Письма в ЖЭТФ, том 109, вып. 3, с. 191 – 195

Поляронный сдвиг уровней квантовой проволоки в гибридной структуре с бозе-конденсатом

А. В. Каламейцев[+], *М. М. Махмудиан*[+*1)], *А. В. Чаплик*[+*1)]

[+]*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения, 630090 Новосибирск, Россия*

[*]*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 29 ноября 2018 г.
После переработки 29 ноября 2018 г.
Принята к публикации 29 ноября 2018 г.

Волновая функция поперечного движения электронов в квантовой проволоке, расположенной вблизи двумерного слоя дипольных экситонов, возмущается флуктуациями экситонной плотности благодаря электрон-экситонному взаимодействию. Этот поляронный эффект приводит к сдвигу уровней проволоки и может наблюдаться по изменению частоты межподзонных переходов. В работе рассчитан поляронный сдвиг частоты основного межподзонного перехода в условиях бозе-конденсации экситонов, а также для нормального состояния вырожденного бозе-газа.

DOI: 10.1134/S0370274X19030111

Введение. Мы рассматриваем структуру, содержащую двумерное "море" бозе-частиц – пространственно непрямых дипольных экситонов – и квазиодномерную ферми-систему – квантовую проволоку, содержащую электроны, на расстоянии Δ от экситонного слоя (см. рис. 1). В нашей предыдущей работе [1], где электронная часть гибридной системы считалась также двумерной, было показано, что возможна автолокализация электрона по типичному поляронному механизму за счет электрон-экситонного взаимодействия. Там же содержится краткое объяснение интереса к подобным гибридным структурам в последние годы и библиография вопроса.

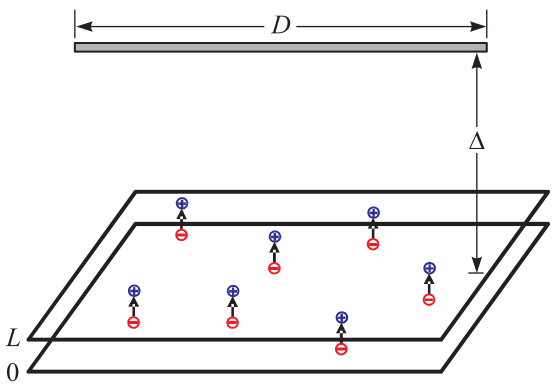

Рис. 1. (Цветной онлайн) Гибридная система квантовая проволока и 2D экситонный газ

Из общих соображений ясно, что с уменьшением эффективной размерности области движения квантовой частицы облегчаются условия ее локализации. Поэтому естественно ожидать, что поляронные эффекты для квантовой проволоки будут проявляться сильнее, чем для двумерного электронного газа. С другой стороны, электронный спектр проволоки частично квантован, и поэтому взаимодействие с экситонным газом приводит еще и к сдвигам подзон размерного квантования. Этот эффект (по существу тоже поляронной природы) проявляется в изменении частот межподзонных переходов и, видимо, легче доступен экспериментальному наблюдению, чем пространственная локализация в поляроне сильной связи. В данной работе мы рассмотрим квантовую проволоку конечной ширины (т.е. двумерную прямую полосу), электроны которой взаимодействуют с двумерным газом дипольных экситонов в состоянии бозе-конденсации. Для сравнения будет рассчитан также сдвиг частоты межзонного перехода в проволоке, взаимодействующей с экситонным вырожденным бозе-газом выше температуры фазового перехода.

Экситон-экситонное взаимодействие будем считать контактным $V_{\text{ex-ex}} = g\delta(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}')$, где $g = 4\pi e^2 L/\varepsilon$, L – плечо диполя, $\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}'$ - двумерные радиус-векторы. Электрон-экситонное взаимодействие дается формулой (см. [1]):

$$V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = -\frac{e^2 \Delta L}{\varepsilon \left[\Delta^2 + (\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}')^2\right]^{3/2}}. \qquad (1)$$

1)e-mail: mahmood@isp.nsc.ru; chaplik@isp.nsc.ru

Формула (1) есть первый член разложения точного выражения $V_{\text{e-ex}}$ при $L \ll \Delta$. Бозе-конденсат экситонов описываем уравнением Гросса–Питаевского [2], т.е. в приближении среднего самосогласованного поля. Обозначая волновую функцию электрона в проволоке через $\chi(\boldsymbol{\rho})$, а конденсатную через $\psi(\boldsymbol{\rho})$, напишем гамильтониан электрон-экситонного взаимодействия в виде

$$\hat{H}_{\text{int}} = \int |\psi(\boldsymbol{\rho}')|^2 V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}')|\psi(\boldsymbol{\rho})|^2 d\boldsymbol{\rho} d\boldsymbol{\rho}'. \qquad (2)$$

Функции $\psi(\boldsymbol{\rho})$ и $\chi(\boldsymbol{\rho})$ удовлетворяют системе уравнений:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\boldsymbol{\rho}} - \mu + g|\psi(\boldsymbol{\rho})|^2 + \right.$$
$$\left. + \int V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}_1)|\chi(\boldsymbol{\rho}_1)|^2 d\boldsymbol{\rho}_1\right]\psi(\boldsymbol{\rho}) = 0, \qquad (3)$$
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{\rho}'} + \int V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho}'-\boldsymbol{\rho}_1)|\psi(\boldsymbol{\rho}_1)|^2 d\boldsymbol{\rho}_1 + \right.$$
$$\left. + U_0(y') - E\right]\chi(\boldsymbol{\rho}') = 0. \qquad (4)$$

Здесь m и M – массы электрона и экситона соответственно, $U_0(y')$ – исходный конфайнмент-потенциал квантовой проволоки, которую считаем параллельной оси OX, μ – химический потенциал экситонного газа, E – энергия электрона в квантовой проволоке.

Точное решение нелинейной системы (3) даже численными методами представляет большие математические трудности. Поэтому мы введем два упрощающих предположения. Во-первых, будем рассматривать однородные по x решения, т.е. считаем, что флуктуации плотности экситонов конденсата зависят лишь от поперечной проволоке координаты y. Волновая функция электронов $\chi(\boldsymbol{\rho}')$ в соответствии с симметрией задачи должна, вообще говоря, иметь вид $\chi(y)\exp(iqx)$, но мы здесь ограничимся лишь случаем $q = 0$. Это соответствует дну произвольной подзоны в электронном спектре квантовой проволоки. Во-вторых, будем считать, что потенциал проволоки $U_0(y')$ существенно больше электрон-экситонного взаимодействия, и поэтому в качестве первого приближения подставим в уравнение (3) для ψ волновую функцию электрона в проволоке $\chi^{(0)}$, определяемую лишь потенциалом $U_0(y')$. Решив после этого уравнение (3) для волновой функции конденсата, мы подставим ее в уравнение (4) и, вычислив соответствующий интеграл, найдем эффективный потенциал, действующий на электроны в квантовой проволоке. Отсюда уже находятся искомые сдвиги уровней. Естественно, для каждого уровня в уравнение (3) следует подставлять соответствующую ему собственную функцию $\chi^{(0)}(y')$ в потенциале $U_0(y')$.

Наиболее трудным этапом в реализации этой программы было численное решение нелинейного уравнения (3). Эта процедура описана в Приложении.

Квантовая проволока и нормальный бозе-газ. Гамильтониан электрон-экситонного взаимодействия здесь удобней записать в виде:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \int |\chi(\boldsymbol{\rho})|^2 V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}') n(\boldsymbol{\rho}') d\boldsymbol{\rho} d\boldsymbol{\rho}', \qquad (5)$$

где $n(\boldsymbol{\rho}')$ – плотность дипольных экситонов. Знак в правой части (5) соответствует определенной полярности ориентированных диполей: к квантовой проволоке обращен положительный полюс диполя.

Плотность экситонов выше точки конденсации определяется распределением Бозе–Эйнштейна, в котором следует учесть потенциал $W(\boldsymbol{\rho}')$ – энергию диполя в поле остальных экситонов и взаимодействие его с электроном.

$$W(\boldsymbol{\rho}') = gn(\boldsymbol{\rho}') + \int V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}')|\chi(\boldsymbol{\rho})|^2 d\boldsymbol{\rho}. \qquad (6)$$

Для плотности $n(\boldsymbol{\rho}')$ имеем:

$$n(\boldsymbol{\rho}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\int \frac{d\boldsymbol{p}}{e^{\beta[p^2/2M + W(\boldsymbol{\rho}') - \mu]} - 1} =$$
$$= -\frac{MT}{2\pi\hbar^2}\ln[1 - e^{\beta[\mu - W(\boldsymbol{\rho}')]}], \quad \beta \equiv 1/T. \qquad (7)$$

Представим плотность в виде $n(\boldsymbol{\rho}') = n_0 + \delta n(\boldsymbol{\rho}')$, где n_0 – постоянная плотность однородного экситонного газа в отсутствие электронов. Соответственно, энергию экситона $W(\boldsymbol{\rho}')$ можно записать как $\widetilde{W} + gn_0$ и включить вклад gn_0 в перенормированный химпотенциал. Тогда для δn получается

$$\delta n(\boldsymbol{\rho}') = -\frac{n_0}{\Gamma}\ln[e^{\Gamma} - (e^{\Gamma} - 1)e^{-\beta\widetilde{W}}], \ \Gamma \equiv \frac{2\pi\hbar^2 n_0}{MT}, \qquad (8)$$

откуда следует уравнение для $W(\boldsymbol{\rho}')$:

$$W(\boldsymbol{\rho}') = \int V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}')|\chi(\boldsymbol{\rho})|^2 d\boldsymbol{\rho} -$$
$$-\frac{gn_0}{\Gamma}\ln[e^{\Gamma} - (e^{\Gamma} - 1)e^{-\beta\widetilde{W}(\boldsymbol{\rho}')}]. \qquad (9)$$

Уравнение Шредингера замыкает систему трех уравнений на три неизвестные функции: $\delta n(\boldsymbol{\rho}')$, $\widetilde{W}(\boldsymbol{\rho}')$ и $\chi(\boldsymbol{\rho})$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\chi(\boldsymbol{\rho}) + \left[U_0(\boldsymbol{\rho}) + \overline{V}_{\text{e-ex}} + \right.$$
$$\left. + \int V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}_1)\delta n(\boldsymbol{\rho}_1) d\boldsymbol{\rho}_1\right]\chi(\boldsymbol{\rho}) = E\chi(\boldsymbol{\rho}), \qquad (10)$$

где $U_0(\boldsymbol{\rho})$ – внешний потенциал, созданный проволокой, $\overline{V}_{\text{e-ex}} = n_0 \int V_{\text{e-ex}}(\mathbf{R})d\mathbf{R}$ – вклад в энергию от взаимодействия электрона с однородным экситонным газом.

Оценим вклады двух слагаемых в правой части уравнения (9), для чего сначала надо оценить величину Г. Примем плотность экситонов $n_0 \sim 10^{10} \div \div 10^{11}\,\text{см}^{-2}$, $M \sim 0.5m_0$ (m_0 – масса электрона), $\varepsilon = 10$, $T \sim 10 \div 100\,\text{K}$, т.е. заведомо выше температуры конденсации. Тогда получаем оценку $\Gamma \sim \sim 10^{-1} \div 10^{-2} \ll 1$. В качестве иллюстрации рассмотрим высокотемпературный случай $T \sim 100\,\text{K}$, $\Delta \sim L \sim 100\,\text{Å}$. В уравнении (9) первое слагаемое справа при этом порядка единицы, второе порядка 0.1. В уравнении (8) надо провести разложение по Г до линейных членов. В первом приближении получим $\widetilde{W}(\boldsymbol{\rho}') \approx \int V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho}' - \boldsymbol{\rho})|\chi(\boldsymbol{\rho})|^2 d\boldsymbol{\rho}$, откуда следует самосогласованное уравнение для волновой функции электрона:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\chi(\boldsymbol{\rho}) + \left\{U_0(\boldsymbol{\rho}) + n_0 \int V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_1) \times \right. \\ \left. \times\, e^{-\beta \int V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}')|\chi(\boldsymbol{\rho}')|^2 d\boldsymbol{\rho}'} d\boldsymbol{\rho}_1 \right\}\chi(\boldsymbol{\rho}) = E\chi(\boldsymbol{\rho}). \quad (11)$$

Уравнение (11) написано фактически для одного электрона или, точнее, для случая, когда все электроны квантовой проволоки находятся в одной подзоне, и поэтому имеют общую волновую функцию поперечного движения, т.е. $\chi_0(\boldsymbol{\rho}) = e^{iqx}\widetilde{\chi}(y)$. В противном случае плотность электронов, определяющая потенциал $V_{\text{e-ex}}$, зависит от функций разных подзон χ_n и от чисел заполнения f_n. Таким образом, общий случай (даже в рассматриваемой сейчас квазиклассической постановке) является крайне сложным для вычислений. Будем интересоваться оптическими переходами между начальным состоянием системы (заполнена только самая нижняя подзона с линейной плотностью N_l) и конечным состоянием, когда "один" электрон перешел в следующую подзону. Тогда в уравнении (11) в показателе экспоненты под интегралом функция χ должна быть нормирована на число электронов в проволоке, т.е. иметь вид $\sqrt{N_l}e^{iqx}\chi(y)$.

Если показатель экспоненты в подинтегральном выражении мал, а взаимодействие $V_{\text{e-ex}}$ можно заменить контактным, то уравнение (11) переходит в уравнение, установленное Гроссом и Питаевским для бозонов.

Для нахождения собственных значений E применим прямой вариационный принцип. Моделируем конфайнмент-потенциал проволоки параболой $U_0 = m\Omega^2 y^2/2$ и выбираем в качестве пробных функций нулевого и первого уровней выражения:

$$\chi_0 = \frac{Ae^{iqx}}{\sqrt{D}}e^{-\alpha y^2}, \;\; \chi_1 = \frac{Bye^{iqx}}{\sqrt{D}}e^{-\gamma y^2}. \quad (12)$$

Здесь D – нормировочная длина проволоки, q – сохраняющийся импульс электрона вдоль проволоки, α и γ – вариационные параметры, A и B находятся из нормировки. При этом интегралы (11) становятся однократными, так как $\int V_{\text{e-ex}}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_1)|\chi(\boldsymbol{\rho}_1)|^2 d\boldsymbol{\rho}_1 = = -\frac{2e^2\Delta L}{D}\int \frac{f(y_1)dy_1}{\Delta^2 + (y-y_1)^2}$, где $f(y)$ – зависящая от поперечной проволоке координаты часть $|\chi|^2$.

Вычисления проводились при следующих значениях параметров: $T = 50\,\text{K}$, $D = 300\,\text{Å}$, $\Delta = 100\,\text{Å}$, $L = 15\,\text{Å}$, $a_\Omega = 180\,\text{Å}$, $n_0 = (1 \div 5) \cdot 10^{10}\,\text{см}^{-2}$, $N_l = (0.3 \div 3.3) \cdot 10^6\,\text{см}^{-1}$. Минимизирующие энергию значения α и γ оказались равными: $\alpha_{\min} = = 0.559a_\Omega^{-2}$, $\gamma_{\min} = 0.516a_\Omega^{-2}$ для $n_0 = 5 \cdot 10^{10}\,\text{см}^{-2}$ и $N_l = 1.3 \cdot 10^6\,\text{см}^{-1}$. Различие этих величин указывает на отклонение эффективного конфайнмент-потенциала от строго параболического, т.е. демонстрирует влияние ангармонизма, вызванного взаимодействием с экситонами (как известно, для гармонического осциллятора показатель гауссовской экспоненты одинаков для всех уровней).

На рисунках 2–5 приведены результаты численных расчетов положения двух нижних уровней размерного квантования в проволоке (минимумы подзон) и частоты вертикального перехода $0 \to 1$. Для удобства сравнения на каждом рисунке приводятся результаты, соответствующие конденсату эксито-

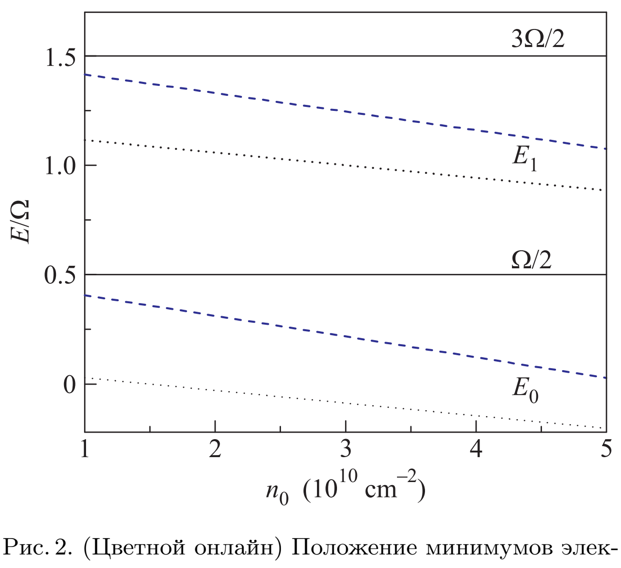

Рис. 2. (Цветной онлайн) Положение минимумов электронных подзон как функция плотности экситонов. Плотность электронов $N_l = 1.3 \cdot 10^6\,\text{см}^{-1}$

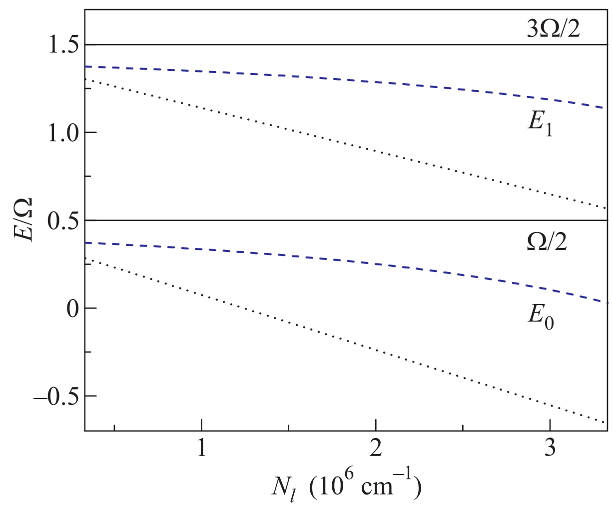

Рис. 3. (Цветной онлайн) Положение минимумов электронных подзон как функция плотности электронов. Плотность экситонов $n_0 = 2 \cdot 10^{10}$ см$^{-2}$

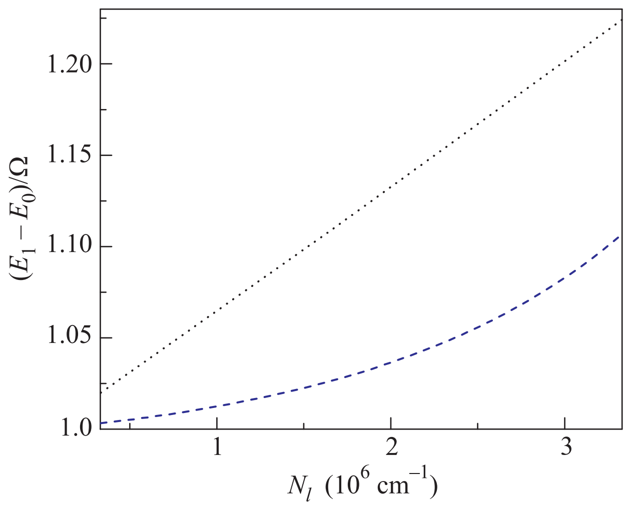

Рис. 5. (Цветной онлайн) Частота межподзонного перехода как функция плотности электронов. Плотность экситонов $n_0 = 2 \cdot 10^{10}$ см$^{-2}$

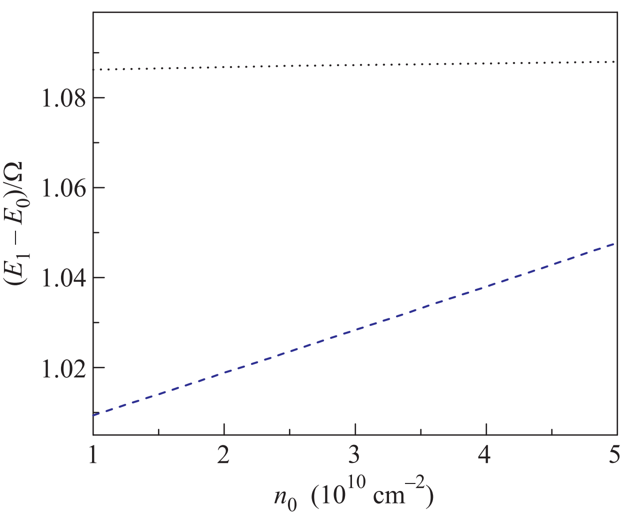

Рис. 4. (Цветной онлайн) Частота межподзонного перехода как функция плотности экситонов. Плотность электронов $N_l = 1.3 \cdot 10^6$ см$^{-1}$

нов при нулевой температуре (точки) и нормальному бозе-газу (пунктир). Найденные величины зависят как от плотности экситонного газа, так и (из-за самосогласованного характера задачи) от линейной плотности электронов в проволоке даже без учета межэлектронного взаимодействия. Видно, что во всех случаях взаимодействие с конденсатом вызывает заметно более сильные сдвиги (отрицательные!) уровней, чем для нормального вырожденного бозе-газа той же плотности, но изменение частоты перехода $E_1 - E_0$ в случае конденсата существенно слабее зависит от плотности последнего (см. рис. 4).

Таким образом, мы показали, что в гибридной системе квантовая проволока – двумерный газ непрямых экситонов измерения частоты межзонных переходов в проволоке могут служить “маркером” фазового перехода в состояние, аналогичное бозе-эйнштейновской конденсации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты # 16-02-00565 и 17-02-00837) и программы РАН (проект 0306-2018-0007).

Приложение. Численное решение уравнения (3) определяется граничными условиями: $\psi'(0) = 0$ и $\psi(\infty) = \sqrt{n}$. Первое условие следует из симметрии задачи, а условие на бесконечности означает, что концентрация носителей на бесконечности стремится к равновесной.

Метод численного решения нелинейных дифференциальных уравнений существенно зависит от вида уравнения. В нашем случае, мы воспользовались методом, при котором варьируется значение волновой функции экситонов при $y = 0$. Начальное значение $\psi(0)$ находится методом последовательных приближений. Критерием отбора численных решений выбиралось поведение $\psi(y)$ при больших значениях y. Из анализа численных решений нелинейного уравнения (3) следует, что при выборе $\psi(0)$ меньше точного значения волновой функции при $y = 0$ решение стремится к $-\infty$ при больших y, и наоборот, при выборе $\psi(0)$ больше точного значения в нуле $\psi(y)$ стремится при больших y к $+\infty$.

Особенностью численных решений является то свойство, что при сколь угодно точном приближении $\psi(0)$ к своему точному значению из-за ошибок округления и разностной схемы получающееся решение применимо лишь в ограниченном интервале от 0 до некоторого значения $y_{\max}$. С другой стороны, легко показать, что универсальное асимптотическое решение уравнения (3), удовлетворяющее граничным условиям на бесконечности, имеет вид:

$$\psi_{\mathrm{asimp}}(y) = \sqrt{n}\left(1 + \frac{\Gamma_l}{2y^2}\right), \tag{13}$$

где $\Gamma_l = 4\Delta L N_l / a_M^*$, $a_M^* \equiv \hbar^2 \epsilon / M e^2$.

Наглядное сравнение этих решений показывает, что области применимости численного решения и асимптотического решения пересекаются. Указанное обстоятельство позволяет задать решение уравнения (3), справедливое во всем интервале y от 0 до ∞:

$$\psi(y) = \begin{cases} \psi_{\mathrm{num}}(y), & \text{при } y < y_0, \\ \psi_{\mathrm{asimp}}(y), & \text{при } y > y_0. \end{cases} \tag{14}$$

Значение y_0 находится из минимума функционала: $F(y) = (\psi_{\mathrm{num}}(y) - \psi_{\mathrm{asimp}}(y))^2 + (\psi'_{\mathrm{num}}(y) - \psi'_{\mathrm{asimp}}(y))^2$. Соответственно, при этом значении y_0 численное решение переходит в асимптотическое с минимальным скачком значения функции и ее производной.

1. А. В. Каламейцев, А. В. Чаплик, Письма в ЖЭТФ **106**(8), 502 (2017).
2. Л. П. Питаевский, УФН **168**, 641 (1998).