УДК 621.315

ВНУТРИЗОННЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ НАНОСФЕРИЧЕСКОМ СЛОЕ

В.А. АРУТЮНЯН

Гюмрийский филиал Государственного инженерного университета Армении

К.С. АРАМЯН, Г.Ш. ПЕТРОСЯН

Арцахский государственный университет

(Поступила в редакцию 12 августа 2003 г.)

Для случая “сильного” квантования рассмотрены дипольные переходы между состояниями дискретного спектра одной и той же зоны в полупроводниковом сферическом слое. Рассчитан коэффициент внутризонного-межподзонного поглощения слабой волны. Показано, что величина и частота поглощения существенно зависят от геометрических размеров образца.

1. Введение

В последние годы значительный прогресс в нанотехнологии сделал возможным создание различных сферических наноструктур с размерами от нескольких до сотен нанометров, что в свою очередь стимулировало как экспериментальные, так и теоретические работы в этой области. Наряду со многими квазинульмерными системами в настоящее время интенсивно исследуются полупроводниковые нанокристаллиты в виде различных сферически-симметричных структур (см., напр., [1-8]). Интерес этот обусловлен прежде всего тем, что подобные гетерофазные системы являются очень перспективными материалами для создания оптических и электронных устройств нового поколения [1,5,9,10].

Одним из наиболее эффективных методов определения зонной структуры полупроводников, в том числе и низкоразмерных, как известно, является исследование их спектра оптического поглощения [11,12]. Среди множества оптоэлектронных явлений в низкоразмерных полупроводниках, в том числе наносферических, большой интерес проявляется к исследованию внутризонных переходов между состояниями размерного квантования одной и той же зоны (см., напр., [6,11-14]).

В этой связи определенный интерес представляет исследование внутризонных переходов в “отдельно взятом” нанокристаллическом слое, который может иметь применение как в “чистом виде”, так и в качестве состав-

ной компоненты при создании слоистых гетероструктур с заранее заданными и требуемыми параметрами для того или иного слоя.

Среди множества подобных работ, касающихся именно сферических наноструктур, отметим, в частности, работы [6,14], где в рамках модели жесткого ротатора для одноэлектронных состояний рассмотрены внутризонные оптические переходы в системе невзаимодействующих электронов, находящихся на поверхности наносферы [6], и исследовано влияние однородного магнитного поля на эти переходы [14]. Цель настоящей работы – рассмотрение внутризонных дипольных переходов в режиме “сильного” квантования, когда энергия размерного квантования носителей заряда в пределах сферического слоя много больше энергии их кулоновского взаимодействия.

2. Одноэлектронные состояния в слое

Структуру будем рассматривать в виде композиции “кор”/слой/среда. Условие “сильного” квантования сводится к требованию

$$L^2 \ll a_L^2, \quad (1)$$

где L – толщина слоя, a_L – боровский радиус 3D-экситона в материале слоя. Предположим также, что слой достаточно “удален” от центра, т.е. наряду с условием (1) выполняется также и следующее условие:

$$L \ll R_1; \quad (L = R_2 - R_1), \quad (2)$$

где R_1 – радиус “кора”, R_2 – внешний радиус слоя.

При выполнении условий (1)-(2), по аналогии с фуллереном, слой в радиальном направлении можно аппроксимировать квантовой ямой, “свернутой в сферу” [15]:

$$U(r) = \begin{cases} 0; & \text{при } R_1 < r < R_2, \\ \infty; & \text{при } r \geq R_2; r \leq R_1. \end{cases} \quad (3)$$

Подобное модельное представление будет физически адекватным, если материал слоя по сравнению с материалом кора и внешней среды является узкозонным, и при перекрывающихся запрещенных зонах контактирующих материалов величина разрыва зонной энергии на интерфейсе много больше энергии размерного квантования носителей заряда в квантовой яме слоя. Типичными в этом смысле можно считать, в частности, композиции CdS/HgS/CdS, CdSe/ZnS/CdSe, CdS/PbS/CdS (см., напр., [2,4,8]). Для наноболочечной структуры CdS/HgS/CdS, например, глубина квантовой ямы слоя составляет порядка электрон-вольта, боровский радиус 3D-экситона в слое $a_L \sim 50$ нм, а в коре и среде $a_c \sim 3$ нм. Так что, если положить $R_1 \sim a_L$, то для названной структуры условия (1),(2) действительно будут иметь место, и, во всяком случае, для не сильно возбужденных состояний приближение модели (3) будет выполняться с достаточной точностью.

Одноэлектронные огибающие волновые функции в сферических координатах (r, ϑ, φ) будем искать в виде

$$\Psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = \frac{\chi(r)}{r} Y_{l,m}(\vartheta, \varphi), \quad (4)$$

где n, l, m – соответственно радиальное, орбитальное и азимутальное квантовые числа, $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ – нормированные шаровые функции. Для “радиального” уравнения Шредингера в приближении изотропной эффективной массы (μ) соответственно имеем:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + E\chi(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \chi(r) = 0, \quad (5)$$

где E – полная энергия частицы в слое. В случае потенциальной ямы (3) граничные условия для радиальной функции будут иметь следующий вид:

$$\chi(R_1) = \chi(R_2) = 0. \quad (6)$$

При $l = 0$ для $\chi(r)$ элементарно получаем:

$$\chi(r) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi m}{L} (r - R_1). \quad (7)$$

Для решения же (5) при $l \neq 0$ перейдем к переменной

$$\rho = r - R_1 \quad (8)$$

и ограничимся, с учетом условия (2), первым порядком по малой величине

$$\frac{\rho}{R_1} \ll 1. \quad (9)$$

Введя безразмерную переменную

$$\xi = \left(\frac{\varepsilon}{F} + \rho \right) \left(\frac{2\mu F}{\hbar^2} \right)^{1/3}, \quad (10)$$

вместо (5) приходим теперь к уравнению

$$\chi''(\xi) + \xi \chi(\xi) = 0. \quad (11)$$

Здесь мы использовали обозначения

$$\varepsilon = E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2}; \quad F = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2} \frac{2}{R_1}. \quad (12)$$

С учетом (2),(9) из (10) и (12) нетрудно увидеть, что в интервале $0 \leq \rho \leq L$ для переменной ξ имеем:

$$\xi \gg 1. \quad (13)$$

Решения уравнения (11), как известно, даются линейной комбинацией

функций Эйри первого и второго рода, которую, при выполнении условия (13), можно представить в следующем асимптотическом виде [16]:

$$\chi(\xi) \cong \frac{C_1}{\pi} \xi^{-\frac{1}{4}} \sin\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{C_2}{\pi} \xi^{-\frac{1}{4}} \cos\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right), \quad (14)$$

где C_1, C_2 – нормировочные константы.

Воспользовавшись теперь граничными условиями (6) и условием нормировки

$$\int_{R_1}^{R_2} |\chi(r)|^2 dr = \int_0^L |\chi(\rho)|^2 d\rho = 1, \quad (15)$$

для энергетического спектра и нормированных радиальных огибающих волновых функций, соответственно, получаем:

$$E \equiv E_{n,l} \cong \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu L^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1 R_2}; \quad (n=1,2,\dots), \quad (16)$$

$$\chi_{n,l}(\rho) \cong \sqrt{\frac{2}{L}} (1 - \alpha_{n,l} \rho) \sin \beta_{n,l} \rho, \quad (17)$$

где

$$\alpha_{n,l} = \frac{F_l}{4\varepsilon_{n,l}}; \quad \varepsilon_{n,l} = E_{1,0} n^2 - \frac{F_l L}{2}; \quad \beta_{n,l} = \frac{\pi}{L} \left(\frac{\varepsilon_{n,l}}{E_{1,0}} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (18)$$

причем

$$\alpha_{n,l} L \ll 1; \quad \beta_{n,l} L \leq 1. \quad (19)$$

3. Внутризонные-межподзонные переходы в слое

Для определенности положим, что падающий свет поляризован линейно вдоль оси z . Тогда в дипольном приближении для возмущения $\hat{V}$, связанного со световой волной, будем иметь:

$$\hat{V} = -i\hbar \frac{e|A_0}{m_0 c} \left(\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right), \quad (20)$$

где m_0 – масса свободного электрона, e – его заряд, c – скорость света в вакууме, A_0 – амплитуда световой волны.

Для матричных элементов M_{ji} оператора (20), построенного на волновых функциях (4),(17), при получающихся правилах отбора $\Delta m = 0$; $\Delta l = \pm 1$, в общем виде получаем:

$$\text{a) } \Delta m = 0; \Delta l = -1; (l_f = l_i - 1; l_i \equiv l = 1, 2, \dots)$$

$$M_{f,i} = \hbar \frac{|e|A_0}{m_0 c} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} \left\{ \beta_i f_3 - \beta_i (\alpha_i + \alpha_f) L f_2 - \alpha_i f_1 - \beta_i (\alpha_i + \alpha_f) L f_1 + \frac{l}{R_1} f_1 \right\}; \quad (21)$$

$$\text{б) } \Delta m = 0; \Delta l = 1; (l_f = l_i + 1; l_i \equiv l = 0, 1, 2, \dots)$$

$$M_{f,i} = -\hbar \frac{|e|A_0}{m_0 c} \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}} \left\{ \beta_i f_3 - \beta_i (\alpha_i + \alpha_f) L f_2 - \alpha_i f_1 - \beta_i (\alpha_i + \alpha_f) L f_1 - \frac{l+1}{R_1} f_1 \right\}, \quad (22)$$

где индексы i, f относятся, соответственно, к начальному и конечному состояниям, а функции f_1, f_2, f_3 имеют следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} f_1 &\equiv f_1(\beta_f, \beta_i) = \frac{\sin(\beta_f - \beta_i)L}{(\beta_f - \beta_i)L} - \frac{\sin(\beta_f + \beta_i)L}{(\beta_f + \beta_i)L}; \\ f_2 &\equiv f_2(\beta_f, \beta_i) = \frac{\cos(\beta_f - \beta_i)L - 1}{L^2(\beta_f - \beta_i)^2} - \frac{\cos(\beta_f + \beta_i)L - 1}{L^2(\beta_f + \beta_i)^2}; \\ f_3 &\equiv f_3(\beta_f, \beta_i) = \frac{\cos(\beta_f - \beta_i)L - 1}{(\beta_f - \beta_i)L} - \frac{\cos(\beta_f + \beta_i)L - 1}{(\beta_f + \beta_i)L}. \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

С учетом условий (2),(13),(19) выражения (21),(22) можно существенно упростить. Для $M_{f,i}$ теперь получаем:

1. Переходы $l_f = l_i - 1$ ($l_i \equiv l = 1, 2, \dots$)

а) $n_f = n_i$:

$$M_{f,i} \cong \hbar \frac{|e|A_0}{m_0 c} \frac{l}{R_1} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} \cong \hbar \frac{|e|A_0}{m_0 c R_1} l V_{l,i-1}; \quad (24)$$

б) $n_f \neq n_i$; $n_f \pm n_i$ четное:

$$M_{f,i} \cong \hbar \frac{|e|A_0}{m_0 c} \frac{l}{R_1} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} \left\{ \frac{1}{n_f + n_i} \left[\frac{F_{l-1}L}{4E_{1,0}n_f} + \frac{F_l L}{4E_{1,0}n_i} \right] - \frac{1}{n_f - n_i} \left[\frac{F_{l-1}L}{4E_{1,0}n_f} - \frac{F_l L}{4E_{1,0}n_i} \right] \right\}; \quad (25)$$

в) $n_f \neq n_i$; $n_f \pm n_i$ нечетное:

$$M_{f,i} \cong \hbar \frac{|e|A_0}{m_0 c L} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} \frac{4n_f n_i}{n_f^2 - n_i^2}. \quad (26)$$

2. Переходы $l_f = l_i + 1$ ($l_i \equiv l = 0, 1, 2, \dots$)

а) $n_f = n_i$:

$$M_{f,i} \cong \hbar \frac{|e|A_0}{m_0 c} \frac{l+1}{R_1} \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}} \cong \hbar \frac{|e|A_0}{m_0 c R_1} (l+1) V_{l,i+1}; \quad (27)$$

б) $n_f \neq n_i$; $n_f \pm n_i$ четное:

$$M_{f,i} \cong \hbar \frac{|e|A_0}{m_0c} \frac{l+1}{R_1} \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}} \left\{ \frac{1}{n_f + n_i} \left[\frac{F_{l+1}L}{4E_{1,0}n_f} + \frac{F_lL}{4E_{1,0}n_i} \right] - \frac{1}{n_f - n_i} \left[\frac{F_{l+1}L}{4E_{1,0}n_f} - \frac{F_lL}{4E_{1,0}n_i} \right] \right\}; \quad (28)$$

в) $n_f \neq n_i$; $n_f \pm n_i$ нечетное:

$$M_{f,i} \cong \hbar \frac{|e|A_0}{m_0c} \frac{l+1}{L} \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}} \frac{4n_f n_i}{n_f^2 - n_i^2}. \quad (29)$$

Опуская постоянные множители, для коэффициента поглощения в общем виде можем записать:

$$\alpha(\omega) \sim \sum_{i,f} |M_{f,i}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (30)$$

где E_i, E_f – энергии соответственно начального и конечного состояний носителей заряда в зоне, $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака.

4. Обсуждение результатов

Из результатов, полученных в работе, можно заключить следующее:

1. Из (24),(27),(30) видно, что при $n_f = n_i$ будет наблюдаться итоговое поглощение на равноотстоящих частотах

$$\omega_l = \frac{\hbar}{\mu R_1 R_2}; \frac{2\hbar}{\mu R_1 R_2}; \dots \frac{l\hbar}{\mu R_1 R_2}; \dots \quad (l=1,2,\dots). \quad (31)$$

Интенсивность поглощения этой серии при данном l определяется величиной

$$(l+1)^2 |V_{l,l+1}|^2 - l^2 |V_{l,l-1}|^2. \quad (32)$$

2. При $n_f \neq n_i$ поглощение и излучение происходят на различных частотах, которые определяются из соотношения

$$E_{n_f, l_f} = E_{n_i, l_i} \pm \hbar\omega, \quad (33)$$

где верхний знак соответствует поглощению, а нижний знак – излучению фотона.

3. Интенсивность переходов при четном $n_f \pm n_i$ существенно меньше интенсивности переходов при нечетном $n_f \pm n_i$ (в L^2 / R_1^2 раз).

4. Из (24)–(30) и (31),(33) нетрудно видеть, что интенсивность и частота внутризонных переходов в слое, кроме всего прочего, в значительной мере определяются геометрическими размерами образца R_1 и L . В частности, при $R_1 \rightarrow \infty$ переходы с $n_f = n_i$ и $n_f \pm n_i$ четном вообще будут отсутствовать и полоса поглощения будет характеризоваться чисто “пленочным” фактором $n_f n_i / (n_f^2 - n_i^2)$.

Из сопоставления результатов (21)–(29) и (31)–(33) с результатами поглощения в наносфере [6,11,17] и квантованной пленке [18,19] заключаем также, что рассмотренный нанослой “комбинирует” в себе свойства как квантовой точки – сферы, так и квантованной пленки, в силу чего, варьируя геометрическими размерами образца, можно добиться в определенных границах желаемого и регулируемого изменения оптических характеристик системы.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.P.Alivisatos. *Science*, **271**, 933 (1996).
2. H.S.Zhou, I.Honma, H.Komiyama, J.W.Haus. *Phys. Rev.*, **B50**, 12052 (1994).
3. Н.В.Ткач, В.А.Головацкий, О.Н.Войцеховская. *ФТП*, **34**, 602 (2000).
4. A.Mews, A.V.Kadavanich, U.Banin, A.P.Alivisatos. *Phys. Rev.*, **B53**, R13242 (1996).
5. D.Nesheva et al. *Nanosc. and Nanotech*, **2**, 645 (2002).
6. Д.В.Булаев, В.А.Маргулис. *ФТТ*, **44**, 1557 (2002).
7. Kai Chang. *Phys. Rev.*, **B61**, 4743 (2001).
8. D.Schoos, A.Mews, A.Eychmuller, H.Weller. *Phys. Rev.*, **B49**, 17072 (1994).
9. V.Ranjan, V.A.Singh. *Phys. Rev.*, **B89**, 6415 (2001).
10. A.P.Alivisatos. *Bull. Mater. Res. Soc.*, **23**, 183 (1998).
11. С.В.Гапоненко. *ФТП*, **30**, 577 (1996).
12. V.V.Mitin, V.A.Kochelap, M.A.Stuscio. *Quantum Heterostructures*. Cambridge University Press, 1999.
13. Э.П.Синяевский, С.М.Соковнич. *ФТП*, **33**, 828 (1999).
14. Д.В.Булаев, В.А.Маргулис. *ФТТ*, **45**, 349 (2003).
15. В.В.Роткин, Р.А.Сулис. *ФТТ*, **36**, 3569 (1994).
16. Справочник по специальным функциям (ред. М.Абрамовиц, И.Стиган). М., Наука, 1979.
17. С.И.Покутний. *ФТП*, **37**, 743 (2003).
18. T.Ando, A.Fauler, F.Stern. *Rev., Mod. Phys.*, **54**, 437 (1982).
19. D.A.V. Miller, S.Schmit-Rink, D.S.Chemia. *Adv. Phys.*, **38**, 89 (1989).

ՆԵՐԳՈՏԻԱԿԱՆ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ԱՆՅՈՒՄՆԵՐԸ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ՆԱՆՈԳՆԴԱՉԵՎ ՇԵՐՏՈՒՄ

Վ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Կ.Ս. ԱՐԱՄՅԱՆ, Հ. Շ. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ

«Ուժեղ» քվանտացման դեպքի համար դիտարկված են դիպոլային անցումները նույն գոտու դիսկրետ սպեկտրի վիճակների միջև կիսահաղորդչային գնդաձև շերտում: Հաշվարկված է ներգոտիական–միջենթագոտային կլանման գործակիցը թույլ ալիքի անկման դեպքում: Ցույց է տրված, որ կլանման մեծությունը և հաճախությունը էապես կախված են մնուշի երկրաչափական չափսերից:

INNERBAND OPTICAL TRANSITIONS IN A SEMICONDUCTOR NANOSPHERICAL LAYER

V.A. HARUTYUNYAN, K.S. ARAMYAN, H.SH. PETROSYAN

In the case of “strong” quantization in a semiconductor spherical layer the transitions between the states of discrete spectrum of the same band are considered. The optical absorption coefficient for innerband–intersubband transitions is calculated. It is shown that the magnitude and frequency of absorption essentially depend on the geometrical sizes of the system.