

Эффективная масса экситона в полупроводниках $A^{III}B^V$

© Н.С. Аверкиев[†], К.С. Романов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 27 августа 2001 г. Принята к печати 10 сентября 2001 г.)

В рамках метода потенциала нулевого радиуса рассчитаны эффективные массы экситонных подзон в полупроводниках со сложной структурой валентной зоны. Продемонстрировано, что результаты представленного модельного расчета хорошо согласуются с численным расчетом для объемного GaAs.

Введение

Как известно, движение экситона как целого изменяет его энергию связи в полупроводниках со сложной структурой зон. Кроме того, эффективная масса экситона оказывается разной для различных значений проекции полного момента экситона на направление движения. Это различие проявляется в расщеплении основного состояния экситона в зависимости от направления и величины его импульса. Математически для кулоновского притяжения между электроном и дыркой задача нахождения зависимости энергии связи экситона от его полного импульса оказывается весьма громоздкой и допускает только численное решение. Однако во многих случаях достаточно знать лишь величину эффективной массы экситона. В настоящей работе представлен расчет уровней и соответствующих им значений масс экситона в полупроводнике со структурой зоны типа GaAs в модели потенциала нулевого радиуса. Получены зависимости массы от параметров зонной структуры. Для упрощения вычислений использовалось сферическое приближение для сложной валентной зоны и зоны проводимости.

Расчет

В модели потенциала нулевого радиуса предполагается, что кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой можно заменить на δ -образное. Тогда уравнение Шредингера примет вид

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) + V_0\delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h)\psi = E\psi, \quad (1)$$

где

$$\hat{H} = - \left\{ -\frac{\hat{\mathbf{k}}_e^2}{2m_e} + \frac{1}{m_0} \left[-\left(\gamma_1 + \gamma \frac{5}{2}\right) \frac{\hat{\mathbf{k}}_h^2}{2} + \gamma(\hat{\mathbf{k}}_h \mathbf{J})^2 \right] \right\}, \quad (2)$$

\mathbf{k}_e — оператор импульса электрона, \mathbf{k}_h — оператор импульса дырки, V_0 — параметр взаимодействия между электроном и дыркой, \mathbf{J} — матрицы 4×4 , γ, γ_1 — параметры Латтинжера для валентной зоны типа Γ_8 [1], m_e — масса электрона в зоне проводимости, m_0 — масса

свободного электрона. В модели потенциала нулевого радиуса [2] δ -образный потенциал в уравнении Шредингера можно заменить граничным условием

$$\left. \frac{\partial}{\partial r}(r\psi_i(\mathbf{r})) \right|_{r \rightarrow 0} = -\alpha, \quad (3)$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$ — расстояние между электроном и дыркой. Для определения собственных значений и функций гамильтониана удобно перейти в импульсное представление и ввести обозначения $\xi = \frac{\gamma_1}{\gamma}$, $\eta = \frac{m_0}{\gamma m_e}$, тогда

$$\hat{H} = -\frac{\gamma}{m_0} \left\{ -\eta \frac{\mathbf{k}_e^2}{2} + \left[-\left(\xi + \frac{5}{2}\right) \frac{\mathbf{k}_h^2}{2} + (\mathbf{k}_h \mathbf{J})^2 \right] \right\}. \quad (4)$$

Поскольку гамильтониан системы инвариантен относительно обращения времени, решения будут двукратно вырождены. Поэтому из четырех линейно независимых решений можно выделить два, относящихся к одному значению энергии, у которых одна из компонент равна нулю, а другая выражается через оставшиеся. Выбранная таким образом волновая функция имеет вид

$$\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ -\frac{H_{41}}{H_{43}} a - \frac{H_{42}}{H_{43}} b \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

H_{ij} — компоненты гамильтониана (4). Уравнение для функций a и b будет выглядеть следующим образом [3]:

$$\begin{pmatrix} H_{11} - \frac{H_{41}}{H_{43}} H_{13} - \varepsilon & H_{12} - \frac{H_{42}}{H_{43}} H_{13} \\ H_{21} - \frac{H_{41}}{H_{43}} H_{23} & H_{22} - \frac{H_{42}}{H_{43}} H_{23} - \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где A, B — произвольные константы.

Решение можно представить в виде

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \frac{-\left(\frac{\xi-1}{2}\right) k_h^2 - \frac{3}{2} k_{hz}^2 - \frac{\eta k_e^2}{2} - \varepsilon}{\Delta} + B \frac{3}{4} k_{h\perp}^2 \frac{4k_{hz}^2 + k_{h\perp}^2}{\sqrt{3}k_{hz}(ik_{hx} - k_{hy})\Delta} \\ A \frac{\sqrt{3}k_{hz}(ik_{hx} - k_{hy})}{\Delta} + B \frac{-\left(\frac{\xi+1}{2}\right) k_h^2 + \frac{3}{2} k_{hz}^2 - \frac{\eta k_e^2}{2} - \varepsilon}{\Delta} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где Δ — определитель системы (6).

[†] E-mail: averkiev@pop.ioffe.rssi.ru
Fax: (812)2471017

Теперь, согласно методу потенциала нулевого радиуса, необходимо наложить граничное условие (3) на решение. Для этого выразим импульсы электрона и дырки через импульс экситона как целого и импульс относительного движения: $\mathbf{p} = \frac{\mathbf{k}_h + \mathbf{k}_e}{2}$ и $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_e}{2}$. Граничное условие будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(a(\mathbf{r}, \mathbf{p}))}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow 0} &= -\alpha \cdot a(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \Big|_{r \rightarrow 0}, \\ \frac{\partial(b(\mathbf{r}, \mathbf{p}))}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow 0} &= -\alpha \cdot b(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \Big|_{r \rightarrow 0}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $a(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ — фурье-преобразованная по \mathbf{k} компонента a , $b(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ — фурье-преобразованная по \mathbf{k} компонента b . Поскольку валентная зона и зона проводимости в рассматриваемой задаче сферически симметричны, для упрощения расчетов можно вычислить усредненное по углам фурье-изображение. Приведем вычисления лишь для одной из компонент (a), поскольку для другой (b) они аналогичны:

$$\begin{aligned} a(r, p) &= 2\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi e^{ikr \sin \Theta} a(k, \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta dk d\Theta \\ &= \frac{4\pi}{r} \int_0^\infty \int_0^\pi k \sin(kr) a(k, \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta dk. \end{aligned}$$

Поскольку $a(-k, \vartheta)|_{-\mathbf{p}} = a(k, \vartheta)|_{\mathbf{p}}$, а \mathbf{p} будет появляться лишь в четных степенях вследствие сферической симметрии, для вычисления масс экситона можно ограничиться 2-м порядком по \mathbf{p} . Волновые функции для двух состояний экситона, отвечающих различным энергиям при $\mathbf{p} \neq 0$, находятся из (7) при $A \neq 0, B = 0$ или $A = 0, B \neq 0$. Выражения для волновых функций в координатном представлении весьма громоздки, поэтому мы их не приводим.

Подставив значения для $a(r, p)$, $b(r, p)$ в соответствующие граничные условия, определим сначала энергию покоящегося ε_0 , а потом и энергию экситона ε при $p \neq 0$. Получающиеся выражения при $p \neq 0$ для волновой функции и дисперсионное уравнение весьма громоздки. Дисперсионное уравнение имеет вид дробно-линейной функции и в качестве параметров содержит ξ и η . Оказалось, что от величины α эффективная масса экситона не зависит (α определяет энергию связи экситона при $p = 0$).

Выражение для ε имеет вид

$$\varepsilon = -|\varepsilon_0| + \frac{p^2}{2m_{1,2}}, \quad (9)$$

где

$$\varepsilon_0 = \gamma \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m_0} \frac{2(\xi + \eta + 2)(\xi + \eta - 2)(\xi + \eta)^2}{((\xi + \eta + 2)^{3/2} + (\xi + \eta - 2)^{3/2})^2},$$

а m_1 и m_2 — эффективные массы экситона.

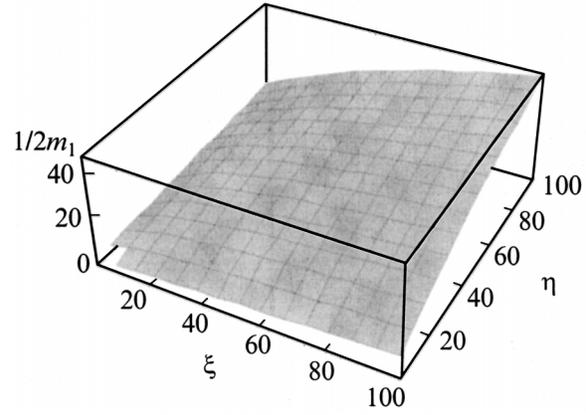


Рис. 1. Зависимость эффективной массы экситона для нижней подзоны от зонных параметров.

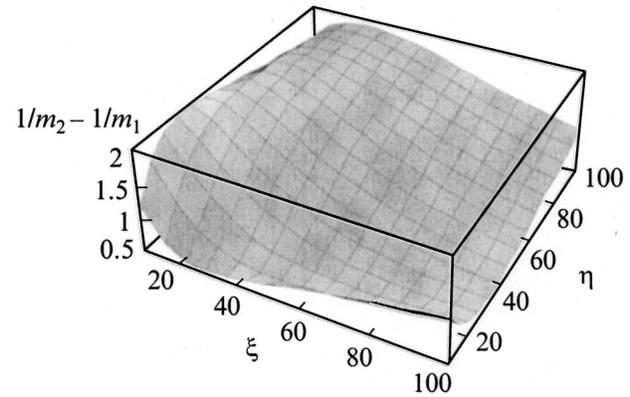


Рис. 2. Зависимость расщепления экситонных ветвей от параметров ξ и η .

На рис. 1 приведена зависимость коэффициента $1/2m_1$ для нижней подзоны от ξ и η в единицах $\hbar^2\gamma/m_0$. На рис. 2 показана разность обратных масс экситона $1/2m_1 - 1/2m_2$ для двух ветвей.

Результаты данного расчета интересно сравнивать с результатами численного расчета эффективной массы экситона в GaAs [4]. Используя [4], находим $1/m_1 \approx 3.45$, согласно расчетам по предложенной методике $1/m_1 \approx 4$. Такое согласие следует считать удовлетворительным.

Заключение

В работе рассчитаны трансляционные массы двух экситонных ветвей для объемных кубических кристаллов $A^{III}B^V$. Полученные данные можно использовать для анализа оптических свойств этих соединений, поскольку трансляционные массы не зависят от исходной энергии связи. Кроме того, указанный метод можно использовать и для оценки величин масс экситона и в двумерных структурах на основе соединений со сложной структурой зон.

Список литературы

- [1] J.M. Luttinger. Phys. Rev., **102**, 1030 (1956).
- [2] Ю.Н. Демков, В.Н. Островский. *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике* (Л., Изд-во ЛГУ, 1975).
- [3] Ч. Киттель. *Квантовая теория твердых тел* (М., Наука, 1967).
- [4] E.O. Kane. Phys. Rev. B, **11**, 3850 (1975).

Редактор Л.В. Беляков

The exciton effective mass in $A^{III}B^V$ semiconductors

N.S. Averkiev, K.S. Romanov

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The effective masses of excitonic subbands in semiconductors with a complex valence band structure have been calculated in the framework of the zero radius potential model. It is shown that our results correlate well with the numerical calculations for the bulk GaAs.