УДК 537.311.33

ЭКСИТОНЫ В ТОНКИХ СЛОЯХ УЗКОЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

А. П. Силин, С. В. Шубенков

Решена задача о двумерном экситоне в двузонной модели Дирака. Получены тонкая структура и зависимость энергии связи экситона от ширины запрещенной зоны и толщины слоя. Получен критерий устойчивости локализованного в тонком слое экситона относительно однофотонной аннигиляции.

Исследование энергетического спектра квазиодномерных и квазидвумерных полупроводниковых структур весьма актуально. Развитие современной полупроводниковой технологии позволяет модулировать такие структуры путем пространственного варьирования ширины запрещенной зоны [1]. Таким образом можно создавать одномерные квантовые ямы любой ширины одновременно для обоих типов носителей тока. Локализованные в слоях электроны и дырки могут образовывать экситоны, энергия связи которых посчитана для случая параболических невзаимодействующих зон [2]. В узкощелевых полупроводниках взаимодействие зон существенно (что, в частности, приводит к непараболическому закону дисперсии носителей), поэтому локализация электрона и дырки в слое ведет к существенному изменению их динамики, что сказывается на энергии экситона.

В данной работе рассмотрена модель, основанная на следующих предположениях:

а) Невзаимодействующие носители тока описываются уравнением Дирака:

$$E\Psi = (s\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{p}} + \hat{\beta}\Delta)\Psi. \tag{1}$$

Здесь и везде ниже $\hat{\vec{\alpha}}$, $\hat{\beta}$ – матрицы Дирака, $\hat{\vec{p}}$ – оператор трехмерного импульса, $\Delta = E_g/2$ – полуширина запрещенной зоны, Ψ – огибающая волновой функции электрона, $s = \sqrt{\Delta/m}$ – кейновский межзонный матричный элемент (квазискорость света),

m – эффективная масса электрона и дырки (в этой модели их массы равны), энергия отсчитывается от середины запрещенной зоны.

б) Вдоль одной из пространственных осей (ось z) модуляцией ширины (2Δ) запрещенной зоны создана квантовая яма одновременно как для электронов, так и для дырок:

$$\Delta = \Delta(z) = \begin{cases} \Delta_1, & |z| < a; \\ \Delta_2, & |z| > a. \end{cases} \tag{2}$$

Стенки ямы достаточно высокие: $\Delta_2 >> \Delta_1, \Delta_2 >> E_{qnt} = \hbar^2 s^2/a^2\Delta_1$, фактически далее мы везде считали стенки ямы бесконечными.

в) Ширина ямы $2a$ (толщина слоя) много меньше характерного радиуса объемного экситона $r_x = 2\epsilon\hbar^2 s^2/\Delta_1 e^2$, $\delta = a/r_x << 1$, т.е. энергия размерного квантования E_{qnt} много больше энергии связи объемного экситона $E_x = e^4\Delta_1/4\epsilon^2 s^2\hbar^2$, т.к. $E_x/E_{qnt} = \delta^2 << 1$ и на каждом уровне размерного квантования имеется свой экситон.

Теперь можно приступить к изучению взаимодействия электрона и дырки в слое узкощелевого полупроводника. Всеми поправками порядка s^2/c^2 мы пренебрегли, это означает, что квантово-механическое уравнение, описывающее взаимодействие двух заряженных частиц, не содержит магнитного взаимодействия их моментов и в нем не учитывается запаздывание взаимодействия за счет конечности скорости света [3]. Взаимодействие электрона и дырки в этом приближении будет экранированным электростатическим. Диэлектрическую проницаемость среды, окружающей слой, мы считали равной проницаемости слоя ϵ, пространственной и частотной дисперсией которой пренебрегли. Аннигиляционное (обменное) взаимодействие в первой части работы исключено из рассмотрения, оно будет посчитано ниже. Таким образом, двухчастичное уравнение имеет вид:

$$E\Phi(\vec{r}_-, \vec{r}_+) = (s\hat{\vec{\alpha}}_- \hat{\vec{p}}_- + s\hat{\vec{\alpha}}_+ \hat{\vec{p}}_+ + \hat{\beta}_- \Delta(z_-) + \hat{\beta}_+ \Delta(z_+) - e^2/\epsilon r)\Phi(\vec{r}_-, \vec{r}_+). \tag{3}$$

Все индексы "$-$" относятся к электрону, "$+$" – к дырке; $r \equiv |\vec{r}_- - \vec{r}_+|$; $\Phi(\vec{r}_-, \vec{r}_+)$ – двухчастичная волновая функция, биспинор ранга 2.

Мы рассмотрим экситон на нижнем уровне размерного квантования. Чтобы получить двумерное уравнение, описывающее взаимодействие электрона и дырки, необходимо усреднить (3) по z_+ и z_-. В нулевом порядке по δ переменные z и (x, y) удается разделить: $\Phi(\vec{r}_-, \vec{r}_+) = Z_0(z_-)Z_0(z_+)\phi(\vec{\eta}_-, \vec{\eta}_+)$. Здесь и везде ниже $\vec{\eta}_\pm$ – двумерные векторы, определяющие координаты частиц в плоскости XY, $Z_0(z)$ – одномерное решение уравнений (1), (2), отвечающее низшей энергии E_0:

$$Z_0(z) = C\begin{pmatrix} \omega\cos(k_0 z) \\ \hat{\sigma}_z\omega\frac{i\hbar s k_0 \sin(k_0 z)}{E_0+\Delta_1}\end{pmatrix} \quad \text{при} \quad |z| < a; \tag{4}$$

ω – произвольный двухкомпонентный спинор, σ_z – матрица Паули, C – нормировочная константа. k_0 и E_0 определяются дисперсионной системой уравнений

$$E_0^2 = \Delta_1^2 + s^2k_0^2, \quad \mathrm{tg}(2k_0 a) = -\frac{\hbar k_0 s}{\Delta_1}. \tag{5}$$

В низшем порядке по δ и $\alpha = e^2/\epsilon\hbar s$ после усреднения (3) по функциям (4) получили уравнение, совпадающее с уравнением Шредингера для двух частиц с массами $m^* = E_0/s^2$ и кулоновским взаимодействием между ними

$$\left[\frac{\hat{\vec{q}}_-^2 s^2}{2E_0} + \frac{\hat{\vec{q}}_+^2 s^2}{2E_0}\right]\phi(\vec{\eta}_-, \vec{\eta}_+) - \frac{e^2}{\epsilon\eta}\phi(\vec{\eta}_-, \vec{\eta}_+) = \epsilon\phi(\vec{\eta}_-, \vec{\eta}_+),$$

где $\epsilon = E - 2E_0$, $\hat{\vec{q}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{\eta}}$.

Решение этого уравнения известно и имеет следующий вид:

$$\phi(\vec{\eta}_-, \vec{\eta}_+) = B_{nm}e^{i\vec{Q}(\vec{\eta}_- + \vec{\eta}_+)}e^{im\phi}r^m e^{-r/(n-1/2)}F(-n+m+1, 2m+1, \frac{2r}{n-\frac{1}{2}}), \tag{6}$$

$$\epsilon^{(n)} = -E_x^{(n)} + \frac{Q^2s^2}{4E_0}, \quad E_x^{(n)} = \frac{1}{2(n-\frac{1}{2})^2},$$

где $F(\alpha, \gamma, x)$ – вырожденная гипергеометрическая функция, $n = 1, 2...$ – главное квантовое число, $m = 1, 2, ...$ – магнитное квантовое число, (r, ϕ) – полярные координаты относительного движения, $\vec{Q}$ – двумерный трансляционный импульс экситона как целого, B_{nm} – нормировочная константа, ее значение при $m = 0$:

$$B_{n0} = \frac{1}{\sqrt{\pi(n-\frac{1}{2})^3}}. \tag{7}$$

За единицу длины принято $2s\hbar/E_0\alpha$, энергии $E_0e^4/2\epsilon^2\hbar^2s^2 = E_0\alpha^2/2$. Энергия связи экситона в нулевом приближении по δ и α

$$E_x = \frac{E_0e^4}{4\epsilon^2\hbar^2s^2(n-\frac{1}{2})^2} = \frac{E_0\alpha^2}{4(n-\frac{1}{2})^2}. \tag{8}$$

Характерный радиус двумерного экситона:

$$a_x = \frac{(2n-1)\epsilon\hbar^2 s^2}{E_0 e^2} = \frac{(2n-1)\Delta_1 a}{2E_0\delta}$$

До сих пор мы не учитывали аннигиляционного взаимодействия электрона и дырки. Рассмотрим аннигиляционную часть амплитуды рассеяния [4]:

$$M_{fi}^{(ann)} = e^2\{[\bar{u}(-\vec{p}_+)\gamma^0 u(\vec{p}_-)]D_{00}(\vec{p}_- + \vec{p}_+)[\bar{u}(\vec{p}'_-)\gamma^0 u(-\vec{p}'_+)]+ \tag{9}$$

$$+\frac{s^2}{c^2}[\bar{u}(-\vec{p}_+)\gamma^i u(\vec{p}_-)]D_{ij}(\vec{p}_- + \vec{p}_+)[\bar{u}(\vec{p}'_-)\gamma^j u(-\vec{p}'_+)]\},$$

где $D_{00}(\vec{p}) = 4\pi/\epsilon(\Omega^2\epsilon/c^2 - p^2)$ и $D_{ij}(\vec{p}) = -4\pi\delta_{ij}/(\Omega^2\epsilon/c^2 - p^2)$ – компоненты фотонного пропагатора, γ^0, γ^i – матрицы Дирака, $u(\vec{p})$ – амплитуда плоской волны с импульсом $\vec{p}$, $\bar{u}(\vec{p})$ – дираковски сопряженная ей амплитуда. Второе слагаемое в (9) даст поправку к энергии не ниже порядка s^2/c^2, им мы пренебрегли. Зато первое слагаемое, как будет показано ниже, даст поправку первого порядка по α. Для того, чтобы получить двумерную амплитуду рассеяния, необходимо усреднить трехмерную амплитуду по z_- и z_+. По двумерной амплитуде рассеяния можно найти эффективный рассеивающий потенциал

$$\hat{U}^{(ann)} = \frac{2\pi e^2}{\epsilon}A_1(k_0,\Delta_1)(\hat{\vec{S}}^2 - 2\hat{S}_z^2)\delta(\vec{\eta}_- - \vec{\eta}_+),$$

где $\hat{\vec{S}}$ – полный спин экситона, $\hat{S}_z$ – проекция спина на ось z.

$$A_1(k_0,\Delta_1) = \frac{(ks)^2}{(2aE_0 + \Delta_1 s/E_0)^2}\left(\frac{a}{2k_0^2} - \frac{c(4k_0^2 + E_0^2\epsilon/c^2)}{iE_0\sqrt{\epsilon}(4k_0^2 - E_0^2\epsilon/c^2)^2}\times \right. \tag{10}$$

$$\times(1 - \exp(2iE_0\sqrt{\epsilon}a/c)\cos(4k_0 a)) - \frac{4k_0\exp(2iE_0\sqrt{\epsilon}a/c)\sin(4k_0 a)}{(4k_0^2 - E_0^2\epsilon/c^2)^2} + \frac{c^2\sin(4k_0 a)}{2k_0 E_0^2\epsilon} +$$

$$\left. + \frac{c(\exp(2iE_0\sqrt{\epsilon}a/c) - \cos(4k_0 a))}{iE_0\sqrt{\epsilon}(4k_0^2 - E_0^2\epsilon/c^2)} - \frac{2k_0 c^2\sin(4k_0 a)}{E_0^2\epsilon(4k_0^2 - E_0^2\epsilon/c^2)}\right).$$

В этой формуле мы положили $\hbar = 1$, чтобы не делать ее еще более громоздкой. $\hat{U}^{(ann)}$, вообще говоря, комплексно, что отражает неустойчивость экситона в некоторой области значений параметра k_0. При $(2k_0 - E_0\sqrt{\epsilon}/\hbar c) \to 0$ (10) неограничено растет по своей абсолютной величине. Дело в том, что при $4k_0^2 \simeq E_0^2\epsilon/\hbar^2 c^2$ велико сечение однофотонной аннигиляции

$$\sigma_{1\gamma}^{ann} \sim \left(4k_0^2 - \frac{E_0^2\epsilon}{\hbar^2 c^2}\right)^{-2}$$

и говорить об экситоне, как о связном состоянии неправомерно. Поэтому для рассмотрения экситона необходимо выбрать k_0 таким образом, чтобы было выполнено либо условие

$$4k_0^2 >> \Delta_1^2\epsilon/\hbar^2c^2, \tag{11}$$

что равносильно $\frac{\alpha^2c^2}{\delta^2s^2\epsilon} >> 1$, либо

$$4k_0^2 << \Delta_1^2\epsilon/\hbar^2c^2,\ \alpha^2c^2/\delta^2s^2\epsilon << 1. \tag{12}$$

В реальных полупроводниках соотношение (12) трудновыполнимо одновременно с ограничениями, принятыми в данной работе, поэтому этот случай мы не рассматривали. Если выполнено (11),

$$A_1(k_0,\Delta_1) = \frac{\hbar^2s^2\left(\frac{3}{4}\hbar\Delta_1 s + \Delta_1^2 a + \frac{1}{2}aE_0^2\right)}{(2aE_0^2 + \hbar\Delta_1 s)^2}. \tag{13}$$

Для того, чтобы оценить порядок аннигиляционного взаимодействия, удобно (13) обезразмерить, взяв за единицы длины и энергии величины, принятые в (6):

$$\tilde{U}^{(ann)}(\vec{q}) = \pi\tilde{A}_1(\frac{1}{2}\hat{\vec{S}}^2 - \hat{S}_z^2)\delta(\vec{\eta}), \tag{14}$$

$$\tilde{A}_1(\zeta) = \alpha\frac{(1+\zeta^2\phi^2)^{1/2}(\frac{3}{4}\zeta + \frac{3}{8}\zeta^2 + \frac{1}{4}\zeta^3\phi^2)}{(1+\frac{1}{2}\zeta + 2\zeta^2\phi^2)^2}.$$

Здесь $\zeta = \hbar s/a\Delta_1 = \alpha/2\delta$ – безразмерный параметр, характеризующий влияние непараболичности зон при данной толщине слоя $2a$, $\phi = k_0a \sim 1$ и удовлетворяет уравнению $\mathrm{tg}2\phi = -2\phi\zeta$ (см. (5)).

$U^{(ann)}$ следует считать величиной первого порядка малости по α, тогда как в трехмерном случае все поправки к энергии не ниже α^2.

В низшем порядке по параметрам α и δ аннигиляционным взаимодействием можно пренебречь. Учет же аннигиляционного взаимодействия нужно вести одновременно с учетом других поправок к взаимодействию того же порядка. Для того, чтобы получить эти поправки, необходимо более точно усреднить по z кулоновский потенциал, сохраняя слагаемые порядка δ. После усреднения была получена следующая поправка к потенциалу:

$$U_1(\vec{\eta}) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon}A_2\delta(\vec{\eta}), \tag{15}$$

где

$$A_2(k_0,\Delta_1) = \frac{\frac{8}{3}E_0^4a^3 + (E_0^2 - 2\Delta_1^2)\Delta_1^2\frac{a}{2k_0^2} + \Delta_1E_0^2(4a^2\hbar^2s - \frac{2a\Delta_1}{k_0^2} - \frac{\hbar s}{k_0^2})}{(2aE_0^2 + \Delta_1\hbar s)^2}. \tag{16}$$

Обратим внимание, что эта поправка к взаимодействию фактически первого порядка по $max(\alpha, \delta)$. Действительно, обезразмеривая (15) и (16), получаем

$$\tilde{U}_1(\vec{\eta}) = \pi \tilde{A}_2 \delta(\vec{\eta}),$$

$$\tilde{A}_2(\zeta) = \delta(1 + \zeta^2\phi^2)^{1/2} \times$$

$$\times[4/3 - 5/4\phi^2 + \zeta(2 - 1/2\phi^2) + \zeta^2(8\phi^2/3 - 3/4) + \zeta^3(2\phi^2 + 1/2) + 4/3\zeta^4\phi^4](1 + \zeta/2 + 2\phi^2\zeta^2)^{-2}. \quad (17)$$

Из (17) видно, что при $\zeta >> 1$ $\tilde{U}_1 \sim \alpha$, а при $\zeta << 1$ $\tilde{U}_1 = \delta(\frac{4\pi}{3} - \frac{5}{\pi})\delta(\vec{\eta}) \sim \delta$, что совпадает с результатом, полученным для этого случая в работе [2]. Для состояний с ненулевым орбитальным моментом поправки к энергии будут порядка α^2. Из формул (6) и (7):

$$|\phi(0)|^2 = \frac{1}{\pi(n - 1/2)^3}.$$

Полная энергия связи экситона в тех же единицах:

$$E_x^{(n)} = \frac{1}{2(n - 1/2)^2} - \frac{\delta_{m0}}{(n - 1/2)^3}[\tilde{A}_2 - \delta_{s1}\delta_{s_{z0}}\tilde{A}_1]. \quad (18)$$

Значения энергии связи экситона и ее расщепление для некоторых полупроводников, рассчитанные по формулам (8), (14), (17) и (18), приведены в Таблице 1.

Таблица 1

Энергия связи экситона и ее расщепление для различных полупроводников в слоях толщиной 40 и 200 Å. Здесь E_x^f – энергия связи экситона в основном состоянии

Кристалл	E_g, *мэВ*	$\frac{m_n}{m_0}$	$\frac{m_p}{m_0}$	$\frac{m_p m_n}{m_p+m_n}$	ϵ_0	a, Å	E_x^f, *мэВ*	$\tilde{A}_1$	$\tilde{A}_2$
InSb	236	0,014	0,015	0,0078	17	20	3,8	0,015	0,028
						100	1,8	0.07	0.07
GaSb	813	0,047	0,06	0,025	15	20	9	0,019	0,06
						100	6,3	0,01	0,29
GaAs	1410	0,068	0,089	0,039	12,53	20	17	0.02	0.10
						100	13,6	0,01	0,54
InAs	425	0,023	0,025	0,012	14,5	20	5,8	0,009	0.04
						100	3,5	0,018	0,11
InP	1416	0,082	0,086	0,042	14	20	14,0	0,2	0,11
						100	11,8	0.01	0,53
AlSb	2320	0,09	0,12	0,06	11,5	20	28,4	0,024	0,15
						100	24,8	0,01	0,83
ZnTe	2301	0,2	0,154	0,082	10	20	50,0	0.03	0.22
						100	45,8	0.01	0.80

ЛИТЕРАТУРА

[1] Силин А. П. УФН, **147**, N 3, 485 (1985).

[2] Андрюшин Е. А., Силин А. П. ФТТ, **35**, 1947 (1993).

[3] Андрюшин Е.А., Силин А.П. Шубенков С. В. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 7-8, 22 (1995).

[4] Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика, М., Наука, 1989, § 83.

Поступила в редакцию 27 марта 1996 г.