

Экситонные состояния в полупроводниковых квантовых точках в рамках модифицированного метода эффективной массы

© С.И. Покутний[¶]

Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова Национальной академии наук Украины, 68002 Ильичевск, Украина

(Получена 29 января 2007 г. Принята к печати 12 марта 2007 г.)

Предложен новый модифицированный метод эффективной массы, с помощью которого описывается энергетический спектр экситона в полупроводниковых квантовых точках с радиусами a , сравнимыми с боровским радиусом экситона a_{ex}^0 . Показано, что в рамках модели квантовых точек, в которой квантовая точка моделировалась бесконечно глубокой потенциальной ямой, приближение эффективной массы можно применять к описанию экситона в квантовых точках с радиусами $a \approx a_{\text{ex}}^0$, считая, что приведенная эффективная масса экситона $\mu = \mu(a)$ является функцией радиуса a КТ.

PACS: 73.21.La, 73.63.Kv, 71.18.+y

1. Введение

Достижения твердотельной технологии привели к получению квазиуменьшенных структур, представляющих собой полупроводниковые квантовые точки (КТ) сферической формы с радиусами $a = 1-10$ нм, выращенные в прозрачных диэлектрических (или полупроводниковых) матрицах [1–10]. Такие линейные размеры a КТ сопоставимы с дебройлевской длиной волны электрона и дырки или (и) с их боровскими радиусами. Последнее обстоятельство приводит к тому, что явления пространственного размерного квантования носителей заряда играют существенную роль в оптических и электрооптических процессах в таких наносистемах [8–18].

Поскольку энергетическая щель полупроводникового материала, который содержит в своем объеме КТ, существенно меньше, чем в диэлектрических (полупроводниковых) матрицах, движение носителей заряда в сферической КТ ограничено во всех трех направлениях объемом КТ (т.е. носители заряда двигаются в трехмерной сферической потенциальной яме КТ). Последнее обстоятельство приводит к тому, что квазичастицы (электрон, дырка и экситон) в КТ не обладают квазиимпульсом. Поэтому можно говорить только о состояниях квазичастиц в КТ. В дальнейшем под экситоном в КТ будем понимать такое экситонное состояние в КТ, которое не имеет квазиимпульса [11–14].

В рамках адиабатического приближения (в котором $m_e \ll m_h$, где m_e и m_h — эффективные массы электрона и дырки в КТ), а также приближения эффективной массы, с учетом в гамильтониане экситона кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой, а также поляризационного взаимодействия электрона и дырки с поверхностью КТ и при использовании только 1-го порядка теории возмущений на электронных волновых

функциях сферической потенциальной ямы бесконечной глубины, в [19] был получен энергетический спектр экситона в КТ как функция радиуса КТ a . В [19] было найдено значение критического размера КТ a_c , начиная с которого в КТ радиусом $a \leq a_c$ возникал объемный экситон. Под объемным экситоном в КТ подразумевался экситон, структура которого (приведенная эффективная масса, боровский радиус, энергия связи) в КТ не отличалась от таковой структуры экситона в неограниченном полупроводниковом материале.

В [20,21] в рамках адиабатического приближения, а также приближения эффективной массы, с использованием модели КТ, в которой КТ моделировалась потенциальной ямой конечной глубины, получен энергетический спектр экситона в КТ как функции радиуса КТ a , а также глубины потенциальной ямы $\Delta V(a)$ КТ. В этих работах было получено значение критического радиуса КТ a_c .

В работе [22], не ограничиваясь адиабатическим приближением, в рамках приближения эффективной массы вариационным методом найден энергетический спектр экситона в КТ как функция радиуса КТ a и отношения эффективных масс электрона и дырки (m_e/m_h).

Большинство подходов к описанию физических свойств полупроводниковых КТ условно можно поделить на две группы [8–13,23]: 1) описание с позиции твердого тела в рамках зонной теории в ее одноэлектронном приближении [1–24]; 2) описание с позиции отдельного атома в рамках квантово-химического кластерного подхода, в котором КТ считают большой молекулой [25].

В рамках первого подхода [1–24] КТ рассматривалась как нанокристалл сферической формы, который обладал периодической кристаллической структурой. Квазичастицам (электрону, дырке и экситону), которые двигались в объеме КТ, приписывали определенную эффективную массу, так же как и в массивном полупроводниковом монокристалле. При этом эффект

[¶] E-mail: Pokutnyi_Sergey@inbox.ru

размерного квантования пояснялся движением квази-частицы в потенциальной яме бесконечной глубины, которой являлась КТ [1–7]. Вопрос о корректности такого подхода, границе его применимости со стороны малых размеров a КТ, а также изменении параметров монокристалла при переходе к размерам a квантовых масштабов остается неполностью решенным [9–14,23].

В большинстве теоретических моделей, в которых рассчитывались энергетические спектры квази-частиц в КТ, авторами использовалось приближение эффективной массы, которое приписывалось КТ, так же как и массивным монокристаллам [9–24]. При этом возникал вопрос — до каких минимальных размеров a КТ можно применять приближение эффективной массы. Частичный ответ на этот вопрос находился в работе [26]. В этой работе проводилось сравнение результатов расчетов ширины запрещенной зоны E_g нанокристаллов Si в вакууме (пористый кремний), полученных в приближении эффективной массы, а также квантово-химическими методами, в которых не использовались параметры массивных монокристаллов [27–30].

Расчет величины E_g в КТ малого радиуса $a < a_{\text{ex}}^0$ (где a_{ex}^0 — боровский радиус экситона в полупроводниковом материале, который содержится в объеме КТ), выполненный в [26] в приближении эффективной массы, давал сильно завышенное значение E_g по сравнению со значением E_g^0 массивного монокристалла кремния. В этом случае для расчетов E_g в КТ кремния необходимо использовать квантово-химические кластерные методы, а также методы, основанные на микроскопическо-статистическом подходе [27–30].

КТ большого радиуса $a \gg a_{\text{ex}}^0$ с удовлетворительной точностью описывались макроскопическими оптическими параметрами (шириной запрещенной зоны, эффективными массами квази-частиц, диэлектрической проницаемостью), которые характеризовали соответствующие им массивные полупроводниковые монокристаллы [1–7,11–13,23,26].

Наименее исследуемыми являются КТ с радиусами a , сравнимыми с боровским радиусом экситона a_{ex}^0 . Вопрос о применимости приближения эффективной массы к описанию таких КТ является до сих пор нерешенным [9–14,23].

В настоящей работе предлагается новый модифицированный метод эффективной массы, с помощью которого описывается энергетический спектр экситона в полупроводниковых КТ с радиусами $a \approx a_{\text{ex}}^0$. Показано, что в рамках модели КТ, в которой КТ моделировалась бесконечно глубокой потенциальной ямой, приближение эффективной массы можно применять к описанию экситона в КТ с радиусами a , сравнимыми с боровским радиусом экситона a_{ex}^0 , считая, что приведенная эффективная масса экситона $\mu = \mu(a)$ является функцией радиуса a КТ.

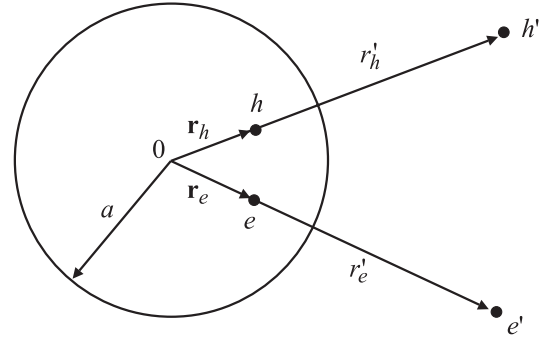


Рис. 1. Схематическое изображение экситона в сферической полупроводниковой квантовой точке. Радиус-векторы \mathbf{r}_e и \mathbf{r}_h определяют расстояние электрона e и дырки h от центра КТ радиуса a . Заряды изображений $e' = (a/r_e)e$ и $h' = (a/r_h)h$ расположены на расстояниях $r_e = (a^2/r_e)$ и $r_h = (a^2/r_h)$ от центра КТ O и представляют собой точечные заряды изображения электрона и дырки соответственно.

2. Гамильтониан экситона в полупроводниковой квантовой точке

Следуя работам [12–14,17,19–22], рассмотрим простую модель квазинульмерной системы: нейтральную полупроводниковую сферическую КТ радиуса a , которая содержит в своем объеме полупроводниковый материал с диэлектрической проницаемостью ϵ_2 , окруженную средой с диэлектрической проницаемостью ϵ_1 . В объеме такой КТ двигались электрон e и дырка h с эффективными массами m_e и m_h (\mathbf{r}_e и \mathbf{r}_h — расстояние электрона и дырки от центра КТ, см. рис. 1). Предполагалось также, что зоны электронов и дырок имели параболическую форму. Характерными размерами задачи являются величины: a , a_e , a_h , a_{ex} , где

$$a_e = \frac{\epsilon_2 \hbar^2}{m_e e^2}, \quad a_h = \frac{\epsilon_2 \hbar^2}{m_h e^2}, \quad a_{\text{ex}}^0 = \frac{\epsilon_2 \hbar^2}{\mu_0 e^2} \quad (1)$$

— боровские радиусы электрона, дырки и экситона соответственно в полупроводнике с диэлектрической проницаемостью ϵ_2 (e — заряд электрона, $\mu_0 = m_e m_h / (m_e + m_h)$ — приведенная эффективная масса экситона).

Условия локализации носителя заряда в окрестностях сферической диэлектрической частицы проанализированы нами в работах [31–35], где решена в конечном аналитическом виде задача о поле, индуцированном носителем заряда вблизи диэлектрической частицы, погруженной в диэлектрическую среду, и приводятся аналитические выражения для потенциальной энергии взаимодействия носителя заряда со сферической поверхностью раздела двух сред.

В рамках изучаемой здесь простой модели квазинульмерной системы, энергию взаимодействия электрона e и дырки h , находящихся в объеме КТ в точках \mathbf{r}_e

и \mathbf{r}_h соответственно, с полем индуцированной этими квазичастицами поляризации, запишем следующим образом [36]:

$$U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) = -\frac{e^2\beta}{\varepsilon_2 a} [(r_e r_h / a^2)^2 - 2(r_e r_h / a^2) \cos \theta + 1]^{-1/2} - \frac{e^2\beta}{2(\varepsilon_2 + \varepsilon_1)a} \int_0^\infty \frac{dy (a^2 / r_h y)^a \Theta(y - (a^2 / r_h))}{|\mathbf{r}_e - y(\mathbf{r}_h / r_h)|} - \frac{e^2\beta}{2(\varepsilon_2 + \varepsilon_1)a} \int_0^\infty \frac{dy (a^2 / r_e y)^a \Theta(y - (a^2 / r_e))}{|\mathbf{r}_e - y(\mathbf{r}_e / r_e)|}, \quad (2)$$

где параметр $\beta = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) / (\varepsilon_2 + \varepsilon_1)$, угол $\theta = \widehat{\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h}$, а $\Theta(x)$ — функция Хевисайда.

Энергию поляризационного взаимодействия $U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ (2) при относительной диэлектрической проницаемости $\varepsilon = (\varepsilon_2 / \varepsilon_1) \gg 1$ можно представить в виде алгебраической суммы энергий взаимодействия дырки и электрона со своими $V_{hh'}(r_h, a)$, $V_{ee'}(r_e, a)$ и „чужими“ $V_{eh'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) = V_{he'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ изображениями соответственно [37–39] (см. рис. 1):

$$U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) = V_{hh'}(r_h, a) + V_{ee'}(r_e, a) + V_{eh'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) + V_{he'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a), \quad (3)$$

где

$$V_{hh'}(r_h, a) = \frac{e^2}{2\varepsilon_2 a} \left(\frac{a^2}{a^2 - r_h^2} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \right), \quad (4)$$

$$V_{ee'}(r_e, a) = \frac{e^2}{2\varepsilon_2 a} \left(\frac{a^2}{a^2 - r_e^2} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \right), \quad (5)$$

$$V_{eh'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) = V_{he'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) = -\frac{e^2}{2\varepsilon_2 a} \frac{a}{[(r_e r_h / a)^2 - 2r_e r_h \cos \theta + a^2]^{1/2}}. \quad (6)$$

В изучаемой простой модели квазинульмерной структуры, в рамках вышеизложенных приближений, а также в приближении эффективной массы, с использованием системы триангулярных координат [40,41] $\mathbf{r}_e = |\mathbf{r}_e|$, $\mathbf{r}_h = |\mathbf{r}_h|$, $\mathbf{r} = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|$ с началом в центре КТ, гамильтониан экситона, движущегося в объеме КТ, принимал вид [22]:

$$H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_e^2} + \frac{2}{r_e} \frac{\partial}{\partial r_e} + \frac{r_e^2 - r_h^2 + r^2}{r_e r} \frac{\partial^2}{\partial r_e \partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_h} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_h^2} + \frac{2}{r_h} \frac{\partial}{\partial r_h} + \frac{r_h^2 - r_e^2 + r^2}{r_h r} \frac{\partial^2}{\partial r_h \partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V_{eh}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a) + V(r_e, r_h) + E_g^0, \quad (7)$$

где первые три члена являются операторами кинетической энергии электрона, дырки и экситона, E_g^0 —

ширина запрещенной зоны в неограниченном полупроводнике с диэлектрической проницаемостью ε_2 . В гамильтониане $H(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ (7) энергия поляризационного взаимодействия $U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ определяется с помощью формул (3)–(6), а энергия кулоновского взаимодействия между электронами и дыркой $V_{eh}(\mathbf{r})$ описывается формулой

$$V_{eh}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\varepsilon_2 \mathbf{r}}. \quad (8)$$

В гамильтониане экситона (7) потенциал

$$V(r_e, r_h) = \begin{cases} 0, & r_e r_h \leq a \\ \infty, & r_e, r_h > a \end{cases} \quad (9)$$

описывает движение квазичастиц в объеме КТ с помощью модели бесконечно глубокой потенциальной ямы.

3. Вариационный расчет энергетического спектра экситона в полупроводниковой квантовой точке

Для возникновения в полупроводниковой КТ радиуса a объемного экситона необходимо, чтобы размер такой КТ был больше некоторого критического размера a_c , начиная с которого в КТ может образоваться объемный экситон [11–14,19–23]. Поясним качественно существование критического радиуса КТ a_c [19–22]. В неограниченном полупроводниковом материале экситон большого радиуса возникает вследствие кулоновского притяжения между электроном и дыркой. В гамильтониане экситона (7), движущегося в объеме КТ, кроме кулоновского притяжения $V_{eh}(\mathbf{r})$ (8), входят также члены $V_{ee'}(r_e, a)$ (5), $V_{hh'}(r_h, a)$ (4) и $V_{eh'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$, $V_{he'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ (6), описывающие соответственно взаимодействие электрона и дырки со своим и „чужим“ изображением (рис. 1). При этом члены $V_{ee'}(r_e, a)$ (5) и $V_{hh'}(r_h, a)$ (4) вызывают отталкивание электрона и дырки от поверхности КТ, что приводит к эффективному притяжению между квазичастицами. Взаимодействия, описываемые членами $V_{eh'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ и $V_{he'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ (6), приводят к притяжению квазичастиц к поверхности КТ, что вызывает отталкивание между электроном и дыркой. При этом члены $V_{ee'}(r_e, a)$ (5) и $V_{hh'}(r_h, a)$ (4), ответственные за притяжение между квазичастицами, будут преобладать над членами $V_{eh'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ и $V_{he'}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ (6), ответственными за отталкивание между электронами и дыркой [19–22].

В результате во взаимодействии между электроном и дыркой в КТ помимо кулоновского притяжения $V_{eh}(\mathbf{r})$ (8) между ними будет также вносить вклад некоторое дополнительное эффективное притяжение между электроном и дыркой, вызванное отталкиванием электрона $V_{ee'}(r_e, a)$ (5) и дырки $V_{hh'}(r_h, a)$ (4) от собственных изображений (рис. 1). С уменьшением радиуса КТ

$a < a_{\text{ex}}^0$ величина такого дополнительного притяжения между электроном и дыркой будет расти $\propto a^{-1}$. Такое эффективное поляризационное притяжение приводит к тому, что движущиеся в КТ электрон и дырка будут локализованными в объеме КТ с эффективной массой $\mu = \mu(a)$, большей, чем значение массы экситона μ_0 в неограниченном полупроводниковом материале с диэлектрической проницаемостью ε_2 . Следовательно, объемный экситон с эффективной массой μ_0 не может образоваться в КТ с размером $a < a_{\text{ex}}^0$ [19–22].

Таким образом, объемный экситон будет возникать только в КТ размером $a > a_{\text{ex}}^0$. Причем образование такого объемного экситона носит пороговый характер и возможно лишь в КТ, размер которой a превышает значение некоторого критического радиуса КТ a_c [19–22]. При этом с ростом радиуса КТ $a > a_{\text{ex}}^0$ эффективное притяжение между электроном и дыркой будет уменьшаться $\propto a^{-1}$. Начиная с некоторого радиуса КТ a , равного a_c , энергия такого эффективного притяжения между электроном и дыркой становится малой по сравнению с энергией связи экситона [19–22]:

$$E_{\text{ex}} = Ry_{\text{ex}} = \frac{\hbar^2}{2\mu_0 a_{\text{ex}}^0}. \quad (10)$$

При выборе вариационной волновой функции экситона в КТ используем подход, аналогичный подходу, развитому в [22,40,41]. Вариационную радиальную волновую функцию основного состояния экситона ($1s$ -состояния электрона и $1s$ -состояния дырки) в КТ радиуса a запишем в виде

$$\begin{aligned} \Psi_0(r_e, r_h, r) = & A \exp\left(-\frac{\mu(a)}{\mu_0} \frac{r}{a_{\text{ex}}^0}\right) \frac{\sin(\pi r_e/a)}{r_e} \\ & \times \frac{\sin(\pi r_h/a)}{r_h} \frac{(a^2 - r_e^2)}{a^2} \frac{(a^2 - r_h^2)}{a^2} \frac{r}{a} \frac{|r_e - (a/r_h)^2 r_h|}{a}. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь коэффициент A определяется из условия нормировки волновой функции экситона (11)

$$\int_0^a r_e dr_e \int_0^a r_h dr_h \int_r^{r_e+r_h} \Psi_0^2(r_e, r_h, r) r dr = 1,$$

а эффективная приведенная масса экситона $\mu(a)$ является вариационным параметром.

Следует отметить, что в гамильтониане экситона (7) операторы кинетической энергии электрона, дырки и экситона представлены по аналогии с соответствующими операторами кинетической энергии квазичастиц, обладающих постоянной эффективной массой. Последнее обстоятельство связано с тем, что представление операторов кинетической энергии квазичастиц с эффективной массой $m(r)$, как функций координаты r , операторами

вида

$$\hat{T} = \frac{\hbar^2}{2m(r)} \nabla_r^2 \quad (12)$$

является неправомерным, поскольку оператор (12) не является эрмитовым и поэтому не может отвечать действительной физической величине — кинетической энергии квазичастицы.

При $a \ll a_{\text{ex}}^0$ энергия размерного квантования электрона в КТ ($\sim \hbar^2/2m_e a^2$) будет велика по сравнению с энергией кулоновского взаимодействия $|V_{eh}(\mathbf{r})|$ (8) электрона и дырки и энергией поляризационного взаимодействия $U(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h, a)$ (3) электрона и дырки с поверхностью КТ которые по порядку величины равны ($\sim e^2/\varepsilon_2 a$). Поэтому кулоновским и поляризационным взаимодействием в первом приближении можно пренебречь. В этом случае основной вклад в гамильтониан экситона (7) в КТ малого радиуса $a \ll a_{\text{ex}}^0$ вносит кинетическая энергия невзаимодействующих электрона и дырки. При этом в вариационную волновую функцию экситона (11) входят волновые функции невзаимодействующих электрона и дырки, которые движутся в сферической потенциальной яме бесконечной глубины $V(r_e, r_h)$ (9) КТ.

С ростом радиуса КТ a (так что $a > a_{\text{ex}}^0$) в КТ возникнет объемный экситон [19–22]. Это обстоятельство приводит к тому, что вариационная волновая функция экситона (11) содержит в себе собственную волновую функцию экситона Ванье–Мотта. Кроме того, в вариационную функцию экситона (11) входят полиномы от r_e и r_h , дающие возможность устранить сингулярность в функционале $E_e(a, \mu(a))$ основного состояния экситона в КТ и получить выражение для функционала $E_0(a, \mu(a))$ в конечном аналитическом виде.

Для определения вариационным методом энергии основного состояния экситона $E_0(a)$ в КТ радиуса a запишем среднее значение гамильтониана экситона (7) на волновых функциях (11) в следующем виде:

$$\begin{aligned} E_0(a, \mu(a)) = & \langle \Psi_0(r_e, r_h, r) | H(r_e, r_h, a) | \Psi_0(r_e, r_h, r) \rangle \\ = & \int_0^a dr_e \int_0^a dr_h \int_r^{r_e+r_h} dr r_e r_h r \Psi_0(r_e, r_h, r) \\ & \times H(r_e, r_h, a) \Psi_0(r_e, r_h, r). \end{aligned} \quad (13)$$

Расчет зависимости энергетического спектра $E_{1,0,0;1,0,0}(a)$ основного состояния экситона ($n_e = 1$, $l_e = m_e = 0$; $n_h = 1$, $l_h = m_h = 0$, где n_e, l_e, m_e и n_h, l_h, m_h — главное, орбитальное и магнитное квантовые числа электрона и дырки соответственно) от радиуса КТ a получим путем минимизации функционала $E_0(a, \mu(a))$ (13)

$$\frac{\partial E_0(a, \mu(a))}{\partial \mu(a)} \equiv F(\mu(a), a) = 0. \quad (14)$$

Не выписывая здесь громоздких выражений для первой производной функционала $(\partial E_0(a, \mu(a))/\partial \mu(a)) \equiv$

Значение вариационного параметра $\mu(a)$ как функции радиуса a нанокристалла сульфида кадмия

a, nm	$\mu(a)/m_0$
2.5	0.40
3.0	0.37
4.0	0.32
5.0	0.28
6.0	0.23
7.0	0.21
8.0	0.20
8.5	0.197

$\equiv F(\mu(a), a)$, приведем численное решение уравнения $F(\mu(a), a) = 0$ в виде таблицы. Из таблицы следует, что решением этого уравнения является функция $\mu(a)$, которая монотонно слабо меняется в пределах

$$0.40 \leq (\mu(a)/m_0) \leq 0.197,$$

при изменении радиуса КТ a в области

$$2.5 \leq a \leq 8.5 \text{ nm} \quad (16)$$

(где m_0 — масса электрона в вакууме).

Подставляя значения вариационного параметра $\mu(a)$ (15), взятые из таблицы, одновременно с соответствующими значениями радиуса КТ a из интервала (16) в функционал $E_0(a, \mu(a))$ (13), получим энергию основного состояния экситона $E_{1,0,0;1,0,0}(a)$ (13) как функцию радиуса КТ a .

Результаты вариационного расчета энергетического спектра экситона $E_{1,0,0;1,0,0}(a)$ (13) в КТ радиуса a показаны на рис. 2. Значения функции $\mu(a)$ (15) и результаты вариационного расчета спектра экситона $E_{1,0,0;1,0,0}(a)$ (13) в КТ, радиус которой определялся неравенством (16), здесь получены в условиях экспериментов [2–5].

Полученный спектр экситона $E_{1,0,0;1,0,0}(a)$ применим только для основного состояния экситона ($n_e = 1, l_e = m_e = 0; n_h = 1, l_h = m_h = 0$), для которого выполняется неравенство

$$(E_{1,0,0;1,0,0}(a) - E_g) \ll \Delta V(a),$$

где $\Delta V(a)$ — глубина потенциальной ямы для электрона в КТ, например в КТ сульфида кадмия в области размеров $a \geq a_{\text{ex}}^0$, величина $\Delta V(a) = (2.3-2.5)$ эВ [7].

Экспериментальная зависимость положения экситонных линий поглощения КТ сульфида кадмия (с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_2 = 9.3$) размером $a \leq 30$ нм, диспергированных в прозрачной диэлектрической матрице силикатного стекла (с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_1 \approx 2.25$), которые были вызваны межзонными переходами на уровни размерного квантования электрона ($n_e = 1, l_e \leq 2$, где n_e и l_e — главное и орбитальное квантовое число электрона соответственно)

в зоне проводимости, от радиуса КТ a была получена в [2–5]. При этом законы дисперсии носителей заряда у дна зоны проводимости и валентной зоны в хорошем приближении можно считать параболическими.

Таким образом, применение нового модифицированного метода эффективной массы, с помощью которого вариационным методом был найден энергетический спектр экситона $E_{1,0,0;1,0,0}(a)$ в КТ радиуса a , позволило получить хорошее согласие спектра экситона $E_{1,0,0;1,0,0}(a)$ со спектром экситона, взятым из экспериментов [2,5]. Отличие между этими спектрами не превышало 10% (рис. 2).

Из поведения функции $\mu(a)$ вытекает, что с ростом радиуса КТ $a > a_{\text{ex}}^0$ эффективная масса экситона $\mu = \mu(a)$ уменьшается, приближаясь при a , равном величине критического радиуса КТ $a_c = 3.40 a_{\text{ex}}^0 \approx 8.5$ нм, к значению эффективной массы экситона $\mu_0 = 0.197 m_0$ в неограниченном сульфиде кадмия (см. таблицу).

В работах автора [19–22] в условиях тех же экспериментов [2–5] были получены соответственно значения критических размеров КТ сульфида кадмия $a_c^{(1)} = 2.8 a_{\text{ex}}^0$ (в рамках адиабатического приближения), $a_c^{(2)} = 1.7 a_{\text{ex}}^0$ (с учетом конечной глубины сферической потенциальной ямы КТ) и $a_c^{(3)} = 3.48 a_{\text{ex}}^0$ (вариационным методом, не ограничиваясь рамками адиабатического приближения). Критические радиусы КТ сульфида кадмия $a_c^{(3)} = 3.48 a_{\text{ex}}^0$ [22], $a_c^{(1)} = 2.8 a_{\text{ex}}^0$ [19] и $a_c = 3.40 a_{\text{ex}}^0$ находятся в хорошем согласии друг с другом, отличаясь лишь в пределах ($\leq 18\%$). Такое отличие, по-видимому, обусловлено тем обстоятельством, что вариационные методы расчета спектра экситона $E_{1,0,0;1,0,0}(a)$ (13)

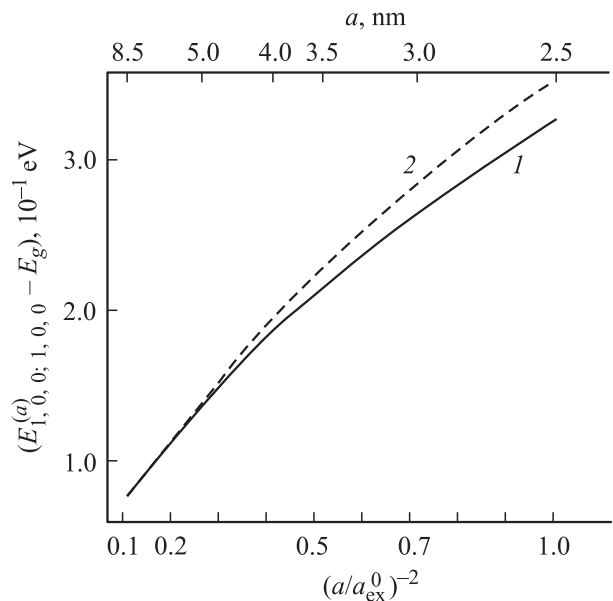


Рис. 2. Энергетический спектр экситона $E_{1,0,0;1,0,0}(a)$ как функция радиуса квантовой точки a . Кривые соответствуют: 1 — спектру экситона, взятому из экспериментов [2,5]; 2 — спектру экситона $E_{1,0,0;1,0,0}(a)$, полученного вариационным методом.

и спектра экситона в [22] могут давать завышенные значения энергии, что в свою очередь приводит также к завышенному значению критических радиусов КТ $a_c = 3.40 a_{\text{ex}}^0$ и $a_c^{(3)} = 3.48 a_{\text{ex}}^0$ [22]. Что же касается величины критического размера КТ сульфида кадмия $a_c^{(2)} = 1.7 a_{\text{ex}}^0$ [20,21], то, как и следовало ожидать, она будет несколько меньшей, чем значения $a_c^{(1)} = 2.8 a_{\text{ex}}^0$ [19], $a_c^{(3)} = 3.48 a_{\text{ex}}^0$ [22] и $a_c = 3.40 a_{\text{ex}}^0$.

Таким образом, в настоящей работе предложен новый модифицированный метод эффективной массы, с помощью которого описывается энергетический спектр экситона в полупроводниковых КТ с радиусами $a \approx a_{\text{ex}}^0$. Показано, что в рамках модели КТ, в которой КТ моделировалась бесконечно глубокой потенциальной ямой, приближение эффективной массы можно применять к описанию экситона в КТ с радиусами a , сравнимыми с боровским радиусом экситона a_{ex}^0 , считая, что приведенная эффективная масса экситона $\mu = \mu(a)$ является функцией радиуса a КТ.

Список литературы

- [1] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. Письма ЖЭТФ, **34** (8), 363 (1981).
- [2] А.И. Екимов, А.А. Онущенко. Письма ЖЭТФ, **40** (8), 337 (1984).
- [3] A. Ekimov, A. Efros. Sol St. Commun., **56** (11), 921 (1985).
- [4] А.И. Екимов, А.А. Онущенко, Ал.Л. Эфрос. Письма ЖЭТФ, **43** (6), 292 (1986).
- [5] D. Cherik, A. Efros, A. Ekimov. J. Lumin., **47** (3), 113 (1990).
- [6] A. Ekimov, F. Hache, M.C. Schanne-Klein. J. Opt. Soc. Amer., **B10** (1), 100 (1993).
- [7] В.Я. Грабовский, Я.Я. Дзенис, А.И. Екимов. ФТТ, **31** (1), 272 (1989).
- [8] Ж.И. Алфёров. ФТП, **32** (1), 3 (1998).
- [9] A.D. Yoffe. Adv. Phys., **42** (2), 173 (1993).
- [10] L. Banyai, S. Koch. *Semiconductor Quantum Dots* (World Sc. Publ. Co., Singapore, 1993).
- [11] С.И. Покутний. *Теория экситонов в квазинульмерных полупроводниковых системах* (Одесса, Астропринт, 2003).
- [12] A.P. Shpak, S.I. Pokutnyi. Progr. Phys. Metal., **6** (2), 105 (2005).
- [13] S.I. Pokutnyi. Ukr. J. Phys. Rev., **3** (1), 46 (2006).
- [14] С.И. Покутний. ФТП, **39** (9), 1101 (2005).
- [15] S.I. Pokutnyi. J. Appl. Phys., **96** (2), 1115 (2004).
- [16] С.И. Покутний. ФТП, **40** (2), 223 (2006).
- [17] S.I. Pokutnyi. Phys. Lett. A, **342**, 347 (2005).
- [18] S.I. Pokutnyi. J. Appl. Phys., **99** (1), 323 (2007).
- [19] С.И. Покутний. ФТП, **30** (11), 1952 (1996).
- [20] S.I. Pokutnyi. Phys. Lett. A, **203**, 388 (1995).
- [21] С.И. Покутний. ФТТ, **38** (2), 512 (1996).
- [22] С.И. Покутний. ФТТ, **38** (9), 2667 (1996).
- [23] А.П. Шпак, С.И. Покутний. *Спектроскопия электронных и экситонных состояний в низкоразмерных системах* (Киев, Академперіодика, 2005).
- [24] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. ФТП, **16** (7), 1209 (1982).
- [25] V.N. Soloviev, A. Eichhofer, D. Frenske. Phys. Status. Solidi B, **224** (1), 285 (2001).

- [26] R.T. Collins, P.M. Fauchet, M.A. Tischler. Phys. Today, **50** (1), 24 (1997).
- [27] C.Y. Yeh, S.B. Zhang, A. Zunger. Phys. Rev. B, **50** (19), 14 405 (1994).
- [28] D. Delerue, G. Allan, M. Lannoo. Phys. Rev. B, **48** (15), 11 024 (1993).
- [29] A.J. Read, R.J. Needs, K.J. Nash. Phys. Rev. Lett., **69** (8), 1232 (1992).
- [30] F. Buda, J. Kohanoff, M. Rarrinello. Phys. Rev. B, **69** (8), 1272 (1992).
- [31] Н.А. Ефремов, С.И. Покутний. ФТТ, **27** (1), 48 (1985).
- [32] Н.А. Ефремов, С.И. Покутний. ФТТ, **32** (10), 2921 (1990).
- [33] S.I. Pokutnyi. Phys. Status Solidi B, **172** (2), 573 (1992).
- [34] С.И. Покутний. ФТТ, **35** (2), 257 (1993).
- [35] С.И. Покутний. ФТП, **31** (12), 1443 (1997).
- [36] S.I. Pokutnyi. Phys. Low-Dim. Structur., **78**, 39 (2002).
- [37] Н.А. Ефремов, С.И. Покутний. ФТТ, **32** (6), 1637 (1990).
- [38] С.И. Покутний. ФТП, **25** (4), 628 (1991).
- [39] S.I. Pokutnyi. Phys. Lett. A, **168** (5,6), 433 (1992).
- [40] Y. Kayanuma. Sol. St. Commun., **59** (6), 405 (1986).
- [41] Н.В. Ткач, В.А. Головацкий. ФТТ, **32** (8), 2512 (1990).

Редактор Л.В. Беляков

Exciton states in semiconductor quantum dots in the framework of the modified effective mass method

S.I. Pokutnyi

G.V. Kurdjumov Institute for Metal Physics,
National Academy of Sciences of the Ukraine,
68002 Il'ichevsk, Ukraine

Abstract The new effective mass modified method which is used to describe energetic spectrum of an exciton in semiconductor quantum dots (QD) with radius a compared with the Bohr radius of the exciton a_{ex}^0 is offered. It is shown that in the framework of the QD model in which QD was modelled by an infinitely deep potential well the effective mass approximation can be used to describe an exciton in QD with radii $a \approx a_{\text{ex}}^0$ taking into account the fact that the above effective exciton mass $\mu = \mu(a)$ is a function of QD radius a .