УДК 535.343.2

ОСНОВНОЕ ЭКСИТОННОЕ СОСТОЯНИЕ И ДИАМАГНИТНЫЙ СДВИГ В ПЛЕНКЕ КРИСТАЛЛА MoS_2

В. И. Бойчук, Н. И. Стасив

Найдены волновые функции и энергии основного состояния экситона серий A и B кристалла MoS_2 при $L \geqslant 10$ Å. Для обеих экситонных серий получена зависимость диамагнитного сдвига от толщины пленки.

В последнее время появилось немало теоретических работ, где изучаются экситонные состояния в полупроводниковых пленках и квантовых ямах гетероструктур [1-5]. Важное место среди этих работ занимают исследования, посвященные изучению энергетического спектра экситонов в пленках с толщиной L порядка экситонного боровского радиуса $a_0 = \varepsilon\hbar^2/\mu e^2$.

Келдыш [1] показал, что энергия взаимодействия электрона и дырки в очень тонкой пленке ($L \leqslant a_0$) может существенно отличаться от обычной кулоновской, и как следствие получено значительное увеличение энергии связи экситона. Последняя вычислялась для конкретных значений L пленки некоторых кристаллов Андрюшиным и Силиным в [2] для логарифмического характера электрон-дырочного взаимодействия.

Изменение энергии связи экситона с толщиной возможно также и для $L \geqslant a_0$, когда взаимодействие электрона и дырки в хорошем приближении можно считать кулоновским. В работах [4, 5] с помощью вариационного метода проведен расчет зависимости энергии экситона от толщины пленок. Полученные результаты качественно согласуются с экспериментальными данными.

Одним из недостатков имеющихся теоретических работ является то, что в них рассматриваются изотропные модели полупроводников, тогда как измерения проводятся в основном на пленках слоистых кристаллов [6-8]. Поэтому нет возможности делать качественные сопоставления результатов теории с данными эксперимента.

В данной работе на примере кристалла MoS_2 проводится расчет энергии, волновой функции и диамагнитного сдвига основного состояния экситона тонкой пленки анизотропного полупроводника.

1. Постановка задачи. Общие формулы

Рассматривается пленка анизотропного слоистого кристалла в области пространства $0 \leqslant z \leqslant L$, когда ось C кристалла совпадает с координатной осью OZ. Гамильтониан системы электрон—дырка в ней представится выражением

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_\parallel^e}\frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_\parallel^h}\frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_\parallel}\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{\hat{P}^2}{2m_\perp} + W_{\text{int}}(\rho,\ z_e,\ z_h), \qquad (1)$$

где

$$m_\perp = m_\perp^e + m_\perp^h, \quad \frac{1}{\mu_\perp} = \frac{1}{\mu_\perp^e} + \frac{1}{\mu_\perp^h}, \quad \rho = \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2},$$

$$\hat{P} = -i\hbar\nabla_{R_\perp}, \quad R = \frac{m_\perp^e \rho_e + m_\perp^h \rho_h}{m_\perp}, \quad \rho_e = x_e i + y_e j, \quad \rho_h = x_h i + y_h j,$$

W_{int} — энергия взаимодействия частиц между собой и с поверхностями пленки. Так как предполагается рассматривать пленки с $L \geqslant a_0$, то взаимодействие между электроном и дыркой считается кулоновским, а взаимодействие частиц с поверхностями пленки представлено с помощью бесконечной прямоугольной потенциальной ямы. Тогда

$$W_{\text{int}} = \begin{cases} \infty, & z_{e,h} = 0;\ L, \\ -e^2[\varepsilon_\parallel \varepsilon_\perp \rho^2 + \varepsilon_\perp^2 (z_e - z_h)^2]^{-1/2}, & 0 < z_{e,h} < L. \end{cases} \tag{2}$$

Уравнение Шредингера с гамильтонианом (1), (2) решалось с помощью прямого вариационного метода. Пробная волновая функция выбиралась в виде

$$\Psi(R_\perp, \rho, z_e, z_h) = \frac{A}{\sqrt{S}} \sin\left(\frac{\pi}{L} z_e\right) \sin\left(\frac{\pi}{L} z_h\right) \exp\{-[\alpha^2\rho^2 + \beta^2 (z_e - z_h)^2]^{1/2}\}. \tag{3}$$

Энергию экситона можно определить из минимума выражения $\mathcal{J}(\alpha, \beta) = \langle \Psi \mid \hat{H} \mid \Psi \rangle$ при условии $\langle \Psi \mid \Psi \rangle = 1$. После несложных преобразований коэффициент A и $\mathcal{J}(\alpha, \beta)$ представятся следующими формулами:

$$A^2 = \frac{\alpha^2}{\pi(F_1 + 2\beta F_2)}, \tag{4}$$

$$\mathcal{J}(\alpha, \beta) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\perp} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu_\parallel L^2} + F(\alpha, \beta, L) \equiv E_e + F(\alpha, \beta, L), \tag{5}$$

$$F(\alpha, \beta, L) = \frac{2\alpha^2}{F_1 + 2\beta F_2}\left[\frac{\hbar^2}{2\mu_\perp}\left(\frac{1}{2} F_1 + \beta F_2\right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_\perp}\beta^2 F_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu_\parallel}\left(\frac{\beta^2}{\alpha^2} F_1 - \frac{2\beta^3}{\alpha^2} F_2\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{\hbar^2}{2\mu_\parallel}\frac{\beta^4}{\alpha^2} F_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu_\parallel}\frac{\beta^2}{\alpha^2}\frac{\pi}{L} F_7\right] - \frac{4\alpha^2}{F_1 + 2\beta F_2} F_8, \tag{6}$$

$$F_0 = \int_0^L dz_e \sin^2\left(\frac{\pi}{L} z_e\right) \int_0^L dz_h \sin^2\left(\frac{\pi}{L} z_h\right)(z_e - z_h)^2 \int_{\beta|z_e - z_h|}^{\infty} dt\, (te^{2t})^{-1},$$

$$F_n = \int_0^L dz_e \sin^2\left(\frac{\pi}{L} z_e\right) \int_0^{z_e} dz_h \sin^2\left(\frac{\pi}{L} z_h\right)(z_e - z_h)^{n-1} e^{-2\beta(z_e - z_h)}, \quad n = 1,\ 2,$$

$$F_7 = \int_0^L dz_e \sin\left(\frac{\pi}{L} z_e\right) \int_0^{z_e} dz_h \sin\left(\frac{\pi}{L} z_h\right) \sin\frac{\pi}{L}(z_e - z_h)\, e^{-2\beta(z_e - z_h)},$$

$$F_8 = \int_0^L dz_e \sin^2\left(\frac{\pi}{L} z_e\right) \int_0^L dz_h \sin^2\left(\frac{\pi}{L} z_h\right) \times$$
$$\times \int_0^\infty d\rho \frac{\rho e^{-2\sqrt{\alpha^2\rho^2 + \beta^2 (z_e - z_h)^2}}}{\sqrt{\varepsilon_\parallel \varepsilon_\perp \rho^2 + \varepsilon_\perp^2 (z_e - z_h)^2}}. \tag{7}$$

Функции F_1, F_2, F_7 определяются в аналитическом, хотя и громоздком, виде, а F_0 и F_8 вычисляются на ЭВМ.

Энергия образования экситона в наших обозначениях определяется выражением

$$E = E_g + E_e + E_i, \tag{8}$$

где E_g — ширина запрещенной зоны полупроводника, $E_i = \min F(\alpha, \beta, L)$ определяет энергию «внутреннего» движения экситона, тогда энергия связи экситона равна $|E_i|$.

2. Анализ численных расчетов

Конкретные расчеты проведены для обеих экситонных серий (A, B) пленки кристалла MoS_2. Из условия минимума функции $F(\alpha, \beta)$ при различных значениях L определены $\alpha^{A,B}_{\min}$ и $\beta^{A,B}_{\min}$.

На рис. 1 приведены зависимости безразмерных параметров $\tilde{\alpha}^{A,B} = \alpha^{A,B}_{\min} a_{\parallel}$, $\tilde{\beta}^{A,B} = \beta^{A,B}_{\min} a_{\parallel}$ ($a_{\parallel} = \varepsilon_{\parallel}\hbar^2/\mu_{\parallel}e^2$) от безразмерной толщины пленки $\tilde{L} = L/a_{\parallel}$. Как видно из этого рисунка, в области малых $\tilde{L}$ ($\tilde{L} < 1$) все вариационные параметры возрастают с уменьшением толщины. Для $\tilde{L} > 1$ характер зависимости $\tilde{\alpha}^{A,B}$ и $\tilde{\beta}^{A,B}$ более сложный. Все рассматриваемые параметры достигают своих минимальных значений, а при больших $\tilde{L}$ вообще не зависят от толщины.

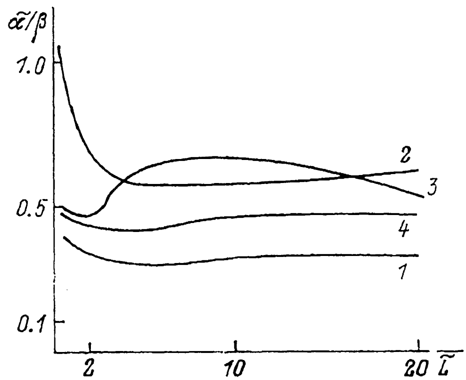

Рис. 1. Зависимости вариационных параметров $\tilde{\alpha}^A$ (1), $\tilde{\alpha}^B$ (2), $\tilde{\beta}^A$ (3), $\tilde{\beta}^B$ (4) от безразмерной толщины пленки $\tilde{L}$.

Используя полученные графики, легко определить волновую функцию экситона для произвольной толщины. В частности, для серии A при $L \geqslant 400$ Å, а для серии B при $L \geqslant 30$ Å волновые функции экситона пленки практически совпадают с соответствующими функциями массивного кристалла. На основе имеющихся зависимостей легко определить также средние значения расстояния между электроном и дыркой в различных направлениях. Расчеты показывают, что $l_z = \sqrt{\langle (z_e - z_h)^2 \rangle}$ стремится к нулю при $L \to 0$, а $l_{x,y} = \sqrt{\langle (x_e - x_h)^2 \rangle} = \sqrt{\langle (y_e - y_h)^2 \rangle}$ для малых L принимает конечные значения ($l^A_{x,y} = 16.3$, $l^B_{x,y} = 5.7$ Å). В области больших L все указанные величины выходят на насыщение: $l^A_z = 9.5$, $l^A_{x,y} = 28.4$, $l^B_z = 10.4$, $l^B_{x,y} = 16.2$ Å. Интересно сравнить эти результаты с аналогичными данными работы [6]: $r^A_z = 23.6$, $r^A_{x,y} = 37.18$, $r^B_z = 8.13$, $r^B_{x,y} = 12.82$ Å. Отметим также, что характер зависимости l_z и $l_{x,y}$ от L в области малых толщин качественно отличается от соответствующего поведения вариационных параметров. Данный результат свидетельствует о том, что для малых $\tilde{L}$ при определении среднего расстояния между частицами существенную роль играет синусоидальная часть волновой функции (3), а параметры α и β не определяют наиболее вероятного расстояния между электроном и дыркой экситона, как в случае бесконечного кристалла.

Энергия образования экситонов серии A и B определялась, как уже отмечалось, по формуле (8). На рис. 2 представлены графики $E^A(L)$ и $E^B(L)$ в области 10 Å $\leqslant L \leqslant$ 100 Å. Видно, что уменьшение толщины пленки ведет к увеличению энергии экситонов. «Скорость» же изменения E^B больше, чем E^A, поэтому в процессе $L \to 0$ «расстояние» между экситонными пиками ($E^B - E^A$) увеличивается, что и наблюдалось в [6, 8] на возбужденных состояниях экситона.

Проведенные расчеты дают возможность исследовать также влияние магнитного поля на экситонный спектр пленки MoS_2. Рассматривается случай, когда однородное магнитное поле параллельно оси C кристалла ($\mathbf{H} \parallel C$). В случае слабых полей вклад в энергию экситона можно представить выражением [9]

$$\Delta E = \frac{e^2}{8\mu_\perp c^2} H^2 \langle \rho^2 \rangle \equiv SH^2, \tag{9}$$

где S — коэффициент диамагнитного сдвига.

Для пленки S является функцией толщины пленки. Как следует из рис. 3, S^A и S^B — монотонные функции $\tilde{L}$. В области $\tilde{L} > 15$ для S^A и $\tilde{L} > 8$ для S^B коэффициенты диамагнитного сдвига выходят на насыщение: $S^A = 9.2 \cdot 10^{-13}$,

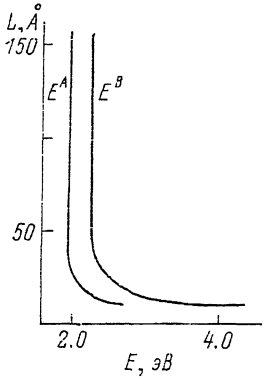

Рис. 2. Зависимости энергии образования экситонов E^A и E^B от L.

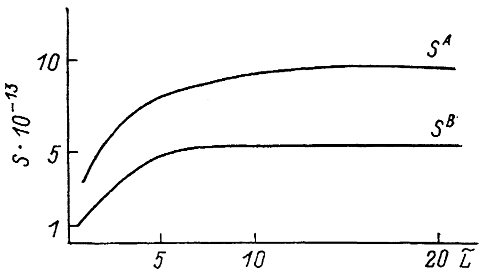

Рис. 3. Зависимости S^A и S^B от $\tilde{L}$.

$S^B = 5.1 \cdot 10^{-13}$ эВ$\cdot$(Гс)$^{-2}$. При уменьшении $\tilde{L}$ коэффициенты S^A и S^B стремятся к своим минимальным значениям, что полностью согласуется с экспериментальными данными работы [8].

Таким образом, в работе найдены волновые функции и энергии основного экситонного состояния серий A и B кристалла MoS_2 при $L \geqslant 10$ Å. Получена зависимость диамагнитного сдвига от толщины пленки для обеих экситонных серий. Проведенные расчеты можно использовать для изучения возбужденных состояний экситонов в пленках MoS_2, которые детально изучены экспериментально в работах [6, 8]. Этим вопросам будет посвящена следующая работа.

Список литературы

[1] Келдыш Л. В. // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т. 29. № 11. С. 716—719.
[2] Андрюшин Е. А., Силин А. П. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 9. С. 2676—2680.
[3] Бойчук В. И., Ницович В. М., Ткач Н. В. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 3. С. 699—703.
[4] Broido B. A. // Superlattces and Microstruct. 1989. V. 5. N 3. P. 471—472.
[5] Бойчук В. И., Билынский И. В. // УФЖ. 1990. Т. 35. № 2. С. 293—296.
[6] Evans B. L., Young P. A. // Phys. Stat. Sol. 1968. V. 25. P. 477—485.
[7] Consadori F., Frindt R. F. // Phys. Rev. B. Sol. State. 1970. V. 2. N 12. P. 4893—4896.
[8] Evans B. L., Young P. A. // Proc. Roy. Soc., 1967. V. A298. P. 74—96.
[9] Mikloz J. C., Wheeler R. C. // Phys. Rev. 1967. V. 153. N 3. P. 913—923.

Минский государственный
педагогический институт
им. И. Франко

Поступило в Редакцию
18 февраля 1991 г.
В окончательной редакции
12 августа 1991 г.