

Локализация экситонов на островках в структурах с квантовыми ямами

© Л.Е. Голуб

Физико-технический институт им А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 25 апреля 1997 г.)

Теоретически исследована локализация экситона на островках цилиндрической формы в структурах с квантовыми ямами. Показано, что, как правило, экситон на таких островках локализуется как целое. Выявлены области применимости адиабатического приближения при факторизации экситонной волновой функции. Проанализировано изменение характера локализации при увеличении высот барьеров квантовой ямы.

1. В последние годы проводится много экспериментальных и теоретических исследований нульмерных гетероструктур. Хорошо известны успехи в технологии, связанные с самоорганизующимися системами [1]. Низкотемпературная фотолуминесценция подобных структур обусловлена излучательной рекомбинацией экситонов, локализованных на неоднородностях гетероструктурного потенциала. Это позволяет экспериментально характеризовать состояние интерфейсов квантовой ямы и делать выводы о флуктуациях состава [2,3].

Теоретически задача о расчете состояний экситона в подобных структурах является довольно сложной из-за необходимости одновременного учета гетероструктурного и кулоновского потенциалов. Существуют работы [4–6], посвященные численным расчетам энергии экситона. В них изначально делаются предположения о характере его локализации, и волновая функция берется в конкретных факторизованных формах.

В данной работе рассчитывается основное состояние экситона на островке цилиндрической формы в структурах с квантовыми ямами. С помощью различных факторизаций волновой функции исследуется характер его локализации. Рассчитывается изменение энергии экситона в зависимости от параметров структуры: радиуса и высоты островка и от величины барьеров квантовой ямы.

2. Рассмотрим островок цилиндрической формы в структуре с квантовыми ямами (рис. 1). Гамильтониан экситона, локализованного на таком островке, имеет вид

$$\hat{H}_{\text{exc}} = \hat{T}_e + \hat{T}_h + V_e(\mathbf{r}_e) + V_h(\mathbf{r}_h) + V_C(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h). \quad (1)$$

Здесь \hat{T}_α ($\alpha = e, h$) — оператор кинетической энергии электрона или дырки,

$$\hat{T}_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m_\alpha^\parallel} \frac{1}{\rho_\alpha} \frac{\partial}{\partial \rho_\alpha} \left(\rho_\alpha \frac{\partial}{\partial \rho_\alpha} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_\alpha^z} \frac{\partial^2}{\partial z_\alpha^2},$$

гетероструктурный потенциал

$$V_\alpha(\mathbf{r}) = -V_\alpha \Theta\left(\frac{a}{2} - |z|\right) - V_\alpha \Theta\left(z - \frac{a}{2}\right) \times \Theta\left(\frac{a}{2} + h - z\right) \Theta(R - \rho), \quad (2)$$

$$V_C(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = -\frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}, \quad (3)$$

где z и ρ — проекции радиус-вектора частицы \mathbf{r} соответственно на ось роста и на плоскость, перпендикулярную

этой оси, V_α — разрывы зоны проводимости и валентной зоны, m_α^\parallel и m_α^z — массы частиц для движения в плоскости и вдоль оси z , $\Theta(x)$ — функция Хэвисайда, e — заряд электрона, ε — диэлектрическая постоянная. Точка $z = 0$ выбрана посередине идеальной ямы, а $\rho = 0$ — в центре островка.

Гамильтониан (1) зависит от четырех координат и угла β , характеризующего азимутальное движение в плоскости квантовой ямы. В качестве таких координат могут быть выбраны, например, ρ_e, ρ_h, z_e и z_h , а β в этом случае — угол между векторами ρ_e и ρ_h .

Огибающая волновой функции экситона Ψ_{exc} также зависит от пяти переменных, и ее нахождение представляет большие вычислительные сложности. Необходимо сделать какие-либо упрощающие предположения относительно ее вида. Поэтому в данной работе при расчете основного состояния экситона функция Ψ_{exc} предполагалась независимой от угла β . Кроме того, она представлялась в различных факторизованных формах

$$\Psi_{\text{exc}} = \psi_1(\xi_1, \zeta_1)\psi_2(\xi_2, \zeta_2), \quad (4)$$

где ξ_i и ζ_i ($i = 1, 2$) — какие-либо скалярные координаты, характеризующие движение экситона (например, ρ_e, ρ_h, z_e и z_h). Поскольку ищется локализованное состояние, $\psi_{1,2}$ предполагаются вещественными.

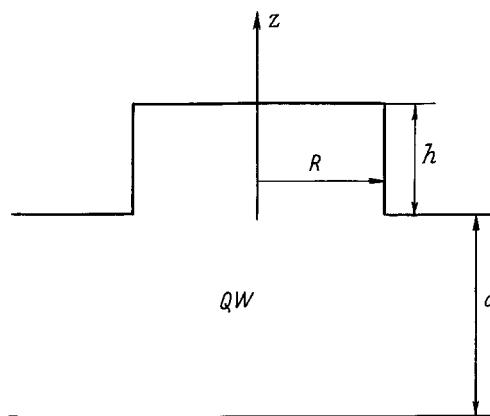


Рис. 1. Схематическое изображение изучаемой структуры. z — ось роста, a — ширина квантовой ямы, R — радиус островка, h — его высота.

Для удобства введем двухкомпонентные векторы

$$\mathbf{x}_i \equiv (\xi_i, \zeta_i) \quad (i = 1, 2).$$

Выражая координаты электрона и дырки в (1) через \mathbf{x}_1 , \mathbf{x}_2 и β , домножая получившийся оператор слева и справа на $\psi_j(\mathbf{x}_j)$ и интегрируя по \mathbf{x}_j и β , получим уравнение для функции ψ_i ($i \neq j$)

$$[\hat{T}_i + V_i(\mathbf{x}_i)] \psi_i(\mathbf{x}_i) = E_i \psi_i(\mathbf{x}_i). \quad (5)$$

Здесь

$$V_i(\mathbf{x}_i) = \int d\beta d\mathbf{x}_j (V_e + V_h + V_C) \psi_j^2(\mathbf{x}_j),$$

$$\hat{T}_i = -\frac{\hbar^2}{2M_i} \Delta_{\xi_i} - \frac{\hbar^2}{2\mu_i} \Delta_{\zeta_i}$$

— оператор кинетической энергии с массами M_i и μ_i , зависящими от выбора координат, и операторами Лапласа, дифференцирующими по ξ_i и ζ_i .

Энергия экситона равна

$$E_{\text{exc}} = E_1 + E_2 - E', \quad (6)$$

где

$$E' = \int d\mathbf{x}_1 V_1(\mathbf{x}_1) \psi_1^2(\mathbf{x}_1) = \int d\mathbf{x}_2 V_2(\mathbf{x}_2) \psi_2^2(\mathbf{x}_2).$$

Для расчетов были выбраны три различных способа факторизации функции Ψ_{exc} .

1) Движение электрона и дырки по отдельности, когда

$$\Psi_{\text{exc}} = \psi_e(\rho_e, z_e) \psi_h(\rho_h, z_h), \quad (7)$$

т. е.

$$\begin{aligned} M_1 &= m_e^{\parallel}, \quad \mu_1 = m_e^{\bar{z}}, \quad M_2 = m_h^{\parallel}, \quad \mu_2 = m_h^{\bar{z}}, \\ \xi_1 &= \rho_e, \quad \zeta_1 = z_e, \quad \xi_2 = \rho_h, \quad \zeta_2 = z_h, \\ \Delta_{\xi_i} &= \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\xi_i \frac{\partial}{\partial \xi_i} \right), \quad \Delta_{\zeta_i} = \frac{\partial^2}{\partial \zeta_i^2}. \end{aligned}$$

2) Движение центра масс и относительное движение.

В этом случае

$$\Psi_{\text{exc}} = \psi_c(R_c, Z_c) \psi_{\text{rel}}(\rho, z), \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_c &= \frac{m_e^{\parallel} \boldsymbol{\rho}_e + m_h^{\parallel} \boldsymbol{\rho}_h}{m_e^{\parallel} + m_h^{\parallel}}, \quad Z_c = \frac{m_e^{\bar{z}} z_e + m_h^{\bar{z}} z_h}{m_e^{\bar{z}} + m_h^{\bar{z}}}, \\ \boldsymbol{\rho} &= \boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h, \quad z = z_e - z_h, \\ M_1 &= m_e^{\parallel} + m_h^{\parallel}, \quad \mu_1 = m_e^{\bar{z}} + m_h^{\bar{z}}, \end{aligned}$$

$$M_2 = m_e^{\parallel} m_h^{\parallel} / (m_e^{\parallel} + m_h^{\parallel}), \quad \mu_2 = (m_e^{\bar{z}} m_h^{\bar{z}}) / (m_e^{\bar{z}} + m_h^{\bar{z}}).$$

3) Раздельное движение в плоскости ямы и вдоль оси z :

$$\Psi_{\text{exc}} = \psi_{\parallel}(R_c, \rho) \psi_z(z_e, z_h),$$

$$M_1 = m_e^{\parallel} + m_h^{\parallel}, \quad \mu_1 = m_e^{\parallel} m_h^{\parallel} / (m_e^{\parallel} + m_h^{\parallel}),$$

$$M_2 = m_e^{\bar{z}}, \quad \mu_2 = m_h^{\bar{z}}. \quad (9)$$

Для нахождения собственных состояний и энергий экситона мы использовали так называемый метод свободной релаксации [7–9], позволяющий решать двумерные дифференциальные уравнения. После выбора вида факторизации задача решается следующим образом: уравнение Шредингера решается для функции $\psi_1(\mathbf{x})$, после этого ищется новый потенциал $V_2(\mathbf{x})$ и соответствующее решение $\psi_2(\mathbf{x})$, затем $V_1(\mathbf{x})$ и так далее. Эта процедура продолжается до достижения сходимости.

3. В ряде работ, посвященных локализованным экситонам, авторы используют адиабатическое приближение и выбирают волновую функцию в следующем виде (см., например, [10]):

$$\Psi_{\text{exc}} = u_e(z_e) u_h(z_h) \Phi_{\parallel}(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h). \quad (10)$$

Здесь $u_{\alpha}(z)$ — функции размерного квантования электрона и дырки в идеальной яме ширины a , а Φ_{\parallel} — решение уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H}_{\parallel} = \hat{T}_{e\parallel} + \hat{T}_{h\parallel} + \bar{V}_e(\rho_e) + \bar{V}_h(\rho_h) + \bar{V}_C(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h). \quad (11)$$

Здесь $\hat{T}_{\alpha\parallel}$ — оператор кинетической энергии при движении электрона или дырки в плоскости,

$$\hat{T}_{\alpha\parallel} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\alpha}^{\parallel}} \frac{1}{\rho_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial \rho_{\alpha}} \left(\rho_{\alpha} \frac{\partial}{\partial \rho_{\alpha}} \right),$$

а черта означает усреднение потенциалов (2) и (3) вдоль оси z :

$$\bar{V}_{\alpha}(\rho) = E_{\alpha} - \mathcal{V}_{\alpha} \Theta(R - \rho) \int_{a/2}^{a/2+h} dz u_{\alpha}^2(z), \quad (12)$$

$$\bar{V}_C(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) = -\frac{e^2}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dz_e dz_h \frac{u_e^2(z_e) u_h^2(z_h)}{\sqrt{|\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h|^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (13)$$

(E_{α} — энергии размерного квантования носителей в идеальной яме ширины a).

Для сравнения с описанным выше методом мы также рассчитали основное состояние локализованного экситона в адиабатическом приближении. При этом, поскольку гамильтониан (11) зависит от трех переменных (например, ρ_e , ρ_h и β) и они не разделяются, волновая функция движения экситона в плоскости выбиралась в различных пробных формах: 1) раздельное квантование носителей, т. е.

$$\Phi_{\parallel} = \phi_e(\rho_e) \phi_h(\rho_h); \quad (14)$$

2) разделение переменных центра масс и относительного движения:

$$\Phi_{\parallel} = \phi(R_c) f(\rho); \quad (15)$$

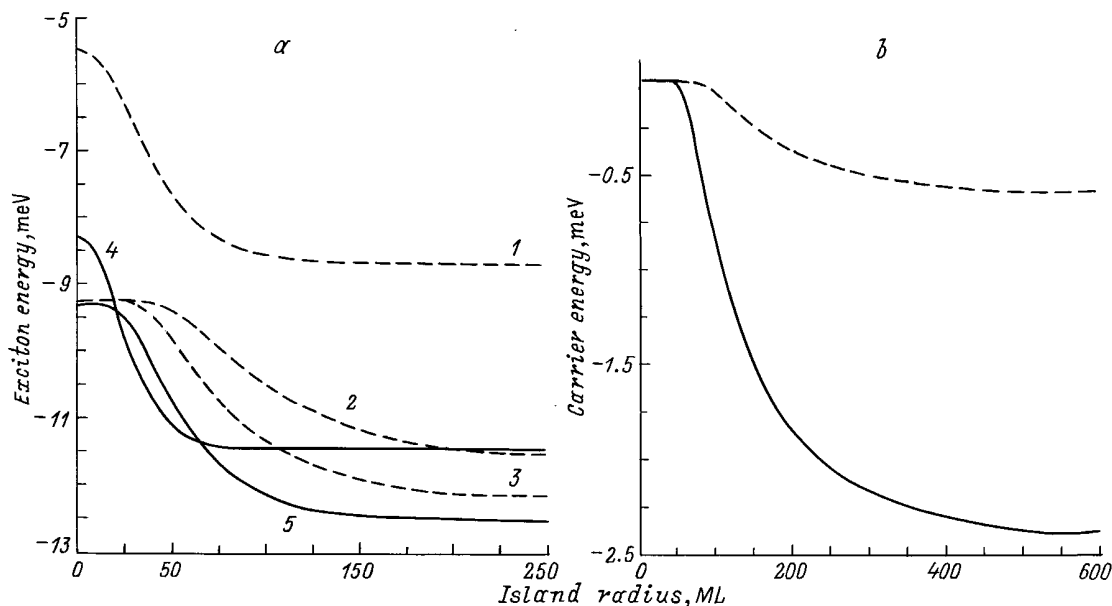


Рис. 2. *a)* Зависимости энергии экситона, локализованного на островке, от его радиуса. $a = 25$ монослоев, $h = 1$ монослой. Штриховые кривые 1–3 рассчитаны соответственно по формулам (14)–(16), а сплошные кривые 4, 5 — формулам (7), (9). Энергия отсчитана от $E_e + E_h$. *b)* Зависимость энергии электронов (сплошная кривая) и дырок (штриховая кривая) от радиуса островка. $a = 25$ монослоев, $h = 1$ монослой. За уровень отсчета энергии выбран уровень размерного квантования носителя в идеальной яме ширины a .

3) электрон, связанный на локализованной дырке:

$$\Phi_{||} = \phi(\rho_h)f(\rho). \quad (16)$$

Характер локализации экситона определяется из сопоставления значений его энергии, рассчитанных при различных факторизациях. Наилучшим является приближение, дающее наименьшее значение E_{exc} .

4. На рис. 2, *a* представлены зависимости энергии экситона, локализованного на островке высоты $h = 1$ монослой (2.83 \AA) в яме ширины $a = 25$ монослоев, от радиуса островка. За нуль выбрана сумма энергий размерного квантования электрона и дырки в квантовой яме ширины a , $E_e + E_h$. Кривые 1–3 (штриховые линии) рассчитаны в адиабатическом приближении соответственно по формулам (14)–(16), а сплошные кривые 4 и 5 — методом свободной релаксации при факторизациях (7) и (9). Факторизация (8) дает сильно завышенные значения энергии и соответствующую кривую мы не приводим. Параметры, использованные при расчете, соответствуют структуре GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As: $\mathcal{V}_e = 250 \text{ meV}$, $\mathcal{V}_h = 167 \text{ meV}$, $\varepsilon = 12.5$. Массы частиц в материалах ямы и барьера для простоты здесь и далее предполагаются одинаковыми: $m_e^z = 0.067m_0$, $m_h^z = 0.45m_0$, $m_e^{||} = m_e^z$, $m_h^{||} = 0.15m_0$ (m_0 — масса свободного электрона).

Видно, что для исследуемых модельных гетероструктур описание квантования экситона в виде электронной и дырочной индивидуальной локализации является неудовлетворительной аппроксимацией: кривая 3 лежит ниже кривой 1, а кривая 5 (почти при всех R) ниже кривой 4.

Наоборот, локализацию на цилиндрическом островке можно рассматривать в виде "пиннинга" экситона как целого. При промежуточных значениях R , меньших квазидвумерного боровского радиуса, факторизация (7) оказывается более справедливой, чем факторизация (9), но при $R \rightarrow 0$ она опять неудовлетворительна, так как при описании квантования экситона как раздельного движения носителей нельзя получить правильное значение энергии связи в идеальной яме ширины a .

Из сравнения кривых 1 и 4, 3 и 5, рассчитанных в эквивалентных аппроксимациях, видны недостатки адиабатического приближения. Однако при $R > 100$ монослоев кривая 3 лежит ниже кривой 4. Отсюда следует, что самым важным при расчете экситонных состояний является выбор аргументов волновой функции, после чего уже можно использовать и адиабатическое приближение. Факторизация (15) оказывается более точной, чем (7), и при $R = 0$.

Для свободных носителей задача о квантовании на островке цилиндрической формы может быть решена способом, приведенным в [11], в которой решалась подобная задача о квантовых нитях. При этом волновая функция частицы ищется в виде

$$\psi_{\alpha}(\mathbf{r}_{\alpha}) = f_{\alpha}(z_{\alpha})\phi_{\alpha}(\rho_{\alpha}) \quad (17)$$

(зависимость от направления ρ в плоскости ямы не рассматривается, так как ищется основное, симметричное, состояние).

На рис. 2, *b* приведена зависимость энергии электронов (сплошная линия) и дырок (штриховая линия) от радиуса островка. Его высота h равна 1 монослою,

$a = 25$ монослоев. За уровень отсчета энергии выбран уровень размерного квантования носителя в идеальной яме ширины a .

Видно, что электронная энергия локализации больше, чем дырочная. Это объясняется тем, что энергия размерного квантования в яме ширины a у электрона больше, и поэтому ее абсолютное изменение при уширении ямы до $a + h$ также оказывается большим.

Заметим, что в адиабатическом приближении в качестве функций $u_\alpha(z)$ могут быть выбраны также и функции размерного квантования в идеальной яме ширины $a + h$. Расчет показывает, что это приближение дает еще меньшее значение энергии, причем начиная уже с малых R . Выбор в качестве $u_\alpha(z)$ функций размерного квантования в яме ширины a оказывается справедливым для данной структуры только при $R < 30$ монослоев.

На рис. 3 представлены результаты расчетов энергии экситона при аппроксимациях (7) (сплошные линии) и (9) (штриховые линии) для различных высот островка h . Ширина ямы $a = 25$ монослоев. Видно, что качественная картина экситонной локализации на монослойных флуктуациях интерфейсов квантовой ямы сохраняется и при увеличении высоты островка h .

Для гетеросистем с большими разрывами зон, например для GaAs/AlAs, мы должны наблюдать изменение характера локализации, а именно переход от квантования экситона как целого к одночастичной локализации. Этот вывод подтверждается расчетом, приведенным на рис. 4. Вычисления проводились для $h = 10$ монослоев, $a = 25$ монослоев, $\mathcal{V}_e = 1.1$ eV, $\mathcal{V}_h = 0.55$ eV.

Данный переход также может наблюдаться в структурах с $a \rightarrow 0$, в которых формируется хорошо опре-

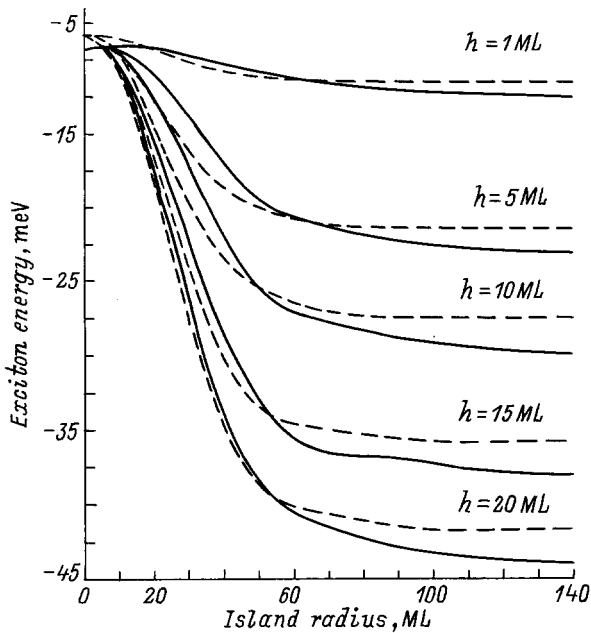


Рис. 3. Результаты расчетов энергии экситона при аппроксимациях (7) (сплошные кривые) и (9) (штриховые кривые) для различных высот островка h . Ширина ямы $a = 25$ монослоев. Энергия отсчитана от $E_e + E_h$.

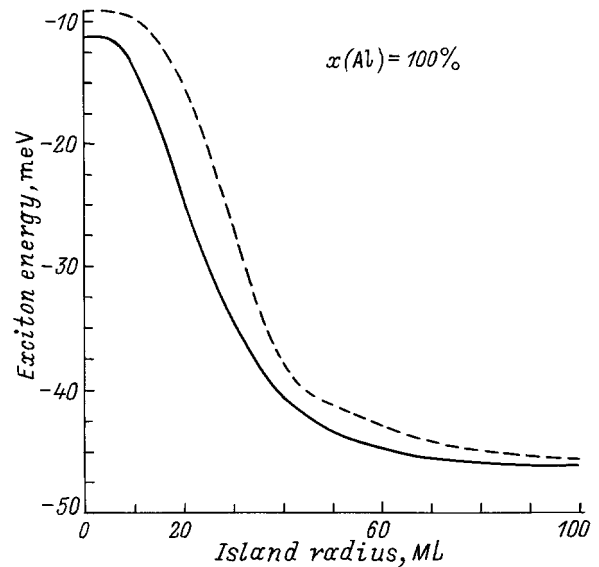


Рис. 4. Зависимости энергии локализованного экситона от радиуса островка, рассчитанные для структуры GaAs/AlAs при факторизациях (7) (штриховая кривая) и (9) (сплошная кривая). $a = 25$ монослоев, $h = 10$ монослоев. Энергия отсчитывается от $E_e + E_h$.

деленная квантовая точка. При этом адиабатическое приближение (14), использованное в работе [5] для расчета энергии экситона в квантовых точках, должно быть справедливым.

Автор благодарен А.А. Киселеву за полезные обсуждения и Е.Л. Ивченко за критические замечания при чтении рукописи.

Работа была поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 96-02-17849a) и Фондом Фольксвагена (Volkswagen Foundation).

Список литературы

- [1] M. Grundmann, J. Christen, N.N. Ledentsov, J. Böhrer, D. Bimberg, S.S. Rovimov, P. Werner, U. Richter, U. Gösele, J. Heydenreich, V.M. Ustinov, A.Yu.Egorov, A.E. Zhukov, P.S. Kop'ev, Zh.I. Alferov. Phys. Rev. Lett. **74**, 4043 (1995).
- [2] J. Hegarty, M.D. Sturge. J. Opt. Soc. Am. **B2**, 1143 (1985).
- [3] J. Christen, D. Bimberg. Phys. Rev. **B42**, 7213 (1990).
- [4] J.Y. Marzin, J.M. Gérard, A. Izrael, D. Barrier, G. Bastard. Phys. Rev. Lett. **73**, 716 (1994).
- [5] Ph. Lelong, G. Bastard. Solid State Commun. **98**, 819 (1996).
- [6] M. Grundmann, N.N. Ledentsov, O. Stier, J. Böhrer, D. Bimberg, V.M. Ustinov, P.S. Kop'ev, Zh.I. Alferov. Phys. Rev. **B53**, R10509 (1996).
- [7] A.A. Kiselev, U. Rössler. Phys. Rev. **B50**, 14283 (1994).
- [8] A.A. Kiselev, U. Rössler. Semicond. Sci. Technol. **11**, 203 (1996).
- [9] Л.Е. Голуб, А.А. Киселев. Proc. 23th Int. Symp. on Compound Semiconductors. St. Petersburg (1996), in print.
- [10] G. Bastard, C. Delalande, M.H. Meynadier, P.M. Frijlink, M. Voos. Phys. Rev. **B29**, 7042 (1984).
- [11] J.Y. Marzin, G. Bastard. Solid State Commun. **91**, 39 (1991).