

RESOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE MASA EFECTIVA PARA EL EXCITON DE WANNIER EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELÉCTRICO HOMOGÉNEO (I)

M. RAMOS Y C. TRALLERO

Grupo de Física Teórica, Esc. de Física, Universidad de la Habana, Cuba.

Recibido: 27 de junio de 1975.

ABSTRACT. The Bubnov-Galerkin functional method is considered in the solution of the effective mass equation for the Wannier exciton under an homogeneous electric field. The magnetic quantum number is taken equal to zero, as for the calculation of the absorption coefficient when only direct allowed transition are considered. The eigenvalue and oscillatory equations obtained through the separation variables method in parabolic coordinates are shown, the properties of which are analysed. The fundamental theorems of the functional method are explicitly stated and applied to the equations.

RESUMEN. Este trabajo considera la aplicación del método funcional de Bubnov-Galerkin a la resolución de la ecuación de masa efectiva para el exciton de Wannier, bajo un campo eléctrico homogéneo. Teniendo presente el cálculo del aporte de las transiciones directas permitidas al coeficiente de absorción sólo se considera el valor cero del número cuántico magnético. Se presenta la ecuación de autovalores y la de oscilaciones, obtenidas mediante el método de separación de variables en coordenadas parabólicas analizándose las propiedades de las mismas. Los teoremas fundamentales que sustentan el método funcional se presentan aplicándose a ambas ecuaciones.

INTRODUCCIÓN

En la investigación de los estados electrónicos de un semiconductor o aislante ha resultado de mucho interés en los últimos años la medición experimental de magnitudes tales como: la electrorreflectancia y la electroabsorción. Estas magnitudes reflejan la modificación que sufren los estados electrónicos del material al aplicársele un campo eléctrico, siendo ellas susceptibles de medirse con gran precisión, presentando una alta sensibilidad respecto a los parámetros que especifican la estructura de banda del material.

Los resultados experimentales obtenidos con estas técnicas electroópticas ha motivado una investigación teórica más profunda de los procesos físicos presentes. La teoría unielectrónica que no incluyen ningún mecanismo de correlación entre los electrones explica los resultados experimentales de algunos semiconductores, pre-

sentando en otros casos poca coincidencia con estos. Así, después de Hamakawa¹ haber sugerido los efectos excitónicos como responsables de la citada divergencia con el experimento, varios autores incluyeron en la ecuación de masa efectiva un término de interacción electrón-hueco. Para los semiconductores y dieléctricos que presentan excitones tipo Wannier, este nuevo término se interpreta como una atracción coulombiana apantallada por la constante dieléctrica estática del cristal.

En este trabajo se presenta un nuevo método de resolución de la ecuación de masa efectiva incluyendo la interacción electrón-hueco, considerando aquellos estados que aportan al proceso de absorción óptica mediante transiciones directas permitidas en un semiconductor genérico con bandas de energía parabólicas e isotrópicas.

El método de resolución escogido permite obtener una expresión analítica aproximada para las soluciones del problema físico, que se está considerando. Otros autores² han obtenido mediante métodos numéricos el valor en el origen de la función de onda normalizada, necesaria en el cálculo del coeficiente de absorción. Esta magnitud como es conocido, puede ser determinada experimentalmente, no obstante, la obtención de una expresión analítica para la función de onda es también útil en el cálculo de otras magnitudes físicas.

En la primera parte de este trabajo se presenta un planteamiento detallado del problema en estudio, la ecuación de masa efectiva para el excitón de Wannier y las características generales de sus soluciones.

En la segunda parte se presenta un resumen del método funcional de Bubnov-Galerkin (B.G.), incluyendo los teoremas fundamentales que justifican su aplicación.

Por último se hacen las conclusiones del trabajo.

Sección I. Ecuación de masa efectiva.

En la teoría de absorción óptica para el excitón de Wannier³ se obtiene que el coeficiente de absorción para las transiciones directas permitidas viene dado por la expresión:

$$\alpha_p = \frac{4 \pi^2 e^2}{\eta_{cm}^2 \omega} \sum_{\vec{k}, n} \delta_{k,0} |\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{P}_{cv}|^2 |\phi_n(0)|^2 \delta(E_g + E_n - \hbar\omega) \quad (1)$$

donde: $\vec{P}_{cv} = \langle c | \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} | v \rangle$ es el elemento matricial interbanda
 ω es la frecuencia de la luz incidente

η índice de refracción del cristal y

\vec{k} es el vector de onda total del excitón.

La función de onda $\phi_n(\vec{r})$, es la solución de la ecuación de masa efectiva que en nuestro caso tiene la siguiente forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \phi_n(\vec{r}) = E_n \phi_n(\vec{r}) \quad (2)$$

E_n es la energía del par electrón-hueco, μ la masa reducida de ambas partículas y $V(\vec{r})$ es el potencial de interacción que viene dado por:

$$V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon_{nr}} - e \vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r}$$

siendo ϵ_0 la constancia dieléctrica del medio, $\vec{\mathcal{E}}$ el campo eléctrico aplicado y r la distancia entre el electrón y el hueco.

La ecuación diferencial (2) es análoga a la ecuación de Schrödinger para el efecto Stark en el átomo de hidrógeno. Sin embargo, debido a que el campo eléctrico de ionización para el excitón de Wannier es pequeño, las diferentes aproximaciones empleadas en el estudio del efecto Stark en los átomos, tales como la teoría de perturbaciones y el método WKB se hacen inaplicables en este caso, teniéndose que recurrir a la búsqueda de la solución completa de la ecuación (2).

La simetría axial del problema permite una separación de variables en coordenadas parabólicas,⁴ proponiéndose una solución de la forma siguiente:

$$\phi_n(\vec{r}) = A f(\eta) g(\xi) e^{im\varphi} \quad (4)$$

donde n es el número cuántico magnético y A cierta constante de normalización.

La sustitución (4) en (2) reduce el problema a la resolución de dos ecuaciones diferenciales de segundo orden, una de las cuales conlleva a un problema de frontera y la otra a una de autovalores, o sea:

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left[x \frac{df_k}{dx} \right] + \left[-\frac{m^2}{4x^2} - x + \beta - \frac{k}{x} \right] f_k = 0 \quad (5)$$

$$0 \leq x < \infty \quad |f_k(0)| < \infty \quad f_k(x) \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad x \rightarrow \infty$$

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left[x \frac{dg_{k'}}{dx} \right] + \left[-\frac{m^2}{4x^2} + x + \beta + \frac{k'}{x} \right] g_{k'} = 0 \quad (6)$$

$$0 \leq x < \infty \quad |g_{k'}(0)| < \infty$$

donde se ha definido la variable x como:

$$x = (\mathcal{E}/\mathcal{E}_i)^{1/3} \frac{1}{2a} \left(\frac{\eta}{\xi} \right)$$

donde

\mathcal{E}_i es el campo eléctrico de ionización del excitón

a el radio de Bohr efectivo

$$\beta = \frac{En}{\hbar\theta} = \frac{E - E_g}{\hbar\theta} \quad \text{es la energía electroóptica.}$$

El parámetro de separación de variable k y k' están dadas por las relaciones siguientes:

$$k = (4\hbar^2/\mu e \mathcal{E})^{1/3}$$

$$k' = k + 2(\mathcal{E}_i/\mathcal{E})^{1/3}$$

De la ecuación (1) se puede observar que aquellas funciones de onda que se anulan en el origen no aportan al coeficiente de absorción, haciéndose necesario un análisis del comportamiento en el origen de las soluciones de las ecuaciones (5) y (6). Estas soluciones al ser expresadas en forma de serie de potencias generalizadas para $x \rightarrow 0$ revelan que sólo para $m = 0$ no se anulan en el origen.

Las ecuaciones (5) y (6) toman entonces la forma:

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left[x \frac{df_k}{dx} \right] + \left[-x + \beta - \frac{k}{x} \right] f_k = 0 \quad (7a)$$

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left[x \frac{dg_{k'}}{dx} \right] + \left[+x + \beta + \frac{k'}{x} \right] g_{k'} = 0 \quad (7b)$$

Para las ecuaciones (7a) y (7b) se pueden definir respectivamente los potenciales:

$$V(x) = \frac{k}{x} - x$$

$$V(x) = -\frac{k'}{x} - x$$

los gráficos de dichos potenciales se muestran en las Figs. 1 y 2.

En la Fig. 1 se puede observar que el movimiento es acotado para cualquier valor de β , lo cual determina que el espectro de la ecuación (7a) sea discreto, o sea, que debemos buscar aquellos valores de k que garanticen una solución diferente de la trivial, acotada en el origen, y que tienda asintóticamente a cero cuando x tienda a infinito. De donde se desprende que la resolución de esta ecuación constituye un problema de autovalores.

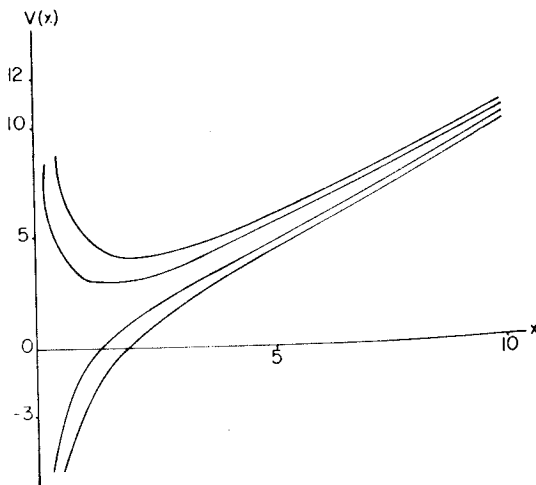


Fig. 1. Potencial efectivo.

La ecuación (7b), contrariamente al caso anterior, no representa un movimiento acotado, lo cual puede observarse en la Fig. 2. Esto trae como consecuencia que la normalización para la función de onda de la ecuación (2) se realice con la delta de Dirac en la energía.

Puede demostrarse que las ecuaciones (7a) y (7b) para $x \gg \beta$ presentan los siguientes comportamientos asintóticos.

$$f_k(x) \sim \frac{1}{x^{\frac{1}{2}}(x-\beta)^{\frac{1}{2}}} \exp \left[-\frac{2}{3}(x-\beta)^{3/2} - \frac{k}{(x-\beta)^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (8a)$$

$$g_k(x) \sim \frac{1}{x^{\frac{1}{2}}(x+\beta)^{\frac{1}{2}}} \text{sen} \left[\frac{2}{3}(x+\beta^{3/2}) + \phi(x) \right] \quad (8b)$$

donde $\phi(x)$ viene dado por:

$$\phi(x) = \begin{cases} \frac{k'}{2|\beta|^{1/2}} \ln \left[\left(\frac{x}{\beta} + 1 \right)^{1/2} - 1 / \left(\frac{x}{\beta} + 1 \right)^{1/2} + 1 \right] + \alpha & \beta > 0 \\ \frac{k'}{|\beta|^{1/2}} \operatorname{tg}^{-1} \left[\left(\frac{x}{|\beta|} - 1 \right)^{1/2} \right] + \alpha & \beta < 0 \end{cases} \quad (9)$$

Utilizando las expresiones asintóticas (8a) y (8b) se obtiene para la constante de normalización A la expresión:

$$A^2 = \frac{\mu}{2\pi^2 a^2 \hbar^2} \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_1} \right)^{1/3} \quad (10)$$

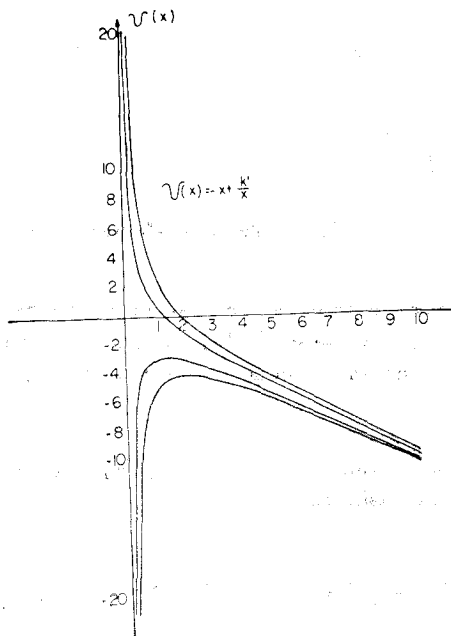


Fig. 2.a. Potencial efectivo para $k' = 2,4$ y b. Potencial efectivo para $k' = -2, -4$.

Sección II. Aplicación del método de B-G a la resolución de la ecuación de masa efectiva.

El método de B-G⁵ es una generalización del método variacional de Ritz, el mismo presenta determinadas características que lo hacen más útil en la solución de problemas físico matemáticos.

Para la ecuación

$$Av(P) = f \quad (11)$$

definida en un dominio Ω , donde A es cierto operador lineal positivo definido, y la función $v(P)$ satisface condiciones de contorno homogéneas, el método consiste en seleccionar una secuencia infinita de funciones coordenadas que sean continuamente diferenciables en el dominio cerrado $\bar{\Omega}$ tantas veces como el problema lo exija y que satisfagan todas las condiciones de contorno del problema. Una solución aproximada debe escribirse como combinación lineal de las funciones coordenadas, v. g.,

$$v_n(P) = \sum_{k=1}^n a_k \varphi_k(P) \quad (12)$$

donde las φ_k son las funciones coordenadas. La tarea se reduce a la determinación de los coeficientes a_k , esto se efectúa sustituyendo en (11) obteniéndose el siguiente sistema de ecuaciones lineales que permite determinar los coeficientes a_k

$$\sum_{k=1}^n a_k (A\varphi_k, \varphi_j) = (f, \varphi_j) \quad j = 1, \dots, n \quad (13)$$

La aplicación de este método al clásico problema de autovalores.

$$Av = \lambda v \quad (14)$$

conduce a la resolución del siguiente sistema de ecuaciones lineales homogéneas:

$$\sum_k [(A\varphi_k, \varphi_j) - \lambda(\varphi_k, \varphi_j)] a_k = 0 \quad (15)$$

Una garantía fundamental de la aplicabilidad del método radica en su convergencia, por lo cual haremos una breve exposición de las condiciones que la garantizan.

Supongamos que el operador A de las ecuaciones (7) puede ser expresado en la forma siguiente:

$$A = A_0 + k \quad (16)$$

donde A_0 es un operador simétrico y positivo inferiormente acotado en un espacio de Hilbert H . Supongamos que el campo de definición del operador k contiene el

campo de definición del operador A_0 e introduciremos el espacio de Hilbert H_0 donde el producto a escalar entre dos de sus elementos es:

$$[v, v] = (A_0 v, v)$$

Exijamos además que las funciones coordenadas empleadas pertenezcan al campo de definición del operador A_0 que el conjunto de funciones sea completo en H_0 .

Dadas estas condiciones se puede enunciar el siguiente teorema:

TEOREMA 1. Las soluciones aproximadas de la ecuación (11) construidas por el método de Galerkin convergen en la energía del operador A_0 a la solución exacta de la ecuación si son satisfechas las siguientes condiciones:

La solución de la ecuación es única en H_0 .

El operador $T = A_0^{-1} K$ es completamente continuo en H_0 .

Para la ecuación de autovalores el teorema que garantiza la convergencia es el siguiente teorema.

TEOREMA 2. Si el operador $T = A_0^{-1} K$ es completamente continuo en H_0 el método de Galerkin para hallar los autovalores nos lleva a un proceso convergente.

Si además la resolvente del operador T sólo tiene polos simples las autofunciones aproximadas convergen a las exactas. La condición suficiente para garantizar el carácter completamente continuo de T está contenido en el siguiente teorema.

TEOREMA 3. Si el operador K es acotado en H y A_0^{-1} es completamente continuo en H , entonces T es completamente continuo en H_0 . Además emplearemos posteriormente los teoremas auxiliares:

TEOREMA 4. Si A_0 es un operador simétrico, positivo inferiormente acotado (PIA), con espectro discreto entonces A_0^{-1} es completamente continuo.

TEOREMA 5. Sea un operador PIA tal que cualquier conjunto de funciones, todas ellas con normas energéticas acotadas, sea compacto en el sentido de convergencia en media. Entonces el operador tiene espectro discreto, es decir, se cumple que:

a. El operador tiene un conjunto infinito de autovalores

$$0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n < \dots, \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = \infty$$

b. Las autofunciones forman un conjunto completo en el sentido de convergencia en energía y en el sentido de convergencia en media.

Hacemos notar que para un operador PIA las condiciones del teorema 5 son también necesarias para que tenga espectro discreto.

Una forma de garantizar que el operador A_0^{-1} son completamente continuo es demostrar que éste cumple los requisitos del Teorema 4 y para garantizar que tenga espectro discreto están los requisitos del Teorema 5.

La ecuación (7a) constituye un problema de autovalores, ésta toma la forma siguiente:

$$-\frac{d}{dx} \left[x \frac{dv_\lambda}{dx} \right] + [x^2 - \beta x] v_\lambda = \lambda v_\lambda \quad (17)$$

donde $\lambda = -k$ y las condiciones de contorno son:

$$|v_\lambda(0)| < \infty \quad v_\lambda(\infty) = 0 \quad \|v_\lambda\| = 1$$

El operador A será en este caso

$$A = -\frac{d}{dx} \left[x \frac{d}{dx} \right] + (x^2 - \beta x) \quad (18)$$

este operador es evidentemente lineal, además es simétrico, es decir,

$$(A v, v) = (A v, v)$$

Este operador se convierte en PIA si se le añade determinado parámetro, efectivamente, definiendo el operador A' como

$$A' = A + \frac{\beta^2}{4} + \varepsilon \quad \varepsilon > 0 \quad (19)$$

A' será PIA para todo valor de A , ya que

$$(A' v, v) \geq \varepsilon \|v\|^2 \quad (20)$$

Es obvio que A' y A tienen las mismas autofunciones y sus autovalores están relacionados mediante:

$$\lambda' = \lambda + \frac{\beta^2}{4} + \varepsilon \quad (21)$$

luego podemos usar para las futuras demostraciones el operador A' en lugar del operador A .

Por otra parte la ecuación (17) constituye un problema clásico de Sturm-Liouville para el cual están demostradas, varias propiedades.⁶

Estas propiedades aseguran el conjunto de autofunciones de A' sea completo en el sentido de convergencia en media. Como estas son autofunciones de A' que es un operador PIA también constituyen un conjunto completo en el sentido de convergencia en la energía⁵ de A' .

Todo lo anterior junto con el teorema 5 de esta sección nos lleva a concluir que A' tiene espectro discreto y escogeremos a este como el operador A_0 del método de Galerkin.

Según el teorema 4 el operador $(A')^{-1}$ es completamente continuo, si además tomamos como operador K el operador identidad tendremos por el teorema 3 que el operador $T = (A')^{-1}$ es completamente continuo en H_0 . Además esta selección de K hace que la resolvente del operador T sólo tenga polos simples tal como requiere el método para la convergencia de las autofunciones. Inmediatamente el teorema 2 nos asegura que el método de Galerkin nos dará autovalores y autofunciones aproximados que convergen a los exactos.

La ecuación (7b) no constituye un problema de autovalores, ella es responsable del carácter continuo del espectro, por lo cual se plantea como solución de dicha ecuación la expresión.

$$g_k(x) = \begin{cases} g_x(x_0) + \varphi(x) & 0 \leq x \leq x_0 \\ g_x(x) & x \geq x_0 \end{cases} \quad (22)$$

preservando así el comportamiento asintótico $g_x(x)$ dado por la expresión (9) y donde el punto x_0 se toma de forma tal que para valores de $x \geq x_0$ sea válido dicho comportamiento. De esta manera la expresión (22) determina que $g_k(x)$ sea continua en todo el intervalo de definición, lo que obliga a la función $\varphi(x)$ a cumplir la condición $\varphi(x_0) = 0$

En concordancia con (22) se obtiene para $\varphi(x)$ la ecuación:

$$\frac{d}{dx} \left[x \frac{d\varphi}{dx} \right] + [k' + \beta x + x^2] \varphi = -g_x(x_0) (k' + \beta x + x^2) \quad |\varphi(0)| < \infty$$

$$\varphi(x_0) = 0 \quad (23)$$

En este caso los operadores A_0 y K se definen como

$$A_0 \varphi = - \frac{d}{dx} \left[x \frac{d\varphi}{dx} \right]$$

$$|\varphi(0)| < \infty \quad \varphi(x_0) = 0 \quad (24)$$

y

$$k \varphi = - (k' + \beta x + x^2) \varphi \quad (25)$$

De acuerdo con las definiciones de A_0 y K sus correspondientes campos de definición contienen las siguientes funciones:

- a. $D\dot{A}_0$ está definido por el conjunto de funciones doblemente diferenciables en $0 < x < x_0$ que están acotadas en $x = 0$ y se anulan en $x = x_0$
- b. D_k está definido por el conjunto de funciones continuas en $[0, x_0]$.

En el análisis de la validez del método B-G puede demostrarse que:

1. El operador A_0 definido por la relación (24) es simétrico

$$(A_0 v, v) = (A_0 v, v)$$

2. El operador A_0 es PIA, o sea

$$(A_0 v, v) \geq \gamma \|v\|^2 \quad \gamma = \frac{1}{x_0} > 0$$

3. El operador A_0 tiene espectro discreto, pues demuestra que cualquier conjunto de funciones con norma energética acotada es compacto en el sentido de la convergencia en media.

De esta manera se garantizan las condiciones del teorema 4 y se afirma que el operador A_0^{-1} es completamente continuo en H .

4. El operador K es acotado.

$$\|K \varphi\| \leq C \|\varphi\|$$

Luego, empleando el teorema 3 quedan garantizadas las condiciones del teorema 1 y queda demostrado que el método B.G. nos permite obtener soluciones analíticas aproximadas que convergen a la solución exacta.

CONCLUSIONES

Queda demostrado que la ecuación de masa efectiva para el excitón de Wannier bajo un campo eléctrico homogéneo con la restricción, $m = 0$ puede ser resuelta mediante el método funcional de Bubnov-Galerkin. Este método provee soluciones

aproximadas en forma analítica de las ecuaciones que se obtienen al separar variables en la ecuación de masa efectiva en un sistema de coordenadas parabólicas. Los parámetros de la separación de variables aparecen relacionados con los autovalores de la ecuación diferencial de espectro discreto los cuales también pueden ser calculados por este método.

Para la ecuación (17) se demuestra que el operador diferencial A' es un operador simétrico PIA, y con espectro discreto lo cual implica que el método de B-G es apropiado para hallar sus soluciones y autovalores, convergiendo las soluciones aproximadas a la exacta en la energía del operador A' .

La ecuación (7b) es necesario reducirla a una en que las soluciones sean normalizables, es decir, con espectro discreto. Esto se efectúa mediante la transformación (22) que separa la parte asintótica no normalizable de la solución y convierte la ecuación en otra cuyo rango de variación en x es finito, siendo sus elementos normalizables. Para la ecuación diferencial (23) se demuestra que el operador A_0 es simétrico PIA y de espectro discreto, en tanto el operador K es acotado, con lo que se garantiza la validez del método en este caso, convergiendo las soluciones aproximadas a la exacta en la energía del operador A_0 .

RECONOCIMIENTOS

Queremos hacer patente nuestro agradecimiento al Cand. Víctor Kashinikov por su labor de asesoría que prestó durante su estancia en la U. H. y al Cand. Obis Casaña por sus múltiples consejos y estímulo en la consecución de este trabajo.

REFERENCIAS

1. HAMAKAWA, Y., HANDLER, P. AND GERMANO, F. *Phys-Rev.*, 167, 709, 1968; 167. 703, 1968.
2. DUKE, C. B. AND ALFERIEFF, M. E. *Phys. Rev.*, 145, 583, 1966; RALPH, H. I. *J. Phys. C.* 1378, 1968; DOWN, J. D. AND REDFIELD, D. *Phys. Rev. B.*, 1, 3358, 1970, BLOSSEY, D. F. *Phys. Rev. B.*, 2, 3976, 1970.
3. ELLIOT, R. J. *Phys. Rev.*, 108, 1384, 1957.
4. LANDAU, L. D. AND LIFSHITZ, E. M. *Quantum Mechanics Non-relativistic Theory.*
5. Mikhlin. *Variational Methods in Mathematical Physics.*
6. RAMOS, M. Tesis de Maestro en Ciencias, Esc. de Física, Universidad de la Habana.
7. TRALLERO, C. Tesis de Maestro en Ciencias, Esc. de Física, Universidad de la Habana.