

ЭКСИТОНЫ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ С ДВУМЕРНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ГАЗОМ

Пикус Ф. Г.

Исследуется влияние двумерного электронного газа на экситоны в полупроводниковой квантовой яме. Рассмотрены эффекты экранирования электронным газом кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в экситоне и влияния частичного заполнения импульсного пространства двумерными электронами. Показано, что оба эффекта дают сравнимые вклады в изменение энергии связи и силы осциллятора экситона. Предложена новая вариационная функция, позволяющая учесть частичное заполнение импульсного пространства значительно точнее, чем это делалось в предыдущих работах. Предложен метод расчета энергии связи экситона в квантовой яме с двумерным электронным газом при конечной температуре, позволяющий приближенно учесть частичное заполнение импульсного пространства. Показано, что энергия связи экситона в квантовой яме с двумерным электронным газом возрастает при увеличении температуры, так как ослабляется экранирование и уменьшается заполнение импульсного пространства двумерными электронами.

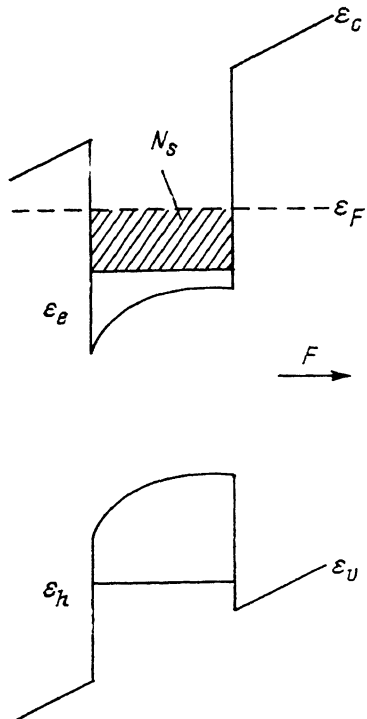
Введение. В последнее время предпринимаются многочисленные попытки создать приборы с использованием двумерных экситонов, локализованных в полупроводниковой квантовой яме (КЯ) [1-12]. В основном это оптические приборы — модуляторы, переключатели, ориентированные на использование вместе с полупроводниковыми лазерами, волноводами и другими приборами интегральной оптики. Поэтому исследование двумерных экситонов в различных условиях представляет не только теоретический, но и практический интерес.

В этой статье мы будем изучать влияние двумерного электронного газа (ДЭГ), заполняющего КЯ, на свойства экситона. Мы определим энергию связи основного состояния экситона при различных концентрациях ДЭГ и температурах. Поскольку основные надежды на практическое использование экситонных эффектов связаны с электрооптическими приборами, рассчитаем коэффициент поглощения (силу осциллятора) и рассмотрим влияние на экситон электрического поля, приложенного перпендикулярно плоскости КЯ.

Свойства экситонов в квантовых ямах исследовались во многих работах как экспериментально [9-14, 33, 35-42], так и теоретически [15-34]. При этом изучались различные эффекты, связанные со сложной валентной зоной [28-30, 33], обменным взаимодействием [31, 32], непараболическостью зон [33], различием эффективных масс в материалах ямы и барьерах [34], и многие другие. Поскольку целью работы является максимально подробное исследование влияния именно ДЭГ на свойства экситона, «исходный» экситон (экситон без ДЭГ) желательнее рассматривать простейшим способом, так как любое усложнение исходной модели приведет к значительно большему усложнению учета влияния ДЭГ. Поэтому рассмотрим простейшую модель: не будем учитывать перечисленные выше эффекты, стенки КЯ будем считать бесконечно высокими, при расчете электрон-электронного взаимодействия учтем только кулоновское взаимодействие, обменной и корреляционной энергиями будем пренебрегать.

Рис. 1. Зонная диаграмма полупроводниковой квантовой ямы с ДЭГ в электрическом поле F .

Сплошные линии — валентная зона ϵ_v и зона проводимости ϵ_c , штриховая — уровень Ферми ϵ_F . Первый уровень размерного квантования электронов — ϵ_e , дырок — ϵ_h . Область, в которой расположен ДЭГ концентрации N_s , заштрихована.



1. Электрон и дырка в квантовой яме с двумерным электронным газом

Рассчитаем энергию основного состояния электрона и дырки в модуляционно-легированной квантовой яме в поперечном электрическом поле F , заполненной двумерным электронным газом. Зонная диаграмма КЯ схематически изображена на рис. 1.

Толщина КЯ равна d , уровни энергии электрона и дырки обозначены через ϵ_e и ϵ_h соответственно, ϵ_F — энергия Ферми двумерных электронов, N_s — их концентрация. Искривление дна КЯ вызвано потенциалом электронов, образующих ДЭГ. Доноры, поставляющие электроны в КЯ, расположены в слоях AlGaAs. Считаем, что в самой яме концентрация доноров намного меньше концентрации электронов благодаря селективному легированию.

Будем рассматривать только прямоугольную КЯ с бесконечно высокими стенками. Как показывают оценки, приведенные в [43], приближение бесконечной КЯ хорошо работает для ям GaAs/AlGaAs, если толщина ямы d больше 50–70 Å. Для определения уровней размерного квантования электронов и дырок используем вариационный метод. Вариационные функции мы выбрали в виде [43, 44]

$$\psi_e(z_e) = A_e \sin\left(\frac{\pi z_e}{d}\right) e^{-\alpha_e z_e/d}, \quad f_e(z_e) = |\psi_e(z_e)|^2, \quad (1.1)$$

$$\psi_h(z_h) = A_h \sin\left[\frac{\pi}{d}(d - z_h)\right] \exp\left(-\alpha_h \frac{d - z_h}{d}\right), \quad f_h(z_h) = |\psi_h(z_h)|^2, \quad (1.2)$$

где z_e и z_h — координаты электрона и дырки в направлении, перпендикулярном плоскости КЯ, α_e и α_h — вариационные параметры, A_e и A_h — нормировочные коэффициенты:

$$A_e = \left[\frac{\pi^2 d}{4\alpha_e (\pi^2 + \alpha_e^2)} (1 - e^{-2\alpha_e}) \right]^{-1/2}, \quad (1.3)$$

$$A_h = \left[\frac{\pi^2 d}{4\alpha_h (\pi^2 + \alpha_h^2)} (1 - e^{-2\alpha_h}) \right]^{-1/2}.$$

При определении основного состояния электронов в КЯ необходимо учесть потенциал, создаваемый самими электронами. Для этого применим метод самосогласованного поля. Если все электроны находятся на первом уровне, то потенциал, действующий на один электрон со стороны остальных, может быть определен из уравнения Пуассона

$$\frac{\partial^2 V_{ee}}{\partial z^2} = -\frac{4\pi}{x} e N_s f_e(z), \quad (1.4)$$

где κ — диэлектрическая проницаемость, а N_s — концентрация ДЭГ. В отсутствие внешнего электрического поля поле F , создаваемое ДЭГ по обе стороны от КЯ, равно $\frac{2\pi e}{\kappa} N_s$, поэтому уравнение (1.4) необходимо дополнить граничными условиями

$$\left. \frac{\partial V_{ee}}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{2\pi e}{\kappa} N_s, \quad \left. \frac{\partial V_{ee}}{\partial z} \right|_{z=d} = -\frac{2\pi e}{\kappa} N_s. \quad (1.5)$$

Решение уравнения (1.4), удовлетворяющее граничным условиям (1.5), может быть записано в виде

$$V_{ee} = \frac{4\pi e^2}{\kappa} N_s \int_0^z dz' (z' - z) f_s(z') + \frac{2\pi e^2}{\kappa} N_s z + C_2. \quad (1.6)$$

Для определения постоянной C_2 необходимо выбрать начало отсчета энергии. Удобно выбрать его так, чтобы энергия дна зоны проводимости в центре КЯ всегда равнялась нулю. Энергия потолка валентной зоны в центре ямы равна $-\varepsilon_g$, где ε_g — ширина запрещенной зоны материала ямы. Тогда

$$C_2 = \frac{d}{2} - \int_0^{d/2} dz \left(z - \frac{d}{2} \right) f_s(z). \quad (1.7)$$

Для определения первого уровня квантования электрона в яме вариационным методом необходимо минимизировать полную энергию системы взаимодействующих электронов относительно вариационного параметра α_s . Гамильтониан электрона в КЯ, заполненной ДЭГ, в электрическом поле имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}_s = -\frac{\hbar^2}{2m_s} \frac{\partial^2}{\partial z_s^2} + eV_0(z_s) + eV_{ee}(z_s) + e^2 F z_s, \quad (1.8)$$

где m_s — эффективная масса электрона, V_0 — потенциал КЯ, равный нулю внутри ямы и бесконечности — вне ее, V_{ee} — потенциал, созданный остальными электронами, F — электрическое поле. Энергия электрона с гамильтонианом (1.8) и волновой функцией (1.1) равна

$$E_s = \langle \psi_s | \hat{\mathcal{H}}_s | \psi_s \rangle = \int_0^d dz_s \psi_s^*(z_s) \hat{\mathcal{H}}_s \psi_s(z_s) = \frac{\hbar^2}{2md^2} (\pi^2 + \alpha_s^2) + \frac{2\pi e^2}{\kappa} N_s (2 \langle U_s \rangle + \langle z_s \rangle) + e^2 F \langle z_s \rangle + C_2, \quad (1.9)$$

где

$$\langle z_s \rangle = \int_0^d dz_s z_s f(z_s), \quad \langle U_s \rangle = \int_0^d dz_s V_{ee}(z_s) f(z_s). \quad (1.10)$$

Первый член в выражении (1.9) — это кинетическая энергия, второй член — энергия электрон-электронного взаимодействия, а третий — энергия электрона во внешнем поле. Полная энергия системы N_s электронов E_s не равна $N_s E_s$, поскольку второй член в (1.9), описывающий электрон-электронное взаимодействие, входит в полную энергию с коэффициентом 1/2, чтобы избежать двукратного учета кулоновской энергии взаимодействия каждой пары электронов. Таким образом, полная энергия равна

$$E_s = N_s \left[E_s - \frac{\pi e^2}{\kappa} N_s (2 \langle U_s \rangle + \langle z_s \rangle) \right]. \quad (1.11)$$

Аналогично рассчитывается энергия дырок. Единственное отличие состоит в том, что дырочного газа в КЯ нет, поэтому никакой процедуры самосогласова-

ния для дырок не требуется, а потенциал, созданный электронами, необходимо учесть как внешний потенциал. Таким образом, для энергии дырок получаем

$$E_h = \frac{\hbar^2}{2m_h d^2} (\pi^2 + \alpha_h^2) + \frac{2\pi e^2}{x} N_s (2\langle U_h \rangle + \langle z_h \rangle) + e^2 F \langle z_h \rangle + C_2, \quad (1.12)$$

где

$$\langle z_h \rangle = \int_0^d dz z_h f_h(z), \quad \langle U_h \rangle = \int_0^d dz z_h V_{eh}(z_h) f_h(z_h). \quad (1.13)$$

Энергии первого уровня электрона ϵ_e и дырки ϵ_h могут быть вычислены путем минимизации выражений (1.11) и (1.12) относительно α_e и α_h . Определение энергий уровней и вариационных параметров производилось численно — путем расчета на ЭВМ.

2. Экситон в квантовой яме с двумерным электронным газом

Рассчитаем теперь энергию связи экситона в основном состоянии, образованном электроном и дыркой, находящимся на первом уровне размерного квантования. Будем рассматривать только экситон, центр масс которого неподвижен, так как именно такой экситон участвует в излучении и поглощении света в прямозонных материалах. Гамильтониан экситона имеет вид

$$\mathcal{H}_{ex} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + e\varphi_{eh}(z_e, z_h, \rho), \quad (2.1)$$

где $\rho = r_e - r_h$ — расстояние между электроном и дыркой в плоскости КЯ, r_e и r_h — двумерные радиусы-векторы электрона и дырки, $\varphi_{eh}(z_e, z_h, \rho)$ — потенциал взаимодействия электрона и дырки, находящиеся на расстоянии ρ друг от друга и имеющих координаты в направлении, перпендикулярном КЯ, z_e и z_h соответственно, $\mu = (m_{e\parallel}^{-1} + m_{h\parallel}^{-1})^{-1}$ — приведенная масса экситона, $m_{e\parallel}$ и $m_{h\parallel}$ — эффективные массы электрона и дырки в направлении, параллельном плоскости КЯ. Волновую функцию экситона будем искать в виде

$$\Psi_{ex} = \psi_e(z_e) \psi_h(z_h) \psi(\rho), \quad (2.2)$$

где ψ_e и ψ_h — волновые функции электрона и дырки (1.1), (1.2).

Вычисления, однако, удобнее производить не для величин, зависящих от ρ , а для их пространственных фурье-компонент. В то же время для величин, зависящих от координаты z , перпендикулярной плоскости КЯ, будем пользоваться обычным координатным представлением. В таком смешанном (z, q) представлении гамильтониан экситона имеет вид

$$\mathcal{H}_{ex} = \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu} - e\varphi_{eh}(z_e, z_h, q), \quad (2.3)$$

$\varphi_{eh}(z_e, z_h, q)$ — фурье-компонента потенциала взаимодействия электрона и дырки. Влияние ДЭГ на экситон в КЯ проявляется в двух эффектах. Двумерные электроны экранируют кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой, что приводит к уменьшению энергии связи. Второй эффект, обусловленный влиянием ДЭГ на экситон в КЯ, связан с заполнением части импульсного пространства электронами, входящими в ДЭГ. Из-за этого часть состояний для электрона в экситоне оказывается запрещенной, т. е. они уже заняты другими электронами. Впервые такое влияние вырожденного электронного газа на свойства экситона было рассмотрено в работе Махана

[45], в которой показано, что при наличии электронного газа уравнение Шредингера для экситона в k -представлении имеет вид

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \psi_{\mathbf{k}} + \int d\mathbf{k}' U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}') = \varepsilon \psi_{\mathbf{k}}, \quad (2.4)$$

где

$$f(\mathbf{k}') = \left\{ \exp \left[\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_F}{T} \right] + 1 \right\}^{-1}$$

— функция Ферми, $\varepsilon(\mathbf{k})$ — энергия электрона с волновым вектором \mathbf{k} , ε_F — энергия Ферми. Так, при нулевой температуре, когда электронный газ заполняет часть импульсного пространства с волновыми векторами $k < k_F$, волновая функция электрона в экситоне не содержит пространственных гармоник с такими k :¹

$$\psi_{\mathbf{q}} = \Theta(k_F - q) \psi_{\mathbf{q}}. \quad (2.5)$$

Влияние заполнения k -пространства на спектр двумерного экситона было исследовано в работах [18–23]. В [20–23] учитывалось только экранирование. Как будет показано в настоящей работе, оба эффекта — экранирование кулоновского взаимодействия электрона и дырки и заполнение части k -пространства двумерными электронами примерно одинаковы по величине и должны учитываться одновременно.

Для того чтобы учесть частичное заполнение k -пространства при вариационном расчете, следует выбрать вариационную функцию, удовлетворяющую условию (2.5) и в отсутствие ДЭГ переходящую в обычную вариационную функцию для экситона типа $\psi(\rho) \sim e^{-\alpha\rho}$. Однако подобрать функцию, удовлетворяющую этим требованиям, которую можно было бы задать в явном виде, не удастся. В работе [18] использовалась обычная вариационная функция

$$\psi(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha e^{-\alpha\rho}, \quad \psi_q = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\alpha^2}{(\alpha^2 + q^2)^{3/2}}, \quad (2.6)$$

но параметр α ограничивался условием $\alpha > \sqrt{2}k_F$. Множитель $\sqrt{2}$ выбран здесь главным образом эмпирически. Аналогичный метод использовался в работе [19]. Для проверки такого способа приближенного учета ортогональности (2.5) мы провели расчеты с аналогичной вариационной функцией

$$\psi(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \bar{\alpha} e^{-\bar{\alpha}\rho}, \quad \psi_q = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\bar{\alpha}^2}{(\bar{\alpha}^2 + q^2)^{3/2}}, \quad (2.7)$$

где

$$\bar{\alpha} = \sqrt{\alpha^2 + k_F^2}. \quad (2.8)$$

Энергия экситона с гамильтонианом (2.1) и волновой функцией (2.7) равна

$$E_{\text{ex}} = \langle \Psi_{\text{ex}} | \hat{\mathcal{H}}_{\text{ex}} | \Psi_{\text{ex}} \rangle = \int_0^d dz_a \int_0^d dz_b \int d^2\rho \Psi_{\text{ex}}^* \hat{\mathcal{H}}_{\text{ex}} \Psi_{\text{ex}}. \quad (2.9)$$

¹ В двумерном случае имеется принципиально другая возможность обеспечить ортогональность волновых функций электрона в экситоне и в ДЭГ — построить экситон, в котором электрон находится на следующем уровне размерного квантования. Основным состоянием он может стать, только если уровень экситона с электроном на первом уровне поднимается на величину порядка расстояния между уровнями. Это может произойти, если энергия Ферми ДЭГ будет порядка этого расстояния.

Выражение для потенциала φ_{eh} в (z, q) -представлении с учетом экранирования ДЭГ кулоновского взаимодействия электрона и дырки получено в работе [18]:

$$e\varphi_{eh}(z_e, z_h, q) = \frac{e^2}{\alpha q} \left\{ e^{-q|z_e - z_h|} - \frac{\int_0^d dz e^{-q|z_e - z_h|} |f_e^{(0)}(z)| \int_0^d dz' e^{-q|z' - z_e|} |f_h^{(0)}(z')|}{\frac{q}{q_s} + \int_0^d dz f_e^{(0)}(z') \int_0^d dz' f_h^{(0)}(z') e^{-q|z - z'|}} \right\}. \quad (2.10)$$

Здесь α — диэлектрическая проницаемость, $q_s = 2me^2/\alpha\hbar^2$ — обратный радиус экранирования ДЭГ,

$$f_e^{(0)}(z) = |\psi_e^{(0)}(z)|^2,$$

где $\psi_e^{(0)}$ — волновая функция электрона в ДЭГ (1.1). Будем считать, что волновая функция электрона в ДЭГ и в экситоне имеет одинаковый вид (1.1), но параметры α_e для них могут различаться. Поэтому все величины, относящиеся к электронам в ДЭГ, в дальнейшем будут отмечаться индексом (0).

Энергия экситона (2.9) с потенциалом (2.10) и волновой функцией (2.7) равна

$$E_{ex} = T_{ex} + U_{ex}, \quad (2.11)$$

где T_{ex} — кинетическая энергия:

$$T_{ex} = \left\langle \Psi_{ex} \left| -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \right| \Psi_{ex} \right\rangle = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu}, \quad (2.12)$$

U_{ex} — потенциальная энергия:

$$U_{ex} = \langle \Psi_{ex} | e\varphi_{eh} | \Psi_{ex} \rangle = \int_0^d dz_e f_e \int_0^d dz_h f_h \int d^2\rho |\Psi_{ex}|^2 e\varphi_{eh}(z_e, z_h). \quad (2.13)$$

В интеграле по ρ надо перейти к фурье-компонентам и переменной интегрирования q . При этом удобно использовать преобразование Фурье не для волновой функции $\psi(\rho)$, а для квадрата модуля $f(\rho) = |\psi(\rho)|^2$. После преобразований выражение для потенциальной энергии принимает вид

$$U_{ex} = \int d^2q f_q U_q, \quad U_q = \int_0^d dz_e f_e \int_0^d dz_h f_h e\varphi_{eh}(z_e, z_h, q). \quad (2.14)$$

Кроме энергии связи, рассчитаем также силу осциллятора для экситонного поглощения и излучательной рекомбинации экситона. При наличии двумерных электронов, когда часть k -пространства недоступна для электрона в экситоне, сила осциллятора равна [46]

$$I_{ex} = \left| \int_0^d dz \psi_e(z) \psi_h(z) \right| \left| \int_0^d d^2q \psi_q \right|. \quad (2.15)$$

В работах [18, 19] была рассчитана энергия связи двумерных экситонов с вариационными функциями, аналогичными (2.7). Мы рассчитали также зависимость силы осциллятора экситонного поглощения I_{ex} от концентрации ДЭГ. Результаты расчета энергии связи и силы осциллятора экситона представлены на рис. 2. При расчетах использованы следующие параметры: толщина ямы 100 Å, диэлектрическая проницаемость $\alpha = 12.55$ (мы не учитывали небольшую разницу в диэлектрических проницаемостях GaAs и AlGaAs),

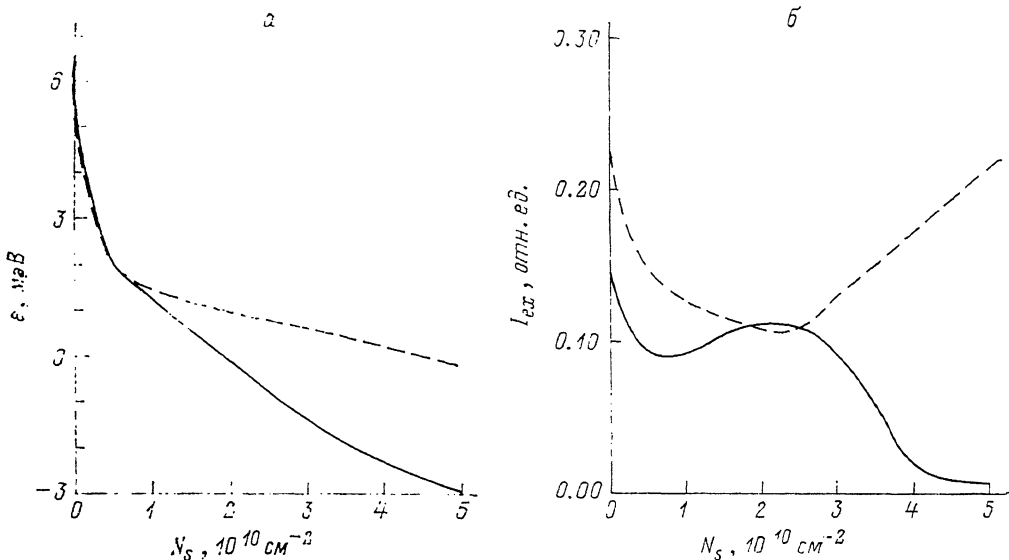


Рис. 2. Зависимости энергии связи экситона от концентрации ДЭГ (а) и силы осциллятора экситона от концентрации ДЭГ (б).

Сплошные линии — расчет с вариационной функцией (3. 19), штриховые — с функцией (3. 7). Электрическое поле отсутствует.

эффективная масса электронов $m_e = 0.067 m_0$, где m_0 — масса покоя свободного электрона, параметры Латтинжера валентной зоны $\gamma_1 = 7.65$, $\gamma_2 = 2.41$. Для экситона электрон — тяжелая дырка в КЯ, выращенной в плоскости (100), эффективная масса дырки в направлении z , перпендикулярном плоскости КЯ, получается равной $m_h = m_0 / (\gamma_1 + \gamma_2) = 0.099 m_0$, а приведенная масса экситона $\mu = 0.04 m_0$.

Бросается в глаза рост силы осциллятора с увеличением концентрации ДЭГ при больших концентрациях. Эта особенность прямо вытекает из свойств волновой функции (2. 7). Действительно, при больших концентрациях и, следовательно, больших k_F волновая функция (2. 7) оказывается локализованной в области $\rho < k_F^{-1}$. С ростом k_F происходит сжатие волновой функции и возрастание силы осциллятора. Таким образом, рост силы осциллятора связан с выбранным способом приближенного учета условия ортогональности (2. 5). Возникает вопрос, существует ли это явление в действительности или же обусловлено только выбором вариационной функции, который в последнем случае следует признать неудачным.

Чтобы ответить на этот вопрос, решим более простую, аналитически решаемую задачу — найдем основное состояние электрона в одномерном притягивающем потенциале

$$U(x) = -U_0 \delta(x) \quad (2.16)$$

с учетом частичного заполнения k -пространства. Для энергии связи ϵ получим уравнение

$$\frac{4U_0}{\sqrt{2\epsilon}} \left[\frac{\pi}{2} - \arctg \left(\frac{k_F}{\sqrt{2\epsilon}} \right) \right] = 1, \quad (2.17)$$

а сила осциллятора равна

$$I = \left| \int dk \phi_k \right|^2 = \left\{ 2U_0 \int_{k_F}^{\infty} \frac{dk}{\left(\frac{k^2}{2} + \epsilon \right)^2} \right\}^{-1}. \quad (2.18)$$

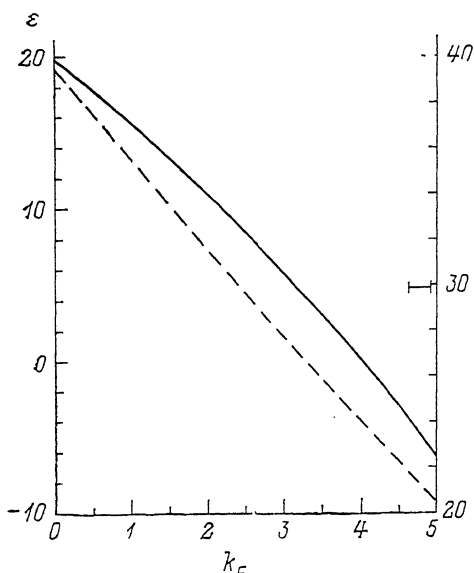


Рис. 3. Результат решения модельной задачи — электрон в одномерном δ -потенциале при наличии электрического газа.

Зависимость от k_F : сплошная линия — энергии связи ϵ , штриховая — силы осциллятора.

На рис. 3 изображены зависимости ϵ и I от k_F . Видно, что как энергия связи ϵ , так и сила осциллятора I убывают с ростом k_F . Таким образом, результат вариационного расчета, предсказывающий рост силы осциллятора с ростом k_F , представляется сомнительным. Для дополнительной проверки были решены аналогичные двумерные задачи с несколькими различными короткодействующими потенциалами: $U = -U_0\delta(\rho)$, $U = -U_0\Theta(R-\rho)$, $U = -U_0e^{-\rho/R}$. Эти задачи могут быть решены только численно. Во всех случаях результат оказался аналогичен результату решения одномерной задачи, т. е. сила осциллятора падает с ростом k_F .

Таким образом, выбор вариационной функции в виде (2. 7) приводит к качественно неверному результату и должен быть признан неудачным.

Для того чтобы выбрать лучшую вариационную функцию, рассмотрим, какие именно особенности волновой функции (2. 7) приводят к неверному результату. Ясно, что это свойство — локализация волновой функции в области $\rho \leq k_F^{-1}$ при больших k_F . С другой стороны, найденные в результате точного решения модельных задач волновые функции осциллируют на масштабах k_F^{-1} , но медленно убывают по амплитуде. Результаты решения этих задач наводят на мысль:

следует выбрать вариационную функцию в виде

$$\psi(\rho) = Ae^{-\alpha\rho} \cos(k_F\rho), \quad A = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{k_F^2 + \alpha^2}{[k_F^2 + \alpha^2k_F^2 + 2\alpha^4]^{1/2}}, \quad (2. 19)$$

α — вариационный параметр.

Мы все время ограничивались однопараметрическими вариационными функциями, поскольку численный расчет с несколькими вариационными параметрами занял бы слишком много времени. Энергия экситона, вычисляемая по формулам (2. 11)—(2. 14), минимизировалась по трем вариационным параметрам — α_s , α_h и α . Заметим, что значения вариационных параметров электронной и дырочной волновых функций α_s и α_h могли довольно сильно отличаться от соответствующих значений для электрона и дырки, не связанных в экситон.

На рис. 2 представлены зависимости энергии связи экситона ϵ_{ex} и силы осциллятора I_{ex} от концентрации ДЭГ N_s . Видно, что сила осциллятора убывает с ростом концентрации, следовательно, вариационная функция (2. 24) свободна от недостатка, присущего ранее использовавшимся функциям [18, 19]. Небольшая немонотонность зависимости I_{ex} от N_s не выходит за пределы погрешности вариационного расчета.

Функция (2. 19) точнее учитывает условие (2. 5). Это следует из сравнения фурье-компонент функций (2. 7) и (2. 19). Спектры функций (2. 7) и (2. 19) приведены на рис. 4 для нескольких значений параметра α . Функция, точно удовлетворяющая условию ортогональности (2. 5), не должна иметь пространственных гармоник с $q < k_F$. Видно, что функция (2. 7) имеет монотонно убывающий спектр и большая его часть расположена в области $q < k_F$. В то же

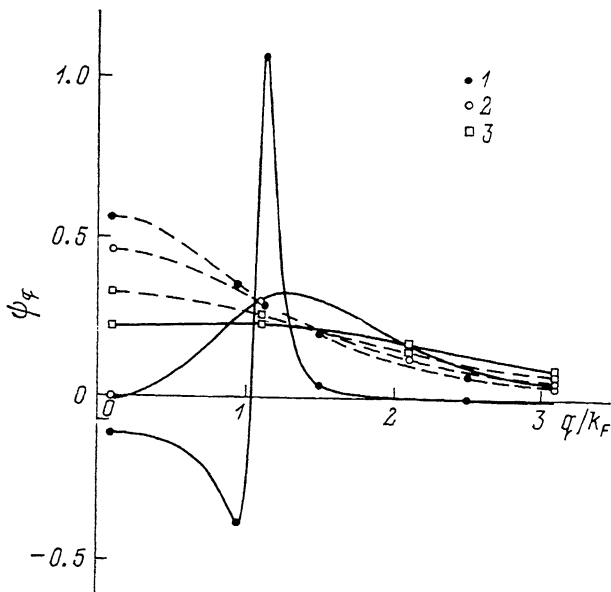


Рис. 4. Сравнение спектров волновых функций (3.7) и (3.19) при разных значениях параметра α .

α/k_F : 1 — 0.1, 2 — 1.0, 3 — 2.0. Сплошные линии — функция (3.19), штриховые — (3.7).

время вариационная функция (2.19) имеет острый максимум при $q > k_F$, где и расположена основная часть спектра.

Все расчеты, результаты которых приведены выше, были выполнены для случая нулевого электрического поля. Представляет интерес также вопрос о том, как влияет ДЭГ на зависимость энергии связи экситона и силы осцилля-

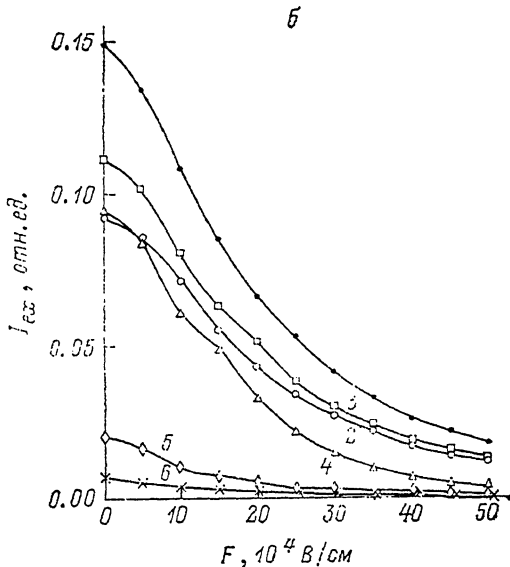
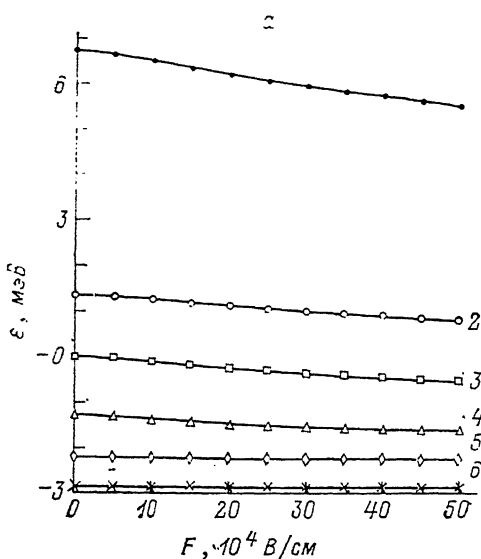
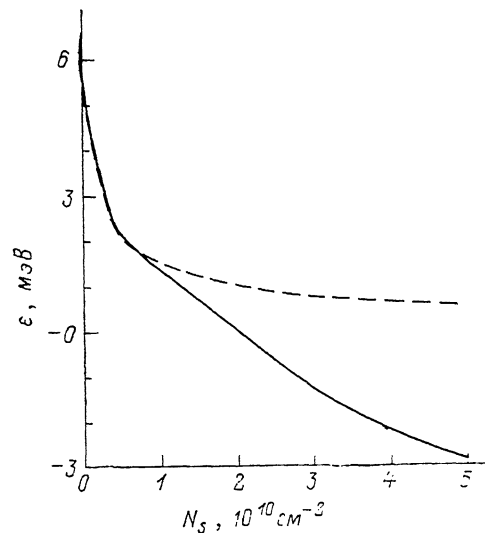


Рис. 5. Зависимости энергии связи экситона в квантовой яме с ДЭГ от электрического поля (а) и силы осциллятора экситона в квантовой яме с ДЭГ от электрического поля (б).

$N_0 \times 10^{19}$ см $^{-2}$: 1 — 0, 2 — 1, 3 — 2, 4 — 3, 5 — 4, 6 — 5.

Рис. 6. Зависимость энергии связи экситона от концентрации ДЭГ N_s .

Штриховая линия — результат расчета с учетом только экранирования ДЭГ взаимодействия электрона и дырки, сплошная — с учетом также и заполнения k -пространства электронами ДЭГ.



словенное растягиванием электрона и дырки, образующих экситон, к противоположным стенкам КЯ.

На рис. 5 изображены зависимости энергии связи ϵ_{ex} и силы осциллятора I_{ex} от электрического поля F для нескольких концентраций двумерных электронов A_s . Видно, что зависимость ϵ_{ex} и I_{ex} от поля ослабевает с увеличением концентрации N_s в соответствии со сказанным выше.

В заключение этого раздела сравним влияние на экситон двух эффектов, о которых говорилось в начале, — экранирования ДЭГ кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в экситоне и частичного заполнения импульсного пространства двумерными электронами. На рис. 6 приведена зависимость энергии связи экситона от концентрации ДЭГ N_s . При расчете первой кривой (сплошная линия) мы учли оба эффекта, а при расчете второй (штриховая) — только экранирование. Видно, что оба эффекта дают сравнимые вклады в изменение энергии связи экситона при концентрациях ДЭГ $> 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Особенно важен учет заполнения k -пространства в области концентраций, в которой энергия связи мала, поскольку экранирование потенциала электронно-дырочного взаимодействия не может привести к отрицательной энергии связи: в двумерной потенциальной яме всегда есть связанное состояние. В то же время при учете заполнения k -пространства энергия связи может быть и отрицательной.

3. Обобщение на случай ненулевой температуры

Уравнение Шредингера (2.4) для экситона в КЯ с ДЭГ справедливо и при температуре, отличной от нуля. При нулевой температуре можно было сформулировать ограничение, действующее только на волновую функцию, — условие ортогональности (2.5). Если волновая функция удовлетворяет этому условию, то уравнение Шредингера для нее может быть записано в обычном виде

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2\mu} \psi_q + \int a^2 q' U_{q-q'} \psi_{q'} = \epsilon \psi_q,$$

поскольку $\psi_q = 0$ при $q < k_F$, и эта запись совпадает с формулой (2.4). Для случая произвольной температуры такого ограничения записать нельзя. Ис-

ходя из уравнения Шредингера (2. 4), можно получить выражение для потенциальной энергии экситона

$$U_{ex} = \int d^2q \int d^2q' \psi_{\mathbf{q}} U_{-\mathbf{q}'\psi_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'}} [1 - f(\mathbf{q} + \mathbf{q}')], \quad (3. 1)$$

где $f(\mathbf{q})$ — функция распределения Ферми. Это выражение содержит два интеграла по \mathbf{q} , \mathbf{q}' и сводится к трехкратному интегралу — по модулям q , q' и по углу между \mathbf{q} и \mathbf{q}' . Минимизация такой функции выходит за пределы наших возможностей.

Предлагаемый в этом разделе метод расчета может рассматриваться как полумпирический, позволяющий получить результаты, при низких температурах совпадающие с результатами предыдущего раздела, а при высоких температурах, когда заполнение импульсного пространства электронным газом несущественно, — результатом расчета без ДЭГ. При промежуточных температурах метод дает результаты, непрерывно переходящие от одного случая к другому.

Поскольку расчеты с трехкратным интегралом (3. 1) мы выполнить не могли, осталась единственная возможность — перенести ограничения из уравнения Шредингера в волновую функцию, аналогичную случаю нулевой температуры. Ошибка, возникающая при этом, не столь велика, как кажется с первого взгляда. Дело в том, что при низких температурах, когда влияние функции $f(\mathbf{q})$ на интеграл (3. 1) наибольшее, такое перенесение ограничений на волновую функцию является точным, а при высоких температурах $f(\mathbf{q})$ меняется слабо и практически не влияет на интеграл. Мы выбрали вариационную функцию в виде

$$\psi(\rho) = A e^{-\alpha\rho} \cos[\Omega(T) k_F \rho], \quad (3. 2)$$

$$A = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} \frac{\Omega^2 k_F^2 + \alpha^2}{[\Omega^2 k_F^2 + \alpha^2 \Omega^2 k_F^2 + 2\alpha^4]^{1/2}}, \quad (3. 3)$$

где

$$\Omega(T) = e^{-T/\epsilon_F}, \quad (3. 4)$$

ϵ_F — энергия Ферми ДЭГ. При низких температурах эта функция переходит в (2. 19), а при высоких — совпадает с (2. 7) при не слишком больших ρ . Однако именно такие ρ дают основной вклад в интеграл для потенциальной энергии (2. 14), поскольку и $\psi(\rho)$, и $\varphi_{eh}(z_s, z_h, \rho)$ быстро убывают с ростом ρ , как $e^{-\alpha\rho}$ и $1/\rho^3$ соответственно.

Как уже говорилось, влияние ДЭГ на экситон в КЯ проявляется в двух эффектах — заполнении части \mathbf{k} -пространства и экранировании кулоновского потенциала. Оба эти эффекта зависят от температуры. Влияние температуры на заполнение импульсного пространства приближенно учитывается вариационной функцией (3. 2). Экранирование также зависит от температуры. При ненулевой температуре обратный радиус экранирования q_s имеет вид [47]

$$q_s = \frac{2\pi e^2 N_s}{\chi T} \{ [1 + e^{-\epsilon_F/T}] \ln [1 + e^{\epsilon_F/T}] \}^{-1}. \quad (3. 5)$$

Расчеты экситона в КЯ при конечной температуре выполнялись аналогично расчетам при нулевой температуре, результаты которых приведены в разделе 2. Различие состоит только в использовании волновой функции (3. 2) вместо (2. 19) и выражения (3. 5) для q_s в формуле для потенциала электронно-дырочного взаимодействия φ_{eh} (2. 10).

На рис. 7 показаны зависимости энергии связи ϵ_{ex} и силы осциллятора I_{ex} экситона в КЯ от температуры для нескольких значений концентрации ДЭГ N_s . Электрическое поле здесь равно нулю. Видно, что при уменьшении температуры энергия связи и сила осциллятора уменьшаются, так как возрастают эф-

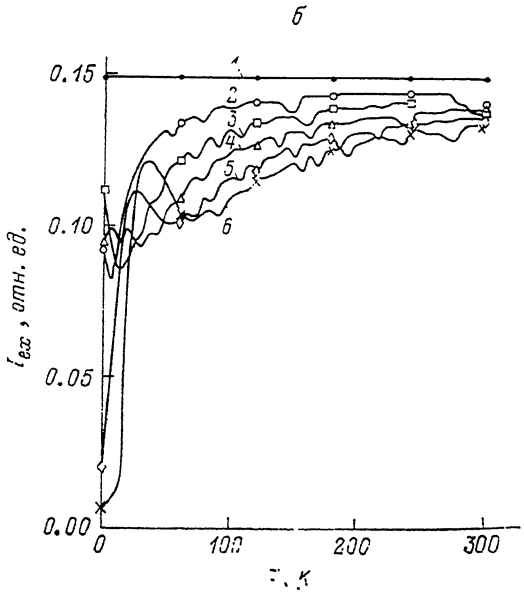
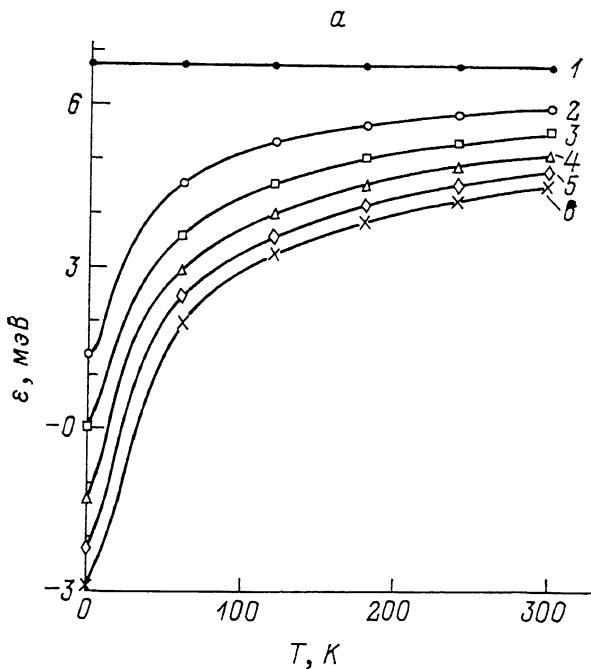


Рис. 7. Зависимости энергии связи экситона в квантовой яме с ДЭГ от температуры (а) и силы осциллятора экситона в квантовой яме с ДЭГ от температуры (б).

Электрическое поле отсутствует. 1—6 — то же, что и на рис. 5.

Эффекты экранирования ДЭГ кулоновского взаимодействия электрона и дырки, а также увеличивается вырождение электронного газа, т. е. растет заполнение импульсного пространства.²

² Ситуация здесь в известном смысле обратна общепринятой: обычно при уменьшении температуры экситонные эффекты лучше проявляются.

4. Основные результаты и выводы

В работе рассмотрено влияние двумерного электронного газа на экситоны в полупроводниковой квантовой яме. Сформулируем основные результаты, полученные в этой статье.

1) Рассчитаны энергия связи и сила осциллятора экситона в квантовой яме, заполненной двумерным электронным газом, в электрическом поле. При этом учтены как экранирование электронным газом кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в экситоне, так и влияние частичного заполнения импульсного пространства двумерными электронами. Показано, что оба эффекта дают сравнимые вклады в изменение энергии связи и силы осциллятора экситона.

2) Показано, что необходимость учета частичного заполнения импульсного пространства при вариационном расчете предъявляет особые требования к вариационной функции; предложена новая вариационная функция, позволяющая учесть частичное заполнение импульсного пространства значительно точнее, чем это сделано в предыдущих работах.

3) Предложен метод расчета энергии связи экситона в квантовой яме с двумерным электронным газом при конечной температуре, позволяющий приближенно учесть частичное заполнение импульсного пространства.

4) Энергия связи экситона в квантовой яме с двумерным электронным газом возрастает при увеличении температуры, так как ослабляется экранирование и уменьшается заполнение импульсного пространства двумерными электронами.

Автор выражает благодарность В. И. Перелю, Г. Е. Пикусу и Р. П. Сейсяну за обсуждение работы и полезные советы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Schmitt-Rink S., Chemla D. S., Knox W. H., Miller D. A. B. // *Opt. Lett.* 1990. V. 15. N 1. P. 60—62.
- [2] Ahn D. // *IEEE J. Quant. Electron.* 1989. V. 25. N 11. P. 2260—2265.
- [3] Mendez E. E., Agullo-Rueda F. // *J. Luminesz.* 1989. V. 44. N 4-6. P. 223—231.
- [4] Ishikawa T., Tado K. // *Japan. J. Appl. Phys.* 1989. V. 28. N 11. P. L1982—L1984.
- [5] Ribot H., Larwelle F., Collren L. A. // *Appl. Phys. Lett.* 1989. V. 55. N 24. P. 2526—2528.
- [6] Miller D. A. B., Chemla D. S., Damen T. C., Gossard A. C., Wiegmann W., Wood T. H., Burrus C. A. // *Appl. Phys. Lett.* 1984. V. 45. N 1. P. 13—16.
- [7] Wood T. H., Burrus C. A., Miller D. A. B., Chemla D. S., Damen T. C., Gossard A. C., Wiegmann W. // *Appl. Phys. Lett.* 1984. V. 44. N 1. P. 16—18.
- [8] Kesler M. P., Harder C. // *Appl. Phys. Lett.* 1990. V. 57. N 2. P. 123—125.
- [9] Dingle R., Wiegmann W., Hury C. H. // *Phys. Rev. Lett.* 1974. V. 33. N 14. P. 827—830.
- [10] Miller R. C., Kleinman D. A., Tsang W. T., Gossard A. C. // *Phys. Rev. B.* 1981. V. 24. N 2. P. 1134—1136.
- [11] Miller D. A. B., Chemla D. S., Eilenberger D. J., Smith P. W., Gossard A. C., Tsang W. T. // *Appl. Phys. Lett.* 1982. V. 41. N 8. P. 679—681.
- [12] Chemla D. S., Miller D. A. B., Smith P. W., Gossard A. C., Wiegmann W. // *IEEE J. Quant. Electron.* 1984. V. 20. N 3. P. 265—268.
- [13] Chemla D. S., Damen T. C., Miller D. A. B., Gossard A. C., Wiegmann W. // *Appl. Phys. Lett.* 1983. V. 42. N 10. P. 864—866.
- [14] Miller D. A. B., Chemla D. S., Damen T. C., Gossard A. C., Wiegmann W., Wood T. H., Burrus C. A. // *Phys. Rev. B.* 1985. V. 32. N 2. P. 1043—1045.
- [15] Schlosser J., Stahl A., Balslev I. // *J. Phys.: Cond. Matter.* 1990. V. 2. N 27. P. 5979—5989.
- [16] Greene R. L., Bajaj K. K., Phelps D. E. // *Phys. Rev. B.* 1984. V. 29. N 4. P. 1807—1815.
- [17] Greene R. L., Bajaj K. K. // *Sol. St. Commun.* 1983. V. 45. N 9. P. 831—835.
- [18] Аверкиев Н. А., Пикус Г. Е., Шматов М. Л. // *ФТТ.* 1988. Т. 30. В. 11. С. 3766—3771.
- [19] Kleinmann D. A. // *Phys. Rev. B.* 1985. V. 32. N 6. P. 3766—3771.
- [20] Edelstein W. S., Spector H. N. // *Surf. Sci.* 1985. V. 224. P. 581—590.
- [21] Wendler L., Bechsted F., Fiedler M. // *Phys. St. Sol. (b).* 1990. V. 153. P. 143—154.
- [22] Spector H. N., Lee J., Melman P. // *Superlat. a. Microstr.* 1985. V. 1. P. 149—151.

- [23] Lee J., Spector H. N., Melman P. // *J. Appl. Phys.* 1985. V. 58. N 2. P. 1983—1985.
- [24] Haug H., Schmitt-Rink S. // *Progr. Quant. Electron.* 1984. V. 9. P. 3.
- [25] Schmitt-Rink S., Ell C., Koch S. W., Schmidt H. E., Haug H. // *Sol. St. Commun.* 1984. V. 52. N 2. P. 123—125.
- [26] Schmitt-Rink S., Ell C. // *J. Luminesz.* 1985. V. 30. N 2. P. 585—591.
- [27] Das Sharma S., Jalabert A. R., Eric Yang S. R. // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 39. N 8. P. 5516—5519.
- [28] Schmitt-Rink S., Chemla D. S., Miller D. A. B. // *Phys. Rev. B.* 1985. V. 32. N 10. P. 6601—6619.
- [29] Sanders G. D., Chang Y. C. // *Phys. Rev. B.* 1985. V. 32. N 12. P. 8452—8454.
- [30] Broido D. A., Cham L. J. // *Phys. Rev. B.* 1986. V. 34. N 6. P. 3917—3925.
- [31] Chen Y. // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. N 15. P. 10604—10607.
- [32] Chen Y., Gie B., Lefebvre P. L., Mathieu H. // *Phys. Rev. B.* 1988. V. 37. N 11. P. 6429—6432.
- [33] Gershoni D., Vanderberg J. M., Chy S. N. C., Temkin H., Tanbun-Ek T., Alogan R. // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 40. N 14. P. 10007—10020.
- [34] Priester C., Allan G., Lannoo M. // *Phys. Rev. B.* 1984. V. 30. N 12. P. 2302—2309.
- [35] Holtz P. O., Sundaram M., Merz J. L., Gossard A. C. // *Superlat. a. Microstr.* 1990. V. 7. N 1. P. 57—61.
- [36] Chen J. J., Elma B., Koteles E. S. // *Sol. St. Commun.* 1989. V. 72. N 1. P. 25—29.
- [37] Colocci M., Gurioli M., Vinattieri A., Fermi F., Deparis C., Massies J., Neu G. // *Europhys. Lett.* 1990. V. 12. N 5. P. 417—422.
- [38] Damen T. C., Chan J., Oberli D. J., Chemla D. S., Cunningham J. E., Kuo J. M. // *J. Luminesz.* 1990. V. 45. N 1. P. 181—185.
- [39] Hou H. Q., Segawa Y., Aoyagi Y., Namba S. // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 42. N 2. P. 1284—1289.
- [40] Hou H. Q., Segawa Y., Aoyagi Y., Namba S. // *Sol. St. Commun.* 1990. V. 75. N 1. P. 159—161.
- [41] Koteles E. S., Chi J. Y. // *Phys. Rev. B.* 1988. V. 37. N 11. P. 6332—6335.
- [42] Moore K. J., Duggan G., Woodbridge K., Roberts C. // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. N 2. P. 1090—1094.
- [43] Bastard G., Mendez E. E., Chang L. L., Esaki L. // *Phys. Rev. B.* 1983. V. 28. N 6. P. 3241—3245.
- [44] Bastard G., Mendez E. E., Chang L. L., Esaki L. // *Phys. Rev. B.* 1982. V. 26. N 4. P. 1974—1979.
- [45] Mahan G. D. // *Phys. Rev.* 1967. V. 153. N 3. P. 882—889.
- [46] Walukiewicz W., Ruda H. E., Lagowski J., Gatos H. C. // *Phys. Rev. B.* 1984. V. 30. N 8. P. 4571—4582.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Получена 30.05.1991
Принята к печати 28.06.1991