УДК 621.315.592

ЭКСИТОН В КВАЗИНУЛЬМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ

© С.И.Покутний

Криворожский государственный педагогический институт,
324086 Кривой Рог, Украина
(Поступила в Редакцию 11 ноября 1994 г.
В окончательной редакции 28 июня 1995 г.)

Развита теория размерного квантования экситона в малом полупроводниковом микрокристалле с учетом возможности выхода электрона из микрокристалла в окружающую его диэлектрическую матрицу. Из сравнения теории и эксперимента определяются параметры квазинульмерной структуры.

В настоящей работе в отличие от [1] энергетический спектр экситона в малом полупроводниковом монокристалле (ПМ) и его зависимость от радиуса ПМ a и эффективной массы носителей заряда теоретически исследуются в предположении, что потенциальная яма V_0 для электрона в ПМ имеет конечную глубину. Учтена также возможность выхода электрона из объема ПМ в матрицу [2].

В [1] изучалась простая модель квазинульмерной структуры: нейтральный сферический ПМ радиуса a с диэлектрической проницаемостью ε_2, окруженный средой с ε_1. В объеме такого ПМ двигались электрон e и дырка h с эффективными массами m_e и m_h (r_e и r_h — расстояния электрона и дырки от центра ПМ), причем диэлектрические проницаемости ПМ и матрицы сильно отличались ($\varepsilon_2 \gg \varepsilon_1$). Предполагалось также, что зоны электронов и дырок имели параболическую форму.

В рамках вышеизложенных приближений, а также в приближении эффективной массы гамильтониан экситона в ПМ имеет вид [1]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_h}\Delta_h + E_g + V_{hh'}(r_h, a) + V_{eh}(r_e, r_h) + V_{ee'}(r_e, a) + $$

$$+ V_{eh'}(r_e, r_h, a) + V_{he'}(r_e, r_h, a), \quad (1)$$

$$V_{eh}(r_e, r_h) = -(e^2/\varepsilon_2 a)(r_e^2 - 2r_e r_h \cos\theta + r_h^2)^{-1/2}, \qquad \theta = \mathbf{r}_e \widehat{\ } \mathbf{r}_h, \quad (2)$$

$$V_{hh'}(r_h, a) = \frac{e^2}{2\varepsilon_2 a}\left(\frac{a^2}{a^2 - r_h^2} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\right), \quad (3)$$

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

$$V_{eh'} = V_{he'} = -\frac{e^2}{2\varepsilon_2 a}\frac{a}{\left[(r_e^2 r_h^2/a^2) - 2r_e r_h\cos\theta + a^2\right]^{1/2}}, \tag{5}$$

где первые два члена в (1) определяют кинетическую энергию электрона и дырки, V_{eh} — энергия кулоновского взаимодействия электрона с дыркой, $V_{ee'}$ и $V_{hh'}$ — энергии взаимодействия с собственными изображениями для электрона и дырки, $V_{eh'}$ и $V_{he'}$ — их энергии взаимодействия с «чужими» изображениями, E_g — ширина запрещенной зоны в неограниченном полупроводнике с ε_2. Члены (3)–(5) получены в [1] при $\varepsilon_2 \gg \varepsilon_1$.

Исследуем спектр экситона в малом ПМ в случае, когда размер ПМ a ограничен условием

$$a_0 \ll a_h \ll a \lesssim a_e \simeq a_{\text{ex}} \tag{6}$$

(где $a_h = \varepsilon_2\hbar^2/m_h e^2$, $a_e = \varepsilon_2\hbar^2/m_e e^2$ и $a_{\text{ex}} = \varepsilon_2\hbar^2/\mu e^2$ — боровские радиусы дырки, электрона и экситона в полупроводнике с ε_2, $\mu = m_c m_h/(m_e + m_h)$ — приведенная эффективная масса экситона, a_0 — характерный размер порядка межатомного), при выполнении которого в потенциальной энергии гамильтониана (1) поляризационное взаимодействие играет существенную роль. В условии (6) можно использовать адиабатическое приближение ($m_e \ll m_h$). Справедливость неравенства (6) дает возможность рассматривать движение тяжелой дырки ($m_h \gg m_e$) в электронном потенциале, усредненном по движению электрона. При этом волновая функция экситона в малом ПМ в адиабатическом приближении будет иметь вид

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Psi_{n_e,l_e,m_e}(r_e, \theta_e, \varphi_e)\chi_{n_h,l_h,m_h}(r_h, \theta_h, \varphi_h), \tag{7}$$

где Ψ_{n_e,l_e,m_e} и χ_{n_h,l_h,m_h} — волновые функции электрона и дырки, n_e, l_e, m_e и n_h, l_h, m_h — радиальное, орбитальное и магнитное квантовые числа электрона и дырки, θ_e, φ_e и θ_h, φ_h — полярные и азимутальные углы электрона и дырки соответственно.

В рамках адиабатического приближения будем считать кинетическую энергию электрона T_e самой большой величиной, а последние четыре члена в гамильтониане экситона $H(\bar{\mathbf{r}}_e, \bar{\mathbf{r}}_h, a)$ (1) в малом ПМ вместе с оператором неадиабатичности будем учитывать по теории возмущений. Используя только первый порядок теории возмущений, запишем спектр экситона $E_{n_e,l_e,m_e}^{n_h,l_h,m_h}(a)$ в состоянии $(n_e, l_e, m_e; n_h, l_h, m_h)$ в малом ПМ радиуса a в следующем виде:

$$E_{n_e,l_e,m_e}^{n_h,l_h,m_h}(a) = T_e + \nabla_{ee'}(a) + \lambda_{n_e,l_e,m_e}^{n_h,l_h,m_h} a + E_g, \tag{8}$$

где T_e — кинетическая энергия электрона в сферической яме конечной глубины, $\nabla_{ee'}(a)$ — среднее значение энергии взаимодействия электрона с собственным изображением на волновых функциях сферической ямы конечной глубины Ψ_{n_e,l_e,m_e} (7). В формуле (8) величина $\lambda_{n_e,l_e,m_e}^{n_h,l_h,m_h}(a)$ является собственным значением гамильтониана тяжелой дырки

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{2m_h}\Delta_h + V_{hh'}(r_h, a) + \nabla_{n_e,l_e,m_e}(r_h, a), \tag{9}$$

$$\nabla_{n_e,l_e,m_e}(r_h,a)=\nabla_{eh}(r_h,a)+\nabla_{eh'}(r_h,a)+\nabla_{he'}(r_h,a), \tag{10}$$

где ∇_{n_e,l_e,m_e} — среднее значение энергии кулоновского взаимодействия $\nabla_{eh}(r_h,a)$ и энергии взаимодействия с «чужими» изображениями ($\nabla_{eh'}(r_h,a)$, $\nabla_{he'}(r_h,a)$) на функциях сферической ямы конечной глубины Ψ_{n_e,l_e,m_e} (7).

Для определения спектра экситона $E^{n_h,l_h,m_h}_{n_e,l_e,m_e}(a)$ (8) в малом ПМ радиуса a с учетом выхода электрона из объема ПМ в диэлектрическую матрицу, в которую погружен этот ПМ (при этом тяжелая дырка ($m_e \ll m_h$) двигается в объеме ПМ, не выходя из него), необходимо знать волновые функции электрона в объеме ПМ и в диэлектрической матрице, а также спектр электрона в потенциальной яме конечной глубины V_0, которой является для электрона малый ПМ.

В этой связи решим здесь задачу об энергетическом спектре электрона в сферической яме с радиусом a и с глубиной V_0 с учетом выхода электрона из объема ПМ в диэлектрическую матрицу.

1. Спектр электрона в потенциальной яме конечной глубины малого ПМ

Решениями радиальных уравнений Шредингера, описывающих движение электрона в сферической яме с радиусом a и с глубиной V_0 при $r \leqslant a$ и при $r > a$ в диэлектрической матрице, являются функции [3]

$$f_2(r)=A_0 j_l(p_{nl}r), \qquad p_{nl}^2=\frac{2m_{e,2}E_{nl}(a)}{\hbar^2}, \qquad r\leqslant a, \tag{11}$$

$$f_1(r)=B_0 h_l^{(1)}(i\lambda_{nl}r), \qquad \lambda_{nl}^2=\frac{2m_{e,1}(V_0-E_{nl}(a))}{\hbar^2}, \qquad r>a, \tag{12}$$

где $j_l(pr)$ — сферическая функция Бесселя, а $h_l^{(1)}(i\lambda r)$ — сферическая функция Ханкеля мнимого аргумента. В радиальных функциях $f_2(r)$ (11) и $f_1(r)$ (12) учтена возможность выхода электрона из объема ПМ (эффективная масса электрона в ПМ равна $m_{e,2}$) в окружающую этот ПМ диэлектрическую матрицу (в ней эффективная масса электрона $m_{e,1}$). Волновые функции $f_2(r)$ (11) и $f_1(r)$ (12) на границе ПМ радиуса a с диэлектрической матрицей при $r=a$ должны удовлетворять условиям [4]

$$f_1(r)\Big|_{r=a}=f_2(r)\Big|_{r=a},$$

$$\frac{1}{m_{e,1}}\frac{df_1(r)}{dr}\Big|_{r=a}=\frac{1}{m_{e,2}}\frac{df_2(r)}{dr}\Big|_{r=a}. \tag{13}$$

Используя формулы (11), (12), запишем условие непрерывности логарифмической производной функции $f_2(r)$ (11) и $f_1(r)$ (12) на границе ПМ ($r=a$)

$$\frac{\frac{d}{dr}j_l(pr)|_{r=a}}{m_{e,2}j_l(pr)|_{r=a}}=\frac{\frac{d}{dr}h_l^{(1)}(i\lambda r)|_{r=a}}{m_{e,1}h_l^{(1)}(i\lambda r)|_{r=a}}. \tag{14}$$

Для получения энергетического спектра электрона $E_{nl}(a)$ в малом ПМ радиуса a в состояниях $(n = 1,\ l = 0)$ и $(n = 1,\ l = 1)$ приведем явный вид функций $j_l(\varepsilon)$ и $h_l^{(1)}(\varepsilon)$ при $l = 0, 1$ [3]

$$j_0(\varepsilon) = \frac{\sin\varepsilon}{\varepsilon}, \qquad h_0^{(1)}(\varepsilon) = \frac{\exp(i\varepsilon)}{\varepsilon},$$

$$j_1(\varepsilon) = \frac{\sin\varepsilon}{\varepsilon^2} - \frac{\cos\varepsilon}{\varepsilon}, \qquad h_1^{(1)}(\varepsilon) = \left(\frac{1}{\varepsilon^2} - \frac{i}{\varepsilon}\right)\exp(i\varepsilon). \tag{15}$$

Введем следующие обозначения:

$$(x_0\varepsilon)_{nl} \equiv (pa)_{nl} = \left[\frac{2m_{e,2}a^2}{\hbar^2}\,E_{nl}\right]^{1/2} \equiv x_0\varepsilon,$$

$$\lambda a \equiv x_0\sqrt{1-(\varepsilon^2/\beta)},$$

$$x_0 = \left[\frac{2m_{e,2}a^2}{\hbar^2}\,\frac{V_0}{\beta}\right]^{1/2}, \qquad \varepsilon = \left(\beta\,\frac{E_{nl}}{V_0}\right)^{1/2}, \qquad \beta \equiv \frac{m_{e,2}}{m_{e,1}}. \tag{16}$$

Легко показать, что из формулы (14) с учетом выражений (15), (16) можно получить уравнение

$$\operatorname{tg}(x_0\varepsilon) = R_l(x_0\varepsilon), \tag{17}$$

где функция $R_l(x_0\varepsilon)$ при $l = 0$ и 1 принимает вид

$$R_0(x_0\varepsilon) = (x_0\varepsilon)\left[1-\beta-\beta x_0\sqrt{1-(\varepsilon^2/\beta)}\right]^{-1}, \tag{18}$$

$$R_1(x_0\varepsilon) = (x_0\varepsilon)\left[1 - \frac{(x_0\varepsilon)^2 D(x_0,\varepsilon,\beta)}{1+[2(\beta-1)+(x_0\varepsilon)^2]D(x_0,\varepsilon,\beta)}\right]. \tag{19}$$

Здесь

$$D(x_0,\varepsilon,\beta) = \beta^{-1}\left[1+x_0\sqrt{1-(\varepsilon^2/\beta)}\right]\Big/x_0^2(1-(\varepsilon^2/\beta)).$$

Решения уравнений (16)–(19) (численные или графические) при определенном значении параметра β, согласно (16), дают спектр электрона $E_{nl}(a)$

$$E_{nl}(a) = \frac{\hbar^2}{2m_{e,2}a^2}\,(x_0\varepsilon)_{nl}^2 \equiv T_e \tag{20}$$

в малом ПМ радиуса a с учетом выхода электрона из объема этого ПМ в окружающую его диэлектрическую матрицу. Величина $E_{nl}(a)$ (20) определяет также кинетическую энергию электрона T_e в сферической яме конечной глубины. С другой стороны, если известно значение энергии электрона $E_{nl}(a)$ в ПМ определенного радиуса a (например, из эксперимента), то из решения уравнений (17)–(20) можно определить значение параметра $\beta \equiv m_{e,2}/m_{e,1}$, т.е. отношение эффективных масс электрона в ПМ и в окружающей его диэлектрической матрице. Формулы (17)–(20) при $\beta = 1$ переходят в соответствующие выражения в задаче об энергетическом спектре частицы в сферической яме конечной глубины V_0 при условии, что $m_{e,2} = m_{e,1}$ [3].

2. Спектр экситона в потенциальной яме конечной глубины малого ПМ

Для определения спектра экситона в потенциальной яме конечной глубины V_0 малого ПМ радиуса a $E_{n_e,0,0}^{n_h,l_h,m_h}(a)$ (8) в состоянии (n_e, $l_e = m_e = 0$; n_h, l_h, m_h) запишем, используя формулы (11), (12) и (15), явный вид полных волновых функций электрона внутри сферического ПМ $\Psi_{n_e,0,0}^{(2)}(r,\theta,\varphi)$ и вне ПМ в диэлектрической матрице $\Psi_{n_e,0,0}^{(1)}(r,\theta,\varphi)$

$$\Psi_{n_e,0,0}^{(2)}(r) = \left(A_0/\sqrt{4\pi}\right) j_0(pr) = \left(A_0/\sqrt{4\pi}\right)[\sin(pr)/r], \qquad (21)$$

$$\Psi_{n_e,0,0}^{(1)}(r) = \left(B_0/\sqrt{4\pi}\right) h_0^{(1)}(i\lambda r) = \left(B_0/\sqrt{4\pi}\right)[\exp(-\lambda r)/r]. \qquad (22)$$

Условия нормировки и непрерывности волновых функций $\Psi_{n_e,0,0}^{(2)}(r)$ (21) и $\Psi_{n_e,0,0}^{(1)}(r)$ (22) на границе ПМ дают для неизвестных постоянных A_0 и B_0 значения

$$A_0 = \frac{2}{a^{1/2}}\left[1 - \frac{\sin(2pa)}{2pa} + \frac{\sin^2(pa)}{\lambda a}\right]^{-1/2},$$

$$B_0 = \frac{2}{a^{1/2}}\sin(pa)\left[1 - \frac{\sin(2pa)}{2pa} + \frac{\sin^2(pa)}{\lambda a}\right]^{-1/2}\exp(\lambda a). \qquad (23)$$

Проведем усреднение потенциалов $V_{eh}(r_e,r_h)$ (2), $V_{ee'}(r_e,a)$ (4), $V_{eh'}(r_e,r_h,a)$ и $V_{he'}(r_e,r_h,a)$ (5) по волновым функциям электрона $\Psi_{n_e,0,0}^{(2)}(r)$ (21), (23) в сферической яме конечной глубины

$$\nabla_{ee'}(S) = S^{-1}Z_{n_e,0}, \qquad Z_{n_e,0} = \left[1 - \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{2(pa)_{n,0}} + \frac{\sin^2(pa)_{n,0}}{(\lambda a)_{n,0}}\right]^{-1} \times$$

$$\times\left[\left(1 - \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{2(pa)_{n,0}}\right)\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} + 2\int_0^1 \frac{dx_e \sin^2\left((pa)_{n,0}x_e\right)}{1 - x_e^2}\right], \qquad (24)$$

$$\nabla_{eh}(S) = S^{-1}\left[1 - \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{2(pa)_{n,0}} + \frac{\sin^2(pa)_{n,0}}{(\lambda a)_{n,0}}\right]^{-1} \times$$

$$\times\left[\frac{\sin\left((2pa)_{n,0}x_h\right)}{(pa)_{n,0}x_h} - 2\mathrm{Ci}(2(pa)_{n,0}x_h) + 2\mathrm{Ci}(2pa)_{n,0} + 2\ln x_h - 2\right], \qquad (25)$$

$$\nabla_{eh'}(S)+\nabla_{he'}(S) = -\frac{2}{S}\left[1 - \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{2(pa)_{n,0}} + \frac{\sin^2(pa)_{n,0}}{(\lambda a)_{n,0}}\right]^{-1}\left[1 - \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{2(pa)_{n,0}}\right], \qquad (26)$$

где $\mathrm{Ci}(y)$ — интегральный косинус. Здесь и далее энергия измеряется в единицах $-\mathrm{Ry}_h^* = \hbar^2/2m_h a_h^2$ и используются безразмерные величины длины $x_{e(h)} = r_{e(h)}/a$ и $S = a/a_h$.

С учетом формул (10), (25) и (26) запишем потенциальную энергию в гамильтониане тяжелой дырки (9) в виде

$$\bar{U}_{n_e,0,0}(x,S) = V_{hh'}(x,S) + \bar{V}_{n_e,0,0}(x,S) = \frac{S^{-1}}{1-x^2} +$$

$$+ S^{-1}\left[1 - \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{2(pa)_{n,0}} + \frac{\sin^2(pa)_{n,0}}{(\lambda a)_{n,0}}\right]^{-1} \times$$

$$\times \left[\frac{\sin\left((2pa)_{n,0}x\right)}{(pa)_{n,0}x} - 2\mathrm{Ci}(2(pa)_{n,0}x) + 2\mathrm{Ci}(2pa)_{n,0} + 2\ln x + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} - 4 + \right.$$

$$\left. + \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{(pa)_{n,0}} - \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\right)\frac{\sin(2pa)_{n,0}}{(2pa)_{n,0}}\right], \qquad x_h \equiv x. \tag{27}$$

Минимум потенциальной энергии $\bar{U}_{n_e,0,0}(x,S)$ (27) достигается в точке $x = 0$, при этом

$$\bar{U}^{\min}_{n_e,0,0} = \bar{U}_{n_e,0,0}(x=0,S) = \frac{P_{n_e,0}}{S},$$

$$P_{n_e,0} = 1 + \left[1 - \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{2(pa)_{n,0}} + \frac{\sin^2(pa)_{n,0}}{(\lambda a)_{n,0}}\right]^{-1} \times$$

$$\times \left[2\mathrm{Ci}(2(pa)_{n,0}) - 2\ln(2pa)_{n,0} - 2j + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} - \right.$$

$$\left. - 2 + \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{(pa)_{n,0}} - \left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\right)\frac{\sin(2pa)_{n,0}}{(2pa)_{n,0}}\right], \tag{28}$$

где $j = 0.577$ — постоянная Эйлера. Разложив потенциал $\bar{U}_{n_e,0,0}(x,S)$ (27) в ряд по параметру $x^2 \ll 1$ с точностью до первых двух членов, получим спектр дырки $\lambda^{t_h}_{n_e,0,0}(S)$ в электронном потенциале, усредненном по движению электрона, осцилляторного вида

$$\lambda^{t_h}_{n_e,0,0}(S) = \frac{P_{n_e,0}}{S} + \omega\left(t_h + \frac{3}{2}\right), \tag{29}$$

где

$$\omega = \frac{2}{S^{3/2}}\left[1 + \left(1 - \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{2(pa)_{n,0}} + \frac{\sin^2(pa)_{n,0}}{(\lambda a)_{n,0}}\right)^{-1}\frac{2}{3}(pa)^2_{n,0}\right]^{1/2},$$

где $\omega(S)$ — частота осцилляторных колебаний дырки, $t_h = 2n_h + l_h = 0, 1, 2, \ldots$ — главное квантовое число дырки.

Условия справедливости представления потенциала $\bar{U}_{n_e,0,0}(x,S)$ (27) в виде потенциала трехмерного гармонического осциллятора сводятся к требованию $(a_{0S}/a)^2 \ll 1$ (где $a_{0S} = (\langle r_h \rangle_{t_h})^{1/2} = (t_h + 3/2)^{1/2}(h^2/m_h\omega)^{1/2}$ — амплитуда осциллятора), которое выполняется для ПМ с размерами

$$S^{1/2} \gg \left(t_h + \frac{3}{2}\right)\left[1 + \left(1 - \frac{\sin(2pa)_{n,0}}{2(pa)_{n,0}} + \frac{\sin^2(pa)_{n,0}}{(\lambda a)_{n,0}}\right)^{-1}\frac{2}{3}(pa)^2_{n,0}\right]^{-1/2}. \tag{30}$$

Учитывая значение кинетической энергии электрона T_e (20), а также формулы (24), (29) и (29), получим спектр экситона $E^{t_h}_{n_e,0,0}(S)$ (8) для ПМ, радиусы которых S одновременно удовлетворяют условиям (6) и (30)

$$E^{t_h}_{n_e,0,0}(S) = E_g + \frac{m_h}{m_{e,2}}\frac{(pa)^2_{n,0}}{S^2} + S^{-1}(Z_{n_e,0} + P_{n_e,0}) + \omega\left(t_h + \frac{3}{2}\right). \tag{31}$$

Значения параметров $(pa)_{n,0}$ и $(\lambda a)_{n,0}$, входящих в формулы (20), (22)–(31), являются решениями уравнений (17)–(19). При этом $(pa)_{n,0}$, согласно (20), определяет кинетическую энергию электрона T_e в состоянии (n,l) в сферической потенциальной яме конечной глубины.

Следует отметить, что энергетический спектр экситона $E^{t_h}_{n_e,0,0}(S)$ (31) в пределе $\beta = 1$, $(pa)_{n,0} = (x_0\varepsilon)_{n,0} \to n\pi$ и $(\lambda a) \sim V_0^{1/2} \to \infty$ переходит в соответствующее выражение для спектра экситона $E^{t_h}_{n_e,0,0}(S)$ в малом ПМ, полученного нами ранее в [1] с использованием граничного условия, состоящего в равенстве нулю волновой функции на границе раздела ПМ, что соответствовало бесконечно высокой потенциальной стенке $V_0 \to \infty$.

3. Сравнение теории с экспериментом

В [5,6] наблюдались пики межзонного поглощения диспергированных в прозрачной диэлектрической матрице силикатного стекла (диэлектрическая проницаемость которой $\varepsilon_1 = 2.25$) малых сферических ПМ сульфида кадмия ($\varepsilon_2 = 9.3$) с размерами a в интервале от 12 до 300 Å. Эффективные массы электрона $m^0_{e,2}$, дырки m_h и приведенная масса экситона $\mu_0 = m^0_{e,2}m_h/(m^0_{e,2} + m_h)$ в CdS соответственно равны $m^0_{e,2}/m_0 = 0.205$, $m_h/m_0 = 5$ (т. е. $m^0_{e,2} \ll m_h$) и $\mu_0/m_0 = 0.197$. В частности, в [5,6] экспериментально была определена зависимость положения линий поглощения ПМ, обусловленных межзонными переходами на уровни размерного квантования электрона ($n_e = 1$, $l_e = 0$), ($n_e = 1$, $l_e = 1$) и ($n_e = 1$, $l_e = 2$) в зоне проводимости, от размера ПМ a.

В экспериментальной работе [2] было установлено, что неравновесные электроны, создаваемые при межзонном возбуждении ПМ CdS, имеют конечную вероятность преодоления потенциального барьера и выхода в матрицу борно-силикатного стекла, в которую погружен ПМ. При этом глубина потенциальной ямы для электронов в ПМ $V_0 = 2.3\text{–}2.5\,\mathrm{eV}$. Следуя [1], предположим, что и в случае, когда электрон может выходить из объема ПМ, с ростом радиуса ПМ $a > a_{\mathrm{ex}}$ значение эффективной массы экситона $\mu = \mu(a)$ (электрона $m_{e,2} = m_{e,2}(a)$) уменьшается, приближаясь при a, равном величине критического радиуса ПМ ($a = a_c$), к значению эффективной массы экситона $\mu(a) = \mu_0$ (электрона $m_{e,2}(a) = m^0_{e,2}$) в неограниченном CdS, а объемный экситон[1] может возникнуть лишь в ПМ, размер которого a превышает значение некоторого критического радиуса a_c.

Сначала исследуем спектр экситона в состоянии ($n_e = 1$, $l_e = 1$; $t_h = 0$) в малом ПМ CdS с радиусом $a = 25\,\text{Å}$. В условиях экспериментов [5,6], используя в качестве волновой функции электрона в малом ПМ волновую функцию в бесконечной глубокой сферической яме радиусом a, проведем простые оценки отношения вклада энергии кулоновского взаимодействия электрона с дыркой ($|V_{eh}| \simeq e^2/\varepsilon_2 a$) к вкладу кинетической энергии электрона в состоянии ($n_e = l_e = 1$) ($T_e = h^2\varphi^2_{1,1}/2m_{e,2}a^2$, где $\varphi_{1,1} = 4.493$ [3]) в гамильтониане экситона (1) в малом ПМ. Это отношение равно $|V_{eh}|/T_e \approx (2/\varepsilon_2\varphi^2_{1,1})(m_{e,2}/m_0)(a/a_0) \simeq 5\%$ (здесь m_0 и a_0 — масса и боровский радиус электрона в вакууме). Все оставшиеся в гамильтониане экситона (1) взаимодействия вносят малый вклад в энергию экситона по сравнению с вкладом кулоновского взаимодействия электрона с дыркой, т. е. $|V_{hh'} + V_{ee'} + V_{eh'} + V_{he'}|/|V_{eh}| \leqslant 0.3$ [7,8].

Хотя в работах [7,8] и в приведенных выше простых оценках, касающихся вклада кинетической энергии электрона в спектр экситона в малом ПМ, в качестве волновой фукнции электрона была использована волновая функция электрона в бесконечной глубокой сферической яме, тем не менее эти результаты, по-видимому, дают основание и в случае учета конечности глубины потенциальной ямы для электронов в ПМ пренебречь в гамильтониане экситона (1) энергией кулоновского взаимодействия электрона с дыркой, а также энергией поляризационного взаимодействия электрона и дырки с поверхностью ПМ по сравнению с кинетической энергией электрона.

Таким образом, основной вклад в спектр экситона в состоянии ($n_e = 1$, $l_e = 1$; $t_h = 0$) в малом ПМ с радиусом $a = 25\,\text{Å}$ вносит кинетическая энергия электрона. Решая численно уравнения (17), (19) и (20) с известными из экспериментов [5,6] значениями энергии экситона $E^0_{1,1} = E_g + 1.30\,\mathrm{eV}$ и высоты потенциального барьера $V_0 = 2.5\,\mathrm{eV}$ в малом ПМ радиуса $a = 25\,\text{Å}$, получим для неизвестного параметра β (16) численное значение $\beta = 0.322$, а также значение ранее неизвестной эффективной массы электрона $m_{e,1} = \beta^{-1} m_{e,2} \simeq 3.16 m_{e,2}$ в матрице силикатного стекла. При этом эффективная масса электрона в силикатном стекле $m_{e,1}$ будет значительно больше массы электрона $m_{e,2}$ в ПМ CdS. Если эффективную массу электрона в состоянии ($n_e = 1$, $l_e = 1$) в ПМ с радиусом $a = 25\,\text{Å}$ положить равной значению массы

[1] Объемным экситоном в ПМ назовем экситон, эффективная масса μ которого равна эффективной массе μ_0 экситона в неограниченном материале.

Зависимость параметров задачи $(pa)_{1,0}$, $(\lambda a)_{1,0}$, эффективных масс электрона $m_{e,2}(a)$ и экситона $\mu(a)$ от радиуса ПМ

a, Å	$E^0_{1,0} - E_g$,* meV	$(pa)_{1,0}$	$(\lambda a)_{1,0}$	$\frac{m_{e,2}}{m_0}$	$\frac{\mu}{m_0}$
25	331.6	2.601	15.5	0.273	0.26
30	263.2	2.686	19.3	0.252	0.24
35	226.3	2.733	21.34	0.233	0.223
40	189.5	2.79	23.44	0.215	0.206
42.8	178	2.81	25.54	0.205	0.197

* Значения энергий $(E^0_{1,0} - E_g)$ из экспериментов [5,6].

электрона в неограниченном кристалле CdS $m_{e,2} = m^0_{e,2} = 0.205m_0$, то при этом эффективная масса электрона в матрице силикатного стекла оказывается равной $m_{e,1} \simeq 0.64m_0$.

Исследуем энергетический спектр экситона $E^{t_h}_{n_e,0,0}(S)$ (31) в состоянии ($n_e = 1$, $l_e = m_e = 0$; $t_h = 0$) в малом ПМ в области размеров ПМ $a \gtrsim a_{\text{ex}} = 25$ Å в условиях экспериментов [5,6]. Хотя при этом нарушается строгость одного из условий применимости построенной здесь теории (неравенства (6)), тем не менее будем считать, так же как и в [6], что формула (31) может быть использована и для ПМ с радиусами $a \gtrsim a_{\text{ex}}$.[2] Подставляя значения параметров $(pa)_{1,0}$ и $(\lambda a)_{1,0}$, полученных в результате численного решения уравнений (17), (19) и (20) при $\beta = 0.322$ для электрона в состоянии ($n_e = 1$, $l_e = 0$) при $a \gtrsim a_{\text{ex}}$ (см. таблицу), в формулу (31), найдем численные значения энергии экситона $E^0_{1,0,0}(S)$ в состоянии ($n_e = 1$, $l_e = m_e = 0$; $t_h = 0$) в малом ПМ с размерами $a \gtrsim a_{\text{ex}}$. Далее, сравнивая полученный спектр экситона $E^0_{1,0,0}(S)$ (31) с экспериментальными положениями пиков поглощения в ПМ [5,6] определим эффективные массы электрона $m_{e,2} = m_{e,2}(a)$ и экситона $\mu = \mu(a)$ в малом ПМ как функции размеров ПМ a. Численные значения функций $m_{e,2} = m_{e,2}(a)$ и $\mu = \mu(a)$ для $a \gtrsim a_{\text{ex}}$ представлены в таблице. Из результатов, приведенных в таблице, следует, что с ростом радиуса ПМ $a > a_{\text{ex}}$ эффективная масса экситона $\mu = \mu(a)$ (электрона $m_{e,2} = m_{e,2}(a)$) уменьшается, приближаясь при $a = a_c \simeq 1.7a_{\text{ex}} \simeq 43$ Å к значению эффективной массы экситона μ_0 (электрона $m^0_{e,2}$) в неограни-

[2] Строго говоря, для расчета спектра экситона в ПМ радиусом $a \gtrsim a_{\text{ex}}$ необходимо использовать вариационную волновую функцию, содержащую в себе как волновую функцию сферической ямы (21), так и собственную функцию экситона Ванье–Мотта [6,9,10]. Поскольку в области размеров ПМ $a \gtrsim a_{\text{ex}}$ поляризационное взаимодействие экситона с поверхностью ПМ (3)–(5) приводит к отталкиванию электрона и дырки от поверхности ПМ, то это взаимодействие не приводит к существенному изменению потенциала сферической ямы. Поэтому спектр экситона в ПМ с размером $a \gtrsim a_{\text{ex}}$, полученный в [9,10] с помощью таких вариационных функций, находится в хорошем согласии со спектром (31). Это обстоятельство, по-видимому, дает возможность применить спектр экситона (31) в области размеров ПМ $a \gtrsim a_{\text{ex}}$.

ченном кристалле CdS. Таким образом, возникновение объемного экситона в малом ПМ, так же как и в рамках теории [1], носит пороговый характер и возможно лишь в тех ПМ, радиус которых a больше критического размера a_c.

Следует отметить, что для экситона в основном состоянии в малом ПМ с радиусом $a \gtrsim a_{\rm ex}$ условие применимости (30) построенной здесь теории хорошо выполняется. Кроме того, при построении теории предполагалось, что зоны электронов и дырок имеют параболическую форму. Поскольку параметр непараболичности таких зон j для энергий экситона $E^0_{1,0,0}(a)$ в основном состоянии, взятых из экспериментов [5,6], в малом ПМ с размерами $a \gtrsim a_{\rm ex}$ принимает малое значение $j(a) = [E^0_{1,0,0}(a) - E_g]/E_g \leqslant 8\%$, то это обстоятельство дает основание с хорошей точностью считать валентную зону и зону проводимости параболическими.

В отличие от данной работы в [11] при определении численными методами спектра экситона в ПМ не были использованы граничные условия (13). Поэтому найденный в [11] спектр экситона нельзя сравнивать со спектром экситона (31), полученным в данной работе.

Таким образом, предложенный в данной работе новый метод определения неизвестных параметров квазинульмерных структур, в котором в отличие от [1] был учтен выход электрона из ПМ, дает возможность не только определить эффективную массу экситона $\mu(a)$, но и найти эффективную массу электрона $m_{e,1}$ в диэлектрической матрице. При этом, как и следовало ожидать, значение критического радиуса $a_c = 1.7a_{\rm ex}$ для ПМ CdS, полученное в данной работе для тех же условий [5,6], что и $\tilde{a}_c = 2.8a_{\rm ex}$ в [1], будет несколько меньше, чем $\tilde{a}_c$ (т. е. $a_c < \tilde{a}_c$).

Автор признателен В.М. Аграновичу, Б.П. Антонюку, Н.А. Ефремову, Э.А. Пашицкому за обсуждение полученных результатов.

Работа выполнена при частичной поддержке Фонда Дж. Сороса.

Список литературы

[1] Покутний С.И. ФТТ **34**, *8*, 2386 (1992); УФЖ **40**, *7*, 743 (1995).
[2] Грабовскис В.Я., Дзенис Я.Я., Екимов А.И. ФТТ **31**, *1*, 272 (1989).
[3] Давыдов А.С. Квантовая механика. М. (1973). 704 с.
[4] Гашимзаде Н.Ф., Ивченко Е.Л. ФТП **25**, *2*, 323 (1991).
[5] Екимов А.И., Онущенко А.А. Письма в ЖЭТФ **40**, *8*, 337 (1984).
[6] Chepik D., Efros L., Ekimov A. J. Lumin. **47**, *3*, 113 (1990).
[7] Pokutnyi S.I. Phys. Lett. **A168**, *5, 6* 433 (1992).
[8] Pokutnyi S.I. Phys. Stat. Sol. (b) **173**, *2*, 607 (1992).
[9] Kayanuma Y. Phys. Rev. **B38**, *14*, 9797 (1988).
[10] Ткач Н.В., Головацкий В.А. ФТТ **32**, *8*, 2512 (1990).
[11] Banyai L., Gilliot P., Hu Y. Phys. Rev. **B45**, *24*, 14136 (1992).