ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЭКСИТОНА В CdTe

Александру ВАРЗАРЬ, студент
CZU: 530.145:538.9
santwosna8@gmail.com

In this article, the energy spectrum of an exciton in CdTe is calculated using a numerical minimization method. For this, the Schrödinger equation is solved in the impulse representation with the potential deduced in [1]. The relevance of the problem is that this potential is solved numerically for the first time. The importance of the problem is that this potential makes it possible to find the energy spectrum of the exciton for different materials (in this case, it is CdTe).

Введение. Энергетический спектр квантовой системы можно получить решая уравнение Шредингера. Твёрдое тело – это пример того, где можно применить уравнение Шредингера для расчёта, в частности, энергетического спектра квазичастиц. Для численного анализа энергетического спектра экситона в теллуриде кадмия (CdTe) используется метод конечных элементов. Актуальность работы заключается в том, что данная форма потенциала для экситона до этого не использовалась для численного вычисления энергетического спектра экситона. Для численного анализа используются метод конечных методов и метод нахождения численного корня трансцендентного уравнения.

Важность работы состоит в том, что данная форма потенциала позволяет гибко вписывать параметры определенного материала. Это дает возможность численного анализа энергетического спектра экситона для различных материалов.

Численный анализ энергетического спектра экситона Для численного анализа энергетического спектра экситона в CdTe решается следующее уравнение Шредингера [1], используя [2]:

$$\left(1+\frac{\hbar^2 k^2}{2m_r E}\right) E\,(1+k^2a^2)^{-2} =$$

$$= \frac{e^2}{\pi\varepsilon_0}\int_{-1}^{1} dx \int_0^{\infty} dq\left(1+a^2(k^2+q^2+2kqx)\right)^{-2} \frac{1}{\varepsilon}\left(n_{CK}^{(T)} - n_{VK}^{(T)}\right) \qquad (1)$$

где: $\varepsilon = \frac{\varepsilon_0(q^2+q_c^2)}{q^2}$; $q_c^2 = \frac{4\pi n_0 e^2}{\varepsilon_0 k_0 T}$; $n_{CK} = \left(e^{(E_{CK}-\mu)/k_0 T}+1\right)^{-1}$;

$$n_{VK} = \left(e^{(E_{VK}-\mu)/k_0 T}+1\right)^{-1};$$

$$E_{CK} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e};\ E_{VK} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} - E_g \qquad (2)$$

CdTe имеет следующие параметры:

Эффективная масса электрона проводимости: $m_n = 0{,}11m_e$

Эффективная масса дырки: $m_p = 0{,}4m_e$

Ширина запрещенной зоны при 300 К: $E_G(300\ K) = 1{,}45\ eV$ (3)

Ширина запрещенной зоны при 0 К: $E_G(0\ K) = 1{,}601\ eV$

Температурная зависимость ширины запрещенной зоны имеет вид линейной зависимости:

$$E_G(T) = E_G(0\ K) - \alpha\, T \qquad (4)$$

Химический потенциал:

$$\mu = \frac{E_G}{2} + \frac{3}{4}k_0\, T \ln\frac{m_p}{m_n} \qquad (5)$$

Решая уравнение Шредингера (1), учитывая параметры CdTe (2) и химический потенциал (5), определяя ширину запрещенной зоны из зависимости (3), в диапазоне температур от 10 до 77 К, получается температурная зависимость энергии экситона в данном диапазоне температур. При граничных значениях энергия имеет следующие значения:

$$\begin{cases} E(10\ K) = 9{,}12\ m\text{eV} \\ E(77\ K) = 8{,}92\ m\text{eV} \end{cases} \qquad (6)$$

Температурная зависимость имеет следующую форму:

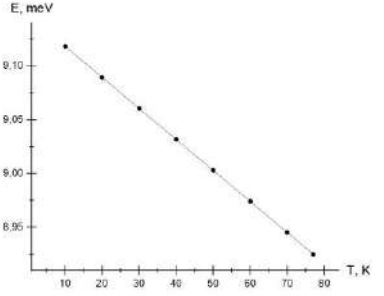


Рис. Температурная зависимость энергии экситона

В случае, когда $\varepsilon = \varepsilon_0$; $n_{CK} = 0$; $n_{VK} = 1$, что соответствует нулевой температуре, основная энергия экситона равна:

$$E = 14{,}91\ meV \quad (7)$$

Выводы

Исходя из полученных результатов следует, что:

- Была получена температурная зависимость энергии экситона в диапазоне температур от 10 до 77 К. Значение энергии в данном диапазоне температур варьирует от 9,12 meV до 8,92 meV.
- С увеличением температуры энергия экситона уменьшается и стремиться к нулю.
- Энергия, определяющая энергетический спектр экситона при нулевой температуре, равна 14,91 meV, что сопоставимо с экситонным Ридбергом в CdTe, который равен 9,1 meV.
- Значения энергии экситона при 77 К хорошо коррелируют с значениями, полученными экспериментально – 12,0 meV [3] и теоретически – 13,2 meV [4].

Библиография:

1. КЛЮКАНОВ, А., НИКА, Д. Квазичастицы в физике конденсированного состояния. В: *Conferința științifică națională cu participare internațională „Integrare prin cercetare și inovare”.* Chișinău, 10-11 noiembrie 2020. *Rezumatele comunicărilor. Științe ale naturii și exacte.* Chișinău: CEP USM, 2020, pp.267-271.
2. Программа Wolfram Mathematica 11.
3. REYNOLDS, D.C., LITTON, C.W., COLLINS, T.C. Some Optical Properties of Group II-VI Semiconductors (II). In: *Phys. Stat. Sol.*,1965, no. 12, pp.3-55.
4. MAHLER, G. *Dissertation.* Universität Regensburg, 1973.

Recomandat
Sergiu VATAVU, dr., conf. univ.