НЕЛИНЕЙНЫЕ ФРАКТАЛЫ И ЭКСИТОННЫЕ ОБРАЗОВАНИЯ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

З.Ж. Жанабаев, Т.Ю. Гревцева, Н.Е. Алмасбеков

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы

Предлагается фрактальная модель энергетического спектра экситонов в аморфных, пористых полупроводниках, из-за хаотичности структуры которых известная аналогия экситона с водородоподобным атомом становится неполной.

Получены уравнения для энергии экситона, биэкситона и триона в зависимости от энергии возбуждающего фотона. Приведено сопоставление теории с экспериментами последних лет. Теория указывает наличие наиболее универсальных закономерностей, присущих динамическим системам.

Введение

Экситоны образования (биэкситоны, трионы) И ИХ позволяют различать быстропеременную информацию, поэтому являются перспективными объектами исследований по наноэлектронике. В наноразмерных полупроводниках реализуются более благоприятные условия для перекрытия волновых функций электрона и дырки, в силу этого энергия связи экситона будет значительно больше, чем в неограниченно однородной среде. Этот факт дает надежду на то, что квантовые биты от экситонов можно будет получать при достаточно высоких, даже комнатных температурах.

специфики Как правило, из-за технологических процессов (имплантация, диффузионная агрегация) наноразмерные полупроводники имеют нерегулярную, хаотическую структуру. При этом у них наблюдаются, хотя и на малом интервале масштаба измерения, фрактальные закономерности. Следовательно, свойства экситонов не могут быть универсальным образом описаны плавными закономерностями, вытекающими, например, из дифференциальных уравнений. Поэтому известная аналогия экситонов с водородоподобными атомами не может полностью описать специфику энергетического спектра экситонов в некристаллических полупроводниках с хаотической структурой [1].

К такому выводу также приводят экспериментальные работы [2, 3], в которых описывается наличие некоторого самоподобия, квантовомеханической когерентности экситонов и биэкситонов и условия ее разрушения. Из сказанного следует естественный вопрос: обладает ли энергетический спектр экситонов свойствами фрактальных кривых?

Целью настоящей работы является построение нелинейной фрактальной эволюции экситонов в зависимости от энергии образующих их фотонов.

1. Нелинейные фрактальные меры

Основными свойствами фракталов являются их самоподобие и зависимость меры от масштаба измерения. Под мерой понимается любая физическая величина, характеризуемая аддитивным измеряемым множеством. К примеру, мерой геометрического фрактала служит длина, площадь, объем. Удивительное разнообразие физических свойств нанообъектов обусловлено именно нелинейной зависимостью их меры от собственной ее величины. Этот факт убедительно показывает необходимость фрактального анализа в нанонауке.

Известные теории фракталов предполагают независимый выбор минимального масштаба измерения (размера ячеек, покрывающих объект) от величины определяемой меры. Если нас интересует эволюция меры от заданного параметра порядка – определяющей переменной физического процесса, то масштаб измерения выбирается через этот параметр и искомую меру. Следовательно, фрактальная мера будет нелинейной функцией, зависящей от самого процесса.

Запишем традиционное определение фрактальной меры *М* в виде

$$M = M_0 \left(|\Delta M| / M_* \right)^{-\gamma}, \ \gamma = D - d, \ \gamma > 0,$$
(1)

где M_0 – регулярная (нефрактальная) мера, ΔM – масштаб измерения, M_* – норма M, D – фрактальная размерность множества значений M, d – топологическая размерность носителя меры. Учитывая то, что ΔM не зависит от M, меру, определяемую формулой (1), можно условно назвать линейной.

При наличии параметра порядка λ можно выбрать ΔM в следующих формах:

$$\Delta M_{M} = \frac{|M - \lambda|}{M} = \left|1 - \frac{\lambda}{M}\right|, \ \Delta M_{\lambda} = \frac{|M - \lambda|}{\lambda} = \left|1 - \frac{M}{\lambda}\right|, \tag{2}$$

где индексы M, λ соответствуют нормам ΔM . С учетом (2) формула (1) запишется в виде

$$M_{M} = M_{0} \left(\left| 1 - \frac{\lambda}{M} \right| \right)^{-\gamma}, M_{\lambda} = M_{0} \left(\left| 1 - \frac{M}{\lambda} \right| \right)^{-\gamma}.$$
(3)

В пределе $\gamma \to 0$ имеем $M_M = M_{\lambda} = M_0$, что соответствует смыслу M_0 . При $\lambda = 0$ имеем $M_M = M_0$, $M_{\lambda} = 0$. Это означает, что фрактальная мера, определяемая собственной нормой, существует и в случаях отсутствия внешнего воздействия, характеризуемого параметром λ .

Применим формулы (3) к описанию энергетического спектра экситонов. Пусть в зоне проводимости полупроводника с шириной запрещенной зоны E_g имеется один электрон с эффективной массой m_e , а в валентной зоне – одна дырка с эффективной массой m_n . Роль остальных частиц сведем к фону с диэлектрической проницаемостью ε . Считая, что взаимодействие между этими квазичастицами происходит по закону Кулона, из уравнения Шредингера задачи об атоме водорода можно получить следующее выражение для полной энергии электронно-дырочной пары:

$$E_n(\vec{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_n)} - \frac{m_e m_h e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2 n^2 (m_e + m_h)}, \ n = 1, 2, 3...$$
(4)

В дальнейшем мы не будем учитывать энергию движения экситона «как целого», считая равным нулю квазиимпульс \vec{k} . Обозначим энергию связи электрона и дырки в экситоне (последний член в формуле (4)) через *E*. Рассмотрим случай возбуждения электрона в зону проводимости фотоном с энергией $\hbar w$, тогда формулу (4) можно записать в виде

$$\hbar w - E_g = E. \tag{5}$$

Принимая упрощенные обозначения $M_M = M = E_1$, $M_0 = E_0$, $\lambda = \hbar w - E_1$, $M_{\lambda} = E_{1,w}$, из формул (3) получим для энергии одиночного экситона E_1 выражение

$$E_{1} = E_{0} \left(\left| 1 - \frac{\hbar w - E_{g}}{E_{1}} \right| \right)^{-\gamma} = f\left(E_{0}, E_{1}\right), E_{1,w} = E_{0,w} \left(\left| 1 - \frac{E_{1,w}}{\hbar w - E_{g}} \right| \right)^{-\gamma} = f\left(E_{0,w}, E_{1,w}\right).$$
(6)

Здесь E_0 – энергия экситона на пороге возбуждения его фотоном при $\hbar w = E_g$, при этом $E_{0,w} = 0$.

Биэкситоны, трионы и другие кластеры определим через иерархические структуры:

$$E_n = f\left(\dots f\left(\frac{E_0}{n}, E_n\right)\dots\right),\tag{7a}$$

$$E_{n,w} = f\left(\dots f\left(\frac{E_{0,w}}{n}, E_{n,w}\right) \dots\right), n = 1, 2, \dots,$$
(7b)

где число скобок равно n. Уравнения (7a) соответствуют выбору масштаба измерения фрактальной меры относительно самой меры и описывают эволюцию экситонов, биэкситонов и других структур, существующих в основном состоянии (без внешнего излучения), уравнения (7b) – относительно энергии фотонов и соответствуют описанию возбужденного состояния. Формулы (6), (7a), (7b) позволяют определить энергию системы, состоящей из экситонных образований в виде

$$E = \sum_{i=1}^{n} E_i, n = 1, 2, \dots$$
(8)

где n = 1 описывает экситон, n = 2 – биэкситон, n = 3 – трион и т.д.

Если, как в простейшем случае собственной проводимости коэффициент поглощения фотонов $\alpha(w)$ определяется плотностью числа состояний, пропорциональной квадратному корню из энергии, то имеем

$$\alpha(w) = const \cdot \sqrt{E} = \alpha_0 \sqrt{E}. \tag{9}$$

В экспериментах [2-4] отмечается наличие когерентности экситонных и биэкситонных спектров. О наличии когерентности можно судить по мгновенной фазе спектров и соответствующей частоте. Мгновенная фаза $\varphi(t)$ некоторого сигнала x(t) определяется с помощью стандартного преобразования Гильберта:

$$\varphi(t) = \operatorname{arctg}\left(\frac{x^{H}(t)}{x(t)}\right), \ x^{H}(t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x(\tau)}{t-\tau} d\tau \,.$$

$$\tag{10}$$

Среднюю «частоту» по интервалам *ћw* определим как:

$$F = \left\langle \left| \frac{d \left| \varphi(\hbar w) \right|}{d \left(\hbar w \right)} \right| \right\rangle.$$
(11)

2. Результаты численного анализа

На основе формул (6)-(8) рассмотрим экситонно-биэкситонные спектры в наноструктурированных полупроводниковых пленках. Варьируя значения параметров E_g , E_0 , γ , можно получить различные типы экситонных спектров.



Рис. 1. Влияние параметра γ на экситонно-биэкситонный спектр. (a) – формула (7a), (b) – формула (7 b): $E_g = 1.6 \, eV$, $E_0 = 0.05 \, eV$, $1 - \gamma = 1 - I_2$, $2 - \gamma = 1 - I_1$.



Рис. 2. Экситонно-биэкситонный спектр (a), модуль фазы (b) и средняя частота (c): $E_g = 1.6 \, eV, E_0 = 0.05 \, eV, \gamma = 1 - I_2$

Фрактальность приводит к росту амплитуды осцилляций и расширению спектра (рисунок 1). Были использованы самоподобное $(1-I_2)$ и самоаффинное $(1 - I_1)$ значения фрактальных размерностей [5]. Увеличение ширины запрещен- E_{σ} приводит ной зоны к смещению области осцилляций в сторону бо́льших энергий фотонов.

На языке «фаза-частота» экситонные биэкситонные И области. соответственно с большими И малыми осцилляциями, четко разделяются (рисунок 2). Этот факт указывает на наличие когерентности в смысле определенной разности фаз между областями осцилляций экситона и биэкситона. Расположение пиков и количество их внутри этих областей зависит от γ и числа точек моделирования. Рисунки 2 получены при шаге $\Delta \hbar w = 10^{-3}$ эВ.

3. Сопоставление с экспериментом

Экситонно-биэкситонный спектр, показанный на рисунке 3(а), получен при 4 К [2]. Квантовые точки, исследуемые в эксперименте, были созданы в матрице GaAs (311) методом металлорганической вакуумной эпитаксии. Квантовые точки образовались в результате самоорганизации. Каждый пик фотолюминесценции соответствует возбужденному энергетическому состоянию экситона или биэкситона. На рисунке 3(b) представлен экситонно-биэкситонный спектр, полученный численным анализом формул 7(а), (8), (9).

На рисунке 4(а) показан экспериментальный экситонный спектр фотолюминесценции пары квантовых точек InGaAs, полученных на подложке GaAs методом металлорганической вакуумной фазовой эпитаксии [3]. Образец имеет два слоя квантовых точек, расстояние между слоями составляет 5 нм. Результаты моделирования по формулам 7(а), (8), (9) представлены на рисунке 4(b).



Рис.3. Экситонно-биэкситонный спектр фотолюминесценции изолированной квантовой точки InGaAs (a) – эксперимент [2], (b) – теория: $E_g = 1.6 \ eV$, $\gamma = 0.244$, $E_0 = 0.05 \ eV$, $\Delta \hbar w = 10^{-4} \ eV$.



Рис.4. Спектр фотолюминесценции квантовых точек двухслойной структуры квантовых точек InGaAs (a) – эксперимент [3], (b) – теория: $E_g = 1.65 \ eV$, $\gamma = 1 - I_2$, $E_0 = 4 \cdot 10^{-3} \ eV$, $\Delta \hbar w = 10^{-4} \ eV$.

4. Обсуждение

Так же, как и в эксперименте, в теоретических графиках наблюдается смещение экситонных и биэкситонных спектров по частоте фотонов. Полученные в теории экситонные пики энергии возникают на тех же интервалах изменения $\hbar w$, что и в экспериментах, т.е. на интервалах порядка $10^{-2} \div 10^{-3}$ эВ. Параметры E_0, E_g адекватно учитывают условия эксперимента. Когерентность ярче наблюдается при меньших значениях параметра E_0 . Пороговое значение энергии образования экситонов E_0 зависит, как и ожидалось, от характера локализации наноструктур, от температуры. По смыслу E_0 может служить верхней оценкой энергии фононов, т.к. при бо́льшей энергии фононов экситон распадается.

Заслуживает внимания тот факт, что в эксперименте [2] биэкситон образуется вокруг квантовой точки, область локализации специально не ограничена. В эксперименте [3] биэкситон образуется между квантовыми точками, расстояние между которыми порядка 5 нм, т.е. узкая локализация способствует образованию экситона при малых E_0 . Это тоже соответствует теории.

69

Таким образом, фрактальная модель зависимости энергии электрон-дырочной пары от энергии возбуждающего фотона может быть использована для описания когерентности экситонных образований. Мы хотим указать различие между терминами «квантовомеханическая когерентность» и когерентность общих волновых процессов. Квантовомеханическая когерентность означает только наличие интерференции между волновыми функциями, что обнаруживается в виде осцилляций энергии системы. Когерентность в общем смысле означает постоянство разности фаз эволюции подсистем. В экситонных образованиях когерентность может наблюдаться в этих разных видах.

5. Заключение

В настоящей работе мы впервые предлагаем формулу нелинейной фрактальной меры, которая зависит от самой себя в виде масштаба измерения. Такая мера правильно отражает иерархическую суть экситонных образований. Теория описывает условия разделения, когерентности энергетических пиков экситонных образований. Новые идеи нашей работы могут найти широкое применение в современной наноэлектронике.

Литература

1. Жанабаев З.Ж., Данегулова Т.Ю., Гревцева Т.Ю. Оптические процессы в хаотически наноструктурированных полупроводниках // Мат. 7-й междунар. конф. «Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент». – Астана, 2010. - С. 115-126.

2. Gotoh H., Kamada H., et al. Exciton Absorption Properties of Coherently Coupled Exciton-Biexciton Systems in Quantum Dots // Physical Review B 71. – 2005. – PP. 195334-1 – 9.

3. Gotoh H., Sanada H., Kamada H., Nakano H., Hughes S., Ando H., Temmyo J. Detecting Coupled Excitons with Microphotoluminescence Techniques in Bilayer Quantum Dots // Physical Review B 71. – 2006. – PP. 115322-1 – 6.

4. Kamada H., Gotoh H., Temmyo J., Takagahara T., Ando H. Exciton Rabi Oscillations in a Single Quantum Dot // Physical Review . Vol. 87, No 24. – 2001. – PP. 246401-1 – 4.

5. Zhanabayev Z.Zh., Grevtseva T.Yu. Fractal Properties of Nanostructured Semiconductors // Physica B: Condensed Matter. – 2007. - Vol. 391, № 1. - P. 12-17.

БЕЙСЫЗЫҚ ФРАКТАЛДАР ЖӘНЕ НАНОҚҰРЫЛЫМДЫ ШАЛАӨТКІЗГІШТЕРДЕГІ ЭКСИТОНДЫҚ ҚҰРЫЛЫМДАР

З.Ж. Жаңабаев, Т. Ю. Гревцева, Н.Е. Алмасбеков

Аморфты, босқыл шалаөткізгіштердегі экситондар спектрінің фракталдық моделі ұсынылған. Бұл көрсетілген орталарда экситонның сутегі атомына ұқсастық моделі орындалмайды.

Экситонның биэкситонның, трионның энергиясының қоздырушы фотон энергиясына байланысын анықтайтын теңдеулер алынған. Теория соңғы жылдардағы экспериментпен салыстырылған. Динамикалық жүйелерге сай мейлінше әмбебап заңдылықтар бар екендігі теория жүзінде көрсетілген.

NONLINEAR FRACTALS AND EXCITON FORMATIONS IN NANOSTRUCTURED SEMICONDUCTORS

Z.Zh. Zhanabayev, T.Yu. Grevtceva, N.E. Almasbekov

We suggest the fractal model for the description energy spectra of excitons in amorphous and porous semiconductors. Because of theirs chaotic structure the famous analogy of exciton to hydrogen-like atom is insufficient.

We obtain equations for energy of exciton, biexciton and trion depending on photon energy. Comparison of results of our theory to experimental data of the last years is given in the paper. Theory shows the existence of most universal regularities of dynamical systems.