

УДК 537.311.33

ЭКСИТОНЫ В ДВУХЗОННОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, С. В. Шубенков

В модели Дирака проведено исследование экситонов в узкощелевых полупроводниках. Рассчитана энергия основного состояния и его расщепление для дираковского (то есть с учетом конечности энергетической щели), но нерелятивистского (то есть без учета запаздывания и спин-спинового взаимодействия) экситона.

Расчеты энергии связи экситона, как аналитические, так и численные, проведены для всевозможных полупроводниковых структур и хорошо известны [1 – 3]. Однако до сих пор отсутствует исследование зависимости энергии связи экситона от величины энергетической щели полупроводника. Это связано с тем, что обычно отношение энергии связи экситона к энергетической щели, во-первых, мало, а, во-вторых, постоянно. Поэтому влияние конечности энергетической щели маскируется другими эффектами, такими, например, как анизотропия энергетических зон, дисперсия диэлектрической проницаемости и т.п. Однако представляет большой интерес исследование тонкой структуры экситона, связанной с конечностью энергетической щели. В последнее время на основе достижений полупроводниковой технологии создаются полупроводниковые структуры, для которых исследование зависимости энергии связи экситона от величины энергетической щели довольно актуально. Это связано с тем, что в полупроводниковых гетероструктурах эффективная энергетическая щель зависит от размеров квантовой ямы, квантовой нити или квантовой точки, где локализованы носители тока, и ее легко можно изменять (см., напр., [4]). Следует также отметить, что энергия связи экситона в квазидвумерных и квазиодномерных структурах существенно больше, чем в трехмерном случае. Если к тому же эти гетероструктуры будут составлены из узкощелевых полупроводников (см., напр., [5]), то отношение энергии связи экситона к энергетической щели полупроводника, в котором он локализован, может превышать 1/10.

В настоящей работе рассматривается более простая задача об образовании дираковского экситона в узкощелевом полупроводнике, когда нельзя пренебречь взаимодействием валентной зоны и зоны проводимости. Рассматривается модельный полупроводник с невырожденными зонами (двухзонная модель Дирака). В этой модели эффективные массы электрона и дырки равны и изотропны. Более реалистичная трехзонная модель Кейна, хотя и более громоздка [6 - 8], не может дать качественно других результатов.

Интересно, что уже для такой простой системы нельзя пользоваться хорошо известными в квантовой электродинамике результатами для тонкой структуры позитрония [10, 11]. В этой задаче нет полной аналогии с электрон-позитронным вакуумом, которая была в низшем порядке по кулоновскому взаимодействию (по постоянной тонкой структуры). Для описания взаимодействия носителей заряда в полупроводнике требуется больше постоянных, чем для описания взаимодействия электрон-позитрон. Кроме постоянной Планка \hbar , заряда e , диэлектрической проницаемости ϵ , эффективной массы m , участвуют две величины размерности скорости. Это, во-первых, кейновский матричный элемент $s = \sqrt{\frac{\Delta}{m}}$ (квазискорость света), где Δ - полуширина энергетической щели, а, во-вторых, собственно скорость света c . Причем для узкощелевых полупроводников с большим запасом выполняется соотношение

$$c \gg s. \quad (1)$$

Наличие двух постоянных размерности скорости приводит к тому, что кроме постоянной тонкой структуры квантовой электродинамики

$$\alpha_0 = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (2)$$

при описании взаимодействия носителей заряда используется также постоянная

$$\alpha = \frac{e^2}{\epsilon \hbar s}, \quad (3)$$

квадрат которой (см. ниже) с точностью до числового множителя равен отношению энергии связи экситона к энергетической щели. Поправки же, связанные с запаздыванием, спин-спиновым взаимодействием и вообще с взаимодействием электродинамической (не статической) природы (например, магнитной), будут пропорциональны степеням α_0 . В силу (1)

$$\alpha \gg \alpha_0. \quad (4)$$

Под узкощелевыми полупроводниками в настоящей работе будем понимать такие полупроводники, в которых величины α максимальные. В низшем порядке по α в полупроводнике с законом дисперсии носителей заряда $E(p) = \pm\sqrt{p^2s^2 + \Delta^2}$ получим экситон с энергией

$$E_{ex} = \Delta \left(1 - \frac{\alpha^2}{4}\right) \quad (5)$$

(энергия отсчитывается от середины щели), что совпадает с энергией позитрония с точностью до замены $\alpha \rightarrow \alpha_0$, $\Delta \rightarrow m_e c^2$, где m_e – масса свободного электрона. Учет тонкой структуры экситона даст поправки порядка α^4 и $\alpha_0^2 \alpha^2$.

Процедура вычисления поправок стандартна и аналогична процедуре вычисления тонкой структуры позитрония (см., напр., [7], § 83 и 84). Она сводится к нахождению эффективного потенциала для уравнения Шредингера и его усреднению по невозмущенным состояниям (поправки $\propto \alpha^4$ рассматриваются как возмущение). Отличие же состоит в том, что 4-потенциал $A^\mu = (\Phi, \vec{A})$ входит в уравнение Дирака, описывающее электрон (дырку) в полупроводнике, несколько иначе, чем в аналогичное уравнение квантовой электродинамики. Из требования инвариантности уравнения Дирака относительно калибровочных преобразований ($\psi \rightarrow \psi \exp(i e \phi(x^\mu))$, $A_\mu \rightarrow A_\mu - \partial_\mu \phi(x^\mu)$) следует, что уравнение должно иметь вид

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(s \hat{\alpha} \hat{p} + \hat{\beta} \Delta + e \Phi - e \frac{s}{c} \hat{\alpha} \vec{A} \right) \psi. \quad (6)$$

Здесь и в дальнейшем $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ – матрицы Дирака, $\hbar = 1$. Используя (6), можно найти амплитуду рассеяния электрона на позитроне и по ней восстановить эффективный потенциал (7) для уравнения Шредингера, аналогичный потенциалу взаимодействия электрона и позитрона (см. ниже (8)):

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi,$$

$$\text{где } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{m} - \frac{e^2}{\epsilon r} + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3 + \hat{V}_4,$$

$$\hat{V}_1 = -\frac{\hat{p}^4}{4m^3 s^2} + 4\pi \mu_*^2 \delta(\vec{r}), \quad \hat{V}_2 = 4\mu_*^2 \frac{(\hat{S}, \vec{l})}{r^3}, \quad \hat{V}_3 = 0,$$

$$\hat{V}_4 = 4\pi \mu_*^2 \hat{S}^2 \delta(\vec{r}) + 6 \frac{\mu_*^2}{r^3}. \quad (7)$$

Здесь \hat{V}_1 – поправка орбитального происхождения, \hat{V}_2 – спин-орбитальное взаимодействие, \hat{V}_3 – спин-спиновое взаимодействие, \hat{V}_4 – обменное (аннигиляционное) взаимодействие, ψ – трехкомпонентная волновая функция (система электрон-дырка может иметь спин 1), \hat{S} – операторы спина, \hat{l} – операторы орбитального момента, $m = \frac{\Delta}{s^2}$, $\mu_* = \frac{e}{2\sqrt{cm}s}$ – эффективный магнетон Бора. Для сравнения выпишем потенциал взаимодействия электрона и позитрона в вакууме с точностью до слагаемых, пропорциональных α_0^2 :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi,$$

$$\text{где } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{m_e} - \frac{e^2}{r} + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3 + \hat{V}_4,$$

$$\hat{V}_1 = -\frac{\hat{p}^4}{4m_e^3 c^2} + 4\pi\mu_0^2 \delta(\vec{r}) - \frac{e^2}{2m_e^2 c^2 r} \left(\hat{p}^2 + \frac{(\hat{p}, \vec{r})(\vec{r}, \hat{p})}{r^2} \right),$$

$$\hat{V}_2 = 6\mu_0^2 \frac{(\hat{S}, \hat{l})}{r^3}, \quad (8)$$

$$\hat{V}_3 = 6 \frac{\mu_0^2}{r^3} \left(\frac{(\hat{S}, \vec{r})(\vec{r}, \hat{S})}{r^2} - \frac{1}{3} \hat{S}^2 \right) + 4\pi\mu_0^2 \left(\frac{4}{3} \hat{S}^2 - 2 \right) \delta(\vec{r}),$$

$$\hat{V}_4 = 4\pi\mu_0^2 \hat{S}^2 \delta(\vec{r}), \quad \mu_0 = \frac{e}{2m_e c}.$$

Как можно было ожидать, потенциал взаимодействия электрона и дырки (7) содержит в целом меньше слагаемых, чем электрон-позитронный потенциал (8), так как в (7) опущены слагаемые, пропорциональные α_0^2 .

Наличие в гамильтониане (7) поправок $\hat{V}_1 - \hat{V}_4$ приводит к появлению "тонкой" структуры экситона. Энергия расщепления уровней получается усреднением поправочных членов по волновым функциям невозмущенных состояний с различными значениями n, j, l, s и m (т.е. определенными энергией, полным моментом, орбитальным моментом, спином и проекцией орбитального момента). Именно на состояниях с таким набором квантовых чисел поправочные члены диагональны (это существенно, т.к. невозмущенные состояния вырождены). Используя при усреднении результаты, приведенные в [10], § 84 и [12], § 29, легко получить полное выражение для энергии экситона:

$$E_{ex} = \Delta - \frac{1}{4n^2} + \alpha^2 \frac{3}{64n^2} - \alpha^2 \frac{(1 - \delta_{l0})}{8n^3(2l + 1)} + \alpha^2 \frac{\delta_{l0}(1 - \delta_{s0})}{4n^3} +$$

$$+ \alpha^2 \frac{(1 - \delta_{l0})(1 - \delta_{s0})}{8n^3} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{-1}{l(l+1)(2l+1)}, & j = l; \\ \frac{-(4l-1)}{l(2l-1)(2l+1)}, & j = l-1; \\ \frac{4l+5}{(l+1)(2l+3)(2l+1)}, & j = l+1. \end{array} \right. \quad (9)$$

Результат приведен в единицах, аналогичных атомным, т.е. за единицы длины и энергии приняты величины $\frac{\epsilon \hbar^2 s^2}{\Delta e^2}$ и $\frac{\Delta e^4}{\epsilon^2 \hbar^2 s^2}$ соответственно. Полезно привести величину параорто расщепления основного состояния как важный частный случай формулы (9):

$$\Delta E(\text{осн}) = E_{\text{осн}}^{\text{орто}} - E_{\text{осн}}^{\text{пара}} = \frac{\alpha^2}{4}. \quad (10)$$

Энергию расщепления удобно выразить через $E_{\text{осн}}$ и E_g :

$$\Delta E(\text{осн}) = \frac{8E_{\text{осн}}^2}{E_g}. \quad (11)$$

Приведем экспериментальные значения запрещенной зоны и энергии связи экситона для полупроводников, зонная структура которых описывается моделью Кейна, и рассчитанную по ним величину орто-пара расщепления основного состояния.

Т а б л и ц а

Кристалл	E_g , мэВ	Литература	$E_{\text{осн}}$, мэВ	Литература	$\Delta E_{\text{осн}}$, мэВ
<i>GaSb</i>	813	[12]	1,8	[13]	0,03
<i>GaAs</i>	1410	[12]	5,1	[13]	0,15
<i>InSb</i>	236	[12]	0,5	[13]	0,009
<i>InAs</i>	425	[12]	1,8	[13]	0,06
<i>InP</i>	1416	[12]	6,5	[13]	0,27
<i>AlSb</i>	2320*	[14]	7,5	[13]	0,21
<i>ZnTe</i>	2301	[13]	13,0	[13]	0,6
<i>ZnSe</i>	2670	[12]	19,0	[13]	1,1
<i>ZnS</i>	3912	[13]	40,1	[13]	3,3
<i>CdTe</i>	1606	[13]	10,0	[13]	0,5
<i>CdSe</i>	1842	[13]	15,7	[13]	1,1
<i>CdS</i>	2583	[13]	29,4	[13]	2,7

* – Для *AlSb* приведено значение прямой запрещенной зоны.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 93-02-14700) и Международного научного фонда (грант N 9Z000).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Нокс Р. Теория экситонов. М., Мир, 1966.
- [2] Агранович В. М. Теория экситонов. М., Наука, 1968.
- [3] Андрюшин Е. А., Силин А. П. ФТТ, **35**, N 7, 1947 (1993).
- [4] Силин А. П. УФН, **147**, N 3, 485 (1985).
- [5] Валеико М. В., Засавицкий И. И., Матвеевко А. В.,
Мацонашвили Б. Н. Письма в ЖЭТФ, **43**, N 3, 140 (1986).
- [6] Гельмонт Б. Л., Кисин М. В. ФТП, N 8, 1493 (1983).
- [7] Келдыш Л. В. ЖЭТФ, **45**, 364 (1963).
- [8] Волков Б. А., Панкратов О. А. Письма в ЖЭТФ, **42**, N 4, 145 (1985).
- [9] Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая
электродинамика. М., Наука, 1989.
- [10] Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика, М.,
Наука, 1969.
- [11] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., Наука, 1989.
- [12] Аронзон Б. А., Лазарев С. Д., Мейлихов Е. З. Физические свойства
полупроводниковых материалов, Институт атомной энергии им. Курчатова, 1973.
- [13] Blassey D. F. Phys. Rev., **В 3**, N 4, 1382 (1971).
- [14] Landolt-Börnstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science
and Technology, **17A**, Springer-Verlag, Berlin, 1983.

Поступила в редакцию 4 апреля 1995 г.