

©1995

ЭКСИТОНЫ ВАННЬЕ В ПЛАНАРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ

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

Воронежский государственный педагогический университет,
394043, Воронеж, Россия

(Поступила в Редакцию 10 ноября 1994 г.)

В окончательной редакции 17 мая 1995 г.)

Методом огибающих функций в приближении эффективной массы исследованы экситонные состояния в полупроводниковых гетероструктурах типа I с несколькими прямоугольными квантовыми ямами и туннельно прозрачными барьерами без каких-либо ограничений на соотношения между их размерами. При расчете энергетического спектра и квантовых состояний одночастичных возбуждений учитываются различия электронных и дырочных эффективных масс в материалах квантовых ям и барьерных слоев. Эффективный потенциал взаимодействия между электроном и дыркой вычислен с учетом различия диэлектрических проницаемостей материалов квантовых ям и барьерных слоев. Получена система дифференциальных уравнений для экситонных огибающих функций, относящихся к различным парам дырочных и электронных подзон размерного квантования, учитывающая смешивание состояний экситонов разных типов. Учет сильной непараболичности закона дисперсии одночастичных возбуждений показывает, что в отдельных случаях энергии связи экситонов могут достигать anomalously больших значений и приводить к экситонным спектрам, резко различным для гетероструктур даже с весьма близкими значениями геометрических параметров системы квантовых ям и барьеров. Указано существование достаточно широких областей изменения параметров гетероструктур, в которых некоторые экситоны не возникают вовсе.

Современная технология полупроводниковых гетероструктур (ГС) позволяет конструировать спектры элементарных возбуждений с ярко выраженными свойствами систем с пониженной размерностью. Возможность контроля толщины атомных слоев приводит к исключительно широкому набору вариантов сопряжения элементов ГС, соответствующих областям двумерных (2D) квантовых ям (КЯ) и барьерных слоев. Электронные состояния и энергетический спектр существенно зависят от вида ГС, поэтому обилие вариантов чередований КЯ и барьеров различной ширины и высоты дает возможность создавать структуры с требуемым характером электронных волновых функций [1], что позволяет практически непрерывным образом изменять оптические и электрические параметры системы. С конфайнментом электронов и дырок в КЯ связана особая роль экситонов в планарных ГС (по сравнению с массивными полупроводниками). Так, в ГС с КЯ экситонные резонансы уверенно регистрируются вплоть до комнатной

температуры [2]. Поэтому после первого наблюдения экситонных резонансов в ГС с КЯ [3] экситоны в таких структурах активно исследуются как экспериментально, так и теоретически. Рассмотрение экситонов в конкретных ГС, например $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$, требует учета особенностей энергетического спектра электронов и дырок в полупроводниках, образующих эти структуры. Так, следствием вырождения валентной зоны в центре зоны Бриллюэна (снимаемого одномерным потенциалом КЯ) является смешивание состояний тяжелых и легких дырок при отличных от нуля значениях поперечного (по отношению к оси ГС) квазиимпульса [4,5], приводящее к сильной непараболичности валентных подзон размерного квантования. Учет такого смешивания в теории экситонов в КЯ оказывает заметное влияние на энергии связи экситонов. Различие диэлектрических свойств материалов КЯ и барьерных слоев, приводящее к модификации кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой [6], влияет на энергию связи экситона в результате возникновения полей изображений зарядов электрона и дырки [6-10]. С различными парами подзон размерного квантования, возникающих в валентной зоне и зоне проводимости, могут быть связаны соответствующие ветви экситонного спектра; учет кулоновского смешивания экситонов, принадлежащих разным ветвям спектра, т.е. выход за рамки простого двухзонного приближения) может оказаться существенным при определении энергии связи экситона [11,12].

В исследовании электронных состояний в ГС особую роль играет приближение огибающих функций в рамках метода эффективной массы [13], позволяющее сравнительно легко учесть не только особенности энергетического спектра полупроводников, составляющих ГС, но и влияние различных внешних полей. Состояния дырок у края валентной зоны в ГС с КЯ могут иметь довольно необычные свойства; так, сильная непараболичность $2D$ -валентных подзон, приводящая в отдельных случаях даже к изменению знака кривизны закона дисперсии в центре зоны Бриллюэна, проявляется при сравнительно малых значениях квазиимпульса [14]. Несмотря на это обстоятельство, метод эффективной массы оказывается достаточно приемлемым как для расчета структуры энергетических подзон, так и для определения соответствующих огибающих функций для всей совокупности квазиимпульсов, существенных при формировании экситонных состояний, что позволяет рассматривать его как один из наиболее подходящих методов исследования как одночастичных, так и экситонных возбуждений в ГС с произвольными профилями КЯ и барьеров. Поскольку в полупроводниках диэлектрическая проницаемость достаточно велика, характерный размер возникающего связанного состояния существенно превышает межатомное расстояние, так что экситоны можно рассматривать как экситоны Ванье. Хотя неизбежное использование ряда существенных приближений, достаточно грубо учитывающих особенности ГС (кусочно-постоянный характер координатной зависимости краев зон, особые граничные условия для огибающих на гетерограницах), и вызывает определенные сомнения в количественных результатах, относящихся как к одночастичным, так и к экситонным состояниям, качественно их особенности теория, основанная на методе огибающих функций, передает, по-видимому, вполне удовлетворительно, о чем свидетельствуют расчеты экситонных спектров одиночных КЯ [11,12].

1. Эквивалентный гамильтониан экситона Ванье

Выберем ось z в качестве оси ГС; гетерограницы имеют z -координаты, равные d_p , где $p = 0, 1, 2, \dots, N$. Полупространства $z < d_0$ и $z > d_N$ считаются заполненными материалами барьерных слоев. В силу трансляционной симметрии системы в плоскости xy поперечный квазиимпульс \mathbf{k} одноэлектронного возбуждения является сохраняющейся величиной, поэтому для классификации таких возбуждений можно воспользоваться набором квантовых чисел $\{s, n, \mathbf{k}\}$, где s — индекс энергетической зоны, n — индекс $2D$ — подзоны размерного квантования для данной s -зоны (n принимает конечное число значений, соответствующих локализованным вдоль оси z состояниям электрона или дырки, и квазиконтинуум значений, отвечающих возбуждениям с более высокими энергиями, для которых n фактически переходит в продольную z -компоненту квазиимпульса).

Огибающие одноэлектронных волновых функций могут быть представлены в виде [13]

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

где S — нормировочная площадь слоя ГС, $\boldsymbol{\rho}$ — поперечная составляющая радиус-вектора \mathbf{r} , $f_{s\mathbf{n}\mathbf{k}}(z)$ — решение одномерного уравнения Шредингера с потенциалом в виде прямоугольных КЯ в z -зоне при заданном \mathbf{k} . Из этого же уравнения и соответствующей системы граничных условий определяется и энергетический спектр $E_{s\mathbf{n}}(\mathbf{k})$ одночастичных (дырочных и электронных) возбуждений. Спиновая переменная в (1) явно не выписана; можно считать, что она входит в состав зонного индекса s .

В основном состоянии все (включая $2D$ -подзоны размерного квантования) валентные зоны заполнены, а зоны проводимости пусты. Возбужденное состояние можно представить как рождение электрона в одной из подзон зоны проводимости и дырки в одной из валентных подзон. Обозначим $|s'n'\mathbf{k}'; s\mathbf{n}\mathbf{k}\rangle$ огибающую функцию такого возбуждения. Здесь квантовые числа, помеченные штрихом, относятся к дырке, без штриха — к электрону. Далее набор квантовых чисел $\{s'n'; s\mathbf{n}\}$, задающий зоны и подзоны, в которых возникает электронно-дырочная пара (ЭДП), обозначается единым индексом λ . Энергия элементарного возбуждения (ЭДП без учета взаимодействия между электроном и дыркой) записывается как

$$E_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = E_{s\mathbf{n}}(\mathbf{k}) - E_{s'n'}(\mathbf{k}'). \quad (2)$$

Гамильтониан ЭДП, не включающий взаимодействия между электроном и дыркой, в базисе $|s'n'\mathbf{k}'; s\mathbf{n}\mathbf{k}\rangle \equiv |\lambda; \mathbf{k}', \mathbf{k}\rangle$ диагонален; его отличные от нуля матричные элементы определяются непосредственно соотношением (2).

Для определения энергии кулоновского взаимодействия между дыркой и электроном введем электростатическую функцию Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, имеющую смысл потенциала в точке \mathbf{r} единичного положительного заряда, расположенного в точке \mathbf{r}' , и позволяющую предста-

Вить элементарные элементы оператора взаимодействия между базисными функциями $|\lambda; \mathbf{k}, \mathbf{k}'\rangle$ в виде

$$\begin{aligned} \langle \lambda_1; \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}_1 | \hat{U} | \lambda; \mathbf{k}' \mathbf{k} \rangle = & -e \iint d^3 r d^3 r' \varphi_{s_n \mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \varphi_{s_1 n_1 \mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) \times \\ & \times G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_{s' n' \mathbf{k}'}(\mathbf{r}') \varphi_{s'_1 n'_1 \mathbf{k}'_1}(\mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (3)$$

где $\lambda_1 = \{s'_1 n'_1; s_1 n_1\}$. Трансляционная симметрия системы в плоскости xy позволяет классифицировать возбужденные состояния при помощи квазиимпульса экситона $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, характеризующего неприводимое представление, по которому преобразуется волновая функция при трансляциях в плоскости ГС. Кроме того, удобно сохранить зависимость огибающей функции и энергии взаимодействия от радиус-вектора $\beta = \rho - \rho'$ относительного движения ЭДП в плоскости ГС, т.е. перейти к $2D$ -экситонному представлению Ванье [15] при помощи унитарного преобразования

$$|\lambda; \mathbf{K}, \beta\rangle = \mathfrak{N}^{-1/2} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\beta \mathbf{x}} |\lambda; \mathbf{x} - u\mathbf{K}, \mathbf{x} + v\mathbf{K}\rangle. \quad (4)$$

Здесь \mathfrak{N} — число элементарных ячеек в плоскости ГС, $\mathbf{x} = u\mathbf{k} + v\mathbf{k}'$ — квазиимпульс относительного движения электрона и дырки, а параметры u и v определяются так, чтобы в квадратичной по \mathbf{k} и \mathbf{k}' составляющей закона дисперсии ЭДП

$$E_{\lambda}^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \Delta_{\lambda} + \hbar^2 k^2 / 2m_{s_n} + \hbar^2 k'^2 / 2m_{s'_n} \quad (5)$$

исключить член, линейный по квазиимпульсу экситона \mathbf{K} . При этом $u = m_{s'_n} (m_{s_n} + m_{s'_n})^{-1}$, $v = m_{s_n} (m_{s_n} + m_{s'_n})^{-1}$, где m_{s_n} и $m_{s'_n}$ — эффективные массы поперечного движения электрона и дырки в подзонах s_n и s'_n соответственно, Δ_{λ} — расстояние между краями (при $k = 0$) подзон s'_n и s_n . Таким образом,

$$E_{\lambda}^{(2)}(\mathbf{K}, \mathbf{x}) = \Delta_{\lambda} + \hbar^2 K^2 / 2m_{\lambda} + \hbar^2 \mathbf{x}^2 / 2\mu_{\lambda}, \quad (6)$$

где $m_{\lambda} = m_{s_n} + m_{s'_n}$ — трансляционная, а $\mu_{\lambda} = m_{s_n} m_{s'_n} m_{\lambda}^{-1}$ — приведенная масса экситона типа λ .

Преобразование (4) не изменяет не зависящих от \mathbf{x} слагаемых в (6), которые, таким образом, являются диагональными в представлении Ванье. Матричные элементы третьего слагаемого, диагонального по \mathbf{K} и λ , представленные в виде дифференциальных операторов

$$\langle \lambda, \mathbf{K}, \beta | \hbar^2 \mathbf{x}^2 / 2\mu_{\lambda} | \lambda, \mathbf{K}, \beta \rangle \Rightarrow -(\hbar^2 / 2\mu_{\lambda}) \nabla_{\beta}^2, \quad (7)$$

очевидным образом диагональны и по β . Здесь ∇_{β}^2 — $2D$ -оператор Лапласа. Можно также убедиться в том, что оператор кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в представлении Ванье диагонален по квазиимпульсу экситона \mathbf{K} , заметив, что электростатическая функция Грина зависит лишь от разности поперечных

радиус-векторов $\rho - \rho'$, т.е. $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\rho - \rho'; z, z')$. Дальнейшие упрощения кулоновских матричных элементов возможны при определенных предположениях о виде огибающих функций. Так, в случае подзон размерного квантования зоны проводимости ($s = c$) достаточно хорошим приближением при $k \ll a^{-1}$ считается [16] $f_{cnk}(z) \cong f_{cn0}(z)$, где a — параметр решетки (далее индекс 0 у огибающих будет опускаться: $f_{cn0} \equiv f_{cn}$). Напротив, возможность довольно заметного смешивания состояний тяжелых и легких дырок при $k \neq 0$ приводит к необходимости учитывать зависимость огибающих функций валентных подзон от квазиимпульса. Если заметить, что основной вклад в формирование экситонов вносит область значений $2D$ -квазиимпульсов $k \leq a_{\text{exc}}^{-1}$, где a_{exc} — характерный боровский радиус экситона, и, кроме того, смешивание тяжелых и легких дырок уже учтено при рассмотрении одночастичных возбуждений (что, в частности, проявляется в перенормировке эффективных масс в некоторых валентных подзонах), то при вычислении матричных элементов (3) также достаточно ограничиться приближением $f_{s'n'k'}(z) \cong f_{s'n'}(z)$. Соответствующая матрица в представлении Ванье диагональна по β и может быть представлена в виде

$$\langle \lambda_1 \mathbf{K} \beta | \hat{U} | \lambda \mathbf{K} \beta \rangle = e^2 \langle \lambda_1 | G(\beta) | \lambda \rangle, \quad (8)$$

где по определению

$$\langle \lambda_1 | G(\beta) | \lambda \rangle = \int dz dz' f_{s'n}^*(z) f_{s_1 n_1}(z) G(\beta, z, z') f_{s'n'}(z') f_{s_1' n_1'}^*(z'). \quad (9)$$

Таким образом, эквивалентный гамильтониан экситона может быть представлен в виде матричного линейного дифференциального оператора, учитывающего кулоновское смешивание квантовых состояний экситонов, относящихся к различным парам $2D$ -дырочных и электронных подзон размерного квантования; квантовые числа \mathbf{K} и β , по которым гамильтониан диагонален, далее опускаются

$$\hat{H}_{\lambda \lambda_1} = \left[\Delta_\lambda - (\hbar^2/2\mu_\lambda) \nabla_\beta^2 + \hat{V}_\lambda(\beta) \right] \delta_{\lambda \lambda_1} + U_{\lambda \lambda_1}(\beta). \quad (10)$$

Здесь $U_{\lambda \lambda_1}(\beta)$ определяется выражением (8), $\hat{V}_\lambda(\beta)$ обозначает член, пропорциональный κ^4 в законе дисперсии (2) и в значительной степени определяемый характером смешивания состояний тяжелых и легких дырок в подзонах размерного квантования, а также положено $\mathbf{K} = 0$. Следовательно, индивидуальность каждой конкретной ГС (размеры и число КЯ и барьеров, величины скачков dna зоны проводимости и потолка валентной зоны, различия эффективных масс в областях КЯ и барьерных слоев) определяется спектром одночастичных возбуждений и огибающими функциями $f_{sn}(z)$ для каждой из $2D$ -подзон, принимаемых во внимание и определяемых независимо от задачи об экситонных состояниях; различия диэлектрических проницаемостей материалов КЯ и барьеров учитываются при определении электростатической функции Грина.

Система уравнений, определяющая многокомпонентную (по числу учитываемых пар подзон) огибающую функцию экситона, имеет вид

$$(E - \hat{H}_\lambda) \Phi_\lambda(\beta) = \sum_{\lambda_1}' U_{\lambda \lambda_1} \Phi_{\lambda_1}, \quad (11)$$

где штрих у знака суммы означает исключение слагаемого с $\lambda_1 = \lambda$, а $\hat{H}_\lambda = \hat{H}_{\lambda\lambda}$. Необходимо отметить, что, как следует из определения (9), диагональные матричные элементы оператора кулоновского взаимодействия электрона и дырки, вообще говоря, гораздо больше недиагональных, поскольку в первом случае подынтегральная функция в (9) является существенно положительной при всех значениях аргументов z и z' . В противном случае произведение огибающих функций с разным числом узлов приводит к значительному уменьшению их вклада в интеграл (в принятом здесь приближении, очевидно, отличны от нуля недиагональные элементы, относящиеся к одной и той же валентной зоне тяжелых или легких дырок, но к различным подзонам размерного квантования). Таким образом, недиагональные элементы эквивалентного гамильтониана экситона могут быть учтены по теории возмущений.

Если в (11) вообще опустить недиагональные члены, то совокупность независимых уравнений

$$\hat{H}_\lambda \Phi_\lambda^{(0)} = E_\lambda^{(0)} \Phi_\lambda^{(0)} \quad (12)$$

определяет в нулевом по межподзонам матричным элементам приближении состояния и энергетический спектр экситонов, которые в этом приближении классифицируются при помощи квантовых чисел λ -пар подзон размерного квантования в одной из валентных зон и в зоне проводимости. Для решения каждого из уравнений (12) можно воспользоваться методом [17], развитым применительно к экситонам в КЯ в [18]. Следует, однако, отметить, что в отличие от [18] при решении уравнений (12) метод [17] применяется к задаче о движении частицы в чисто 2D-эффективном потенциале $U_{\lambda\lambda}(\beta)$. Представим гамильтониан \hat{H}_λ в виде

$$\hat{H}_\lambda = \hat{H}_\lambda^{(0)}(\chi) + \hat{W}_\lambda(\chi), \quad (13)$$

где

$$\hat{H}_\lambda^{(0)}(\chi) = \Delta_\lambda - (\hbar^2/2\mu_\lambda)\nabla_\beta^2 - (\chi e^2)/\beta, \quad (14)$$

$$\hat{W}_\lambda(\chi) = (\chi e^2)/\beta + U_{\lambda\lambda}(\beta) + \hat{V}_\lambda. \quad (15)$$

Здесь χ — безразмерный параметр, определяемый таким образом, чтобы в первом порядке теории возмущений вклад в энергию экситона от второго члена в гамильтониане (13) обращался в нуль. Тем самым собственные функции операторов (14) определяют множество огибающих функций нулевого приближения, на которых может быть построена теория возмущений для системы уравнений (11).

2. Размерно-квантованные состояния электронов и дырок

Метод эффективной массы позволяет рассматривать зависящие от координат края валентной зоны и зоны проводимости как потенциальные энергии соответственно дырок и электронов. В нелегированных ГС для простоты обычно предполагается, что края зон принимают различные, но постоянные значения во всей области КЯ или барьера [13].

Соответствующие величины разрывов зон, ΔE_h и ΔE_e , трудно поддаются точным измерениям. Так, для ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$ первоначально [19] принималось правило, согласно которому $\Delta E_h = 0.15\Delta E_g$, а $\Delta E_e = 0.85\Delta E_g$, где ΔE_g — разность между величинами запрещенных зон $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (барьерные слои) и GaAs (области КЯ). Позднее [20] более реалистичным было признано правило $\Delta E_h = 0.4\Delta E_g$, $\Delta E_e = 0.6\Delta E_g$. При вычислениях используются и другие значения отношения $\Delta E_h/\Delta E_e$, например 0.35/0.65 [21], 0.33/0.67 [8]. Таким образом, моделью КЯ служит прямоугольная потенциальная яма конечной глубины, для эффективных масс электронов и дырок в КЯ и внутри барьерных слоев принимаются их значения для соответствующих массивных кристаллов [13]. Используемая весьма примитивная модель ГС может, очевидно, претендовать лишь на качественное описание поведения электронов и дырок. Следует, однако, отметить, что изменения указанных параметров ГС даже в достаточно широких пределах не приводят к существенным изменениям в характере квантовых состояний одночастичных возбуждений, относящихся по крайней мере к наиболее глубокому подзонам энергетического спектра [22].

Электронные огибающие функции $f_{cnk}(z)$, таким образом, являются решениями простого дифференциального уравнения с кусочно-постоянным потенциалом [13], дополненного граничными (при $z = d_p$) условиями, заключающимися в непрерывности огибающих и плотности потока вероятности, вычисленного для этих огибающих [9,13]. Система граничных условий позволяет определить энергетический спектр электрона $E_{cn}(\mathbf{k})$, в частности положения краев подзон размерного квантования и эффективные массы поперечного движения в каждой подзоне. Слабую непараболичность [23,24] зоны проводимости в области квазиимпульсов, существенных при формировании экситонов, учесть сравнительно несложно [12]. Вычисления показывают, что при $k \leq a_{\text{exc}}^{-1}$ аппроксимация $f_{cnk} \cong f_{cn}$, как уже отмечалось выше, является вполне удовлетворительной. Значения же эффективных масс m_{cn} могут, вообще говоря, в достаточно широких пределах меняться в зависимости от параметров ГС. Значения основных параметров GaAs и AlAs , используемые в этой работе при вычислениях, приведены в таблице и соответствуют принятым в [11]. Значения параметров для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ получаются, как обычно, линейной интерполяцией по концентрации x .

Значения основных параметров GaAs и AlAs , используемые в настоящей работе при вычислениях

Вещество	m_c	γ_1	γ_2	γ_3	E_g, eV	ϵ_0
GaAs	0.0665	6.790	1.924	2.681	1.519	12.56
AlAs	0.15	3.790	1.230	1.395	2.766	9.80

П р и м е ч а н и е. Эффективная масса электрона m_c представлена в единицах массы свободного электрона (m_0), параметры Латтинджера $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — в единицах $\hbar^2/2m_0$. Значения статической диэлектрической проницаемости ϵ_0 соответствуют принятым в [25].

Для описания дырок у потолка валентной зоны использован известный гамильтониан Латтинджера [26], который в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием можно представить в виде матричного (4×4) дифференциального оператора [14]

$$\hat{H}_{\nu\nu'} = \begin{bmatrix} P+Q & L & M & 0 \\ L^+ & P-Q & 0 & M \\ M^+ & 0 & P-Q & -L \\ 0 & M^+ & -L^+ & P+Q \end{bmatrix}_{\nu\nu'}, \quad (16)$$

где (в единицах $\hbar^2/2m_0$)

$$\begin{aligned} P &= -\gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), & Q &= -\gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \\ L &= 2\sqrt{3}\gamma_3 (k_x - ik_y)k_z, \\ M &= -[\sqrt{3}\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2\sqrt{3}\gamma_3 ik_x k_y], \end{aligned} \quad (17)$$

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — параметры Латтинджера, имеющие, как и эффективная масса зоны проводимости, кусочную зависимость от координаты z , ν — спинорный индекс, принимающий значения $\pm 3/2$ (тяжелые дырки) и $\pm 1/2$ (легкие дырки). Прямая диагонализация гамильтониана Латтинджера вместе с зависящим от z ступенчатым потенциалом ГС является достаточно сложной задачей, поэтому для ее решения целесообразно воспользоваться теорией возмущений, учитывая, что недиагональные элементы гамильтониана (16) малы по компонентам k_x и k_y поперечного квазиимпульса \mathbf{k} . Действительно, существенные значения $k \cong a_{\text{exc}}^{-1}$, тогда как при резком (на атомном масштабе) изменении потенциала значения k_z существенны вплоть до величины $\simeq \pi/a$.

Зависящий от координаты z оператор потенциальной энергии дырки диагонален по спинорным индексам, поэтому в нулевом приближении, учитывающем лишь диагональные элементы оператора (16) при заданных k_x, k_y , после замены $k_z \rightarrow -i(d/dz)$ состояния тяжелых (НН) и легких (ЛН) дырок разделяются, и задача определения огибающих функций валентных подзон $f_{v\mathbf{n}}(z)$, где $v = \text{НН}, \text{ЛН}$, сводится к аналогичной задаче для электронов. При этом, как и в случае электронов, для дырочных огибающих нулевого приближения можно воспользоваться обычными граничными условиями, заключающимися в непрерывности на гетерограницах самих огибающих и вычисляемой на них плотности потока вероятности. Эффективные массы в подзонах размерного квантования, вычисленные в нулевом приближении, уже частично учитывают проникновение огибающих в области барьерных слоев, приводя, разумеется, к обычному квадратичному закону дисперсии.

Смешивание тяжелых и легких дырок при $k \neq 0$ осуществляется недиагональными элементами оператора (16), причем операторы L и M смешивают спинорные компоненты огибающих функций с разными знаками проекции момента и поэтому в низших порядках теории возмущений могут учитываться независимо друг от друга. Первые поправки к энергии от этих операторов возникают во втором порядке теории

возмущений, причем во вкладе от L при малых k доминирует член, пропорциональный k^2 , тогда как вклад от M начинается с члена $\sim k^4$. Таким образом, в квадратичном по k приближении поправку к энергии дырочной подзоны $s'n'$ можно представить в виде $\hbar^2 k^2 / 2m_{s'n'}^{(1)}$. Эффективная масса $m_{s'n'}$ дырки в подзоне $s'n'$ может быть определена соотношением

$$\frac{1}{m_{s'n'}} = \frac{1}{m_{s'n'}^{(0)}} - \frac{1}{m_{s'n'}^{(1)}}, \quad (18)$$

в котором $m_{s'n'}^{(0)}$ — эффективная масса дырки в подзоне $s'n'$, вычисленная в нулевом приближении. Для некоторых валентных подзон знак эффективной массы может быть как положительным, так и отрицательным, причем положения краев подзон, знаки и величины эффективных масс могут существенно зависеть от соотношений между размерами КЯ и барьеров и, разумеется, от их химического состава (например, от концентрации x и ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$).

При $m_{s'n'} < 0$ особенно существенным является учет следующих ($\sim k^4$) членов разложения закона дисперсии дырок в ряд по степеням квазиимпульса. Необходимо, однако, отметить, что практическая ценность подобных вычислений невелика, поскольку сам гамильтониан Латтинджера выписан лишь с точностью до членов порядка k^2 . Поэтому при рассмотрении эффектов непараболичности и анизотропии дырочных подзон более целесообразным представляется введение небольшого числа дополнительных феноменологических параметров, определяемых при согласовании получаемых результатов с имеющимися экспериментальными данными. В частности, в ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$ эффектами анизотропии можно пренебречь, поэтому для каждой подзоны достаточно ввести лишь один параметр b_λ . При этом в эквивалентном гамильтониане экситона (10), описывающем относительное движение электрона и дырки, такие параметры, очевидно, учитывают непараболичность как дырочных, так и электронных подзон. Представим таким образом введенный в (10) оператор \hat{V}_λ как

$$\hat{V}_\lambda = \left(\hbar^2 / 2m_0 \right) b_\lambda^2 \left(\nabla_\beta^2 \right). \quad (19)$$

Согласно имеющимся данным [14], типичные значения параметров b_λ по порядку величины могут быть оценены как $10^{-7} - 10^{-6}$ см, т.е. сравним с характерными значениями a_{exc} .

Отметим, что точность вычисления энергетических параметров и эффективных масс подзон размерного квантования фактически определяется выбором некоторого конечного множества базисных функций из полного ортонормированного базиса, формируемого при данном k состояниями как дискретного, так и непрерывного спектра. В этом смысле аналогичная проблема возникает и при самом выборе гамильтониана в виде (16) в результате пренебрежения состояниями, принадлежащими зоне, отщепленной спин-орбитальным взаимодействием [14]. Считается [14], что подобная процедура обоснована, если величина спин-орбитального расщепления Δ_{so} гораздо больше характерных энергий размерного квантования потенциалом КЯ. Величина $\Delta_{so} \cong 340$ meV для GaAs [13] считается достаточной [14] для того, чтобы

использовать приближенное описание структуры валентных подзон, основанное на гамильтониане (16), несмотря на достаточно большую глубину КЯ для дырок ($\Delta E_h \leq 200 \text{ meV}$). Поэтому при рассмотрении глубоких подзон влиянием состояний сплошного спектра тоже можно пренебречь.

Необходимо также отметить, что плотность состояний квазичастиц с законом дисперсии вида

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^{(0)} + \hbar^2 k^2 / 2m_n + \left(\hbar^2 / 2m_0 \right) b_n^2 k^4, \quad (20)$$

где b_n имеет тот же смысл, что и b_λ , а эффективная масса m_n может быть как положительной, так и отрицательной, обладает свойствами, существенно отличающимися от свойств обычных $2D$ -систем. Так, при $m_n > 0$ плотность состояний (на единицу площади ГС) имеет вид

$$g^{(+)}(E) = \frac{m_0}{8\pi m_n b_n^2 E_{n0}^{1/2} \sqrt{E - E_n^{(0)} + E_{n0}}}, \quad E \geq E_n^{(0)}, \quad (21)$$

где

$$E_{n0} = (m_0 / 2m_n)^2 \hbar^2 / 2m_0 b_n^2. \quad (22)$$

При $m_n < 0$ плотность состояний принимает вид

$$g^{(-)}(E) = \frac{m_0}{4\pi |m_n| b_n^2 E_{n0}^{1/2} \sqrt{E - E_n^{(0)} + E_{n0}}} \begin{cases} 1, & E_n^{(0)} - E_{n0} \leq E < E_n^{(0)}, \\ \frac{1}{2}, & E > E_n^{(0)}. \end{cases} \quad (23)$$

Сингулярность плотности состояний (23) у края зоны $E = E_n^{(0)} - E_{n0}$, характерная для $1D$ -систем, обусловлена тем, что зарождение изоэнергетических линий у края зоны происходит не в точке, а на линии (окружности $kb_n = (m_0 / 2|m_n|)^{1/2}$), так называемой петле экстремумов. Конечный скачок функции (23) при $E = E_n^{(0)}$,

$$\Delta g^{(-)} = m_0 \left(8\pi |m_n| b_n^2 E_{n0} \right)^{-1} \quad (24)$$

отвечает исчезновению одного семейства изоэнергетических линий в точке $E = E^{(0)}$ при возрастании энергии. Отмеченные свойства плотности состояний соответствуют характеру сингулярностей Ван-Хова в $2D$ -системах с законом дисперсии вида (20).

На рис. 1 представлены графики (при $k = 0$) квадратов модулей нескольких огибающих функций электронов и дырок для [001] ГС GaAs-Al_{0,34}Ga_{0,66}As с двумя КЯ шириной 11а и 6а, разделенными барьером шириной 5а (структура 11-5-6). Указаны положения краев подзон размерного квантования и соответствующие эффективные массы с учетом проникновения электронов и дырок в области барьерных слоев. Для сравнения показан график одной из огибающих при $k \neq 0$. Для обозначения дырочных подзон использованы общепринятые символы: HH_n (LH_n) — n -подзона зоны тяжелых (легких) дырок. Электронные подзоны обозначены символом Sp.

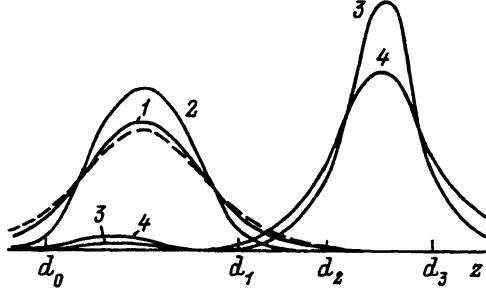


Рис. 1. Графики квадратов модулей огибающих функций электронов и дырок для ГС $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}-\text{GaAs}$ с осью роста $[001]$ и геометрическими параметрами $d_1 - d_0 = 11a$, $d_2 - d_1 = 5a$, $d_3 - d_2 = 6a$, где a — параметр решетки (структура 11-5-6).

Цифрой 1 обозначена огибающая C1, 2 — HH1, 3 — HH2, 4 — C2. Графики огибающих функций для легких дырок весьма близки к соответствующим графикам электронных огибающих: 1 соответствует также LH1, 4 — LH2. Графики, представленные сплошными линиями, соответствуют огибающим при $k = 0$. Для сравнения штриховой линией показан график огибающей C1 при $k = 5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Энергии (meV) краев подзон (при $k = 0$) и соответствующие эффективные массы (в единицах m_0) равны: C1 — 57.68 и 0.0684, C2 — 113.79 и 0.0714, C3 — 222.24 и 0.0755, HH1 — 17.11 и 0.155, HH2 — 40.25 и 0.179, HH3 — 67.30 и 0.079, HH4 — 140.09 и 0.212, HH5 — 149.81 и 0.120, LH1 — 41.96 и 0.982, LH2 — 83.04 и 0.391, LH3 — 156.13 и 0.041.

Следует отметить, что даже значительное изменение концентрации x существенно не изменяет характера огибающих функций для глубоко лежащих подзон. Небольшое изменение параметров структуры (ширин КЯ и барьеров) в пределах одного-двух межатомных расстояний также не приводит к радикальному изменению характера огибающих. Например, огибающие функции для структуры 12-5-6 в принципе почти не отличаются от представленных на рис. 1, за исключением, естественно, несколько большей их пространственной протяженности.

Возникновение новых подзон с ростом x приводит к заметной перестройке энергетического спектра электронов и дырок; в частности, для одной и той же структуры с близкими значениями x эффективные массы некоторых валентных подзон могут отличаться весьма существенно, вплоть до изменения их знака. При этом имеет место пересечение энергетических уровней при некоторых значениях x , как это показано на рис. 2 для двух близких структур 11-5-6 и 12-5-6.

3. Кулоновское взаимодействие электрона и дырки

Функция Грина, определяющая энергию взаимодействия между электроном и дыркой в эквивалентном гамильтониане (10), удовлетворяет уравнению

$$\nabla_r \left[\varepsilon(z) \nabla_r G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right] = -4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (25)$$

в котором диэлектрическая проницаемость ГС представляется ступенчатой функцией

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \sum_{p=0}^N (-1)^p \vartheta(z - d_p), \quad (26)$$

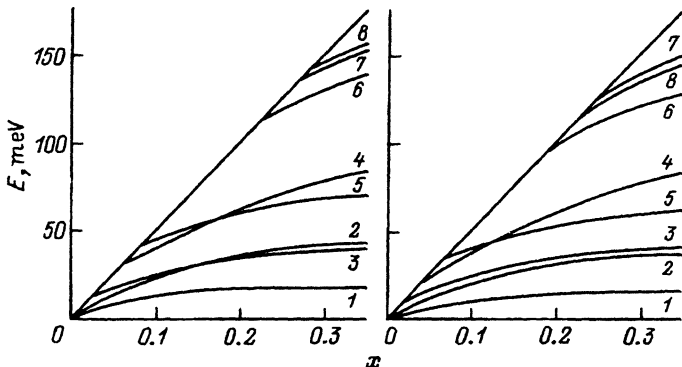


Рис. 2. Положения краев валентных подзон размерного квантования в ГС 11-5-6 и 12-5-6 в зависимости от концентрации x .

Цифрами обозначены подзоны: 1 — НН1, 2 — ЛН1, 3 — НН2, 4 — ЛН2, 5 — НН3, 6 — НН4, 7 — НН5, 8 — ЛН3.

где ε_1 и ε_2 — диэлектрические проницаемости материалов барьерных слоев и КЯ соответственно, $\vartheta(z)$ — единичная функция Хевисайда. Решение уравнения (25) для рассматриваемых здесь ГС сравнительно несложно получить, воспользовавшись методом интегрального преобразования Фурье. При этом для любого конечного числа гетерограниц N можно в замкнутой форме получить выражение для фурье-образа функции Грина по поперечному радиус-вектору ρ . Однако, учитывая, что в реальных ГС обычно $\varepsilon_1 \cong \varepsilon_2 \gg 1$, и вводя малый параметр $\nu = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) / (\varepsilon_2 + \varepsilon_1)$, проще представить функцию Грина в виде бесконечного ряда по степеням параметра ν непосредственно в g -представлении

$$G(\rho; z, z') = \sum_{q=0}^{\infty} G^{(q)}(\rho, z, z'), \quad (27)$$

где

$$G^{(0)}(\rho, z, z') = \frac{1}{\varepsilon(z') \sqrt{\rho^2 + (z - z')^2}}, \quad (28)$$

$$G^{(1)} = -\frac{\nu}{\varepsilon(z')} \sum_{p=0}^N \frac{(-1)^p \operatorname{sgn}(d_p - z')}{\sqrt{\rho^2 + (|z - d_p| + |d_p - z'|)^2}} \quad (29)$$

и вообще

$$G^{(q)} = 2\pi(-\nu)^{q+1} \sum_p \sum_{p'} (-1)^p \int dk J_0(k\rho) \times \\ \times \exp(-k|z - d_p|) \left[a^{q-1}(k) \right]_{pp'} b_{p'}(k; z') \quad (30)$$

при $q \geq 1$. Здесь

$$a_{pp'}(k) = (-1)^{p'} \exp(-k|d_p - d_{p'}|) \operatorname{sgn}(d_p - d_{p'}), \quad (31)$$

$$2\pi b_p(k; z) = \varepsilon^{-1}(z) \exp(-k|d_p - z|) \operatorname{sgn}(z - d_p), \quad (32)$$

$\text{sgn}(z)$ — знаковая функция, $[a^q(k)]_{pp'}$ — q -я степень матрицы (31). Каждое слагаемое ряда (27) имеет простой физический смысл потенциала в точке \mathbf{r} заряда-изображения q -го порядка единичного положительного заряда в точке \mathbf{r}' ; сам ряд (27), очевидно, симметричен относительно \mathbf{r} и \mathbf{r}' .

В ГС с прямоугольными потенциальными барьерами огибающие в КЯ и барьерах представляются простыми экспоненциальными и тригонометрическими функциями соответственно, так что интегрирование по z и z' в (9) может быть произведено в явном виде, причем для симметричных ГС возможна довольно громоздкая процедура (описанная, например, в [11,12]) суммирования получающихся при этом рядов. Учитывая малость параметра ν (так, $\nu \leq 0.046$ для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$ при $x \leq 0.4$), для ГС с произвольными соотношениями между размерами барьеров и КЯ более целесообразным представляется рассмотреть лишь несколько первых членов ряда (27). При этом, учитывая, что каждый член этого ряда записан в несимметричной по z и z' форме, принимаемую во внимание конечную сумму из (27) необходимо предварительно симметризовать по этим переменным.

При $z, z' \leq d_N - d_0 \equiv d$ нетрудно получить асимптотику функции Грина (27) при $\rho \gg d$. В этом случае основной вклад в интегралы (30) вносят $k \ll d^{-1}$, так что экспоненциальные множители в (30)–(32) могут быть заменены единицами. Кроме того, нетрудно убедиться в том, что $[a^2(0)]_{pp'} = \delta_{pp'}$, поэтому в (27) легко выполнить частичные суммирования при четных и нечетных q . В результате $G \sim \varepsilon_1^{-1} \rho^{-1}$, т.е. на больших расстояниях взаимодействие между электроном и дыркой обратно пропорционально расстоянию между ними. В противоположном предельном случае (малые расстояния между электроном и дыркой) матричные элементы (9) функции Грина зависят от вида электронных и дырочных огибающих функций, однако характер их зависимости от ρ установить несложно. Для оценки матричных элементов заменим каждую огибающую константой $d^{-1/2}$ при $d_0 \leq z \leq d_N$, а также, учитывая, что $\nu \ll 1$, положим $\varepsilon(z) = \varepsilon_1$ и вычислим вклад основного члена (28) в диагональный элемент (9). Задача в этом случае сводится к вычислению табличного интеграла, так что

$$\langle \lambda | G(\beta) | \lambda \rangle \sim \frac{2}{\varepsilon_1 d} \left[\frac{\beta}{d} - \sqrt{1 + \frac{\beta^2}{d^2}} + \ln \sqrt{\frac{\sqrt{\beta^2 + d^2} + d}{\sqrt{\beta^2 + d^2} - d}} \right]. \quad (33)$$

При $\beta \ll d$ выражение (33) ведет себя как $(2/\varepsilon_1 d) \ln(d/\beta)$; заметим, что при $\beta \gg d$ выражение (33) имеет правильную асимптотику $(\varepsilon_1 \beta)^{-1}$.

Отметим также, что выход за рамки приближения, принятого при определении (9), т.е. учет зависимости дырочных огибающих функции от поперечного квазиимпульса \mathbf{k} , может быть учтен по теории возмущений. В этом случае первая поправка к (9), линейная по \mathbf{k} и имеющая происхождение от оператора L в гамильтониане (16), является линейным дифференциальным оператором $\sim \nabla_\beta$ и приводит к смешиванию экситонных состояний, относящихся к подзонам тяжелых и легких дырок. Для экситонов относительно большего радиуса ($a_{\text{exc}} \gg a$), когда применимость схемы Ванье не вызывает возражений, малость этой

поправки обеспечивается неравенством $k \ll a^{-1}$. Подобные поправки могут иметь существенное значение при определении времени жизни некоторых из экситонов, поскольку при всех λ (кроме одного, соответствующего возбуждению с наименьшей энергией) экситонные состояния являются квазистационарными, попадая в область сплошного спектра других экситонных состояний [12, 22]. Поскольку в оптических спектрах различных ГС, в том числе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$, четко проявляются несколько экситонных линий, далее при определении энергии кулоновского взаимодействия электрона и дырки мы ограничимся приближением (9), фактически полностью перенося эффект смешивания тяжелых и легких дырок в ту часть гамильтониана (10), которая соответствует кинетической энергии ЭДП.

4. Энергия связи экситона: двухзонное приближение

Ввиду аксиальной симметрии оператора (14) его собственные функции в полярных координатах β, ϕ можно классифицировать с помощью проекции M момента импульса на ось z и главного квантового числа \mathcal{N} , определяющего, согласно (12), энергетический спектр экситона в нулевом приближении

$$E_{\lambda\mathcal{N}}^{(0)} = \Delta_\lambda - \chi^2 \text{Ry}^{(\lambda)} (\mathcal{N} + 1/2)^{-2}. \quad (34)$$

Собственные функции $|\lambda\mathcal{N}M\rangle$ оператора (14) выражаются через присоединенные полиномы Лагерра, а эффективный бороский радиус a_λ и эффективный Ридберг $\text{Ry}^{(\lambda)}$ λ -экситона записываются как

$$a_\lambda = \hbar^2 / \mu_\lambda e^2, \quad \text{Ry}^{(\lambda)} = \mu_\lambda e^4 / 2\hbar^2, \quad (35)$$

причем приведенная эффективная масса λ -экситона $\mu_\lambda > 0$ (в противном случае связанные состояния, естественно, отсутствуют). Условие, определяющее параметр χ , можно записать как

$$\langle \lambda\mathcal{N}M | \hat{W}_\lambda(\chi) | \lambda\mathcal{N}M \rangle = 0, \quad (36)$$

откуда следует, что значения χ , вообще говоря, различны для разных состояний экситона. Поскольку для оператора \hat{V}_λ принята аксиально-симметричная аппроксимация, интеграл по угловой переменной в (36) вычисляется тривиально, после чего остается однократный интеграл по радиальной переменной β , вычисление которого мы продемонстрируем для случая основного состояния экситона

$$\langle \lambda 0 0 \rangle = (2\pi)^{-1/2} (4\chi/a_\lambda) \exp(-2\chi\beta/a_\lambda). \quad (37)$$

Интеграл от первого слагаемого в (15) с функциями (37) вычисляется элементарно $\langle \lambda 0 0 | \chi e^2 / \beta | \lambda 0 0 \rangle = 4\chi^2 e^2 / a_\lambda$. Вычисление матричного элемента оператора (19) приводит к выражению

$$\langle \lambda 0 0 | \hat{V}_\lambda | \lambda 0 0 \rangle = \frac{\hbar^2 b_\lambda^2}{8m_0} \left(\frac{4\chi}{a_\lambda} \right)^4 \left[\ln \frac{1}{\chi} + A \right], \quad (38)$$

где $A = \ln(\pi a_\lambda/2a) - 3/4$, причем расходимость интеграла (38), появляющаяся вообще при $M = 0$, устраняется, как обычно, обрезанием интеграла в пространстве квазиимпульсов на верхнем пределе $k_m = \pi/a$. Матричный элемент оператора $U_{\lambda\lambda}(\beta)$ записывается как

$$\langle \lambda 0 0 | U_{\lambda\lambda} | \lambda 0 0 \rangle = -e^2 \int dz dz' |f_{sn}(z)|^2 \langle \lambda 0 0 | G(\beta; z, z') | \lambda 0 0 \rangle |f_{s'n'}(z')|^2, \quad (39)$$

поэтому с учетом того, что функция Грина (27) в каждом порядке по параметру ν имеет фактически одинаковую зависимость от поперечного радиус-вектора, удобно, как это, например, сделано в [7], определить универсальную функцию

$$F(\xi) = \xi \left\{ \frac{\pi}{2} [H_1(\xi) - Y_1(\xi)] - 1 \right\}, \quad (40)$$

причем, очевидно, что

$$\langle \lambda 0 0 | \frac{1}{\sqrt{\beta^2 + \eta^2}} | \lambda 0 0 \rangle = \frac{4\chi}{a_\lambda} F(|\xi|). \quad (41)$$

Здесь $\xi = 4\chi\eta/a_\lambda$, $Y_1(\xi)$ и $H_1(\xi)$ — функции Бесселя и Струве соответственно.

Для иллюстрации используемого метода рассмотрим вначале простейшую модельную ситуацию предельно сильной локализации электрона и дырки в некоторой (одной и той же) точке z_0 $|f_{sn}(z)|^2 = \delta(z - z_0)$, $|f_{s'n'}(z')|^2 = \delta(z' - z_0)$, причем $\varepsilon(z_0) = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon$. Тогда матричный элемент (39) в первом порядке по ε принимает вид

$$\langle \lambda 0 0 | U_{\lambda\lambda} | \lambda 0 0 \rangle = -\frac{4\chi e^2}{\varepsilon a_\lambda} \left\{ 1 - \nu \sum_p (-1)^p \operatorname{sgn}(d_p - z_0) F\left(\frac{8\chi|d_p - z_0|}{a_\lambda}\right) \right\}. \quad (42)$$

Ограничимся случаем одной КЯ, т.е. $N = 1$, и положим $d_0 = -d/2$, $d_1 = d/2$, $z_0 = 0$; тогда (42) еще более упрощается

$$\langle \lambda 0 0 | U_{\lambda\lambda} | \lambda 0 0 \rangle = -\frac{4\chi e^2}{\varepsilon a_\lambda} \left\{ 1 + 2\nu F\left(\frac{4\chi d}{a_\lambda}\right) \right\}. \quad (43)$$

Пусть ширина КЯ меньше или порядка экситонного боровского радиуса ($d \leq a_\lambda$). Поскольку, очевидно, при $\varepsilon_1, \varepsilon_2 \gg 1$ параметр $\chi \ll 1$, можно воспользоваться первыми двумя членами разложения (40) в ряд по ξ и представить (43) в виде

$$\langle \lambda 0 0 | U_{\lambda\lambda} | \lambda 0 0 \rangle \approx -\frac{4\chi e^2}{\varepsilon a_\lambda} \left\{ 1 + 2\nu - 2\nu \frac{4\chi d}{a_\lambda} \right\}, \quad (44)$$

после чего условие (36) принимает вид

$$\chi \left(1 + \frac{8\nu d}{\varepsilon a_\lambda} \right) - \frac{1 + 2\nu}{\varepsilon} + \frac{8\mu_\lambda}{m_0} \left(\frac{b_\lambda}{a_\lambda} \right)^2 \chi^3 (A - \ln \chi) = 0. \quad (45)$$

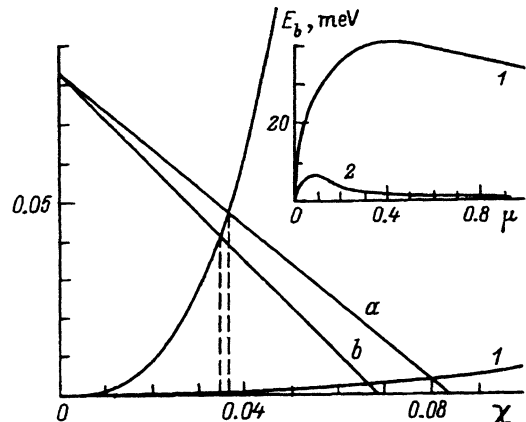


Рис. 3. Графическое решение уравнения (45).

Кривые 1 и 2 отвечают значениям параметра b_λ , равным 10^{-7} и 10^{-6} см соответственно. Прямые a и b соответствуют значениям приведенной эффективной массы экситона $0.01m_0$ и $0.1m_0$. На вставке — зависимость энергии связи экситона от его приведенной массы.

Значение χ^{-1} , полученное как решение уравнения (45), может быть истолковано как эффективная диэлектрическая проницаемость ГС, характеризующая взаимодействие электрона и дырки, образующих λ -экситон в основном состоянии. Из (45) также следует, что при увеличении эффективной массы экситона значение параметра χ уменьшается, и, следовательно, энергия связи экситона (34) является немонотонной функцией его приведенной эффективной массы, достигая максимума при некотором ее значении. Таким образом, учет слагаемого $\sim \chi^4$ в гамильтониане экситона естественным образом ограничивает величину энергии связи при существенном увеличении приведенной массы (возможно, очевидно, при отрицательных эффективных массах дырок), позволяя использовать для описания экситонов схему Ванье. На рис. 3 представлено графическое решение уравнения (45) и показан характер зависимости энергии связи экситона от его приведенной эффективной массы. Необходимо обратить внимание на то, что, несмотря на малость параметра ν в рассматриваемом случае ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$ (так, при $\chi = 0.34$ имеем $\nu = 3.88 \cdot 10^{-2}$), учет различия диэлектрических проницаемостей материалов КЯ и барьеров приводит к заметному вкладу в вычисляемое значение параметра χ и, следовательно, в энергию связи экситона. Кроме того, χ весьма сильно зависит от параметра b_λ , с помощью которого принимается в расчет непараболичность $2D$ -подзон размерного квантования электрона и дырки, образующих экситон. Хотя прямой связи между b_λ и приведенной массой экситона μ_λ , по-видимому, нет, и b_λ выступает как феноменологический параметр, определяемый в каждом конкретном случае из соответствующих законов дисперсии электронов и дырок, можно указать полезное соотношение, позволяющее легко оценить b_λ в случае дырочной подзоны с отрицательной эффективной массой, когда эффекты, связанные с непараболичностью, особенно велики. Обозначив k_0 положение минимума дырочной n -подзоны, из (20) можно получить значение $b_n = (m_0/2|m_n|)^{1/2}k_0^{-1}$; при относительно слабой непараболичности подзоны проводимости $b_\lambda \cong b_n$ и, следовательно, параметр b_λ может быть оценен по величине k_0 .

Для реалистического распределения электронной и дырочной плотности в соответствующих подзонах размерного квантования уравнение, подобное (45), в явном виде, разумеется, выписано быть не мо-

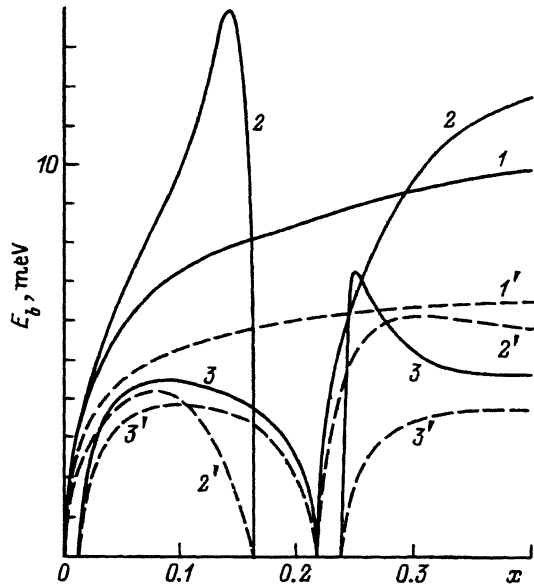


Рис. 4. Зависимость энергий связи HH1-C1-(1), LH1-C1-(2) и HH2-C1-экситонов (3) от концентрации x в ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$ (11-5-6).

Сплошные линии соответствуют значению $b_\lambda = 10^{-7}$ см, штриховые — 10^{-6} см.

жет. Однако использование функции (40), допускающей элементарное табулирование с любой необходимой точностью, позволяет достаточно просто решать уравнение (36) численно для любых ГС с конечным числом КЯ. Результаты численного решения уравнения (36), выполненного для представленных на рис. 2 ГС с двумя КЯ, показаны на рис. 4,5. 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 данными рис. 2, главным образом связано с характером дырочных возбуждений, в частности с возникновением подзон с отрицательными эф-

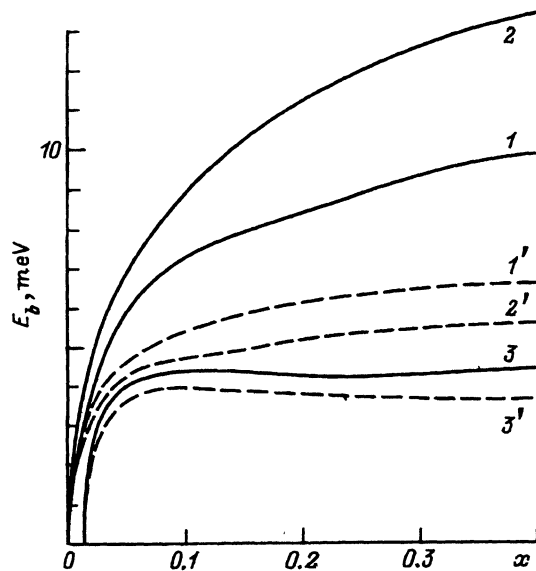


Рис. 5. Зависимость энергий связи HH1-C1-(1), LH1-C1-(2) и HH2-C1-экситонов (3) от концентрации x в ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$ (12-5-6).

Сплошные линии соответствуют значению $b_\lambda = 10^{-7}$ см, штриховые — 10^{-6} см.

фективными массами. Области концентраций на рис. 4, при которых отсутствуют экситоны ЛН1-С1 или НН2-С1, отвечают, очевидно, случаю отрицательной приведенной массы экситона. Напротив, резкое возрастание энергий связи этих экситонов (в особенности при малых b_λ) соответствует большим значениям приведенной массы, когда эффективная масса дырки $m_h < 0$, но $|m_h| \geq m_e$. Относительно малая величина энергии связи НН2-С1-экситона по сравнению с ЛН1-С1-экситоном обусловлена тем, что в случае НН2-С1-экситона дырка и электрон локализованы в основном в разных КЯ (рис. 1), тогда как дырка в подзоне ЛН1 и электрон в подзоне С1 локализованы в одной и той же (более широкой) КЯ.

При расчете энергий связи 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 $x \rightarrow 0$, т.е. при уменьшении глубины КЯ, точность расчетов, основанных на теории возмущений, снижается из-за возрастания роли состояний сплошного спектра. Поэтому при $x \rightarrow 0$ энергии связи НН1-С1- и ЛН1-С1-экситонов также стремятся к нулю, а не к значению энергии связи экситона в массивном GaAs (около 6 meV). Как видно из рис. 4 и 5, для экситонов, образованных глубокими подзонами электронов и дырок, вклад состояний сплошного спектра становится малосущественным начиная с концентрации $x \geq 0.05$.

5. Кулоновское смешивание экситонов

Наличие недиагональных элементов в гамильтониане (10) приводит к тому, что экситонные огибающие функции следует искать в виде линейных комбинаций огибающих нулевого приближения $|\lambda \mathcal{N} M\rangle \equiv \Phi_{\lambda \mathcal{N} M}^{(0)}(\beta)$, относящихся к различным парам подзон размерного квантования зоны проводимости и валентной зоны,

$$\Phi_{\alpha \lambda}(\beta) = \sum_{\lambda', \mathcal{N}, M} A_{\lambda \lambda'}^\alpha(\mathcal{N}, M) \varphi_{\lambda' \mathcal{N} M}^{(0)}(\beta). \quad (46)$$

Здесь набор квантовых чисел α нумерует различные огибающие и в конечном счете определяет тип экситона. Волновая функция α -экситона с квазиимпульсом $\mathbf{K} = 0$ в принятом здесь приближении ($f_{snk} \approx f_{sn}$) имеет вид

$$\Psi_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = S^{-1/2} \sum_\lambda \Phi_{\alpha \lambda}(\beta) f_{sn}(z) f_{s'n'}^*(z') u_{s0}(\mathbf{r}) u_{s'0}(\mathbf{r}'), \quad (47)$$

где, как и раньше, $\lambda \equiv \{s, n; s'n'\}$, u_{s0} и $u_{s'0}$ — блоховские амплитуды s -зоны проводимости и валентной s' -зоны. Таким образом, вид волновой функции (47) соответствует обычно используемому приближению эффективной массы [11,12].

Как уже отмечалось, недиагональные члены в уравнении (11) могут рассматриваться как возмущение, поэтому их роль становится существенной, если два (или более) невозмущенных энергетических уровня

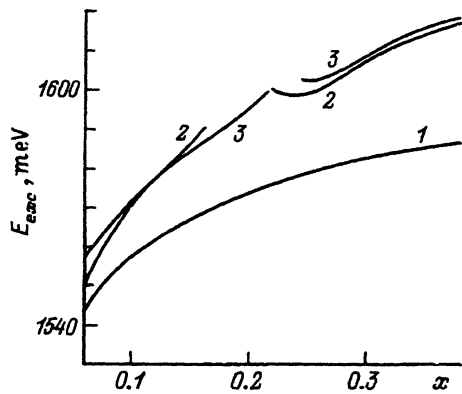


Рис. 6. Энергии возбуждения HH1-C1 (1), LH1-C1 (2) и HH2-C1 -экситонов (3) в ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ (11-5-6) в зависимости от концентрации Al.

(34) при различных λ имеют близкие значения. В относительно простых ГС с туннельно прозрачными барьерами близкими по энергии могут, например, оказаться состояния LH1-C1 - и HH2-C1 -экситонов, как это показано на рис. 6. В частности, при некоторых значениях концентрации x может даже иметь место пересечение соответствующих уровней (именно такой случай для главного квантового числа $\mathcal{N} = 0$ и показан на рис. 6). В этом случае (при x вблизи точки пересечения) основной вклад в (46) вносят состояния именно LH1-C1 - и HH2-C1 -экситонов (соответствующие коэффициенты в (46) близки к $1/2$), а изменение положения энергетических уровней определяется матричным элементом оператора кулоновского взаимодействия (8), вычисленным между огибающими нулевого приближения LH1-C1 - и HH2-C1 -экситонов. Подобная проблема кулоновского смешивания экситонов уже неоднократно обсуждалась [11,12,18] для ГС с одной КЯ; в частности, утверждается [12], что кулоновское смешивание экситонов в этом случае может приводить к заметному вкладу в энергии связи экситонов. Далее мы приведем аргументы в пользу того, что по крайней мере для асимметричных ГС с несколькими КЯ этот эффект, как правило, мал, и его учет при вычислении энергий связи экситонов выходит за пределы точности обычно делаемых приближений.

Прежде всего очевидно, что в использовавшемся здесь приближении $f_{snk} \cong f_{sn}$ кулоновские матричные элементы между состояниями LH1-C1 - и HH2-C1 -экситонов равны нулю тождественно, что уже отмечалось выше. Поэтому смешивание дырочных состояний LH1 и HH2 необходимо явно учесть не только в законе дисперсии, но и в огибающих. Пусть концентрация x близка к значению, соответствующему пересечению термов LH1 и HH2 (рис. 2); тогда вклады обоих дырочных состояний в огибающие примерно одинаковы (в противоположном случае достаточно удаленных термов, рассматривая недиагональные элементы гамильтониана Латтинджера (16) как возмущение, можно показать, что их матричные элементы между состояниями LH1 и HH2 малы в силу того, что эти состояния локализованы в основном в разных КЯ, как это видно из рис. 1). Величина относительного смещения термов LH1 и HH2 определяется модулем матричного элемента оператора (8) между состояниями с $\lambda = \{\text{C1; LH1}\}$ и $\lambda_1 = \{\text{C1; HH2}\}$, т.е. в (9) следует положить $sn = s_1n_1 = \text{C1}$, $s'n' = \text{LH1}$, $s'_1n'_1 = \text{HH2}$. В результате в асимметричных ГС, подобным рассмотренным выше ГС с двумя КЯ, соот-

ветствующий матричный элемент оказывается весьма малым в силу малости перекрытия дырочных огибающих $LN1$ и $HN2$. По-видимому, эффект кулоновского смешивания $LN1-C1$ и $HN2-C1$ экситонов невелик и в случае ГС с относительно равномерным распределением дырочной плотности, поскольку $LN1$ -огибающая узлов не имеет, тогда как $HN2$ -огибающая имеет один узел.

При рассмотрении достаточно сложных ГС, состоящих из нескольких КЯ и барьеров произвольной ширины и высоты, предлагаемый метод расчета экситонных спектров позволяет принимать во внимание многие факторы, влияющие на энергетический спектр и квантовые состояния экситонов. К важнейшим из них, несомненно, следует отнести сильную непараболичность $2D$ -подзон размерного квантования (особенно дырочных), влияние проникновения электронных и дырочных огибающих в области барьеров на поперечные эффективные массы $2D$ -электронов и дырок, а также различие в диэлектрических проницаемостях материалов КЯ и барьеров. Последний эффект, несмотря на относительную малость для $Al_xGa_{1-x}As-GaAs$, приводит тем не менее к заметному вкладу в энергии связи экситонов. Величинами электронных и дырочных эффективных масс в значительной степени определяются не только значения энергий связи, но и их концентрационные зависимости, в том числе и области концентраций, в которых могут существовать экситоны разных типов. Для некоторых типов экситонов, таких как $LN1-C1$ или $HN2-C1$, величина энергии связи в определенных интервалах концентрации может весьма сильно зависеть от характера непараболичности соответствующих дырочных подзон, приводя к аномально большим значениям [27]; следует, однако, отметить, что при этом энергия связи чрезвычайно сильно зависит от концентрации (рис. 4), что, по-видимому, делает проблематичной самую возможность наблюдения таких аномальных экситонов. Сравнительно слабое кулоновское смешивание экситонов по крайней мере в асимметричных ГС с туннельно прозрачными барьерами позволяет сделать вывод о том, что $2D$ -классификация экситонов при помощи набора квантовых чисел $\{\lambda, N, M\}$ является удовлетворительной, а сами экситоны не только по характеру трансляционного движения, но и по внутренней структуре можно рассматривать как $2D$ -квазичастицы, естественно, при условии, что расстояния между соответствующими подзонами размерного квантования для электронов и дырок превышают величины энергий связи экситонов. Подобная ситуация реализуется, если размеры КЯ и барьеров не превышают нескольких (≈ 10) межатомных расстояний, а концентрация Al в ГС $Al_xGa_{1-x}As-GaAs$ $x \geq 0.05$. Следует также отметить, что сравнительно простой метод расчета энергий связи экситонов в КЯ, предложенный в [28] и основанный на рассмотрении экситонов в пространстве дробной размерности, оказывается недостаточно эффективным для ГС с аномальной концентрационной зависимостью экситонных спектров, подобных представленным на рис. 4, 7.

Общий характер энергетического спектра и огибающих функций f_{snk} одночастичных возбуждений позволяет сделать весьма определенные выводы и об особенностях экситонного спектра каждой конкретной ГС с тем, чтобы далее применить используемую здесь вычислительную процедуру для расчета спектров наиболее интересных в отноше-

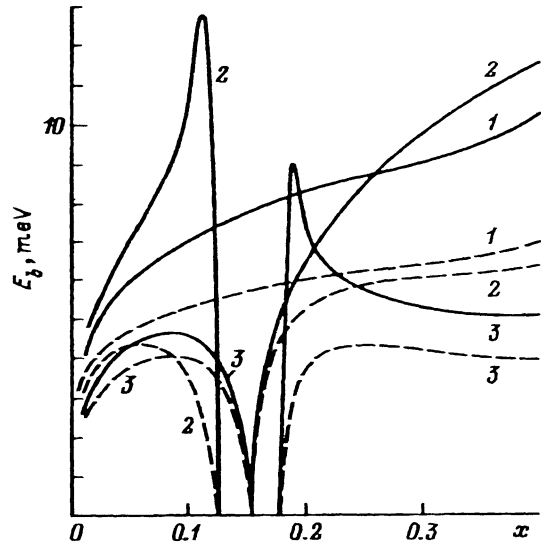


Рис. 7. Зависимость энергий связи HH1-C1- (1), LH1-C1- (2) и HH2-C1-экситонов (3) от концентрации x в ГС $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$ (10-4-6-8-4). Сплошные линии соответствуют значению $b_\lambda = 10^{-7}$ см, штриховые — 10^{-6} см.

нии оптических свойств структур. Объем вычислений с ростом числа КЯ, естественно, возрастает, но эффективность вычислительной методики не вызывает сомнений, по крайней мере для ГС с числом КЯ $N \leq 10$. На рис. 7 представлена концентрационная зависимость экситонных спектров (показаны только основные состояния HH1-C1-, LH1-C1- и HH2-C1-экситонов) в ГС с тремя КЯ (10-4-6-8-4), подобранной таким образом, чтобы обеспечить «экзотический» характер зависимости спектров от концентрации x , как и в случае ГС с двумя КЯ, представленном на рис. 4.

При всех расчетах предполагалось, что внешние барьерные слои заполняют полупространства и электростатический потенциал взаимодействия электрона и дырки обращается в нуль на бесконечности. Учет конечной толщины внешних барьеров и, следовательно, изменения граничных условий может повлиять на величины энергий связи экситонов, как это отмечалось, например, в [29]. Поэтому внешнее электрическое поле, приложенное к ГС вдоль ее оси, может оказаться эффективным управляющим фактором, позволяющим в некоторых случаях существенно изменять экситонные спектры ГС с несколькими КЯ.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований и МНТП России «Физика твердотельных наноструктур».

Список литературы

- [1] Sirtori C., Capasso F., Sivco D.L., Cho A.Y. Phys. Rev. Lett. **68**, 9, 1010 (1992).
- [2] Weisbuch G., Miller R.C., Dingle R., Gossard A.C., Wiegmann W. Solid State Commun. **37**, 2, 219 (1981).
- [3] Dingle R., Wiegmann W., Henry C.H. Phys. Rev. Lett. **33**, 7, 827 (1974).
- [4] Chang Y.-C., Schulman J.N. Appl. Phys. Lett. **43**, 4, 536 (1983).
- [5] Altarelli M., Ekenberg U., Fasolino A. Phys. Rev. **B32**, 8, 5138 (1985).
- [6] Келдыш Л.В. Письма в ЖЭТФ **29**, 11, 716 (1979).
- [7] Чаплик А.В., Энтин М.В. ЖЭТФ **61**, 6(12), 2496 (1971).
- [8] Whittaker D.M., Elliott R.J. Solid State Commun. **68**, 1, 1 (1988).

- [9] Kumagai M., Takagahara T. Phys. Rev. **B40**, 18, 12359 (1989).
- [10] Wendler L., Hartwig B. J. Phys.: Cond. Matter. **3**, 19, 9907 (1991).
- [11] Bauer G.E.W., Ando T. Phys. Rev. **B36**, 9, 6015 (1988).
- [12] Andreani L.C., Pasquarello A. Phys. Rev. **B42**, 14, 8928 (1990).
- [13] Altarelli M. Excitons in Confined Systems / Ed. R. Del Sole, A.D'Andrea, A.Lapicciarella. Springer Proc. in Physics. Springer-Verlag, Berlin etc. (1988). V. 15. P. 170.
- [14] Chang Y.-C., Sanders G.D., Ting D.Z.-Y. Excitons in Confined Systems / Ed. R. Del Sole, A.D'Andrea, A.Lapicciarella. Springer Proc. in Physics. Springer-Verlag, Berlin etc. (1988). V. 25. P. 159.
- [15] Нокс Р. Теория экситонов. М. (1966). 219 с.
- [16] Chang Y.C., Sanders G.D., Chu H.Y. Excitons in Confined Systems / Ed. R. Del Sole, A.D'Andrea, A.Lapicciarella. Springer Proc. in Physics. Springer-Verlag, Berlin etc. (1988). V. 25. P. 189.
- [17] Lee Y.C., Mei W.N., Lin K.C. J. Phys. **C15**, 23, L469 (1982).
- [18] Ekenberg U., Altarelli M. Phys. Rev. **B35**, 10, 7585 (1987).
- [19] Dingle R. Festkörperprobleme (Adv. in Solid State Physics) / Ed. H.J.Queisser Pergamon / Vieweg. Braunschweig (1975). V. 15. P. 21.
- [20] Miller R.C., Kleinman D.A., Gossard A.C. Phys. Rev. **29**, 10, 7085 (1984).
- [21] Fu Y., Chao K.A. Phys. Rev. **B43**, 15, 12626 (1991).
- [22] Broido D.A., Sham L.J. Phys. Rev. **B34**, 6, 3917 (1986).
- [23] Rössler U. Solid State Commun. **49**, 10, 943 (1984).
- [24] Ekenberg U. Phys. Rev. **B40**, 11, 7714 (1989).
- [25] Landolt-Börnstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology / Ed. O.Madelung. Springer Berlin (1982). Ch. III. V. 17.
- [26] Luttinger J.M. Phys. Rev. **102**, 3, 1030 (1956).
- [27] Belyavsky V.I., Капаев V.V., Копяев Yu.V., Pavlov S.T., Shevtsov S.V. Phys. Low-Dim. Struct. **4/5**, 19 (1994).
- [28] Mathieu H., Lefebvre P., Christol P. Phys. Rev. **B46**, 7, 4092 (1992).
- [29] Берил С.И., Покатиллов Е.П., Фомин В.М., Погорилко Г.А. ФТП **19**, 3, 412 (1985).