

ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ТОНКОЙ КВАНТУЮЩЕЙ
ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПРОВОЛОКЕ С НЕПАРАБОЛИЧЕСКИМ
ЗАКОНОМ ДИСПЕРСИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА

А. П. ДЖОТЯН, Э. М. КАЗАРЯН, Ю. В. КАРАКАШЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 25 марта 1993 г.)

Исследованы энергетический спектр и плотность состояний, а также межзонное поглощение света в квантующих проволоках с непараболическим законом дисперсии носителей заряда. Рассмотрено также влияние кулоновского взаимодействия частиц на спектральную кривую межзонного поглощения. Учет непараболическости закона дисперсии носителей заряда приводит к существенному смещению линии поглощения на основное состояние одномерного экситона.

В достаточно тонких проволоках, где длина волны де-Бройля носителей заряда сравнима с радиусом сечения, имеют место квантовые размерные эффекты (КРЭ) [1]. В работе [1] вычислены энергетический спектр носителей и плотность состояний в тонкой проволоке с учетом КРЭ в случае стандартного закона дисперсии ($E=p^2/2m$). Межзонное поглощение света в квантующих проволоках при параболическом законе дисперсии носителей заряда рассмотрено в [2].

Как правило, закон дисперсии в реальных полупроводниках имеет более сложный вид. Так, например, в полупроводниковых соединениях типа A^3B^5 , как показал Кейн [3], учет «взаимодействия» зон приводит к непараболическости закона дисперсии носителей заряда. В частности, в двухзонном приближении

$$E_{c,v}(k) = \pm \frac{E_g}{2} \left[1 + \left(\frac{2\hbar s k}{E_g} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{E_g}{2},$$

где $E_g = 2m_n s^2$ — ширина запрещенной зоны, m_n — эффективная масса электрона на дне зоны проводимости, s — параметр, пропорциональный матричному элементу «взаимодействия» зон, имеющий размерность скорости (для $InSb$ $s \approx 10^8$ см/с), k — волновой вектор частицы.

Будем предполагать, что в тонких проволоках полупроводниковых соединений A^3B^5 сохраняется изотропный кейновский закон дисперсии носителей заряда. С учетом этого в настоящей работе исследуются энергетический спектр и плотность состояний, а также межзонное поглощение света в квантующих проволоках с непараболическим законом дисперсии для носителей заряда. Рассмотрено влияние кулоновского взаимодействия частиц на спектральную кривую поглощения.

1. Энергетический спектр и плотность состояний

Как и в работе [1], энергетический спектр носителей заряда определим из условия обращения волновой функции в нуль на границе проволоки, что эквивалентно аппроксимации ее потенциала бесконечно глубокой потенциальной ямой. Будем рассматривать проволоку («ус») с круглым сечением радиуса R_0 .

Уравнение Шредингера для одной свободной частицы с кейновским законом дисперсии имеет вид

$$\left[-\hbar^2 s^2 \Delta + \frac{E_g^2}{4} - \left(E + \frac{E_g}{2} \right)^2 \right] \psi(r) = 0, \quad (1.1)$$

решением которого для носителей заряда с учетом одномерной зонной структуры вдоль оси проволоки является

$$\psi_{l,mnk}(r) = \frac{1}{(SL)^{1/2} J_{|m|+1}(\lambda_n^{l|m|})} J_{|m|} \left(\lambda_n^{l|m|} \frac{r}{R_0} \right) e^{im\varphi} e^{ikz} u_{lk}(z), \quad (1.2)$$

где S — площадь поперечного сечения, L — длина проволоки, магнитное квантовое число m нумерует функции Бесселя $J_{|m|}(x)$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), $\lambda_n^{l|m|}$ — значение n -го корня функции Бесселя, l — зонный индекс, $u_{lk}(z)$ — одномерные амплитуды функций Блоха.

Энергетический спектр невырожден и непрерывен по одному квантовому числу:

$$E_{nmk} = \frac{1}{2} \left[E_g^2 + 4\hbar^2 s^2 k^2 + \frac{4\hbar^2 s^2 (\lambda_n^{l|m|})^2}{R_0^2} \right]^{1/2} - \frac{E_g}{2}, \quad (1.3)$$

что также может быть записано в виде

$$E_{nmk}(E_{nmk} + E_g) = \frac{\hbar^2 s^2 (\lambda_n^{l|m|})^2}{R_0^2} + \hbar^2 s^2 k^2, \quad (1.4)$$

где k — волновой вектор носителя заряда вдоль оси проволоки.

Стандартная процедура вычисления плотности состояний на единицу объема приводит к выражению:

$$g(E) = \frac{(2m_n)^{1/2}}{2\pi\hbar S} \sum_{n,m} \frac{2}{E_g^{1/2}} \frac{E + \frac{E_g}{2}}{\left[\left(E + \frac{E_g}{2} \right)^2 - \frac{E_g^2}{4} - \frac{\hbar^2 s^2 (\lambda_n^{l|m|})^2}{R_0^2} \right]^{1/2}}. \quad (1.5)$$

2. Коэффициент поглощения света

Воспользуемся известным выражением для коэффициента поглощения света

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega^{1/2}}{c} \sum_{s,s'} f_s (1 - f_{s'}) \frac{2\pi}{\hbar} |\langle s | H_I | s' \rangle|^2 \delta(E_{s'} - E_s - \hbar\omega), \quad (2.1)$$

где ω , c — частота и скорость света, χ — диэлектрическая проницаемость среды, f_s , $f_{s'}$ — функции распределения для начального и конечного состояний, E_s , $E_{s'}$ — энергии этих состояний, s , s' — совокуп-

ность квантовых чисел, характеризующих начальное и конечное состояния электрона в тонкой проволоке. Гамильтониан взаимодействия света со средой имеет вид

$$H_i = -\frac{ie\hbar}{m_0 c} (A \vec{\Delta}), \quad (2.2)$$

где A — вектор-потенциал падающей световой волны, m_0 — масса свободного электрона.

Как и в [2], предполагается наличие одномерной зонной структуры проволоки, обуславливающей возможность продольных междозонных переходов при взаимодействии со световой волной соответствующей поляризации.

Рассмотрим междозонные переходы в тонкой полупроводниковой проволоке с изотропным кейновским законом дисперсии для носителей заряда в двузонном приближении при $T=0$ ($f_v=1$, $f_c=0$) при $q_z \ll k$ (q_z — z -компонента вектора световой волны), то есть при вертикальных переходах. При этом нельзя пренебречь поперечной компонентой $q_{\perp}$ волнового вектора световой волны из-за неопределенности волнового вектора электрона в плоскости, перпендикулярной оси проволоки.

С учетом (1.3) запишем выражения для начального и конечного состояний носителей заряда в проволоке в виде

$$E_{s',s} = E_{c,v} = \pm \frac{1}{2} \left[E_g^2 + 4\hbar^2 s^2 k^2 + \frac{4\hbar^2 s^2 (\lambda_n^{[m]})^2}{R_0^2} \right]^{1/2} - \frac{E_g}{2}. \quad (2.3)$$

(За начало отсчета энергии берется дно зоны проводимости).

Для коэффициента междозонного поглощения при разрешенных переходах, следуя работе [2], имеем:

$$\alpha_p = \frac{16\pi^2 e^2 \hbar^2}{\chi^{1/2} c m^2 \omega L S} \cos^2 \beta |L_{cv}(0)|^2 \times \sum_{m,m';n,n'} K_{mn}^{m'n'}(q_{\perp} R_0) \int dk \delta(\hbar\omega - E_{s'} + E_s), \quad (2.4)$$

где

$$L_{cv}(k) = \frac{1}{L} \int_0^1 u_{ck}^*(z) \frac{du_{vk}(z)}{dz} dz, \quad (2.5)$$

$$K_{mn}^{m'n'}(q_{\perp} R_0) = \left[2 \int_0^1 \frac{J_{|m'|}(\lambda_n^{[m']}) J_{|m|}(\lambda_n^{[m]})}{J_{|m'|+1}(\lambda_n^{[m']}) J_{|m|+1}(\lambda_n^{[m]})} J_{|m'-m|}(q_{\perp} R_0 x) x dx \right]^2, \quad (2.6)$$

β — угол между вектором поляризации световой волны и осью oz .

Коэффициент поглощения при разрешенных переходах можно представить в виде

$$\alpha_p(\omega) = \alpha_{op}(\omega) + \delta\alpha_p, \quad (2.7)$$

где

$$\alpha_{op} = \frac{B}{\hbar s} \cos^2 \beta |L_{cv}(0)|^2 \sum_{n,m} \frac{\hbar\omega}{\left[\hbar^2 \omega^2 - E_g^2 - \frac{4\hbar^2 s^2 (\lambda_n^{[m]})^2}{R_0^2} \right]^{1/2}}, \quad (2.8)$$

$$B = \frac{16\pi^2 e^2 \hbar^2}{\kappa^{1/2} c m^2 \omega^2 L_S}, \quad (2.9)$$

а малая добавка $\delta\alpha_p$, пропорциональная $(q_\perp R_0)^2$ (для *InSb* $q_\perp R_0 \approx 0,1$ при $R_0 \approx 100 \text{ \AA}$), определяется правилами отбора

$$\delta\alpha_p = \begin{cases} \delta\alpha_{m,m'+1} & m' = m-1 \\ \delta\alpha_{m,m'-1} & m' = m+1 \end{cases}. \quad (2.10)$$

В случае запрещенных переходов, когда $L_{cv}(0) = 0$, а $L'_{cv}(0) \neq 0$, пренебрегая членами, пропорциональными $(q_\perp R_0)^2$, получаем

$$\alpha_{03} = \frac{1}{4\hbar^3 s^3} B \cos^2 \theta |L'_{cv}(0)|^2 \sum_{n,m} \hbar \omega \left[\hbar^2 \omega^2 - E_g^2 - \frac{4\hbar^2 s^2 (\lambda_n^{lm})^2}{R_0^2} \right]^{1/2}. \quad (2.11)$$

В области малых энергий выражения (2.8) и (2.11) для коэффициентов поглощения, для разрешенных и запрещенных переходов, как и выражение (1.5) для плотности состояний, переходят в соответствующие выражения для проволоки со стандартным законом дисперсии носителей заряда [1,2]. В общем случае, как и следовало ожидать, учет непараболичности закона дисперсии носителей заряда приводит к увеличению плотности состояний в каждой из проволочных подзон и вследствие этого к росту межзонного поглощения света (как для разрешенных, так и для запрещенных переходов) по сравнению со случаем стандартного закона дисперсии (рис. 1). Одним из

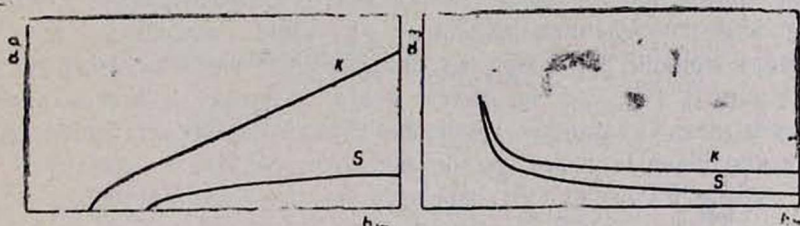


Рис. 1. Ход кривых поглощения для разрешенных (а) и запрещенных переходов в тонкой проволоке в одной проволочной подзоне в случае стандартного (s) и кейновского (к) законов дисперсии носителей заряда

проявлений непараболичности закона дисперсии является сдвиг края поглощения в область малых энергий, существенный при малых радиусах «усов» (при $R_0 \approx 100 \text{ \AA}$ $\Delta \hbar \omega \approx 10^{-2}$ эВ).

3. Учет экситонных эффектов

Учет экситонных эффектов приводит к вычислению известного экситонного множителя S_{ex} [4]:

$$S_{ex} = \begin{cases} |\Phi(0)|^2 & \text{— для разрешенных переходов} \\ |\Phi'(0)|^2 & \text{— для запрещенных переходов.} \end{cases}$$

Здесь $\Phi(z)$ — решение уравнения Шредингера для кейновского экситона в тонкой проволоке в системе центра инерции:

$$\left[-4\hbar^2 s^2 \Delta + E_g^2 - \left(E + E_g + \frac{e^2}{z|z|} \right)^2 \right] \Phi(z) = 0. \quad (3.2)$$

Рассмотрим отдельно решения в области дискретного и непрерывного спектров.

а) Дискретный спектр

Решение (3.2) имеет вид

$$\Phi_0(z) = \frac{1}{(z_s a_0)^{1/2}} \exp\left(-\frac{|z|}{z_s a_0}\right), \quad N=0, \quad (3.3)$$

$$\Phi_N(z) = \left[\frac{2}{a_0^3 N^3 (N+1)^3} \right]^{1/2} z \exp\left(-\frac{|z|}{a_0 N}\right) L_N^1\left(\frac{2|z|}{a_0 N}\right), \quad N=1, 2, \dots, \quad (3.4)$$

где $L_N^1(z)$ — полиномы Лагерра.

Величина $\lambda_s = z_s a_0 = \hbar/\mu s$ (μ — приведенная масса экситона), входящая в выражение для волновой функции основного состояния, представляет собой аналог комптоновской длины волны $\lambda = \hbar/\mu c$, являющейся характерной величиной волновой функции основного состояния одномерного релятивистского атома водорода [5].

Таким образом, учет непараболичности приводит к локализации волновой функции основного состояния экситона в конечной области с характерным размером λ_s . Вследствие этого трудности, связанные с δ -образным поведением волновой функции основного состояния экситона в тонкой проволоке со стандартным законом дисперсии носителей заряда [6], уже не имеют места, и потому в тонкой проволоке с кейновским законом дисперсии реализуются как разрешенные, так и запрещенные переходы на основное состояние экситона.

В случае разрешенного перехода на основное состояние

$$S_{ex} = |\Phi_0(0)|^2 = \frac{1}{\lambda_s}. \quad (3.5)$$

В случае запрещенного перехода на основное состояние

$$S_{ex} = |\Phi'_0(0)|^2 = \frac{1}{\lambda_s^3}. \quad (3.6)$$

Очевидно, что разрешенные переходы на возбужденные экситонные уровни ($N=1, 2, \dots$) отсутствуют, так как волновые функции в начале координат обращаются в нуль.

При запрещенных переходах на возбужденные уровни

$$S_{ex} = |\Phi'_N(0)|^2 = \frac{1}{a_0^3 N^3}, \quad N=1, 2, \dots \quad (3.7)$$

Вид S_{ex} в этом случае совпадает с результатом [2].

Как и в [2], возникает система уровней экситонных состояний,

подвешенных под дном каждой подзоны размерного квантования. При этом в случае непараболического закона дисперсии носителей, линия поглощения на основное состояние одномерного экситона существенно отделена от других; действительно, энергия основного состояния экситона $E_0 = \mu_s^* \alpha_s = \alpha_s \frac{E_g}{4}$ (для $InSb$ $\alpha_s \approx 10^{-1}$, $E_0 \approx 0,02$ эВ). Существенно меняется также отношение интенсивностей линий поглощения для запрещенных переходов на основное и первое возбужденное состояния: $S_{ex}^{(0)}/S_{ex}^{(1)} \approx 500$.

б) Непрерывный спектр

Решение уравнения Шредингера (3.2) в области непрерывного спектра имеет вид

$$\Phi = C|z| \exp(-i\varepsilon'|z|) F(1 + i\lambda'; 2, 2i\varepsilon'|z|), \quad (3.8)$$

где

$$i\lambda' = \frac{\alpha_s(E + E_g)}{(E_g^2 - (E + E_g)^2)^{1/2}}, \quad i\varepsilon' = \frac{1}{2\hbar s} (E_g^2 - (E + E_g)^2)^{1/2}. \quad (3.9)$$

В приближении $E \ll E_g$

$$\lambda' = \left[\frac{R_{ex}}{2E} \right]^{1/2}, \quad \varepsilon' = \frac{1}{a_0} \left[\frac{2E}{R_{ex}} \right]^{1/2} \quad (3.10)$$

(R_{ex} — ридберговская энергия экситона), и потому в кулоновых единицах

$$\Phi = C|z| \exp(-i(2E)^{1/2}|z|) F\left(1 + \frac{i}{(2E)^{1/2}}; 2; i(2E)^{1/2}|z|\right). \quad (3.11)$$

Из условия нормировки получаем для C :

$$C = \left[\int_0^1 |z|^2 \exp(-i(2E)^{1/2}|z|) F\left(1 + \frac{i}{(2E)^{1/2}}; 2; i(2E)^{1/2}|z|\right)^2 dz \right]^{-1/2}. \quad (3.12)$$

Данный интеграл вычислялся в [7]:

$$C^2 = \frac{2\pi}{(2E)^{1/2} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{(2E)^{1/2}}\right) \right]}. \quad (3.13)$$

Спектр кейновского экситона в области непрерывного спектра дается выражением

$$E_{total} = E_g + E_{m',c}^n + E_{m,v}^n + E, \quad (3.14)$$

где

$$E = \frac{R_{ex}}{\gamma^2}, \quad E_{m',c}^n = \frac{\hbar^2 (\lambda_n^{m'})^2}{2m_n R_0^2}, \quad E_{m,v}^n = \frac{\hbar^2 (\lambda_n^m)^2}{2m_n R_0^2}.$$

Как видно из (3.11), при оптическом поглощении в непрерывном спектре разрешенные переходы отсутствуют, а для запрещенных переходов коэффициент поглощения пропорционален

$$|\Phi'(0)|^2 = \frac{2\pi\gamma}{1 - \exp(-2\pi\gamma)}, \quad (3.15)$$

где

$$\gamma = \left[\frac{R_{ex}}{\hbar\omega - E_g - E_{m',c}^n - E_{m,v}^n} \right]^{1/2}. \quad (3.16)$$

С учетом экситонных эффектов коэффициент поглощения имеет вид

$$\alpha_3(\omega) = \sum \alpha_{03}(\omega) |\Phi'(0)|^2, \quad (3.17)$$

где суммирование ведется по всем подзонам размерного квантования. В пренебрежении членами, пропорциональными квадрату малого параметра $q \perp R_0$, для пороговой энергии $\hbar\omega = \left[E_g^2 + \frac{4\hbar^2 s^2 (\lambda_n^{(m)})^2}{R_0^2} \right]^{1/2}$

коэффициент поглощения в отдельной проволочной подзоне, как следует из (2.11),

$$\alpha_{03}^{(m,n)}(\omega) = 0.$$

При учете экситонных эффектов $\alpha_3^{(m,n)}$ отличен от нуля

$$\begin{aligned} \alpha_3^{(m,n)} \simeq & \frac{B}{4\hbar^3 s^3} \cos^2 \beta |L'_{cv}(0)|^2 \hbar\omega \left[\hbar^2 \omega^2 - E_g^2 - \frac{4\hbar^2 s^2 (\lambda_n^{(m)})^2}{R_0^2} \right]^{1/2} \times \\ & \times 2\pi R_{ex}^{1/2} |\hbar\omega + E_g + E_{m,c}^n + E_{m,v}^n|^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

При энергиях, больших пороговой,

$$\begin{aligned} \alpha_3^{(m,n)} \simeq & \frac{B}{4\hbar^3 s^3} \cos^2 \beta |L'_{cv}(0)|^2 \hbar\omega \times \\ & \times \frac{2\pi R_{ex}^{1/2} [\hbar\omega + E_g + E_{m,c}^n + E_{m,v}^n]^{1/2}}{1 - \exp \left[-2\pi \left[\frac{R_{ex}}{\hbar\omega - E_g - E_{m',c}^n - E_{m,v}^n} \right]^{1/2} \right]}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Таким образом, в области непрерывного кулоновского спектра учет непараболичности также приводит к некоторому возрастанию коэффициента межзонного поглощения.

При больших энергиях падающей волны экситонные эффекты, как и следовало ожидать, уже не играют существенной роли, и (3.19) переходит в выражение (2.11) для коэффициента поглощения при запрещенных переходах в тонких проволоках с кейновским законом дисперсии носителей заряда. Качественный ход кривой поглощения

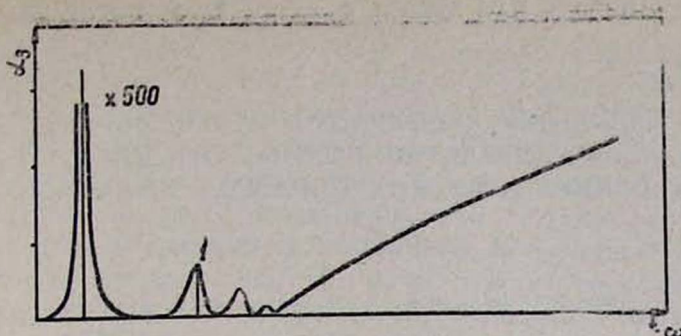


Рис. 2. Качественный ход кривой поглощения для запрещенных переходов в тонкой проволоке при учете экситонных эффектов в случае кейновского закона дисперсии носителей заряда (в одной проволоочной подзоне).

для запрещенных переходов в тонкой проволоке при учете экситонных эффектов для кейновского закона дисперсии носителей заряда представлен на рис. 2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. А. Тавгер, М. Д. Блох, Е. Л. Фишман. ФММ, 33, 1137 (1972).
2. Э. М. Казарян, А. А. Киракосян. Сб. ВИМИ Репорт В4 (1975).
3. E. O. Kane. J. Phys. Chem. Solids, 1, 249 (1957)
4. Оптические свойства полупроводников A^3B^5 . Сб. статей под ред. Р. Уиллард-сона и А. Бира. М., Мир, 1970.
5. H. N. Spector, J. Lee. Am. J. Phys., 53, 248 (1985).
6. R. Loudon. Am. J. Phys., 27, 649 (1959).
7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1989.

ԼՈՒՅՍԻ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ԲԱՐԱԿ ՔՎԱՆՏԱՅՎԱԾ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԼԱՐՈՒՄ ԼԻՑՔԱԿԻՐՆԵՐԻ ՈՉ ՊԱՐԱԲՈԼԻԿԱՆ ԴԻՍՊԵՐՍԻԱՅԻ ՕՐԵՆՔԻ ԴԵՊՔՈՒՄ

Ա. Պ. ԶՈՐՅԱՆ, Է. Մ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ, ՅՈՒ. Վ. ԿԱՐԱԿԱՇԻԱՆ

Լիցքակիրների ոչ պարարտական օրենքի դեպքում ուսումնասիրված են էներգետիկ սպեկտրը և վիճակների խտությունը, ինչպես նաև լույսի միջդոտիական կլանումը քվանտացված լարերում: Դիտարկված է նաև մասնիկների կուլոնյան փոխազդեցության ազդեցությունը միջդոտիական կլանման սպեկտրային կորի վրա: Լիցքակիրների դիսպերսիայի օրենքի ոչ պարարտականության հաշվառումը բերում է միաչափ էքսիտոնի հիմնական վիճակին համապատասխանող կլանման գծի զգալի շեղման:

LIGHT ABSORPTION IN THIN QUANTIZING SEMICONDUCTOR WIRES WITH NON-PARABOLIC LAW OF DISPERSION OF CHARGE CARRIERS

A. P. DJOTIAN, E. M. KAZARIAN, Y. V. KARAKASHIAN

Interband absorption of light in a quantizing wire with non-parabolic dispersion law of charge carriers, as well as energy spectrum and state densities are studied. The effect of Coulomb interaction between particles on the spectral curve of interband absorption is considered. Non-parabolic dispersion law of charge carriers leads to an essential displacement of absorption line to ground state of one-dimensional exciton.