

СВЯЗАННОЕ СОСТОЯНИЕ ЭКСИТОНА НА СЛАБОПРИТЯГИВАЮЩЕМ ДЕФЕКТЕ В ПОЛУПРОВОДНИКЕ С ВЫРОЖДЕННОЙ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНОЙ

М.Э.Райх, А.Л.Эфрос

Показано, что в полупроводнике с вырожденной валентной зоной при отсутствии гофрировки изознергетических поверхностей имеется связанное состояние экситона на любом притягивающем дефекте.

Обычно задача об образовании связанного состояния экситона на дефекте сводится к задаче о локализации частицы с массой, равной трансляционной массе экситона, в некоторой эффективной потенциальной яме. При этом связанное состояние образуется лишь в случае, когда мощность ямы превышает некоторое пороговое значение. Для дефектов с мощностью меньшей пороговой связанное состояние отсутствует. В настоящей работе отмечается, что этот вывод не применим к полупроводникам с вырожденной валентной зоной. Показано, что в изотропном приближении любой дефект, сколь угодно слабо притягивающий экситон, образует связанное состояние.

Гамильтониан экситона в полупроводнике с вырожденной валентной зоной имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_L(p_h) + \frac{p_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{\kappa |r_e - r_h|}, \quad (1)$$

где r_e , p_e и r_h , p_h – координаты и импульсы электрона и дырки соответственно, m_e – масса электрона, κ – диэлектрическая проницаемость, $\hat{\mathcal{H}}_L$ – гамильтониан Латтинжера

$$\hat{\mathcal{H}}_L(p) = \frac{p^2}{2m_h} \hat{\Lambda}_h(p) + \frac{p^2}{2m_l} \hat{\Lambda}_l(p), \quad (2)$$

где m_h и m_l – массы тяжелой и легкой дырок; $\hat{\Lambda}_h(p) = 9/8 - (p\vec{J})^2/2p^2$ и $\hat{\Lambda}_l = 1 - \hat{\Lambda}_h$ – операторы проектирования на состояния тяжелой и легкой дырок соответственно: \vec{J} – оператор спинового момента со значением $3/2$ ¹.

В гамильтониане (1) переменные не разделяются, так что не удается отделить движение экситона, как целого, от относительного движения электрона и дырки в нем. Однако такое разделение оказывается возможным при больших импульсах трансляционного движения \vec{P} , таких что $\vec{P}^2/2m_l \gg E_B$, где $E_B = m_e e^4 / 2\hbar^2 \kappa^2$. Последнее условие означает, что расщепление экситонных ветвей, связанных с тяжелой дыркой много больше энергии связи экситона E_B (мы полагаем $m_h \gg m_e \sim m_l$). Закон дисперсии "тяжелого" экситона при этом имеет вид²

$$\epsilon(\vec{P}) = \frac{\vec{P}^2}{2m_h} + \frac{4E_B^2 m_e}{\vec{P}^2} - E_B, \quad (3)$$

а соответствующие волновые функции равны

$$\Psi_{\vec{P}, \mu}(r, R) = \varphi_0(r) F_{\vec{P}, \mu}(R) \quad (4)$$

$$F_{\vec{P}, \mu}(R) = e^{i \vec{P} R / \hbar} \chi_\mu(\vec{P}), \quad (5)$$

где $R = (m_e r_e + m_h r_h) / (m_e + m_h)$, $r = r_e - r_h$, φ_0 – водородоподобная функция основного состояния, а $\chi_\mu(\vec{P})$ – собственная функция оператора $(\vec{J} \cdot \vec{P})/\vec{P}$: $(\vec{J} \cdot \vec{P})/\vec{P} \chi_\mu(\vec{P}) = \mu \chi_\mu(\vec{P})$, причем индекс μ в (4) принимает значения $\pm 3/2$.

В рамках того же приближения можно получить эффективное уравнение Шредингера, опи-зывающее движение экситона в поле дефекта. Предположим для определенности, что потен-

циал дефекта действует только на дырку. Тогда это уравнение имеет вид

$$(\epsilon(\vec{P}) \hat{\Lambda}_h(\vec{P}) + \frac{\vec{P}^2}{2m_h} \hat{\Lambda}_l(\vec{P})) F(R) + V(R)F(R) = EF(R). \quad (6)$$

Его решение будем искать в виде

$$F(R) = \sum_{\vec{P}, \mu = \pm \frac{3}{2}} A_{\vec{P}, \mu} F_{\vec{P}, \mu}(R). \quad (7)$$

Вкладом "легких" экситонов, которым соответствует $\mu = \pm \frac{1}{2}$, в силу условия $\vec{P} \gg (2m_l E_B)^{1/2}$ можно пренебречь. Полагая радиус потенциала $V(R)$ много меньше размера волновой функции $F(R)$, для коэффициентов $A_{\vec{P}, \mu}$ получаем

$$A_{\vec{P}, \mu} = \frac{W(F(0) \chi_{\mu}(\vec{P}))}{E - \epsilon(\vec{P})}, \quad (8)$$

где $W = \int d^3r V(r)$. Подставляя (8) в (7) и полагая $R = 0$, получаем уравнение для определения энергии связи

$$1 = W \sum_{\vec{P}} \frac{\hat{\Lambda}_h(\vec{P})}{E - \epsilon(\vec{P})}. \quad (9)$$

Покажем, что это уравнение имеет решение при сколь угодно малом отрицательном W . Действительно, закон дисперсии $\epsilon(\vec{P})$ имеет минимум при $\vec{P} = \vec{P}_0 = (8E_B^2 m_e m_h)^{1/4}$, причем в окрестности этого минимума $\epsilon(\vec{P}) = \epsilon(\vec{P}_0) + (2/m_h)(\vec{P} - \vec{P}_0)^2$. Удобно отсчитывать энергию E от значения $\epsilon(\vec{P}_0)$: $E = \epsilon(\vec{P}_0) - \Delta$. Вклад в сумму (9) от значений \vec{P} , близких к \vec{P}_0 , пропорционален $\Delta^{-1/2}$ и расходится при $\Delta \rightarrow 0$. В результате получаем следующее выражение для энергии связи

$$\Delta = \frac{W^2 m_h \vec{P}_0^4}{32\pi^2 \hbar^6} = \frac{W^2 E_B^2 m_h^2 m_e}{4\pi^2 \hbar^6}. \quad (10)$$

Это выражение справедливо при условии $\Delta \ll \epsilon_0 = E_B (2m_e/m_h)^{1/4}$, позволяющем ограничиться импульсами близкими к \vec{P}_0 в сумме (9). Физический смысл полученного результата легко понять, если вычислить плотность состояний $\rho(\epsilon)$, соответствующую закону дисперсии (3). При ϵ близких к $\epsilon(\vec{P}_0)$: $\rho(\epsilon) \sim (\epsilon - \epsilon(\vec{P}_0))^{-1/2}$, то есть ведет себя также, как для одномерной частицы с квадратичным законом дисперсии. В одномерном же случае связное состояние имеется в любом притягивающем потенциале.

Уровень энергии (10) четырехкратно вырожден. Соответствующие нормированные волновые функции имеют вид

$$F_{\pm \frac{3}{2}}(R) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m_h \Delta}{\hbar^2} \right)^{1/4} \frac{\exp(-R \sqrt{\frac{m_h \Delta}{2\hbar^2}})}{R} \left[2 \left(1 - \frac{3\hbar^2}{2(\vec{P}_0 R)^2} \right) \sin \frac{\vec{P}_0 R}{\hbar} + \right. \\ \left. + \frac{3\hbar}{\vec{P}_0 R} \cos \frac{\vec{P}_0 R}{\hbar} \right] \left[\chi_{z, \pm \frac{3}{2}} \right. \\ \left. \right] \quad (11)$$

$$F_{\pm \frac{1}{2}}(R) = \frac{3}{2\sqrt{\pi}} (2m_h \Delta \hbar^2)^{1/4} \frac{\exp(-R \sqrt{\frac{m_h \Delta}{2\hbar^2}})}{\vec{P}_0 R^2} \left[\cos \frac{\vec{P}_0 R}{\hbar} - \frac{\hbar}{\vec{P}_0 R} \sin \frac{\vec{P}_0 R}{\hbar} \right] \chi_{z, \pm \frac{1}{2}},$$

где $\chi_{z,\mu}$ – собственные функции оператора $J_z^{\dagger} J_z \chi_{z,\mu} = \mu \chi_{z,\mu}$. Схематический вид функций $F_\mu(R)$ представлен на рис. 1. Сила осциллятора межзонного перехода одинакова для всех состояний (11) и пропорциональна

$$f = |\int d^3 R F_\mu(R)|^2 = 9\sqrt{2}\pi^3 \hbar^3 (m_h \Delta)^{1/2} / \mathcal{P}_0^4. \quad (12)$$

Удобно сравнить эту величину с величиной f_0 – “гигантской” силой осциллятора экситона, связанного на короткодействующем дефекте с той же энергией связи Δ , но в случае невырожденных зон³: $(f/f_0) = (9\pi^2/8)(\Delta/\epsilon_0)^2$. Малость этого отношения ($\Delta \ll \epsilon_0$) связана с тем, что функция $F_\mu(R)$ быстро осциллирует.

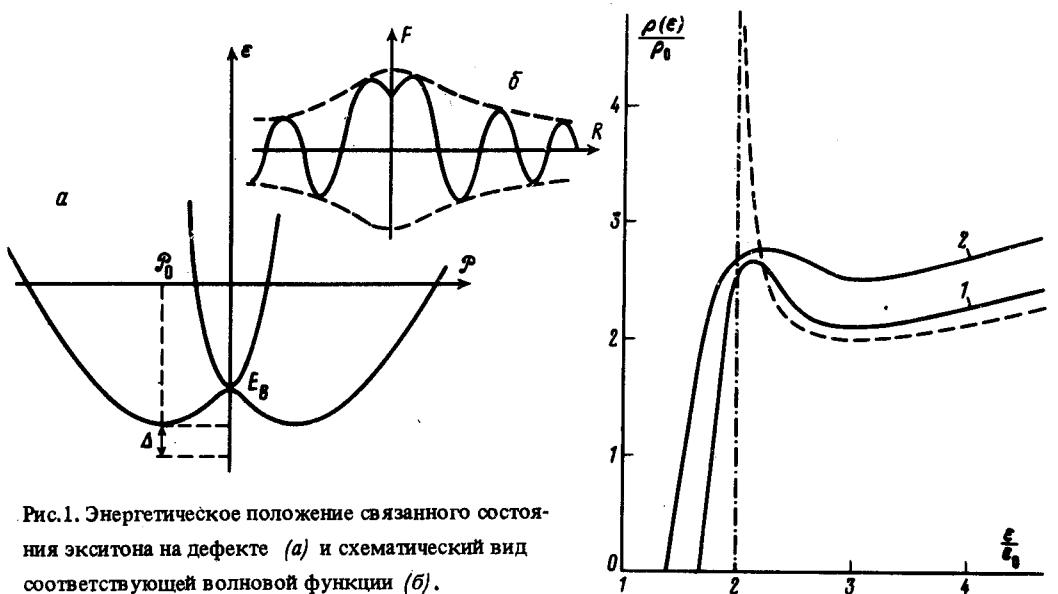


Рис.1. Энергетическое положение связанных состояний экситона на дефекте (a) и схематический вид соответствующей волновой функции (б).

Рис.2. Безразмерная плотность состояний $\rho(\epsilon)$, соответствующая закону дисперсии (13) для значений параметров анизотропии $\Gamma_{min} = (\gamma_1 - 2\gamma_3)\bar{m}_h/m_0 = 0,7$ и $\Gamma_{max} = (\gamma_1 - 2\gamma_2)\bar{m}_h/m_0 = 1,4$ – кривая 1 и $\Gamma_{min} = 0,5$, $\Gamma_{max} = 1,4$ – кривая 2. Штриховая кривая – плотность состояний в отсутствие гофрировки $\Gamma_{min} = \Gamma_{max} = 1$

Мы рассмотрели случай, когда с дефектом взаимодействует только дырка. Случай, когда потенциал дефекта действует на электрон, может быть рассмотрен аналогичным образом. Оказывается, что в этом случае состояния, соответствующие $\mu = \pm 3/2$ и $\mu = \pm 1/2$ имеют разную энергию связи. Для $\mu = \pm 3/2$ она равна $2\Delta m_e/m_h$, а для $\mu = \pm 1/2$ составляет $9\sqrt{2}\pi^2 \Delta m_e^{3/2} / m_h^{3/2}$.

Учет гофрировки валентной зоны приводит к тому, что закон дисперсии (3) принимает вид⁴

$$\epsilon(\vec{P}) = \frac{4E_B^2 m_e}{\vec{P}^2} - E_B + \frac{\vec{P}^2}{2m_0} \left[\gamma_1 - \sqrt{4\gamma_2^2 + 12(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)} \frac{\vec{P}_x^2 \vec{P}_y^2 + \vec{P}_y^2 \vec{P}_z^2 + \vec{P}_z^2 \vec{P}_x^2}{\vec{P}^4} \right], \quad (13)$$

где m_0 – масса свободного электрона, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – параметры Латтинжера⁵ ((13) переходит в (3) при $\gamma_2 = \gamma_3$). Положение минимума $\epsilon(\vec{P})$ в этом случае оказывается зависящим от направления вектора \vec{P} , что приводит к размытию особенности в плотности состояний $\rho(\epsilon)$. Результаты численного расчета $\rho(\epsilon)$ в единицах $\rho_0 = \bar{m}_h^{3/2} \sqrt{2\epsilon_0}/2\pi^2 \hbar^3$,

$(\tilde{m}_h = 5m_0 / (5\gamma_1 - 6\gamma_3 - 4\gamma_2))$ для двух наборов параметров анизотропии приведены на рис. 2. С учетом гофрировки связанное состояние возможно лишь в случае, когда параметр $|W|$ превышает некоторое пороговое значение $|W_c| = \eta \hbar^3 / E_B^{1/2} m_h^{5/4} m_e^{1/4}$, где константа η зависит от параметров анизотропии. Для значений этих параметров, соответствующих кривым 1, 2 на рис. 2, величина η составляет $\eta = 2,8$ и $\eta = 3,5$ соответственно.

Мы благодарны Б.Л.Гельмонту, М.И.Дьяконову, А.С.Иоселевичу и А.Л.Эфросу за полезные обсуждения.

Литература

1. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972, с. 584.
2. Efros Al.L., Gelmont B.L. Sol. St. Comm., 1984, 49, 883.
3. Рацба Э.И., Гургенишвили Г.Э. ФТГ, 1962, 4, 1029.
4. Гельмонт Б.Л., Султанов С.Б., Эфрос А.Л. ФТП, 1984, 18, 2214.
5. Luttinger J.M. Phys. Rev. 1956, 102, 1030.

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
24 июня 1988 г.