

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭКСИТОНА И ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА С УЧЕТОМ ЭКСИТОННЫХ ЭФФЕКТОВ В РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННОЙ ПРОВОЛОКЕ

С. Л. АРУТЮНЯН, Э. М. КАЗАРЯН

Рассмотрено влияние границ тонкой проволоки и кулоновского взаимодействия электрона и дырки в плоскости сечения проволоки на экситонные состояния. Вычислен энергетический спектр экситона Мотта-Ваннье в проволоке при наличии размерного квантования. Получено также выражение для коэффициента поглощения света с учетом экситонных эффектов. Показано, что взаимодействие экситона со стенками проволоки и кулоновское взаимодействие электрона и дырки приводят к возникновению новых линий в спектре поглощения.

Влияние экситонных эффектов на физические свойства кристаллов при наличии квантового размерного эффекта (КРЭ) для тонких пленок исследовано довольно подробно. В частности, в работе [1] изучено влияние стенок пленки на энергетический спектр экситона в предположении, что радиус экситона много меньше толщины пленки, а в [2, 3] энергетический спектр экситона и коэффициент поглощения света вычислены при условии, что радиус экситона много больше толщины пленки.

В работе [4] исследовано влияние экситонных эффектов на коэффициент междузонного поглощения в проволоках при наличии КРЭ в предположении, что выполняется соотношение

$$\frac{R}{a_0} \ll 1, \quad (1)$$

где R — радиус проволоки, $a_0 = \frac{\epsilon \hbar^2}{\mu^* e^2}$ — радиус Бора экситона Мотта-Ваннье, ϵ — диэлектрическая постоянная проволоки, а μ^* — приведенная масса электрон-дырочной пары. При полном пренебрежении кулоновским взаимодействием электрона и дырки в плоскости сечения проволоки уравнение Ваннье распадается на три уравнения, два из которых описывают движение электрона и дырки в плоскости сечения проволоки, а третье — движение по оси проволоки с одномерным кулоновским потенциалом взаимодействия.

Однако это приближение является довольно грубым. Для более корректного описания экситонных эффектов в тонкой проволоке необходимо как-то учесть кулоновское взаимодействие электрона и дырки в плоскости сечения проволоки. Для этого в настоящей работе используется метод разделения переменных, что приводит к значительным изменениям в результатах*).

*) В случае тонких пленок использование того же метода приводит к возникновению новых и смещению существующих линий в спектре поглощения света [5].

Если в соотношении (1) заменить R на радиус циклотронной орбиты $\lambda = \left(\frac{c\hbar}{eH}\right)^{1/2}$, то критерий (1) будет соответствовать условию применимости адиабатического приближения при рассмотрении движения кулоновски связанной пары в магнитном поле, когда движение в магнитном поле считается быстрым по сравнению с движением в кулоновском поле. В работе [6] для водородоподобной системы в сильном магнитном поле применялся метод разделения переменных, который использовался в [7, 8] при изучении диамагнитного экситона.

1. Если выполняется соотношение (1), то аналогично [6] для энергии и волновой функции экситона в цилиндрической системе координат соответственно имеем

$$E_{\beta nl} = E_{nl} + E_{\beta},$$

$$\Psi_{\beta nl} = \Psi_{nl}(\rho, \varphi) \frac{\exp(ikz)}{L^{1/2}} U_{lk}(z) X_{\beta}(z). \quad (2)$$

Здесь

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2\mu^*} \frac{(\lambda_l^{|n|})^2}{R^2}, \quad \Psi_{nl} = \frac{e^{in\varphi} J_{|n|}\left(\lambda_l^{|n|} \frac{\rho}{R}\right)}{\pi^{1/2} R J_{|n|+1}(\lambda_l^{|n|})}, \quad n=0, \pm 1,$$

$\lambda_l^{|n|}$ — значение i -го корня функции Бесселя $J_{|n|}(x)$, k — волновой вектор по оси z проволоки, l — зонный индекс, U_{lk} — одномерная функция Блоха, а E_{β} и X_{β} определяются из уравнения Шредингера

$$\frac{d^2 X_{\beta}}{dz^2} + \frac{2\mu^*}{\hbar^2} (E_{\beta} - V_{nl}(z)) X_{\beta} = 0, \quad (3)$$

где

$$V_{nl}(z) = \int_0^{2\pi} \int_0^R |\Psi_{nl}(\rho, \varphi)|^2 \left(-\frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{\rho^2 + z^2}} \right) \rho d\rho d\varphi$$

есть эффективный потенциал, который можно аппроксимировать следующим выражением:

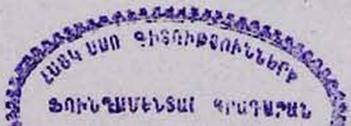
$$V_{nl}(z) = -\frac{e^2}{\varepsilon(a+|z|)}, \quad a = cR, \quad c = \frac{J_{|n|+1}^2(\lambda_l^{|n|})}{2 \int_0^1 J_{|n|}^2(\lambda_l^{|n|} x) dx} \sim 1.$$

а) Для дискретного спектра энергии после подстановок

$$E_{\beta} = -\frac{\hbar^2}{2\mu^*} \frac{1}{a_0^2 \beta^2}, \quad x = \frac{2(a+|z|)}{a_0 \beta}$$

можно убедиться, что решение уравнения (3) есть

$$X_{\beta}(x) = NW_{\beta} \frac{1}{2} \left(\frac{2(a+|z|)}{a_0 \beta} \right).$$



где N — нормировочный множитель, а $W_{\beta \frac{1}{2}}(x)$ — функция Уиттекера.

Вследствие инвариантности потенциала $V_{nl}(z)$ относительно преобразования $z \rightarrow -z$ собственные функции разделяются на четные и нечетные, а собственные значения энергии определяются из уравнений (см. [9])

$$\left(\frac{d}{dx} X_{\beta}(x) \right)_{x=\frac{2a}{a_0\beta}} = 0 \quad (\text{четные состояния}),$$

$$X_{\beta}\left(\frac{2a}{a_0\beta}\right) = 0 \quad (\text{нечетные состояния}).$$

Используя разложение функции Уиттекера при $x \ll 1$ [8], для квантовых дефектов $\delta l = \beta - l_0$ ($l_0 = 0, 1, 2, \dots$) из условий (4) получим следующие выражения:

$$\delta n = \begin{cases} \frac{1}{\ln\left(\frac{a_0}{cR}\right)^2} & \text{при } l_0 = 0 \\ \frac{1}{\ln\left(\frac{a_0}{cR}\right)} & \text{при } l_0 \neq 0 \end{cases} \left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{четные состояния,} \\ \text{нечетные состояния.} \end{array}$$

Таким образом, энергетический спектр экситона в размерно-квантованной проволоке в двухзонной модели ($l=c, v$) имеет следующий вид:

$$E_{nl n' l' e} = \Delta + E_{n' c}^{i'} + E_{n v}^i - \frac{R_{ex}}{(l_0 + \delta n)^2},$$

где Δ — ширина энергетической щели одномерной зоны, $R_{ex} = \frac{\mu^* e^4}{2 \hbar^2 \epsilon^2}$, а δn дается выражением (5). Аналогично случаю диамагнитного экситона энергия основного состояния экситона в размерно-квантованной проволоке становится конечной, а двухкратное вырождение снимается (уровни с $l_0 = 1, 2, \dots$ оказываются дублетами).

б) В случае непрерывного спектра волновую функцию можно записать, используя аналогию с волновой функцией частицы, рассеивающейся в „искаженном“ кулоновском поле [10]. Введя обозначения $E_{\beta} = \frac{\hbar^2}{2\mu^*} \frac{1}{\alpha_0^2 \beta^2}$ и $x = \alpha + |z|$, для волновой функции при малых аргументах получаем

$$X_{\beta}(x) = \frac{Ax}{\beta \alpha_0} \cos \theta + \frac{\sin \theta}{A} \left\{ 1 - \frac{2x}{\alpha_0} \left[\ln \frac{2x}{\alpha_0} + 2\gamma - 1 - \operatorname{Re} \theta(-i\beta) \right] \right\}, \quad (6)$$

где $A^2 = \frac{2\pi\beta}{1 - \exp(-2\pi\beta)}$, $\theta(x) = \ln x + \frac{1}{2x} - \psi(x+1)$, γ — постоянная Эйлера, $\psi(x) = \frac{d}{dx} \Gamma(x)$, а $\theta \approx \sin \theta \ll 1$ — фазовый дефект, который определяется из (4):

$$\theta = \begin{cases} -\frac{A^2}{2\beta \ln \frac{\alpha_0}{2cR}} & \text{(четные состояния),} \\ -\frac{A^2 cR}{\beta \alpha_0} & \text{(нечетные состояния).} \end{cases} \quad (7)$$

2. Коэффициент поглощения с учетом экситонных эффектов имеет вид [11] $\alpha(\omega) = \alpha_0 S$, где ω — частота падающего излучения, $\alpha_0(\omega)$ — коэффициент поглощения для полупроводников без учета экситонных эффектов, а S — множитель, обусловленный экситонным поглощением. Для нелегированной проволоки в двухзонном приближении при $T = 0$ $\alpha_0(\omega)$ имеет вид [12]

$$\alpha_0(\omega) = \sum_{nn'ii'} A' (\hbar\omega - \Delta - E_{n'c}' - E_{nv}^i)^r, \quad (8)$$

где

$$A' = \frac{8\pi e^2 \hbar^2}{s\mu^2 c \omega \varepsilon^{1/2}} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{1+r} |A_r|^2 K_{ni}^{n'i'}(q_{\perp} R) \theta(\hbar\omega - \Delta - E_{n'c}' - E_{nv}^i) \cos^2 \gamma,$$

$r = -\frac{1}{2}$ для „разрешенных“ и $r = \frac{1}{2}$ для „запрещенных“ переходов,

q_{\perp} — компонента импульса световой волны в сечении s , γ — угол между вектором поляризации волны и осью проволоки, $\theta(x)$ — единичная ступенчатая функция,

$$A_{-\frac{1}{2}} = L_{cv}(0), \quad A_{\frac{1}{2}} = L'_{cv}(0), \quad L_{cv} = \frac{1}{L} \int_0^L U_{ck}^* \frac{\partial}{\partial z} U_{vk} dz,$$

$$K_{ni}^{n'i'}(q_{\perp} R) = \left\{ 2 \int_0^1 \frac{J_{|n'|}(\lambda_i^{|n'|} x) J_{|n|}(\lambda_i^{|n|} x)}{J_{|n'+1|}(\lambda_i^{|n'|}) J_{|n'+1|}(\lambda_i^{|n|})} J_{n-n'}(q_{\perp} R x) x dx \right\}^2.$$

а) В случае дискретного спектра для „разрешенных“ переходов с учетом (5) и разложения функции Уиттекера при $x \ll 1$ для множителя S , учитывающего экситонные эффекты, имеем

$$S = |X_{l_0}(0)|^2 = \begin{cases} \frac{2}{3} \frac{\ln \frac{\alpha_0}{2cR}}{\alpha_0} & \text{при } l_0 = 0 \\ \frac{1}{2\alpha_0 l_0^3 \left(\ln \frac{\alpha_0}{2cR}\right)^2} & \text{при } l_0 \neq 0 \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{четные состояния,} \\ \text{нечетные состояния.} \end{matrix} \quad (9)$$

В отличие от результатов [4], где «разрешенные» переходы не дают вклада в коэффициент поглощения, в данном случае для четных состояний допускаются «разрешенные» переходы, причем интенсивность переходов с $l_0 \neq 0$ много меньше интенсивности перехода с $l_0 = 0$.

Для «запрещенных» переходов имеем

$$S = |X'_{l_0}(0)|^2 = \begin{cases} \frac{2}{\alpha_0^4 l_0^3} \left[1 - \frac{4cR}{\alpha_0} \ln \left(\frac{\alpha_0}{2cR} \right) \right], & \text{нечетные состояния,} \\ 0, & \text{четные состояния.} \end{cases} \quad (10)$$

Отсюда видно, что по сравнению с [4] интенсивность поглощения в нашем случае уменьшается из-за наличия дополнительного слагаемого

$$-\frac{8cR}{\alpha_0^4 l_0^3} \ln \frac{\alpha_0}{2cR} \text{ в выражении (10) для } S.$$

б) В случае непрерывного спектра из (6) с учетом (8) для «разрешенных» переходов получаем

$$S = \begin{cases} \frac{1}{\left(\ln \frac{\alpha_0}{2cR} \right)^2} \frac{1}{\alpha (1 - e^{-2\pi\alpha})}, & \text{четные состояния,} \\ 0, & \text{нечетные состояния,} \end{cases} \quad (11)$$

где

$$\alpha = \left(\frac{R_{ex}}{\hbar\omega - \Delta - E_{n'c}^i - E_{n'v}^i} \right)^{1/2}.$$

Аналогично для «запрещенных» переходов имеем

$$S = \begin{cases} \frac{2\pi\alpha}{1 - e^{-2\pi\alpha}} \left[1 - \frac{4cR}{\alpha_0} \ln \left(\frac{\alpha_0}{2cR} \right) \right], & \text{четные состояния,} \\ 0, & \text{нечетные состояния.} \end{cases} \quad (12)$$

Из выражений (8), (11) и (12) легко убедиться, что вблизи порога поглощения ($\alpha \rightarrow \infty$) $\alpha(\omega)\hbar\omega \rightarrow \text{const}$ как для четных, так и для нечетных состояний. Вдали от порога поглощения ($\alpha \rightarrow 0$) имеем

$$\alpha(\omega) = \sum_{\substack{nn' \\ ii'}} \frac{A'(\hbar\omega - \Delta - E_{nc}^i - E_{n'v}^i)^{1/2}}{2\pi R_{ex} \left(\ln \frac{\alpha_0}{2cR} \right)} \text{ — для „разрешенных“ переходов,} \quad (13)$$

$$\alpha(\omega) = \sum_{\substack{nn' \\ ii'}} A' \left(1 - \frac{4cR}{\alpha_0} \ln \frac{\alpha_0}{2cR} \right) (\hbar\omega - \Delta - E_{nc}^i - E_{n'v}^i)^{1/2} \text{ — для „запрещенных“ переходов.}$$

Таким образом, из (13) видно, что коэффициент поглощения для «разрешенных» переходов по величине довольно мал, причем экситонные эффекты существенным образом меняют ход зависимости коэффициента поглощения от частоты падающего света. В случае «запрещенных» перехо-

дов коэффициент поглощения отличается от результатов работы [4] на множитель $\left(1 - \frac{4cR}{a_0} \ln \frac{a_0}{2cR}\right)$.

Ереванский государственный университет

Поступила 6.VII.1976

ЛИТЕРАТУРА

1. П. Г. Харпер, Дж. Э. Хилдер. Спектры экситонов в тонких кристаллах, Труды IX Международной конференции по физике полупроводников, том I, Изд. Наука, М., 1969.
2. R. Fivaz. J. Phys. Chem. Sol., 28, 839 (1966).
3. Э. М. Казарян, Р. Л. Энфиаджян. ФТП, 5, 2002 (1971).
4. А. А. Киракосян, Э. М. Казарян. Сб. ВИНТИ «Рипорт», № 4, 1975.
5. С. Л. Арутюнян, Э. М. Казарян. ФТП, 9, 2214 (1975).
6. L. J. Schiff, H. Snyder. Phys. Rev., 55, 59 (1939).
7. R. T. Elliot, R. Loudon. J. Phys. Chem. Sol., 15, 196 (1960).
8. H. Hasegawa, R. E. Howard. J. Phys. Chem. Sol., 21, 179 (1961).
9. R. Loudon. Amer. J. Phys., 27, 649 (1959).
10. Н. Мотт, Г. Мессе. Теория атомных столкновений, Изд. Мир, 1969.
11. Оптические свойства полупроводников A^3B^5 , Сб. статей под ред. Р. Уиллардсона и А. Бира, Изд. Мир, М., 1970.
12. А. А. Киракосян, Э. М. Казарян. Ученые записки ЕГУ, 3, 44 (1974).

ԷՔՍԻՏՈՆԻ ԷՆԵՐԳԻԱՅԻ ՍՊԵԿՏՐԸ ԵՎ ԼՈՒՅՍԻ ԿԼԱՆՈՒՄԸ
 ԶԱՓԱՅԻՆ-ՔՎԱՆՏԱՑՎԱԾ ԼԱՐՈՒՄ ԷՔՍԻՏՈՆԱՅԻՆ
 ԷՆԵՐԳԻԱՅԻ ԶԱՇՎԱՌՈՒՄՈՎ

Ս. Լ. ՀԱՐՈՒՅՏՈՒՆՅԱՆ, Է. Մ. ԿԱԶԱՐՅԱՆ

Քննարկված է բարակ լարի սահմանների ազդեցությունը էլեկտրոն-խոռոչ կուպլոնյան փոխազդեցության վրա առանցքի ուղղությամբ: Հաշվված է Մոտտ-Վանյեի էքսիտոնի էներգետիկ սպեկտրը և ալիքային ֆունկցիաները: Ստացված է նույնպես արտահայտություն լույսի կլանման գործակցի համար, երբ հաշվի են առնվում էքսիտոնային էֆեկտները: Ցույց է տրված, որ էքսիտոնի փոխազդեցությունը լարի պատերի հետ բերում է կլանման դիսկրետ սպեկտրում նոր գծերի առաջացմանը:

ENERGY SPECTRUM OF EXITON AND LIGHT ABSORPTION
 WITH DUE REGARD FOR EXITONIC EFFECTS
 IN DIMENSION-QUANTIZED WIRE

S. L. HARUTUNYAN, E. M. KAZARYAN

The influence of thin wire borders on the electron-hole Coulomb interaction in the direction of its axis is considered. The energy spectrum and wave functions of the Wannier-Mott exciton is calculated. The expression for the light absorption coefficient is obtained taking into account the excitonic effects. It is shown, that the interaction of the exciton with walls of wire leads to the rise of new lines in the discrete absorption spectrum.