

Л.О. ЛОКОТЬ

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,
 відділ теоретичної фізики
 (Просп. Науки 41, Київ 03028; e-mail: llokot@gmail.com)

ХАРТРИ-ФОКІВСЬКА ЗАДАЧА ЕЛЕКТРОННО-ДІРКОВОЇ ПАРИ В КВАНТОВІЙ ЯМІ GaN

УДК 533.9

Розглянуто мікроскопічне обчислення спектра поглинання для системи GaN/Al_xGa_{1-x}N квантової ями. Тоді як структури квантової ями з параболічним законом дисперсії проявляють звичайне висвітлювання екситону без зміни спектральної області, то значне червоне зміщення екситонного резонансу знайдено для в'юрцитної квантовоямної структури. Обчислено енергію екситонного резонансу для в'юрцитної квантової ями. Одержані результати можуть пояснюватися впливом валентної зонної структури на ефекти квантового конфайнменту. Обчислено оптичний спектр підсилення в хартрі-фоківській апроксимації. Обчислено зоммерфельдівське підсилення. Обчислено червоне зміщення спектра підсилення в хартрі-фоківській апроксимації відносно хартрівського спектра підсилення.

Ключові слова: хартрі-фоківська апроксимація, екситон, в'юрцитна квантова яма, кулонівський ефект, лазери

1. Вступ

Фізичні властивості широкозонних групи-III квантовоямних систем досліджуються завдяки їхньому застосуванню в світлових емітерах і напівпровідникових лазерах в ультрафіолетовій, голубій і зеленій областях спектра. Ультрафіолетові світлові діоди і лазери набули значної уваги в дослідженнях завдяки їхньому застосуванню в компактних біологічних системах детектування, аналітичних приладах і в медичній діагностиці. Хоча число світлових діодів і лазерних діодів вже було продемонстровано [1, 2], однак ці структури все ще знаходяться на етапі розвитку, і є ще багато питань, що стосуються очікуваних характеристик і оптимальних конфігурацій приладів.

Реалізація світлодіодів на основі напівпровідників, ширина забороненої зони яких знаходиться в ультрафіолетовій області, забезпечує джерела світла для різних застосувань, наприклад, у біологічних детекторах і пристроях збереження інформації [2]. Хоча такі пристрої в основному потребують квантових ям на основі Al_xGa_{1-x}N, з високим вмістом Al, їхні фундаментальні оптичні властивості залишаються дискусійними. Було експериментально спостережено, що поверхнева емісія з [0001] – орієнтованої Al_xGa_{1-x}N дуже слабка у зв'язку з домінуючою оптичною поляризацією

вздовж [0001] с напрямку [3–5]. Пояснення цього ефекту може бути знайдено зі структури валентної зони AlN. Структура валентної зони в AlN різко відрізняється, ніж структура валентної зони в GaN. У в'юрцитному AlN чи GaN, виродження *p*-подібного стану в Γ точці знімається під дією розщеплення кристалічним полем і спин-орбітальним розщепленням приводячи до утворення трьох валентних зон у центрі зони Брілюена.

Оскільки AlN має негативну енергію розщеплення кристалічним полем, а GaN позитивну, то це розщеплення приводить до того, що структура валентної зони в AlN має впорядкування Γ_7 , Γ_9 і Γ_7 , а GaN Γ_9 , Γ_7 і Γ_7 [6]. І тому вершина валентної зони в AlN має дірки, розщеплені кристалічним полем з *p_z*-станами, а вершина валентної зони в GaN має важкі дірки з *p_x*-подібними і *p_y*-подібними станами, де вісь *z* напрямлена вздовж гексагональної осі.

Отже, емісія з квантової ями Al_xGa_{1-x}N з високим (низьким) вмістом Al поляризована вздовж (перпендикулярно) до *c* осі.

Останнім часом багато досліджень концентрується на потенціальному застосуванні наноструктур, таких як фотонні кристалічні структури, нанодірки, наноточки і нанопалички. У вивченні технології фотонної ширини забороненої зони спадає на думку, що у випадку діелектричного рядочка або наностовбчика, велика щільність відкрита

для ТМ моди, а не для ТЕ моди [7]. Отже, у використанні цього виду наноструктур для лазерного застосування одержується джерело світла для ТМ моди.

У системі квантової ями InGaN/GaN в c -площині, в активному шарі індукується деформація стиску і поляризаційні властивості світла ТЕ поляризовані [8]. Крім того, присутнє сильне внутрішнє електричне поле, викликане спонтанними і п'єзоелектричними поляризаційними зарядами на інтерфейсі c -площини InGaN/GaN квантової ями. Цей феномен приводить до внутрішнього ефекту Штарка, зменшуючи внутрішню квантову ефективність і приводить до емісійного спектра, зміщеного в червоний бік.

На сьогодні є дослідження [9–11] інтерфейсних поляризаційних зарядів, які використовують сплави для удосконалення характеристик. Багато досліджень концентруються на неполярних і напівполярних площинах [12–15]. Ці результати свідчать про поляризовану світлову емісію і послаблення внутрішнього ефекту Штарка. Однак у зв'язку з високою дороговизною для a -площини і m -площини підкладок використовують підкладки на c -площині. У роботах [16, 17] автори розглядають c -площину InGaN/AlGaIn квантовоюмної структури замість InGaN/GaN для того, щоб отримати деформацію розтягу в шарі квантової ями. У попередніх дослідженнях і в обчисленнях показано, що в нітридних матеріалах $|Z\rangle$ -подібний стан породжується, якщо шар матеріалу знаходиться під дією двовісної деформації розтягу.

Крім приладів на основі нітридів, також група II оксидів розглядається як для високоефективних лазерних діодів [18, 19], так для польових транзисторів з високими характеристиками [21, 22]. Індуковані п'єзоелектричні поля відіграють важливу роль для зонної структури і оптичного підсилення [23]. Однак орієнтація кристалічної структури значно модифікує електронну зонну структуру внаслідок деформаційних ефектів [24]. Було експериментально доведено, що вирощені вздовж кристалографічних напрямків, відмінних від [0001], приводить до зростання квантової ефективності, зменшуючи деформаційно-індуковані електричні поля в області квантової ями, можливо ведучи до шляхів отримання високоефективних білих лазерних діодів [25]. Є теоретичні роботи, які вивчають ефекти кристалічної орієнтації на п'єзоелектричні поля в zdeформованих в'юрцитних квантових ямах [24, 26]. Однак п'єзоелектричні ефекти вмі-

щують не лише деформаційно-індуковану поляризацію, вони також враховують зворотний зв'язок, вплив електричного поля і поляризації на деформацію. Ці ефекти вивчаються в роботі [26].

Глибоке розуміння впливу складної валентної зонної структури на оптичні властивості допомогло б відповісти на багато запитань. Крім того, в цих матеріалах проявляються цікаві ефекти сильної електронно-діркової кулонівської взаємодії. Багаточастинкова взаємодія приводить до ефектів, які вміщують в себе екранування, зсув за фазою, перенормування ширини забороненої зони і заповнення фазового простору [27–30].

Загальний феномен кулонівського підсилення може бути пояснений таким чином. Зумовлені кулонівським притяганням, частинки електрон та дірка мають більшу тенденцію знаходитись в околі одна одної, ніж у випадку невзаємодіючих частинок. Це зростання часу взаємодії приводить до збільшення ймовірності оптичних переходів [28].

Статтю побудовано таким чином. У розділі 2 представлено мікроскопічну багаточастинкову теорію на основі напівпровідникових блохівських рівнянь тобто рівнянь Гейзенберга для оптичної поляризації і заселеності носіїв. У розділі 3 розглянуто квантову яму, яка перпендикулярна до напрямку вирощення [0001]. Ми досліджуємо інтеграл перекриття електронної і діркової хвильових функцій, обчислюємо енергію формування екситону в квантовій ямі, обчислюємо хартрівський та хартрі-фоківський спектри підсилення, та обчислюємо спектр екситонного поглинання у в'юрцитній квантовій ямі і порівнюємо його зі спектром поглинання в квантовій ямі з параболічними зонами. Ми обчислюємо хартрівське та хартрі-фоківське перенормування енергетичного спектра. Обчислено червоне перенормування спектра підсилення, викликане електронно-електронною та дірково-дірковою кулонівською взаємодією. Обчислено значне зоммерфельдівське підсилення спектра. Це підсилення електричного дипольного моменту викликане електронно-дірковою кулонівською взаємодією притягання.

2. Теорія

Точки нульового нахилу \mathbf{k}_0 тобто точки, в яких тотожно згідно з умовами симетрії занулюються компоненти швидкості $\frac{\partial E}{\partial k_\alpha}$, із врахуванням інваріантності відносно інверсії ча-

су, визначається згідно з формулою $N = \frac{1}{h^t} \sum_{g \in G} \frac{1}{2} [\chi_v^2(g) + \chi_\psi(g^2)] \frac{1}{2} [\chi_\psi^2(g) + \chi_\psi(g^2)]$. Для цього випадку занулюються всі компоненти імпульсу, тобто $\frac{\partial E}{\partial k_\alpha} = 0$ для всіх напрямків \mathbf{k} [31].

Ми розглядаємо квантову яму, яка перпендикулярна до напрямку вирощення [0001]. Вісь z напрямлена вздовж гексагональної c осі. Тоді поздовжній хвильовий вектор k_z замінюємо оператором $k_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z}$. Із рівняння Шредінгера одержуємо енергетичний спектр $E_n(k_t)$ для дірок та електронів, де $k_t = (k_x, k_y)$ – поперечний хвильовий вектор. Необхідною умовою екстремуму зони в околі фундаментальної щілини є рівність нулю похідної енергії за k_t . Відомо з фізики напівпровідників, що спектр поглинання в околі фундаментальної щілини, із врахуванням зв'язаної електронно-діркової пари приводить до екситонного спектра. Екситони математично впливають з рівняння Шредінгера для атома водню, яке відоме як рівняння Ваньє [32].

Повна ортонормована система функцій, яка залежить від трьох квантових чисел для дірок: α , що визначає номер підзони, \mathbf{p} – квазіімпульс і m – кількість доданків у розкладі хвильової функції за повною ортонормованою системою функцій на відрізку $[-w/2 \dots w/2]$, який визначає ширину w квантової ями, наведено в роботах [33,34]. Для електронів число, яке визначає номер доданка в розкладі дорівнює числу, що визначає номер підзони. У статті розглядається одна найнижча підзона провідності і одна найвища валентна підзона. В електронно-дірковому представленні вводимо оператори $\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}}^+, \hat{b}_{-\mathbf{p}}, \hat{b}_{-\mathbf{p}}^+$ – оператори знищення і народження електрона і дірки, де $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ – поперечний у площині квантової ями квазіімпульс носіїв. І немає необхідності у квантовому числі, який визначає номер підзони. Отже для важкої дірки:

$$\Psi = \sum_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

де

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{A}} |\mathbf{p}\rangle, \quad (2)$$

де A – площа квантової ями в (x, y) площині;

$$|\mathbf{p}\rangle = \left\| \begin{array}{l} \phi_{\alpha}^{(1)}(z, \mathbf{p}) \\ \phi_{\alpha}^{(2)}(z, \mathbf{p}) \\ \phi_{\alpha}^{(3)}(z, \mathbf{p}) \end{array} \right\|, \quad (3)$$

$$\phi_{\alpha}^{(j)} = \sum_{i=1}^n V_{\mathbf{p}}^{(j)} [i, \alpha] \chi_i(z), \quad (4)$$

$$\chi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{w}} \sin \left(\pi n \left(\frac{z}{w} + \frac{1}{2} \right) \right), \quad (5)$$

де n – натуральне число, α – “важка дірка”.

А для електрона

$$\Psi = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

де

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{A}} \chi_1(z). \quad (7)$$

Для спрощення аналізу розглядаємо невідроджену ситуацію, що описується гамільтоніаном $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} + \hat{H}_{\text{int}}$, який складається в електронно-дірковому представленні з кінетичної енергії електронів $\epsilon_{e, \mathbf{p}}^{\nu_e}$, кінетичної енергії дірок $\epsilon_{h, \mathbf{p}}^{\nu_h}$:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{e, \mathbf{p}}^{\nu_e} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \epsilon_{h, \mathbf{p}}^{\nu_h} \hat{b}_{-\mathbf{p}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{p}}. \quad (8)$$

Гамільтоніан кулонівської взаємодії для частинок в електронно-дірковому представленні запишеться у вигляді:

$$\begin{aligned} \hat{V} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}} V_q^{\nu_e \nu_e \nu_e \nu_e} \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}} + \\ & + V_q^{\nu_h \nu_h \nu_h \nu_h} \hat{b}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{p}} - \\ & - 2 V_q^{\nu_e \nu_h \nu_h \nu_e} \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}}, \end{aligned} \quad (9)$$

де

$$\begin{aligned} V_q^{\nu_e \nu_e \nu_e \nu_e} = & \frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{A} \int_{-w/2}^{+w/2} dz \int_{-w/2}^{+w/2} dz' \chi_{\nu_e}(z) \chi_{\nu_e}(z') \frac{2\pi}{q} \times \\ & \times e^{-q|z-z'|} \chi_{\nu_e}(z') \chi_{\nu_e}(z), \end{aligned} \quad (10)$$

кулонівський потенціал квантової ями, ϵ – діелектрична проникливість основного матеріалу квантової ями. В той час як $V_q = V_q^{\nu_e \nu_e \nu_e \nu_e} = V_q^{\nu_e \nu_e \nu_e \nu_e} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon V q^2}$ – тривимірне перетворення Фур'є кулонівської потенціальної енергії, V – об'єм матеріалу. Взаємодія диполя з електромагнітним полем описується гамільтоніаном

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{1}{A} \sum_{\nu_e, \nu_h, \mathbf{p}} ((\mu_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h})^* \hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} E^* e^{i\omega t} +$$

$$+(\mu_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h})(\hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h})^+ E e^{-i\omega t}, \quad (11)$$

де $\hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} = \langle \hat{b}_{-\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle$ – мікроскопічний диполь, зумовлений електронно-дірковою парою з електронним (дірковим) імпульсом \mathbf{p} ($-\mathbf{p}$) і номером підзони ν_e (ν_h), $\mu_{\mathbf{k}}^{\nu_e\nu_h} = \int d^3r U_{j'\sigma'\mathbf{k}} \mathbf{e} \hat{\mathbf{p}} U_{j\sigma\mathbf{k}}$, – матричні елементи електричного дипольного моменту, які залежать від хвильового вектора \mathbf{k} і номера підзони, між якими відбуваються прямі міжзонні переходи, \mathbf{e} – одиничний вектор векторного потенціалу електромагнітної хвилі, $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор імпульсу. Підзони описуються хвильовими функціями $U_{j'\sigma'\mathbf{k}}$, $U_{j\sigma\mathbf{k}}$, де j' – номер підзони з зони провідності, σ' – спін електрона, j – номер підзони з валентної зони, σ – спін дірки. Ми розглядаємо одну найнижчу підзону провідності $j' = 1$ і одну найвищу валентну підзону $j = 1$. E і ω – амплітуда і частота електричного поля світлової хвилі.

Вводимо наближення, яке спростить обчислення у розв'язанні задачі про електронно-дірковий газ, а саме розглядаємо задачу у випадку високих густин електронно-діркового газу (випадок $r_s < 1$). Оцінюючи відношення кулонівської потенціальної енергії до фермієвської енергії, отримуємо

$$r_s = \frac{E_C}{E_F} = \frac{2me^2}{\epsilon \hbar^2 \sqrt{n\pi}} = 0,73, \quad (12)$$

для концентрації електронно-діркового газу $n = = 10^{13} \text{ см}^{-2}$, діелектричної проникливості матеріалу $\epsilon = 9,38$, поперечної ефективної маси електрона при Γ точці $m = 0,18$ (обернена друга похідна енергії від поперечного хвильового вектора). Це означає, що енергія Фермі домінує у порівнянні з кулонівською потенціальною енергією при $r_s \rightarrow 0$. Тобто, при зростанні густини вона зростає швидше, ніж кулонівська енергія, і при $r_s \rightarrow 0$ будуть домінувати члени, які відповідають циклічним діаграмам.

Рівняння Гейзенберга для електронної $\hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e} = \langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle$ або діркової $\hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_h} = \langle \hat{b}_{-\mathbf{p}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{p}} \rangle$ заселеності запишеться у вигляді

$$\frac{\partial \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e}]. \quad (13)$$

Підставляючи (8), (9), (11) в (13), отримуємо

$$\hbar \frac{\partial \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e}}{\partial t} = -2\text{Im}[\mu_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} E(t) (\hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h})^*] + i \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} V(q) \times$$

$$\times (\langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle - \langle \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle +$$

$$+ \langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \rangle - \langle \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle). \quad (14)$$

Факторизуючи згортки операторів за теоремою Віка одержуємо рівняння Гейзенберга для електронної заселеності в хартрі-фоковській апроксимації:

$$\hbar \frac{\partial \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e}}{\partial t} = -2\text{Im}[\mu_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} E(t) + \sum_{\mathbf{q}} V(q) \hat{p}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e\nu_h} (\hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h})^*]. \quad (15)$$

Попарні згортки походять від ψ операторів, взятих у різних точках, тому це наближення називають хартрі-фоковським.

У другому порядку за кулонівською потенціальною енергією:

$$\begin{aligned} \hbar \frac{\partial \hat{n}_{\mathbf{p},\text{scat}}^{\nu_e}}{\partial t} = & - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} 2\pi V^2(q) \times \\ & \times D(\epsilon_e(\mathbf{p}) + \epsilon_e(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon_e(\mathbf{k}) - \epsilon_e(\mathbf{p} + \mathbf{q})) \times \\ & \times [\hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e} \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_e} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_e}) (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e}) - \\ & - (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e}) (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_e}) \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_e} \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e}] - \\ & - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} 2\pi V^2(q) D(\epsilon_e(\mathbf{p}) + \epsilon_h(\mathbf{k}) - \epsilon_e(\mathbf{p} + \mathbf{q}) - \epsilon_h(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \times \\ & \times [\hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e} \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_h} (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e}) (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_h}) - \\ & - (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e}) (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_h}) \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e} \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_h}], \end{aligned} \quad (16)$$

де $D(\Delta) = \delta(\Delta) - i\pi^{-1}P(\Delta)$, і P означає головне значення.

Ми припустили, що

$$\frac{\partial \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_h}}{\partial t} = 0. \quad (17)$$

Знайдемо середнє за матрицею густини, деяким статистичним оператором $\rho = \frac{e^{-\beta H_0}}{\text{Sp}(e^{-\beta H_0})}$ значення від згортки двох операторів: $\langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_p(\tau) \rangle$. З рівняння Гейзенберга можна знайти:

$$\langle \hat{a}_p \hat{a}_k^+ \rangle = e^{\beta \epsilon_p^{\nu_e}} \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_p \rangle. \quad (18)$$

Оскільки для ферміонів $\hat{a}_p \hat{a}_k^+ = \delta_{pk} - \hat{a}_k^+ \hat{a}_p$, з рівняння (18) одержимо вираз для електронної заселеності через фермі-функцію розподілу:

$$\langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_p \rangle = \frac{\delta_{pk}}{1 + e^{\beta \epsilon_p^{\nu_e}}}, \quad (19)$$

$$\text{де } \epsilon_p^{\nu_e} = \epsilon_p^{\nu_e} - E_F.$$

Для обчислення суми в енергії основного стану електронного газу в усіх порядках теорії збурень в статті [35] вводиться як пропагатор функція, фур'є-трансформанта якої дорівнює:

$$Q_q(u) = \int d^3p \int_{-\infty}^{\infty} e^{ituq} e^{-|t|[\frac{1}{2}q^2 + \mathbf{q}\mathbf{p}]} dt. \quad (20)$$

У роботах [35–38] знайдено пряму відповідність між діаграмами даного порядку і інтегралами, фур'є-перетворення яких дорівнює:

$$A_n = \frac{q}{2\pi n} \int_{-\infty}^{\infty} du [Q_q(u)]^n. \quad (21)$$

Автори [35–38] показали, що повний внесок всіх циклічних діаграм в n -му порядку теорії збурень виражається через фур'є-трансформанту таким чином:

$$\begin{aligned} \epsilon' &\equiv \epsilon^{(2)} + \epsilon^{(3)} + \epsilon^{(4)} + \dots = \\ &= -\frac{3}{8\pi^5} \int \frac{d^3q}{q^3} \frac{1}{2\pi} \sum_{n=2}^{\infty} \langle [[\hat{F}, \hat{V}], \dots, \hat{V}] \rangle_{n-1} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{(-1)^n}{n} [Q_q(u)]^n \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^{n-2} = \\ &= -\frac{3}{8\pi^5} \int \frac{d^3q}{q^3} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du \times \\ &\times \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} [\hat{f}]^{n-1} [Q_q(u)]^n \left(\frac{\alpha r_s}{\pi^2 q^2} \right)^{n-2}, \quad (22) \end{aligned}$$

де \hat{F} вибираємо з суми чотирьох операторів з рівняння (14), які містять чотири добутки операторів народження і знищення частинок, наприклад: $\hat{F} = \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}$, тоді застосовуючи операторну алгебру і формалізм матриці густини, отримуємо

$$\hat{f} = \hat{n}_{\mathbf{p}} \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}). \quad (23)$$

В цьому розділі ми отримуємо рівняння руху для середнього значення добутку $\hat{b}_{-\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}$, мікроскопічного диполя, який задає поляризацію середовища, яка стає макроскопічною завдяки прикладеному зовнішньому полю.

Середнє значення деякої фізичної величини F , якій відповідає оператор \hat{F} можна виразити через слід матриці, деякий статистичний оператор,

для якого задовольняється рівняння Гейзенберга, до якого застосовується ітераційна процедура:

$$\begin{aligned} \langle \hat{F} \rangle &= \text{Sp}(\hat{w}_0 \hat{F}) + \\ &+ \frac{2\pi}{i} D(-\epsilon_{p_1+q} - \epsilon_{p_2-q} + \epsilon_{p_1} + \epsilon_{p_2}) \text{Sp}([\hat{F}, \hat{V}_0] \hat{w}_0), \quad (24) \end{aligned}$$

де $\hat{w}_0 = \frac{e^{-\hat{H}_0/kT}}{\text{Sp}(e^{-\hat{H}_0/kT})}$, тобто припускається, що матриця густини \hat{w}_0 описується канонічним розподілом Гіббса; у представленні взаємодії часу залежність як хвильової функції, так і будь-якого оператора можна виразити через гамільтоніан системи незалежних частинок: $\hat{V}_0 = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$.

Рівняння Гейзенберга для описаної системи електронно-діркового газу набуде вигляду

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h}}{dt} &= -i\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} \hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} - i\Omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} (-1 + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e} + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_h}) + \\ &+ \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} V_q^{\nu_e \nu_e \nu_e \nu_e} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle + \right. \\ &+ V_q^{\nu_h \nu_h \nu_h \nu_h} \langle \hat{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle - \\ &- \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} V_q^{\nu_e \nu_h \nu_h \nu_e} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle + \\ &\left. + \langle \hat{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{-\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} \rangle - \langle \hat{b}_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \rangle \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} \right), \quad (25) \end{aligned}$$

де $\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} = \frac{1}{\hbar} (\epsilon_{g0} + \epsilon_{e, \mathbf{p}}^{\nu_e} + \epsilon_{h, \mathbf{p}}^{\nu_h})$ – частота переходу, $\Omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} = \frac{1}{\hbar} \mu_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} E e^{-i\omega t}$ – частота Рабі. Використовуючи операторну алгебру, формалізм матриці густини і формулу (24), можна отримати:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h}}{dt} &= -i\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} \hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} - i\Omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} (-1 + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e} + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_h}) - \\ &- \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} V_q^{\nu_e \nu_h \nu_h \nu_e} \hat{p}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e \nu_h} (-1 + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e} + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_h}) - \\ &- \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} W_q^{\nu_e \nu_h \nu_h \nu_e} \hat{p}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e \nu_h} (\Xi_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}^{\nu_e} + \Xi_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}^{\nu_h}) + \\ &+ \frac{1}{\hbar} \sum_{\substack{\alpha = e, h \\ \beta = e, h \\ \alpha \neq \beta}} \sum_{\nu_{\alpha}, \nu_{\beta}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} W_q^{\nu_{\alpha} \nu_{\beta} \nu_{\beta} \nu_{\alpha}} W_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}|}^{\nu_{\alpha} \nu_{\beta} \nu_{\beta} \nu_{\alpha}} \times \\ &\times D(\epsilon_{\mathbf{p}}^{\nu_{\beta}} + \epsilon_{\mathbf{k}}^{\nu_{\alpha}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_{\beta}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_{\alpha}}) \times \\ &\times (\hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_{\beta}} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_{\beta}}) \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_{\alpha}} + (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_{\beta}}) \hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_{\beta}} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_{\alpha}})) \hat{p}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e \nu_h}. \quad (26) \end{aligned}$$

Рівняння (26) описує осциляції поляризації на частоті оптичних переходів, а також процеси стимільованої емісії або поглинання. У ролі функцій заселеності вибираємо фермі-функції розподілу. Частота переходу $\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h}$ визначається за таким виразом:

$$\begin{aligned} \omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} &= \frac{1}{\hbar} (\epsilon_{g0} + \epsilon_{e,\mathbf{p}}^{\nu_e} + \epsilon_{h,\mathbf{p}}^{\nu_h} + \\ &+ \sum_{\alpha=e,h} \sum_{\nu_\alpha} \sum_{\mathbf{q}} (V_q^{\nu_\alpha \nu_\alpha \nu_\alpha \nu_\alpha} (-\hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_\alpha}) + \\ &+ W_q^{\nu_\alpha \nu_\alpha \nu_\alpha \nu_\alpha} (-\hat{\Xi}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{q}}^{\nu_\alpha})) - \\ &- i \sum_{\substack{\alpha=e,h \\ \beta=e,h \\ \alpha \neq \beta}} \sum_{\nu_\alpha, \nu_\beta} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (W_q^{\nu_\alpha \nu_\beta \nu_\beta \nu_\alpha})^2 \times \\ &\times D(-\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_\alpha} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_\beta} + \epsilon_{\mathbf{k}}^{\nu_\beta} + \epsilon_{\mathbf{p}}^{\nu_\alpha}) \times \\ &\times (\hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_\beta} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_\beta}) \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_\alpha} + (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_\beta}) \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_\beta} (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_\alpha})). \end{aligned} \quad (27)$$

Функції $\hat{\Xi}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{q}}^{\nu_e}$ і $\hat{\Xi}_{\mathbf{p},\mathbf{q}}^{\nu_e}$ визначені далі

$$\begin{aligned} \hat{\Xi}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{q}}^{\nu_e} &= i \sum_{\mathbf{k}} [W_q^{\nu_e \nu_e \nu_e \nu_e} - W_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}|}^{\nu_e \nu_e \nu_e \nu_e}] \times \\ &\times D(-\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_e} + \epsilon_{\mathbf{k}}^{\nu_e} + \epsilon_{\mathbf{p}}^{\nu_e}) \times \\ &\times (\hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_e} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_e}) \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e} + (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_e}) \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_e} (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e})), \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \hat{\Xi}_{\mathbf{p},\mathbf{q}}^{\nu_e} &= i \sum_{\mathbf{k}} [W_q^{\nu_e \nu_e \nu_e \nu_e} - W_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{p}|}^{\nu_e \nu_e \nu_e \nu_e}] \times \\ &\times D(-\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_e} + \epsilon_{\mathbf{k}}^{\nu_e} + \epsilon_{\mathbf{p}}^{\nu_e}) \times \\ &\times ((1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_e}) \hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_e} (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e}) + \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_e} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_e}) \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e}). \end{aligned} \quad (29)$$

Ми замінюємо кулонівську потенціальну енергію екранованою кулонівською потенціальною енергією:

$$V_q (1 - VM + (VM)^2 - (VM)^3 + \dots), \quad (30)$$

де

$$M = \sum_{\mathbf{k}} \frac{n(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (31)$$

Коефіцієнт перед сумою в другому члені ряду (30) дорівнює

$$N \frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{4\pi e^2}{\Omega} \right)^2 \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_F^3} 2 =$$

$$= N \frac{m e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{4\pi}{\Omega} \right)^2 \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{\Omega}{3\pi^2 N} 2 = \frac{m e^4}{2\hbar^2} \frac{4}{3\pi^3}, \quad (32)$$

у третьому члені ряду:

$$\begin{aligned} \frac{m^2}{2\hbar^4} \left(\frac{4\pi e^2}{\Omega} \right)^3 \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \right)^2 \frac{1}{k_F^3} \frac{1}{k_F} 2 &= \frac{m e^4}{2\hbar^2} \frac{4}{3\pi^3} \frac{\alpha r_s}{2\pi^2}. \\ \alpha r_s &= \frac{m e^2}{\hbar^2} \frac{1}{k_F}. \end{aligned} \quad (33)$$

Тоді ряд можна переписати у вигляді безмежно спадної геометричної прогресії:

$$\begin{aligned} \frac{1}{q^2} - \frac{4}{3\pi^3} \int d^3 k \frac{1}{q^4} \frac{n(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n(\epsilon_{\mathbf{k}})}{(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2 - k^2} + \\ + \frac{4}{3\pi^3} \frac{\alpha r_s}{2\pi^2} \int \int d^3 k_1 d^3 k_2 \frac{1}{q^6} \frac{n(\epsilon_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}) - n(\epsilon_{\mathbf{k}_1})}{(\mathbf{k}_1+\mathbf{q})^2 - k_1^2} \times \\ \times \frac{n(\epsilon_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}) - n(\epsilon_{\mathbf{k}_2})}{(\mathbf{k}_2+\mathbf{q})^2 - k_2^2} - \dots \end{aligned} \quad (34)$$

Підсумовуючи всі члени ряду, отримуємо

$$W_q^{\nu_\alpha \nu_\beta \nu_\beta \nu_\alpha} = \frac{V_q^{\nu_\alpha \nu_\beta \nu_\beta \nu_\alpha}}{\epsilon_q(N)}. \quad (35)$$

Тобто, для діелектричної функції отримуємо статичну формулу Ліндхарда:

$$\epsilon_q(N) = 1 - \sum_{\rho=e,h} \sum_{\nu_\rho} \sum_{\mathbf{p}} V_q^{\nu_\rho \nu_\rho \nu_\rho \nu_\rho} \frac{\hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_\rho} - \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_\rho}}{\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_\rho} - \epsilon_{\mathbf{p}}^{\nu_\rho}}. \quad (36)$$

Оскільки циклічні діаграми є основним типом діаграм у процесах розсіяння при високих густинах електронно-діркового газу, то діаграмний метод еквівалентний методу самоузгодженого поля, також як і наближення хаотичних фаз.

Відповіддю як отримується інтегро-диференціальне рівняння (26) для мікроскопічного диполя є така схема. Суму за імпульсами в мікроскопічному поляризаційному рівнянні можна отримати, якщо

$$\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} : V_q^{\nu_\alpha \nu_\alpha \nu_\alpha \nu_\alpha} \rightarrow W_q^{\nu_\alpha \nu_\alpha \nu_\alpha \nu_\alpha}, n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_\alpha} \rightarrow \Xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{q}}^{\nu_\alpha}, \quad (37)$$

плюс вираз, графічне представлення якого нагадує подвійну бульбашку,

$$\sum_{\mathbf{p}} \frac{d\hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h}}{dt} : V_q^{\nu_e \nu_h \nu_h \nu_e} \rightarrow W_q^{\nu_e \nu_h \nu_h \nu_e}, n_{\mathbf{p}}^{\nu_\alpha} \rightarrow \Xi_{\mathbf{p},\mathbf{q}}^{\nu_\alpha}, \quad (38)$$

плюс вираз, графічне представлення якого нагадує устрицю. Суму за імпульсами в поляризаційному рівнянні, яке враховує частинково-частинкові кореляції вищих порядків, ніж хартрі-фоківські, можна отримати, якщо до власної енергії у рівнянні додати такий самий доданок, який стоїть у рівнянні в хартрі-фоківському наближенні, замінюючи в ньому кулонівську потенціальну енергію – екранованою кулонівською потенціальною енергією, фермі-функції розподілу – $\Xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{q}}^{\nu\alpha}$ функціями, плюс вираз, графічне представлення якого нагадує подвійну бульбашку. А в саме інтегро-диференціальне рівняння додається такий же доданок, який стоїть у рівнянні в хартрі-фоківському наближенні, замінюючи в ньому кулонівську потенціальну енергію – екранованою кулонівською потенціальною енергією, фермі-функції розподілу – $\Xi_{\mathbf{p},\mathbf{q}}^{\nu\alpha}$ функціями, і додається вираз, який графічно можна зобразити діаграмою, що нагадує устрицю. Ми розглядаємо зв'язані замкнуті діаграми. А сума всіх нез'язаних діаграм, які містять k замкнутих петель, які мають відповідно m_1, m_2, \dots, m_k вершин, є сума всіх зв'язаних діаграм порядку m .

Поляризаційне рівняння записане в інших позначеннях, отримане в статті [29], розділяється на діагональні і недиагональні доданки відносно $p_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h}$:

$$\begin{aligned} \frac{dp_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h}}{dt} = & -i\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} \hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} - i\Omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} (-1 + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e} + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_h}) + \\ & + (\Gamma_{\mathbf{p}}^{\nu_e} + \Gamma_{\mathbf{p}}^{\nu_h}) \hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} + \sum_{\mathbf{q}} (\Gamma_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^{\nu_e} + \Gamma_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^{\nu_h}) \hat{p}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e\nu_h}. \end{aligned} \quad (39)$$

Частота переходу $\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h}$ і частота Рабі визначаються таким чином:

$$\begin{aligned} \omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} = & \frac{1}{\hbar} (\epsilon_{g0} + \epsilon_{e,\mathbf{p}}^{\nu_e} + \epsilon_{h,\mathbf{p}}^{\nu_h} - \\ & - \sum_{\alpha=e,h} \sum_{\mathbf{q}} V_q^{\nu\alpha\nu\alpha\nu\alpha\nu\alpha} n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu\alpha}), \end{aligned} \quad (40)$$

$$\Omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} = \frac{1}{\hbar} (\mu_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} E e^{-i\omega t} + \sum_{\mathbf{q}} V_q^{\nu_e\nu_h\nu_h\nu_e}) \hat{p}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e\nu_h}. \quad (41)$$

Частинково-частинкові кореляції, які приводять до екранування і зсуву за фазою описуються виразами, які містять діагональні ($p_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h}$ члени) і недиагональні ($p_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e\nu_h}$ члени) внески. Для діагонального внеску отримуємо вираз, який визначатиме півширину екситонного резонансу:

$$\Gamma_{\mathbf{p}}^{\nu\alpha} = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\beta=e,h} \sum_{\nu_\beta} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} (|W_q^{\nu\alpha\nu\beta\nu\beta\nu\alpha}|^2 -$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \delta_{\nu_\alpha\nu_\beta} W_q^{\nu\alpha\nu\beta\nu\beta\nu\alpha} W_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}|}^{\nu\alpha\nu\beta\nu\beta\nu\alpha}) \times \\ & \times D(-\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu\alpha} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu\beta} + \epsilon_{\mathbf{k}}^{\nu\beta} + \epsilon_{\mathbf{p}}^{\nu\alpha}) \times \\ & \times (\hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu\beta} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu\beta}) \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu\alpha} + (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu\beta}) \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu\beta} (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu\alpha})). \end{aligned} \quad (42)$$

Є також недиагональні внески, які зв'язують поляризації різних хвильових векторів і визначаються з виразу

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{q}\mathbf{p}}^{\nu\alpha} = & -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\substack{\beta=e,h \\ \beta' \neq \alpha}} \sum_{\nu_\beta, \nu_{\beta'}} \sum_{\mathbf{k}} (|W_q^{\nu\alpha\nu\beta\nu\beta\nu\alpha}|^2 - \\ & - W_q^{\nu\alpha\nu\beta\nu\beta\nu\alpha} W_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}|}^{\nu\alpha\nu\beta'\nu\beta'\nu\alpha} + \\ & + \frac{1}{2} \delta_{\nu_\alpha\nu_{\beta'}} W_q^{\nu\alpha\nu\beta\nu\beta\nu\alpha} W_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{p}|}^{\nu\alpha\nu\beta'\nu\beta'\nu\alpha}) \times \\ & \times D(-\epsilon_{\mathbf{k}}^{\nu\alpha} - \epsilon_{\mathbf{p}}^{\nu_{\beta'}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_{\beta'}} + \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu\alpha}) \times \\ & \times (\hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_{\beta'}} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_{\beta'}}) \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu\alpha} + (1 - \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_{\beta'}}) \hat{n}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_{\beta'}} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu\alpha})). \end{aligned} \quad (43)$$

Розв'язуємо систему диференціальних рівнянь і отримуємо систему алгебраїчних рівнянь, тобто інтегральне рівняння:

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} = & \frac{i}{\hbar} \frac{(\hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e} + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_h} - 1)}{i(\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} - \omega) + \Gamma_{\mathbf{p}}^{\nu_e} + \Gamma_{\mathbf{p}}^{\nu_h}} (\mu_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} - \\ & - \sum_{\mathbf{q}} V_{\left\{ \begin{array}{l} |-\mathbf{p}| \\ |-\mathbf{p}-\mathbf{q}| \end{array} \right\}}^{\nu_e\nu_h\nu_h\nu_e} \chi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e\nu_h}), \end{aligned} \quad (44)$$

в якій $\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h}$ – власна енергія, тобто перенормована ширина забороненої зони. А одержана енергія перенормування – це обмінна енергія. Сумарне $\Gamma_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h}$ – визначає півширину спектра підсилення. Поляризацію виражено через функцію $\chi_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h}$ таким чином:

$$p_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} = \chi_{\mathbf{p}}^{\nu_e\nu_h} E e^{-i\omega t}. \quad (45)$$

Півширина спектра підсилення обчислена за допомогою формул

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{k}}^{\nu\alpha} = & \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{\beta=e,h} \sum_{\nu_\beta} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \times \\ & \times \int q dq \frac{1}{\partial(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\beta} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu\alpha}) / \partial|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} \times \\ & \times Q \left(\int dz \int dz' \chi_{\nu_\alpha}(z) \chi_{\nu_\beta}(z') \times \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times e^{-q|z-z'|} \chi_{\nu_\beta}(z') \chi_{\nu_\alpha}(z) \frac{2\pi}{q} \Big)^2 \times \\
& \times (\hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_\alpha} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_\beta}) \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_\beta} + (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_\alpha}) \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_\beta} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_\beta})), \quad (46) \\
\Gamma_{\mathbf{k}}^{\nu_\alpha} &= \frac{1}{2\pi \hbar} \sum_{\beta=e,h} \sum_{\nu_\beta} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \times \\
& \times \int q dq \frac{1}{\frac{\partial(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_\alpha})}{\partial|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}} Q \left(\left(\int dz \int dz' \chi_{\nu_\alpha}(z) \chi_{\nu_\beta}(z') \times \right. \right. \\
& \times e^{-q|z-z'|} \chi_{\nu_\beta}(z') \chi_{\nu_\alpha}(z) \frac{2\pi}{q} \Big)^2 - \\
& - \frac{1}{2} \delta_{\nu_\alpha \nu_\beta} \left(\int dz \int dz' \chi_{\nu_\alpha}(z) \chi_{\nu_\beta}(z') \times \right. \\
& \times e^{-q|z-z'|} \chi_{\nu_\beta}(z') \chi_{\nu_\alpha}(z) \frac{2\pi}{q} \times \\
& \times \int dz \int dz' \chi_{\nu_\alpha}(z) \chi_{\nu_\beta}(z') e^{-k\sqrt{2-2\cos(\alpha)}|z-z'|} \times \\
& \times \chi_{\nu_\beta}(z') \chi_{\nu_\alpha}(z) \frac{2\pi}{k\sqrt{2-2\cos(\alpha)}} \Big) \Big) \times \\
& \times (\hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_\alpha} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_\beta}) \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_\beta} + \\
& + (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_\alpha}) \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu_\beta} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}}^{\nu_\beta})) \delta_{\nu_\alpha \nu_\beta}, \quad (47)
\end{aligned}$$

де $Q = |\mathbf{k} + \mathbf{q}|$, φ – кут між векторами \mathbf{k} і \mathbf{q} . В обчисленнях розширення, зумовленого частинково-частинковими кореляціями, можна побачити, що у графічному представленні його виразів у вигляді діаграм – два вирази, діаграми графічного представлення яких нагадують устрицю і чотири вирази, діаграми графічного представлення яких у вигляді подвійної бульбашки.

Поляризаційне рівняння для в'юрцитної квантової ями в хартрі-фоківській апроксимації із врахуванням хвильових функцій для електронів і дірок записаних у вигляді [33, 34], коли коефіцієнти розкладу хвильової функції за повною ортонормованою системою функцій для дірки залежать від хвильового вектора, в базисі хвильових функцій з орбітальним кутовим моментом $l = 1$ і власним значенням m_l , його z -ї компоненти, відомих як сферичні гармоніки, можна шукати таким чином:

$$\frac{d\hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h}}{dt} = -i\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} \hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} - i\Omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} (-1 + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_e} + \hat{n}_{\mathbf{p}}^{\nu_h}). \quad (48)$$

Частота переходу $\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h}$ і частота Рабі описуються виразами із врахуванням хвильової функції [33, 34] у вигляді

$$\omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} = \frac{1}{\hbar} (\epsilon_{g0} + \epsilon_{e,\mathbf{p}}^{\nu_e} + \epsilon_{h,\mathbf{p}}^{\nu_h} - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\nu_e \nu_e \nu_e \nu_e} n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e} - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\nu_h \nu_h \nu_h \nu_h} \left\{ \begin{array}{cc} |-\mathbf{p}+\mathbf{q}| & |-\mathbf{p}| \\ |-\mathbf{p}+\mathbf{q}| & |-\mathbf{p}| \end{array} \right\} n_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_h}), \quad (49)$$

$$\Omega_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} = \frac{1}{\hbar} (\mu_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} E e^{-i\omega t} + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\nu_e \nu_h \nu_h \nu_e} \left\{ \begin{array}{cc} |-\mathbf{p}| & |-\mathbf{p}| \\ |-\mathbf{p}-\mathbf{q}| & |-\mathbf{p}-\mathbf{q}| \end{array} \right\}) \hat{p}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_e \nu_h}, \quad (50)$$

де

$$\begin{aligned}
V_{\left\{ \begin{array}{cc} |-\mathbf{p}| & |-\mathbf{p}| \\ |-\mathbf{p}-\mathbf{q}| & |-\mathbf{p}-\mathbf{q}| \end{array} \right\}}^{\nu_e \nu_h \nu_h \nu_e} &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \sum_{\alpha} g_{\alpha} \int dq \times \\
& \times \int dz \xi \int dz \xi' \chi_{n_1}(z\xi) \chi_{m_1}(z\xi') \chi_{m_2}(z\xi) \chi_{n_2}(z\xi) \times \\
& \times e^{-q|z\xi - z\xi'|} C_p^j[n_1, 1] V_p^j[m_1, 1] C_{Q_1}^i[n_2, 1] V_{Q_1}^i[m_2, 1], \\
n_1 = m_1 = n_2 = m_2 &= 1, \\
\mathbf{Q}_1 &= \mathbf{q} + \mathbf{p}, \quad (51)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha, \mathbf{q}} g_{\alpha} V_{\left\{ \begin{array}{cc} |-\mathbf{p}+\mathbf{q}| & |-\mathbf{p}| \\ |-\mathbf{p}+\mathbf{q}| & |-\mathbf{p}| \end{array} \right\}}^{\nu_h \nu_h \nu_h \nu_h} n_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\nu_h} &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \sum_{\alpha} g_{\alpha} \times \\
& \times \int dq \int dz \xi \int dz \xi' \chi_{n_1}(z\xi) \chi_{m_1}(z\xi') \chi_{m_2}(z\xi) \chi_{n_2}(z\xi) \times \\
& \times e^{-q|z\xi - z\xi'|} V_{Q_2}^j[n_1, 1] V_p^i[m_1, 1] \times \\
& \times V_{Q_2}^i[n_2, 1] V_p^j[m_2, 1] n_{\alpha, Q_2},
\end{aligned} \quad (52)$$

$$\mathbf{Q}_2 = \mathbf{q} - \mathbf{p}, \quad (52)$$

де $\chi_{n_1}(z\xi)$ – огибаюча частина квантовоямних хвильових функцій, $V_p^i[m_1, 1]$, $C_p^j[n_1, 1]$ – коефіцієнти розкладу хвильових функцій для дірки і електрона за повною ортонормованою системою власних функцій на ширині квантової ями, φ – кут між векторами \mathbf{p} і \mathbf{q} , g_{α} – виродження рівня.

Чисельно розв'язуючи це інтегро-диференціальне рівняння можна з рівнянь Максвелла отримати коефіцієнт поглинання поля плоскої хвилі в середовищі:

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{\epsilon_0 n c E} \text{Im } P, \quad (53)$$

де ϵ_0 , c – діелектрична проникливість і швидкість світла в вакуумі, n – показник заломлення матеріалу квантової ями,

$$P = \frac{2}{A} \sum_{\nu_e, \nu_h, \mathbf{p}} (\mu_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h})^* \hat{p}_{\mathbf{p}}^{\nu_e \nu_h} e^{i\omega t}. \quad (54)$$

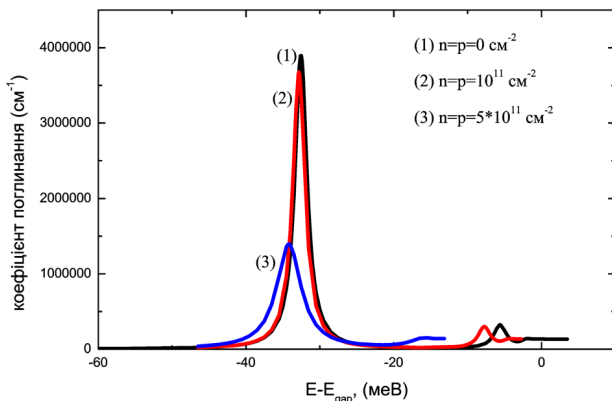


Рис. 1. Обчислений хартрі-фоківський спектр для квантової ями шириною 2,6 нм

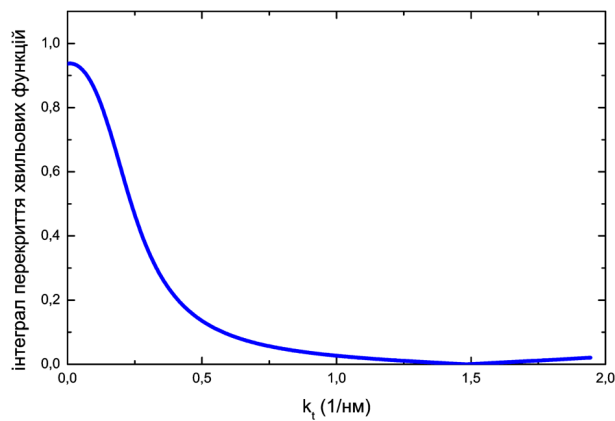


Рис. 2. Інтеграл перекриття електронної і діркової хвильових функцій

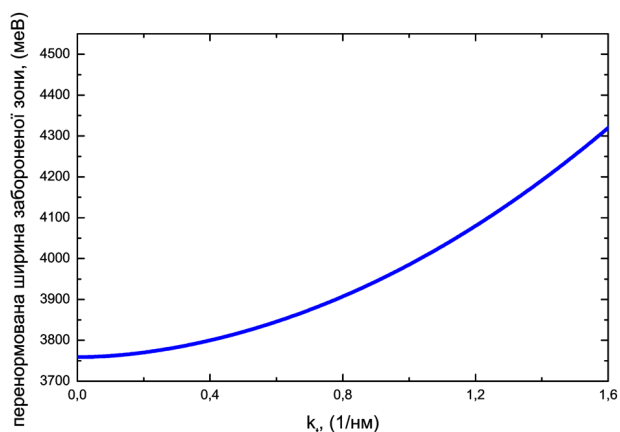


Рис. 3. Дисперсія ширини забороненої зони для квантової ями шириною 2 нм, при концентрації носіїв $5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$

3. Результати та їх обговорення

Чисельно розв'язуючи поляризаційне рівняння для квантової ями з параболічними зонами можна побачити, що із зростанням густини плазми, оптичне підсилення розвивається в спектральній області походження екситонного резонансу. Із зростанням густини вільних носіїв іонізаційний континуум швидко зміщується у бік довгих довжин хвиль, в той час як енергія $1s$ екситонного резонансу залишається майже сталою величиною. Це зумовлено високим ступенем компенсації між перенормуванням електричного дипольного моменту і перенормуванням ширини забороненої зони. Фізично це означає зарядову нейтральність екситону [39]. Існування екситонного резонансу є наслідком електронно-діркової взаємодії притягання. Спектр екситонного поглинання для квантової ями з параболічним законом дисперсії наведено на рис. 1. Всі обчислення проведено при температурі 300 К.

Інтеграл перекриття електронної і діркової хвильових функцій для в'юрцитної квантової ями зображено на рис. 2.

Не схожим чином розвиватиметься процес зміщення краю поглинання на фоні сталої енергії екситону при зростанні концентрації для в'юрцитної квантової ями. Розв'язуючи поляризаційне рівняння в хартрі-фоківській апроксимації можна одержати червоне зміщення екситонного резонансу із зростанням концентрації у в'юрцитній квантовій ямі. Обчислений хартрі-фоківський спектр для в'юрцитної квантової ями шириною 2 нм наведено на рис. 4.

Таке зміщення можна пояснити відмінністю в інтегралах перекриття електронної і діркової хвильової функції у в'юрцитній квантовій ямі і квантовій ямі з параболічними зонами. Інтеграл перекриття електронної і діркової хвильової функції при відмінних від нуля хвильових векторах у в'юрцитній квантовій ямі має менше значення, ніж інтеграл перекриття у квантовій ямі з параболічними зонами. Відтак кулонівське перенормування електричного дипольного моменту в (50) у в'юрцитній квантовій ямі буде меншим, ніж у квантовій ямі з параболічними зонами і не зможе компенсувати кулонівське перенормування власної енергії в (49), яке входить в нього зі знаком мінус. Звідки і впливатиме зміщення екситонного піка у бік менших енергій. Оскільки зміщення екситонного резонансу – дуже рідкісний ефект, приклади таких винятків – завжди цікаві.

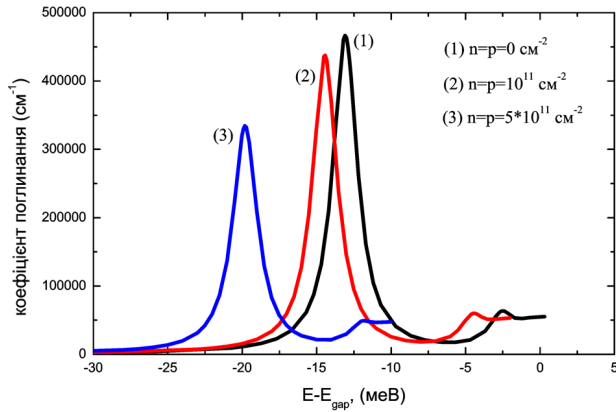


Рис. 4. Обчислений хартрі-фоковський спектр для квантової ями шириною 2 нм

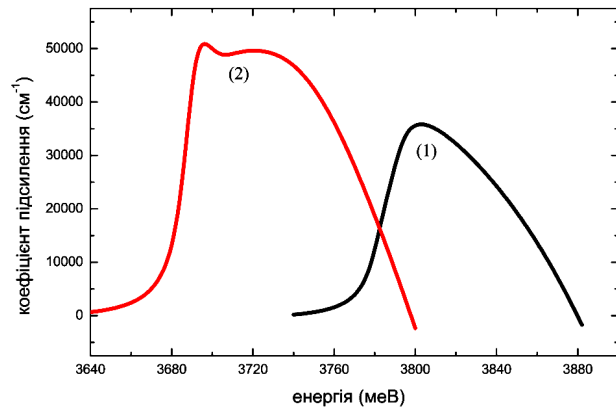


Рис. 5. Хартрівський спектр підсилення (1), хартрі-фоковський спектр підсилення (2) при концентрації $n = p = 9 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ для квантової ями шириною 2 нм при температурі 300 К

Дисперсію перенормування ширини забороненої зони для квантової ями шириною 2 нм, при концентраціях носіїв $5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ наведено на рис. 3. Обчислено енергію екситонного резонансу і знайдено, що для концентрації носіїв $5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, енергія екситону дорівнює 3749,5 меВ. Обчислений хартрі-фоковський спектр підсилення для квантової ями шириною 2 нм при концентрації носіїв $n = p = 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

У загальному існування резонансу та зоммерфельдівського підсилення неперервного оптичного спектра є відображенням перенормування енергії електричної дипольної взаємодії. Це перенормування спричинене кулонівською взаємодією притягання між електроном та діркою, і є причиною зростання оптичного поглинання, коли порівнювати зі оптичним спектром вільних носіїв. Це зростання

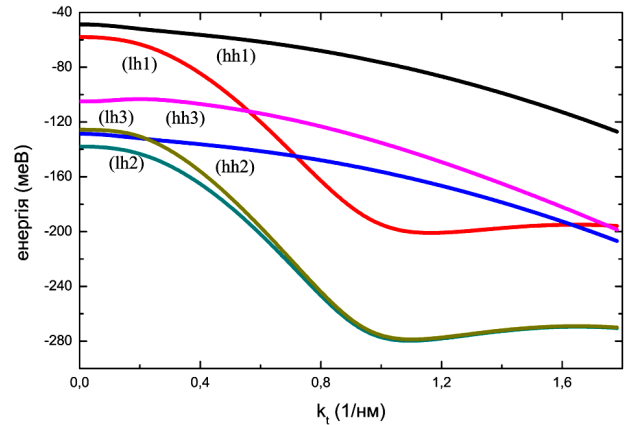


Рис. 6. Обчислений енергетичний спектр для важких (hh1), легких (lh1) дірок для незаповненої носіями валентної зони, хартрівський енергетичний спектр для важких (hh2), легких (lh2) дірок і хартрі-фоковський енергетичний спектр для важких (hh3), легких (lh3) дірок для квантової ями шириною 2 нм при концентрації дірок $p = 9 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, при температурі 300 К

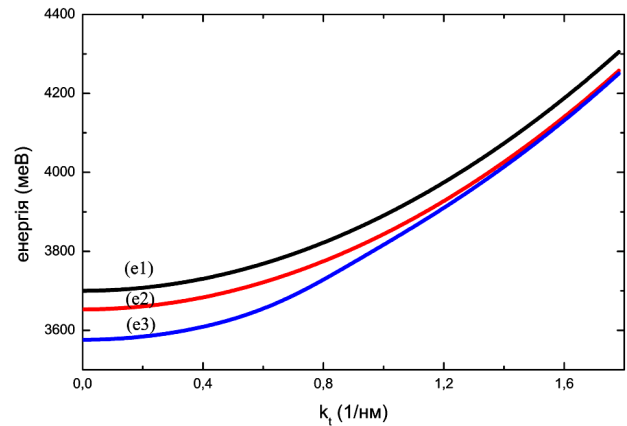


Рис. 7. Обчислений енергетичний спектр для електронів (e1) для незаповненої носіями зони провідності, хартрівський спектр електронів (e2), хартрі-фоковський спектр електронів (e3) для квантової ями шириною 2 нм при концентрації електронів $n = 9 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, при температурі 300 К

поглинання є прикладом більш загального феномена кулонівського підсилення і може бути пояснене таким чином. Зумовлені кулонівським притяганням частинки електрон та дірка мають більшу тенденцію знаходитись в околі одна одної, ніж у випадку коли вони були невзаємодіючими частинками. Це зростання часу взаємодії приводить до збільшення ймовірності оптичних переходів [28] і до перенормування енергії електричної-дипольної взаємодії.

Хартрівський та хартрі-фоківський спектри підсилення зображено на рис. 5.

Енергетичний спектр для важких та легких дірок та електронів для квантової ями наведено на рис. 6, 7, а також хартрівське та хартрі-фоківське перенормування енергетичного спектра для важких та легких дірок та електронів, які відображають багаточастинковий ефект, відомий як перенормування ширини забороненої зони.

4. Висновки

Обчислення спектра підсилення світла та екситонного спектра раніше були проведені лише для нітридної квантової ями з параболічними зонами і не проводились для квантової ями зі складним спектром. В статті ми представили вивчення непараболічності на екситонні стани у в'юрцитній квантовій ямі. Ми обчислили та пояснили, що енергія формування екситону сильно залежить від того чи є валентні підзони переплетеними, оскільки залежить від інтеграла перекриття електронних та діркових хвильових функцій. Обчислили та пояснили зміщення з концентрацією електронно-діркового газу екситонного резонансу, форму спектра підсилення у в'юрцитній квантовій ямі. Обчислили обмінне перенормування енергетичного спектра для дірок та електронів. У вивченні впливу інтеграла перекриття хвильових функцій на хартрі-фоківське перенормування електричного дипольного моменту у в'юрцитній квантовій ямі можна зробити такі висновки: відхилення від параболічної зонної структури квантової ями, у в'юрцитній квантовій ямі приводить до значних змін у визначенні енергії формування екситону. Обчислення свідчать про незначні зміни інтеграла перекриття хвильових функцій електрона і дірки зумовлені внутрішнім ефектом Штарка квантового конфайнменту при розглянутих концентраціях. Відхилення від параболічної зонної структури квантової ями приводить до значних змін в інтегралі перекриття хвильових функцій електрона і дірки. Це стає причиною червоного зміщення екситонного піка із збільшенням концентрації. Згадані вище результати можуть пояснюватися впливом валентної зонної структури на ефекти квантового конфайнменту. Обчислено значне червоне зміщення спектра підсилення із врахуванням кулонівських ефектів відносно хартрівського спектра підсилення. Обчислено значне зоммерфельдівське підсилення спектра.

Автор висловлює щире подяку професору В.О. Кочелалу за численні дискусії.

1. N. Savage, *Nature Photonics* **1**, 83 (2007).
2. A. Khan, K. Balakrishnan, and T. Katona, *Nature Photonics* **2**, 77 (2008).
3. H. Kawanishi, M. Senuma, and T. Nukui, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 041126 (2006).
4. H. Kawanishi, M. Senuma, M. Yamamoto, E. Niikura and T. Nukui, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 081121 (2006).
5. J. Shakya, K. Knabe, K.H. Kim, J. Li, J.Y. Lin, and H.X. Jiang, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 091107 (2005).
6. R.G. Banal, M. Funato, and Y. Kawakami, *Phys. Rev. B.* **79**, 121308(R) (2009).
7. R.D. Meade, A.M. Rappe, K.D. Brommer, and J.D. Joannopoulos, *J. Opt. Soc. Am. B* **10**, 328 (1993).
8. S.H. Park, D. Ahn, and S.L. Chuang, *IEEE J. Quantum Electron.* **43**, 1175 (2007).
9. M.F. Schubert, J. Xu, J.K. Kim, E.F. Schubert, M.H. Kim, S. Yoon, S.M. Lee, C. Sone, T. Sakong, and Y. Park, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 041102 (2008).
10. M.H. Kim, W. Lee, D. Zhu, M.F. Schubert, J.K. Kim, E.F. Schubert, and Y. Park, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **15**, 1122 (2009).
11. S.H. Park, D. Ahn, and J.W. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 171115 (2008).
12. A.E. Romanov, T.J. Baker, S. Nakamura, J.S. Speck, and E.J.U. Group, *J. Appl. Phys.* **100**, 023522 (2006).
13. A.A. Yamaguchi, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 201104 (2009).
14. H.H. Huang, and Y.R. Wu, *J. Appl. Phys.* **106**, 023106 (2009).
15. M. Nido, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2* **34**, L1513 (1995).
16. S. Chichibu, T. Azuhata, T. Sota, H. Amano, and I. Akasaki, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 2085 (1997).
17. D. Fu, R. Zhang, B. Wang, Z. Zhang, B. Liu, Z. Xie, X. Xiu, H. Lu, Y. Zheng, and G. Edwards, *J. Appl. Phys.* **106**, 023714 (2009).
18. P.Y. Dang, Y.R. Wu, *J. Appl. Phys.* **108**, 083108 (2010).
19. S. Fujita, T. Takagi, H. Tanaka, and S. Fujita, *Phys. Status Solidi B* **241**, 599 (2004).
20. W.J. Fan, J.B. Xia, P.A. Agus, S.T. Tan, S.F. Yu, and X.W. Sun, *J. Appl. Phys.* **99**, 013702 (2006).
21. S. Sasa, M. Ozaki, K. Koike, M. Yano, and M. Inoue, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 053502 (2006).
22. K. Koike, I. Nakashima, K. Hashimoto, S. Sasa, M. Inoue, and M. Yano, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 112106 (2005).
23. S.-H. Park, and S.-L. Chuang, *J. Appl. Phys.* **72**, 3103 (1998).
24. M. Willatzen, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control* **48**, 100 (2001).
25. B. Auld, *Acoustic Fields and Waves in Solids* (Wiley, New York, 1973).
26. L. Duggen, and M. Willatzen, *Phys. Rev. B* **82**, 205303 (2010).

27. M. Lindberg, S.W. Koch, Phys. Rev. B. **38**, 3342 (1988).
28. W.W. Chow, S.W. Koch, M. Sargent III, *Semiconductor Laser Physics* (Springer, New York, 1994).
29. W. Chow, M. Kira, S.W. Koch, Phys. Rev. B. **60**, 1947 (1999).
30. W.W. Chow, M. Kneissl, J. Appl. Phys., **98**, 114502 (2005).
31. G.L. Bir and G.E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, New York, 1974).
32. Р. Нокс, *Теория экситонов* (Мир, Москва, 1966).
33. Л.О. Локоть, УФЖ **54**, 964 (2009).
34. Л.О. Локоть, УФЖ **57**, 12 (2012).
35. M. Gell-Mann, K.A. Brueckner, Phys. Rev. **106**, 364 (1956).
36. C. Kittel *Quantum Theory of Solids* (Wiley, New York–London, 1963).
37. С. Реймс, *Теория многоэлектронных систем* (Мир, Москва, 1976).
38. R.D. Mattuck *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem* (McGraw-Hill, New York, 1967).
39. H. Haug, S. Schmitt-Rink, Prog. Quant. Electr. **9**, 3 (1984).

Одержано 24.04.12

Л.Е. Локоть

ХАРТРИ–ФОКОВСКАЯ ЗАДАЧА
ЭЛЕКТРОННО–ДЫРОЧНОЙ ПАРЫ
В КВАНТОВОЙ ЯМЕ GaN

Резюме

Представлено микроскопическое вычисление спектра поглощения для системы GaN/Al_xGa_{1-x}N квантовой ямы.

Тогда как структуры квантовой ямы с параболическим законом дисперсии проявляют обычное высвечивание экситона без изменения спектральной области, то значительное красное смещение экситонного резонанса найдено для вюрцитной квантовоямной структуры. Вычислена энергия экситонного резонанса для вюрцитной квантовой ямы. Полученные результаты могут объясняться влиянием валентной зонной структуры на эффекты квантового конфайнмента. Вычислен оптический спектр усиления в хартри–фоковской аппроксимации. Вычислено зоммерфельдовское усиление. Вычислено красное смещение спектра усиления в хартри–фоковской аппроксимации относительно хартри–фоковского спектра усиления.

L.O. Lokot

HARTREE–FOCK PROBLEM
OF ELECTRON–HOLE PAIR
IN QUANTUM WELL GaN

Summary

We present microscopic calculations of the absorption spectra for GaN/Al_xGa_{1-x}N quantum well systems. Whereas the quantum well structures with the parabolic law of dispersion exhibit the usual bleaching of an exciton resonance without shifting a spectral position, the significant red-shift of an exciton peak is found with increasing the electron-hole gas density for a wurtzite quantum well. The energy of the exciton resonance for a wurtzite quantum well is found. The obtained results can be explained by the influence of the valence band structure on quantum confinement effects. The optical gain spectrum in the Hartree–Fock approximation and the Sommerfeld enhancement are calculated. A red shift of the gain spectrum in the Hartree–Fock approximation with respect to the Hartree gain spectrum is found.