

УДК 621.315.592

© 1990

КВАНТОВАНИЕ ДЫРКИ И КРАЙ ПОГЛОЩЕНИЯ В СФЕРИЧЕСКИХ МИКРОКРИСТАЛЛАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ СО СЛОЖНОЙ СТРУКТУРОЙ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ

Г. Б. Григорян, Э. М. Казарян, Ал. Л. Эфрос, Т. В. Язева

Для алмазоподобных полупроводников с конечной величиной спин-орбитального расщепления валентной зоны, описываемых шестизонным гамильтонианом, получены радиальные уравнения для волновых функций дырок, движущихся в сферически симметричном потенциале. С их помощью развита теория уровней размерного квантования дырок в сферических микрокристаллах с кубической кристаллической решеткой. Для кубического CdS построены зависимости положения нижних уровней размерного квантования дырок от радиуса микрокристалла. Исследованы силы осцилляторов переходов на нижний уровень размерного квантования электрона и продемонстрировано, что край поглощения микрокристаллов CdS формируется несколькими сравнимыми по интенсивности переходами с разных уровней размерного квантования дырок. Показано, что нижний уровень дырки в микрокристаллах CdS малого размера является состоянием *p*-типа симметрии и не дает вклада в оптический переход на нижний уровень размерного квантования электрона (*s*-типа симметрии). Это объясняет низкий квантовый выход люминесценции в микрокристаллах CdS малого размера.

1. Последние годы большое внимание уделяется исследованию полупроводниковых структур пониженной мерности. К таким объектам (ОД-структурам) можно отнести и стекла, легированные полупроводниковыми микрокристаллами. Развита технология позволяет направленно варьировать размер таких микрокристаллов [1], поэтому имеется возможность направленно изменять их оптические свойства, обусловленные энергетическим спектром уровней размерного квантования электрон-дырочных пар [2]. Настоящая работа посвящена расчету уровней размерного квантования дырок в кубическом полупроводнике с учетом конечной величины спин-орбитального расщепления валентной зоны Δ . Такая задача возникает при рассмотрении оптических свойств микрокристаллов малого размера, когда энергия уровней размерного квантования дырок оказывается порядка Δ (например, для CdS, где $\Delta \approx 62$ мэВ, и для GaAs, где $\Delta \approx 300$ мэВ).

2. Рассмотрение проводилось в рамках шестизонного гамильтониана, описывающего энергетический спектр валентной зоны кубических полупроводников с конечной Δ в пренебрежении гофрировкой изоэнергетических поверхностей

$$H = \frac{1}{m_0} \begin{vmatrix} P+Q & L & M & 0 & i\sqrt{1/2}L & -i\sqrt{2}M \\ L^* & P-Q & 0 & M & -i\sqrt{2}Q & i\sqrt{3/2}L \\ M^* & 0 & P-Q & -L & -i\sqrt{3/2}L^* & -i\sqrt{2}Q \\ 0 & M^* & -L^* & P+Q & -i\sqrt{2}M^* & -i\sqrt{1/2}L^* \\ -i\sqrt{1/2}L^* & i\sqrt{2}Q & i\sqrt{3/2}L & i\sqrt{2}M & P-\Delta & 0 \\ i\sqrt{2}M^* & -i\sqrt{3/2}L^* & i\sqrt{2}Q & i\sqrt{1/2}L & 0 & P-\Delta \end{vmatrix} \quad (1)$$

где введены следующие обозначения:

$$P = \frac{\gamma_1}{2} \hat{p}^2, \quad Q = \frac{\gamma}{2} (\hat{p}_1^2 - 2\hat{p}_2^2), \quad L = -i\sqrt{3}\gamma\hat{p}_-\hat{p}_z,$$

$$M = \sqrt{3}/2\gamma\hat{p}_-^2, \quad \hat{p}_\pm^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2, \quad \hat{p}_\pm = \hat{p}_x \pm i\hat{p}_y,$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z},$$

γ_1, γ — постоянные Латтинжера, которые определяют эффективные массы тяжелой и легкой дырок; $m_l = m_0/(\gamma_1 + 2\gamma)$, $m_h = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma)$, m_0 — масса свободного электрона.

После подстановки в этот гамильтониан сферически-симметричных решений, полученных в работе [3] для четных и нечетных состояний дырки с полным моментом j

$$\begin{aligned} \psi_j^+ &= \left(\frac{R_{h2}^+}{\sqrt{2j(2j-1)(2j-2)}} \Phi_{j-3/2}^{(4)} + \frac{R_{h1}^+}{\sqrt{2j(2j+2)(2j+3)}} \Phi_{j+1/2}^{(4)} \right), \\ \psi_j^- &= \left(\frac{R_{h2}^-}{\sqrt{2(j+1)(2j+3)(2j+4)}} \Phi_{j+3/2}^{(4)} + \frac{R_{h1}^-}{\sqrt{2j(2j-1)(2j+2)}} \Phi_{j-1/2}^{(4)} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

где $\Phi^{(4)}$ — 4-столбцы, а $\Phi^{(2)}$ — 2-столбцы,

$$\begin{aligned} \Phi_{j-1/2}^{(4)} &= \begin{pmatrix} -\sqrt{(j+m)(j+m-1)(j+m-2)} Y_{j-3/2, m-3/2} \\ i\sqrt{3(j-m)(j+m-1)(j+m)} Y_{j-3/2, m-1/2} \\ \sqrt{3(j+m)(j-m)(j-m-1)} Y_{j-3/2, m+1/2} \\ i\sqrt{(j-m)(j-m-1)(j-m-2)} Y_{j-3/2, m+3/2} \end{pmatrix}, \\ \Phi_{j+1/2}^{(4)} &= \begin{pmatrix} \sqrt{3(j+m)(j-m+1)(j+m-1)} Y_{j-1/2, m-3/2} \\ i(j-3m+1)\sqrt{j+m} Y_{j-1/2, m-1/2} \\ (j+3m+1)\sqrt{j-m} Y_{j-1/2, m+1/2} \\ i\sqrt{3(j+m+1)(j-m)(j-m+1)} Y_{j-1/2, m+3/2} \end{pmatrix}, \\ \Phi_{j+1/2}^{(4)} &= \begin{pmatrix} \sqrt{3(j+m)(j-m+1)(j-m+2)} Y_{j+1/2, m-3/2} \\ i(j+3m)\sqrt{j-m+1} Y_{j+1/2, m-1/2} \\ i(j-3m)\sqrt{j+m+1} Y_{j+1/2, m+1/2} \\ i\sqrt{3(j+m)(j+m+1)(j+m+2)} Y_{j+1/2, m+3/2} \end{pmatrix}, \\ \Phi_{j+3/2}^{(4)} &= \begin{pmatrix} -\sqrt{(j-m+1)(j-m+2)(j-m+3)} Y_{j+3/2, m-3/2} \\ -i\sqrt{3(j+m+1)(j-m-2)(j-m+1)} Y_{j+3/2, m-1/2} \\ \sqrt{3(j-m+1)(j+m+1)(j+m-2)} Y_{j+3/2, m+1/2} \\ -i\sqrt{(j+m+1)(j+m+2)(j+m+3)} Y_{j+3/2, m+3/2} \end{pmatrix}, \\ \Phi_{j-1/2}^{(2)} &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{(j+m)}{2j}} Y_{j-1/2, m-1/2} \\ i\sqrt{\frac{(j-m)}{2j}} Y_{j-1/2, m+1/2} \end{pmatrix}, \\ \Phi_{j+1/2}^{(2)} &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{(j-m+1)}{2(j+1)}} Y_{j+1/2, m-1/2} \\ i\sqrt{\frac{(j+m+1)}{2(j+1)}} Y_{j+1/2, m+1/2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$Y_{l, m}(\theta, \varphi)$ — шаровые функции, получаем две системы радиальных уравнений для радиальных компонент собственных волновых функций дырок R_{h2}, R_{h1}, R_s ,двигающихся в сферически-симметричном потенциале ($j=1/2, 3/2, 5/2, \dots$). Для четных состояний эта система имеет вид

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{\gamma_1}{2} - \frac{\gamma}{2} \frac{2j-3}{2j}\right) (\Delta_{j+1/2} R_{h1}^+) - \frac{\gamma}{4j} \sqrt{3(2j-1)(2j+3)} (A_{j-1/2}^+ R_{h2}^+) - \\ & \quad - \frac{\gamma}{2} \sqrt{\frac{2j+3}{j}} (\Delta_{j+1/2} R_s^+) - \varepsilon R_{h1}^+ = 0, \\ & -\left(\frac{\gamma_1}{2} + \frac{\gamma}{2} \frac{2j-3}{2j}\right) (\Delta_{j-1/2} R_{h2}^+) - \frac{\gamma}{4j} \sqrt{3(2j-1)(2j+3)} (A_{j+1/2}^- R_{h1}^+) - \\ & \quad - \frac{\gamma}{2} \sqrt{\frac{(2j-1)3}{j}} (A_{j+1/2}^- R_s^+) - \varepsilon R_{h2}^+ = 0, \\ & -\frac{\gamma}{2} \sqrt{\frac{2j+3}{j}} (\Delta_{j+1/2} R_{h1}^+) - \frac{\gamma}{2} \sqrt{\frac{3(2j-1)}{j}} (A_{j-1/2}^+ R_{h2}^+) - \\ & \quad - \frac{\gamma_1}{2} (\Delta_{j+1/2} R_s^+) - (\varepsilon - \delta) R_s^+ = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_l &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad A_l^- = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2l+1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l^2-1}{r^2}, \\ A_l^+ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2l-1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l-2)}{r^2} \end{aligned}$$

и введена безразмерная энергия $\varepsilon = E/(\hbar^2/2m_h a^2)$ и $\delta = \Delta/(\hbar^2/2m_h a^2)$, а для нечетных

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{\gamma_1}{2} - \frac{\gamma}{2} \frac{2j+5}{2(j+1)}\right) (\Delta_{j-1/2} R_{h1}^-) + \frac{\gamma}{4(j+1)} \sqrt{3(2j-1)(2j+3)} (A_{j+1/2}^- R_{h2}^-) + \\ & \quad + \frac{\gamma}{2} \sqrt{\frac{2j-1}{j+1}} (\Delta_{j-1/2} R_s^-) - \varepsilon R_{h1}^- = 0, \\ & -\left(\frac{\gamma_1}{2} + \frac{\gamma}{2} \frac{2j+5}{2(j+1)}\right) (\Delta_{j+1/2} R_{h2}^-) + \frac{\gamma}{4(j+1)} \sqrt{3(2j-1)(2j+3)} (A_{j-1/2}^+ R_{h1}^-) - \\ & \quad - \frac{\gamma}{2} \sqrt{\frac{3(2j+3)}{j+1}} (A_{j-1/2}^+ R_s^-) - \varepsilon R_{h2}^- = 0, \\ & \frac{\gamma}{2} \sqrt{\frac{2j-1}{j+1}} (\Delta_{j-1/2} R_{h1}^-) - \frac{\gamma}{2} \sqrt{\frac{3(2j+3)}{j+1}} (A_{j+1/2}^- R_{h2}^-) - \\ & \quad - \frac{\gamma_1}{2} (\Delta_{j-1/2} R_s^-) - (\varepsilon - \delta) R_s^- = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Легко видно, что системы уравнений (3)–(4) совпадают в случае бесконечно большой Δ с системой, полученной для четырехкратно вырожденной зоны Гельмонтом и Дьяконовым [4]. В случае $\Delta = 0$ переход к сферически-симметричным решениям трехзонного гамильтониана Латтинжера [5] можно осуществить следующим образом. После введения в системе уравнений (4) новых переменных

$$U = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2j-1}{j+1}} R_{h1} - R_s, \quad V = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3(2j+1)}{j+1}} R_{h2}, \quad Y = R_{h1} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2j-1}{j+1}} R_s$$

она распадается на две части

$$\frac{\gamma_1 - 2\gamma}{2} (\Delta_{j-1/2} Y) + \varepsilon Y = 0, \quad (5a)$$

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{\gamma_1}{2} + \frac{\gamma}{2} \frac{2j-1}{j+1}\right) (\Delta_{j-1/2} U) + \frac{3}{2} \frac{\gamma}{2} \frac{\sqrt{(2j+1)(2j+3)}}{j+1} (A_{j+1/2}^- V) - \varepsilon U = 0, \\ & -\left(\frac{\gamma_1}{2} + \frac{\gamma}{2} \frac{2j+5}{2(j+1)}\right) (\Delta_{j+1/2} V) + \frac{3}{2} \frac{\gamma}{2} \frac{\sqrt{(2j+1)(2j+3)}}{j+1} (A_{j-1/2}^+ U) - \varepsilon V = 0. \end{aligned} \quad (5b)$$

Полученная система для радиальных частей волновых функций также совпадает с этой системой для трехзонного сферически-симметричного гамма-милитония Латтинжера. Точно такие же уравнения (5) получаются из системы (3) заменой переменных

$$\tilde{U} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2j+3}{j}} R_{h1} + R_s, \quad \tilde{V} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3(2j+1)}{j}} R_{h1}, \quad \tilde{Y} = R_{h1} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2j+3}{j}} R_s$$

и последующим сдвигом на 1 ($j=j-1$).

3. Уровни размерного квантования дырок мы искали в предположении бесконечно высокого потенциального барьера на границе полупроводник—стекло. Это условие приводит к обращению в нуль радиальных волновых функций дырки при r , равном радиусу микрокристалла a ($r=a$). В микрокристалле сферической формы радиальные функции R_{h2} , R_{h1} , R_s , удовлетворяющие системе (3)—(4), в общем случае имеют вид сумм трех сферических функций Бесселя, аргументы которых отвечают трем зависимостям модуля волнового вектора от энергии собственного состояния (трем ветвям в законе дисперсии валентной зоны. Более подробно об этом написано в [6]). Так, для «четных» состояний эти решения для произвольного j имеют вид

$$\begin{aligned} R_{h1}^{j+}(r) &= c_1 \mathcal{J}_{j+1/2}(k_l r) + c_2 \mathcal{J}_{j+1/2}(k_h r) + c_3 \mathcal{J}_{j+1/2}(k_s r), \\ R_{h2}^{j+}(r) &= -c_1 \sqrt{\frac{3(2j-1)}{2j+3}} \mathcal{J}_{j-1/2}(k_l r) + c_2 \sqrt{\frac{2j+3}{3(2j-1)}} \mathcal{J}_{j-1/2}(k_h r) - \\ &\quad - c_3 \sqrt{\frac{3(2j-1)}{2j+3}} \mathcal{J}_{j+1/2}(k_s r), \\ R_s^{j+}(r) &= c_1 \sqrt{\frac{j}{2j+3}} \frac{2\varepsilon - (\gamma_1 + 2\gamma) k_l^2}{\gamma k_l^2} \mathcal{J}_{j+1/2}(k_l r) + \\ &\quad + c_3 \sqrt{\frac{j}{2j+3}} \frac{2\varepsilon - (\gamma_1 + 2\gamma) k_s^2}{\gamma k_s^2} \mathcal{J}_{j+1/2}(k_s r), \end{aligned} \quad (6)$$

а для «нечетных» состояний

$$\begin{aligned} R_{h1}^{j-}(r) &= c_4 \sqrt{2j-1} \mathcal{J}_{j-1/2}(k_l r) + c_5 \sqrt{2j-1} \mathcal{J}_{j-1/2}(k_h r) + c_6 \sqrt{2j-1} \mathcal{J}_{j-1/2}(k_s r), \\ R_{h2}^{j-}(r) &= c_4 \sqrt{3(2j+3)} \mathcal{J}_{j+1/2}(k_l r) - c_5 \frac{2j-1}{\sqrt{3(2j+3)}} \mathcal{J}_{j+1/2}(k_h r) + \\ &\quad + c_6 \sqrt{3(2j+3)} \mathcal{J}_{j+1/2}(k_s r), \\ R_s^{j-}(r) &= c_4 \sqrt{j+1} \frac{(\gamma_1 + 2\gamma) k_l^2 - 2\varepsilon}{\gamma k_l^2} \mathcal{J}_{j-1/2}(k_l r) + \\ &\quad + c_6 \sqrt{j+1} \frac{(\gamma_1 + 2\gamma) k_s^2 - 2\varepsilon}{\gamma k_s^2} \mathcal{J}_{j-1/2}(k_s r), \end{aligned} \quad (7)$$

где $\mathcal{J}_l(x)$ — сферические функции Бесселя, а квадраты волновых векторов k_l , k_h , k_s связаны с собственной энергией E исследуемых состояний следующими соотношениями:

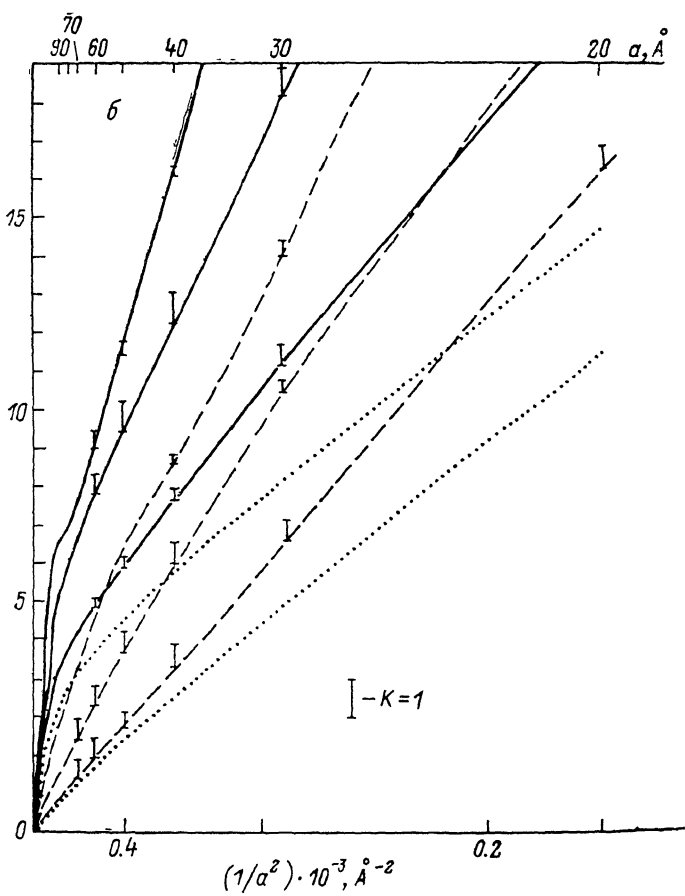
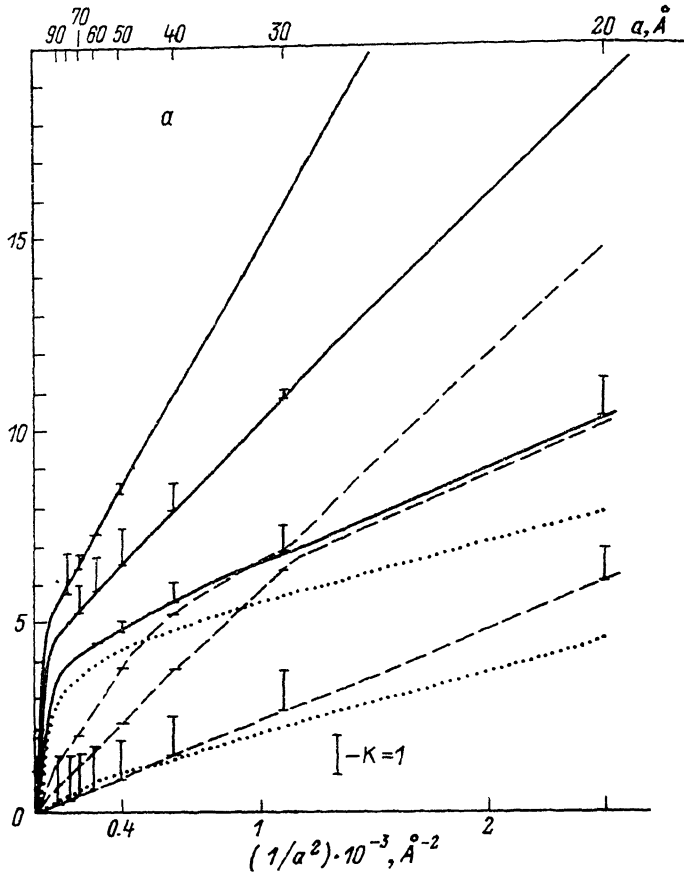
$$\begin{aligned} k_{l,s}^2 &= \frac{m_0}{\hbar^2 (\gamma_1 - 2\gamma) (\gamma_1 + 4\gamma)} [2E (\gamma_1 + \gamma) - \Delta (\gamma_1 + 2\gamma) \pm \{ [2E (\gamma_1 + \gamma) - \Delta (\gamma_1 + 2\gamma)]^2 - \\ &\quad - 4E (E - \Delta) (\gamma_1 - 2\gamma) (\gamma_1 + 4\gamma) \}^{1/2}], \quad k_h^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2 (\gamma_1 - 2\gamma)}. \end{aligned} \quad (8)$$

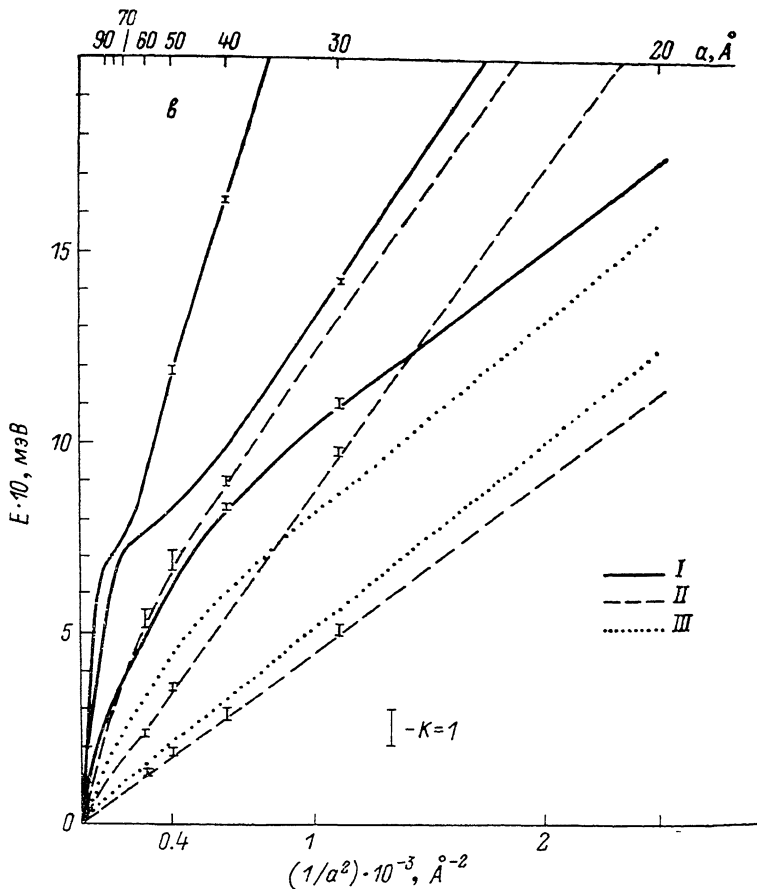
Обращение в нуль радиальных функций на границе микрокристалла

$$R_{h1}^{j+}(a) = 0, \quad R_{h2}^{j+}(a) = 0, \quad R_s^{j+}(a) = 0 \quad (9)$$

для четных состояний и

$$R_{h1}^{j-}(a) = 0, \quad R_{h2}^{j-}(a) = 0, \quad R_s^{j-}(a) = 0 \quad (10)$$





Зависимость положения нижних уровней размерного квантования дырки от радиуса микрокристалла a , рассчитанная для полупроводника с параметрами, близкими к кубическому CdS: величиной спин-орбитального расщепления валентной зоны $\Delta = 62.4$ мэВ, эффективными массами легкой и тяжелой дырки $m_l = 0.2m_0$, $m_h = 5m_0$ (а), $m_l = 0.2m_0$, $m_h = 1.6m_0$ (б), $m_l = 0.5m_0$, $m_h = 1.6m_0$ (в).

I — три нижних нечетных состояния дырки с момента $j=1/2$; II — четные состояния с $j=3/2$; III — два нижних состояния, не дающих вклада в оптический переход на первый уровень размерного квантования электрона: нечетный уровень с $j=3/2$ и четный с $j=1/2$.

для нечетных состояний дает нам две системы уравнений для численных коэффициентов c_i ($i=1, \dots, 6$). В свою очередь условие разрешимости этих систем (обращение в нуль соответствующих детерминантов) приводит к дисперсионным уравнениям для нахождения уровней размерного квантования. Для нечетных состояний это уравнение имеет вид

$$\begin{aligned}
 (2j-1) 2\varepsilon^- \left(\frac{1}{k_s^2} - \frac{1}{k_l^2} \right) \mathcal{J}_{j-1/2}(k_l a) \mathcal{J}_{j+3/2}(k_h a) \mathcal{J}_{j-1/2}(k_s a) / \mathcal{J}_{j-1/2}(k_h a) + \\
 + 3(2j+3) \left[\frac{(\gamma_1 + 2\gamma) k_l^2 - 2\varepsilon^-}{k_l^2} \mathcal{J}_{j+3/2}(k_s a) \mathcal{J}_{j-1/2}(k_l a) - \right. \\
 \left. - \frac{(\gamma_1 + 2\gamma) k_s^2 - 2\varepsilon^-}{k_s^2} \mathcal{J}_{j+3/2}(k_l a) \mathcal{J}_{j-1/2}(k_s a) \right] = 0, \quad (11)
 \end{aligned}$$

где $j=1/2, 3/2, \dots$, а для четных состояний

$$\begin{aligned}
 2\varepsilon^+ \left(\frac{1}{k_s^2} - \frac{1}{k_l^2} \right) \mathcal{J}_{j+1/2}(k_l a) \mathcal{J}_{j-3/2}(k_h a) \mathcal{J}_{j+1/2}(k_s a) + \\
 + \frac{3(2j-1)}{2j+3} \left[\frac{2\varepsilon^+ - (\gamma_1 + 2\gamma) k_s^2}{k_s^2} \mathcal{J}_{j+1/2}(k_h a) \mathcal{J}_{j-3/2}(k_l a) \mathcal{J}_{j+1/2}(k_s a) - \right. \\
 \left. - \frac{2\varepsilon^+ - (\gamma_1 + 2\gamma) k_l^2}{k_l^2} \mathcal{J}_{j+1/2}(k_h a) \mathcal{J}_{j-3/2}(k_s a) \mathcal{J}_{j+1/2}(k_l a) \right] = 0, \quad (12)
 \end{aligned}$$

где $j=3/2, 5/2, \dots$. В случае $j=1/2$ в системе волновых функций (6) $R_{k_s}^{j+}(r)=0$ и $c_s=0$. При этом дисперсионное уравнение принимает вид

$$\mathcal{J}_1(k_1 a) \mathcal{J}_1(k_s a) = 0. \quad (13)$$

При $\varepsilon < \delta$, когда $k_s^2 < 0$, входящие в выражения (11)–(13) сферические функции Бесселя должны рассматриваться как функции комплексного аргумента с помощью соотношений Эйлера для тригонометрических функций.

4. На рисунке приведены зависимости положения ряда нижних s-подобных состояний (состояний, в волновую функцию которых входят шаровые функции $Y_{l, m}(\theta, \varphi)$ с $l=0$) от обратного квадрата радиуса $1/a^2$. К ним можно отнести только нечетные состояния с $j=1/2$ и четные состояния с $j=3/2$. Расчет проводился для полупроводника с параметрами, близкими к кубическому CdS; Δ выбиралась равной 62.4 мэВ. Что касается масс легкой и тяжелой дырок, то для кубического CdS они плохо известны. Для тяжелой дырки мы использовали два значения тяжелой массы $m_h = 5m_0$ [7] и $m_h = 1.6 m_0$ [8], а для легкой $m_l = 0.2 m_0$ и $m_l = 0.3 m_0$ (см. рисунок, a–в). Видно, что сдвиг уровней размерного квантования от размера нелинеен от $1/a^2$ и сильно зависит от набора зонных параметров. Это естественным образом связано с непараболичностью закона дисперсии дырок при конечном Δ .

Кроме того, порядок уровней размерного квантования с разными моментами j зависит от радиуса микрокристалла. Предварительный анализ, проведенный в пределе $m_l/m_h \ll 1$, показывает, что нижним уровнем размерного квантования в больших микрокристаллах, когда $\hbar^2/2m_h a^2 \ll \Delta$, являются четные состояния с $j=3/2$ (состояние s-типа). Энергия соответствующего уровня описывается выражением

$$E^+ = \hbar^2 \varphi_2^2 / 2m_h a^2, \quad (14)$$

где $\varphi_2 \approx 5.76$ — первый корень функции $\mathcal{J}_2(x)$ (см. также [6]). Что касается малых микрокристаллов, когда $\hbar^2/2m_h a^2 \gg \Delta$, то, хотя в них нижнее состояние s-типа продолжает описываться выражением (14), наименьшим состоянием, как впервые было отмечено в [9], становится состояние p-типа. Его энергия описывается выражением

$$E^- = \hbar^2 \varphi_1^2 / 2m_h a^2, \quad (15)$$

где $\varphi_1 \approx 4.49$ — первый корень функции Бесселя $\mathcal{J}_1(x)$. Такими состояниями являются нечетное состояние с $j=3/2$ — $\psi_{3/2}^-$ и четное состояние с $j=1/2$ — $\psi_{1/2}^+$ (см. рисунок, штриховые линии). Видно, что в зависимости от выбора зонных параметров действительно может происходить инверсия порядка состояний s- и p-типа.

5. Обсудим теперь «правила отбора», возникающие при переходах между нижними уровнями размерного квантования электрона и дырки. Как было показано в [2], относительная интенсивность оптических переходов в полупроводниковом микрокристалле с дипольно разрешенными переходами определяется квадратом интеграла перекрытия электронных ψ_e и дырочных ψ_h волновых функций

$$K = \left| \int d^3r \psi_e(r) \psi_h(r) \right|^2. \quad (16)$$

Как было обнаружено в [10], три нижних уровня размерного квантования электрона являются соответственно состояниями 1s-, 1p- и 1d-типа. В этом случае, как следует из (16), оптические переходы на нижний уровень размерного квантования электрона возможны только из нечетных состояний $\psi_{3/2}^+$ и четных состояний $\psi_{1/2}^-$, так как только в них содержатся шаровые функции Y_{00} . Соответственно в переходах на второй уровень размерного квантования (1p) могут участвовать дырки с волновыми функциями $\psi_{1/2}^+$, $\psi_{3/2}^-$ и $\psi_{5/2}^-$, а в переходах на третий уровень размерного квантования (1d) — $\psi_{3/2}^+$, $\psi_{1/2}^-$, $\psi_{5/2}^+$ и $\psi_{7/2}^-$.

Кроме того, что в оптических переходах на один уровень размерного квантования электрона могут участвовать состояния дырки с различным полным моментом j ; сравнимые по интенсивности вклады в оптические переходы могут давать и несколько уровней с одним и тем же j . Действительно, оптические правила отбора, когда переходы идут с одного уровня размерного квантования дырки на один уровень размерного квантования электрона, были получены для полупроводников с простыми параболическими зонами [2]. Они были обусловлены тем, что волновые функции электронов и дырок в этом случае описывались одной и той же полной системой ортогональных функций. Условие ортогональности (см. (16)) и приводило к полученной в [2] простой картине спектра оптических переходов. В случае вырожденной валентной зоны спектр переходов усложняется, что обусловлено неортогональностью волновых функций электрона с волновыми функциями многих состояний дырок для одного и того же j .

На рисунке вертикальными отрезками показаны значения квадратов интеграла перекрытия K , рассчитанные для переходов, идущих на нижний уровень размерного квантования электрона. Видно, что вне зависимости от выбранных зонных параметров ряд переходов должен иметь вполне сравнимое по интенсивности значение. Таким образом, для полупроводников с вырожденной валентной зоной край поглощения формируется целой серией переходов.

В заключение еще раз отметим, что, как видно из рисунка, в результате инверсии порядка состояний s - и p -типа валентной зоны в микрокристаллах CdS возможна ситуация, когда запрещены оптические переходы между нижним уровнем размерного квантования электрона и нижним уровнем размерного квантования дырки. Этот эффект должен приводить к ослаблению краевой люминесценции, усилению безызлучательных процессов и, как следствие, к падению квантового выхода люминесценции.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Голубков В. В., Екимов А. И., Онущенко А. А., Цехомский В. А. // ФХС. 1981. Т. 7. № 3. С. 397—401.
- [2] Эфрос Ал. Л., Эфрос А. Л. // ФТП. 1982. Т. 16. № 7. С. 1209—1214.
- [3] Шека В. И., Шека Д. И. // ЖЭТФ. 1966. Т. 51. № 5. С. 1445—1436.
- [4] Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И. // ФТП. 1971. Т. 5. № 12. С. 2191—2195.
- [5] Lattinger J. M. // Phys. Rev. 1956. V. 102. N 4. P. 1030—1041.
- [6] Екимов А. И., Онущенко А. А., Плюхин А. Г., Эфрос Ал. Л. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 4. С. 1490—1501.
- [7] Бир Г. А., Пикус Г. Е. М.; Наука, 1972. 583 с.
- [8] Екимов А. И., Кудрявцев И. А., Иванов М. Г., Эфрос Ал. Л. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 192—207.
- [9] Efros Al. L., Rodina A. V. // Sol. St. Comm. 1989. V. 72. N 7. P. 645—649.
- [10] Екимов А. И., Онущенко А. А. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 40. № 8. С. 337—340.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
19 декабря 1989 г.