

ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЭКСИТОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В СИСТЕМАХ КВАНТОВЫХ ЯМ

В.И.Белявский, Ю.В.Копеев, С.Т.Павлов, С.В.Шевцов

Государственный педагогический университет

394043 Воронеж, Россия

Физический институт им. П.Н.Лебедева

117924 Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 декабря 1994 г.

Указана возможность радикальной перестройки экситонных спектров несимметричных полупроводниковых гетероструктур типа *I* при вариации геометрических параметров квантовых ям и барьеров. Сильная, вплоть до изменения знака эффективной массы в некоторых дырочных подзонах, непараболичность закона дисперсии одночастичных возбуждений может приводить к тому, что в весьма широких диапазонах этих параметров некоторые экситоны могут иметь аномально большие значения энергии связи, и, наоборот, возможны случаи, когда связанные состояния не возникают вовсе.

Элементарные возбуждения в искусственно создаваемых полупроводниковых гетероструктурах (ГС) нередко обнаруживают ярко выраженные свойства систем с пониженной размерностью. Так, в ГС с квантовыми ямами (КЯ) экситонные резонансы в оптических спектрах уверенно регистрируются вплоть до комнатной температуры [1]. Тенденция к увеличению энергии связи экситона Ванье при понижении размерности системы хорошо известна; также известен факт существования в определенных ГС с КЯ некоторых подзон размерного квантования валентной зоны, имеющих аномальный характер закона дисперсии при малых квазиимпульсах: изменение знака эффективной массы дырки из-за квантовой интерференции состояний в подзонах тяжелых и легких дырок [2]. Учет непараболичности этих подзон при рассмотрении экситонных состояний становится особенно существенным.

Методом огибающих функций в приближении эффективной массы [3] нами исследованы экситоны в ГС типа *I* с несколькими узкими КЯ произвольной ширины, разделенными туннельно-прозрачными барьерами. Подобные несимметричные ГС путем вариации размеров КЯ и барьеров допускают различные варианты пространственной локализации носителей, принадлежащих разным подзонам, а также, в определенных случаях, позволяют весьма существенно влиять на закон дисперсии носителей в подзонах (особенно валентных). На рис.1 показаны рассчитанные для двух ГС $Al_xGa_{1-x}As-GaAs$ с тремя КЯ законы дисперсии дырок; концентрация x и параметры КЯ и барьеров подобраны таким образом, чтобы продемонстрировать качественные различия законов дисперсии в первой подзоне легких (ЛН1) и второй подзоне тяжелых (НН2) дырок. Для определения электронных и дырочных огибающих принята обычная модель ГС с кусочно-постоянным потенциалом и граничными условиями, сохраняющими плотность вероятности и плотность потока вероятности, вычисленных на огибающих функциях [3]. Вычисление закона дисперсии в дырочных подзонах в рамках формализма Латинджера позволяет, как обычно, определить эффективные массы поперечного (по отношению к оси ГС) движения в подзонах, тогда как члены четвертого порядка по поперечному квазиимпульсу, то есть непараболичность подзон, более целесообразно учитывать феноменологически.

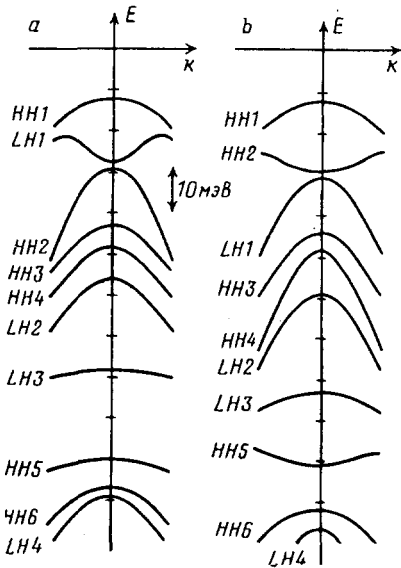


Рис.1

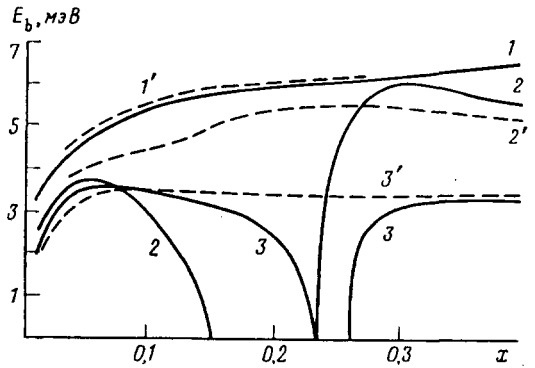


Рис.2

Рис.1. Закон дисперсии дырочных подзон для ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ с тремя КЯ ширины $13a$, $7a$, $5a$ и промежуточными барьерами ширины $5a$ и $7a$ (структура 13-5-7-7-5) при концентрациях $x = 0,22$ (а) и $x = 0,25$ (б)

Рис.2. Зависимость энергий связи HH1-C1 , LH1-C1 и HH2-C1 экситонов от концентрации x в ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ (13-5-7-7-5) – кривые 1, 2 и 3; то же для структуры (14-5-7-7-5) – кривые 1', 2' и 3'. Расчет выполнен при $b_\lambda = 10^{-6}$ см

При вычислении эффективных масс принимаются во внимание как проникновение огибающих в области барьеров (и, соответственно, различия в значениях эффективных масс в барьерах и КЯ), так и смешивание состояний тяжелых и легких дырок. Последний эффект весьма существен для несимметричных ГС, поскольку в этом случае нарушаются правила отбора по четности, присущие симметричным ГС (в частности, ГС с одной КЯ), а также изменяются условия квантовой интерференции электронных и дырочных состояний, что очевидным образом отражается на внутренней структуре экситонов, возникающих в таких ГС.

Огибающая функция n -подзоны размерного квантования объемной s -зоны может быть, таким образом, представлена в виде

$$\Psi_{s,n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = S^{-1/2} \exp(i\mathbf{k}\vec{\rho}) f_{s,n\mathbf{k}}(z), \quad (1)$$

где \mathbf{k} – поперечный квазиимпульс, S – нормировочная площадь ГС, перпендикулярная оси z , $\vec{\rho}$ – поперечный радиус-вектор, $f_{s,n\mathbf{k}}(z)$ – огибающая функция продольного (вдоль оси z) движения. Соответствующий закон дисперсии с точностью до членов порядка k^4 имеет вид

$$E_{s,n}(k) = E_{s,n}^{(0)} + \hbar^2 k^2 / 2m_{s,n} + (\hbar^2 / 2m_0) b_{s,n}^2 k^4. \quad (2)$$

В использованном изотропном (в плоскости ГС) приближении первое слагаемое дает положение края подзоны, во втором слагаемом эффективная масса

m_{sn} может быть (в отдельных случаях) как положительной, так и отрицательной, феноменологический параметр b_{sn} , учитывающий непараболичность подзоны, может быть оценен по положению k_0 минимума дырочной подзоны с отрицательной эффективной массой как $b_{sn} = (m_0/2|m_{sn}|)^{1/2}k_0^{-1}$ и составляет $10^{-7} \div 10^{-6}$ см, m_0 – масса свободного электрона.

При расчетах экситонных спектров асимметричных ГС с узкими КЯ обычные методики, основанные на вариационном принципе [4] или использующие представление Латинджера для гамильтониана экситона с последующим разложением экситонных огибающих по специально выбираемым базисным функциям [5,6], недостаточно эффективны. Более целесообразно использовать двумерное (2D) k -представление (в плоскости ГС), учитывая движение вдоль оси ГС с помощью набора квантовых чисел sn , который для каждой s -зоны принимает конечное число значений, соответствующих локализованным вдоль z состояниям электрона или дырки, и квазиконтинуум значений, отвечающих возбуждениям с более высокими энергиями, для которых n фактически переходит в z -компоненту квазиимпульса. В случае узких КЯ и барьеров, очевидно, достаточно учесть лишь небольшое число значений sn , отвечающих нижним подзонам размерного квантования. Таким образом, переходя к 2D экситонному представлению Ванье, эквивалентный гамильтониан экситона может быть представлен в виде матричного линейного дифференциального оператора, учитывающего кулоновское смешивание экситонов, относящихся к различным парам 2D дырочных и электронных подзон (комбинируемый индекс $\{sn; s'n'\}$ этих подзон далее обозначается единым символом λ):

$$\tilde{H}_{\lambda\lambda_1} = [\Delta_\lambda - [\hbar^2/2\mu_\lambda]\nabla^2 + \hat{V}_\lambda(\rho)]\delta_{\lambda\lambda_1} + U_{\lambda\lambda_1}(\rho). \quad (3)$$

Здесь $\Delta_\lambda = E_{sn}^{(0)} - E_{s'n'}^{(0)}$, ρ – радиус-вектор поперечного относительного движения электронно-дырочной пары, оператор $\hat{V}_\lambda(\rho)$ включает члены, пропорциональные k^4 в законе дисперсии электрона и дырки, а матричные элементы кулоновского взаимодействия электрона и дырки определяются как

$$U_{\lambda\lambda_1}(\rho) = -e^2 \int dzdz' f_{sn}^*(z) f_{s_1n_1}(z) G(\rho; z, z') f_{s'n'}(z') f_{s'_1n'_1}(z') \quad (4)$$

с электростатической функцией Грина G , учитывающей различия диэлектрических проницаемостей материалов КЯ (ϵ_2) и барьеров (ϵ_1). Учитывая, что в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ и других подобных ГС параметр

$$\nu = (\epsilon_2 - \epsilon_1)/(\epsilon_2 + \epsilon_1) \ll 1,$$

можно ограничиться в (4) учетом членов не выше первого порядка по ν . Индекс k у продольных огибающих в (4) положен равным нулю и опущен ввиду того, что при малых $k \leq a_{exc}^{-1}$ (a_{exc} – характерный пространственный масштаб экситонной огибающей в плоскости xy) эти огибающие весьма слабо зависят от k как в случае электронов, так и дырок, и, кроме того, для дырочных подзон смешивание состояний тяжелых и легких дырок учтено при вычислении соответствующих эффективных масс.

Приведенная эффективная масса экситона

$$\mu_\lambda = m_{sn} m_{s'n'} (m_{sn} + m_{s'n'})^{-1}$$

в случае, когда дырочная эффективная масса $m_{s'n'} < 0$, может быть как отрицательной (тогда связанное состояние электрона и дырки не возникает), так и положительной (если $m_{sn} + m_{s'n'}$ также меньше нуля). В последнем случае особенно существенным является учет непараболичности подзон, то есть слагаемого с $\hat{V}_\lambda(\rho)$ в (3).

Из (4) непосредственно видно, что диагональные матричные элементы кулоновского взаимодействия, как правило, существенно превышают недиагональные, поскольку в первом случае подынтегральная функция положительна, тогда как при $\lambda_1 \neq \lambda$ она, во-первых, знакопеременна, а во-вторых, в случае несимметричных ГС, электронные и дырочные огибающие локализованы, в основном, в различных КЯ. Это обстоятельство позволяет рассматривать недиагональные элементы как возмущения и использовать обычную классификацию экситонов при помощи уже введенного индекса λ , например, HH1-C1 , LH1-C1 и т.д. Здесь символы $\text{HH}n$ и $\text{LH}n$ обозначают n -подзону зон тяжелых и легких дырок, а $\text{C}n$ — n -подзону зоны проводимости. Таким образом, в первом приближении эффектами кулоновского смешивания экситонов можно пренебречь, в результате чего гамильтониан (3) приводит к независимым уравнениям для экситонных огибающих функций для каждого λ . Для решения этих уравнений можно воспользоваться методом [7], который заключается в определении эффективной диэлектрической проницаемости ГС для каждого экситонного состояния из условия обращения в нуль поправки к энергии экситона в первом порядке теории возмущений по отклонению $U_{\lambda\lambda}(\rho)$ от некоторого 2D кулоновского потенциала, содержащего подлежащий определению множитель χ . Именно, представим гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_{\lambda\lambda} \equiv \hat{\mathcal{H}}_\lambda$ в виде

$$\hat{\mathcal{H}}_\lambda = \hat{\mathcal{H}}_\lambda^{(0)} + \hat{W}_\lambda(\chi), \quad (5)$$

где

$$\hat{\mathcal{H}}_\lambda^{(0)} = \Delta_\lambda - (\hbar^2/2\mu_\lambda)\nabla^2 - (\chi e^2)/\rho, \quad (6)$$

а

$$\hat{W}_\lambda(\chi) = (\chi e^2)/\rho + U_\lambda(\rho) + \hat{V}_\lambda(\rho). \quad (7)$$

Огибающая функция $|\lambda\rangle$ основного состояния λ -экситона есть решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (6):

$$|\lambda\rangle = (2\pi)^{-1/2} (4\chi/a_\lambda) \exp(-2\chi\rho/a_\lambda), \quad (8)$$

где $a_\lambda = \hbar^2/\mu_\lambda e^2$. Энергия связи λ -экситона в нулевом приближении равна

$$E_\lambda^{(0)} = 4\chi^2 R y^{(\lambda)}, \quad (9)$$

где $R y^{(\lambda)} = \mu_\lambda e^4/2\hbar^2$. Условие, определяющее параметр χ ,

$$\langle \lambda | \hat{W}_\lambda(\chi) | \lambda \rangle = 0, \quad (10)$$

легко преобразовать к виду

$$4\chi^2 e^2/a_\lambda + (\hbar^2 b_\lambda^2/8m_0)(4\chi/a_\lambda)^4 [A - \ln \chi] + \langle \lambda | U_\lambda | \lambda \rangle = 0. \quad (11)$$

Здесь $A = \ln(\pi a_\lambda/2a) - 3/4$, a — параметр решетки. Второе слагаемое в (11) связано с явным видом оператора \hat{V}_λ ; появляющаяся при вычислении $\langle \lambda | \hat{V}_\lambda | \lambda \rangle$

расходимость устраняется, как обычно, обрезанием интеграла в пространстве квазиимпульсов на верхнем пределе $k_m = \pi/a$. Поскольку электростатическая функция Грина в (4) в каждом порядке по параметру ν имеет фактически одинаковую зависимость от поперечного радиуса-вектора, последнее слагаемое в (11) удобно выразить через универсальную функцию.

$$F(\zeta) = \zeta\{(\pi/2)[H_1(\zeta) - Y_1(\zeta)] - 1\}, \quad (12)$$

где $Y_1(\zeta)$ и $H_1(\zeta)$ – функции Бесселя и Струве, соответственно, а их аргумент, например в нулевом порядке по ν , равен $\zeta = (4\chi/a_\lambda)(z - z')$. Дальнейшее интегрирование по z и z' в (4) производится численными методами. Использование функции (12), допускающей элементарное табулирование с любой необходимой точностью, позволяет достаточно эффективно решать уравнение (11) численно для любых ГС с конечным числом КЯ. Результаты численного решения уравнения (11), выполненного для ГС с тремя КЯ, представлены на рис.2. Видно, что весьма малое структурное различие этих ГС (наличие одного дополнительного монослоя в одной из КЯ) может (в определенных интервалах концентрации x) приводить к радикальной перестройке экситонных спектров, что, как показывает сравнение с рис.1, главным образом связано с характером дырочных возбуждений, в частности, с возникновением подзон с отрицательными эффективными массами. Изменением концентрации (и, следовательно, глубины КЯ для электронов и дырок) можно добиться того, что при определенных размерах КЯ и барьеров расстояние между отдельными дырочными подзонами (например, LH1 и HH2) оказывается весьма малым. В этом случае интерференция состояний тяжелых и легких дырок [2], исчезающая при $k \rightarrow 0$ и не изменяющая величин $E_{s'n}^{(0)}$ в (2), приводит к эффективному отталкиванию уровней размерного квантования при $k \neq 0$. Если при этом в одной из подзон (с меньшей энергией возбуждения) происходит изменение знака эффективной массы (LH1 на рис.1a или HH2 на рис.1b), то в соответствии с (2) возникает петля экстремумов [8,9], отвечающая энергии, меньшей $E_{s'n}^{(0)}$. В окрестности этой энергии плотность состояний имеет вид, типичный для 1D-систем. Дальнейшим изменением концентрации для ГС с более чем одной КЯ можно добиться (при некотором $x = x_0$) изменения порядка следования некоторых дырочных подзон (например, HH2 и LH1, рис.1b) при соответствующем изменении 2D характера плотности состояний на 1D в окрестности энергии, отвечающей вновь возникшей петле экстремумов. Очевидно, существуют значения x_1 и x_2 концентрации, такие, что $x_1 < x_0 < x_2$ и при всех x из интервала $x_1 < x < x_0$ приведенная масса LH1-C1 экситона отрицательна, тогда как при всех x из интервала $x_0 < x < x_2$ отрицательна приведенная масса HH2-C1 экситона. Области концентраций на рис.2, при которых отсутствуют экситоны LH1-C1 или HH2-C1, и отвечают, очевидно, случаю отрицательной приведенной массы экситона. Резкое возрастание [10] энергий связи этих экситонов (особенно при малых b_λ) соответствует большим значениям приведенной массы, когда $m_h < 0$, но $|m_h| \geq m_e$. Относительная малая величина энергии связи HH2-C1 экситона по сравнению с LH1-C1 экситоном обусловлена тем, что в первом случае дырка и электрон локализованы, в основном, в разных КЯ, тогда как дырка в подзоне LH1 и электрон в подзоне C1 локализованы в одной и той же (более широкой) КЯ.

Значение χ^{-1} , полученное как решение уравнения (11), можно истолковать как эффективную диэлектрическую проницаемость ГС, характеризующую взаимодействие электрона и дырки, связанных в λ -экситон. При увеличении приведенной массы экситона параметр χ уменьшается, так что энергия связи (9) является немонотонной функцией приведенной массы, достигая максимума при некотором ее значении. Поэтому учет \hat{V}_λ в гамильтониане экситона естественным образом ограничивает величину энергии связи при существенном увеличении приведенной массы, позволяя, таким образом, использовать для описания экситонов схему Ваннье.

При расчете энергий экситонов принимались во внимание все подзоны размерного квантования, имеющие место при данной концентрации x , но не учитывались состояния сплошного спектра. В связи с этим нужно отметить, что при $x \rightarrow 0$, то есть при уменьшении глубины КЯ, точность расчетов, основанных на теории возмущений, снижается. Для экситонов, образованных глубокими подзонами электронов и дырок, вклад состояний сплошного спектра становится малосущественным, начиная с концентрации $x \geq 0,05$.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

-
1. R.Dingle, W.Wiegmann, and C.H.Henry, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 827 (1974).
 2. Y.-C.Chang and G.D.Sanders, In: *Excitons in Confined Systems* (Springer Proc. in Physics. **25**), 1988, p.159
 3. M.Altarelli, In: *Excitons in Confined Systems* (Springer Proc. ings in Physics. **25**), 1988, p.170.
 4. Y.Fu and K.A.Chao, *Phys. Rev.* **B43**, 12626 (1991).
 5. G.E.W.Bauer and T.Ando, *Phys. Rev.* **B36**, 6015 (1988).
 6. L.C.Andreani and A.Pasquarello, *Phys. Rev.* **B42**, 8928 (1990).
 7. Y.C.Lee, W.N.Mei, and K.C.Lin, *J. Phys.* **C15**, L469 (1982).
 8. Э.И.Рашба, В.И.Шека, ФГТ 1 (приложение, сб.И), 162 (1959).
 9. Ю.В.Копаев, *Письма в ЖЭТФ* **47**, 628 (1988).
 10. V.I.Belyavsky, V.V.Капаев, Yu.V.Копаев et al., *Phys. Low-Dim. Struct.* **4/5**, 19 (1994).