

УДК 538.975

КУЛОНОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И ЭКСИТОНЫ ВАНЬЕ–МОТТА В ПОЛЯРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ НИТЯХ

С. И. Берил^{*)}, Е. П. Покатилов^{**)}, А. С. Старчук^{*)}

Теоретически исследовано кулоновское взаимодействие и экситонные состояния Ванье–Мотта в полярных полупроводниковых квантовых нитях в диэлектрической среде. Показано, что наряду с эффектами размерного (геометрического) и диэлектрического усиления кулоновского взаимодействия электрона и дырки имеет место дополнительный эффект роста энергии связи экситона, обусловленный «потерей» части инерционной экранировки. Проведены оценки обусловленного этим эффектом смещения экситонных пиков в оптическом спектре для квантовых нитей селенида кадмия и арсенида галлия в прозрачной диэлектрической матрице.

Введение

Квантовые полупроводниковые и полуметаллические нити (квазиодномерные структуры) представляют большой интерес среди структур пониженной размерности в связи с возможностью их использования для создания новых электронных и оптоэлектронных устройств. В работах [1–9] экспериментально исследованы некоторые свойства таких структур.

В работах [10, 11] показано, что кулоновское взаимодействие в тонкой нити может значительно возрастать в результате понижения размерности среды (геометрический эффект), а также в результате диэлектрического усиления, обусловленного «вытеснением» силовых линий кулоновского поля в соседние области с малой диэлектрической проницаемостью.

В работе [12] развита теория экситонных состояний Ванье–Мотта для полупроводниковой квантовой нити (КН) с учетом обоих эффектов, использованная для анализа и интерпретации экспериментальных спектров квантовых нитей из селенида кадмия, иодида свинца и арсенида галлия в диэлектрической матрице [13, 14].

В работе [15] было установлено, что для планарной структуры из полярного полупроводника наряду с установленными в [11, 12] эффектами геометрического и диэлектрического усиления электрон-дырочного взаимодействия (ЭДВ) может иметь место еще один эффект, обусловленный потерей части инерционной экранировки кулоновского взаимодействия электрона и дырки вследствие перекрытия их поляризационных облаков.

Поскольку в экспериментах [12, 13] КН были изготовлены из полярных полупроводников, то при расчете энергии связи экситона Ванье–Мотта необ-

ходимо учитывать также и влияние экранировки ЭДВ полярными оптическими фононами.

В настоящей работе рассчитан вклад в энергию связи экситона от размерного эффекта потери инерционной экранировки с учетом принятых в работах [10–12] приближений:

1) континуальное приближение

$$R \gg a_0, \quad (1)$$

где R — радиус нити, a_0 — межатомное расстояние;

2) приближение эффективной массы;

3) адиабатическое приближение, позволяющее разделить поперечное и продольное движения электрона и дырки

$$E_{sq} \gg V_{e-h}, \quad (2)$$

E_{sq} — энергия размерного квантования, V_{e-h} — средняя энергия ЭДВ;

4) приближение бесконечного потенциального барьера на поверхности нити и окружающей среды.

В разделе 1 обсуждается гамильтониан системы, на основе которого в разделе 2 производится обобщение теории полярного экситона для трехмерного [16–18] и двумерного [19] кристаллов на случай полярной полупроводниковой нити.

В разделе 3 вариационным методом рассчитаны энергия связи полярного экситона и поляронные вклады в перенормировку ширины запрещенной зоны в КН.

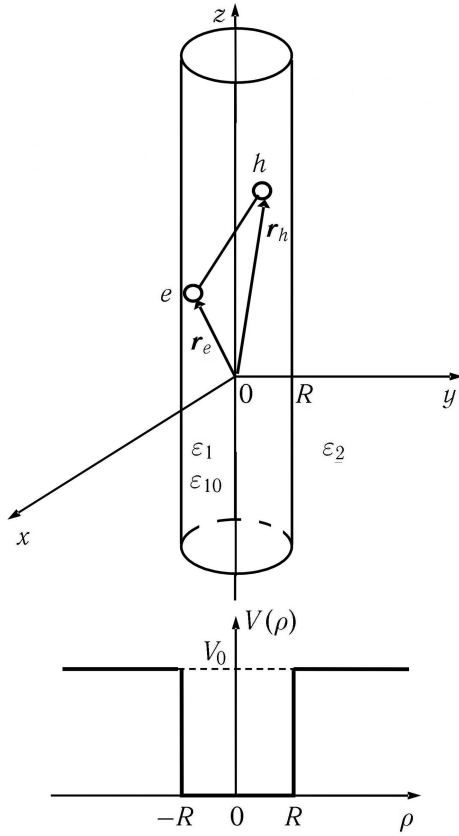
В разделе 4 проведено сравнение теории с экспериментом для квантовых полярных нитей селенида кадмия и арсенида галлия в диэлектрической матрице из хризотиласбеста [13, 14].

1. Гамильтониан

Гамильтониан системы, состоящей из двух зарядов (электрона и дырки), движущихся в зоне проводимости и валентной зоне соответственно,

^{*)} Приднестровский государственный университет им. Т. Г. Шевченко, г. Тирасполь, Республика Молдова.

^{**)} Государственный университет Молдовы, г. Кишинев, Республика Молдова.



в полярной полупроводниковой нити радиуса R , граничащей с полубесконечной полярной средой (рисунок), имеет вид

$$\hat{H} = \hat{K}_e + \hat{K}_h + \hat{H}_{\text{ph}}^{s_{1,2}} + \hat{H}_{\text{ph}}^v + \hat{H}_{e,h-\text{ph}}^{s_{1,2}} + \hat{H}_{e-\text{ph}}^s + \hat{H}_{h-\text{ph}}^s + V_{e-h} + V_{\text{SA}}(\rho_e) + V_{\text{SA}}(\rho_h) + V_0, \quad (3)$$

где

$$\hat{K}_i = \frac{\hat{p}_{z_i}^2}{2m_{\parallel,i}^*} + \frac{\hat{p}_{\perp_i}^2}{2m_{\perp,i}^*} \quad (4)$$

— операторы кинетической энергии электрона ($i=e$) и дырки ($i=h$); $m_{\parallel,i}^*$, $m_{\perp,i}^*$ — продольная и поперечная компоненты эффективной массы электрона и дырки;

$$\hat{H}_{\text{ph}}^j = \sum_{\chi_j} \hbar \Omega_{\chi_j} \hat{a}_{\chi_j}^+ \hat{a}_{\chi_j} \quad (5)$$

— гамильтонианы поверхностных ($j=s$) и объемных ($j=v$) оптических фононов ($\Omega_{j=v} \equiv \omega_{10}$ — частота продольных оптических фононов, $\Omega_{j=s} = \Omega_s$ — частота поверхностных оптических фононов);

$$\hat{H}_{i-\text{ph}}^j = \sum_{\chi_j, n} \left[\Gamma_{\chi_j} e^{i(\eta_j z_i + l_i \varphi_i)} \hat{a}_{\chi_j, n} + \text{c. c.} \right]. \quad (6)$$

— гамильтонианы взаимодействий электрона и дырки с поверхностными ($j=s$) и объемными ($j=v$) оптическими фононами, полученные в работах [21, 22]. Здесь

$$\chi_j = \begin{cases} (m, q_1, \eta) & \text{при } j=v, \\ (m, \eta) & \text{при } j=s \end{cases} \quad (7)$$

— полные наборы квантовых чисел для объемных и поверхностных мод: q_1 — радиальное квантовое число; m — квантовое число для проекции момента на ось z ; η — волновое число движения вдоль z ; $\hat{a}_{\chi_j}^+$, \hat{a}_{χ_j} — операторы рождения и уничтожения поверхностного ($j=s$) и объемного ($j=v$) фононов в полярной нити;

$$\Gamma_{\chi_j} = \begin{cases} V_{\chi_v} \psi_1(\rho_i) & \text{при } j=v, \\ V_{\chi_s} F_1^1(\rho_i) & \text{при } j=s, \end{cases} \quad (8)$$

где V_{χ_v} — амплитуда ЭФВ для объемных полярных оптических фононов в нити [21]:

$$|V_{\chi_v}|^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_1} - \frac{1}{\epsilon_{10}} \right) \frac{\hbar\omega_{10}}{(q_1^2 + q^2)R^2}, \quad (9)$$

$$\psi_1(\rho_i) = \frac{\sqrt{2} J_m(q_1 \rho_i)}{|J_{m+1}(q_1 R)|}, \quad (10)$$

$\epsilon_1, \epsilon_{10}$ — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости нити, $J_m(x)$ — функция Бесселя и величина q_1 находится из уравнения

$$J_m(q_1 R) = 0. \quad (11)$$

Далее, V_{χ_s} в выражении (8) — это амплитуда ЭФВ для поверхностных фононов в нити:

$$|V_{\chi_s}|^2 = \frac{e^2 \hbar\omega_{10} (\epsilon_{10} - \epsilon_1)^{1/2}}{2\pi\epsilon_0 \eta R (\chi_1 + \chi_2)^{3/2} (\epsilon_1 \chi_2 - \epsilon_{10} \chi_1)^{1/2}}, \quad (12)$$

$$F_1^1(\rho_i) = \frac{I_m(\eta \rho_i)}{I_m(\eta R)}, \quad (13)$$

$$\chi_1 = \epsilon_1 \frac{I'_{|m|}(\eta R)}{I_{|m|}(\eta R)}, \quad \chi_2 = -\epsilon_2 \frac{K'_{|m|}(\eta R)}{K_{|m|}(\eta R)}, \quad (14)$$

ϵ_2 — диэлектрическая проницаемость окружающей среды; $I_m(x)$ и $K_m(x)$ — модифицированные функции Бесселя и Макдональда соответственно, V_{e-h} — потенциальная энергия взаимодействия электрона и дырки, полученная в [11–13] и имеющая вид

$$V_{e-h} = -e \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik(z_e - z_h)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\gamma} \Phi_n(k, \rho_e, \rho_h). \quad (15)$$

Поскольку V_{e-h} не зависит от угла γ , в выражении (15) остается только одно слагаемое с $n=0$, причем

$$\Phi_0(k, \rho_e, \rho_h) = \frac{e^2}{4\pi^2 \epsilon_0 \epsilon_1} \times \left\{ \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2) K_0(kR) K'_0(kR) I_0(k\rho_e) I_0(k\rho_h)}{\epsilon_2 I_0(kR) K'_0(kR) - \epsilon_1 I'_0(kR) K_0(kR)} + \theta(\rho_h < \rho_e) I_0(k\rho_h) K_0(\rho_e) + \theta(\rho_h > \rho_e) I_0(k\rho_e) K_0(\rho_h) \right\}, \quad (16)$$

$\rho, \rho_e \leq R, \theta(\rho) = 1$ при $\rho > 0, \theta(\rho) = 0$ при $\rho < 0$. В гамильтониане (3) $V_{SA}(\rho_i)$ — это потенциальная энергия самовоздействия электрона (дырки), обусловленная взаимодействием носителя с индуцированной им самим безынерционной поляризацией среды [12, 13]:

$$V_{SA}(\rho_i) = -\frac{1}{2}e \int_{-\infty}^{+\infty} dk \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Phi_m(k, \rho_i), \quad (17)$$

где

$$\Phi_0(k, \rho_i) = \frac{e}{4\pi^2 \varepsilon_0 \varepsilon_1} \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) K_0(kR) K'_0(kR) I_0^2(k\rho_i)}{\varepsilon_2 I_0(kR) K'_0(kR) - \varepsilon_1 I'_0(kR) K_0(kR)}, \quad \rho_i \leq R, \quad (18)$$

и, наконец, V_0 — потенциальный барьер на границе нити и окружающей среды:

$$V_0 \rightarrow \infty \text{ при } \rho \geq R; \quad V_0 = 0 \text{ при } \rho < R. \quad (19)$$

2. Вывод эффективного потенциала электрон-дырочного взаимодействия

Рассматривая V_{e-h} как затравочный потенциал, учитывающий экранирование ЭДВ быстрой поляризацией (плазмоны валентных электронов), применим метод [22–23] для вывода эффективного потенциала ЭДВ, включающего экранировку медленной поляризацией (поверхностные и объемные оптические фононы полярной нити).

Волновая функция системы с учетом принятых приближений может быть представлена в мультипликативном виде

$$\psi(\rho_e, \rho_h, \phi_e, \phi_h, z) = \psi(z) \psi(\rho_e, \phi_e) \psi(\rho_h, \phi_h), \quad (20)$$

где $\psi(z)$ — волновая функция, описывающая относительное движение электрона и дырки вдоль оси z ; $\psi(\rho_i, \phi_i)$ — волновая функция, описывающая движение электрона ($i = e$) и дырки ($i = h$) внутри нити перпендикулярно ее оси (в цилиндрической квантовой яме с бесконечными барьерами) и удовлетворяющая уравнению Шрёдингера

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \Phi(\rho_i) \right) + \left(\xi^2 - \frac{m^2}{\rho^2} \right) \Phi(\rho_i) = 0. \quad (21)$$

В области $\rho < R$

$$\xi^2 = \beta^2 - k^2, \quad \beta^2 = \frac{2m_{\perp,i}^* E_i}{\hbar^2}. \quad (22)$$

Решение уравнения (21) приведено в работе [20].

Волновая функция $\psi(\rho_i, \phi_i)$ может быть представлена в виде

$$\psi(\rho_i, \phi_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Phi(\rho_i) e^{im_i \phi_i}. \quad (23)$$

Считая движение электрона и дырки перпендикулярно оси z быстрым, усредним гамильтониан

(3)–(18) на волновой функции (20), (23) и, перейдя в систему центра масс для движения вдоль z , получим

$$\begin{aligned} \tilde{H}_1 &= \langle \Phi(\rho_e) \Phi(\rho_h) | \hat{H} | \Phi(\rho_e) \Phi(\rho_h) \rangle = \\ &= \frac{\hat{p}_z^2}{2M_{\parallel}} + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu_{\parallel}} + \frac{\hbar^2 \xi_e^2(m, k)}{2m_{e\perp}^*} + \frac{\hbar^2 \xi_h^2(m, k)}{2m_{h\perp}^*} + \\ &+ \tilde{V}_{e-h}(R, z) + \tilde{V}_{SA}(R) + \sum_{\mathbf{k}(\eta, q_1)} \hbar \omega_{10} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \sum_{\eta} \hbar \Omega_s a_{\eta}^+ a_{\eta} + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}(\eta, q_1)} \tilde{V}_{\chi_v} e^{iqz} \left\{ \left[e^{i\sigma_1 qz + im\phi_e} - e^{-i\sigma_2 qz + im\phi_h} \right] \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ + \text{c. c.} \right\} + \\ &+ \sum_{\eta} \tilde{V}_{\chi_s} e^{i\eta z} \left\{ \left[e^{i\sigma_1 \eta z + im\phi_e} - e^{-i\sigma_2 \eta z + im\phi_h} \right] \hat{a}_{\eta}^+ + \text{c. c.} \right\}, \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{e-h}(R, z) &= -e \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikz} \times \\ &\times \int_0^R \int_0^R |\varphi(\rho_e)|^2 |\varphi(\rho_h)|^2 \Phi_0(k, \rho_e, \rho_h) \rho_e d\rho_e \rho_h d\rho_h, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{SA}(R) &= \frac{-e}{2} \sum_{i=e, h} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \times \\ &\times \int_0^R \int_0^R |\varphi(\rho_e)|^2 |\varphi(\rho_h)|^2 \Phi_0(k, \rho_i) \rho_e d\rho_e \rho_h d\rho_h. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь введены обозначения

$$\tilde{V}_{\chi_v} = \frac{\sqrt{2} V_{\chi_v} \int_0^R |\varphi(\rho_i)|^2 J_m(q_1 \rho_i) \rho_i d\rho_i}{J_{m+1}(q_1 R)}, \quad (27)$$

$$\tilde{V}_{\chi_s} = \frac{\sqrt{2} V_{\chi_s} \int_0^R |\varphi(\rho_i)|^2 I_m(\eta \rho_i) \rho_i d\rho_i}{I_{m+1}(\eta R)}, \quad (28)$$

$$z = z_e - z_h, \quad Z = \frac{m_{\parallel, e}^* z_e + m_{\parallel, h}^* z_h}{m_{\parallel, e}^* + m_{\parallel, h}^*}, \quad (29)$$

$$\mu^{-1} = m_{\parallel, e}^*{}^{-1} + m_{\parallel, h}^*{}^{-1}, \quad M_{\parallel} = m_{\parallel, e}^* + m_{\parallel, h}^*, \quad (30)$$

$$\sigma_1 = \frac{m_{\parallel, h}^*}{M_{\parallel}}, \quad \sigma_2 = \frac{m_{\parallel, e}^*}{M_{\parallel}}. \quad (31)$$

В пределе тонкой нити ($kR \ll 1$) волновые функции $\Phi(\rho_i)$ в (23) могут быть взяты в виде [12]

$$\Phi(\rho_i) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi R}}, & \rho_i \leq R, \\ 0, & \rho_i > R. \end{cases} \quad (32)$$

В этом случае интегралы (25), (26) вычисляются аналитически:

$$\tilde{V}_{e-h}(R, z) = -\frac{e^2}{\pi^2 \varepsilon_0 \varepsilon_1} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{ikz}}{k^2} \times \left\{ \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) K'_0(kR) K_0(kR) I_1^2(kR)}{\varepsilon_2 I_0(kR) K'_0(kR) - \varepsilon_1 I'_0(kR) K_0(kR)} - I_1(kR) K_1(kR) + \frac{1}{2} \right\}, \quad (33)$$

$$\tilde{V}_{SA}(R, z) = -\frac{e^2}{4\pi^2 \varepsilon_0 \varepsilon_1} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\pi R^2} \times \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{K'_0(kR) K_0(kR) \int_0^R I_0^2(k\rho_i) \rho_i d\rho_i}{\varepsilon_2 I_0(kR) K'_0(kR) - \varepsilon_1 I'_0(kR) K_0(kR)}. \quad (34)$$

Следуя методу Хакена [16], усредним гамильтониан (24) на волновой функции

$$\psi(z, \{\hat{a}_\kappa\}, \{\hat{a}_\eta\}) = \psi(z) e^{\hat{U}_1} e^{\hat{U}_2} |0\rangle_v |0\rangle_s, \quad (35)$$

где \hat{U}_1 и \hat{U}_2 — операторы унитарных преобразований, определяющиеся выражениями

$$\hat{U}_1 = \sum_{\kappa} \{ \hat{a}_{\kappa} f_{\kappa}^*(z) - \hat{a}_{-\kappa}^+ f_{\kappa}(z) \}, \quad (36)$$

$$\hat{U}_2 = \sum_{\eta} \{ \hat{a}_{\eta} f_{\eta}^*(z) - \hat{a}_{-\eta}^+ f_{\eta}(z) \},$$

$|0\rangle_s |0\rangle_v$ — волновая функция основного состояния фононной подсистемы.

В системе центра масс $Z = 0$ для вариационных амплитуд смещений операторов фононных мод $f_{\kappa}(z)$, $f_{\eta}(z)$ получаем следующие выражения:

$$f_{\kappa}(z) = \frac{\sqrt{2} \tilde{V}_v^* e^{i\sigma_1 \eta z}}{\hbar \omega_{10} + \frac{\hbar^2 \eta^2}{2m_{\parallel,e}^*} + \frac{\hbar^2 q_{\perp}^2}{2m_{\perp,e}^*}} - \frac{\sqrt{2} \tilde{V}_v^* e^{-i\sigma_2 \eta z}}{\hbar \omega_{10} + \frac{\hbar^2 \eta^2}{2m_{\parallel,h}^*} + \frac{\hbar^2 q_{\perp}^2}{2m_{\perp,h}^*}}, \quad (37a)$$

$$\kappa \equiv \kappa(\eta, q_{\perp}),$$

$$f_{\eta}(z) = \frac{\sqrt{2} \tilde{V}_{\chi_s}^* e^{i\sigma_1 \eta z}}{\hbar \Omega_s + \frac{\hbar^2 \eta^2}{2m_{\parallel,e}^*}} - \frac{\sqrt{2} \tilde{V}_{\chi_s}^* e^{-i\sigma_2 \eta z}}{\hbar \Omega_s + \frac{\hbar^2 \eta^2}{2m_{\parallel,h}^*}}. \quad (37b)$$

Эффективный потенциал ЭДВ $W_{\text{eff}}(R, z)$ представляет собой сумму затравочного кулоновского потенциала $\tilde{V}_{e-h}(R, z)$ и вкладов от экранировки кулоновского взаимодействия объемными и поверхностными фононами:

$$W_{\text{eff}}(R, z) = \tilde{V}_{e-h}(R, z) + W_v(R, z) + W_s(R, z), \quad (38)$$

где

$$\tilde{V}_{e-h}(R, z) = -\frac{2e^2(1-\kappa)}{\pi^2 R \varepsilon_0 \varepsilon_1} F_1(R, z), \quad (39)$$

$$W_v(R, z) = \frac{e^2}{\pi^3 R \varepsilon_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_0} - \frac{1}{\varepsilon_{10}} \right) \frac{F_2(q_1 R)}{|J_{m+1}(q_1 R)|^2} \times \quad (40)$$

$$\times \{ F_3(z, R_{\parallel,e}, R_{\perp,e}) - F_3(z, R_{\parallel,h}, R_{\perp,h}) \},$$

$$W_s(R, z) = \frac{e^2(\varsigma - 1)}{\pi^2 R \varepsilon_0 \varepsilon_1} F_1(R, z). \quad (41)$$

В формулах (39)–(41) введены обозначения

$$F_1(R, z) = \int_0^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{z}{R}x\right)}{x^2} \times \left\{ \frac{K_0(x)K_1(x)I_1^2(x)}{I_1(x)K_0(x) + \kappa I_0(x)K_1(x)} - I_1(x)K_1(x) + \frac{1}{2} \right\} dx, \quad (42)$$

$$F_2(q_1 R) = \int_0^1 J_m(q_1 R x) dx, \quad (43)$$

$$F_3(z, R_{\parallel,i}, R_{\perp,i}) = \int_0^{\infty} \frac{dx \cos\left(\frac{z}{R_{s\parallel,i}}x\right)}{(x^2 + q_{\perp}^2 R_{\parallel,i}^2)(1 + x^2 + q_{\perp}^2 R_{\perp,i}^2)}, \quad (44)$$

$$F_4(R, z) = \int_0^{\infty} K_0^2(x) I_1^3(x) \cos\left(\frac{z}{R}x\right) \times \left\{ \left(1 + \frac{R_{\parallel,e}^2}{R^2} x^2\right)^{-1} - \left(1 + \frac{R_{\parallel,h}^2}{R^2} x^2\right)^{-1} \right\} \times \left[x^3 I_0(x) \{ \varsigma I_1(x) K_0(x) + \kappa I_0(x) K_1(x) \} \right]^{-1} \left[\frac{\omega_{10}}{\Omega_s(x)} \right] dx, \quad (45)$$

$$\varsigma = \frac{\varepsilon_{10}}{\varepsilon_1}, \quad \kappa = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1},$$

$$R_{S\parallel,i} = \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel,i}^* \Omega_s} \right)^{1/2}, \quad R_{\parallel,i} = \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel,i}^* \omega_{10}} \right)^{1/2}. \quad (46)$$

Для поляронных вкладов в энергию самовоздействия от объемных $E_{p,i=e,h}^V(R)$ и поверхностных фононов получаем следующие выражения:

$$E_{p,i=e,h}^V(R) = -\frac{e^2 R_{\parallel,i}}{4\pi^3 \varepsilon_0 R^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_0} - \frac{1}{\varepsilon_{10}} \right) \times \frac{F_2^2(q_1 R) F_5(q_{\perp,i}, R_{\parallel,i}, R_{\perp,i})}{|J_{m+1}(q_1 R)|^2}, \quad (47)$$

$$E_{p,i=e,h}^S(R) = -\frac{e^2}{\pi^3 \varepsilon_0 R} (\varepsilon_{10} - \varepsilon_1)^{1/2} \frac{F_6(R, R_{S\parallel,i})}{|J_{m+1}(q_1 R)|^2}, \quad (48)$$

где приняты обозначения

$$F_5(z, R_{\parallel,i}, R_{\perp,i}) = \int_0^{\infty} \frac{dx}{(x^2 + q_{\perp}^2 R_{\parallel,i}^2)(1 + x^2 + q_{\perp}^2 R_{\perp,i}^2)}, \quad (49)$$

$$F_6 \left(\frac{R}{R_{S\parallel,i}} \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x} \left[\tilde{I} \left(\frac{R}{R_{S\parallel,i}} \right) \right] \times \\ \times \left[\left(\frac{\Omega_S}{\omega_{10}} \right) (\chi_1 + \chi_2)^{3/2} (\varepsilon_1 \chi_2 - \varepsilon_{10} \chi_1)^{1/2} \times \right. \\ \left. \times \left| I_m \left(\frac{R}{R_{S\parallel,i}} \right) \right|^2 (1+x^2) \right]^{-1}, \quad (50)$$

$$\frac{\Omega_S}{\omega_{10}} = \left[\left(\frac{\omega_1}{\omega_{10}} \right)^2 + \frac{\chi_1}{\chi_1 + \chi_2} \right]^{1/2}, \quad (51)$$

$$\chi_1 = \varepsilon_1 \frac{I'_{|m|} \left(x \frac{R}{R_{S\parallel}} \right)}{I_{|m|} \left(x \frac{R}{R_{S\parallel}} \right)}, \quad \chi_2 = -\varepsilon_2 \frac{K'_{|m|} \left(x \frac{R}{R_{S\parallel}} \right)}{K_{|m|} \left(x \frac{R}{R_{S\parallel}} \right)}, \quad (52)$$

$$\left[\tilde{I} \left(\frac{R}{R_{S\parallel}} \right) \right] = \int_0^1 J_m \left(\frac{R}{R_{S\parallel}} x \right) x dx.$$

3. Энергия связи экситона в квантовой нити

Для расчета энергии основного состояния экситона в полярной полупроводниковой КН используем эффективный гамильтониан

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \frac{d^2}{dz^2} + W_{\text{eff}}(R, z), \quad (53)$$

где $W_{\text{eff}}(R, z)$ определяется выражениями (38)–(46). Выберем пробную волновую функцию в виде

$$\psi(z) = \sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \beta^2 (z_e - z_h)^2 \right\}, \quad (54)$$

где β — вариационный параметр. Матрируя гамильтониан (53) на пробной волновой функции (54), получаем вариационный функционал для расчета энергии основного состояния экситона

$$E_0(R) = \frac{\hbar^2 \beta^2}{4\mu_{\parallel}} - \frac{2e^2(1-k)}{\pi^2 \varepsilon_0 \varepsilon_1 R} \tilde{F}_1(\beta, R) + \\ + \frac{e^2}{\pi^3 \varepsilon_0 R} \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - \frac{1}{\varepsilon_{10}} \right) \frac{F_2(q_1 R)}{|J_{m+1}(q_1 R)|^2} \times \\ \times \{ \tilde{F}_3(\beta, R_{\parallel,e}, R_{\perp,e}) - \tilde{F}_3(\beta, R_{\parallel,h}, R_{\perp,h}) \} + \\ + \frac{e^2(\zeta-1)}{2\pi^2 \varepsilon_0 \varepsilon_1 R} \tilde{F}_4(\beta, R), \quad (55)$$

где

$$\tilde{F}_1(\beta, R) = \int_0^{\infty} \frac{\exp \left(-\frac{x^2}{4\beta^2} \right)}{x^2} \times \\ \times \left\{ \frac{K_0(x)K_1(x)I_1^2(x)}{I_1(x)K_0(x) + \kappa I_0(x)K_1(x)} - I_1(x)K_1(x) + \frac{1}{2} \right\} dx, \quad (56)$$

$$\tilde{F}_3(\beta, R_{\parallel,i}, R_{\perp,i}) = \int_0^{\infty} \frac{dx \exp \left\{ -\frac{x^2}{4\beta^2 z^2} \right\}}{(x^2 + q_1^2 R_{\parallel,i}^2)(1+x^2 + q_1^2 R_{\perp,i}^2)}, \quad (57)$$

$$\tilde{F}_4(\beta, R) = \int_0^{\infty} \frac{dx K_0^2(x)I_1^3(x) \exp \left\{ -\frac{x^2}{4\beta^2 z^2} \right\} \left[\frac{\omega_{10}}{\Omega_S(x)} \right]}{x^3 I_0(x) \{ \zeta I_1(x)K_0(x) + \kappa I_0(x)K_1(x) \}} \times \\ \times \left\{ \left(1 + \frac{R_{\parallel,e}^2}{R^2} x^2 \right)^{-1} - \left(1 + \frac{R_{\parallel,h}^2}{R^2} x^2 \right)^{-1} \right\}. \quad (58)$$

В пределе тонкой квантовой нити при выполнении критерия

$$\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \right) (\beta R)^2 \ln |\beta R| \ll 1 \quad (59)$$

из выражений (55)–(58) получаем

$$E_0(\beta) = \frac{\hbar^2 \beta^2}{4\mu_{\parallel}} + \frac{2e^2}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_2} \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \left[\ln \left(\frac{\beta R_{\text{eff}}}{2} \right) + \frac{C}{2} \right] + \\ + F_v(\beta) + F_s(\beta). \quad (60)$$

Здесь

$$R_{\text{eff}} = R \exp \left\{ \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} S(R) + S(\infty) - S(R) \right\}, \quad (61)$$

$$S(x) = (2\pi)^2 \int_0^x \rho d\rho \ln \left(\frac{\rho}{R} \right) \times \\ \times \int_0^R \rho' d\rho' \left\{ \Phi_e^2(\rho)\Phi_h^2(\rho') + \Phi_e^2(\rho')\Phi_h^2(\rho) \right\}. \quad (62)$$

Выберем в качестве единиц энергии и длины в формуле (60) величины

$$Ry^* = \frac{\mu_{\parallel} e^4}{2(4\pi \varepsilon_0)^2 \hbar^2 \varepsilon_1^2}, \quad r_B^* = \frac{4\pi \varepsilon_0 \hbar^2 \varepsilon_1}{\mu_{\parallel} e^2}. \quad (63)$$

Тогда вариационный функционал (60) может быть представлен в виде

$$\tilde{E}(\tilde{\beta}) = \frac{\tilde{\beta}^2}{2} + \frac{4\tilde{\beta}}{\varepsilon_2 \sqrt{\pi}} \left[\ln \left(\frac{\tilde{\beta} \tilde{R}_{\text{eff}}}{2} \right) + \frac{C}{2} \right] + \tilde{F}_v(\tilde{\beta}) + \tilde{F}_s(\tilde{\beta}), \quad (64)$$

где

$$\tilde{\beta} = \beta r_B^*, \quad \tilde{E} = \frac{E}{Ry^*}, \quad \tilde{R}_{\text{eff}} = \frac{R_{\text{eff}}}{r_B^*}. \quad (65)$$

В общем случае, когда критерий (59) не выполняется, энергию связи экситона следует рассчитывать, используя функционал (55)–(58).

Таблица 1
CdSe-XA ($\varepsilon_1 = 5.8, \varepsilon_2 = 2.2$)

R, r_B^*	$E_{cl}^0(R), Ry^*$	$E_{cl}(R), Ry^*$	$E_{ph}^0(R), Ry^*$	$E_{ph}(R), Ry^*$	a_0^{-1}, r_B^*	a^{-1}, r_B^*
0.01	116.87	114.5	114.63	109.6	0.0959	0.0964
0.03	61.42	59.62	60.00	55.67	0.151	0.154
0.1	26.15	25.84	25.42	23.45	0.293	0.274
0.3	10.47	10.98	10.13	9.74	0.644	0.496
1	3.439	3.973	3.322	3.457	1.812	0.990
3	1.182	1.493	1.141	1.282	5.123	1.922
10	0.359	0.489	0.346	0.416	16.69	4.218

Таблица 2
GaAs-XA ($\varepsilon_1 = 10.9, \varepsilon_2 = 2.2$)

R, r_B^*	$E_{cl}^0(R), Ry^*$	$E_{cl}(R), Ry^*$	$E_{ph}^0(R), Ry^*$	$E_{ph}(R), Ry^*$	a_0^{-1}, r_B^*	a^{-1}, r_B^*
0.01	282.0	261.2	280.6	255.2	0.06637	0.07394
0.03	137.1	123.5	136.3	119.4	0.1136	0.1264
0.1	53.33	48.73	52.95	46.64	0.2476	0.2435
0.3	20.01	19.35	19.85	18.39	0.5987	0.4605
1	6.323	6.631	6.271	6.266	1.812	0.9596
3	2.143	2.403	2.125	2.263	5.267	1.912
10	0.6467	0.7665	0.6412	0.7199	17.36	4.237

Таблица 3
Значения рассчитанных параметров экситонов в квантовых нитях GaAs и CdSe A, кристаллизованных в хризотил-асбестовых нанотрубках, и экспериментальные значения энергии экситонных переходов ($\hbar\omega_{ex}$ — величина энергии кванта, генерирующего экситон, рассчитанная в настоящей работе, $\hbar\omega_{ex}^{cl}$ — в работе [13]. Остальные величины также взяты из работы [13])

Тип нити и экситона	Параметры модели						Теория		Эксперимент	
	$\frac{m_{\pm,h}}{m_0}$	$\frac{m_{\parallel,h}}{m_0}$	$\frac{\mu}{m_0}$	$E_g^0, \text{эВ}$	ε_1	ε_2	$d, \text{нм}$	$\hbar\omega_{ex}^{cl}, \text{эВ}$	$\hbar\omega_{ex}, \text{эВ}$	
GaAs $e-hh$	0.067	0.050	0.034	1.426	10.9	2.2	4.8	1.840	1.824	1.82 ± 0.04
							6.0	1.710	1.693	1.69 ± 0.04
GaAs $e-lh$	0.067	0.068	0.059	1.426	10.9	2.2	4.8	2.118	2.111	2.11 ± 0.05
							6.0	1.910	1.899	1.89 ± 0.05
CdSe A	0.12	0.45	0.107	1.751	5.8	2.2	4.8	1.992	1.995	1.98 ± 0.08
							6.0	1.905	1.908	

В табл. 1 и 2 приведены результаты численного расчета энергии связи экситона для квантовых нитей CdSe и GaAs в диэлектрических матрицах из хризотиласбеста без учета и с учетом вклада от фононов, рассчитанные по приближенной формуле (60) (столбцы 2 и 4) и по точным формулам (55)–(58) (столбцы 3 и 5) в зависимости от радиуса КН. Как видно из табл. 1, для более полярного полупроводника CdSe вклад фононов составляет от 4 до 15% в интервале R от $0.01r_B^*$ до $10r_B^*$, в то время как для менее полярного GaAs в этих же интервалах радиуса КН фононы вносят вклад от 2 до 6%.

4. Сравнение теории и эксперимента

В эксперименте [13–14] непосредственно измеряемой величиной является энергия фотона, генерирующего экситон:

$$\hbar\omega_{ex} = E_g^0 + \sum_{i=e,h} \left(E_{sq}^i + E_{SA}^i + W_{ph,i}^{s,v} \right) - E_b. \quad (66)$$

Здесь E_g^0 — ширина запрещенной зоны массивного кристалла полупроводника (вещество нити).

Второе слагаемое в (66) определяет вклад в перенормировку ширины запрещенной зоны, обусловленный размерным квантовым эффектом, эффектом самовоздействия и поляронным эффектом соответственно, E_b — энергия связи экситона.

В соответствии с подходом, развитым в работе [13], в $\hbar\omega_{ex}$ учтены эффекты непараболичности

зон, а также расщепление валентной зоны на зоны легких и тяжелых дырок и образование «легких» и «тяжелых» экситонов, которые наблюдаются в оптическом спектре КН из CdSe и GaAs независимо.

В табл. 3 представлены размерные зависимости $\hbar\omega_{ex}$: теоретическое и экспериментальные значения, рассчитанные для КН GaAs ($e-hh$), GaAs ($e-lh$), CdSe (подзона легких дырок A).

Как видно из сравнения теоретических и экспериментальных данных, приведенных в табл. 3, учет вкладов оптических фононов улучшает согласие теории и эксперимента. При этом необходимо учесть, что на значениях $\hbar\omega_{ex}$ это сказывается слабее, поскольку вклады входят с противоположными знаками.

Авторы выражают благодарность В. С. Днепровскому, П. К. Кашкарову и участникам семинара кафедры общей физики и молекулярной электроники физического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова за плодотворное обсуждение и поддержку работы.

Литература

1. Kapon E., Kash E., Clousen E.M. et al. // Appl. Phys. Lett. 1992. **60**, N 4. P. 477.
2. Nagamune Y., Arakawa Y., Tsukamoto S. et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. **69**, N 20. P. 2963.
3. Kapon E. // Proc. IEEE. 1992. **80**. P. 398.
4. Weigscheider W., Pfeiffer L.N., Dignam M.M. et al. // Phys. Rev. Lett. 1993. **71**, N 24. P. 4071.

5. *Tsukamoto S., Nagamune Y., Nishioka M., Arakawa Y.* // Appl. Phys. Lett. 1993. **63**, N 3. P. 355.
6. *Schooss D., Mews A., Eychemüller A., Weller H.* // Phys. Rev. B. 1994. **49**, N 24. P. 17072.
7. *Someya T., Akiyama H., Sakaki H.* // Phys. Rev. Lett. 1996. **76**, N 16. P. 2965.
8. *Weman H., Potemski M., Lazzouni M.E. et al.* // Phys. Rev. B. 1996. **53**, N 11. P. 6959.
9. *Glutsh S., Bechstedt F., Wegscheider W., Schedelbeck G.* // Phys. Rev. B. 1992. **56**. P. 4108.
10. *Бабиченко В.С., Келдыш Л.В., Силин А.П.* // ФТТ. 1980. **22**, № 4. С. 1238.
11. *Андрюшин Е.А., Силин А.П.* // ФТТ. 1993. **35**, № 7. С. 1947.
12. *Муляров Е.А., Тиходеев С.Г.* // ЖЭТФ. 1997. **111**, № 1. С. 274.
13. *Днепроvский В.С., Жуков Е.А., Муляров Е.А., Тиходеев С.Г.* // ЖЭТФ. 1998. **114**, № 2(8). С. 700.
14. *Muljarov E.A., Zhukov E.A., Dneprovskii V.S., Masumoto Y.* // Phys. Rev. B. 2000. **62**, N 11. P. 7420.
15. *Берил С.И., Покатилов Е.П., Чебан И.С.* // ФТТ. 1986. **26**, № 12. С. 3698.
16. *Haken H.* // Zeitschrift für Physik. 1956. **146**, N 5. S. 527.
17. *Meyer H.I.G.* // Physica. 1956. **22**. P. 109.
18. *Bednarek S., Adamowski J., Suffczynsky M.* // Sol. St. Com. 1977. **21**. P. 1.
19. *Берил С.И., Покатилов Е.П.* // ФТП. 1980. **14**, № 1. С. 37.
20. *Pokatilov E.P., Klimin S.N., Balaban S.N., Fomin V.M.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1995. **191**. P. 311.
21. *Klimin S.N., Pokatilov E.P., Fomin V.M.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1994. **184**. P. 373.
22. *Покатилов Е.П., Берил С.И., Фомин В.М.* Колебательные возбуждения, поляроны и экситоны в многослойных системах и сверхрешетках. Кишинев, 1990.
23. *Pokatilov E.P., Beril S.I., Fomin V.M., Ribukhin G.Yu.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1992. **169**. P. 429; Phys. Stat. Sol. (b). 1992. **171**. P. 437.

Поступила в редакцию
01.07.05