

ВЗАЄМОДІЯ ЕКСИТОНІВ ВИЩИХ РІВНІВ ЗБУДЖЕННЯ З ФОНОНАМИ

Проведено розрахунки функції екситон-фононної взаємодії для перших трьох рівнів воднево-подібного спектра екситонів кристалів CdS і PbI₂. Проаналізовано специфіку поведінки функції зв'язку на всій області зміни квазіімпульсу фононів.

The calculations of the exciton-phonon interaction function for the first three levels of the hydrogen-like energy exciton spectrum of crystals CdS і PbI₂ were performed. The specific character of the bond function behavior on the whole region of phonon quasiimpulse variations were analyzed.

Важливим джерелом інформації про електронні стани напівпровідникових кристалів служать оптичні спектри екситонів. Дослідження екситонної смуги поглинання дає можливість виявити не лише енергетичну структуру напівпровідника, але і вивчати специфіку релаксацийних процесів, які відповідають за зміщення і розширення смуги поглинання. На першому місці тут стоїть екситон-фононна взаємодія, яка відповідає за форму і температурну трансформацію екситонних смуг поглинання. Нині практично повністю, як теоретично так і експериментально, досліджено функцію форми і основні характеристики ізольованих смуг екситонного поглинання світла [1]. Проте для більшості неорганічних напівпровідників екситонне збудження характеризується воднево-подібною енергетичною серією [2]:

$$E_n(\vec{k}) = E_g - \frac{R}{n^2} + L(\vec{k}\vec{a}/\pi)^2, \quad (1)$$

де E_g – ширина забороненої зони напівпровідника, R – екситонний Рідберг, $n=1, 2, 3, \dots$ – номер збудженого рівня екситонної серії, L – ширина окремої екситонної зони, \vec{k} – квазіімпульс екситона, \vec{a} – постійна ґратки кристала. У таких напівпровідниках електрон із зони провідності і дірка з валентної зони за рахунок кулонівської взаємодії утворюють безструмове збудження кристала, т.з. екситон Ванье–Мотта. Рух такого комплексу складається з відносного руху електрона і дірки (в (1) – другий доданок) і руху їхнього центра ваги, що у періодичній структурі зумовлює появу енергетичної зони (у (3) – третій доданок). Появу водневоподібного спектра екситонів на довгохвильовому крилі власного

поглинання зареєстровано різними авторами для багатьох напівпровідників. Кількість рівнів, які виявляють себе у смузі поглинання, є різною для різних кристалів (наприклад, $n=6$ у Cu₂O [3] і $n=3$ для CdS [4]), так і для різних серій одного й того ж кристала (наприклад, для кристала MoS₂ $n=6$ у серії A і $n=4$ у серії B [5]).

Зауважимо, що екситонні збудження кристала різняться не тільки енергією, але й хвильовою функцією внутрішнього стану екситона, різною для різних енергетичних рівнів водневоподібної серії. А це означає, що характер взаємодії екситона з коливаннями ґратки кристала змінюватиметься зі зміною номера екситонного рівня. Мета даної роботи – розрахунок функції екситон-фононної зв'язку для перших трьох екситонних рівнів ($n=1, 2, 3$).

Енергію взаємодії екситонів з ґратковими фононами визначають як різницю взаємодії електрона e і дірки h з коливаннями ґратки. Тоді функцію взаємодії екситона з фононами q (фонон S -ої вітки з квазіімпульсом \vec{q}) можна записати [2]:

$$F_n(q) = f_{se}I_{ne}(q) - f_{sh}I_{nh}(q). \quad (2)$$

Тут f_{sj} – параметр, який характеризує інтенсивність взаємодії носія заряду j з фононом S -ої вітки, а I – інтегральна функція типу:

$$I_{nj} = \frac{1}{2} \int \varphi_n^*(\vec{r}) \exp\left(i \frac{m_j}{m} \vec{q} \vec{r}\right) \varphi(\vec{r}) d\vec{r} \equiv \\ \equiv 4\pi \int \varphi_n^2(r) \cos\left(\frac{m_j}{m} \vec{q} \vec{r}\right) r^2 dr. \quad (3)$$

У цьому виразі
рад, індекс j –
хвильової функції
з радіусом a_{ex}
функції φ_n
які для перших
видає [6]:

$$\varphi_2(r) =$$

$$\varphi_3(r) = \frac{1}{3\sqrt{3}}$$

Підставляючи
отримали такі
рівняння енергетичної

$$I_{1j} = \frac{1-3\alpha_j}{(1+\alpha_j)^3}$$

$$I_{3j} = \frac{1-39\alpha_{3j}+2}{(1+\alpha_{3j})^5}$$

$$\alpha_{nj} = \pi^2 \alpha_j (n^2 - 1)$$

Традиційно
рів екситона на
льованій екситон-
ну функцію [2]:

$$E(y) = E_0$$

При цьому
ближньому, зокр
проводимо точн
фононного зв'яз
перших трьох ек
Обмежимося р
екситонів n -го р
гією Ω_0 :

$$|F_n(y)|^2 = \frac{f_n^2}{2}$$

Для аналізу в
час життя ексит

У цьому виразі m_j – маса відповідного носія заряду, індекс $j=e, h$, а φ_m – нормовані на одиницю хвильової функції внутрішнього стану екситона з радіусом a_{ex} і масою m (тотожні з хвильовими функціями внутрішнього стану атома водню), які для перших трьох екситонних рівнів мають вигляд [6]:

$$\varphi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_{ex}^3}} e^{-\frac{r}{a_{ex}}},$$

$$\varphi_2(r) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi a_{ex}^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_{ex}}\right) e^{-\frac{r}{2a_{ex}}}, \quad (4)$$

$$\varphi_3(r) = \frac{1}{3\sqrt{3\pi a_{ex}^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_{ex}} + \frac{2r^2}{27a_{ex}^2}\right) e^{-\frac{r}{3a_{ex}}}.$$

Підставивши (4) у (3) і проінтегрувавши, ми отримали такі вирази для інтегральної функції різних енергетичних рівнів:

$$I_{1j} = \frac{1-3\alpha_j}{(1+\alpha_j)^3}, \quad I_{2j} = \frac{1-64\alpha_{2j}+25\alpha_{2j}^2-6\alpha_{2j}^3}{(1+\alpha_{2j})^5},$$

$$I_{3j} = \frac{1-39\alpha_{3j}+204\alpha_{3j}^2-280\alpha_{3j}^3+107\alpha_{3j}^4-9\alpha_{3j}^5}{(1+\alpha_{3j})^7}, \quad (5)$$

$$\alpha_{nj} = n^2 \alpha_j(y), \quad \alpha_j = \left(\frac{\pi m_j a_{ex}}{2 m a} y\right)^2, \quad y = \frac{qa}{\pi}.$$

Традиційно при розрахунку оптичних спектрів екситона використовували наближення ізольованої екситонної зони і наближену інтегральну функцію [2]:

$$E(y) = E_0 - Ly^2; \quad I_{0j} = (1 - \alpha_j)^{-2}. \quad (6)$$

При цьому жодних пояснень для такого наближення, зокрема щодо I_{0j} не робилось. Ми проводимо точні розрахунки залежності екситон-фононного зв'язку від квазіімпульсу фонона для перших трьох екситонних рівнів енергій ($n=1,2,3$). Об'єктом розгляду процесів розсіювання екситонів n -го рівня на оптичних фононах з енергією Ω_q :

$$E_n(y) = E_{0n} - Ly^2,$$

$$|F_n(y)|^2 = \frac{f_0 \Omega_0}{y^2} [I_{ne} - I_{nh}]^2 \equiv \frac{f_0 \Omega_0}{y^2} i_n(y). \quad (7)$$

Для аналізу візьмемо величину $|F(y)|^2$, так як час життя екситонного збудження і всі характе-

ристики смуги екситонного поглинання (зсув, напівширина, асиметрія) описуються саме квадратом функції екситон-фононної взаємодії. Розрахунки проведено для двох різних кристалів з такими параметрами: $m_e=0,2 m_0$, $m_h=0,7 m_0$, $m=0,9 m_0$, $a_{ex}=30 \text{ \AA}$, $a=5,8 \text{ \AA}$ – кристал CdS; $m_e=1,4 m_0$, $m_h=0,8 m_0$, $m=2,2 m_0$, $a_{ex}=30 \text{ \AA}$, $a=4,4 \text{ \AA}$ – кристал PbI₂. Результати обчислень наведено на рис. 1 і 2, де i_0 – інтегральна функція у традиційному наближенні (6), а i_1, i_2, i_3 – точні інтегральні функції, отримані за допомогою (5). Наші розрахунки показують, що у залежності $i_n(y)$ існують два екстремуми – головний пік та ледь виражений супутник (висота якого на порядок менша), а також що i_0 значно різниться від i_1 у всій області зміни квазіімпульсу. Зі зростом номера екситонного рівня максимум екситон-фононної взаємодії зсувається у бік менших значень квазіімпульсу фонона. При цьому висота головного піка дзвоноподібної функції зв'язку зменшується з істотним зменшенням напівширини кривої. Це свідчить про те, що збільшення номера енергетичного екситонного рівня веде до різкого зменшення часу життя екситонного збудження. Порівнюючи поведінку функції зв'язку для екситона третього рівня ($n=3$) з фононом у різних кристалах, можна стверджувати: у CdS (рис.1) він себе ще може яскраво проявити у смузі поглинання, а для кристала PbI₂ (рис.2) його спостереження під сумнівом, оскільки час його життя вже порядку радіаційної ширини рівня (а отже смуга поглинання з $n=3$ потоне у шумовому фоні кристала).

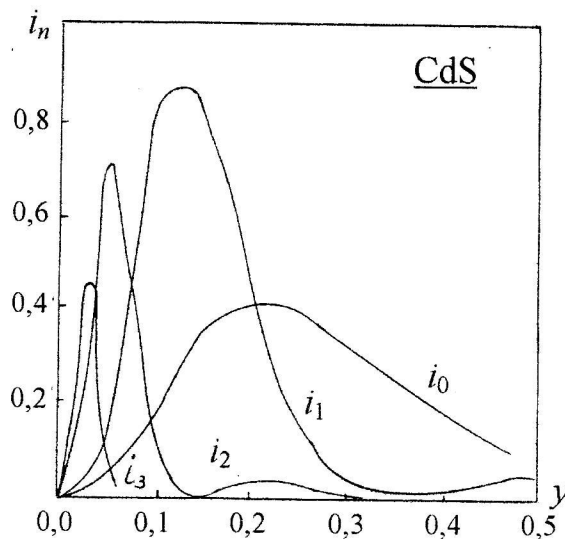


Рис.1. Залежність функції екситон-фононної взаємодії від квазіімпульсу фонона для кристалу CdS.

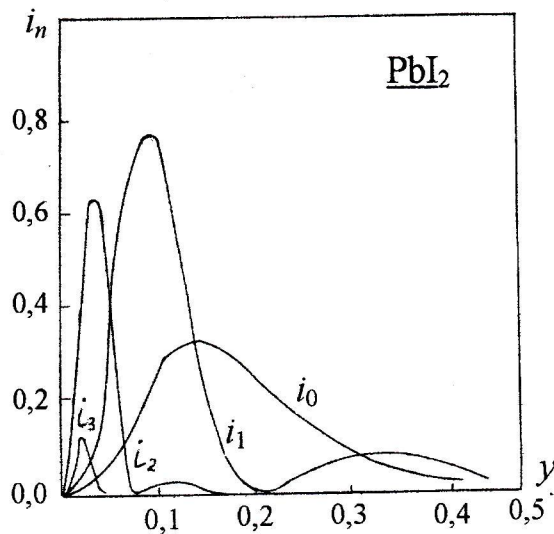


Рис.2. Залежність функції екситон-фононної взаємодії від квазіімпульсу фонона для кристалу PbI_2 .

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Бродин М.С., Блонский И.В., Ніцович Б.М. Динамические эффекты в многокомпонентном газе квазичастиц. - Киев: Наукова думка, 1990.
2. Давыдов А.С. Теория твердого тела. - М.:Наука, 1968.
3. Гросс Е.Ф. Экситон и его движение в кристаллической решетке // УФН. - 1962. - 76, №433.
4. Бродин М.С., Страшикова С.С. Энергетическая структура CdS и форма его экситонных полос // УФЖ. - 1970. - 15, №705.
5. Evans B.L., Young P.A. Exciton spectra in thin crystals // Proc.Phys.Soc. - 1967. - 91, No.572. - P.475-482.
6. Вакарчук І. Квантова механіка. - Львів, 1995.