03,04

Энергия относительного движения электрона и дырки в экситоне во внешнем электрическом поле в пластине GaAs

© Д.К. Логинов¹, А.В. Донец²

 ¹ Лаборатория оптики спина им. И.Н. Уральцева, Санкт-Петербургский государственный университет, Петергоф, Россия
 ² Санкт-Петербургский государственный университет, Петергоф, Россия

E-mail: loginov999@gmail.com

Поступила в Редакцию 2 мая 2022 г. В окончательной редакции 24 июня 2022 г. Принята к публикации 2 июля 2022 г.

> Теоретически рассчитана зависимость энергии относительного движения электрона и дырки в экситоне от величины приложенного электрического поля для различных толщин идеальной плоской полупроводниковой пластины. Показано, что вариация толщины пластины существенно влияет на зависимость этой энергии от электрического поля. Эффект должен наблюдаться в пластинах, толщина которых на два десятичных порядка превосходит боровский радиус экситона.

Ключевые слова: экситон, электрическое поле, полупроводниковые пластины.

DOI: 10.21883/FTT.2022.11.53317.303

1. Введение

Экситонные состояния в полупроводниковых слоистых гетероструктурах, таких как квантовые ямы (КЯ), к настоящему времени широко исследованы методами оптической спектроскопии [1–3]. Влияние толщины слоя КЯ на экситонные состояния выражается в размерном квантовании энергии экситона. Если ширина КЯ на порядок превосходит боровский радиус экситона (т. н. широкие ямы), то происходит размерное квантование движения экситона как целого [4–13]. В случае, если ширина КЯ сопоставима либо меньше боровского радиуса (т. н. узкие ямы), ограничение размеров ямы сказывается на относительном движении электрона и дырки в экситоне, см., например, [14–17].

Внешние поля, приложенные к КЯ, приводят к дополнительным эффектам. Например, в узких и широких КЯ одноосное давление приводит к монотонному росту энергии связи экситона [18], к энергетическому сдвигу уровней размерного квантования экситона [19,20], эффекту сближения масс экситонов тяжелой и легкой дырок и инверсии фазы экситонных особенностей в оптических спектрах [21,22]. Магнитное поле, приложенное в геометрии Фогта, приводит к эффективному увеличению массы экситона [23–30]. В геометрии Фарадея наблюдается эффект зависимости экситонного g-фактора от волнового вектора экситона [31–35].

Настоящая работа посвящена исследованию влияния электрического поля на состояния относительного движения электрона и дырки в экситоне в толстых слоях GaAs. Большая часть работ, опубликованных ранее, посвящена исследованию влияния электрического поля на экситон в узких КЯ. В таких ямах электрическое поле приводит к квантовому эффекту Штарка, см., например, [36–44]. Последние годы также исследовалось влияние электрического поля на экситон в широких КЯ. В работе [45] было показано, что электрическое поле приводит к модификации волновой функции относительного движения электрона и дырки внутри экситона. В работе [46] анализировалось влияние электрического поля на светоэкситонное взаимодействие в широкой КЯ. Работы [47–49] посвящены исследованию эффекта инверсии фазы спектральных осцилляций экситона в широкой КЯ под действием электрического поля.

Как уже отмечалось, обычно в широких КЯ с помощью методов оптической спектроскопии удается наблюдать особенности (резонансы), связанные с размерным квантованием движения экситона. Однако, чем шире КЯ, тем меньше амплитуда наблюдаемых резонансов, и при достаточно большой толщине слоя КЯ они становятся неразличимы на фоне спектральных шумов. В оптических спектрах таких толстых слоев наблюдается только резонанс, энергия которого близка к энергии основного экситонного перехода в объемном материале. Энергия движения экситонов, соответствующих этому резонансу, мала по сравнению с его энергией связи и поэтому может не рассматриваться. В нашей работе мы ограничимся рассмотрением только таких состояний экситона. Слои, в которых виден только основной экситонный резонанс, будем в дальнейшем называть полупроводниковыми пластинами. Насколько известно авторам настоящей работы, первая попытка теоретического описания влияния электрического поля на состояния относительного движения электрона и дырки в экситоне в полупроводниковых пластинах была предпринята в работе [50]. В ней рассматривалось влияние толщины слоя арсенида галлия, в котором находился экситон, на зависимость свето-экситонного взаимодействия от приложенного электрического поля. Было показано, что это влияние наиболее ярко проявляется для толщины слоя GaAs более 1000 nm, то есть в слоях, которые мы выше обозначили как полупроводниковые плоские пластины. В нашей работе мы рассматриваем влияние толщины полупроводниковой пластины на энергию относительного движения электрона и дырки в экситоне.

Гамильтониан экситона в идеальной полупроводниковой пластине во внешнем однородном электрическом поле

Будем рассматривать экситон в широком плоском слое GaAs. Считаем, что границы слоя перпендикулярны оси z, направление которой совпадает с кристаллографической осью [001]. Считаем, что интерфейсы непроницаемы для электронов и дырок, то есть пластина представляет собой потенциальную яму с бесконечно высокими стенками. Вектор напряженности электрического поля **F** считаем направленным также вдоль оси z, то есть $F = F_z$, $F_x = F_y = 0$. Координатные оси x и y направлены вдоль осей симметрии четвертого порядка [100] и [010] соответственно. Экситонные состояния, наблюдаемые в оптическом эксперименте в кристаллах с кубической решеткой, формируются из состояний двукратно вырожденной зоны проводимости симметрии Г₆ и четырехкратно вырожденной валентной зоны симметрии Г₈. Гамильтониан экситона при этом формируется из гамильтонианов свободных электронов и дырок $(H_c \ \mathrm{i} H_v)$ в этих зонах, их кулоновского взаимодействия и потенциальной энергии внешнего поля:

$$\hat{H}_X = E_g + \hat{H}_c + \hat{H}_v - \frac{e^2}{\varepsilon_0 r} - eFz.$$
(1)

Здесь E_g — ширина запрещенной зоны в полупроводнике, e — заряд электрона, ε_0 — фоновая диэлектрическая проницаемость полупроводника, $r = |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|$ — расстояние между электроном и дыркой ($\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h$ — радиусвекторы электрона и дырки), а величина $z = z_e - z_h$ — проекция этого расстояния на ось z.

Гамильтонианы свободных электронов и дырок в кристалле кубической решетки имеют вид [51,52]:

$$\hat{H}_e(\hat{k}_e) = \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e},\tag{2}$$

$$\hat{H}_{h}(\hat{k}_{h}) = \left(\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\right) \left[\gamma_{1}\mathbf{I}\hat{k}_{h}^{2} - 2\gamma_{2}\sum_{\alpha=x,y,z}J_{\alpha}^{2}\left(\hat{k}_{h\alpha}^{2} - \frac{\hat{k}_{h}^{2}}{3}\right) - 4\gamma_{3}\sum_{\alpha\neq\beta}\{J_{\alpha}, J_{\beta}\}\hat{k}_{h\alpha}\hat{k}_{h\beta}\right].$$
(3)

Здесь индексы α и β принимают значения x, y, z; безразмерные константы γ_1, γ_2 и γ_3 — параметры Латтинжера; m_e — эффективная масса электрона в зоне проводимости; m_0 — масса электрона в вакууме. Матрицы J_{α} описывают спиновые состояния дырок в валентной зоне.

Заметим, что для высококачественных гетероструктур GaAs/AlGaAs методы оптической спектроскопии позволяют наблюдать спектральные особенности, связанные с размерным квантованием движения экситона, в слоях толщиной до 1000 nm [9]. Однако в настоящей работе мы ограничимся анализом только основного состояния экситона (движением его как целого пренебрегаем) и изучим влияние границ слоя только на состояния относительного движения электрона и дырки, из которых состоит экситон. Поэтому ниже мы не рассматриваем кинетическую энергию движения экситона. Операторы волнового вектора свободного электрона и дырки могут быть выражены в этом случае через операторы относительного движения в экситоне по формулам

$$\hat{k}_{h\alpha} = -\frac{1}{\hbar}\,\hat{p}_{\alpha}, \quad \hat{k}_{e\alpha} = \frac{1}{\hbar}\,\hat{p}_{\alpha}.$$
 (4)

Здесь $\hat{p}_{\alpha} = -i\hbar\partial/\partial\alpha$ — оператор импульса относительного движения, в котором $\alpha = x_e - x_h$, $y_e - y_h$, $z_e - z_h$ — координаты относительного движения электрона и дырки; x_e, y_e, z_e и x_h, y_h, z_h — координаты свободных электрона и дырки. Подставив выражения (4) в гамильтониан экситона (1) с учетом (2) и (3), можно получить экситонный гамильтониан в представлении координат относительного движения.

Из выражения (3) следует, что для полупроводника с вырожденной валентной зоной, такого как GaAs, тензор эффективной массы дырки является анизотропным [52], и состояния тяжелого и легкого экситонов нельзя рассматривать независимо. Энергия экситонных состояний в таких случаях вычисляется методом теории возмущений, см., например, [53]. Невозмущенный гамильтониан выбирают так, чтобы его собственные энергии были одинаковы для состояний тяжелого и легкого экситонов. Это достигается включением в нулевом приближении в экситонный гамильтониан сферическисимметричной части гамильтониана Латтинжера, общей для тяжелой и легкой дырок. Обычно в качестве такой общей сферически-симметричной части дырочного гамильтониана выбирают первое слагаемое в выражении (3). Все остальные операторы гамильтониана Латтинжера рассматриваются как возмущения, см. [53].

Как будет продемонстрировано ниже, в нашей работе в невозмущенный гамильтониан экситона входит, помимо прочих операторов, слагаемое $-eF_z$ из выражения (1). Наш анализ показывает, что в этом случае включение в невозмущенный гамильтониан только первого слагаемого гамильтониана Латтинжера дает некорректный результат. Он возникает при вычислении вклада в энергию от возмущения, которое получается из второго слагаемого (3) при подстановке в него (4) и имеет вид

$$\hat{V} = -2\gamma_2 \left(\frac{1}{2m_0}\right) \left[J_z^2 \frac{2}{3} - J_x^2 \frac{1}{3} - J_y^2 \frac{1}{3}\right] \hat{p}_z^2.$$
 (5)

Анализ показывает, что абсолютные величины матричных элементов такого возмущения при достаточно большом заданном внешнем поле возрастают пропорционально увеличению ширины пластины *L*. При переходе к объемному кристаллу $L \to \infty$ и, следовательно, матричный элемент оператора (5) также должен стремиться к бесконечности.

Такое нефизическое поведение матричного элемента возмущения (5) связано с тем, что он является поправкой к кинетической энергии относительного движения электрона и дырки вдоль направления поля. Кинетическая энергия этого движения меняется за счет соответствующего изменения потенциальной энергии. Поэтому, если в невозмущенный гамильтониан входит -eFz, то все операторы в выражении (5) также должны быть включены в этот гамильтониан. В противном случае энергия будет иметь нефизическую зависимость от ширины пластины, описанную выше. Очевидно, что одновременно для легкого и тяжелого экситонов невозможно включить в невозмущенный гамильтониан все слагаемые, которые входят в (5). Чтобы это сделать только для тяжелого экситона, следует в нулевом приближении в качестве сферически-симметричной дырочной массы, одинаковой для тяжелых и легких дырок, выбрать значение

$$m_h = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma}.\tag{6}$$

Тогда при подстановке выражений (2) и (3) в выражение (1) с учетом (4) невозмущенный гамильтониан как для тяжелого, так и для легкого экситонов имеет вид:

$$\hat{H}_X^{(0)} = E_g + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\varepsilon_0 r} - eFz.$$
 (7)

Здесь $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ — приведенная масса, в которой m_h — сферически-симметричная масса дырки (6). При этом полный гамильтониан экситона запишется как

$$\hat{H}_X = E_g + \hat{H}_X^{(0)} + \hat{V}_1 + \bar{V}_2.$$
(8)

Третье слагаемое в правой части этого выражения — совокупность не вошедших в невозмущенный гамильтониан (7) слагаемых, полученных из второй суммы в (3). Матрица-оператор этого возмущения:

$$\begin{split} \hat{V}_{1} &= \frac{\gamma_{2}}{m_{0}} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\sqrt{3} & 0 & 3 \end{pmatrix} \hat{p}_{x}^{2} \\ &+ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 3 \end{pmatrix} \hat{p}_{y}^{2} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{p}_{z}^{2} \end{bmatrix}. \end{split}$$

Верхняя и нижняя строчки этих матриц описывают тяжелые экситоны, а остальные строки — состояния легких экситонов.

Четвертое слагаемое в выражении (8) получается из третьей суммы в выражении (3) при подстановке в него (4) и имеет вид

$$\hat{V}_2 = -2 \frac{\gamma_3}{m_0} \left(\sum_{\alpha \neq \beta} \{ J_\alpha, J_\beta \} \hat{p}_\alpha \hat{p}_\beta \right).$$
(10)

Возмущения (9) и (10) вычисляются на собственных функциях невозмущенного гамильтониана (7). Чтобы их найти, удобно перейти к параболическим координатам, как это сделано в работах [54,55]:

$$\xi = r + z, \quad \eta = r - z, \quad \varphi = \arctan(x/y).$$
 (11)

Уравнение на собственные значения и собственные функции гамильтониана (7) распадается на два независимых дифференциальных уравнения, которые имеют вид [54,55]:

$$\frac{1}{\eta} \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{df_{\nu}(\eta)}{d\eta} \right) + \left(-\frac{m^2}{4\eta^2} - \frac{\nu'}{\eta} + \frac{\mu R}{2\hbar^2} - \frac{\mu eF\eta}{4\hbar^2} \right) f_{\nu}(\eta) = 0,$$

$$\frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{dg_{\nu}(\xi)}{d\xi} \right) + \left(-\frac{m^2}{4\xi^2} + \frac{\nu'}{\xi} + \frac{\mu R}{2\hbar^2} + \frac{\mu eF\xi}{4\hbar^2} \right) g_{\nu}(\xi) = 0.$$
(12)

В уравнениях R — энергия экситона за вычетом E_g , а ν и ν' — параметры разделения переменных. Волновую функцию экситона можно записать как

$$\phi = A f_{\nu}(\eta) g_{\nu}'(\xi) e^{\pm i m \varphi}, \quad \nu' = \nu + \mu e^2 / (\varepsilon_0 \hbar^2), \quad (13)$$

где A — нормировочная константа. Заметим, что мы ограничимся в нашем рассмотрении только теми состояниями, которые наиболее эффективно взаимодействуют со светом. В случае GaAs это состояния, для которых m = 0. Поэтому мы опустим в гамильтониане (12) слагаемое, содержащее m, и экспоненту в (13).

Анализ показывает, что функция f_{ν} быстро спадает с ростом η . Тогда для этой затухающей части волновой функции можно выбрать достаточно большое значение η_{max} , для которого $f_{\nu}(\eta_{\text{max}}) \approx 0$. Если толщина L полупроводникового слоя, в котором находится экситон, превышает значение η_{max} , то для этой затухающей части волновой функции такой слой можно считать бесконечным [50]. Анализ показывает, что для GaAs можно выбрать

$$\eta_{\rm max} = 120\,\rm nm. \tag{14}$$

В то же время функция $g_{\nu}(\xi)$ при достаточно большом значении *F* имеет длинный осциллирующий "хвост", амплитуда которого остается конечной при любом конечном значении ξ , см. работы [46,50]. Это значит, что в идеальном полупроводниковом плоском слое осциллирующая часть волновой функции (13) должна обращаться в ноль только на границе слоя. Из выражений (11) следует, что этой точке соответствуют значения

$$\xi_{\max} = 2L + \eta_{\max}.$$
 (15)



Рис. 1. Потенциальный профиль пластины толщиной L = 100 nm вдоль координаты $z = z_e - z_h$ относительного движения электрона и дырки. Область, выделенная вертикальными штриховыми прямыми, примерно соответствует кулоновской потенциальной яме взаимного притяжения электрона и дырки. Штрих-пунктирной тонкой линией схематично показана осциллирующая волновая функция относительного движения электрона и дырки при F = 1 kV/cm.

Таким образом, для экситона в идеальной КЯ или полупроводниковой пластине во внешнем электрическом поле задача на собственные значения (12) должна решаться с граничными условиями

$$f_{\nu}(\eta_{\max}) = 0, \qquad (16)$$
$$g_{\nu}'(\xi_{\max}) = 0,$$

где η_{max} и ξ_{max} описываются выражениями (14) и (15).

На рис. 1 схематически показаны профили потенциальной энергии в пространстве относительного движения электрон-дырочной пары вдоль координаты $z = z_e - z_h$ в полях F = 0 и F = 1 kV/cm. Центральная область, выделенная на рисунке, примерно соответствует кулоновской яме взаимного притяжения электрона и дырки. В отсутствие поля потенциальный профиль для волновой функции относительного движения электрона и дырки представляет симметричную бесконечно глубокую потенциальную яму, туннелирование за пределы которой практически невозможно. Внешнее поле ведет к перекосу кулоновского потенциала. При этом потенциальный барьер в правой части рисунка опускается, и потенциальный барьер кулоновской ямы становится туннельно-прозрачным для электрона и дырки вдоль координаты $z = z_e - z_h$. В координатах, описывающих положение электрона и дырки, ze и zh, это означает, что эти частицы могут выйти за пределы кулоновской ямы и разлететься от нее в противоположных направлениях. Однако электрон и дырка, покинувшие кулоновскую яму их взаимного притяжения под действием внешнего поля, всегда будут возвращаться в нее из-за отражения от потенциальных барьеров на границах пластины. Говоря

Физика твердого тела, 2022, том 64, вып. 11

иначе, состояния относительного движения электрона и дырки в слое с бесконечно высоким потенциальным барьером на границах являются стационарными при любом поле.

После того, как вычислены собственные волновые функции невозмущенного гамильтониана (7), рассмотрим матричные элементы (9) и (10). Анализ показывает, что матричные элементы операторов квадратов компонент импульса $p_x^2 = \langle \phi | \hat{p}_x^2 | \phi \rangle$ и $p_y^2 = \langle \phi | \hat{p}_y^2 | \phi \rangle$, вычисленные на волновых функциях (13), равны друг другу. По этой причине, недиагональные элементы матрицыоператора (9) взаимно сокращаются и не дают вклад в энергию экситона. Также в результате вычислений матричных элементов операторов $\hat{p}_{\alpha}\hat{p}_{\beta}$, входящих в (10), на волновой функции основного состояния (13), получаем $\langle \phi | \hat{p}_x \hat{p}_y | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{p}_x \hat{p}_z | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{p}_y \hat{p}_z | \phi \rangle = 0$. Из этого следует, что в первом приближении теории возмущений оператор (10) не дает вклада в энергию экситона. Таким образом, все недиагональные матричные элементы полного гамильтониана (8), описывающие смешивание состояний тяжелого и легкого экситона, оказываются равными нулю. Это позволяет далее в первом приближении рассматривать тяжелый и легкий экситоны независимо друг от друга. Ниже мы ограничимся рассмотрением только тяжелого экситона, поскольку этот тип состояний наиболее ярко проявляется в оптических экспериментах, см., например, [4–12].

Заметим, что третье слагаемое в возмущении (9) содержит некоторые операторы из (5), не вошедшие в невозмущенный гамильтониан (7). Это слагаемое приводит к обсуждавшейся выше нефизической зависимости энергии от ширины пластины только для легкого экситона, поскольку все его матричные элементы, описывающие состояния тяжелых экситонов, равны нулю. Уточним, что для легкого экситона также можно устранить нефизическую зависимость энергии от ширины слоя выбором сферически симметричной массы дырки в нулевом приближении. Для этого в качестве массы дырки, входящей в величину μ в выражении (7), вместо значения (6) следует подставить значение $m_h = m_0/(\gamma_1 + 2\gamma_2)$. При этом проблема с нефизическим поведением энергии от *L* возникнет для состояний тяжелого экситона.

Остается рассмотреть вклад в энергию тяжелого экситона от диагональных матричных элементов первых двух слагаемых в выражении (9). После того, как из рассмотрения был исключен легкий экситон, для тяжелого экситона это возмущение можно записать в одномерном виде

$$\hat{V}_1 = \frac{3\gamma_2}{2\mu} \, (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2). \tag{17}$$

Анализ показывает, что поправка к энергии, описываемая этим возмущением, не зависит от приложенного поля и ширины пластины. Она уменьшает абсолютную величину энергии основного экситонного состояния на постоянную величину, примерно равную 20% от значения его энергии связи в отсутствии поля. Поскольку эта поправка непосредственно не влияет на обсуждаемые в настоящей работе эффекты, ниже мы ее не рассматриваем.



Рис. 2. Зависимость энергии экситона R от электрического поля для полей $0.5 \le F \le 4 \text{ kV/cm}$ в пластинах толщиной L = 200, 300, 600, 1000, 1500, 2500 и 4000 nm.



Рис. 3. Зависимости коэффициентов a) A и b) B и C в выражении (18) от толщины пластины L. Горизонтальными стрелками на панели b показаны оси, к которым относятся соответствующие кривые; зависимости коэффициентов B и C показаны ромбическими и круглыми пустыми точками соответственно. Плавные кривые проведены по формулам (19).

3. Результаты и обсуждения

Были рассчитаны энергии относительного движения электрона и дырки основного состояния тяжелого экситона в электрических полях от 0.5 до 4 kV/cm в плоских полупроводниковых слоях GaAs от 200 до 4000 nm. В расчетах были использованы следующие значения материальных параметров: $m_e = 0.067m_0$, $\gamma_1 = 6.8$, $\gamma = \gamma_2 = 2.3$ [52] и $\varepsilon_0 = 12.56$ [56]. Результаты представлены на рис. 2. Из рисунка видно, что в полях $F \ge 0.5$ kV/cm энергия экситона R понижается при увеличении поля, за счет эффекта Штарка в экситоне. Кроме того, как иллюстрирует рисунок, энергия экситона зависит не только от приложенного

поля, но и от толщины пластины. Чем больше толщина пластины L, тем более пологой является зависимость энергии экситонных состояний от F.

Зависимости, представленные на рис. 2, могут быть аппроксимированы функциями, которые имеют вид

$$R = A(L)F^{2} + B(L)|F| + C(L).$$
(18)

Здесь все три коэффициента A, B, C зависят от толщины полупроводникового слоя. Их зависимости изображены на рис. 3.

Зависимости от L для коэффициентов в выражении (18) могут быть также аппроксимированы следующими выражениями:

$$A = \frac{\alpha_A}{L^{1/6}} + \beta_A,$$

$$B = \frac{\alpha_B}{L^{1/6}} + \beta_B,$$

$$C = \frac{\alpha_C}{L^{1/3}} + \beta_C.$$
 (19)

Здесь

$$lpha_A = 0.38 \text{ meV} \cdot \text{nm}^{1/6} \text{cm}^2/\text{kV}^2,$$

 $\beta_A = -0.087 \text{ meV} \cdot \text{cm}^2/\text{kV}^2,$
 $\alpha_B = -3.73 \text{ meV} \cdot \text{nm}^{1/6} \text{cm}/\text{kV},$
 $\beta_A = -0.85 \text{ meV} \cdot \text{cm}/\text{kV}$

И

 $\alpha_C = 3.16 \,\mathrm{meV}\cdot\mathrm{cm}^{1/3}, \quad \beta_C = -5.26 \,\mathrm{meV}.$

Таким образом, численное моделирование позволяет получить выражения, которые могут использоваться для описания энергии экситона в пластинах GaAs в поле $F \ge 0.5 \, \text{kV/cm}$.

Чтобы проанализировать природу выполаживания зависимостей R(F) при увеличении толщины пластины (см. рис. 2), мы рассчитали по отдельности матричные элементы от последних трех операторов в гамильтониане (7) для поля F = 4 kV/cm и различных значений *L*. Введем следующие обозначения:

$$T = \left\langle \phi \left| \frac{\hat{p}^2}{2\mu_h} \right| \phi \right\rangle,$$
$$U_{\rm Q} = \left\langle \phi \left| \frac{e^2}{\varepsilon_0 r} \right| \phi \right\rangle,$$
$$U_{\rm F} = \left\langle \phi \right| eF_z | \phi \right\rangle. \tag{20}$$

Энергия экситона является суммой этих матричных элементов

$$R = T + U_{\rm Q} + U_{\rm F}.\tag{21}$$



Рис. 4. *а*) Зависимости матричных элементов *T* (черные квадраты) и U_F (черные кружки), от толщины пластины *L* для поля F = 4 kV/cm. *b*) Аналогичные зависимости вклада в энергию U_Q (черные ромбы), суммы $T + U_F$ (черные треугольники) и энергии экситона R(L) (полые кружки).

Зависимости T, U_Q, U_F и R от толщины пластины Lпредставлены на рис. 4. Вклады кинетической энергии относительного движения электрона и дырки Т и потенциальной энергии внешнего поля U_F зависят от L очень сильно, приблизительно по линейному закону. Но эти два вклада противоположны по знаку, близки по абсолютной величине и в значительной степени компенсируют друг друга. Это ожидаемый результат, поскольку кинетическая энергия относительного движения за пределами кулоновской ямы увеличивается, в основном, за счет уменьшения потенциальной энергии электрон-дырочной пары во внешнем поле. Однако взаимная компенсация является не полной, так что их сумма $T + U_{\rm F} < 0$ дает не нулевой вклад в энергию экситона. Отличие от нуля суммы $T + U_{\rm F}$ обусловлено тем, что энергия Т растет также за счет уменьшения потенциальной энергии кулоновского взаимодействия электрона и дырки UQ. Вклад в энергию кулоновского потенциала уменьшается по модулю с увеличением L, как это показано на рис. 4, b. Следовательно, на такую же величину должна уменьшиться кинетическая энергия относительного движения электрона и дырки Т. Поэтому суммарный отрицательный вклад в энергию экситона T + U_F при увеличении толщины пластины растет по абсолютной величине, как это показано на рис. 4, b.

Уменьшение вклада U_Q с ростом L связано с тем, что в сильном поле волновая функция относительного движения электрона и дырки (13) слабо локализована в кулоновской яме, см. рис. 1. Чем больше толщина пластины, тем длиннее осциллирующие хвосты волновой функции и тем слабее эта локализация. Следовательно, увеличение L приводит к уменьшению вклада в энергию экситона от кулоновского взаимодействия электрона и дырки $U_{\rm O}$, как это видно из рис. 4, *b*.

Поскольку вклад U_Q по модулю уменьшается сильнее, чем по модулю растет вклад $T + U_F$, их полная сумма R < 0, согласно выражению (21), должна уменьшаться по абсолютной величине с ростом L при фиксированном поле. Это наблюдается как выполаживание зависимостей R(F) с ростом толщины пластины, см. рис. 2.

Заметим, что наши результаты находятся в кажущемся противоречии с ранее выполненными расчетами энергии связи экситона в объемном материале. Согласно работе [55], абсолютная величина отрицательной энергии связи экситона в объемном кристалле в слабых полях растет пропорционально квадрату F в соответствие с теорией эффекта Штарка. Однако в сильных полях отрицательное значение энергии относительного движения электрона и дырки должно уменьшаться по модулю и в какой-то момент стать равным нулю. Это связано с тем, что электрическое поле растаскивает электрон и дырку в разные стороны, из-за чего среднее расстояние между ними увеличивается. Вследствие этого ослабляется их кулоновское взаимодействие, и, как следствие, модуль энергии связи экситона уменьшается и при $F \approx 4.2 \,\text{kV/cm}$ она становится равной нулю [55]. Это соответствует ионизации экситона, при которой электрон и дырка, покинувшие кулоновскую яму их притяжения, более не могут в нее вернуться. В нашей же модели ничего подобного не происходит.

Чтобы объяснить это расхождение наших результатов и результатов, полученных авторами [55], напомним, что мы рассматриваем экситон в широкой пластине. Из-за отражения от границ пластины электрон и дырка, покинувшие кулоновскую яму, всегда будут возвращаться в нее. Наличие границ с бесконечно высоким потенциалом приводит к тому, что ионизации экситона не происходит ни при каком поле. Как следствие, в идеальной пластине отсутствует необратимый развал экситона на электрон и дырку, который сопровождается уменьшением модуля энергии R с усилением поля. С другой стороны, при $L \rightarrow \infty$ должен происходить предельный переход к случаю нестационарной задачи [55]. Обсудим кратко этот переход.

В реальном кристалле из-за наличия центров рассеяния, а также рассеяния на фононах, электрон и дырка имеют конечную длину свободного пробега l_{mfp} . Как обсуждалось в работе [50], величина l_{mfp} может быть меньше L для толстого полупроводникового слоя. В результате процессов рассеяния электрона и дырки за пределами кулоновской ямы произойдет необратимый развал экситонного состояния, см., например, [57,58]. Наличие процессов распада экситона делает задачу нестационарной, поскольку время жизни экситона ограничивается процессами рассеяния электрона и дырки. Поэтому результаты решения стационарной задачи (12) с граничными условиями (16) становятся некорректными при $L \gg l_{mfp}$. В наших расчетах мы принимаем, что

для самых больших рассматриваемых слоев выполняется условие

$$L \leq l_{mfp}.$$
 (22)

Если оно выполнено, то задачу об экситоне в электрическом поле в полупроводниковой пластине можно с хорошей точностью считать стационарной. Заметим, что в простейшей модели величина l_{mfp} не зависит от приложенного поля [59]. При низких температурах в высококачественных гетероструктурах на основе GaAs длина свободного пробега может достигать 3 µm [60]. Для пластины максимальной рассмотренной в нашей работе толщины L = 4000 nm это значение несколько больше, но может считаться примерно равным 3 µт. Поэтому все рассмотренные нами значения L удовлетворяют условию (22). С другой стороны, существует фундаментальный процесс рассеяния носителей заряда, связанный с испусканием фононов [3]. Этот канал рассеяния не может быть устранен ни за счет повышения качества пластины, ни путем понижения температуры образца. В рамках нашей модели мы полагаем, что этим фундаментальным процессом рассеяния можно пренебречь.

При нарушении критерия (22) состояния экситона становятся нестационарными, и описанный нами подход не может быть использован. При $L \gg l_{mfp}$ следует использовать нестационарный подход, описанный, например, в работе [55].

Заметим, что ранее зависимость величины штарковского сдвига обсуждалась для узких ям, ширина которых примерно равна либо меньше боровского радиуса экситона в объемном кристалле [39-41]. Наши результаты говорят о том, что такая зависимость имеет место даже для полупроводниковых пластин, толщина которых превосходит боровский радиус экситона на два десятичных порядка. Однако в узких ямах эта зависимость противоположна той, которая описана в данной работе, а именно, в узких КЯ штарковский сдвиг быстро растет с увеличением L, см. [39-41]. Физический смысл роста величины штарковского сдвига состоит в том, что в узких ямах среднее расстояние между электроном и дыркой в экситоне меньше, чем в объемном кристалле, поскольку оно ограничено потенциальными барьерами КЯ. Благодаря этому ограничению, чем уже яма, тем сильнее кулоновское взаимодействие электрона и дырки в экситоне. Поэтому экситон в узких КЯ более устойчив к воздействию внешнего электрического поля, чем экситон в объемном материале. Увеличение ширины узкой ямы приводит к уменьшению кулоновского взаимодействия электрона и дырки и, как следствие, к более сильному эффекту Штарка при приложении электрического поля. Такое поведение штарковского сдвига будет наблюдаться до тех пор, пока энергия связи экситона в отсутствии внешнего поля зависит от ширины КЯ. Как было показано в работах [6,9], размеры ямы перестают влиять на величину энергии, если ширина КЯ на порядок превосходит боровский радиус экситона в объемном кристалле, *а*_{*B*}. Поэтому наша модель применима только к таким ямам, ширина которых удовлетворяет условию

$$L \ge 10a_B. \tag{23}$$

Выражение (23) является еще одним критерием применимости нашей модели.

4. Заключение

Проанализировано влияние толщины пластины GaAs на энергию экситона во внешнем электрическом поле. Показано, что в достаточно сильных полях энергия должна зависеть не только от приложенного электрического поля, но и от толщины полупроводниковой пластины, в которой рассматривается экситон. Этот эффект должен наблюдаться в пластинах, толщина которых превышает на два десятичных порядка величину боровского радиуса экситона в объемном GaAs. При этом зависимость от поля тем слабее, чем больше толщина полупроводниковой пластины. Произведено сравнение со случаем экситона в электрическом поле в объемном кристалле. Представлен критерий для предельного перехода от случая толстой пластины к случаю экситона в объемном полупроводнике.

Финансирование работы

Авторы благодарят СПбГУ за финансовую поддержку в рамках гранта № 91182694.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] E.L. Ivchenko. Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanotstructures. Alpha Science, Harrow (2005).
- [2] A.V. Kavokin, J.J. Baumberg, G. Malpuech, F.P. Laussy. Microcavities. Oxford University, N.Y. (2007).
- [3] C.F. Klingshirn. Semiconductor Optics. 4th ed. Springer, Berlin (2012).
- [4] В.А. Киселев, Б.С. Разбирин, И.Н. Уральцев. Письма в ЖЭТФ 18, 8, 504 (1973).
- [5] В.А. Киселев, И.В. Макаренко, Б.С. Разбирин, И.Н. Уральцев. ФТТ 19, 8, 1348 (1977).
- [6] N. Tomassini, A. D'Andrea, R. Del Sole, H. Tuffigo-Ulmer, R.T. Cox. Phys. Rev. B 51, 8, 5005 (1995).
- [7] E. Ubyivovk, Yu.K. Dolgikh, Yu.P. Efimov, S.A. Eliseev, I.Ya. Gerlovin, I.V. Ignatiev, V.V. Petrov, V.V. Ovsyankin. J. Luminesc. 102–103, 751 (2003).
- [8] С.А. Марков, Р.П. Сейсян, В.А. Кособукин. ФТП 38, 2, 230 (2004).
- [9] Д.К. Логинов, Е.В. Убыйвовк, Ю.П. Ефимов, В.В. Петров, С.А. Елисеев, Ю.К. Долгих, И.В. Игнатьев, В.П. Кочерешко, А.В. Селькин. ФТТ 48, 11, 1979 (2006).

- [10] Е.В. Убыйвовк, Д.К. Логинов, И.Я. Герловин, Ю.К. Долгих, Ю.П. Ефимов, С.А. Елисеев, В.В. Петров, О.Ф. Вывенко, А.А. Ситникова, Д.А. Кириленко. ФТТ 51, 9, 1818 (2009).
- [11] A.V. Trifonov, S.N. Korotan, A.S. Kurdyubov, I.Ya. Gerlovin, I.V. Ignatiev, Yu.P. Efimov, S.A. Eliseev, V.V. Petrov, Yu.K. Dolgikh, V.V. Ovsyankin, A.V. Kavokin. Phys. Rev. B 91, 11, 115307 (2015).
- [12] E.S. Khramtsov, P.A. Belov, P.S. Grigoryev, I.V. Ignatiev, S.Yu. Verbin, Yu.P. Efimov, S.A. Eliseev, V.A. Lovtcius, V.V. Petrov, S.L. Yakovlev. J. Appl. Phys. **119**, *18*, 184301 (2016).
- [13] E.S. Khramtsov, P.S. Grigoryev, D.K. Loginov, I.V. Ignatiev, Yu.P. Efimov, S.A. Eliseev, P.Yu. Shapochkin, E.L. Ivchenko, M. Bayer. Phys. Rev. B 99, 3, 035431 (2019).
- [14] U. Ekenberg, M. Altarelli. Phys. Rev. B 35, 14, 7585 (1987).
- [15] M.H. Degani, O. Hipólito. Phys. Rev. B 35, 17, 9345(R) (1987).
- [16] B. Gerlach, J. Wusthoff, M.O. Dzero, M.A. Smondyrev. Phys. Rev. B 58, 16, 10568 (1998).
- [17] T. Makino, Y. Segawa, M. Kawasaki, H. Koinuma. Semicond. Sci. Technol. 20, 4, S78 (2005).
- [18] T. Hiroshima. Phys. Rev. B 36, 8, 4518(R) (1987).
- [19] J. Lee, C. Jagannath, M.O. Vassell, E.S. Koteles. Phys. Rev. B 37, 8, 4164 (1988).
- [20] A.R. Glanfield, G. Rau, P.C. Klipstein, G.W. Smith. Phys. Status Solidi B 211, *1*, 269 (1999).
- [21] D.K. Loginov, A.V. Trifonov, I.V. Ignatiev. Phys. Rev. B 90, 7, 075306 (2014).
- [22] D.K. Loginov, P.S. Grigoryev, Yu.P. Efimov, S.A. Eliseev, V.A. Lovtcius, V.V. Petrov, E.V. Ubyivovk, I.V. Ignatiev. Phys. Status Solidi B 253, 8, 1537 (2016).
- [23] Yu.E. Lozovik, I.V. Ovchinnikov, S.Yu. Volkov, L.V. Butov, D.S. Chemla. Phys. Rev. B 65, 23, 235304 (2002).
- [24] D. Loginov, V.P. Kochereshko, A. Litvinov, L. Besombes, H. Mariette, J.J. Davies, L.C. Smith, D. Wolverson. Acta Physica Pol. A **112**, *2*, 381 (2007).
- [25] Д.К. Логинов. ФТТ **52**, *1*, 58 (2010).
- [26] D.K. Loginov, V.P. Kochereshko, R.T. Cox, L. Besombes, H. Mariette, J.J. Davies, D. Wolverson, L.C. Smith. Phys.Status Solidi B 247, 6, 1528 (2010).
- [27] J. Wilkes, E.A. Muljarov. New J. Phys. 18, 023032 (2016).
- [28] J. Wilkes, E. Muljarov. Superlattices. Microstruct. 108, 32 (2017).
- [29] S.Yu. Bodnar, P.S. Grigoryev, D.K. Loginov, V.G. Davydov, Yu.P. Efimov, S.A. Eliseev, V.A. Lovtcius, E.V. Ubyivovk, V.Yu. Mikhailovskii, I.V. Ignatiev. Phys. Rev. B 95, 19, 195311 (2017).
- [30] A. Chavesab, F.M. Peeters. Solid State Commun. 334–335, 114371 (2021).
- [31] J.J. Davies, D. Wolverson, V.P. Kochereshko, A.V. Platonov, R.T. Cox, J. Cibert, H. Mariette, C. Bodin, C. Gourgon, E.V. Ubyivovk, Y.P. Efimov, S.A. Eliseev. Phys. Rev. Lett. 97, 18, 187403 (2006).
- [32] D. Loginov, V.P. Kochereshko, A. Litvinov, L. Besombes, H. Mariette, J.J. Davies, L.C. Smith, D. Wolverson. Acta Physica Pol. A 112, 2, 161 (2007).
- [33] V.P. Kochereshko, A.V. Platonov, D.K. Loginov, J.J. Davies, D. Wolverson, L.C. Smith, H. Boukari, R.T. Cox, J. Cibert, H. Mariette. Semicond. Sci. Technol. 23, 11, 114011 (2008).
- [34] J.J. Davies, L.C. Smith, D. Wolverson, A. Gust, C. Kruse, D. Hommel, V.P. Kochereshko. Phys. Rev. B 81, 8, 085208 (2010).

- [35] P.S. Grigoryev, O.A. Yugov, S.A. Eliseev, Yu.P. Efimov, V.A. Lovtcius, V.V. Petrov, V.F. Sapega, I.V. Ignatiev. Phys. Rev. B 93, 20, 205425 (2016).
- [36] D.A.B. Miller, D.S. Chemla, T.C. Damen, A.C. Gossard, W. Wiegmann, T.H. Wood, C.A. Burrus. Phys. Rev. Lett. 53, 22, 2173 (1984).
- [37] D.A.B. Miller, D.S. Chemla, T.C. Damen, A.C. Gossard, W. Wiegmann, T.H. Wood, C.A. Burrus. Phys. Rev. B 32, 2, 1043 (1985).
- [38] R.T. Collins, L. Vina, W.I. Wang, L.L. Chang, L. Esaki, K. von Klitzing, K. Ploog. Phys. Rev. B 36, 3, 1531 (1987).
- [39] G.D. Sanders, K.K. Bajaj. Phys. Rev. B 35, 5, 2308 (1987).
- [40] P.W. Yu, G.D. Sanders, K.R. Evans, D.C. Reynolds, K.K. Bajaj, C.E. Stutz, R.L. Jones. Phys. Rev. B 38, 11, 7796 (1988).
- [41] C. Morhain, T. Bretagnon, P. Lefebvre, X. Tang, P. Valvin, T. Guillet, B. Gil, T. Taliercio, M. Teisseire-Doninelli, B. Vinter, C. Deparis. Phys. Rev. B 72, 24, 241305(R) (2005).
- [42] Y.-H. Kuo, Yong Kyu Lee, Y. Ge, S. Ren, J.E. Roth, T.I. Kamins, D.A.B. Miller, J.S. Harris. Nature 437, 7063, 1334 (2005).
- [43] K. Sivalertporn, L. Mouchliadis, A.L. Ivanov, R. Philp, E.A. Muljarov. Phys. Rev. B 85, 4, 045207 (2012).
- [44] S. Zielińska-Raczyńska, G. Czajkowski, D. Ziemkiewicz. Eur. Phys. J. B 88, 338 (2015).
- [45] S. Zielińska-Raczyńska, D. Ziemkiewicz, G. Czajkowski. Phys. Rev. B 97, 16, 165205 (2018).
- [46] Д.К. Логинов, А.В. Донец. ФТТ 62, 2, 208 (2020).
- [47] D.K. Loginov, A.V. Donets. Semiconductors 52, 5, 562 (2018).
- [48] D.K. Loginov, P.A. Belov, V.G. Davydov, I.Ya. Gerlovin, I.V. Ignatiev, A.V. Kavokin, Y. Masumoto. Phys. Rev. Res. 2, 3, 033510 (2020).
- [49] Д.К. Логинов, П.А. Белов, И.Я. Герловин, И.В. Игнатьев. ФТП 55, 9, 779 (2021).
- [50] Д.К. Логинов, А.В. Донец. ФТТ 63, 4, 457 (2021).
- [51] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **102**, *4*, 1030 (1956).
- [52] E.L. Ivchenko, G. Pikus. Superlattices and Other Heterostructures. Springer-Verlag, Berlin (1995).
- [53] A. Baldereschi, N.O. Lipari. Phys. Rev. Lett. 25, 3, 373 (1970).
- [54] L.D. Landau, E.M. Lifschitz. Quantum Mechanics. 3rd ed. Pergamon, Oxford (1977).
- [55] D.F. Blossey. Phys. Rev. B 3, 4, 1382 (1971).
- [56] S. Adachi. GaAs and Related Materials. World Scientific Publishing, Singapore (1994).
- [57] S. Haastrup, S. Latini, K. Bolotin, K.S. Thygesen. Phys. Rev. B 94, 4, 041401 (2016).
- [58] M. Massicotte, F. Vialla, P. Schmidt, M.B. Lundeberg, S. Latini, S. Haastrup, M. Danovich, D. Davydovskaya, K. Watanabe, T. Taniguchi, V.I. Fal'ko, K.S. Thygesen, T.G. Pedersen, F.H.L. Koppens. Nature Commun. 9, 1633 (2018).
- [59] A. Jaeger, G. Weiser. Phys. Rev. B 58, 16, 10674 (1998).
- [60] B. Brill, M. Heiblum. Phys. Rev. B 54, 24, R17280 (1996).

Редактор Е.В. Толстякова