

PACS numbers: 68.65.Hb, 71.35.Ee, 73.20.Mf, 73.21.La, 73.22.Lp, 73.63.Kv, 81.05.Zx

Экситон из пространственно разделённых электрона и дырки в квазиульмерных наноструктурах

С. И. Покутний, А. П. Горбик

*Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины,
ул. Генерала Наумова, 17,
03164 Киев, Украина*

Обнаружен эффект существенного увеличения энергии связи основного состояния экситона из пространственно разделённых электрона и дырки (дырка движется в объёме полупроводниковой квантовой точки, а электрон локализован на внешней сферической поверхности раздела квантовая точка–диэлектрическая матрица) по сравнению с энергией связи экситона в монокристалле CdS.

Виявлено ефект істотного збільшення енергії зв'язку основного стану екситона з просторово розділеними електроном і діркою (дірка рухається в об'ємі напівпровідникової квантової точки, а електрон локалізований на зовнішній сферичній поверхні розділу квантова точка–матриця) порівняно з енергією зв'язку екситона у монокристалі CdS.

The effect of a substantial increase of the binding energy of an exciton with the spatially separated electron and hole as compared with the binding energy of an exciton within the single-crystalline CdS is found out.

Ключевые слова: экситон из пространственно разделённых электрона и дырки, квантовая точка, энергия связи экситона.

(Получено 9 сентября 2013 г.; после доработки — 1 декабря 2014 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Применению полупроводниковых наносистем, состоящих из полупроводниковых нанокристаллов сферической формы — так называемых квантовых точек (КТ), в качестве активной области нанолазеров препятствует малая энергия связи экситона $E_{ex}(a)$ (a — радиус КТ) в наносистеме [1, 2]. Поэтому исследования направленные на

поиск наноструктур, в которых может наблюдаться существенное увеличение энергии связи экситона $E_{ex}(a)$, является актуальными.

В настоящей работе обнаружен эффект существенного увеличения энергии связи основного состояния экситона из пространственно разделённых электрона и дырки (дырка движется в объёме КТ, а электрон локализован на внешней сферической поверхности раздела КТ–диэлектрическая матрица) по сравнению с энергией связи экситона в монокристалле CdS.

2. ПОЛНАЯ ЭНЕРГИЯ И ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ЭКСИТОНА

Рассмотрим модель квазиульмерной наносистемы: нейтральную сферическую КТ радиуса a , которая содержит в своём объёме полупроводник с диэлектрической проницаемостью (ДП) ε_2 , окружённую диэлектрической матрицей с ДП ε_1 . В объёме КТ движется дырка h с эффективной массой m_h , а электрон e с эффективной массой $m_e^{(1)}$ находится в матрице. Предположим, что на сферической поверхности раздела КТ–матрица существует бесконечно высокий потенциальный барьер. Поэтому в изучаемой модели дырка h не может выйти из объёма КТ, а электрон e не может проникнуть в объём КТ. Для простоты, не теряя общности, будем считать, что дырка h расположена в центре КТ. С ростом радиуса a КТ (так что $a \gg a_{ex}$, где a_{ex} — боровский радиус экситона в полупроводнике с ДП ε_2) сферическая поверхность раздела КТ–матрица переходит в плоскую поверхность раздела «полупроводник с ДП ε_2 –матрица с ДП ε_1 ». Экситон из пространственно — разделённых электрона и дырки становится двумерным. Вкладом энергии поляризационного взаимодействия электрона и дырки с поверхностью КТ в гамильтониан экситона в первом приближении можно пренебречь. Поэтому в потенциальной энергии гамильтониана экситона остаётся только энергия кулоновского взаимодействия электрона с дыркой [3]:

$$V_{eh}(r) = -\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2\varepsilon_1\varepsilon_2} \frac{e^2}{r}, \quad (1)$$

где r — расстояние электрона от центра КТ. Уравнение Шрёдингера с таким гамильтонианом описывает двумерный экситон из пространственно разделённых электрона и дырки (электрон движется в матрице с ДП ε_1 , а дырка — в полупроводнике с ДП ε_2), энергетический спектр которого имеет вид [4]:

$$E_n^{2D} = -\frac{Ry_{ex}^{2D}}{(n + 1/2)^2}, \quad Ry_{ex}^{2D} = \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2\varepsilon_1\varepsilon_2}\right)^2 \left(\frac{\mu_0}{m_0}\right) Ry_0, \quad (2)$$

где $Ry_0 = 13,606$ эВ — постоянная Ридберга, $n = 0, 1, 2, \dots$ —

главное квантовое число экситона, $\mu_0 = m_e^{(1)} m_h / (m_e^{(1)} + m_h)$ — приведённая масса экситона. Боровский радиус и энергия связи основного состояния такого двумерного экситона, согласно (2), принимают вид:

$$a_{ex}^{2D} = (2\varepsilon_1 \varepsilon_2 / (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)) (\hbar^2 / \mu_0 e^2), \quad (3)$$

$$E_{ex}^{2D} = -4Ry_{ex}^{2D}. \quad (4)$$

При этом энергия связи E_{ex}^{2D} (4) основного состояния двумерного экситона (из пространственно разделённых электрона и дырки)

$$E_{ex}^{2D} = [1 + \varepsilon_2 / \varepsilon_1]^2 (\mu_0 / \bar{\mu}) E_{ex}^{2D} \quad (5)$$

в $[1 + \varepsilon_2 / \varepsilon_1]^2 (\mu_0 / \bar{\mu})$ раз больше энергии связи

$$E_{ex}^{2D} = -(\bar{\mu} / m_0) \varepsilon_2^{-2} Ry_0 \quad (6)$$

основного состояния трёхмерного экситона (где μ — приведённая масса экситона в полупроводнике с ДП ε_2).

Найдём полную энергию $E_0(a)$, а также энергию связи $E_{ex}(a)$ основного состояния экситона в наносистеме вариационным методом. Вариационную радиальную волновую функцию основного состояния экситона (1s-состояния электрона и 1s-состояния дырки) в наносистеме запишем в виде [3]:

$$\Psi(r, a) = A (r/a) \exp \left[-(\mu(a) / \mu_0) (r/a_{ex}^{2D}) \right], \quad (7)$$

где A нормировочный коэффициент, а приведённая масса экситона $\mu(a)$ является вариационным параметром. Энергия связи $E_{ex}(a)$ основного состояния экситона в такой наносистеме определяется выражением:

$$E_{ex}(a) = E_0(a) - \langle \Psi(r, a) | V_{hh'}(a) + V_{ee'}(r, a) | \Psi(r, a) \rangle, \quad (8)$$

где $\langle \Psi(r, a) | V_{hh'}(a) + V_{ee'}(r, a) | \Psi(r, a) \rangle$ описывает средние значения энергий взаимодействия дырки $V_{hh'}$ и электрона $V_{ee'}$ со своими изображениями на вариационных функциях (7). Поскольку величины средних энергий взаимодействия дырки и электрона со своими изображениями вносят в энергию связи $E_{ex}(a)$ (8) вклады с разными знаками, то они в значительной степени компенсируют друг друга. Поэтому значения энергии связи $E_{ex}(a)$ (8) основного состояния экситона слабо отличаются от соответствующих значений полной энергии $E_0(a)$ основного состояния экситона в таких наносистемах.

При исследовании образцов стёкол с КТ CdS в экспериментальных работах [5] установлено, что электрон может локализоваться в поляризационной яме вблизи внешней поверхности КТ, а дырка при этом движется в объёме КТ.

Результаты вариационного расчёта полной энергии $E_0(a)$ и энергии связи $E_{ex}(a)$ (8) основного состояния экситона (из пространственно разделённых электрона и дырки) здесь получены для наносистем, содержащих КТ CdS (см. рис.), синтезированных в матрице боросиликатного стекла, которые исследовались в экспериментальной работе [5]. В [5] исследовались образцы стёкол с малыми концентрациями КТ ($\approx 0,003-0,06\%$). Оптические свойства таких наносистем в основном определяются энергетическими спектрами электрона и дырки, локализованных вблизи сферической поверхности одиночных КТ, синтезированных в матрице стекла.

С ростом радиуса a КТ наблюдается увеличение полной энергии $|E_0(a)|$ и энергии связи $|E_{ex}(a)|$ (8) основного состояния экситона. В интервале радиусов $5,1 \leq a \leq 35,5$ нм энергия связи $|E_{ex}(a)|$ (8) основного состояния экситона существенно превышает (в 4,2–79 раз) значение энергии связи экситона $E_{ex}^{2D(1)} \approx -31$ мэВ (6) в монокристалле CdS. Начиная с радиусов КТ $a \geq a^{(1)} \approx 35,5$ нм значения полной энергии $E_0(a)$, а также энергии связи $E_{ex}(a)$ (8) экситона асимп-

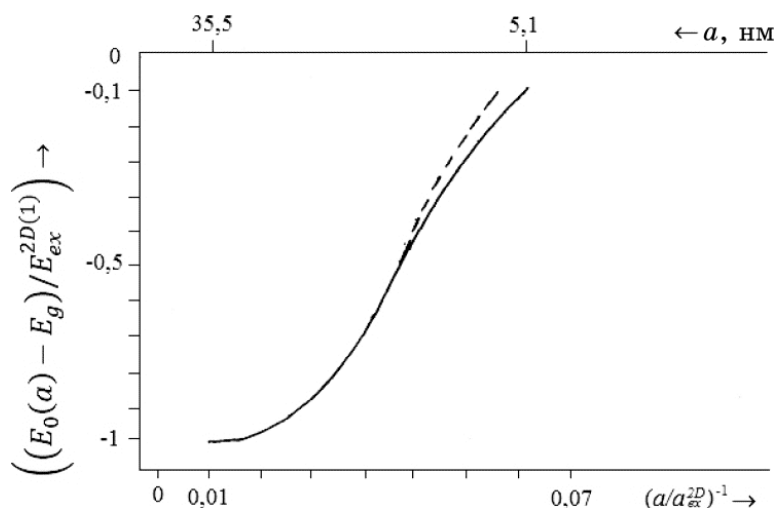


Рис. Зависимость энергии основного состояния экситона $E_0(a) - E_g$ (сплошная линия), а также энергии связи основного состояния экситона $E_{ex}(a) - E_g$ (8) (пунктир) от радиуса a КТ сульфида кадмия. Здесь $E_g = 2,58$ эВ — ширина запрещённой зоны в монокристалле сульфида кадмия, $E_{ex}^{2D(1)} = 2,435$ эВ (4) и $a_{ex}^{2D} = 0,36$ нм (3) — энергия связи и борковский радиус основного состояния двумерного экситона (из пространственно разделённых электрона и дырки) соответственно.

тотически следуют к значениям $E_{ex}^{2D(1)} \approx -2,435$ мэВ, определяющим энергии связи основного состояния двумерного экситона (из пространственно разделённых электрона и дырки) (см. рис.).

Эффект существенного увеличения энергии связи $|E_{ex}(a)|$ (8) основного состояния экситона (из пространственно разделённых электрона и дырки) в изучаемых наносистемах (по сравнению с энергиями связи экситона в монокристалле CdS) обуславливается двумя факторами: 1) существенным увеличением энергии кулоновского взаимодействия (1) электрона и дырки с поверхностью КТ (эффект «диэлектрического усиления» [8]); 2) пространственным ограничением области квантования объёмом КТ; при этом с увеличением радиусов КТ, начиная с радиусов КТ $a \geq a^{(1)} \approx 35,5$ нм, экситон становится двумерным с энергиями связи основного состояния $E_{ex}^{2D(1)}$ и $E_{ex}^{2D(2)}$ (4), значения которых, согласно (5), (6), почти на два порядка превышают энергии связи экситона в монокристаллах CdS (отношение $|E_{ex}^{2D(1)}/E_{ex}^{2D(1)}| \approx 78,6$) (см. рис.).

Авторы надеются, что настоящая работа будет стимулировать экспериментальные исследования наногетероструктур, которые можно использовать в качестве активной области нанолазеров, работающих на экситонных переходах.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Ж. И. Алфёров, *Успехи физических наук*, **172**, № 9: 1068 (2002).
2. S. I. Pokutnyi, *Phys. Lett. A*, **342**, No. 5: 347 (2005).
3. S. I. Pokutnyi, *Phys. Express*, **2**: 1 (2012).
4. Ю. Е. Лозовик, В. Н. Нишанов, *Физика твердого тела*, **18**, № 11: 3267 (1976).
5. В. Я. Грабовскис, Я. Я. Дзенис, А. И. Екимов, *Физика твердого тела*, **31**, № 1: 272 (1989).
6. S. I. Pokutnyi, *Phys. Lett. A*, **203**: 388 (1995).
7. Л. В. Келдыш, *Письма в ЖЭТФ*, **29**, № 11: 776 (1979).

REFERENCES

1. Zh. I. Alferov, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, **172**, No. 9: 1068 (2002).
2. S. I. Pokutnyi, *Phys. Lett. A*, **342**, No. 5: 347 (2005).
3. S. I. Pokutnyi, *Phys. Express*, **2**: 1 (2012).
4. Yu. E. Lozovik and V. N. Nishanov, *Fizika Tverdogo Tela*, **18**, No. 11: 3267 (1976).
5. V. Ya. Grabovskis, Ya. Ya. Dzenis, and A. I. Ekimov, *Fizika Tverdogo Tela*, **31**, No. 1: 272 (1989).
6. S. I. Pokutnyi, *Phys. Lett. A*, **203**: 388 (1995).
7. L. V. Keldysh, *Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **29**, No. 11: 776 (1979).