RPA<sup>2</sup>). Na energię własną w przybliżeniu GW składają się dwa czynniki: część Hartree oraz człon wymienny, w którym oddziaływanie jest ekranowane. W języku diagramów Feynmana można przedstawić to schematycznie w następujący sposób

$$\Sigma = \Sigma_H + \Sigma_{GW}$$

gdzie  $\Sigma$  oznacza energię własną,  $\Sigma_H$  część Hartree reprezentującą potencjał samouzgodniony. Drugi diagram odpowiada wyrażeniu na energię własną GW, przy czym typowo wyróżniamy w nim część bezdyspersyjną  $\Sigma_X$  odpowiedzialną za nieekranowaną wymianę oraz część dyspersyjną  $M(\omega)$ . Mamy zatem  $\Sigma_{GW}(\omega) = \Sigma_X + M(\omega)$ . W powyższych diagramach ekranowane oddziaływanie  $W$  oznaczone jest podwójną linią przerywaną, a nieekranowany potencjał - pojedynczą linią przerywaną. Podwójna linia ciągła oznacza propagator cząstki  $G$ . [64].

<sup>1</sup>Nazwa pochodzi od wyrażenia GW (iloczyn funkcji Greena i ekranowanego oddziaływania) występującego we wzorach perturbacyjnych zamiast standardowego GV. Stosowana jest także zwyczajowa nazwa „dynamicznie ekranowane przybliżenia Hartree-Focka.

<sup>2</sup> Przybliżenie RPA znane jest także pod nazwą SCF, z ang. *Self-Consistent Field Approximation*



Stosując metodę sum Matsubary po częstościach energii własną dla pojedynczej cząstki w skończonej temperaturze w przybliżeniu GW możemy zapisać w następującej postaci

$$\Sigma(\mathbf{p}, ip_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_m} \int d\mathbf{q} W(q, i\omega_n) \mathcal{G}^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, ip_n + i\omega_n), \quad (4.10)$$

gdzie  $W(q, i\omega_n)$  jest ekranowanym oddziaływaniem coulombowskim, natomiast  $\mathcal{G}$  jest funkcją Greena pary elektron-dziura [67].

### 4.3 Przybliżenie bieguna plazmowego

Zwykle widmo wzbudzeń kolektywnych gazu elektronowego zdominowane jest przez jedno dyskretne wzbudzenie typu plazmonowego [58]. Plazmon jest w ośrodku jednorodnym wzbudzeniem typu fali płaskiej o częstości drgań związanej z wektorem falowym  $\mathbf{q}$  relacją dyspersji  $\omega_{\mathbf{q}}$ . Widmo ciągłe polegające na wzburzeniach typu cząstka-dziura w pobliżu powierzchni Fermiego zwykle wnosi mały wkład do pełnej gęstości spektralnej oscylacji gęstości. Wygodnie jest założyć w pierwszym przybliżeniu, że cały efekt ekranowania związany jest z plazmonami. Metoda ta nosi nazwę przybliżenia bieguna plazmowego i sprowadza się do założenia, że zależność od częstości funkcji dielektrycznej  $\varepsilon_{\text{PPA}}(\mathbf{q}, i\omega)$  jest w pełni określona przez pojedynczy biegun w płaszczyźnie zespolonych częstości i może zostać zapisana w postaci

$$\frac{1}{\varepsilon_{\text{PPA}}(\mathbf{q}, i\omega)} = \frac{1}{\varepsilon_0} \left[ 1 + \frac{\omega_{\text{pl}}^2}{(\omega + i\delta)^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2} \right], \quad (4.11)$$

W wyniku zastosowania przybliżenia bieguna plazmowego otrzymujemy bardzo prostą zależność odwrotności funkcji dielektrycznej od częstości i wektora falowego. Przybliżenie bieguna plazmowego w realnym przypadku sprowadza się zwykle do policzenia funkcji dielektrycznej w przybliżeniu RPA oraz rozwinięcie jej w granicy  $q \rightarrow 0$  przy skończonej wartości  $\omega$ . Otrzymujemy w ten sposób plazmonową relację dyspersji  $\omega_{\mathbf{q}}$ , częstość plazmonową  $\omega_{\text{pl}}$  oraz stałą ekranowania statycznego  $\kappa$  stojąca przy dominującym wyrazie w dyspersji. W trzech wymiarach

przybliżenie bieguna plazmowego będzie miało postać

$$\omega_q^2 = \omega_{\text{pl}}^2 \left( 1 + \frac{q^2}{\kappa^2} \right) + \left( \frac{q^2}{2m_e} \right)^2, \quad (4.12)$$

$$\omega_{\text{pl}}^2 = n_e \left( \frac{\sqrt{m_H} + \sqrt{m_L}}{\sqrt{m_H^3} + \sqrt{m_L^3}} + \frac{1}{m_e} \right) \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_\infty}, \quad \kappa = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_\infty} \left( \frac{\partial n}{\partial \mu_e} + \frac{\partial n}{\partial \mu_h} \right). \quad (4.13)$$

We wzorze na częstość plazmonową uwzględnione zostało w sposób efektywny istnienie dwóch podpasz walencyjnych (lekkich i ciężkich dziur —  $m_L, m_H$ ) w strukturze blendy cynkowej. Jest to jeden z kilku sposobów prostego wprowadzenia do rachunków konsekwencji istnienia bardziej złożonej struktury pasma walencyjnego.

Główną konsekwencją redukcji wymiaru układu jest zmiana relacji dyspersji plazmonowej  $\omega_{\mathbf{q}}$ . W dwóch wymiarach zmienia się mapa wzbudzeń plazmonowych w stosunku do przypadku trójwymiarowego [61]

$$\frac{1}{\varepsilon_{\text{PPA}}(\mathbf{q}, i\omega)} = \frac{1}{\varepsilon_0} \left[ 1 + \frac{\omega_{\text{pl}}^2}{(\omega + i\delta)^2 - \omega_q^2} \right], \quad (4.14)$$

gdzie jedyną różnicą w stosunku do wzoru (4.11) jest to, że wektor falowy  $\mathbf{q}$  jest dwuwymiarowy  $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ . Odpowiednie wzory określające przybliżenie bieguna plazmowego w dwóch wymiarach mają postać

$$\begin{aligned} \omega_q^2 &= \frac{2\pi n e^2}{\varepsilon_0 m} q \left( 1 + \frac{q}{\kappa} \right) + \left( \frac{q^2}{2m_e} \right)^2, \\ \omega_{\text{pl}}^2(\mathbf{q}) &= \frac{2\pi n e^2 q}{\varepsilon_0 m}, \\ \kappa &= \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_0} \left( \frac{\partial n}{\partial \mu_e} + \frac{\partial n}{\partial \mu_h} \right). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Na podstawie wzorów określających PPA w trzech i dwóch wymiarach bez trudu możemy znaleźć funkcje definiujące efektywne sprzężenie (patrz wzór (4.9)). Przyjmując przybliżenie

bieguna plazmowego otrzymujemy następujące wyrażenie na element macierzowy efektywnego oddziaływania

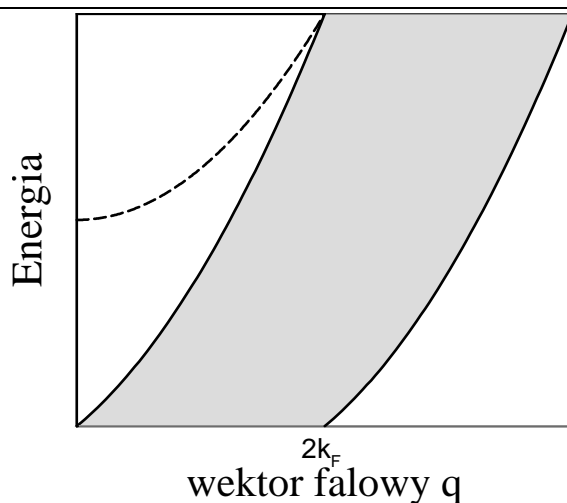
$$V_q = \sqrt{\frac{2\pi e^2 \omega_{pl}^2}{\epsilon_\infty \omega_q}} \frac{1}{q}. \quad (4.16)$$

Podstawową różnicą jaka zachodzi pomiędzy odpowiednimi wzorami na energię własną dla oddziaływania z fononami LO i plazmonami jest pojawienie się zależności od  $q$  w relacji dyspersji oraz inna postać efektywnego oddziaływania. Podobieństwo na tym poziomie pozwala nam przeprowadzić analizę wzorując się na dobrze znanych przykładach z rozdziału 3.

Koncentracja nośników pojawia się w powyższym wzorze w kilku miejscach, jednak główna zależność, która będzie miała największy wpływ na kształt funkcji energii własnej, występuje w amplitudzie oddziaływania. Istotne jest tutaj także to, że amplituda maleje dla bardzo dużych wartości wektora  $q$  wprowadzając naturalne wysokoenergetyczne obcięcie.

W przypadku wzbudzeń plazmonowych przybliżenie bieguna plazmowego pogarsza się wraz ze wzrostem  $q$ . Wynika to z natury tego przybliżenia. Jeśli popatrzymy na mapę wzbudzeń wykreśloną w płaszczyźnie  $(q, \omega)$  — patrz rys. 4.1, to dla małych wartości wektora falowego mamy do czynienia z ostrą linią plazmonową (w zerowej temperaturze jest to delta Diraca pokrywająca się relacją dyspersji plazmonów), która dla większych wartości przechodzi płynnie w obszar wzbudzeń cząstka-dziura o rozciąglym charakterze. W drugim z tych obszarów nie mamy już do czynienia ze ściśle określoną jedną częstotścią odpowiadającą każdej wartości wektora falowego, a całym obszarem wzbudzeń o różnym natężeniu i intensywności. Przybliżenie bieguna plazmowego traktuje cały ten obszar jako jedno średnie wzbudzenie o dokładnie zdefiniowanej częstotliwości plazmonowej. Jednak w naszym przypadku dla dużych wartości  $q$  amplituda oddziaływania maleje, a co za tym idzie wpływ tego obszaru potraktowanego w bardzo przybliżony sposób, jest niewielki. Rozważania te dotyczą zarówno przypadku trójwymiarowego jak i dwuwymiarowego.

Nieco inaczej wygląda mapa wzbudzeń plazmonowych w dwóch wymiarach. Podstawową różnicę stanowi zachowanie się bieguna plazmowego, wyznaczającego jednocześnie relację dyspersji

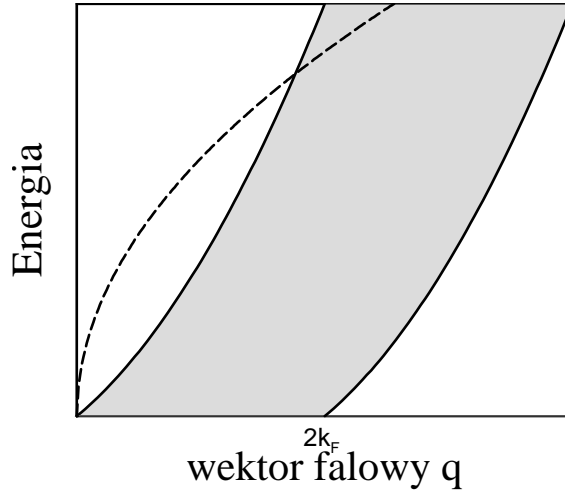


Rysunek 4.1: Typowa mapa wzbudzeń plazmonowych w trzech wymiarach. Kolorem szarym oznaczony jest obszar wzbudzeń cząstka dziura. Oddzielna linia to kwazicząstkowe wzbudzenia bieguna plazmowego

dla plazmonów. W trójwymiarowym półprzewodniku o dużej koncentracji swobodnych nośników zależność energii plazmonu od wektora falowego wyraża się przez funkcję kwadratową, przy czym dla  $q = 0$  mamy niezerową energię wzbudzeń. W zerowej temperaturze mamy do czynienia z ostrą linią, która dla  $T \neq 0$  zostaje poszerzona, zanikając wykładniczo wraz z oddalaniem się od maksimum. Tymczasem w dwóch wymiarach zmierza ona do zera wraz z malejącymi wartościami  $q$ , a następnie rośnie zachowując się w przybliżeniu jak funkcja  $x \rightarrow \sqrt{x}$  przechodząc dla bardzo dużych wartości  $q$  w zależność kwadratową i pokrywając się z obszarem wzbudzeń wewnątrzprasmowych, cząstka-dziura. W związku z tym w obu przypadkach mamy do czynienia z kwazicząstkami o zupełnie różnym charakterze, a to wpływa na zachowanie się funkcji energii własnej.

#### 4.4 Jednocząstkowa energia własna

Przed przejściem do dalszych rachunków postać funkcji energii własnej zostanie zilustrowana na przykładzie jednocząstkowym dla pasma przewodnictwa. W funkcji energii własnej dla pojedyn-



Rysunek 4.2: Typowa mapa wzbudzeń plazmonowych w dwóch wymiarach. Kolorem szarym oznaczony jest obszar wzbudzeń cząstka dziura. Oddzielna linia to kwazicząstkowe wzbudzenia bieguna plazmowego

czej cząstki możemy wyróżnić dwie części

$$\Sigma(q, \omega) = \Sigma_{\text{HF}}(q) + M(q, \omega), \quad (4.17)$$

gdzie  $\Sigma_{\text{HF}}(q) = \Sigma_{\text{H}}(q) + \Sigma_{\text{X}}(q)$  jest lokalnym przyczynkiem odpowiadającym przybliżeniu Hartree-Focka. Część dyspersyjna  $M(\mathbf{q}, \omega)$  jest transformatą Fouriera składowej energii własnej nielokalnej w czasie. Wyrażenie na część urojoną  $M(\mathbf{q}, \omega)$  przyjmuje postać

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \text{Im}M(q, \omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}\Sigma(q, \omega) = \\ &= \sum_{\zeta} \sum_{\mathbf{q}} V_q^{\zeta} (V_q^{\zeta})^* \left[ (1 - f_c(\epsilon_c(\mathbf{k} + \mathbf{q})) + N(\omega_q^{\zeta})) \delta(\omega - \omega_q^{\zeta} - \epsilon_c(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \right. \\ &\quad \left. + (f_c(\epsilon_c(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + N(\omega_q^{\zeta})) \delta(\omega + \omega_q^{\zeta} - \epsilon_c(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \right], \end{aligned} \quad (4.18)$$

gdzie  $N_q(\omega_q^{\zeta})$  jest funkcją obsadzeń Bosego-Einsteina. Widać duże podobieństwo powyższego wzoru do analogicznego wyrażenia na  $\text{Im}\Sigma$  w przypadku sprzężenia ekscyton-fonon (wzór (A.9)). Główne różnice polegają na zastąpieniu oddziaływania odpowiednimi potencjałami  $V_q^{\zeta}$  zdefiniowanymi w równaniu (4.9) oraz pojawieniu się zależności dyspersyjnej  $\omega_q^{\zeta}$  dla wzbudzeń  $\zeta$ .



Wyprowadzenie wzoru (4.18) przebiega analogicznie do odpowiednich wzorów na  $\text{Im}\Sigma(q, \omega)$  dla tego w niniejszym rozdziale pominię szczegóły rachunkowe związane z (4.18). Ta analogia będzie wykorzystana w dalszych rozważaniach dla par elektron-dziura.

## 4.5 Równania na funkcje korelacji

W przypadku laserów półprzewodnikowych celem poniższych rachunków będzie otrzymanie funkcji wzmocnienia. Zależność tę można uzyskać obliczając emisję spontaniczną daną przez transformatę Fouriera zależnej od czasu funkcji korelacji

$$iG_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}^<(t) = \langle a_{c\mathbf{k}'_1}^\dagger(0)a_{v\mathbf{k}'_2}(0)a_{v\mathbf{k}'_2}^\dagger(t)a_{c\mathbf{k}_1}(t) \rangle. \quad (4.19)$$

$\langle \dots \rangle$  oznacza średnią termodynamiczną względem kwazirównowagowego stanu przy obecności obu rodzajów nośników. Funkcja ta związana jest z emisją spontaniczną. Transformata Fouriera propagatora zdefiniowanego wzorem (4.19) jest bezpośrednio związana z funkcją wzmocnienia. Sprzężenie pary elektron-dziura z zewnętrznym polem elektromagnetycznym o polaryzacji  $\sigma$  jest wprost proporcjonalne do elementu macierzowego

$$P_{\sigma,\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} = \langle \nu = c, \mathbf{k}_1 | \hat{p}_\sigma | \nu = v, \mathbf{k}_2 \rangle, \quad (4.20)$$

natomiast funkcja wzmocnienia wyraża się wzorem

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi}{cn_r\omega\mathcal{V}} \left(1 - e^{\beta(\omega - \mu_x)}\right) \langle P_\sigma | i\hat{G}^<(\omega) | P_\sigma \rangle, \quad (4.21)$$

gdzie  $\mu_x$  jest potencjałem chemicznym dla międzypasmowych wzbudzeń elektron-dziura ( $\mu_x = \mu_c - \mu_v$ ),  $\hat{G}^<(\omega)$  oznacza transformatę Fouriera funkcji  $\hat{G}^<(t)$ ,  $n_r$  to współczynnik odbicia,  $\mathcal{V}$  objętość układu a  $c$  prędkość światła. Wprowadzono też oznaczenie dla iloczynu skalarnego w przestrzeni dwucząstkowej elektronu i dziury

$$\langle P | P' \rangle = \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} P_{\sigma,\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^* P_{\sigma,\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \quad (4.22)$$

ROZDZIAŁ 4. FUNKCJA WZMOCNIENIA W LASERACH PÓŁPRZEWODNIKOWYCH —  
EFEKTY WIELOCIAŁOWE

Podobnie jak w przypadku fononów wprowadzę funkcję Greena na urojonym konturze czasowym  $\tau = it, 0 \leq \tau < \beta$

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}(\tau) = \left\langle a_{c\mathbf{k}'_1}^\dagger(-i\tau) a_{v\mathbf{k}'_2}(-i\tau) a_{v\mathbf{k}_2}^\dagger(0) a_{c\mathbf{k}_1}(0) \right\rangle, \quad (4.23)$$

Powyższą funkcję korelacji można przedstawić jako całkę funkcjonalną względem fluktuacji potencjału w reprezentacji stanów koherentnych (patrz rozdział 2)

$$\mathcal{G}(\tau) = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[b_{\mathbf{q}}^*(\tau') b_{\mathbf{q}}(\tau')] e^{S_{\text{bos}}[b_{\mathbf{q}}^*(\tau) b_{\mathbf{q}}(\tau); \tau']} g([b_{\mathbf{q}}^*(\tau') b_{\mathbf{q}}(\tau')]; \tau). \quad (4.24)$$

Tak samo jak w rozdziale 2 możemy wprowadzić funkcję korelacji  $g(\tau)$  reprezentującą wybraną realizację klasycznych fluktuacji plazmy reprezentowaną przez amplitudy  $b_{\mathbf{q}}(\tau), b_{\mathbf{q}}^*(\tau)$ . Dana jest ona wzorem

$$g_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}(\tau) = \left\langle a_{c\mathbf{k}'_1}^\dagger(-i\tau) a_{v\mathbf{k}'_2}(-i\tau) a_{v\mathbf{k}_2}^\dagger(0) a_{c\mathbf{k}_1}(0) \right\rangle_{\text{el}}, \quad (4.25)$$

gdzie  $\langle \dots \rangle_{\text{el}}$  oznacza średnią termodynamiczną względem zmiennych elektronowych. Efektywne działanie zostanie policzone przy założeniu gaussowskiego rozkładu fluktuacji. Dodatkowo nakładamy periodyczne warunki brzegowe na amplitudy

$$b_{\mathbf{q}}(\beta) = b_{\mathbf{q}}(0) \quad \text{oraz} \quad b_{\mathbf{q}}^*(\beta) = b_{\mathbf{q}}^*(0). \quad (4.26)$$

Oddziaływanie pomiędzy parami elektron-dziura oraz efektywnymi bozonami typu  $\zeta$  opisywane jest przez hamiltonian postaci

$$\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} \left( a_{c\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{c\mathbf{k}} - a_{v\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v\mathbf{k}} \right) \left( V_q^\zeta b_{\mathbf{q}}^\zeta + (V_{-q}^\zeta)^* (b_{-\mathbf{q}}^\zeta)^* \right). \quad (4.27)$$

Postać tego oddziaływania w przypadku plazmonów zdeterminowana jest wzorami (4.9) natomiast w przypadku fononów optycznych podłużnych przyjmę fröhlichowski potencjał

$$V_q = -i \sqrt{\frac{2\pi\omega_0 e^2}{\mathcal{V}}} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{1}{q}. \quad (4.28)$$

ROZDZIAŁ 4. FUNKCJA WZMOCNIENIA W LASERACH PÓŁPRZEWODNIKOWYCH —  
EFEKTY WIELOCIAŁOWE

Stosując przybliżenie Hartree-Focka dla par elektron-dziura otrzymujemy równanie postaci

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \tau} g_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}(\tau) &= (\epsilon_c(\mathbf{k}'_1) - \epsilon_v(\mathbf{k}'_2)) g_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}(\tau) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} \left[ \langle a_{v\mathbf{k}}^\dagger(-i\tau) a_{v\mathbf{k}'_2}(-i\tau) \rangle_{\text{el}} g_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{q} \mathbf{k} + \mathbf{q} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}(\tau) \right. \\
 &- \left. \langle a_{c\mathbf{k}'_1}^\dagger(-i\tau) a_{c\mathbf{k}}(-i\tau) \rangle_{\text{el}} g_{\mathbf{k} + \mathbf{q} \mathbf{k}'_2 + \mathbf{q} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}(\tau) \right] \\
 &+ \sum_{\zeta} \sum_{\mathbf{q}} (V_q^\zeta b_{\mathbf{q}}^\zeta + (V_{-q}^\zeta)^* (b_{-\mathbf{q}}^\zeta)^*) \left[ g_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{q} \mathbf{k}'_2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}(\tau) - g_{\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 - \mathbf{q} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}(\tau) \right],
 \end{aligned} \tag{4.29}$$

gdzie  $U_q$  oznacza międzypasmowe statyczne oddziaływanie elektron-dziura. W powyższym równaniu jest ono modyfikowane przez jednocząstkowe średnie  $\langle a_{v\mathbf{k}}^\dagger(-i\tau) a_{v\mathbf{k}'_2}(-i\tau) \rangle_{\text{el}}$  oraz  $\langle a_{c\mathbf{k}'_1}^\dagger(-i\tau) a_{c\mathbf{k}}(-i\tau) \rangle$ . Część dynamiczna oddziaływania coulombowskiego manifestuje się poprzez fluktuujące potencjały pól bozonowych w ostatnim wyrazie wzoru (4.29). Przybliżmy średnie termodynamiczne stojące przy  $U_q$  przez kwazicząstkowe rozkłady Fermiego-Diraca

$$\langle a_{v\mathbf{k}}^\dagger(-i\tau) a_{v\mathbf{k}'_2}(-i\tau) \rangle_{\text{el}} = \delta_{k k'_2} f_v(\epsilon_v(k)) \tag{4.30}$$

dla pasma walencyjnego oraz

$$\langle a_{c\mathbf{k}'_1}^\dagger(-i\tau) a_{c\mathbf{k}}(-i\tau) \rangle_{\text{el}} = \delta_{k k'_1} f_c(\epsilon_c(k)), \tag{4.31}$$

dla pasma przewodnictwa.

Równanie (4.29) możemy zapisać schematycznie w następujący sposób

$$\frac{\partial}{\partial \tau} g(\tau) = [\hat{H}_0 + \hat{V}(\tau)] g(\tau) \tag{4.32}$$

W powyższym wzorze  $H_0$  oznacza część elektron-dziura z międzypasmowym oddziaływaniem  $U_q$ , składa się ona z dwóch części

$$\hat{H}_0 = \hat{T} - \hat{F} \cdot \hat{U}, \tag{4.33}$$

$\hat{T}$  — operatora energii kinetycznej oraz statycznego międzypasmowego oddziaływania  $\hat{U}$  mnożonego przez czynnik  $\hat{F}$  odpowiadający jednocząstkowym funkcjom obsadzeń. W części tej

ROZDZIAŁ 4. FUNKCJA WZMOCNIENIA W LASERACH PÓŁPRZEWODNIKOWYCH —  
EFEKTY WIELOCIAŁOWE

manifestuje się zakaz Pauliego, który powoduje obsadzanie coraz to wyższych poziomów jednocząstkowych przez elektrony i dziury. Skutkiem pojawienia się operatora  $\hat{F}$  operator  $H_0$  nie jest hermitowski. Ponadto operator ten posiada dla każdej wartości własnej lewostronne i prawostronne wektory własne (patrz np. [68]).

Operator  $\hat{V}$  reprezentuje potencjał oddziaływania z zależnym od czasu polem bozonowym i w dalszych rachunkach będzie traktowany jako zaburzenie. Z punktu widzenia rachunku zaburzeń stosując powyższe przybliżenia traktujemy międzypasmowe wzbudzenia elektron-dziura jako dominujący efekt mający wpływ na optyczne własności układu. Dynamiczne ekranowanie związane z efektami wewnątrzpasmowymi oraz oddziaływanie z fononami traktowane jest tutaj jako zaburzenie. Prowadzi to do formalnego wzoru na  $g(\tau)$  (zdefiniowanej przez (4.25)),

$$g(\tau) = e^{\hat{H}_0\tau} \mathcal{T} \exp \left[ \int_0^\tau e^{-\hat{H}_0\tau'} \hat{V}(\tau') e^{\hat{H}_0\tau'} d\tau' \right] g(0). \quad (4.34)$$

Rozwijając powyższy wzór do drugiego rzędu rozwinięcia kumulantowego otrzymujemy następujące wyrażenie

$$\mathcal{G}(\tau) = e^{\hat{H}_0\tau} \exp \left[ \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 e^{-\hat{H}_0\tau_1} \langle \hat{V}(\tau_1) e^{\hat{H}_0(\tau_1-\tau_2)} \hat{V}(\tau_2) \rangle_{\text{bos}} e^{\hat{H}_0\tau_2} \right] \mathcal{G}(0), \quad (4.35)$$

gdzie  $\mathcal{G}(\tau)$  jest funkcją  $g(\tau)$  uśrednioną po zmiennych bozonowych.

Oznaczmy przez  $|n\rangle$  oraz  $\langle \tilde{n}|$  odpowiednio prawostronne oraz lewostronne wektory własne odpowiadające wartościom własnym  $E_n$

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (4.36)$$

$$\langle \tilde{n}| \hat{H}_0 = \langle \tilde{n}| E_n. \quad (4.37)$$

Stanów tych możemy użyć do policzenia funkcji wykładniczej. Używając reprezentacji jedynek złożonej ze stanów  $|n\rangle$ ,  $\langle \tilde{n}|$  oraz uwzględniając, że średnia po zmiennych bozonowych prowadzi

do pojawienia się kombinacji bozonowych funkcji obsadzeń otrzymujemy

$$\left\langle \left( b_{\mathbf{q}}(\tau) + b_{-\mathbf{q}}^*(\tau) \right) \left( b_{-\mathbf{q}'}(0) + b_{\mathbf{q}'}^*(0) \right) \right\rangle_{\text{bos}} = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \left[ (N(\omega_{\mathbf{q}}) + 1)e^{-\omega_{\mathbf{q}}\tau} + N(\omega_{\mathbf{q}})e^{\omega_{\mathbf{q}}\tau} \right] \quad (4.38)$$

Dokonując przedłużenia analitycznego od urojonych czasów  $t = -i\tau$  do czasów rzeczywistych w wykładniku funkcji korelacji 4.35 odnajdujemy analogiczne wyrażenie na funkcję działania do przypadku oddziaływania ekscyton-fonon omawianego w rozdziale 3 (wzór (2.42))

$$S_n(t) = \int_{-\infty}^{\infty} M_n^<(\omega + E_n) \left( \frac{e^{-i\omega t} + i\omega t - 1}{\omega^2} \right) d\omega, \quad (4.39)$$

gdzie

$$M_n^<(\omega) = \sum_{\zeta} \sum_{n'} \sum_{\mathbf{q}} \langle \tilde{n} | V_{\mathbf{q}}^{\zeta} | n' \rangle \langle \tilde{n}' | (V_{-\mathbf{q}}^{\zeta})^* | n \rangle \frac{1}{\langle \tilde{n}' | n' \rangle} \left[ (N(\omega_{\mathbf{q}}^{\zeta}) + 1) \delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}}^{\zeta} - E_{n'}) + N(\omega_{\mathbf{q}}^{\zeta}) \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}^{\zeta} - E_{n'}) \right]. \quad (4.40)$$

Należy zaznaczyć, że funkcja  $M_n^<$ , nie jest w obecnym sformułowaniu dokładnie równa urojonej części retardowanej energii własnej ekscytonu. Wynika to stąd, że rozważana jest gęstość spektralna dla emisji, a nie absorpcji. Wzór (4.35) przyjmuje w związku z tym następującą postać

$$iG_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}^<(t) = \sum_n e^{-iE_n t} e^{S_n(t)} \frac{1}{\langle \tilde{n} | n \rangle} \sum_{\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2} \langle \mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2 | n \rangle \langle \tilde{n} | \mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2 \rangle iG_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}^<(0). \quad (4.41)$$

Czasowa funkcja korelacji posiada w tym przypadku bardzo ciekawą strukturę. Odnajdujemy w niej sumę po poziomach  $n$ , reprezentowanych przez funkcję oscylującą z odpowiednią częstotliwością związaną z niezaburzonym spektrum oraz dla każdego z tych poziomów mamy oddzielny czynnik modyfikujący związany z fazą drgań. Oprócz tego każda z tych linii posiada swój „warunek początkowy” wyrażający się poprzez przekrywanie się każdego poziomu  $n$  ze wszystkimi funkcjami korelacji w czasie  $t = 0$ .

ROZDZIAŁ 4. FUNKCJA WZMOCNIENIA W LASERACH PÓŁPRZEWODNIKOWYCH —  
EFEKTY WIELOCIAŁOWE

W celu wyznaczenia warunku początkowego  $iG_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}^<(0)$  rozważmy pomocniczą wielkość  $\mathcal{F}$  zdefiniowaną następującym wzorem

$$\mathcal{F} = iG^<(\beta) - iG^<(0) = \left\langle \left( \mathcal{T} e^{\int_0^\beta (\hat{H}_0 + \hat{V}(\tau)) d\tau} - 1 \right) g(0) \right\rangle_{\text{bos}}. \quad (4.42)$$

Elementy macierzowe operatora  $\mathcal{F}$  wynoszą

$$\mathcal{F}_{\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} = \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_1} \langle a_{v\mathbf{k}_2}^\dagger a_{v\mathbf{k}'_2} \rangle - \delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_2} \langle a_{c\mathbf{k}'_1}^\dagger a_{c\mathbf{k}_1} \rangle. \quad (4.43)$$

Po prawej stronie równania (4.42) mamy średnią termodynamiczną po zmiennych bozonowych. Przybliżmy ją, zaniedbując korelacje wyższych rzędów następującym wyrażeniem

$$\left\langle \left( \mathcal{T} e^{\int_0^\beta (\hat{H}_0 + \hat{V}(\tau)) d\tau} - 1 \right) g(0) \right\rangle_{\text{bos}} = \left\langle \mathcal{T} e^{\int_0^\beta (\hat{H}_0 + \hat{V}(\tau)) d\tau} - 1 \right\rangle_{\text{bos}} \langle g(0) \rangle_{\text{bos}} \quad (4.44)$$

i zdefiniujmy efektywny hamiltonian ekscytonowy w następujący sposób

$$e^{\beta \hat{H}_{\text{eff}}} = \left\langle \mathcal{T} e^{\int_0^\beta (\hat{H}_0 + \hat{V}(\tau)) d\tau} \right\rangle_{\text{bos}}. \quad (4.45)$$

Korzystając z tych definicji możemy zapisać przybliżony wzór na  $\mathcal{G}(0)$

$$\mathcal{G}(0) = \left( e^{\beta \hat{H}_{\text{eff}}} - 1 \right)^{-1} \mathcal{F}. \quad (4.46)$$

Następnie zdefiniujmy funkcję kształtu linii

$$\mathcal{L}_n(\omega) = \text{Re} \left[ \int_0^{+\infty} e^{\mathcal{S}_n(t)} e^{i\omega t} dt \right]. \quad (4.47)$$

oraz czynnik związany z warunkiem początkowym

$$B_n = \left\langle \tilde{n} \left| \left( e^{\beta \hat{H}_{\text{eff}}} - 1 \right)^{-1} \mathcal{F} \right| \tilde{n} \right\rangle. \quad (4.48)$$

Dla nieoddziałujących cząstek  $B_n = n_c(\mathbf{k})(1 - n_v(\mathbf{k}))$ , gdzie  $n_c(\mathbf{k})$  i  $n_v(\mathbf{k})$  oznaczają funkcje obsadzeń Fermiego-Diraca.

Wzór na liniowy czynnik wzmocnienia wyrażony przez powyższe funkcje (patrz równania (4.21), (4.41)) ma wobec tego postać

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi}{cn_r\omega\mathcal{V}} \left(1 - e^{\beta(\omega - \mu_x)}\right) \sum_n |\langle P_\sigma | n \rangle|^2 B_n \mathcal{L}_n(\omega - E_n). \quad (4.49)$$

Wyrażenie  $|\langle P_\sigma | n \rangle|^2$  odpowiada elementowi macierzowemu przejścia optycznego związanego z rekombinacją odpowiadającą polaryzacji  $\sigma$  dla stanu własnego  $|n\rangle$  hamiltonianu ekscytonowego  $H_0$ .  $B_n$  spełnia rolę warunku początkowego i zawiera w sobie funkcję rozkładu par elektron-dziura przed zajściem rekombinacji. Ostatni czynnik  $\mathcal{L}_n(\omega)$  to funkcja kształtu linii odpowiadającej stanowi  $|n\rangle$ . Trzeba zauważyć, że suma występująca po prawej stronie jest jawnie dodatnia. Natomiast czynnik  $\left(1 - e^{\beta(\omega - \mu_x)}\right)$  gwarantuje, że tzw. *cross-over*, czyli punkt, w którym współczynnik wzmocnienia zmienia znak na ujemny wypada dokładnie w potencjale chemicznym ekscytonu, czyli dla energii wynoszącej  $(\mu_c - \mu_v)$ . Zauważmy, że stosując powyższy wzór otrzymujemy wynik samozgodny względem potencjału chemicznego  $\mu_x$ . Wartość  $\mu_x$  determinuje zmianę znaku w funkcji wzmocnienia dokładnie w tym samym punkcie, który wynika z postaci operatora  $H_0$ . W ten sposób unikamy dodatkowego problemu na jaki natknęlibyśmy się w okolicy punktu zmiany znaku funkcji wzmocnienia. Wszelkie drobne niedokładności obliczenia wartości  $\mu_x$  powodowałyby błędny opis  $\alpha(\omega)$  w otoczeniu  $\mu_x$ , gdzie funkcja zmienia znak.

Zwróćmy jeszcze uwagę na wynik określający kształt linii widmowej  $\mathcal{L}_n(\omega)$ . Każda linia charakteryzuje się odmienną zależnością funkcyjną i dla każdego poziomu powinniśmy przeprowadzić oddzielne rachunki w oparciu o rozwinięcie kumulantowe. Jednak z przyczyn praktycznych taka procedura prowadzi do sporych komplikacji rachunkowych nie wpływając zbytnio na końcowy wynik. Zakładamy, że najistotniejsza jest  $\mathcal{L}_0(\omega)$  związana ze stanem podstawowym pary elektron-dziura. Dlatego też wzór (4.49) na  $\alpha(\omega)$  można zapisać w następującej postaci.

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi}{cn_r\omega\mathcal{V}} \left(1 - e^{\beta(\omega - \mu_x)}\right) \sum_n |\langle P_\sigma | n \rangle|^2 B_n \mathcal{L}_0(\omega - E_n). \quad (4.50)$$

Dalszą analizę powyższego wzoru można przeprowadzić na podstawie porównania z konkretnymi danymi doświadczalnymi.

## 4.6 Porównanie z danymi doświadczalnymi

Do dalszych rachunków przyjmijmy używany już wcześniej w niniejszej rozprawie model dwupasmowy. Stany  $|n\rangle$  opisywały będą ekscyton o pędzie związanym z ruchem środka masy  $\mathbf{P}$  oraz stanie wewnętrznym  $\lambda$ . Energia ekscytonu opisywana będzie wobec powyższego wzorem

$$\epsilon_\lambda(\mathbf{P}) = \epsilon_\lambda + \frac{P^2}{2M}, \quad (4.51)$$

gdzie  $M$  oznacza sumę mas elektronu i dziury.

W przejściach optycznych dominujące będą procesy dla których zmiana pędu całkowitego obu cząstek będzie pomijalnie mała, dlatego też skupię się na ekscytonie w stanie  $|\lambda_0, \mathbf{P} = 0\rangle$ . Wykonując rachunki analogiczne do przeprowadzonych w dodatku A,B otrzymujemy następujący wzór na  $M_{\lambda_0}^<(\omega)$

$$\begin{aligned} M_{\lambda_0}^<(\omega) &= \sum_{\lambda \zeta \mathbf{q}} V_q^\zeta (V_q^\zeta)^* \left[ (1 + N(\omega_q^\zeta)) \delta(\omega + \omega_q^\zeta - \epsilon_\lambda(\mathbf{q})) + N(\omega_q^\zeta) \delta(\omega - \omega_q^\zeta - \epsilon_\lambda(\mathbf{q})) \right] \times \\ &\times \frac{\langle \tilde{\lambda}_0 | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_e} - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_h} | \lambda \rangle \langle \tilde{\lambda} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_e} - e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_h} | \lambda_0 \rangle}{\langle \tilde{\lambda} | \lambda \rangle}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Stany  $|\lambda\rangle$  wraz z odpowiadającymi im energiami  $\epsilon_\lambda$  stanowią rozwiązanie problemu własnego (4.37), (4.36). W przypadku niskich koncentracji mogą one być reprezentowane przez wodoropodobne funkcje falowe. Przybliżenie takie nie może zostać zastosowane do laserów półprzewodnikowych. W silnie wzbudzonych układach, gdzie ekranowanie jest bardzo silne w pierwszym przybliżeniu możemy zaniedbać międzypasmowe oddziaływanie coulombowskie  $U_q$  (wzór (4.29)), które ma mniejsze znaczenie w porównaniu z energią kinetyczną co wynika z obsadzenia coraz wyższych stanów w obu pasmach.

W takim przypadku para elektron-dziura scharakteryzowane są przez pęd względny  $\mathbf{p}$  oraz pęd środka masy  $\mathbf{P}$ . Przyjmując  $\lambda = \mathbf{p}$  oraz oznaczając masę zredukowaną pary cząstek elektron-



dziura symbolem  $\mu$  mamy

$$\epsilon_\lambda(\mathbf{P}) = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{P^2}{2M}. \quad (4.53)$$

Układem referencyjnym będzie laser oparty na heterostrukturze zbudowany na bazie  $\text{In}_{0.727}\text{Ga}_{0.273}\text{As}_{0.58}\text{P}_{0.4}$ .  
W doświadczeniu mierzono spontaniczną emisję i rekombinacja w temperaturze pokojowej [8,69].

Zauważmy, że w przypadku zaniedbania korelacji pomiędzy elektronem w paśmie przewodnictwa i dziurą w paśmie walencyjnym funkcja działania  $S(t)$  rozpada się na dwie niezależne części z których jedna opisuje wzbudzenia elektronowe a druga dziurowe. Każdą z tych części można policzyć oddzielnie. Element macierzowy przejścia pomiędzy stanami o różnych  $\mathbf{p}$  ma postać

$$\langle \mathbf{p}_0 | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_e} - e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_h} | \mathbf{p} \rangle = \mathcal{V} (\delta_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_0, \mathbf{q}m_h/M} - \delta_{\mathbf{p}_0-\mathbf{p}, \mathbf{q}m_e/M}). \quad (4.54)$$

$M^{<}$  rozpada się w ten sposób na dwie niezależne części, elektronową i dziurową

$$M_{\mathbf{p}_0}^{<}(\omega) = M_{\mathbf{p}_0}^{e,<}(\omega) + M_{\mathbf{p}_0}^{h,<}(\omega). \quad (4.55)$$

$M_{\mathbf{p}_0}^{i,<}$ , gdzie  $i = e, h$  dane jest następującym wzorem

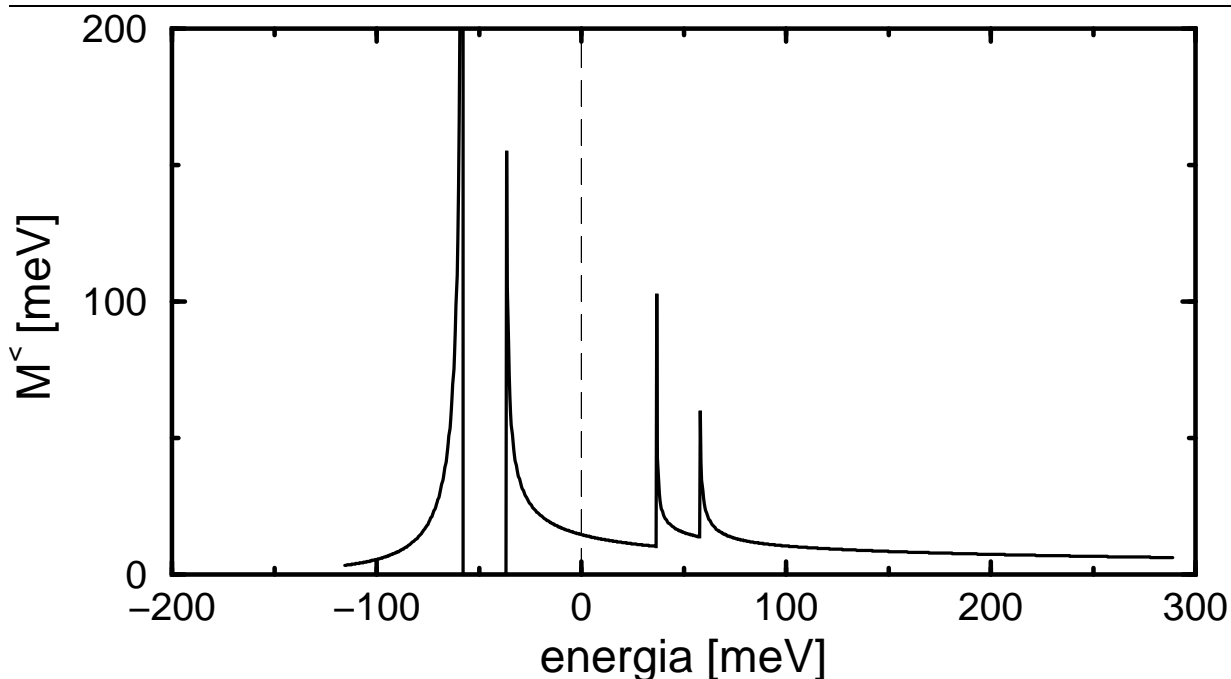
$$M_{\mathbf{p}_0}^{i,<}(\omega) = - \sum_{\zeta} \left[ \frac{\gamma_{\zeta}^2}{2\pi} \frac{N(\omega_{q-}^{\zeta})}{\left| \frac{q^2}{m_i} + (\omega_q^{\zeta})'(q_-) \right|} + \frac{\gamma_{\zeta}^2}{2\pi} \frac{1 + N(\omega_{q+}^{\zeta})}{\left| \frac{q^2}{m_i} + (\omega_q^{\zeta})'(q_+) \right|} \right], \quad (4.56)$$

gdzie  $\gamma_{\zeta}$  oznacza czynnik sprzężenia różny dla plazmonów i fononów

$$\gamma_{\zeta}^2 = \begin{cases} 2\pi \frac{\omega_{\text{pl}}^2}{\epsilon_{\infty}\omega_q} & \text{plazmony,} \\ 2\pi\omega_0 \left( \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) & \text{fonony.} \end{cases} \quad (4.57)$$

$(\omega_q^{\zeta})'_q$  oznacza pochodną relacji dyspersji po wektorze falowym, natomiast  $q_{\pm}$  stanowią dodatnie rozwiązanie równania

$$\omega \pm \omega_q^{\zeta} - \frac{q^2}{2m_e} = 0 \quad (4.58)$$

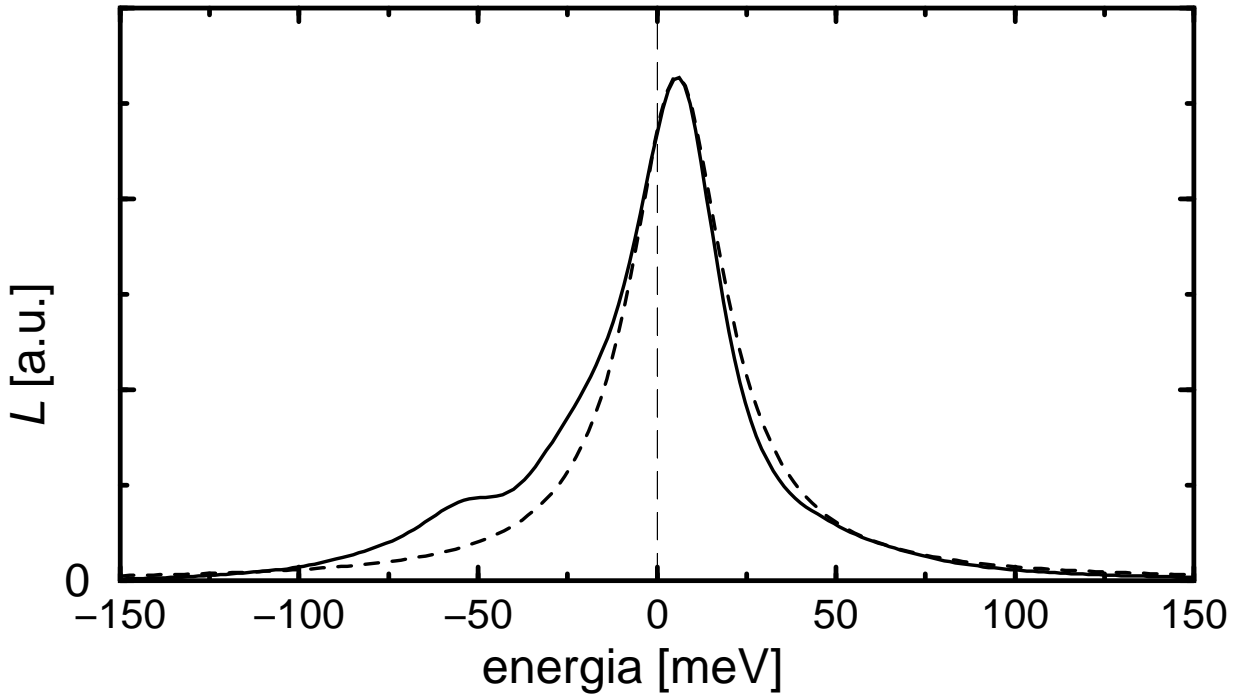


Rysunek 4.3: Zależność  $M^<(\omega)$  dla heterozłącza zbudowanego na bazie  $\text{In}_{.727}\text{Ga}_{.273}\text{As}_{.58}\text{P}_{.42}/\text{InP}$  przy koncentracji wynoszącej  $1,8 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ .

Otrzymana w wyniku tych obliczeń funkcja  $M^<$  przedstawiona jest na rysunku 4.3.

Na wykresie zauważamy silne maksima związane z oddziaływaniem z plazmonami oraz fononami optycznymi podłużnymi. Zewnętrzne maksima pochodzą od wzbudzeń plazmonowych, natomiast za środkowe odpowiedzialne są fonony. Istotnym faktem jest brak wpływu plazmonów na poszerzenie linii widmowej (przypomnijmy, że szerokość linii widmowej zdeterminowana jest przez wartość  $M^<$  w  $\omega = 0$ , patrz rozdział 3). Maksima plazmonowe wypadają w energiach odpowiadających energiom wzbudzeń fononowych oraz plazmonowych. Linie są bardzo ostre, a ich natężenie zdeterminowane jest przez czynniki obsadzeniowe. W realnych materiałach należy spodziewać się mniej ostrych zależności co spowodowane jest rozmyciem poziomów występującym w rzeczywistości. W pracy tej nie jest stosowany żaden dodatkowy czynnik wpływający na wygładzenie maksimów.

Rysunek 4.4 przedstawia kształt linii widmowej odpowiadający  $M^<$  z rysunku 4.3. Dla porównania została na nim umieszczona funkcja Lorentza przybliżająca główne maksimum kwa-

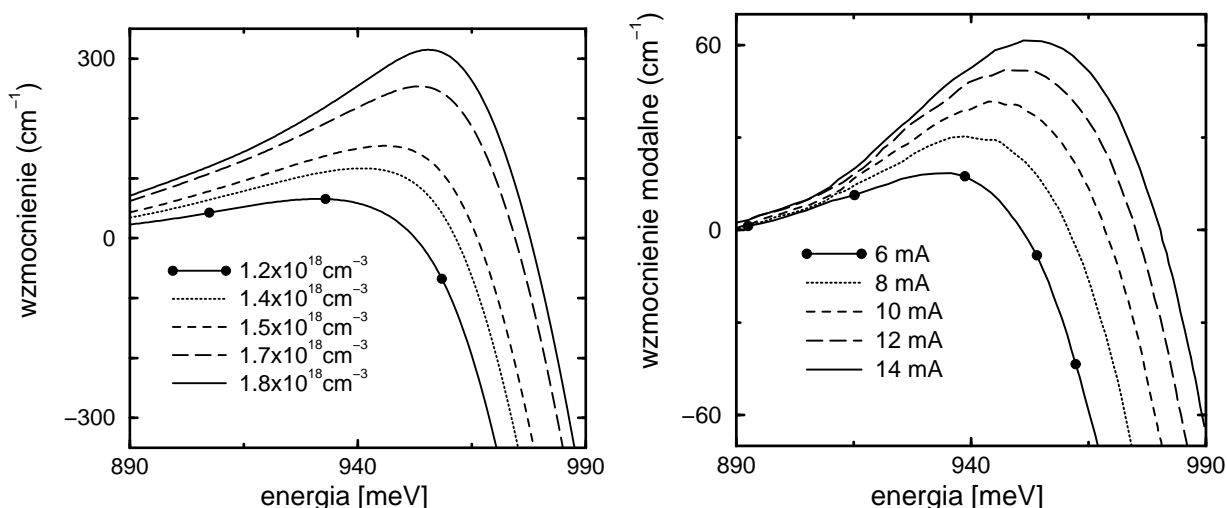


Rysunek 4.4: Kształt linii ekscytonowej dla odpowiadający funkcji energii własnej z rysunku 4.3

zicząstkowe. Linia wykazuje asymetrię oraz wykładniczy zanik, co zgodne jest obserwacjami doświadczalnymi.

Lorentzowski kształt, pomimo, że dobrze odtwarza główną linię, nie może zostać użyty w dokładnych rachunkach. Funkcję tą charakteryzuje potęgowy zanik, co powoduje duże zwiększenie gęstości spektralnej z dala od maksimum. Użycie funkcji Lorentza jako kształtu linii  $\mathcal{L}_0(\omega)$  w wzorze (4.49) powoduje, że suma wkładów od odległych linii modyfikuje jakościowo kształt zależności funkcji wzmocnienia od energii. Dlatego w publikowanych pracach bardzo często stosuje się różne fenomenologiczne funkcje zapewniające wykładniczy zanik gęstości spektralnej. Przykładem takiego podstawienia jest odwrotność cosinusa hiperbolicznego.

Tak obliczonej funkcji kształtu linii można użyć do wyznaczenia zależności współczynnika wzmocnienia od energii. Na rysunku 4.5 przedstawione jest porównanie otrzymanych teoretycznie wyników z krzywymi wyznaczanymi eksperymentalnie. W doświadczeniu mierzony jest tzw. modalny współczynnik wzmocnienia, który różni się od tego, co wyznacza się w teorii. Dlatego skale pionowe na osiach rysunków 4.5 różnią się między sobą. Relacja pomiędzy współczynnikiem



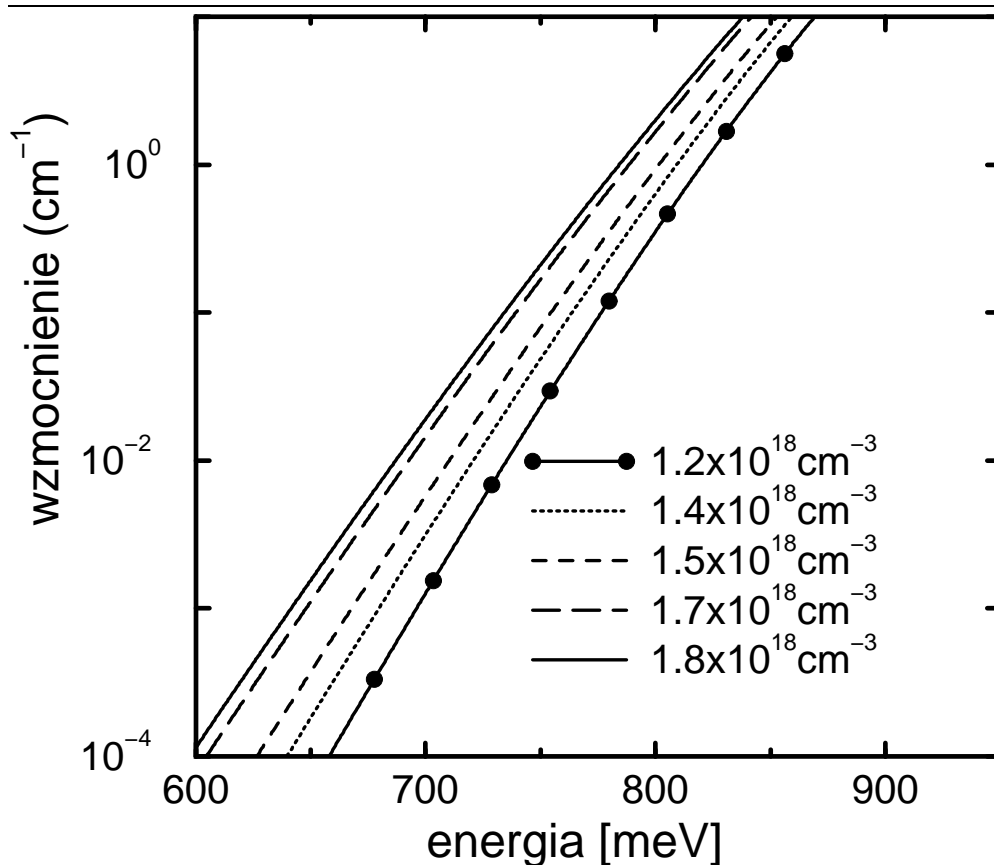
(a) Krzywe teoretyczne opisujące zależność współczynnika wzmocnienia od energii obliczone na podstawie prezentowanego modelu

(b) Dane doświadczalne pochodzące z pracy [49]

Rysunek 4.5: Porównanie współczynnika wzmocnienia lasera dla układu opartego na heterostrukturze  $\text{In}_{0.727}\text{Ga}_{0.273}\text{As}_{0.58}\text{P}_{0.42}/\text{InP}$ . Pomiar dokonany został w temperaturze pokojowej.

wzmocnienia, a modalnym współczynnikiem wzmocnienia związana jest z objętością obszaru czynnego optycznie. Zależność pomiędzy obydwoma współczynnikami zależy istotnie od szczegółów związanych ze specyfiką danego eksperymentu.

Z zamieszczonych tutaj rysunków wyraźnie widać, że zaproponowana w niniejszej pracy teoria zarówno jakościowo jak i ilościowo odtwarza dane uzyskane w eksperymencie. Model odtwarza także punkt, w którym funkcja wzmocnienia zmienia swój znak (z ang. *cross-over*). Pewne różnice można dostrzec w zaniku funkcji wzmocnienia. Zauważmy, że mierzona w doświadczeniu funkcja zanika znacznie szybciej niż przewiduje to teoria. Może być kilka przyczyn, które wpływają na otrzymane nieścisłości. Podstawowym powodem jest przyjęcie modelu nieskorelowanych cząstek elektron-dziura, co prowadzi do zwiększenia efektów fononowych i plazmonowych. Wprowadzenie czynników uwzględniających te korelacje mogłoby doprowadzić do znoszenia się składowych w wzorze na energię własną (elektron i dziura mają przeciwne znaki i w przypadku efektów elektrostatycznych możemy spodziewać się ich osłabienia, czego klasycznym analogonem jest dipol



Rysunek 4.6: Obszar niskoenergetyczny krzywych wzmocnienia z rysunku 4.5 w skali logarytmicznej

elektryczny). Prowadzi to do pojawienia się dodatkowego wyrazu mieszanego we wzorze (4.56). Rachunki takie są możliwe do wykonania, mieszczą się one w ramach przedstawionej procedury, prowadzą jednak do komplikacji natury technicznej.

Kolejny rysunek 4.6 przedstawia zależność krzywej wzmocnienia od energii w obszarze niskoenergetycznym w skali logarytmicznej. Widać wyraźny wykładniczy zanik funkcji wzmocnienia, co jakościowo dobrze odtwarza dane doświadczalne.

W porównaniu z fenomenologicznymi modelami poszerzenia, które zakładają lorentzowski kształt linii przedstawione tutaj rachunki znacznie lepiej przybliżają wyniki doświadczenia. Na bazie przedstawionych tu obliczeń można wnioskować, że teoria ta tworzy dobre podstawy do opisu silnie wzbudzonych struktur. W celu uzyskania lepszej zgodności z doświadczeniem na-

*ROZDZIAŁ 4. FUNKCJA WZMOCNIENIA W LASERACH PÓŁPRZEWODNIKOWYCH —  
EFEKTY WIELOCIAŁOWE*

---

leżałoby uwzględnić dodatkowe efekty związane np. ze strukturą pasmową, formułując model w reprezentacji Luttingera-Kohna uwzględniający wiele pasm.

# Rozdział 5

## Podsumowanie

W niniejszej rozprawie przedstawiona została teoria opisu zjawisk wielociałowych w silnie wzbudzonych strukturach półprzewodnikowych. Celem tej pracy było opracowanie spójnej metody opisu układów w ramach prostego modelu. Podstawę prezentowanej metody stanowi oddzielenie oddziaływania międzypasmowego od wewnątrzpasmowych efektów wielociałowych. Te drugie zostały potraktowane modelowo jako fluktuujące potencjały, które cechuje bozonowy charakter wzbudzeń. Podejście takie pozwala na przeprowadzenie systematycznego wysumowania w rachunku zaburzeń wyrazów do nieskończonego rzędu w ramach rozwinięcia kumulantowego. Ważnym etapem tworzenia jednorodnego opisu jest zaprezentowany w rozdziale 2 opis krawędzi absorpcji w półprzewodnikach. Rozwinięcie kumulantowe odtwarza przewidywany eksperymentalnie wykładniczy zanik funkcji absorpcji od energii w szerokim zakresie wartości. Fragment ten stanowi ilustrację metodologii prowadzącej do otrzymania spójnego opisu układów silnie wzbudzonych.

W pracy zaprezentowane zostały przykładowe rachunki prowadzące do uzyskania zależności funkcji wzmocnienia od energii w laserach półprzewodnikowych. Należy przy tym zaznaczyć, że w ramach przedstawionej teorii możliwe jest otrzymanie także innych wielkości mierzonych w eksperymencie. Funkcja wzmocnienia została wybrana ze względu na ważną rolę, jaką odgrywa w badaniu i opisie układów silnie wzbudzonych. Przykładowe rachunki numeryczne wykazują zgodność z doświadczeniem. Różnice ilościowe pomiędzy prezentowanymi wynikami teoretycznymi a danymi eksperymentalnymi są nieduże i widać, że teoria jakościowo dobrze odtwarza

rzeczywisty układ. Odstępstwa można wyjaśnić przyjęciem w ostatecznych rachunkach prostego modelu nieskorelowanych cząstek, co wpłynęło na podbicie krzywej wzmocnienia w obszarze niskoenergetycznym.

Kolejną bardzo istotną cechą prezentowanej tu teorii jest możliwość systematycznego polepszenia opisu poprzez włączanie innych efektów. Koronnym przykładem może być uwzględnienie w kolejnym przybliżeniu bardziej realistycznego modelu opisującego strukturę pasmową. Rozszerzanie teorii w tym kierunku prowadzi do zmian technicznych i w konsekwencji komplikacji rachunkowych, bez wpływu na ogólny schemat postępowania. Inne efekty, nie związane ze strukturą pasmową, mogą być uwzględnione w ramach funkcji działania, która ma bezpośredni wpływ na kształt pojedynczej linii widmowej. W pierwszym przybliżeniu wszelkie dodatkowe zaburzenia można formułować w analogii do przedstawionego tutaj przykładu oddziaływania elektron-fonon podłużny oraz wewnątrzpasemowego oddziaływania elektron-elektron. Wszystkie te rozszerzenia teorii mieszczą się w ramach zaprezentowanego w niniejszej rozprawie schematu i jedyną przeszkodą mogą być trudności natury technicznej. Cechy te powodują, że zaprezentowana teoria, ze względu z jednej strony na prostotę oraz z drugiej na możliwości rozszerzania, może stanowić użyteczne narzędzie opisu zjawisk wielociałowych w strukturach półprzewodnikowych.



## Dodatek A

# Energia własna dla ekscytonu oddziałującego z fononami LO

W niniejszym dodatku przedstawione zostanie wyprowadzenie wzorów na energię własną ekscytonu oddziałującego z fononami optycznymi podłużnymi w modelu dwupasmowym przy założeniu niskiej koncentracji swobodnych nośników.

Oddziaływanie ekscyton-fonon LO przyjmę w następującej postaci

$$H_{\text{eks-fon}} = \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \sum_{\lambda_0, \lambda} A_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \lambda}^\dagger A_{\mathbf{p}, \lambda_0} \left( V_{\mathbf{q}}^{\lambda_0 \lambda} b_{-\mathbf{q}}^\dagger + (V_{\mathbf{q}}^{\lambda_0 \lambda})^* b_{\mathbf{q}} \right), \quad (\text{A.1})$$

gdzie  $V_{\mathbf{q}}^{\lambda_0 \lambda}$  to element macierzowy tego oddziaływania odpowiadający przejściu pomiędzy stanami ekscytonowymi  $\lambda_0$  i  $\lambda$ , przy jednoczesnej zmianie pędu o  $\mathbf{q}$ . W zależności od przyjętego układu współrzędnych i konwencji  $\lambda_0$  i  $\lambda$  mogą wyrażać się przez różne zestawy liczb kwantowych.

Dla oddziaływania typu Fröhlicha

$$V_{\mathbf{q}}^{\lambda_0 \lambda} = \frac{M_0}{\sqrt{\mathcal{V}q}} \left\langle \lambda_0 \left| e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_e}{m_e+m_h}} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_h}{m_e+m_h}} \right| \lambda \right\rangle, \quad (\text{A.2})$$

gdzie

$$M_0^2 = \frac{4\pi\alpha\omega_0^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2M}}, \quad (\text{A.3})$$

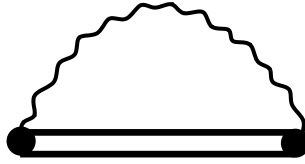
**DODATEK A. ENERGIA WŁASNA DLA EKSCYTONU ODDZIAŁUJĄCEGO Z FONONAMI LO**

---

$$\alpha = e^2 \sqrt{\frac{M}{\omega_0}} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right). \quad (\text{A.4})$$

Współczynnik  $\alpha$  jest stałą sprzężenia Fröhlicha,  $M$  masą ekscytonu,  $e$  ładunkiem elektronu,  $\omega_0$  częstością fononów optycznych-podłużnych (przy założeniu stałej relacji dyspersji),  $\epsilon_0, \epsilon_\infty$  są odpowiednią statyczną i wysokoczęstotściową stałą dielektryczną.

Centralną część we wzorze (2.42) na funkcję działania stanowi część urojona retardowanej energii własnej. W celu jej policzenia rozważmy diagram najniższego rzędu względem oddziaływania ekscyton-fonon.



Linia falista oznaczony jest propagator fononowy, natomiast podwójna gruba kreska symbolizuje propagator ekscytonu. Diagramowi temu odpowiada następujące wyrażenie na energię własną zapisane przy wykorzystaniu metody Matsubary sumy po częstościach.

$$\Sigma_{\lambda_0}(\mathbf{p}, ip_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \sum_{\lambda \mathbf{q}} \mathcal{D}^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n) \mathcal{G}_\lambda^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, ip_n + i\omega_n) |V_q^{\lambda_0 \lambda}|^2, \quad (\text{A.5})$$

gdzie  $\mathcal{D}^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)$  oraz  $\mathcal{G}_\lambda^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, ip_n + i\omega_n)$  oznaczają swobodne propagatory odpowiednio fononowy i ekscytonowy.

$$\mathcal{D}^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{2\omega_0}{(i\omega_n)^2 - \omega_0^2}, \quad (\text{A.6})$$

$$\mathcal{G}_\lambda^{(0)}(\mathbf{p}, ip_n) = \frac{1}{ip_n - \epsilon_{\mathbf{p}, \lambda}}. \quad (\text{A.7})$$

Sumowanie po  $\mathbf{q}, \lambda$  we wzorze (A.5) oznacza sumę po stanach numerowanych całkowitym pędem ekscytonu  $\mathbf{q}$  oraz stanach wewnętrznych, oznaczonych symbolem  $\lambda$ . Wykonanie sumowania po

**DODATEK A. ENERGIA WŁASNA DLA EKSCYTONU ODDZIAŁUJĄCEGO Z FONONAMI LO**

częstościach daje następujący wzór na energię własną, przy założeniu małej koncentracji ekscytónów

$$\Sigma(\mathbf{p}, ip_n) = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \left( \frac{N_0}{ip_n + \omega_0 - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\lambda}} + \frac{N_0 + 1}{ip_n - \omega_0 - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\lambda}} \right) |V_q^{\lambda_0\lambda}|^2. \quad (\text{A.8})$$

Dokonując przedłużenia analitycznego ( $ip_n \rightarrow \omega + i\delta$ , gdzie  $\delta \rightarrow 0^+$  [20]) otrzymujemy następujący wzór na część urojoną retardowanej energii własnej dla ekscytónu w stanie podstawowym  $\lambda_0$  o łącznym pędzie  $\mathbf{k} = 0$  (dno pasma)

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^{\text{R}}(\mathbf{k} = 0, \omega) &= \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\lambda} \frac{-\pi M_0^2}{\mathcal{V}q^2} \left| \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{m_e}{m_e+m_h} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{m_h}{m_e+m_h} | \lambda \rangle \right|^2 \times \\ &\times \left[ (N_0 + 1)\delta(\omega - \omega_0 - \epsilon_q^\lambda) + N_0\delta(\omega + \omega_0 - \epsilon_q^\lambda) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Stan  $\lambda$  jest dowolnym stanem z widma ekscytónowego zarówno z części dyskretnej jak i ciągłej. Powyższy wzór związany jest ze stanem podstawowym  $\lambda_0$ , chociaż nic nie stoi na przeszkodzie wykonania rachunków także dla innych stanów.

We wzorze (A.9) występuje suma po wszystkich poziomach ekscytónowych. Jeżeli przyjmiemy, że funkcja falowa ekscytónu ma wodoropodobną postać i wyrazimy ją w zmiennych parabolicznych [70], to możliwe jest ściśle wykonanie sumowania po podpoziomach. W tym przypadku stany wodorowe numerowane są liczbami kwantowymi  $(n, n_1, m)$  w widmie dyskretnym oraz  $(\mathbf{k}, \beta_1, m)$  w widmie ciągłym. Wzory na sumy po podpoziomach  $n_1, \beta_1$  oraz znaczenie liczb kwantowych przedstawione są w dodatku C.

Oznaczmy wobec tego przez

$$\mathcal{M}_n^{3\text{D}}(q) = \sum_{n_1}^{n-1} \left| \langle 0, 0, 0 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{m_e}{m_e+m_h} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{m_h}{m_e+m_h} | n, n_1, 0 \rangle \right|^2 \quad (\text{A.10})$$

sumę po podpoziomach dyskretnych oraz

$$\mathcal{M}_p^{3\text{D}}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta_1 \left| \langle 0, 0, 0 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{m_e}{m_e+m_h} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{m_h}{m_e+m_h} | p, \beta_1, 0 \rangle \right|^2 \quad (\text{A.11})$$

**DODATEK A. ENERGIA WŁASNA DLA EKSCYTONU ODDZIAŁUJĄCEGO Z FONONAMI LO**

sumę po podpoziomach z widma ciągłego. W obydwu przypadkach do sumy nie wnoszą wkładu stany o  $m \neq 0$  ( $m$  jest magnetyczną liczbą kwantową).

Wzór na część urojoną retardowanej energii własnej przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^{\text{R}}(\mathbf{k} = 0, \omega) = & \quad (A.12) \\ - \sum_{\mathbf{q}} \frac{\pi M_0^2}{\mathcal{V}q^2} \sum_n & \left[ (N_0 + 1) \mathcal{M}_n^{3\text{D}}(q) \delta(\omega - \omega_0 - \epsilon_q^n) + N_0 \mathcal{M}_n^{3\text{D}}(q) \delta(\omega + \omega_0 - \epsilon_q^n) \right] \\ - \sum_{\mathbf{q}} \frac{\pi M_0^2}{\mathcal{V}q^2} \sum_{\mathbf{p}} & \left[ (N_0 + 1) \mathcal{M}_p^{3\text{D}}(q) \delta(\omega - \omega_0 - \epsilon_q^p) + N_0 \mathcal{M}_p^{3\text{D}}(q) \delta(\omega + \omega_0 - \epsilon_q^p) \right]. \end{aligned}$$

Wykonując sumę po  $\mathbf{q}$  otrzymujemy końcowy wzór

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^{\text{R}}(\omega) = & \quad (A.13) \\ -\alpha\omega_0 \sum_n & \left[ \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega - \omega_0 - \epsilon^n}} (N_0 + 1) \mathcal{M}_n^{3\text{D}}(q_-) \Theta(\omega + \omega_0 - \epsilon^n) + \right. \\ & \left. + \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega + \omega_0 - \epsilon^n}} N_0 \mathcal{M}_n^{3\text{D}}(q_+) \Theta(\omega + \omega_0 - \epsilon^n) \right] + \\ -\alpha\omega_0 \sum_{\mathbf{p}} & \left[ \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega - \omega_0 - \epsilon^p}} (N_0 + 1) \mathcal{M}_p^{3\text{D}}(q_-) \Theta(\omega - \omega_0 - \epsilon^p) + \right. \\ & \left. + \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega + \omega_0 - \epsilon^p}} N_0 \mathcal{M}_p^{3\text{D}}(q_+) \Theta(\omega + \omega_0 - \epsilon^p) \right]. \end{aligned}$$

Wzór powyższy można zapisać w zwartej postaci

$$\text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^{\text{R}}(\omega) = -\alpha\omega_0 \sum_{\lambda} [N_0 \mathcal{M}_{\lambda}(\omega_+) \Theta(\omega_+) + (N_0 + 1) \mathcal{M}_{\lambda}(\omega_-) \Theta(\omega_-)]. \quad (A.14)$$

W powyższym zapisie  $\mathcal{M}_{\lambda}$  oznacza zmodyfikowany element macierzowy przejścia do stanu  $\lambda = n, \mathbf{p}$

$$\mathcal{M}_{\lambda}(\omega) = \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega}} \mathcal{M}_{\lambda}^{3\text{D}}(\sqrt{2M\omega}), \quad (A.15)$$

natomiast  $\omega_{\pm} = \omega \pm \omega_0 - \epsilon_{\lambda}$ .

## **Dodatek B**

# **Energia własna dla ekscytonu w studni kwantowej: sprzężenie z fononami LO**

W przypadku studni kwantowej musimy zdecydować się na sposób w jaki zamierzamy przybliżyć realny, kwazidwuwymiarowy układ. Założę, że studnia kwantowa powoduje energetyczne odseparowanie widma wzbudzeń związanych z ruchem w kierunku prostopadłym i równoległym do płaszczyzny studni, czyli, że odległość pomiędzy poziomami w studni będzie na tyle duża, iż wpływ wyższych stanów będzie pomijalny. Ekscyton zostanie potraktowany w przybliżeniu dwuwymiarowym i zanedbany zostanie wpływ oddziaływania coulombowskiego na funkcję falową w kierunku prostopadłym do płaszczyzny studni. Innymi słowy funkcja falowa ekscytonu zostanie przyjęta jako iloczyn trzech części: dwuwymiarowej funkcji falowej ekscytonu oraz funkcji obwiedni odpowiedzialnych za kwantowanie ruchu elektronów i dziur w kierunku prostopadłym do płaszczyzny studni kwantowej. Następnie stosując to przybliżenie zaprezentuję wzory w granicy dwóch wymiarów.

### **B.1 Studnia kwantowa o skończonej szerokości**

Funkcje obwiedni elektronu i dziury w studni kwantowej przyjęte zostaną jako rozwiązania jednowymiarowego równania Schrödingera w studni potencjału o szerokości  $L$ . Stan ekscytonowy będzie wobec tego zdefiniowany jako iloczyn dwuwymiarowej funkcji ekscytonowej w płaszczyź-

**DODATEK B. ENERGIA WŁASNA DLA EKSCYTONU W STUDNI KWANTOWEJ:  
SPRZĘŻENIE Z FONONAMI LO**

---

nie studni oraz jednowymiarowej funkcji odpowiadającej poziomowi  $k$  w studni.

$$\Phi_{\mathbf{P};\lambda_0ln}(\mathbf{R}, \mathbf{r}, z_e, z_h) = e^{i\mathbf{P}\mathbf{R}}\Phi_{\lambda_0}(\mathbf{r})\phi_l^c(z_e)\phi_n^v(z_h), \quad (\text{B.1})$$

gdzie  $\mathbf{R}$  oznacza współrzędne środka masy,  $\mathbf{r}$  współrzędne względne,  $z_e$  oraz  $z_h$  to odpowiednio współrzędna  $z$  elektronu i dziury. Funkcje  $\phi_k^\nu(z)$  są funkcjami obwiedni elektronów ( $\nu = c$ ) i dziur ( $\nu = v$ ) w kierunku prostopadłym do płaszczyzny studni.  $\Phi_{\lambda_0}(\mathbf{r})$  jest dwuwymiarową funkcją wodoropodobną. Zarówno  $\mathbf{R}$  jak i  $\mathbf{r}$  oznaczają wektory dwuwymiarowe.

Założę, że struktura wzbudzeń fononowych nie zmienia się w wyniku kwantowania poziomów w studni. Obliczenia uwzględniające oddziaływanie z modami lokalnymi i powierzchniowymi uniemożliwiają przeprowadzenia części rachunków analitycznie i jednocześnie nie wprowadzają istotnych zmian jakościowych, a jedynie drobne odstępstwa ilościowe.

Hamiltonian oddziaływania ekscyton-fonon analogiczny do (A.1) ma postać (indeksy  $l, n, l', n'$  numerują dyskretne poziomy w studni kwantowej,  $\lambda_0$  oraz  $\lambda$  oznaczają stan wewnętrzny ekscytonu)

$$H_{eks-fon} = \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \sum_{ln'l'n'} \sum_{\lambda_0,\lambda} A_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\lambda,ln}^\dagger A_{\mathbf{p},\lambda_0,l'n'} \left( V_{\mathbf{q}}^{\lambda_0\lambda,ln,l'n'} b_{-\mathbf{q}}^\dagger + (V_{\mathbf{q}}^{\lambda_0\lambda,ln,l'n'})^* b_{\mathbf{q}} \right), \quad (\text{B.2})$$

gdzie element macierzowy oddziaływania ma postać

$$V_{\mathbf{q}}^{\lambda_0\lambda,ln,l'n'} = \frac{M_0}{\sqrt{\mathcal{V}q}} \left[ \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}_{||}r \frac{m\hbar}{M}} | \lambda \rangle \delta_{ll'} F_{nn'}^{cc}(q_z) - \langle \lambda_0 | e^{-i\mathbf{q}_{||}r \frac{m\hbar}{M}} | \lambda \rangle \delta_{nn'} F_{ll'}^{vv}(q_z) \right]. \quad (\text{B.3})$$

Wektor  $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z) = (\mathbf{q}_{||}, q_z)$ . Element macierzowy związany z przekrywaniem się funkcji falowych odpowiadającym różnym poziomom w studni  $F_{ll'}^{\nu\nu'}$  zdefiniowany jest wzorem

$$F_{ll'}^{\nu\nu'}(q_z) = \int dz e^{iq_z z} \phi_l^{\nu*}(z) \phi_{l'}^{\nu'}(z). \quad (\text{B.4})$$

Urojona część retardowanej energii własnej, dla ekscytonu w stanie  $\lambda_0$  i podpasmach  $l, n$  związanych z kwantowaniem ruchu w kierunku prostopadłym do płaszczyzny studni kwantowej, w najniższym rzędzie wyraża się wzorem (rachunki przebiegają analogicznie do wyprowadzeń

**DODATEK B. ENERGIA WŁASNA DLA EKSCYTONU W STUDNI KWANTOWEJ:  
SPRZĘŻENIE Z FONONAMI LO**

---

przedstawionych w dodatku A.

$$\begin{aligned}
 & \text{Im}\Sigma_{ln,\lambda_0}^{\text{R}}(k=0, \omega) = \\
 & - \frac{\pi M_0^2}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \sum_{l'n'} \frac{|F_{ll'}^{cc}(q_z)\delta_{nn'} \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}_{\parallel}r \frac{m_h}{M}} | \lambda \rangle - F_{nn'}^{vv}(q_z)\delta_{ll'} \langle \lambda_0 | e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}r \frac{m_e}{M}} | \lambda \rangle|^2}{q^2} \times \\
 & \times \left[ (N_0 + 1)\delta(\omega - \omega_0 - \epsilon_q^{\lambda,l'n'}) + N_0\delta(\omega + \omega_0 - \epsilon_q^{\lambda,l'n'}) \right].
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Podobnie jak w dodatku A rozważam tylko przejścia proste ( $\mathbf{k} = 0$ ). Zamieniając sumę po  $\mathbf{q}_{\parallel}$  na całkę otrzymujemy

$$\begin{aligned}
 & \text{Im}\Sigma_{ln,\lambda_0}^{\text{R}}(0, \omega) = \\
 & - \frac{\pi M_0^2}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda,l'n'} \int d^2\mathbf{q}_{\parallel} dq_z \frac{|F_{ll'}^{cc}(q_z)\delta_{nn'} \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}_{\parallel}r \frac{m_h}{M}} | \lambda \rangle - F_{nn'}^{vv}(q_z)\delta_{ll'} \langle \lambda_0 | e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}r \frac{m_e}{M}} | \lambda \rangle|^2}{q_z^2 + q_{\parallel}^2} \times \\
 & \times \left[ (N_0 + 1)\delta(\omega - \omega_0 - \epsilon_q^{\lambda,l'n'}) + N_0\delta(\omega + \omega_0 - \epsilon_q^{\lambda,l'n'}) \right],
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

gdzie

$$\epsilon_{q_{\parallel}}^{\lambda,ln} = \frac{q_{\parallel}^2}{2M} + \underbrace{\epsilon^{\lambda} + \epsilon_c^l - \epsilon_v^n}_{\epsilon^{\lambda,ln}} \tag{B.7}$$

$\epsilon_c^l$  jest energią poziomu  $l$  elektronu w studni kwantowej natomiast  $\epsilon_v^n$  to energia stanu  $n$  dziury w studni kwantowej.  $\epsilon^{\lambda}$  jest energią ekscytonowego stanu  $\lambda$ .

Wprowadźmy oznaczenie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|F_{ln}^{\nu\nu'}(q_z)|^2}{q_z^2 + q_{\parallel}^2} dq_z = \pi L R_{ln}^{\nu\nu'}(q_{\parallel}L), \tag{B.8}$$

**DODATEK B. ENERGIA WŁASNA DLA EKSCYTONU W STUDNI KWANTOWEJ:  
SPRZEŻENIE Z FONONAMI LO**

---

gdzie  $L$  oznacza szerokość studni potencjału. Funkcja ta w ogólnym przypadku może zależeć także od innych parametrów opisujących układ. W przypadku nieskończonej studni potencjału  $R_{ln}^{\nu\nu'}(x)$  możemy wyznaczyć analitycznie. W tak przyjętym modelu  $R_{ln}^{cc}(x) = R_{ln}^{vv}(x) = R_{ln}(x)$  i wynosi

$$R_{ln}(x) = \frac{1 + \delta_{ln}}{x^2 + \pi^2(l-n)^2} + \frac{1}{x^2 + \pi^2(l+n)^2} - \frac{2(4\pi^2nl)^2 x (1 - \cos(\pi(l+n))e^{-x})}{[x^2 + \pi^2(l-n)^2]^2 [x^2 + \pi^2(n+l)^2]^2}. \quad (\text{B.9})$$

W przypadku  $n = l = 1$  daje to

$$R_{11}(x) = \frac{2}{x^2} + \frac{1}{x^2 + 4\pi^2} - \frac{32\pi^4 x (1 - e^{-x})}{x^4 [x^2 + 4\pi^2]^2} \quad (\text{B.10})$$

oraz pozwala na prawidłowe przejście do granicy ( $L \rightarrow 0$ ) redukując wzory do przypadku dwuwymiarowego

$$\lim_{L \rightarrow 0} qL \cdot R_{nm}(qL) = \delta_{nm}. \quad (\text{B.11})$$

Przyjęcie modelu, w którym studnia kwantowa jest nieskończenie głęboka pozwala na przejście ze wzorami do granicy ściśle dwuwymiarowej. Należy pamiętać, że widmo energetyczne stanów w studni potencjału o skończonej i nieskończonej głębokości różnią się istotnie, gdy szerokość studni dąży do zera. W przypadku nieskończonych barier poziomy energetyczne oddalają się od siebie i w granicy  $L \rightarrow 0$  zostaje jeden poziom. Zupełnie inaczej wygląda sytuacja w przypadku skończonej studni. Gdy  $L$  maleje kolejne stany „wypychane” są ze studni, a funkcja falowa najniższego energetycznie stanu staje się najpierw coraz bardziej zlokalizowana, a po przekroczeniu pewnej szerokości stan ten staje się coraz bardziej zdelokalizowany, aż w końcu dołącza do stanów z widma ciągłego. W pierwszym przypadku (nieskończona studnia) przechodząc z  $L$  do 0 otrzymujemy w granicy dwa wymiary, w drugim (skończona studnia) otrzymujemy wynik odpowiadający trzem wymiarom.

Zakładając, że odległości pomiędzy poziomami w studni kwantowej są dużo większe niż średnie energie wzbudzeń układu możemy zaniedbać istnienie wyższych poziomów i ograniczyć się do najniższych energetycznie podpasm.

Drugie sumowanie we wzorze (B.6) przebiega po stanach  $\lambda$  ekscytonu związanych z ruchem w płaszczyźnie studni. Podobnie jak w przypadku trójwymiarowym możliwe jest analityczne wyznaczenie elementów macierzowych przejścia pomiędzy stanami  $\lambda$  i  $\lambda_0$  przy założeniu



**DODATEK B. ENERGIA WŁASNA DLA EKSCYTONU W STUDNI KWANTOWEJ:  
SPRZĘŻENIE Z FONONAMI LO**

wodoropodobnego charakteru funkcji falowej w kierunku równoległym do płaszczyzny studni.

Oznaczmy symbolem  $\mathcal{M}_{\lambda_0\lambda}^{2D}$  elementy macierzowe przejścia do stanów wzbudzonych

$$\mathcal{M}_{\lambda_0\lambda}^{2D}(\mathbf{q}_{||}) = \left| \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}_{||}\mathbf{r}\frac{m\hbar}{M}} | \lambda \rangle - \langle \lambda_0 | e^{-i\mathbf{q}_{||}\mathbf{r}\frac{m\hbar}{M}} | \lambda \rangle \right|^2. \quad (\text{B.12})$$

Przyjmując taką definicję część urojoną energii własnej możemy zapisać w następującej postaci

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^{\text{R}}(\mathbf{k} = 0, \omega) &= -\frac{\alpha\omega_0^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2M}} \frac{\pi}{2\pi} \sum_{\lambda} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{+\infty} q_{||} dq_{||} \pi L \cdot R_{11}(q_{||}L) \mathcal{M}_{\lambda_0\lambda}^{2D}(\mathbf{q}_{||}) \times \\ &\times \left[ (N_0 + 1)\delta(\omega - \omega_0 - \epsilon_q^{\lambda,11}) + N_0\delta(\omega + \omega_0 - \epsilon_q^{\lambda,11}) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Energie  $\epsilon^\lambda$  dla ekscytonu znajdującego się na poziomie podstawowym przy założeniu modelu wodoropodobnego w studni kwantowej będą wynosiły

$$\epsilon^\lambda = \begin{cases} -\frac{Ry^*}{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2} & \text{dla stanów dyskretnych, } \lambda = [n, n_1] \\ \frac{p^2}{2\mu} & \text{dla stanów z widma ciągłego, } \lambda = [p, \sigma_1] \end{cases}. \quad (\text{B.14})$$

$\epsilon^\lambda$  to energia  $n$ -tego poziomu ekscytonowego z widma dyskretnego lub energia odpowiadająca stanom z widma ciągłego. Dokładne wyjaśnienie liczb kwantowych pojawiających się we wzorze (B.14) znajduje się w dodatku E, gdzie wypisane są wzory na funkcje falowe ekscytonu w dwóch wymiarach. Ponieważ będziemy rozważać energię własną dla ekscytonu znajdującego się w najniższym stanie energetycznym przez pominięcie indeks  $\lambda_0$  w oznaczeniu  $\mathcal{M}_{\lambda_0\lambda}^{2D}$ .

W elemencie macierzowym  $\mathcal{M}_{\lambda}^{2D}$  występuje niejawną zależność funkcji podcałkowej od kąta pomiędzy wektorami  $\mathbf{q}$  i  $\mathbf{r}$ . Jednak końcowa suma po wszystkich stanach nie zależy od wyboru kierunku wektora  $\mathbf{q}$ . W związku z tym na samym początku możemy przyjąć dowolny, ustalony

**DODATEK B. ENERGIA WŁASNA DLA EKSCYTONU W STUDNI KWANTOWEJ:  
SPRZEŻENIE Z FONONAMI LO**

---

kierunek i dla niego wykonać wszystkie rachunki. Wybór ten będzie szczególnie istotny w dalszych rachunkach (patrz dodatki C, E). Uwzględniając brak zależności od kąta możemy wykonać całkowanie po kącie  $\phi$  i otrzymujemy

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^{\text{R}}(\vec{k} = 0, \omega) &= -\alpha\omega_0\sqrt{2ML^2\omega_0}\frac{\pi}{2}\sum_{\lambda}\int_0^{+\infty}\frac{2q_{\parallel}dq_{\parallel}}{M}R_{11}(q_{\parallel}L)\mathcal{M}_{\lambda}^{2\text{D}}(q_{\parallel})\times \\ &\times \left[(N_0 + 1)\delta(\omega - \omega_0 - \epsilon_q^{\lambda,11}) + N_0\delta(\omega + \omega_0 - \epsilon_q^{\lambda,11})\right] \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Wykonując całkę po  $q_{\parallel}$  (przyjmując kwadratową relację dyspersji w paśmie zgodnie ze wzorem (B.14)) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^{\text{R}}(\vec{k} = 0, \omega) &= -\alpha\omega_0\sqrt{2ML^2\omega_0}\frac{\pi}{2}\times \\ &\times \sum_{\lambda}\left[(N_0 + 1)R_{11}(q_-L)\mathcal{M}_{\lambda}^{2\text{D}}(q_-)\Theta(q_-) + N_0R_{11}(q_+L)\mathcal{M}_{\lambda}^{2\text{D}}(q_+)\Theta(q_+)\right], \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

gdzie

$$q_{\pm} = \sqrt{2M(\omega \pm \omega_0 - \epsilon^{\lambda,11})}.$$

Elementy macierzowe  $\mathcal{M}_{\lambda}^{2\text{D}}(q)$  w przypadku dwuwymiarowym (przy założeniu wodoropodobnego widma wzbudzeń) można policzyć analitycznie dla dowolnego stanu  $\lambda$  zarówno z widma dyskretnego jak i ciągłego. Stany dyskretne numerowane są liczbami kwantowymi  $(n, n_1)$  natomiast stany z widma ciągłego liczbami  $(p, \sigma_1)$  — patrz odpowiednie wzory w dodatku E. Oznaczając przez  $\tilde{\mathcal{M}}_n^{2\text{D}}(q)$  sumę po podpoziomach elementów macierzowych przejścia do stanów z widma dyskretnego

$$\tilde{\mathcal{M}}_n^{2\text{D}}(q) = \sum_{n_1=0}^n \mathcal{M}_{\lambda}^{2\text{D}}(q) \quad \text{dla } \lambda = (n, n_1) \quad (\text{B.17})$$

**DODATEK B. ENERGIA WŁASNA DLA EKSCYTONU W STUDNI KWANTOWEJ:  
SPRZĘŻENIE Z FONONAMI LO**

---

oraz przez  $\tilde{\mathcal{M}}_p^{2D}(q)$  sumę po podpoziomach należących do widma ciągłego

$$\tilde{\mathcal{M}}_p^{2D}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma_1 \mathcal{M}_\lambda^{2D}(q) \quad \text{dla } \lambda = (p, \sigma_1) \quad (\text{B.18})$$

otrzymujemy następujące wyrażenie na część urojoną retardowanej energii własnej

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^R(\vec{k} = 0, \omega) &= -\alpha\omega_0 \sqrt{2ML^2\omega_0} \frac{\pi}{2} \times \\ &\times \left\{ \sum_{n=0}^{+\infty} \left[ (N_0 + 1)R_{11}(q_-L)\tilde{\mathcal{M}}_n^{2D}(q_-)\Theta(q_-) + N_0R_{11}(q_+L)\tilde{\mathcal{M}}_n^{2D}(q_+)\Theta(q_+) \right] + \right. \\ &\left. + \int_0^{+\infty} dp \left[ (N_0 + 1)R_{11}(q_-L)\tilde{\mathcal{M}}_p^{2D}(q_-)\Theta(q_-) + N_0R_{11}(q_+L)\tilde{\mathcal{M}}_p^{2D}(q_+)\Theta(q_+) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

## B.2 Granica dwuwymiarowa

Przechodząc do granicy  $L \rightarrow 0$  ze wzorem (B.16), zakładając jednocześnie postać  $R_{ln}(x)$  zgodnie z (B.8) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{2D}^R(\omega) &= \lim_{L \rightarrow 0} \text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^R(\omega) = \\ &= -\alpha\omega_0 \frac{\pi}{2} \sum_{\lambda} \left[ \frac{(N_0 + 1)\sqrt{2M\omega_0}}{q_+} \mathcal{M}_\lambda^{2D}(q_+)\Theta(q_+) + \frac{N_0\sqrt{2M\omega_0}}{q_-} \mathcal{M}_\lambda^{2D}(q_-)\Theta(q_-) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Wynik jest zgodny z przewidywaniami, gdyż konsekwencją zmiany liczby wymiarów z trzech do dwóch stała sprzężenia oddziaływania elektron-fonon zwiększa się efektywnie o czynnik  $\frac{\pi}{2}$ .

## Dodatek C

# Suma po stanach wodoropodobnych w trzech wymiarach

Równanie Schrödingera dla atomu wodoru w trzech wymiarach można rozwiązać analitycznie w zmiennych parabolicznych  $(\eta, \xi, \varphi)$  zdefiniowanych następującymi wzorami [70]

$$\begin{cases} x = \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi, & \xi, \eta \in < 0, +\infty) \\ y = \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi, & \varphi \in (0, 2\pi) \\ z = (\xi - \eta)/2 \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

Użycie takiego układu współrzędnych pozwala na wyrażenie w sposób analityczny elementów macierzowych przekrycia stanu podstawowego ze wszystkimi pozostałymi stanami własnymi hamiltonianu wodoropodobnego a następnie wykonania sumowania po podpoziomach.

Podobną metodę do policzenia sumy po stanach ekscytonowych zastosowali Rudin et al. [12]. Niestety opublikowane przez nich wyrażenia zawierają wiele błędów i dlatego w poniższym dodatku przedstawię sposób wykonania takich obliczeń

### C.1 Suma po stanach z widma dyskretnego

Funkcje falowe stanów dyskretnych w zmiennych parabolicznych  $(\eta, \xi, \varphi)$  mają postać

$$\Psi_{nn_1} = N_{nn_1} e^{-p_n(\xi-\eta)/2} {}_1F_1(-n_1, 1, p_n\xi) {}_1F_1(-n_2, 1, p_n\eta) e^{im\varphi}, \quad (\text{C.2})$$

DODATEK C. SUMA PO STANACH WODOROPODOBNYCH W TRZECH WYMIARACH

gdzie stała normalizacyjna wyraża się wzorem

$$N_{nn_1} = \frac{1}{(\pi a^3)^{1/2} n^2}, \quad (\text{C.3})$$

natomiast  ${}_1F_1(x, y, z)$  oznacza funkcję hipergeometryczną konfluentną. Liczby kwantowe  $n_1, n_2$  są nieujemnymi liczbami całkowitymi. Energia wyraża się wzorem  $\epsilon_n = \text{Ry}^*/n^2$ , gdzie  $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$ ,  $\text{Ry}^*$  oznacza efektywną stałą Rydberga ( $\text{Ry}^* = \frac{\mu}{\epsilon_\infty^2}$ ),  $a$  jest efektywnym promieniem Bohra ( $a = \frac{\epsilon_\infty}{\mu}$ ),  $\mu$  jest masą zredukowaną układu elektron-dziura,  $\hbar p_n = \sqrt{2\mu|\epsilon_n|}$ ,  $m$  jest magnetyczną liczbą kwantową. Element macierzowy przekrycia stanu podstawowego ze stanami wzbudzonymi  $\langle 0, 0, 0 | e^{iQz} | n_1 n_2 m \rangle$  nie znika tylko dla  $m \neq 0$ , dlatego w poniższych rachunkach  $m$  zostało położone 0

$$\begin{aligned} \langle 0, 0, 0 | e^{iQz} | n_1 n_2 0 \rangle &= \frac{4}{a^3 n^2} \frac{1}{((p_1 + p_n)^2 + Q^2)} \left( \frac{p_1 - p_n - iQ}{p_1 + p_n - iQ} \right)^{n_1} \left( \frac{p_1 - p_n + iQ}{p_1 + p_n + iQ} \right)^{n_2} \times \\ &\times \left[ \frac{p_1 - p_n(2n_1 + 1) - iQ}{(p_1 - iQ)^2 - p_n^2} + \frac{p_1 - p_n(2n_2 + 1) + iQ}{(p_1 + iQ)^2 - p_n^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Wzór (C.4) ma dość skomplikowaną postać. W dalszych rachunkach wygodniej będzie użyć następujących oznaczeń

$$\begin{aligned} Z_Q &= \frac{p_1 - p_n - iQ}{p_1 + p_n - iQ} = |Z_Q| e^{i\Phi}, \quad \Phi \in \left\langle -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right\rangle, \\ g &= \left| \frac{p_1 - p_n - iQ}{p_1} \right|, \\ r &= \left| \frac{p_1 + p_n - iQ}{p_1} \right|, \\ S &= Q/p_1. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

DODATEK C. SUMA PO STANACH WODOROPODOBNYCH W TRZECH WYMIARACH

Możemy wtedy wzór (C.4) zapisać w następującej formie

$$\langle 0, 0, 0 | e^{iQz} | n_1 n_2 0 \rangle = \frac{i16S}{n^3 g^3 r^3} |Z_Q|^n e^{i\Phi(n_1-n_2)} (n_2 - n_1 - inS) =: A_\nu. \quad (C.6)$$

Indeks  $\nu = e, h$  odpowiada elektronowi i dziurze, wtedy też  $Q$  przyjmuje odpowiednio wartości dla elektronu i dziury

$$\begin{aligned} Q_e &= -q \frac{m_e}{m_e+m_h} \\ Q_h &= q \frac{m_h}{m_e+m_h}. \end{aligned} \quad (C.7)$$

Wyrazy  $Z_Q, \Phi, g, r, S$  zależą *explicite* od  $Q_\nu$ , dlatego indeks dolny  $\nu$  w  $Z_{Q_\nu}, \Phi, g_\nu, r_\nu, S_\nu$  ( $\nu = e, h$ ) będzie jednoznacznie wskazywał o jakie wyrażenie chodzi.

We wzorze na energię własną występuje kwadrat modułu elementu macierzowego dla elektronu i dziury oraz wyraz mieszany — elektron-dziura

$$|A_e - A_h|^2 = |A_e|^2 + |A_h|^2 - 2\text{Re}A_e A_h^*. \quad (C.8)$$

Zależność od  $n_1$  we wzorze (C.8) nie jest bardzo skomplikowana i dlatego możemy wykonać sumowanie po poziomach w ramach jednego  $n$ . Dla wyrazów związanych oddzielnie z elektronem ( $|A_e|^2$  oraz  $|A_h|^2$ ) i dziurą mamy

$$|A_\nu|^2 = \frac{16^2 S_\nu^2}{n^6 g_\nu^6 r_\nu^6} \sum_{n_1=0}^{n-1} |n_2 - n_1 - inS|^2 = \frac{16^2 S_\nu^2}{n^6 g_\nu^6 r_\nu^6} \left[ \frac{(n-1)n(n+1)}{3} + n^3 S^2 \right]. \quad (C.9)$$

Wyraz mieszany  $2\text{Re}A_e A_h^*$  we wzorze (C.8) zawiera bardziej skomplikowaną zależność od  $n_1$ . Wprowadźmy oznaczenie  $A_{eh}(n_1)$  na tę część

$$\begin{aligned} \sum_{n_1=0}^n A_{eh}(n_1) &= \sum_{n_1=0}^{n-1} e^{i(\Phi_h - \Phi_e)(n_1 - n_2)} (n_2 - n_1 + inS_e)(n_2 - n_1 - inS_h) = \\ &= \sum_{n_1=0}^{n-1} e^{i(\Phi_h - \Phi_e)(n_1 - n_2)} \left( (n_2 - n_1)^2 + i(n_2 - n_1)n(S_e - S_h) + n^2(S_e S_h) \right) \end{aligned} \quad (C.10)$$

## DODATEK C. SUMA PO STANACH WODOROPODOBNYCH W TRZECH WYMIARACH

Wzór ten można zapisać w postaci różniczkowej. Oznaczając  $\Phi_{he} = \Phi_h - \Phi_e$  oraz  $S_{he} = S_h - S_e$  mamy

$$\sum_{n_1=0}^n A_{eh}(n_1) = \sum_{n_1=0}^{n-1} \left[ -\frac{\partial^2}{\partial \Phi_{he}^2} + n S_{he} \frac{\partial}{\partial \Phi_{he}} + n^2 S_e S_h \right] e^{i\Phi_{he}(n_1-n_2)}. \quad (\text{C.11})$$

Zbierając to wszystko razem suma po podpoziomach dyskretnych  $n_1$  przybiera następującą postać

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_n^{3D}(q) &= \sum_{n_1=0}^{n-1} |A_e - A_h|^2 = \sum_{\nu=e,h} \left( \frac{16^2 S_\nu^2}{n^6 g_\nu^6 r_\nu^6} |Z_{Q_\nu}|^{2n} \frac{(n-1)n(n+1)}{3} + n^3 S_\nu^2 \right) + \\ &+ \frac{-2 \cdot 16^2 S_e S_h}{n^6 g_e^3 g_h^3 r_e^3 r_h^3} |Z_{Q_e} Z_{Q_h}|^n \left[ -\frac{\partial^2}{\partial \Phi_{he}^2} + S_{he} n \frac{\partial}{\partial \Phi_{he}} + S_e S_h n^2 \right] \frac{\sin(n\Phi_{he})}{\sin(\Phi_{he})} \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

## C.2 Suma po stanach z widma ciągłego

Energie stanów rozproszonych wynoszą  $\epsilon_k = \frac{k^2}{2\mu}$ . Funkcje falowe numerowe liczbami kwantowymi  $k, \beta_1, \beta_2$  mają postać

$$\Psi_{k\beta_1} = N_{k\beta_1} e^{ik(\xi-\eta)/2} {}_1F_1(-\beta_1, 1, ik\xi) {}_1F_1(-\beta_2, 1, ik\eta) e^{im\varphi}, \quad (\text{C.13})$$

Stała normalizacyjna w funkcji falowej

$$N_{k\beta_1} = \left( \frac{k}{(2\pi)^3 a} \right)^{1/2} e^{\pi/2ka} \left| \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta_1}{ika}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta_2}{ika}\right) \right| \quad (\text{C.14})$$

zapewnia unormowanie do  $\delta(k - k')\delta(\beta_1 - \beta'_1)$  przy warunku  $\beta_1 + \beta_2 = 1$ .  $\Gamma(\cdot)$  oznacza funkcję gama Eulera zdefiniowaną wzorem

$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} e^{-t} t^{x-1} dt. \quad (\text{C.15})$$

DODATEK C. SUMA PO STANACH WODOROPODOBNYCH W TRZECH WYMIARACH

Element macierzowy przekrycia stanu podstawowego ze stanami z widma ciągłego wynosi

$$\begin{aligned} \langle 0, 0, 0 | e^{iQz} | k, \beta_1 0 \rangle &= 4N_{k\beta_1} \left( \frac{\pi}{a^3} \right)^{1/2} \frac{\left( \frac{p_1+i(k-Q)}{p_1-i(k+Q)} \right)^{-\frac{1}{2}+\frac{i\beta_1}{ka}} \left( \frac{p_1+i(k+Q)}{p_1-i(k-Q)} \right)^{-\frac{1}{2}+\frac{i\beta_2}{ka}}}{((p_1-ik)^2+Q^2)} \times \\ &\times \left[ \frac{p_1-iQ-2\beta_1 p_1}{(p_1-iQ)^2+p^2} + \frac{p_1+iQ-2\beta_2 p_1}{(p_1+iQ)^2+p^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Podobnie jak to zostało zrobione w przypadku stanów dyskretnych także i tutaj wygodnie jest wzór (C.16) zapisać w postaci

$$\langle 0, 0, 0 | e^{iQz} | k, \beta_1 0 \rangle = N_{k\beta_1} \sqrt{\pi a^3} \cdot \frac{i16\tilde{S}}{\tilde{g}^3 \tilde{r}^3} |\tilde{Z}_Q|^{i(\beta_1-\beta_2)/ka} e^{-i\tilde{\Phi}/ka} (\beta_2 - \beta_1 - iS), \quad (\text{C.17})$$

gdzie

$$\tilde{Z}_Q = \frac{p_1+ik-iQ}{p_1-ik-iQ} = |\tilde{Z}_Q| e^{i\tilde{\Phi}} \quad \tilde{\Phi} \in (-\pi/2, \pi/2)$$

$$\tilde{g} = \left| \frac{p_1+ik-iQ}{p_1} \right|$$

$$\tilde{r} = \left| \frac{p_1-ik-iQ}{p_1} \right|$$

$$\tilde{S} = \frac{Q}{p_1}.$$

Wszystkie powyższe wyrażenia zależą w sposób jawny od  $Q$  i, podobnie jak w przypadku stanów dyskretnych, dolny indeks ( $\nu = e, h$ ) przy  $\tilde{Z}_Q, \tilde{\Phi}, \tilde{g}, \tilde{r}, \tilde{S}$  będzie oznaczał odpowiednie  $Q_{e/h} = \mp \frac{m_e/h}{m_e+m_h} q$  podstawione w powyższych definicjach.



DODATEK C. SUMA PO STANACH WODOROPODOBNYCH W TRZECH WYMIARACH

Kwadrat modułu elementu macierzowego przejścia do stanów z widma ciągłego występujący we wzorach na energię własną wynosi w tych oznaczeniach

$$\begin{aligned} \left| \langle 000 | e^{iQ_e z} - e^{iQ_h z} | k, \beta_1 0 \rangle \right|^2 &= \underbrace{|N_{k\beta_1}|^2 \pi a^3 \frac{16^2 \tilde{S}_e^2}{\tilde{g}_e^6 \tilde{r}_e^6} [(\beta_2 - \beta_1)^2 + \tilde{S}_e^2]}_{M_{ee}} + \\ &+ \underbrace{|N_{k\beta_1}|^2 \pi a^3 \frac{16^2 \tilde{S}_h^2}{\tilde{g}_h^6 \tilde{r}_h^6} [(\beta_2 - \beta_1)^2 + \tilde{S}_h^2]}_{M_{hh}} + \underbrace{\text{wyraz mieszany}}_{M_{eh}}. \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

Tym razem należy wykonać całkę po podpoziomach  $\beta_1$ . Na początek zajmijmy się pierwszymi dwoma wyrazami we wzorze (C.18). Zauważmy, że zależność od  $\beta_1$  występuje także w stałej normalizacyjnej. Przekształćmy wzór opisujący  $|N_{k\beta_1}|^2$  używając definicji funkcji  $\Gamma(x)$  (C.15)

$$\begin{aligned} |N_{k\beta_1}|^2 &= \frac{ke^{\frac{\pi}{ka}}}{(2\pi)^3 a} \int_0^{+\infty} dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 e^{-t_1 - t_2 - t_3 - t_4} t_1^{-\frac{1}{2} - \frac{\beta_1}{ika}} t_2^{-\frac{1}{2} + \frac{\beta_1}{ika}} t_3^{-\frac{1}{2} - \frac{\beta_2}{ika}} t_4^{-\frac{1}{2} + \frac{\beta_2}{ika}} = \\ &= \frac{ke^{\frac{\pi}{ka}}}{(2\pi)^3 a} \int_0^{+\infty} dt_1 dt_2 dt_3 dt_4 e^{-t_1 - t_2 - t_3 - t_4} (t_1 t_2 t_3 t_4)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{t_1}{t_2}\right)^{i\frac{\beta_1}{ka}} \left(\frac{t_3}{t_4}\right)^{i\frac{\beta_2}{ka}}. \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

Zamieniając zmienne

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{t_2}{t_1} & v_1 &= t_1 + t_2 & t_1 &= \frac{v_1}{1 + u_1} & t_3 &= \frac{v_2}{1 + u_2} \\ u_2 &= \frac{t_4}{t_3} & v_2 &= t_3 + t_4 & t_2 &= \frac{u_1 v_1}{1 + u_1} & t_4 &= \frac{u_2 v_2}{1 + u_2} \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

otrzymujemy

$$|N_{k\beta_1}|^2 = \frac{e^{\frac{\pi}{ka}} k}{(2\pi)^3 a} \int_0^{+\infty} du_1 \int_0^{+\infty} du_2 \int_0^{+\infty} dv_1 \int_0^{+\infty} dv_2 e^{-v_1 - v_2} \frac{e^{i\beta_1(\frac{\ln(u_2)}{ka} - \frac{\ln(u_1)}{ka})} e^{-i\frac{\ln(u_2)}{ka}}}{\sqrt{u_1 u_2 (1 + u_1)(1 + u_2)}} \quad (\text{C.21})$$

DODATEK C. SUMA PO STANACH WODOROPODOBNYCH W TRZECH WYMIARACH

Całki po  $v_1$  i  $v_2$  dają 1. Dalsze rachunki należy przeprowadzać na pełnym wyrażeniu

$$\begin{aligned}
 M_{ee} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta_1 |N_{k\beta_1}|^2 \pi a^3 \frac{16^2 \tilde{S}_e^2}{\tilde{g}_e^6 \tilde{r}_e^6} [(\beta_2 - \beta_1)^2 + \tilde{S}_e^2] = \\
 &= \pi a^3 \frac{16^2 \tilde{S}_e^2}{\tilde{g}_e^6 \tilde{r}_e^6} \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta_1 \int_0^{+\infty} du_1 \int_0^{+\infty} du_2 \left( (1 - 2\beta_1)^2 + S_e^2 \right) \frac{e^{i\beta_1 \left( \frac{\ln u_2}{ka} - \frac{\ln u_1}{ka} \right)} e^{-i \frac{\ln u_2}{ka}}}{\sqrt{u_1 u_2} (1 + u_1) (1 + u_2)} = \\
 &= \pi a^3 \frac{16^2 \tilde{S}_e^2}{\tilde{g}_e^6 \tilde{r}_e^6} \int_0^{+\infty} du_1 \int_0^{+\infty} du_2 \frac{e^{-i \frac{\ln u_2}{ka}}}{\sqrt{u_1 u_2} (1 + u_1) (1 + u_2)} I_e
 \end{aligned} \tag{C.22}$$

gdzie

$$\begin{aligned}
 I_e &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta_1 \left( (1 - 2\beta_1)^2 + \tilde{S}_e^2 \right) e^{i\beta_1 \left( \frac{\ln u_2}{ka} - \frac{\ln u_1}{ka} \right)} = \\
 &= \left( -4 \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + i4 \frac{\partial}{\partial \lambda} + 1 + \tilde{S}^2 \right) \left( ka \delta(\lambda ka - \ln \left( \frac{u_1}{u_2} \right)) \right) \Big|_{\lambda=0}
 \end{aligned} \tag{C.23}$$

Wstawiając powyższy wynik do wzoru (C.22) otrzymujemy

$$\begin{aligned}
 M_{ee} &= \frac{\pi a^3 16^2 \tilde{S}_e^2}{\tilde{g}_e^6 \tilde{r}_e^6} \int_0^{+\infty} du_1 \int_0^{+\infty} du_2 \frac{e^{-i \frac{\ln(u_2)}{ka}} \left( 1 - 4 \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + i4 \frac{\partial}{\partial \lambda} + \tilde{S}^2 \right) ka \cdot \delta(\lambda ka - \ln \left( \frac{u_1}{u_2} \right))}{\sqrt{u_1 u_2} (1 + u_1) (1 + u_2)} \Big|_{\lambda=0} \\
 &= \pi a^3 \frac{16^2 \tilde{S}_e^2}{\tilde{g}_e^6 \tilde{r}_e^6} \left( -4 \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + i4 \frac{\partial}{\partial \lambda} + 1 + \tilde{S}^2 \right) B(\lambda = 0),
 \end{aligned} \tag{C.24}$$

DODATEK C. SUMA PO STANACH WODOROPODOBNYCH W TRZECH WYMIARACH

gdzie funkcja pomocnicza  $B(\lambda)$  zdefiniowana jest następującym wzorem

$$B(\lambda) = \int_0^{+\infty} du_1 \int_0^{+\infty} du_2 \frac{kae^{-i\frac{\ln(u_2)}{ka}} \delta(\lambda ka - \ln(\frac{u_1}{u_2}))}{\sqrt{u_1 u_2} (1+u_1)(1+u_2)}. \quad (\text{C.25})$$

Tak więc  $M_{\nu\nu}$ , gdzie  $\nu = e, h$  będzie miał następującą postać

$$M_{\nu\nu} = \pi a^3 \frac{16^2 \tilde{S}_\nu^2}{\tilde{g}_\nu^6 \tilde{r}_\nu^6} \left( -4 \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + i4 \frac{\partial}{\partial \lambda} + 1 + \tilde{S}^2 \right) B(\lambda = 0), \quad (\text{C.26})$$

gdzie

$$B(\lambda) = ka e^{\frac{\lambda ka}{2}} \int_0^{+\infty} dx \frac{x^{-i/ka}}{(1+x e^{\lambda ka})(1+x)} = \frac{\pi ka}{\sinh\left(\frac{\pi}{ka}\right)} \frac{e^{\frac{i\lambda}{2}} \sin\left(\frac{\lambda}{2}\right)}{\sinh(ka\lambda)} \quad (\text{C.27})$$

W podobny sposób, tzn. korzystając z funkcji pomocniczej, można wykonać rachunki dla wyrazu mieszanego. Zbierając razem powyższe wzory otrzymujemy

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\mathbf{k}}^{3\text{D}} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\beta_1 \left| \langle 000 | e^{iQ_e z} - e^{iQ_h z} | k\beta_1 0 \rangle \right|^2 = \pi a^3 \frac{16^2 \tilde{S}_e^2}{\tilde{g}_e^6 \tilde{r}_e^6} \left( -4 \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + i4 \frac{\partial}{\partial \lambda} + 1 + \tilde{S}_e^2 \right) B(\lambda) \Big|_{\lambda=0} + \\ &+ \pi a^3 \frac{16^2 \tilde{S}_h^2}{\tilde{g}_h^6 \tilde{r}_h^6} \left( -4 \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + i4 \frac{\partial}{\partial \lambda} + 1 + \tilde{S}_h^2 \right) B(\lambda) \Big|_{\lambda=0} + \\ &+ 2\text{Re} \pi a^3 \frac{16^2 \tilde{S}_e \tilde{S}_h}{\tilde{g}_e^3 \tilde{r}_e^3 \tilde{g}_h^3 \tilde{r}_h^3} \left( -4 \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + i4 \frac{\partial}{\partial \lambda} + 1 + \tilde{S}_e \tilde{S}_h \right) D(\lambda) \Big|_{\lambda=0} e^{i\frac{\tilde{Z}_{Q_e} - \tilde{Z}_{Q_h}}{ka}} e^{-i\frac{\tilde{\Phi}_e - \tilde{\Phi}_h}{ka}} e^{-(\tilde{Z}_{Q_e} - \tilde{Z}_{Q_h})}, \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

gdzie funkcja  $D(\lambda)$  zdefiniowana jest wzorem

$$D(\lambda) = -\frac{\pi ka}{\sinh\left(\frac{\pi}{ka}\right)} \left[ \frac{i \left( e^{-2(\tilde{Z}_{Q_e} - \tilde{Z}_{Q_h})} e^{i\lambda} - 1 \right)}{e^{-2(\tilde{Z}_{Q_e} - \tilde{Z}_{Q_h})} e^{\frac{ka\lambda}{2}} - e^{-\frac{ka\lambda}{2}}} \right]. \quad (\text{C.29})$$

## Dodatek D

# Przybliżone wysumowanie po stanach ekscytonowych w dwóch wymiarach

Otrzymanie analitycznego wyniku na sumę po stanach ekscytonowych pozwala na dokładne uwzględnienie w rachunkach wszystkich poziomów. Wymaga to jednak wykonania dodatkowo pojedynczej całki i w pewnych zastosowaniach wygodniejsze może być użycie wzorów przybliżonych. Suma po stanach ekscytonowych wyraźnie wskazuje, że największy przyczynek pochodzi od poziomu podstawowego, więc najprostszym przybliżeniem byłoby obcięcie we wzorze (B.16) sumy na pierwszym wyrazie. Otrzymujemy wtedy

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{\lambda_0}^{\text{R}}(\omega) &= -\alpha\omega_0\sqrt{2ML^2\omega_0}\frac{\pi}{2} \\ &\quad (N_0 + 1)R_{11}(q_+L)\mathcal{M}_{\lambda_0\lambda_0}^{2\text{D}}(q_+)\Theta(q_+) + N_0R_{11}(q_-L)\mathcal{M}_{\lambda_0\lambda_0}^{2\text{D}}(q_-)\Theta(q_-), \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

gdzie  $\mathcal{M}_{\lambda_0\lambda_0}^{2\text{D}}$  jest elementem elementem macierzowym obliczonym na stanie podstawowym

$$\mathcal{M}_{\lambda_0\lambda_0}^{2\text{D}}(q) = \left| \langle 000 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}\frac{m_e}{M}} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}\frac{m_h}{M}} | 000 \rangle \right|^2. \quad (\text{D.2})$$

Sumę po stanach ekscytonowych można też policzyć w sposób przybliżony, uwzględniając fakt, że wpływ od coraz bardziej odległych poziomów jest coraz mniejszy. Wróćmy do wzoru (B.6). Wypisując wszystkie jego części wzoru, w których występuje zależność od stanów pośrednich ( $\lambda_0$  oznacza w poniższych wzorach stan podstawowy ekscytonu)

$$Q = \sum_{\beta} \left| \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}\frac{m_e}{M}} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}\frac{m_h}{M}} | \beta \rangle \right|^2 \delta(\omega \pm \omega_0 - \epsilon^\beta) \quad (\text{D.3})$$

**DODATEK D. PRZYBLIŻONE WYSUMOWANIE PO STANACH EKSCYTONOWYCH  
W DWÓCH WYMIARACH**

a następnie dodając i odejmując podobne wyrazy, w których zaniedbana jest zależność od energii kolejnych poziomów ekscytonowych otrzymujemy następujące wyrażenie

$$Q = \sum_{\beta} \left| \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_e}{M}} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_h}{M}} | \beta \rangle \right|^2 \delta(\omega \pm \omega_0 - \epsilon^{\lambda_0}) +$$

$$+ \sum_{\beta \neq \lambda_0} \left| \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_e}{M}} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_h}{M}} | \beta \rangle \right|^2 \left( \delta(\omega \pm \omega_0 - \epsilon^{\beta}) - \delta(\omega \pm \omega_0 - \epsilon^{\lambda_0}) \right). \quad (\text{D.4})$$

Pierwszy wyraz we wzorze (D.4) można uprościć korzystając z zupełności stanów ekscytonowych.

$$\sum_{\beta} \langle \lambda_0 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_e}{M}} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_h}{M}} | \beta \rangle \langle \beta | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_e}{M}} - e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_h}{M}} | \lambda_0 \rangle \delta(\omega \pm \omega_0 - \epsilon^{\lambda_0}) =$$

$$= \langle \lambda_0 | \left( e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_e}{M}} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_h}{M}} \right) \left( e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_e}{M}} - e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_h}{M}} \right) | \lambda_0 \rangle \delta(\omega \pm \omega_0 - \epsilon^{\lambda_0}). \quad (\text{D.5})$$

Tak więc pozostaje tylko jeden element macierzowy pomiędzy stanami podstawowymi. Wyrażenie w elemencie macierzowym przyjmuje znacznie prostszą postać

$$\left( e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_e}{M}} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_h}{M}} \right) \left( e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_e}{M}} - e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} \frac{m_h}{M}} \right) = 2 [1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{r})]. \quad (\text{D.6})$$

We wzorze tym występuje jawna zależność od kąta pomiędzy wektorami  $\mathbf{q}$  i  $\mathbf{r}$ . Można się jej pozbyć na co najmniej dwa sposoby: wykorzystując fakt, że suma po stanach nie powinna zależeć od wyboru kierunku wektora  $\mathbf{r}$  względem  $\mathbf{q}$  i założyć jakiś wygodny w dalszych obliczeniach kierunek i zwrot albo skorzystać z tożsamości dla funkcji generującej funkcji Bessela postaci

$$e^{iz \cos \varphi} = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} i^k J_k(z) e^{ik\varphi}. \quad (\text{D.7})$$

Jest to jedyna zależność od kąta  $\varphi$  we wzorach na  $\text{Im}\Sigma(\omega)$ , dlatego też interesuje nas całka z powyższego wyrażenia po kącie  $\varphi$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{iqr \cos \varphi} = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} i^k J_k(qr) \int_0^{2\pi} d\varphi e^{ik\varphi} = 2\pi J_0(qr) \quad (\text{D.8})$$

**DODATEK D. PRZYBLIŻONE WYSUMOWANIE PO STANACH EKSCYTONOWYCH  
W DWÓCH WYMIARACH**

---

Wykorzystując powyższe tożsamości otrzymujemy następujący wzór na część urojoną retardowanej energii własnej

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma^{\text{R}}(\omega) = & -\alpha\omega_0\sqrt{2ML^2\omega_0}\frac{\pi}{2} \left( (N_0 + 1)R_{11}(q_+L)\tilde{\mathcal{M}}(q_+)\Theta(q_+) \right. \\ & \left. + N_0R_{11}(q_-L)\tilde{\mathcal{M}}(q_-)\Theta(q_-) \right), \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

gdzie

$$\tilde{\mathcal{M}}(q) = \int_0^{+\infty} r dr 2(1 - J_0(qr)) |\phi_{000}(r)|^2 = 2 - \frac{2}{\left[1 + \left(\frac{aq}{4}\right)^2\right]^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{D.10})$$

oraz

$$q_{\pm} = \sqrt{2M(\omega \pm \omega_0 - \epsilon_0)}. \quad (\text{D.11})$$

$\phi_{000}(r)$  oznacza stan podstawowy dwuwymiarowego rozwiązania równania Schrödingera dla atomu wodoru.

## Dodatek E

# Elementy macierzowe ekscytonu w dwóch wymiarach

Rozwiązanie równania Schrödingera dla atomu wodoru w dwóch wymiarach w zmiennych parabolicznych można wyrazić wzorami analitycznymi. Współrzędne kartezjańskie  $(x, y)$  związane są ze zmiennymi parabolicznymi następującymi wzorami

$$\begin{cases} x = \operatorname{sgn}(\xi)\sqrt{|\xi|\eta} \\ y = \frac{|\xi| - \eta}{2} \end{cases} \quad (\text{E.1})$$

gdzie  $\eta \in (0, +\infty)$ , a  $\xi \in (-\infty, +\infty)$ .

Stany dyskretne wyrażone w tych zmiennych opisywane są wzorem

$$\Psi_{n,n_1}(|\xi|, \eta) = N e^{-\frac{1}{2}(|\xi|+\eta)p_n} {}_1F_1\left(-n_1, \frac{1}{2}, p_n|\xi|\right) {}_1F_1\left(n_2, \frac{1}{2}, p_n\eta\right). \quad (\text{E.2})$$

Kolejne stany numerowane są liczbami  $n_1, n_2$ , przy czym  $n_1 + n_2 = n$ ,  $n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots$ . Energia  $n$ -tego poziomu wynosi  $\epsilon_n = Ry^*/(n + 1/2)^2$ , a symbol  $p_n$  zdefiniowany został w analogii do przypadku trójwymiarowego jako  $\hbar p_n = \sqrt{2\mu\epsilon_n}$ . Stała normalizacyjna wynosi

$$N_{n,n_1} = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{(2n_1 - 1)!!(2n_2 - 1)!!}{2^{n_1} n_1! 2^{n_2} n_2!} \frac{2^3}{\pi(1 + 2n)^3}}. \quad (\text{E.3})$$

DODATEK E. ELEMENTY MACIERZOWE EKSCYTONU W DWÓCH WYMIARACH

Dla uproszczenia zapisu przyjęta została konwencja, w której  $(-1)!! = 1$ .

Funkcje falowe stanów z widma ciągłego mają postać

$$\Psi_{p\sigma}(|\xi|, \eta) = N e^{\frac{i}{2}(|\xi| + \eta)p} {}_1F_1\left(\frac{\sigma_1}{ipa} + \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, -ip|\xi|\right) {}_1F_1\left(\frac{\sigma_2}{ipa} + \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, -ip\eta\right), \quad (\text{E.4})$$

gdzie  $\sigma_1 + \sigma_2 = 1$ ,  $\sigma_1 \in (-\infty, +\infty)$ ,  $a$  jest efektywnym promieniem Bohra,  $p = \sqrt{2\mu\epsilon}$  oraz stała normalizacyjna

$$N = \frac{e^{\frac{\pi}{2p}}}{2\sqrt{2a\pi^2}} \left| \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{\sigma_1}{ipa}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{\sigma_2}{ipa}\right) \right|. \quad (\text{E.5})$$

Elementy macierzowe pomiędzy stanami podstawowym i należącymi do widma dyskretnego mają postać

$$\begin{aligned} \langle 0, 0 | e^{iQy} | n, n_1 \rangle &= \frac{\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2\pi}{a} N_{n, n_1}}{\sqrt{(p_0 + p_n)^2 + Q^2}} \left( \frac{p_0 - p_n - iQ}{p_0 + p_n - iQ} \right)^{n_1} \left( \frac{p_0 - p_n + iQ}{p_0 + p_n + iQ} \right)^{n - n_1} \times \\ &\times \left[ \frac{p_0 - (1 + 4(n - n_1)p_n) + iQ}{(p_0 + iQ)^2 - p_n^2} + \frac{p_0 - (1 + 4n_1p_n) - iQ}{(p_0 - iQ)^2 - p_n^2} \right], \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

Wzór na element macierzowy przekrycia za stanami z widma ciągłego ma postać

$$\begin{aligned} \langle 0, 0 | e^{iQy} | p, \sigma_1 \rangle &= \frac{e^{\frac{\pi}{2pa}}}{(\pi a)^{3/2}} \left| \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{\sigma_1}{ipa}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{\sigma_2}{ipa}\right) \right| \times \\ &\times \frac{\left( \frac{p_0 + ip - iQ}{p_0 - ip - iQ} \right)^{-\frac{1}{4} - \frac{\sigma_1}{ipa}} \left( \frac{p_0 + ip + iQ}{p_0 - ip + iQ} \right)^{-\frac{1}{4} - \frac{\sigma_2}{ipa}}}{\sqrt{(p_0 - ip)^2 + Q^2}} \times \\ &\times \left[ \frac{p_0 + iQ - 4\sigma_2/a}{(p_0 + iQ)^2 + p^2} + \frac{p_0 - iQ - 4\sigma_1/a}{(p_0 - iQ)^2 + p^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$



DODATEK E. ELEMENTY MACIERZOWE EKSCYTONU W DWÓCH WYMIARACH

Wzory (E.6) oraz (E.7) można zapisać w postaci uproszczonej (analogicznej do odpowiednich wzorów w trzech wymiarach) Dla stanów z widma dyskretnego jest to

$$\begin{aligned} \langle 0, 0 | e^{iQy} | n, n_1 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}(n+1/2)^{3/2}} \sqrt{\frac{(2n_1-1)!!(2(n-n_1)-1)!!}{2^n n_1! (n-n_1)!}} \times \\ &\times \frac{e^{-i(n-2n_1)\Phi}}{(gr)^{5/2}} \left(\frac{g}{r}\right)^{n+\frac{1}{2}} 4iS [2(n-2n_1)x - iS], \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

gdzie

$$\begin{aligned} x &= \frac{p_n}{p_0}, \\ Q_{e,h} &= \mp \frac{m_{h,e}}{m_e + m_h} q, \\ S_{e,h} &= \frac{Q_{e,h}}{p_0}, \\ Z_Q &= \frac{p_0 - p_n - iQ}{p_0 + p_n - iQ} = |Z_Q| e^{i\Phi}, \\ g^2 &= (1-x)^2 + S^2, \\ r^2 &= (1+x)^2 + S^2. \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

W przypadku widma ciągłego analogiczna postać przybiera formę

$$\begin{aligned} \langle 0, 0 | e^{iQy} | p, \sigma_1 \rangle &= \frac{e^{\frac{\pi}{pa}}}{(\pi a)^3} \left| \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{\sigma_1}{ipa}\right) \right| \left| \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{\sigma_2}{ipa}\right) \right| \frac{\tilde{Z}_Q^{(-1/4-\sigma_1/ipa)} (\tilde{Z}_Q^{*-1})^{(-1/4-\sigma_2/ipa)}}{\sqrt{(p_0-ip)^2 + Q^2}} \times \\ &\times \left[ \frac{p_0 + iQ - 4\sigma_2/a}{(p_0 + iQ)^2 + p^2} + \frac{p_0 - iQ - 4\sigma_1/a}{(p_0 - iQ)^2 + p^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

We wzorze (E.10) symbol  $\tilde{Z}_Q$  oznacza następującą wielkość

$$\tilde{Z}_Q = \frac{p_0 - iQ + ip}{p_0 - iQ - ip} = |\tilde{Z}_Q| e^{i\tilde{\Phi}}. \quad (\text{E.11})$$

Dla większej przejrzystości w powyższych wzorach, tam, gdzie było to możliwe unikając niejednoznaczności, pominięte zostały indeksy dolne  $e, h$  oznaczające, że parametry odnoszą się do danego typu cząstki.

Po wysumowaniu po podpoziomach  $n_1$  otrzymujemy następujące wyrażenie na kwadrat elementu macierzowego przejścia do widma dyskretnego

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{M}}_n^{2D}(q) &= \sum_{n_1=0}^n \left| \langle 0, 0 | e^{iQ_e y} - e^{iQ_h y} | n, n_1 \rangle \right|^2 = \\ &= \frac{64}{(2n+1)^3} \times \left[ \frac{S_e^2}{(g_e r_e)^5} \left( \frac{g_e}{r_e} \right)^{2n+1} \left( -4x^2 D_n''(0) + S_e^2 D_n(0) \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{S_h^2}{(g_h r_h)^5} \left( \frac{g_h}{r_h} \right)^{2n+1} \left( -4x^2 D_n''(0) + S_h^2 D_n(0) \right) \right] + \\ &\quad - \frac{64}{(2n+1)^3} \frac{2S_e S_h}{(g_e g_h r_e r_h)^{5/2}} \left( \frac{g_e g_h}{r_e r_h} \right)^{n+1/2} \times \\ &\quad \times \left( -4x^2 D_n''(\Phi_e - \Phi_h) - 2x(S_h - S_e) D_n'(\Phi_e - \Phi_h) + S_e S_h D_n(\Phi_e - \Phi_h) \right), \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

gdzie funkcja  $D_n(\Phi)$  zdefiniowana jest wzorem

$$D_n(\Phi) = \sum_{n_1=0}^n \left[ \frac{(2n_1 - 1)!! (2(n - n_1) - 1)!!}{2^n n_1! n_2!} \right] \cos((n - 2n_1)\Phi), \quad (\text{E.13})$$

Pochodne  $D_n(\Phi)$  po argumentie  $\Phi$  wynoszą odpowiednio

$$D_n'(\Phi) = - \sum_{n_1=0}^n \left[ \frac{(2n_1 - 1)!! (2(n - n_1) - 1)!!}{2^n n_1! n_2!} \right] (n - 2n_1) \sin((n - 2n_1)\Phi),$$

$$D_n''(\Phi) = - \sum_{n_1=0}^n \left[ \frac{(2n_1 - 1)!! (2(n - n_1) - 1)!!}{2^n n_1! n_2!} \right] (n - 2n_1)^2 \cos((n - 2n_1)\Phi).$$

Dla argumentu  $\Phi = 0$  funkcje te upraszczają się i mamy

$$\begin{aligned} D_n(0) &= 1, \\ D'_n(0) &= 0, \\ D''_n(0) &= -\frac{1}{2}n(n+1). \end{aligned} \tag{E.14}$$

Dla dowolnego argumentu funkcję  $D_n(\Phi)$  możemy zapisać w następującej postaci

$$D_n(\Phi) = \text{Re} \left[ e^{in\Phi} {}_2F_1\left(-n, \frac{1}{2}; 1, 1 - e^{-2i\Phi}\right) \right]. \tag{E.15}$$

W przypadku elementów macierzowych przejść do stanów z widma ciągłego otrzymujemy wzór na kwadrat modułu elementu macierzowego

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{M}}_p^{2D}(q) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma_1 \left| \langle 0, 0 | e^{-iQ_e y} - e^{iQ_h y} | p, \sigma_1 \rangle \right|^2 = \frac{8\tilde{x}e^{\pi/(2\tilde{x})}}{\tilde{x}^3 p_0^3} \frac{\tilde{S}_e \tilde{S}_h}{(\tilde{g}_e \tilde{g}_h \tilde{r}_e \tilde{r}_h)^{5/2}} e^{(\tilde{\Phi}_e + \tilde{\Phi}_h)/(2\tilde{x})} A_{Q_e Q_h} \\ &+ \frac{4\tilde{x}e^{\pi/(2\tilde{x})}}{\pi^3} \left[ \frac{\tilde{S}_e^2}{\tilde{g}_e^5 \tilde{r}_e^5} e^{-\tilde{\Phi}_e/x} A_{Q_e Q_e} + \frac{\tilde{S}_h^2}{\tilde{g}_h^5 \tilde{r}_h^5} e^{-\tilde{\Phi}_h/x} A_{Q_h Q_h} \right], \end{aligned} \tag{E.16}$$

gdzie

$$A_{Q_1 Q_2} = \left( -16p^2 B''(\lambda) + 4p(Q_1 - Q_2)B'(\lambda) + Q_1 Q_2 B(\lambda) \right) \Big|_{\lambda=2 \ln |\tilde{Z}_{Q_1}/\tilde{Z}_{Q_2}|}, \tag{E.17}$$

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= p/p_0, \\ \tilde{g}_{e,h}^2 &= (1 - \tilde{x})^2 + \tilde{S}_{e,h}^2 \\ \tilde{r}_{e,h}^2 &= (1 + \tilde{x})^2 + \tilde{S}_{e,h}^2 \\ \tilde{S}_{e,h}^2 &= Q_{e,h}/p_0 \end{aligned} \tag{E.18}$$

oraz

$$B(\lambda) = \frac{2\pi^3}{\cosh(\frac{\pi p_0}{2p})} {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + \frac{ip_0}{p}, \frac{1}{2} - \frac{ip_0}{p}; 1; \frac{1 - \cosh(\lambda/2)}{2}\right). \tag{E.19}$$

${}_2F_1$  oznacza funkcję hipergeometryczną.

## Dodatek F

### Obliczenia numeryczne

W niniejszym dodatku przedstawię szczegóły związane z przeprowadzonymi w niniejszej pracy obliczeniami numerycznymi. Zaprezentuję zastosowane metody i środki jakimi się posłużyłem.

Kluczową wielkością w rozwinięciu kumulantowym była część urojona energii własnej. Determinowała ona kształt linii widmowej zarówno w przypadku niskiej koncentracji jak i silnie wzbudzonych układów. Suma po elementach macierzowych po stanach z widma dyskretnego okazuje się bardzo szybko zbiegać, dlatego w rachunkach numerycznych uwzględniałem kilka do kilkunastu najniższych poziomów, badając zbieżność otrzymywanego wyniku. Stany z widma ciągłego wymagały wykonania pojedynczej całki z funkcji hipergeometrycznej, która obliczana była przy użyciu kwadratur Gaussa.

Kolejny element obliczeń stanowi całka po energii we wzorze (2.42) w przypadku niskiej koncentracji oraz (4.39) w przypadku silnie wzbudzonym. W obydwu przypadkach mamy do czynienia całką funkcji oscylującej z częstością  $t$  w przestrzeni  $\omega$ . Niestety kwadratury Gaussa okazywały się mało stabilną metodą i w rachunkach zastosowana została metoda Simpsona.

Kolejnym etapem na drodze obliczenia kształtu linii widmowej było obliczenie transformaty Fouriera z funkcji Greena zależnej od czasu, która w przypadku słabych zaburzeń jest szybko oscylującą i wolno zanikającą funkcją czasu. Do obliczeń tych używałem standardowego algorytmu szybkiej transformaty Fouriera (*fast Fourier transform*, FFT dobierając rozdzielczość w argumencie czasowym na podstawie szybkości oscylacji (związanej z przesunięciem energii) oraz zasięg posługując się stałą zaniku  $\Gamma$ . Parametry te szacowane były przy wykorzystaniu asymptotycz-

nej postaci  $S_k(t)$ . Wartości te następnie służyły do wyznaczenia rozdzielczości przy obliczaniu  $\text{Im}\Sigma^R(\omega)$ . Parametry numeryczne obliczane są więc w sposób samouzgodniony zapobiegając użyciu zbyt małej rozdzielczości przy tablicowaniu jednej z funkcji.

Zauważmy, że stosując standardowy algorytm szybkiej transformaty Fouriera (FFT) mamy bardzo ograniczoną dokładność. Dlatego w niektórych wypadkach używałem znacznie wolniejszej metody Simpsona, która z definicji umożliwia dokładniejsze wycałkowanie przy takiej samej gęstości obliczonych punktów. Algorytm FFT w praktyce daje wynik w dużo większym obszarze energii niż potrzebny do dalszych obliczeń. W tym niewielkim wycinku, dla części punktów rachunki poprawiane były z wykorzystaniem całkowania metodą Simpsona. Dotyczy to przede wszystkim punktów, w których wartość funkcji jest bliska zeru.

# Dodatek G

## Spis skrótów

W rozprawie stosowane są różne skróty, zgodne ze stosowanymi oznaczeniami w publikacjach fachowych. Część z nich stosowana jest głównie we wzorach matematycznych, inne występują w tekście. Wszystkie zgodne są z ogólnie stosowanymi skrótami w publikacjach fachowych. Dla przejrzystości pracy postanowiłem zebrać je w niniejszym dodatku.

A — skrót stosowany we wzorach do oznaczenia funkcji adwansowanej

FFT – z ang. *fast Fourier transform*, szybka transformata Fouriera

GW — skrót oznaczający przybliżenie uwzględniające dynamiczne ekranowanie w rachunku zaburzeń, nazwa GW pochodzi od pojawiającego się w rachunkach iloczynu funkcji G oraz ekranowanego oddziaływania W.

HF — Hartree-Fock, stosowany do oznaczania wyrażeń we wzorach obliczanych w przybliżeniu Hartree-Focka

LO — z ang. *longitudinal-optical*, podłużny-optyczny

PPA — z ang. *plasmon pole approximation*, przybliżenie bieguna plazmowego

R — skrót stosowany we wzorach do oznaczenia funkcji retardowanej

RPA – z ang. *random phase approximation*, przybliżenie chaotycznych faz

SCFA – z ang. *self consistent field approximation*

# Literatura

- [1] R. Zimmermann. *Many-Particle Theory of Highly Excited Semiconductors*. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1988.
- [2] L.J. Sham, T.M. Rice. Many-particle derivation of the effective-mass equation for the Wannier exciton. *Phys. Rev*, 144(2):708–714, 1966.
- [3] G. Göbel. Recombination without  $k$ -selection rules in dense electron-hole plasma in high-purity GaAs lasers. *Appl. Phys. Let.*, 24(10):492, 1974.
- [4] B. Zee. Broadening mechanism in semiconductor (GaAs) lasers: Limitations to single mode power. *IEEE J. Quant. El.*, QE-14(10):727–736, 1978.
- [5] F. Stern. Calculated spectral dependence of gain in excited GaAs. *J. Appl. Phys.*, 47(12):5382–5385, 1976.
- [6] W.W. Chow, S.W. Koch, M. Sargent III. The effects of electron-hole Coulomb interaction in semiconductor lasers. *IEEE J. Quant. El.*, 1990.
- [7] S.A. Anson, J.T. Olesberg, M.E. Flatté, T.C. Hasenberg. Differential gain, differential index, and linewidth enhancement factor for a 4  $\mu\text{m}$  superlattice laser active layer. *J. Appl. Phys.*, 1999.
- [8] D. A. Ackerman, G.E. Shtengel, M.S. Hybertsen, P.A. Morton, R.F. Kazarinow, T. Tanbun-  
Ek, R.A. Logan. Analysis of gain in determining  $T_0$  in 1.3  $\mu\text{m}$  semiconductor lasers. *IEEE J. Sel. Top. Quant. El.*, 1(2):250–261, 1995.

## LITERATURA

---

- [9] H. Haug, S.W. Koch. Semiconductor laser theory with many body effects. *Phys. Rev. A*, 39(4):1887–98, 1989.
- [10] A. Sugimura, E. Patzak, P. Meissner. Homogeneous linewidth and linewidth enhancement factor for GaAs semiconductor laser. *J. Phys. D*, 19(1):7–16, 1986.
- [11] J. Ding, M. Hagerott, T. Ishihara, H. Jeon, A.V. Nurmikko. (Zn,Cd)Se/ZnSe quantum-well lasers: excitonic gain in an inhomogeneously broadened quasi-two-dimensional system. *Phys. Rev. B*, 47(16):10528–42, 1993.
- [12] S. Rudin, T.L. Reinecke, B Segall. Temperature-dependent exciton linewidths in semiconductors. *Phys. Rev. B*, 42(17):11218–11231, 1990.
- [13] S. Rudin, T.L. Reinecke. Temperature-dependent exciton linewidths in semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. B*, 41(15):3017–3027, 1990.
- [14] J. O’Gorman, A.F. Levi, S. Schmitt-Rink, T. Tanbun-Ek, D.L. Coblenz. On the temperature sensitivity of semiconductor lasers. *Appl. Phys. Lett.*, 1992.
- [15] F.P. Logue, P. Rees, J.E. Heffernan, C. Jordan, J.F. Donegan, J. Hegarty, E. Hiei, S. Taniguchi and T. Hino and K. Nakano, Ishibashi A. Optical gain in (Zn,Cd)Se-Zn(S,Se) quantum wells. *J. Opt. Soc. Am. B*, 15(4):1295–304, 1998.
- [16] B. Nottelmann, V.M. Axt, T. Kuhn. Many-body effects in intersubband transitions of modulation-doped quantum wells. *Physica B*, 272(1-4):234–6, 1999.
- [17] G.B. Ren, P. Blodd. Optical gain in GaN quantum wells with many-body effects. *Phys. Rev. B*, 60(24):16675–9, 1999.
- [18] A.D. Andreev, E. P. O’Reilly. Theory of the gain characteristics of InGaN/AlGaN QD lasers. *MRS Internet J. Nitr. Sem.*, Res4S1:G6.45, 1999.
- [19] L. Hedin. On correlation effects in electron spectroscopies and the GW approximation. *J. Phys.: Cond. Mat.*, 11:R489–R528, 1999.



## LITERATURA

---

- [20] Gerald D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Plenum Press, 1981.
- [21] V. Janis, J. Schlipf. Linked cluster expansion around mean-field theories of interacting electrons. *Phys. Rev. B*, 52(24):17119–34, 1995.
- [22] J. Liebler, H. Haug. Theory of the band-tail absorption saturation in polar semiconductors. *Phys. Rev. B*, 41(9):5843–5856, 1990.
- [23] E. Hanamura, H. Haug. Condensation effects of excitons. *Phys. Rep.*, 33c(4):209–284, Oct 1977.
- [24] I. Egri. Excitons and plasmons in metals, semiconductors and insulators: a unified approach. *Phys. Rep.*, 119(6):363–402, Mar 1985. plazmony - przeglądówka.
- [25] V. Keldysh. Diagram technique for nonequilibrium processes. *Sov. Phys. JETP*, 20(4):1018–1026, 1065.
- [26] W. Bardyszewski, D. Yevick. Electroabsorption and electrorefraction in quantum-well modulators. *Phys. Rev. B*, 49(8):5368–5378, Feb 1994.
- [27] H. Haug, S. Schmitt-Rink. Basic mechanism of the optical nonlinearities of semiconductors near the band edge. *J. Opt. Soc. Am. B*, 2(7):1135, 1985.
- [28] J. Liebler, H. Haug. Calculation of the urbach tail absorption in a second-order cumulant expansion. *Europhys. Lett.*, 14(1):71–76, Jan 1991.
- [29] A. L. Fetter, J. D. Walecka. *Kwantowa teoria układów wielu cząstek*. PWN, 1982.
- [30] J.W. Negele, H. Orland. *Quantum many-particle systems*. Addison-Wesley, 1988.
- [31] D. Dunn. Electron-phonon interaction in an insulator. *Can. J. Phys.*, 53(4):321–337, 1975.
- [32] F. Aryasetiawan, L. Hedin, K. Karlsson. Multiple plasmon satellites in Na and Al spectral functions from ab initio cumulant expansion. *Phys. Rev. Letters*, 77(11):2268, 1996.

## LITERATURA

---

- [33] D. Coffey. Contribution to the quantum-well exciton linewidth due to the intrasubbands scattering by optical phonons in an applied electric fields. *Phys. Rev. B*, 40(17):11654–11658, 1989.
- [34] P. Král. Nonequilibrium linked cluster expansion for steady-state quantum transport. *Phys. Rev. B*, 1997.
- [35] P. Král, A.P. Jauho. Resonant tunneling in a pulsed phonon field. *Phys. Rev. B*, 1999.
- [36] G. Traetta, G. Coli, R. Cingolani. Analytical green's function model for the evaluation of the linear and nonlinear optical properties of the excitons in quasi-two-dimensional systems. *Phys. Rev. B*, 59(20):13196–13200, 1999.
- [37] W. Bardyszewski, M. Prywata. Scattering of excitons by phonons in quantum wells. *Acta Phys. Pol. A*, 90(4):715–718, 1996.
- [38] R. Kubo. Generalized cumulant expansion method. *J. Phys. Soc. Jap.*, 17(7):1100–1120, 1962.
- [39] W. Feller. *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*, wolumen II, rozdział Infinitely Divisible Distributions. John Wiley & Sons Inc., 1966.
- [40] F. Urbach. The long-wavelength edge of photographic sensitivity and the electronic absorption of solids. *Phys. Rev.*, 52:1324, 1953.
- [41] G. D. Mahan. Phonon-broadened optical spectra: Urbach's rule. *Phys. Rev.*, 145(2):602–608, 1966.
- [42] H. Sumi, Y. Toyozawa. Urbach-Mertens rule and exciton trapped momentarily by lattice vibration. *J. Opt. Soc. Jap.*, 31(2):342–358, 1971.
- [43] T. Yamamoto and M. Kasu, S. Noda, A. Sasaki. Photoluminescent properties and optical absorption of AlAs/GaAs disordered superlattices. *J. Appl. Phys.*, 68(10):5318, 1990.

## LITERATURA

---

- [44] W. Sritrakool, V. Sa-yakanit, H. R. Glyde. Band tails in disordered systems. *Phys. Rev. B*, 33(2):1199–1202, 1986.
- [45] S. John, M. Y. CHou, M. H. Cohen, C. M. Soukoulis. Density of states for an electron in a correlated Gaussian random potential: Theory of the Urbach tail. *Phys. Rev. B*, 37(12):6963–6976, 1988.
- [46] P. Van Mieghem. Theory of band tails in heavily doped semiconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 64(3):755, 1992.
- [47] A. Baldereschi, N.O. Lipari. Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors. *Phys. Rev. B*, 1973.
- [48] A. Baldereschi, N.O. Lipari. Energy levels of direct excitons in semiconductors with degenerate bands. *Phys. Rev. B*, 1971.
- [49] M. Beaudoin, A.J. DeVries, S.R. Johnson, H. Laman, T. Tiedje. Optical absorption edge of semi-insulating GaAs and InP at high temperatures. *Appl. Phys. Lett.*, 70(26):3540–3542, 1997.
- [50] L. Hedin, J. Michels, J. Inglesfield. Transition from adiabatic to the sudden limit in core-electron photoemission. *Phys. Rev. B*, 58(23):15565, 1998.
- [51] M. Yamanishi, Y. Lee. Phase dumpings of optical dipole moments and gain spectra in semiconductor lasers. *IEEE J. Quant. El.*, QE-23(4):367–370, 1987.
- [52] S. Schuster, H. Haug. Analysis of emission and gain saturation in gain-switched semiconductor lasers. *J. Opt. Soc. Am B*, 13(7):1605–1613, 1996.
- [53] C. Ell, R. Blank, S. Benner, H. Haug. Simplified calculations of the optical spectra of two- and three-dimensional laser-excited semiconductors. *J. Opt. Soc. Am. B*, 6(11):2006–2012, 1989.

## LITERATURA

---

- [54] A. Selloni, S. Modesti, M. Capizzi. Luminescence line-shape analysis of the electron-hole plasma in direct-gap Ga-Al-As: Random-phase-approximation approach. *Phys. Rev. B*, 30(2):821–831, 1984.
- [55] E Lipparini K. Takayanagi. Dynamic response of a two-dimensional electron gas: Effect of short-range correlations in the ladder approximation. *Phys. Rev. B*, 54(11):8122–8129, 1996.
- [56] M.P. Kessler, E.P.Ippen. Subpicosecond gain dynamics in GaAlAs laser diodes. *Appl. Phys. Lett.*, 1987.
- [57] L. Hedin. New method for calculating one-particle Green's function with application to the electron-gas problem. *Phys. Rev.*, 139(3A):796–823, Aug 1965.
- [58] A. W. Overhauser. Simplified theory of electron correlations in metals. *Phys. Rev. B*, 3(6):1888–1898, 1971.
- [59] T. M. Rice. Quasi-particle properties in an electron-hole liquid. *Il Nuovo Cim.*, 23(1):226–233, 1974.
- [60] C.A. Kukkonen. Electron-electron interaction in simple metals. *Phys. Rev. B*, 20(2):550–557, 1979.
- [61] W. Xu. Dielectric function of a two-dimensional electron gas under intense laser radiation. *Eurphys. Lett.*, 44(1):62–67, 1998.
- [62] R. Zimmermann. Excitons and electron-hole plasma. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 76(191):191–205, 1976.
- [63] W. Bardyszewski, David Yevick, M. Prywata. Cumulant expansion approach to stimulated emission in semiconductor lasers. *Phys. Rev. B*, 62(3):1835–41, 2000.
- [64] W., D. Yevick. Stimulated recombination in highly excited GaAs. *Phys. Rev. B*, 39(15):10839–10851, 1989.

## LITERATURA

---

- [65] F. Aryasetiawan, O. Gunnarsson. The GW method. *Rep. Prog. Phys.*, 61(3):237–312, 1998.
- [66] J.J. Quinn, R.A. Ferrel. Electron self-energy approach to correlation in a degenerate electron gas. *Phys. Rev.*, 112(3):812, 1958.
- [67] S. Schmitt-Rink, D.B. Tran Thoai, H. Haug. Calculation of the dielectric function for highly excited polar semiconductors. *Z. Physik B*, 39:25–31, 1980.
- [68] Y.M. Vil'k, A.E. Ruckenstein, S. Schmitt-Rink. Theory of multiple excitonic peaks in the luminescence of doped quantum wells in a magnetic field. *Int. J. Mod. Phys. B*, 7(19):3435–3447, 1993.
- [69] D. Gershoni, C.H. Henry, G.A. Baraff. Calculating the optical properties of multidimensional heterostructures: Application to the modeling of quaternary quantum well lasers. *IEEE J. Quant. El.*, 29(9):2433, 1993.
- [70] L. D. Landau, E. M. Lifszyc. *Mechanika kwantowa*. Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1979.