Гиперболические экситоны в полупроводниках

© В.И. Белявский, Р.А. Кончаков

Государственный педагогический университет,
394043 Воронеж, Россия

E-mail:vib@vspu.ac.ru

(Поступила в Редакцию 6 декабря 2000 г.)

Энергия и затухание квазистационарного состояния, соответствующего гиперболическому экситону в полупроводниковом кристалле, рассчитаны в предположении, что взаимодействие между электроном и дыркой описывается экранированным кулоновским потенциалом. Определены условия возникновения резонанса, обусловленного гиперболическим экситоном.

Работа поддержана МНТП России "Физика твердотельных наноструктур".

1. Особенности оптических спектров полупроводниковых кристаллов в области собственного поглощения связаны с сингулярностями Ван Хова комбинированной плотности состояний электронов и дырок. Экситонные эффекты, обусловленные кулоновским взаимодействием, приводят к системе уровней в области энергий, меньших энергии минимума плотности состояний. Седловые точки закона дисперсии располагаются в глубине разрешенной зоны энергий, так что в этом случае связанные состояния электрона и дырки определенно попадают в область сплошного спектра и, таким образом, являются квазистационарными состояниями (КСС).

Концепция гиперболического экситона (экситона седловой точки), выдвинутая Дж. Филлипсом [1–4], предполагает наличие в оптических спектрах резонанса (или нескольких резонансов) вблизи энергии седловой точки. Экспериментальные исследования гиперболических экситонов в полупроводниковых кристаллах [5–12] показывают, что соответствующие экситонные резонансы проявляются в виде четко выраженных полос в спектрах поглощения и отражения. В окрестности седловой точки главные значения тензора обратных эффективных масс имеют неодинаковые знаки, так что изоэнергетические поверхности (в первом приближении) являются гиперболоидами. Гиперболическая метрика k-пространства не позволяет получить точное решение для волновых функций и энергетического спектра экситона седловой точки, подобно тому, которое имеет место в случае экситона, связанного с минимумом плотности состояний [13]. В случае предельно сильной анизотропии эффективных масс можно воспользоваться адиабатическим приближением, разделив "быстрое" движение с малой массой и "медленное" движение с большой массой [14]. Таким образом можно найти приближенное решение, соответствующее экситонному резонансу и существующее на протяжении времени жизни экситонов. Вопрос о времени жизни экситона седловой точки при этом остается открытым.

2. Корреляционное взаимодействие электрона и дырки в непроводящем кристалле обычно экранируется свободными носителями

$$U(r) = -\frac{e^2}{\varepsilon_0 r}\exp(-k_o r), \qquad (1)$$

где $k_0^{-1} \equiv r_0$ — радиус экранирования, ε_0 — статическая диэлектрическая проницаемость кристалла. Поэтому определяющий вклад в линейную комбинацию произведений электронных и дырочных блоховских функций, образующую волновую функцию экситона, вносит ограниченная область k-пространства $k \leqslant k_0$, существенно меньшая зоны Бриллюэна. В этом случае для качественного исследования КСС, возникающих в результате взаимодействия электрона и дырки, можно воспользоваться методом [15,16], примененным при рассмотрении электрон-электронных корреляций в сверхпроводниках.

Ограничимся рассмотрением простейшей двухзонной модели полупроводника. Если $\varepsilon_c(k_e)$ и $\varepsilon_v(k_h)$ — закон дисперсии электронов в зоне проводимости и валентной зоне, то энергия возбуждения свободной электронно-дырочной пары (ЭДП) с квазиимпульсом $K = k_e + k_h$, где k_e и k_h — квазиимпульсы электрона и дырки, может быть записана в виде

$$E_{\mathrm{EHP}}(K,k) = E_g + \varepsilon_c\left(\frac{K}{2}+k\right) - \varepsilon_v\left(\frac{K}{2}-k\right). \qquad (2)$$

Здесь E_g — ширина (прямой) запрещенной зоны, $k = (k_e - k_h)/2$ — квазиимпульс относительного движения ЭДП. Поскольку взаимодействие между электроном и дыркой имеет характерный радиус действия $r_0 \gg a$, где a — межатомное расстояние, то в (2) оказываются существенными значения k, удовлетворяющие условию $k < k_0$, и (2) можно приближенно представить как

$$E_{\mathrm{EHP}}(K,k) = E_g + \varepsilon^{(-)}(K) + \hbar\nu_\alpha(K)k_\alpha + \frac{\hbar}{2m}\nu_{\alpha\beta}(K)k_\alpha k_\beta, \qquad (3)$$

где $\varepsilon^{\pm}(K) = \varepsilon_c(K/2) \pm \varepsilon_v(K/2)$, m — параметр размерности массы,

$$\nu_\alpha(K) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon^{(+)}(K)}{\partial k_\alpha}, \quad \nu_{\alpha\beta}(K) = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{\partial^2\varepsilon^{(-)}(K)}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}; \qquad (4)$$

по повторяющимся тензорным индексам подразумевается суммирование.

3. Эквивалентный гамильтониан ЭДП в экситонном представлении Ванные принимает вид

$$\hat{H}_K = -\frac{\hbar^2}{2m}\nu_{\alpha\beta}(K)\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} - i\hbar v_\alpha(K)\frac{\partial}{\partial x_\alpha} + U(r), \quad (5)$$

при этом энергия относительного движения ЭДП отсчитывается от значения $E_g + \varepsilon^{(-)}(K)$. Огибающая функция ЭДП с квазиимпульсом K представляется в факторизованном виде

$$\psi_K(R, r) = \varphi_K(r)\exp(iKR), \quad (6)$$

где R — радиус-вектор ЭДП как целого, r — радиус-вектор относительного движения, $\varphi_K(r)$ — собственная функция гамильтониана (5), которую, чтобы устранить линейный по квазиимпульсу член в эквивалентном гамильтониане, представим в виде

$$\varphi_K(r) = \chi_K(r)\exp(i\lambda_\alpha x_\alpha),$$

$$\lambda_\alpha \equiv \lambda_\alpha(K) = -\frac{m}{\hbar}\nu^{-1}_{\alpha\beta}(K)v_\beta(K). \quad (7)$$

Уравнение для огибающей функции $\chi_K(r)$ принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nu_{\alpha\beta}(K)\frac{\partial^2\chi_K(K)}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} + U(r)\chi_K(K) = \varepsilon_K\chi_K(K), \quad (8)$$

здесь

$$\varepsilon_K = E + \frac{m}{2}v_\alpha(K)\nu^{-1}_{\alpha\beta}(K)v_\beta(K). \quad (9)$$

Для каждого K матрица тензора $\nu_{\alpha\beta}(K)$ может быть приведена к главным осям, тогда она принимает вид $\nu_{\alpha\beta}(K) = \nu^{(\alpha)}(K)\delta_{\alpha\beta}$, а уравнение (8) переписывается как

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_\alpha \nu^{(\alpha)}(K)\frac{\partial^2\chi_K(r)}{\partial^2 x_\alpha^2} + U(r)\chi_K(r) = \varepsilon_K\chi_K(r). \quad (10)$$

4. Относительное движение ЭДП, описываемое уравнением (10) инфинитно, как и должно быть в случае непрерывного спектра. Это не исключает возможности возникновения относительно долгоживущего КСС, характеризующегося комплексной энергией $\tilde{E}^0_K = E^{(0)}_K - i\Gamma_K$ и проявляющегося как полюс амплитуды рассеяния при энергии $E = \tilde{E}_0$. Фурье-образ рассеянной волны, $\tilde{\chi}_K(k)$, удовлетворяет интегральному уравнению [16]

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(q^2 - k^2\right)\tilde{\chi}_K(k) = \tilde{U}(k-q) + \int \tilde{U}(k-k')\tilde{\chi}_K(k')\frac{d^3k'}{(2\pi)^3},$$

$$k^2 \equiv \sum_\alpha \nu^{(\alpha)}(K)k_\alpha^2, \quad \varepsilon_K = (\hbar^2/2m)\sum_\alpha \nu^{(\alpha)}(K)q_\alpha^2 \equiv q^2. \quad (11)$$

Для качественного исследования характера решения уравнения (11) можно воспользоваться оценкой интеграла по теореме о среднем. Заменим истинный потенциал (1) сингулярным потенциалом $U(r) \Rightarrow U_0 r_0^3\delta(r)$, где множитель r_0^3 обеспечивает необходимую размерность параметра U_0, который естественно определить как

$$U_0 = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0 r_0}. \quad (12)$$

Область обрезания Фурье-образа потенциала (1) определим условием $|k| \leqslant k_0$ и обозначим $\{Q\}$. Уравнение (11) легко решается и приводит к

$$\tilde{\chi}_{Kq}(K) = -\frac{w}{1 + wB_K(q^2)}\frac{1}{k^2 - q^2 - i0\cdot\operatorname{sgn}q^2}. \quad (13)$$

Здесь $w = 2mU_0r_0^3/\hbar$, знаковая функция $\operatorname{sgn}q^2$ обеспечивает необходимое асимптотическое поведение расходящейся волны,

$$B_K(q^2) = \int\limits_{\{Q\}} \frac{1}{k^2 - q^2 - i0\cdot\operatorname{sgn}q^2}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

$$\equiv B_{K1}(q^2) + iB_{K2}(q^2). \quad (14)$$

Вещественная и мнимая части (при вещественном аргументе q^2) функции (14) записываются в виде

$$B_{K1}(q^2) = \int\limits_{\{Q\}} \frac{1}{k^2 - q^2}\frac{d^3k}{(2\pi)^3},$$

$$B_{K2}(q^2) = \pi\int\limits_{\{Q\}} \delta(k^2 - q^2)\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\operatorname{sgn}q^2, \quad (15)$$

где интеграл, определяющий $B_{K1}(q^2)$, понимается в смысле главного значения.

5. Знаменатель амплитуды рассеяния, $1 + wB_K(q^2)$, не обращается в нуль ни при каких вещественных q^2. Исключением является случай, когда $B_{K2}(q^2)$ обращается в нуль тождественно. Тогда полюсы амплитуды рассеяния, определяемые из уравнения

$$1 + wB_{k1}(q^2) = 0, \quad (16)$$

соответствуют связанным состояниям. Для ЭДП такая ситуация возникает в области энергий, расположенной ниже минимума закона дисперсии $\varepsilon^{(-1)}(k)$. Если уравнение (16) имеет решение при некотором значении аргумента $q^2 = q_0^2$ и при этом $B_{K2}(q_0^2) \neq 0$, то в окрестности точки q_0^2 функцию $B_{K1}(q_0^2)$ можно представить как (штрихом обозначено дифференцирование по q^2)

$$B_{k1}(q^2) \approx B_{K1}(q_0^2) + B'_{K1}(q_0^2)\left(q^2 - q_0^2\right), \quad (17)$$

после чего амплитуда рассеяния записывается в виде

$$f_K(q^2) = -\frac{w_K}{1 + w_K B_K(q^2)}$$

$$\approx -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{B'_{K1}(q_0^2)}\frac{1}{E - E^{(0)}_K + \frac{i\Gamma_K}{2}}. \quad (18)$$

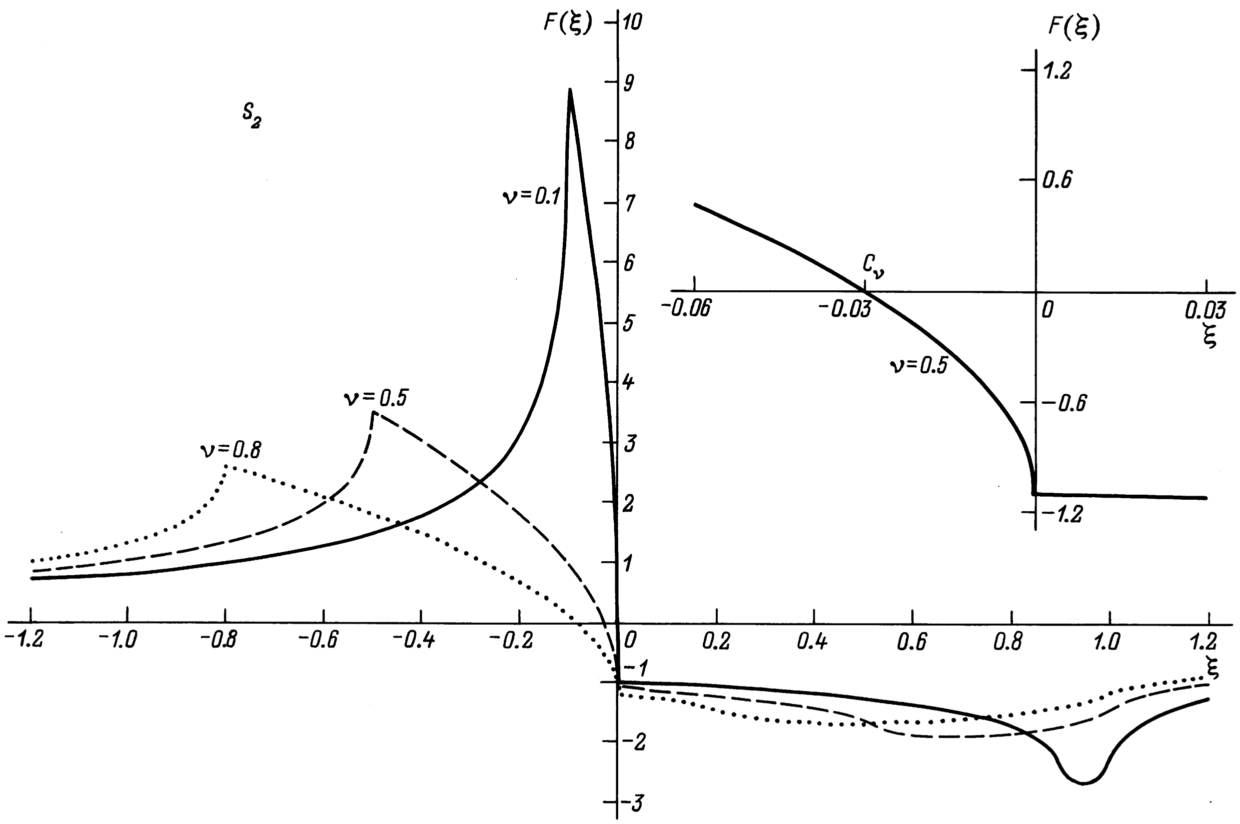

Рис. 1. График безразмерной функции $F(\xi)$ $(B_{K1}(q^2){=}k_0F(\xi)$, где безразмерный аргумент $\xi = q^2/k_0^2)$ для случая седловой точки S_2 при $\nu = 0.1,\ 0.5,\ 0.8$. Слева вверху показан характер особенности $F(\xi)$ в окрестности точки $\xi = 0$.

Здесь $E_K^{(0)} = \hbar^2 q_0^2/2m$ — энергия КСС, $E = \hbar^2 q^2/2m$, а затухание КСС имеет вид

$$\Gamma_K = \frac{\hbar^2}{m}\frac{B_{K2}(q_0^2)}{B'_{K1}(q_0^2)}. \tag{19}$$

6. Далее, рассматривая закон дисперсии в окрестности седловой точки, будем предполагать его цилиндрически симметричным. Именно в окрестности точки S_1 положим $q^2 = \nu q_t^2 - q_3^2$, а в окрестности точки S_2 пусть $q^2 = -\nu q_t^2 + q_3^2$; здесь $q_t^2 = q_1^2 + q_2^2$, ν — безразмерный параметр, характеризующий степень анизотропии закона дисперсии. Для простоты в качестве области интегрирования $\{Q\}$ выберем цилиндр $k_t \leqslant k_0$, $|k_3| \leqslant k_0$. Эта область, как и шар $k^2 \leqslant k_0^2$, имеет единстенный характерный масштаб k_0 в импульсном пространстве, при этом интегралы (15) слабо зависят от формы области $\{Q\}$. Наличие цилиндрической симметрии позволяет выразить $B_{K1}(q^2)$ в виде комбинации элементарных функций. Не выписывая в явном виде это достаточно громоздкое выражение, приведем графики функции $B_{K1}(q^2)$ при некоторых значениях параметра ν в случае седловой точки S_2 (рис. 1).

Асимптотическое при $|q^2| \to \infty$ поведение функции (15) имеет вид $B_{K1}(q^2) \sim -Q^3/(2\pi)^3 q^2$, где Q^3 — объем области $\{Q\}$. Как видно из рис. 1, функция $B_{K1}(q^2)$ ограничена как сверху, так и снизу. Кроме того, при сделанном выше определении закона дисперсии она обладает своеобразной симметрией: $B_{K1}^{(S_2)}(q^2) = -B_{K1}^{(S_1)}(-q^2)$; здесь индекс сверху указывает, к какой именно седловой точке относится функция $B_{K1}(q^2)$. С учетом этого обстоятельства рис. 1 позволяет проанализировать условия возникновения КСС в окрестностях седловых точек обоих типов.

Притяжению между электроном и дыркой соответствует $w < 0$, поэтому, как видно из рис. 1, решение уравнения (16) может иметь место не при любых $|w|$, а лишь начиная с некоторого минимального значения $|w_m|$. В случае точки S_2, рассмотрением которой сначала мы и ограничимся, имеем

$$\frac{1}{(w_m)} = B_{K1}\left(-\nu k_0^2\right) = \frac{k_0}{4\pi^2\nu}\left\{2\sqrt{\nu}\,\mathrm{arctg}\,\frac{1}{\nu} + \ln(1+\nu)\right\}. \tag{20}$$

Так, при $\nu \ll 1$, когда состояния ЭДП можно рассматривать как квазиодномерные (1D), ограничение на величину $|w_m|$ фактически снимается: $|w_m| \sim \sqrt{\nu}$. Квазидвумерный (2D) случай, соответствующий, например, кристаллу со слоистой структурой, можно рассмотреть аналогично, положив $\nu \gg 1$ при условии, что $\nu/m = \text{const}$.

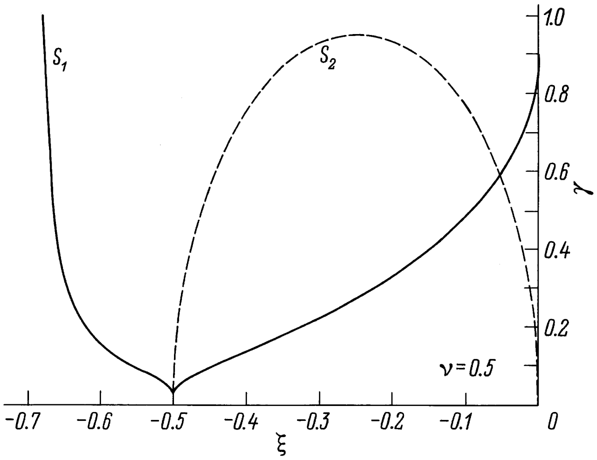

Рис. 2. График безразмерной функции $\gamma = \Gamma_K/\Gamma_K^{(0)}$ в зависимости от безразмерного аргумента $\xi = q^2/k_0^2$ для случаев седловых точек S_1 и S_2.

И в этом случае ограничение на $|w_m|$ оказывается существенно более слабым по сравнению с трехмерным (3D) случаем: $|w_m| \sim 1/\ln\nu$.

Из определения (15), следует, что $B_{K2}(q^2) > 0$ при $q^2 > 0$ и $B_{K2}(q^2) < 0$ при $q^2 < 0$. Поэтому решение уравнения (16), соответствующее КСС, в случае седловой точки S_2 имеет место при $-\nu < q^2 < C_\nu$, где C_ν — корень уравнения $B_{K1}(q^2) = 0$. Именно в интервале $-\nu < q^2 < C_\nu$ затухание КСС (19) положительно, поскольку $B'_{K1}(q^2) < 0$. Кроме того, в широком диапазоне изменения параметра ν оно также и мало: $\Gamma_K/E_K(0) = 2B_{K2}(q_0^2)/q_0^2 B'_{K1}(q_0^2) \ll 1$. График функции $\gamma = \Gamma_K/E_K^{(0)}$ в зависимости от $\xi = q^2/k_0^2$ представлен на рис. 2.

Экситонные состояния, связанные с особенностью электронно-дырочного спектра вблизи седловой точки S_1, могут быть рассмотрены аналогичным образом. Решения в виде КСС имеют место в интервале $C'_\nu < q^2 < 0$, где C'_ν — корень уравнения $B'_{K1}(q^2) = 0$. При этом, как видно из рис. 1, величина $|w|$, при которой возможно возникновение КСС, ограничена в отличие от S_2-экситона как снизу, так и сверху. Поведение затухания S_1-экситона в зависимости от $\xi = q^2/k_0^2$ существенно отличаются от случая S_2-экситона (рис. 2).

7. Условие возникновения КСС в зависимости от величины параметра k_0 непосредственно вытекает из (20). Действительно, функция $B_{K1}(q^2)$ может быть представлена в виде $B_{K1}(q^2) = k_0 F(\xi)$, где $F(\xi)$ — безразмерная функция безразмерного аргумента $\xi = q^2/k_0^2$. Параметр w можно записать как $w = -8\pi/k_0^2 a^*$, где $a^* = \varepsilon_0 \hbar^2/me^2$ — эффективный боровский радиус. Для возникновения КСС необходимо, чтобы в соответствии с (20) было выполнено условие $F(-\nu) \geqslant k_0 a^*/8\pi$. В 1D предельном случае ($\nu \ll 1$) это условие принимает вид $k_0 a^* \leqslant 2/\sqrt{\nu}$, тогда как в 2D случае ($\nu \gg 1$ и $\nu/m = \mathrm{const}$) имеем $k_0 a^* \leqslant 2\ln\nu$. В отсутствие ярко выраженной анизотропии (3D случай, $\nu \approx 1$) подобное условие приближенно можно записать как $k_0 a^* \leqslant 1$. Таким образом, наличие анизотропии электронного закона дисперсии, соответствующей эффективному понижению размерности электронной системы, может существенно расширить диапазон значений k_0, при которых может быть обеспечено возникновение КСС.

Как следует из рис. 1, наряду с решением уравнения (16), соответствующим КСС, имеется еще одно решение с отрицательным затуханием. Подобное решение как и в случае электронов и фононов в кристалле с точечным дефектом, может быть истолковано [17] как состояние, отвечающее резонансному рассеянию при относительном движении ЭДП. Отметим, что в случае седловой точки S_1 и достаточно большой величины $|w|$ уравнение (16) допускает резонансное решение и при $q^2 > 0$.

Список литературы

[1] J.C. Phillips. Phys. Rev. **A136**, *6*, 1721 (1964).
[2] J.C. Phillips. Phys. Rev. **A139**, *4*, 1291 (1965).
[3] J.C. Phillips. The fundamental optical spectra of solids. Solid State Physics **18**, 55 (1966) [Дж. Филлипс. Оптические спектры твердых тел в области собственного поглощения. Мир, М. (1968)].
[4] J.C. Phillips, B.O. Seraphin. Phys. Rev. Lett. **15**, *3*, 107 (1965).
[5] В.К. Субашиев, Ле Хак Бин. Письма в ЖЭТФ **12**, *2*, 139 (1970).
[6] V.K. Subashiev. Sol. State Commun. **9**, *6*, 369 (1971).
[7] А.И. Савчук, Н.Л. Говалешко, Г.Д. Далевский, З.Д. Ковалюк. УФЖ **17**, *10*, 1548 (1972).
[8] V.I. Sokolov, V.K. Subashiev. Phys. Stat. Sol. (b) **65**, *2*, K74 (1974).
[9] Г.И. Абуталыпов, М.Л. Белле. ФТП **9**, *7*, 1330 (1975).
[10] В.Т. Агекян, Ю.Ф. Соломонов, Ю.А. Степанов, В.К. Субашиев. ФТП **10**, *9*, 1776 (1976).
[11] Г.Ф. Глинский, А.А. Копылов, А.А. Пихтин. ФТП **12**, *7*, 1237 (1978).
[12] С.В. Вирко, М.П. Лисица, Ф.В. Моцный. ФТТ **42**, *9*, 1579 (2000).
[13] Р. Нокс. Теория экситонов. Мир, М. (1966).
[14] B. Velicky, I. Sak. Phys. Stat. Sol. **16**, *1*, 147 (1966).
[15] В.И. Белявский, В.В. Капаев, Ю.В. Копаев. ЖЭТФ **118**, *4*, 941 (2000).
[16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Наука, М. (1989).
[17] У. Харрисон. Теория твердого тела. Мир, М. (1972).