ТОНКАЯ СТРУКТУРА УРОВНЕЙ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЭКСИТОНОВ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

С. В. Гупалов, Е. Л. Ивченко*, А. В. Кавокин

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

Поступила в редакцию 23 июня 1997 г.

Построена теория дальнодействующего обменного и запаздывающего взаимодействий между электроном и дыркой в квантовой яме. Развит метод, позволяющий рассчитывать основное и возбужденные состояния экситона, локализованного как целое на флуктуации ширины квантовой ямы в форме прямоугольного островка. Показано, что учет исследованных механизмов электрон-дырочного взаимодействия приводит к расшеплению радиационного дублета экситона на две компоненты, поляризованные вдоль сторон прямоугольника. Проанализированы зависимости величины и знака этого расшепления от линейных размеров островка и номера уровня локализованного экситона.

1. ВВЕДЕНИЕ

В идеальной полупроводниковой гетероструктуре с квантовой ямой движение носителей заряда, электронов или дырок, квантовано в направлении роста структуры и свободно в плоскости интерфейсов. В реальных структурах, выращенных даже наиболее совершенным методом молекулярно-пучковой эпитаксии, гетерограница не является идеально плоской и в лучшем случае представляет собой поверхность, участки которой лежат в двух соседних плоскостях, разделенных мономолекулярным слоем. Топология этой поверхности зависит от материалов гетеропары и технологических условий, в частности от температуры и длительности остановок роста. При отсутствии межинтерфейсной корреляции ширина ямы флуктуирует, принимая одно из трех значений. В результате квазидвумерный носитель находится во флуктуационном потенциале, амплитуда которого определяется разностью энергий размерного квантования в двух идеальных ямах с ширинами, различающимися на один или два монослоя. В этом потенциале формируется хвост локализованных экситонных состояний, ответственных за низкотемпературную фотолюминесценцию нелегированных структур с квантовыми ямами [1-3]. В известных нам работах локализованные экситоны рассчитывались для аксиально-симметричного гауссова потенциала [4] или в модели круглого островка [5]. В структурах типа GaAs/AlGaAs(001) состояние такого локализованного экситона, оптически активное в плоскости интерфейса, двукратно вырождено. Ясно, что аксиальная симметрия локализующего потенциала является исключением и, как правило, он анизотропен в плоскости интерфейса. Понижение симметрии должно приводить к снятию вырождения радиационного дублета и влиять на поляризацию фотолюминесценции в условиях оптической ориентации экситонов.

^{*}E-mail: ivchenko@coherent.ioffe.rssi.ru

В настоящей работе построена теория экситонов, локализованных на анизотропных островках монослойной флуктуации ширины квантовой ямы. Предполагается, что линейные размеры островка превышают боровский радиус квазидвумерного экситона. Показано, что в этом случае расщепление дублета, обусловленное дальнодействующим обменным взаимодействием электрона и дырки в экситоне, составляет несколько десятков микроэлектронвольт при различии сторон прямоугольного островка в полтора-два раза. Такое расшепление значительно превышает естественную ширину линии излучения локализованного экситона \hbar/τ , так как типичное значение его времени жизни имеет порядок 10⁻⁹ с. Недавно Гаммон с соавт. [6] исследовали спектр фотолюминесценции локализованного экситона из отдельного островка в квантовой яме GaAs/AlGaAs(001) в режиме ближнего поля (optical near-field regime) и обнаружили расщепление дублета e1-hh1(1s) на две компоненты, поляризованные вдоль осей [110] и [110]. В спектре возбуждения фотолюминесценции те же авторы наблюдали возбужденные состояния экситона, локализованного на островке как единое целое. Для основного и четырех возбужденных состояний расщепление $\Delta = E_{1\bar{1}0} - E_{110}$ между подуровнями, поляризованными вдоль направлений [110] и [110], оказалось равным соответственно -25, +41, +45, -22 и -47 мкэВ. Поэтому представляло интерес выяснить, можно ли подобрать размеры прямоугольного островка так, чтобы воспроизвести указанную последовательность знаков расщепления Δ. Предварительные результаты данной работы представлены в [7].

2. ОБМЕННЫЙ И ЗАПАЗДЫВАЮЩИЙ МЕХАНИЗМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНА И ДЫРКИ

Последовательная теория электрон-дырочного обменного взаимодействия в полупроводниках развита Пикусом и Биром [8,9]. В приближении эффективной массы оператор кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в полупроводниковом кристалле включает три вклада, описывающих соответственно прямое, или внутризонное, кулоновское взаимодействие (U_C) и обменное взаимодействие, дальнодействуюшее $(U_{exch}^{(long)})$ и короткодействующее $(U_{exch}^{(short)})$. Введем двухчастичные возбужденные состояния кристалла $|m, \mathbf{k}_c; n, \mathbf{k}_h \rangle$, где $\mathbf{k}_{e,h}$ — волновой вектор электрона или дырки, индексы m и n нумеруют вырожденные состояния электрона в зоне проводимости и дырки в валентной зоне при $k_{e,h} = 0$ (для определенности рассматривается прямозонный полупроводник кубической симметрии с экстремумом в Г-точке). Тогда матричные элементы операторов U_C и $U_{exch}^{(long)}$ между этими состояниями можно привести к виду

$$\langle m', \mathbf{k}'_e; n', \mathbf{k}'_h | U_C | m, \mathbf{k}_e; n, \mathbf{k}_h \rangle = -\frac{1}{V} \frac{4\pi e^2}{\kappa_0 |\mathbf{k}_e - \mathbf{k}'_e|^2} \delta_{m'm} \delta_{n'n} \delta_{\mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h, \mathbf{k}'_e + \mathbf{k}'_h} , \qquad (1)$$

$$\langle m', \mathbf{k}'_e; n', \mathbf{k}'_h | U^{(long)}_{exch} | m, \mathbf{k}_e; n, \mathbf{k}_h \rangle = \frac{1}{V} \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{\kappa_b m_0^2 E_g^2} \frac{(\mathbf{K} \mathbf{p}_{m'\bar{n}'}) (\mathbf{K} \mathbf{p}_{m\bar{n}})^*}{K^2} \delta_{\mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h, \mathbf{k}'_e + \mathbf{k}'_h} . \tag{2}$$

Здесь **К** — суммарный волновой вектор, $\mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h = \mathbf{k}'_e + \mathbf{k}'_h$, m_0 — масса свободного электрона, E_g — ширина запрещенной зоны, $\mathbf{p}_{m\bar{n}}$ — матричный элемент оператора импульса, рассчитанный между электронными блоховскими функциями $|m, \mathbf{k}=0\rangle$ и $|\bar{n}, \mathbf{k}=0\rangle$ (дырочное состояние n, \mathbf{k} и электронное состояние $\bar{n}, -\mathbf{k}$ связаны между собой операцией инверсии времени), κ_0 и κ_b — диэлектрические проницаемости, низкочастотная и высокочастотная (на частоте электронно-дырочного возбуждения), e — заряд электрона,



Рис. 1

V — объем кристалла. Взаимодействие (2) описывается последовательностью диаграмм рис. 1, где парной линии сопоставляется функция Грина электронно-дырочного возбуждения, а волнистой линии — фурье-компонента неэкранированного кулоновского потенциала $4\pi e^2/V |\mathbf{k}_e - \mathbf{k}_h|^2$. Таким образом, это взаимодействие можно интерпретировать как результат виртуальной рекомбинации и генерации электронно-дырочной пары, а его уменьшение в κ_b раз возникает при учете в диаграммах цепочки виртуальных электронно-дырочных возбуждений, индуцированных кулоновским потенциалом. Формулу (2) можно получить еще одним способом: рассчитать макроскопическое электрическое поле, порождаемое электронно-дырочной парой, и учесть самосогласованное влияние этого поля на энергию пары.

Вклад в короткодействующее взаимодействие вносят фурье-компоненты кулоновского потенциала с волновыми векторами $\mathbf{b} + \mathbf{k}'_e - \mathbf{k}_e$, где \mathbf{b} — отличные от нуля векторы обратной решетки. При достаточно малых значениях k_e и k_h , удовлетворяющих критерию применимости метода эффективной массы, оператор $U_{exch}^{(short)}$ имеет характер контактного взаимодействия и его можно представить в виде $\Delta_{m'n',mn}a_0^3\delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h)$, где a_0 — постоянная решетки и множитель a_0^3 выделен, чтобы коэффициенты $\Delta_{m'n',mn}$ имели размерность энергии. Зависимость этих коэффициентов от зонных индексов находится из соображений симметрии, а их абсолютные значения — из сравнения теории с экспериментом по изучению тонкой структуры экситонных уровней (см., например, [10-12]). Число линейно независимых коэффициентов совпадает с числом неприводимых представлений, содержащихся в прямом произведении $\Gamma_c \times \Gamma_v$, по которым преобразуются электронные состояния на дне зоны проводимости и в вершине валентной зоны. Для иллюстрации рассмотрим пару зон Г₆ и Г₇ в полупроводниках типа GaAs: $\Gamma_6 \times \Gamma_7 = \Gamma_2 + \Gamma_5$. Удобно перейти к базису электронно-дырочных возбуждений, в котором три состояния $|\nu, \mathbf{k}_{e}, \mathbf{k}_{h}\rangle$ ($\nu = x, y, z$) оптически активны в поляризации $\mathbf{e} \parallel \boldsymbol{\nu}$, а оптический переход в четвертое состояние $|\Gamma_2, \mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h\rangle$ запрещен. Обменное взаимодействие (2) затрагивает только состояния $|\nu, \mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h\rangle$ и имеет в новом базисе вид

$$\langle \nu', \mathbf{k}'_{e}, \mathbf{k}'_{h} | U^{(long)}_{exch} | \nu, \mathbf{k}_{e}, \mathbf{k}_{h} \rangle = \frac{4\pi}{\kappa_{b} V} \left(\frac{e\hbar p_{0}}{m_{0} E_{g}} \right)^{2} \frac{K_{\nu'} K_{\nu}}{K^{2}} \, \delta_{\mathbf{K}', \mathbf{K}} \,, \tag{3}$$

где p_0 — межзонный матричный элемент оператора импульса при оптическом переходе в состояние $|\nu\rangle$.

Мы обобщили теорию Пикуса и Бира [8] с учетом запаздывающего взаимодействия, возникающего в результате последовательного излучения и поглощения электронно-дырочной парой поперечного фотона и описываемого диаграммой рис. 2. Здесь штриховой линии сопоставляется фотонная функция Грина в среде с диэлектрической прони-



цаемостью κ_b , а вершине — множитель $-i/\hbar$, а также матричный элемент электронфотонного взаимодействия

$$-rac{e}{m_0}\left(rac{2\pi\hbar}{V\omega_K\kappa_b}
ight)^{1/2}\mathbf{e}\mathbf{p}_{mar{n}}$$

при поглощении фотона или комплексно-сопряженное выражение при испускании фотона, где частота фотона $\omega_K = (c/\sqrt{\kappa_b})K$, е — вектор его поляризации. В результате для матричных элементов запаздывающего взаимодействия получаем

$$\Sigma_{el-phot}(\nu', \mathbf{k}'_{e}, \mathbf{k}'_{h}; \nu, \mathbf{k}_{e}, \mathbf{k}_{h}; \omega) = -\frac{4\pi}{\kappa_{b}V} \left(\frac{e\hbar p_{0}}{m_{0}E_{g}}\right)^{2} \left(\delta_{\nu\nu'} - \frac{K_{\nu}K_{\nu'}}{K^{2}}\right) \frac{k^{2}}{K^{2} - k^{2} - i0} \delta_{\mathbf{K}', \mathbf{K}}, \quad (4)$$

где $k = \sqrt{\kappa_b} (\omega/c), \omega$ — частота возбуждения электронно-дырочной пары, или, на строгом диаграммном языке, аргумент собственно-энергетической функции, возникающей при расчете функции Грина электронно-дырочной пары, в общем множителе произведение $\omega\omega_K$ заменено на $(E_g/\hbar)^2$. Вещественная и мнимая части $\Sigma_{el-phot}$ определяют соответственно перенормировку энергии и затухание парного возбуждения, обусловленное испусканием фотона. При выводе (4) учтено, что матрица $e_{1,\nu'}e_{1,\nu} + e_{2,\nu'}e_{2,\nu}$, где $\mathbf{e}_1 \perp \mathbf{e}_2 \perp \mathbf{K}$, есть оператор проектирования на плоскость перпендикулярную вектору **К**.

Экситон, рассчитываемый при учете только главного взаимодействия (1), называется механическим [13]. Кулоновский экситон находится в пренебрежении запаздыванием; согласно (3), расщепление между продольным и поперечными состояниями 1s-экситона связано с микроскопическим параметром p_0 соотношением

$$\hbar\omega_{LT} = \frac{4}{\kappa_b a_B^3} \left(\frac{e\hbar p_0}{m_0 E_g}\right)^2 \,, \tag{5}$$

где a_B — экситонный боровский радиус. Наконец, учет запаздывающего взаимодействия приводит к поперечным экситонным поляритонам. При $K \sim k$ расщепление поляритонных ветвей существенно превышает продольно-поперечное расщепление $\hbar\omega_{LT}$, и лишь при $K \gg k$ поляритонным эффектом можно пренебречь по сравнению с дальнодействующим обменным взаимодействием.

3. ЭЛЕКТРОН-ДЫРОЧНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ

Рассмотрим электрон-дырочные возбуждения в полупроводниковой квантовой яме, в которой одночастичные состояния характеризуются номером подзоны размерного квантования, двумерным волновым вектором $\mathbf{k}^{||} = (k_x, k_y)$ и спиновыми индексами m, n, пробегающими по два значения. В квантовых ямах, выращенных на основе полупроводников типа GaAs, $m = \pm 1/2$ для электрона и $n = \pm 3/2$ для тяжелой дырки или $n = \pm 1/2$ для легкой дырки. В пренебрежении межподзонным смешиванием огибающая двухчастичной волновой функции имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = S^{-1} \exp\left[i(\mathbf{k}_e^{\parallel} \boldsymbol{\rho}_e + \mathbf{k}_h^{\parallel} \boldsymbol{\rho}_h)\right] \varphi_e(z_e) \varphi_h(z_h) .$$
(6)

Здесь ρ — составляющая трехмерного вектора **r** в плоскости интерфейсов (x, y), S — площадь образца, $\varphi_e(z_e), \varphi_h(z_h)$ — одночастичные функции размерного квантования. В симметричной квантовой яме эти функции характеризуются определенной четностью по отношению к отражению в плоскости, проходящей через середину ямы, z = 0. В дальнейшем для определенности мы считаем, что $\varphi_{e,h}(-z) = \varphi_{e,h}(z)$.

Рассчитаем матричные элементы дальнодействующего обменного и запаздывающего взаимодействий между квазидвумерными электроном и дыркой. Для этого нужно умножить сумму матричных элементов операторов $U_{exch}^{(long)}$ и $U_{el-phot}$ на

$$\exp\left[i(K_z z - K'_z z')\right]\varphi_e(z')\varphi_h(z')\varphi_e(z)\varphi_h(z),$$

просуммировать по K'_z, K_z и проинтегрировать по z', z. С учетом симметрии функций $\varphi_{e,h}(z)$ получим

$$\Sigma(m',n',\mathbf{k}'_{e},\mathbf{k}'_{h};m,n,\mathbf{k}_{e},\mathbf{k}_{h};\omega) = \frac{4\pi}{S\kappa_{b}} \left(\frac{e\hbar}{m_{0}E_{g}}\right)^{2} \delta_{\mathbf{k}'_{e}+\mathbf{k}'_{h},\mathbf{k}_{e}+\mathbf{k}_{h}} \times \left\{ \left[(\mathbf{q}\mathbf{p}_{m'\tilde{n}'})(\mathbf{q}\mathbf{p}_{\tilde{n}m}) - (\mathbf{p}_{m'\tilde{n}'}\mathbf{p}_{\tilde{n}m})k^{2} \right] \frac{iP(\gamma)}{2\gamma} + p^{z}_{m'\tilde{n}'}p^{z}_{\tilde{n}m} \left[Q + \frac{i}{2}\gamma P(\gamma) \right] \right\},$$
(7)

где $\gamma = \sqrt{k^2 - q^2}$, по-прежнему $k^2 = (\omega/c)^2 \kappa_b$, индекс || над двумерными векторами $\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h$ опущен, \mathbf{q} — двумерный вектор с компонентами $(k_{e,x} + k_{h,x}, k_{e,y} + k_{h,y})$,

$$P(\gamma) = \int dz' \int dz \varphi_e(z') \varphi_h(z') \varphi_e(z) \varphi_h(z) \exp\left(i\gamma |z-z'|\right), \quad Q = \int dz \, \varphi_e^2(z) \varphi_h^2(z) \, .$$

Отдельный вклад дальнодействующего обменного взаимодействия получается из (7) формальным переходом к пределу $c \to \infty$, т.е. при $k \to 0$ или $\gamma = \sqrt{k^2 - q^2} \to iq$. В этом случае диагональные компоненты Σ становятся вещественными, так как их мнимые части связаны исключительно с процессом испускания фотона. Выражение для матричных элементов дальнодействующего обменного взаимодействия между электроном и дыркой в квантовой яме было получено ранее в [14] и представлено в более громоздкой форме, содержащей не огибающие $\varphi_{e,h}(z)$, а их фурье-компоненты

$$C(k_z) = \int dz \, \exp\left(-ik_z z\right)\varphi(z).$$

Пренебрегая межподзонным смешиванием, запишем огибающую волновой функции свободного экситона в идеальной квантовой яме в виде

$$\Psi_{exc}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = S^{-1/2} \exp\left(i\mathbf{q}\mathbf{R}_{\parallel}\right) f(\boldsymbol{\rho}) \varphi_e(z_e) \varphi_h(z_h) , \qquad (8)$$

где $\rho = \rho_e - \rho_h$ и \mathbf{R}_{\parallel} — центр тяжести экситона в плоскости *xy*. Тонкая структура и дисперсия свободных квазидвумерных экситонов в квантовых ямах с учетом обменного взаимодействия и запаздывания (или поляритонного эффекта) рассчитывались в ряде

11*

работ [14–17]. Используя (7), получаем в согласии с [14–17] для дисперсии 1*s*-экситона с тяжелой (*hh*1) или легкой (*lh*1) дыркой

$$E_{1} = -\frac{2\pi}{\kappa_{b}} i \left(\frac{e\hbar p_{0}}{m_{0}E_{g}}\right)^{2} \frac{k^{2}}{\sqrt{k^{2} - q^{2}}} P\left(\sqrt{k^{2} - q^{2}}\right) f^{2}(0) ,$$

$$E_{2} = -\frac{2\pi}{\kappa_{b}} i \left(\frac{e\hbar p_{0}}{m_{0}E_{g}}\right)^{2} \sqrt{k^{2} - q^{2}} P\left(\sqrt{k^{2} - q^{2}}\right) f^{2}(0) , \qquad (9)$$

$$E_{3} = \frac{2\pi}{\kappa_{b}} i \left(\frac{e\hbar p_{0}'}{m_{0}E_{g}}\right)^{2} \left[Q - \frac{i}{2}\sqrt{k^{2} - q^{2}} P\left(\sqrt{k^{2} - q^{2}}\right)\right] f^{2}(0) ,$$

где $E_{\alpha} = E'_{\alpha} - iE''_{\alpha}$ — комплексная энергия, вещественная часть которой равна $E'_{\alpha} = \hbar(\omega - \omega_0)$ ($\hbar\omega_0$ — энергия механического экситона при **q** = 0), а мнимая часть определяет радиационное время жизни экситона $\tau = 2\hbar/E''_{\alpha}$; индекс $\alpha = 1, 2, 3$ указывает поляризацию экситона: ось 1 перпендикулярна плоскости, содержащей ось z и волновой вектор **q**, ось 2 параллельна **q**, ось 3 параллельна оси z, $p_0(e1-hh1) = p_{cv}$, $p_0(e1-hh1) = 0$, $p'_0(e1-hh1) = 2p_{cv}/\sqrt{3}$, p_{cv} — межзонный матричный элемент $i\langle S|p_z|Z\rangle$ в прямозонных полупроводниках со структурой цинковой обманки.

Перейдем для экситонов с тяжелой дыркой к двум базисным состояниям $|\nu, \mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h\rangle$, поляризованным вдоль фиксированных осей x, y, и двум оптически неактивным состояниям с полным спином $m + n = \pm 2$. В этом базисе формула (7) принимает вид

$$\Sigma(\nu', \mathbf{k}'_{e}, \mathbf{k}'_{h}; \nu, \mathbf{k}_{e}, \mathbf{k}_{h}; \omega) = \frac{1}{Sf^{2}(0)} \left[E_{1} \left(\delta_{\nu'\nu} - \frac{q_{\nu'}q_{\nu}}{q^{2}} \right) + E_{2} \frac{q_{\nu'}q_{\nu}^{*}}{q^{2}} \right] \delta_{\mathbf{k}'_{e} + \mathbf{k}'_{h}, \mathbf{k}_{e} + \mathbf{k}_{h}} = \frac{2\pi}{S\kappa_{b}} i \left(\frac{e\hbar p_{0}}{m_{0}E_{g}} \right)^{2} \frac{q_{\nu'}q_{\nu} - k^{2}\delta_{\nu'\nu}}{\sqrt{k^{2} - q^{2}}} P\left(\sqrt{k^{2} - q^{2}} \right) \delta_{\mathbf{k}'_{e} + \mathbf{k}'_{h}, \mathbf{k}_{e} + \mathbf{k}_{h}}.$$
 (10)

4. ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭКСИТОНА В МОДЕЛИ БЕСКОНЕЧНО ВЫСОКИХ БАРЬЕРОВ

Рассчитаем энергию и обменное расщепление экситона, локализованного на флуктуации ширины квантовой ямы. За пределами островка квантовая яма состоит из Nмономолекулярных слоев (в GaAs ширина монослоя $a_0/2 = 2.8$ Å), один из интерфейсов является плоским, а второй интерфейс в области островка сдвинут на монослой в глубь барьера, т. е. в этой области ширина ямы равна $(N + 1)a_0/2$. Островок выбран в форме прямоугольника, ориентированного вдоль осей x и y.

Вначале для оценки проведем рассмотрение в рамках простой модели бесконечно высоких барьеров и пренебрежем расплыванием экситона за пределы островка. Предполагая, что линейные размеры прямоугольника L_x, L_y превышают экситонный боровский радиус a_B , запишем огибающую волновой функции экситона в виде

$$\Psi_{exc}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = F(X, Y) f(\boldsymbol{\rho}) \varphi_e(z_e) \varphi_h(z_h) , \qquad (11)$$

где функции f, φ_e, φ_h введены в (8) и характеризуют состояние свободного экситона в идеальной яме шириной $(N + 1)a_0/2$, X и Y — компоненты вектора \mathbf{R}_{\parallel} , функция

F(X, Y) описывает локализацию 1*s*-экситона как целого в плоскости интерфейсов. Используя в качестве граничных условий обращение в нуль этой функции на периметре прямоугольника, получаем набор решений в форме

$$F(X,Y) = F_x(X)F_y(Y), \qquad (12)$$

где $F_{\alpha}(x_{\alpha})$ ($\alpha = x, y$) — одномерные функции размерного квантования

$$\sqrt{\frac{2}{L_{\alpha}}} \begin{cases} \cos\left(\pi j x_{\alpha}/L_{\alpha}\right) & \text{при нечетном } j, \\ \sin\left(\pi j x_{\alpha}/L_{\alpha}\right) & \text{при четном } j. \end{cases}$$
(13)

Энергия локализованного экситона, отсчитанная от дна экситонной зоны в (N + 1)монослойной яме, характеризуется двумя индексами j, j':

$$E_{jj'} = \frac{\hbar^2}{2M} \left[\left(\frac{j}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{j'}{L_y} \right)^2 \right] , \qquad (14)$$

где M — трансляционная масса экситона при его движении в плоскости xy. Каждый уровень $E_{jj'}$ состоит из четырех подуровней, которые для тяжелого экситона в квантовых ямах типа GaAs/AlGaAs характеризуются проекцией суммарного спина $m + n = \pm 1, \pm 2$. Выберем базисные состояния в виде $|j, j', x\rangle$, $|j, j', y\rangle$, $|j, j', \pm 2\rangle$, где $|j, j', x\rangle = (|j, j', 1\rangle + |j, j', -1\rangle)/\sqrt{2}$, $|j, j', y\rangle = (|j, j', 1\rangle - |j, j', -1\rangle)/\sqrt{2}$. При нормальном падении света матричный элемент оптического возбуждения экситона пропорционален интегралу $\int dXdY F(X, Y)$. Поэтому подуровни $E_{jj',x}, E_{jj',y}$ с нечетными j, j'оптически активны в поляризациях $\mathbf{e} \parallel x$ и $\mathbf{e} \parallel y$ соответственно, а все остальные экситонные состояния — $|j, j', \pm 2\rangle$ с любыми j, j' и $|j, j', x\rangle, |j, j', y\rangle$ при хотя бы одном четном индексе j или j' — оптически неактивны. Однако дальнодействующее обменное взаимодействие (10) приводит к расщеплению между подуровнями $E_{jj',x}, E_{jj',y}$ при произвольных j и j'. Действительно, переходя от функций F(x) к фурье-компонентам

$$F(q) = \int dx \ F(x) e^{-iqx}$$

и используя выражение (10) для собственно-энергетической функции Σ , находим перенормировку энергии локализованного экситона $|j, j', \nu\rangle$ ($\nu = x, y$):

$$\Delta E_{\nu} = \frac{2\pi}{S\kappa_{b}} \left(\frac{e\hbar p_{0}}{m_{0}E_{g}}\right)^{2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{q_{\nu}^{2} - k^{2}}{\sqrt{q^{2} - k^{2}}} F_{x}^{2}(q_{x}) F_{y}^{2}(q_{y}) \times \\ \times \left[\theta(q-k) P\left(\sqrt{k^{2} - q^{2}}\right) - i \theta(k-q) \operatorname{Im} P\left(\sqrt{k^{2} - q^{2}}\right)\right],$$
(15)

где $\theta(t) = 1$ при t > 0 и $\theta(t) = 0$ при t < 0, $k = \sqrt{\kappa_b} \omega_{jj'}/c$, $\hbar \omega_{jj'} = E_{1s}(N+1) + E_{jj'}$, $E_{1s}(N+1)$ — энергия возбуждения свободного экситона 1s с $q_x = q_y = 0$ в (N+1)-монослойной квантовой яме¹⁾. Так как в сумму (15) входят квадраты фурье-компонент $F_{\alpha}(q_{\alpha})$, то эта сумма отлична от нуля для состояний как с нечетным, так и с четным

¹⁾ В пределах точности метода эффективной массы частоту $\omega_{jj'}$ в выражении для k и величину E_g/\hbar в (15) можно заменить на резонансную частоту возбуждения локализованного экситона.



Рис. 3. Расщепление радиационного дублета в экситоне (1,1), рассчитанное в модели бесконечно высоких барьеров (штриховые кривые) и в приближении факторизованных огибающих (сплошные кривые) для трех значений длины $L_x = 950$ Å (1), 700 Å (2) и 450 Å (3)

индексом *j* или *j'*. Заметим, что мнимая единица в квадратных скобках под знаком суммы компенсируется мнимостью корня $\sqrt{q^2 - k^2}$ при k > q, а при k < q величина $P\left(\sqrt{k^2 - q^2}\right)$ вещественна. Оценки показывают, что для типичных квантовых ям вклад в сумму от области k > q пренебрежимо мал, и этот вклад учтен в (15) для общности. На рис. 3 штриховыми линиями показана зависимость от L_y расщепления $E_x - E_y$ между радиационными состояниями $|1, 1, x\rangle$ и $|1, 1, y\rangle$, рассчитанная при трех различных значениях L_x для 10-монослойной квантовой ямы GaAs/AlGaAs и 11-монослойного островка. Из рис. 3 видно, что в рассматриваемом диапазоне размеров островка расщепление лежит в пределах ±50 мкэВ (микроэлектронвольт). Это намного меньше энергетического расстояния между уровнями локализованных состояний (порядка мэВ или больше), что позволяет при расчете обменных поправок ограничиться первым порядком теории возмущений.

5. ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭКСИТОНА В ПРИБЛИЖЕНИИ ФАКТОРИЗОВАННЫХ ОГИБАЮЩИХ

Разность $E_{1s}(N) - E_{1s}(N+1) \equiv U$ энергий возбуждения свободных 1s-экситонов в N- и (N+1)-монослойных квантовых ямах определяет высоту барьера, локализующего экситон в островке. В структуре GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As величина U при N = 10 составляет 11 мэВ. В данном разделе мы проанализируем влияние конечности барьера U на экситонные уровни $E_{jj'}$ и их обменное расшепление. При $L_x, L_y > a_B$ огибающую $\Psi_{exc}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ можно приближенно представить в виде (11), имея в виду, что в качестве $f(\rho), \varphi_e(z_e), \varphi_h(z_h)$ фигурируют функции, рассчитанные для (N+1)-монослойной ямы, если координаты X, Y лежат внутри островка, или для N-монослойной ямы в области вне островка. Тогда огибающая F(X, Y) удовлетворяет двумерному уравнению Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2}\right) - U\theta\left(\frac{L_x}{2} - |X|\right)\theta\left(\frac{L_y}{2} - |Y|\right)\right]F(X,Y) = -\varepsilon F(X,Y), \quad (16)$$

где ε — энергия локализации экситона ($\varepsilon > 0$), связанная с энергией $E_{jj'}$ соотношением $E_{jj'} = U - \varepsilon_{jj'}$. Предполагается, что огибающая F(X, Y) и ее производная в направлении перпендикулярном стороне прямоугольника непрерывны на периметре островка. Эффективный приближенный метод решения такого рода уравнений был предложен в работе [18]. Функция F(X, Y) ищется в виде произведения функций $F_x(X)$ и $F_y(Y)$, удовлетворяющих системе уравнений

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dX^2} - UP_y \theta\left(\frac{L_x}{2} - |X|\right)\right]F_x(X) = -\varepsilon_x F_x(X),$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dY^2} - UP_x \theta\left(\frac{L_y}{2} - |Y|\right)\right]F_y(Y) = -\varepsilon_y F_y(Y),$$
(17)

связанных друг с другом через величины

$$P_x = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} F_x^2(X) \, dX, \quad P_y = \int_{-L_y/2}^{L_y/2} F_y^2(Y) \, dY.$$

Последние отличны от единицы в меру проникновения функций $F_x(X), F_y(Y)$ под потенциальные барьеры. Энергия локализации экситона выражается через вспомогательные энергии $\varepsilon_x, \varepsilon_y$ в виде $\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y - UP_x P_y$. Локализованные состояния по-прежнему характеризуются парой индексов j, j', где j - 1 и j' - 1 определяют число нулей функций $F_x(X)$ и $F_y(Y)$ соответственно. На рис. 4 сплошными линиями показана энергия локализации основного состояния экситона, связанного на островке в квантовой яме GaAs/AlGaAs(001), ширина которой флуктуирует в пределах от 10 до 11 монослоев. Для сравнения на том же рисунке приведена также зависимость $E_{11}(L_y)$, рассчитанная при L_x = 450 Å в модели бесконечно высоких барьеров $U \to \infty$ (штриховая кривая). При этом $P_x = P_y = 1, \varepsilon \to \infty$, а $U - \varepsilon$ остается конечной величиной. Сопоставление штриховой кривой со сплошной кривой 3 показывает, что модель бесконечно высоких барьеров довольно сильно завышает значения энергии локализованных экситонов. Для возбужденных уровней $E_{jj'}$ с j + j' > 2 расхождение между результатами двух расчетов еще более возрастает. В то же время замена в системе уравнений (17) P_x и P_y на единицу, вследствие чего эта система расцепляется на два несвязанных одномерных уравнения Шредингера, приводит к результатам, практически совпадающим с расчетом в приближении факторизованной огибающей.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сплошные кривые на рис. З рассчитаны по формуле (15) в приближении факторизованной огибающей F(X, Y), т. е. при подстановке в (15) функций, удовлетворяющих уравнениям (17). Видно, что в отличие от энергии E_{11} расщепление $E_x - E_y$ мало чувствительно к способу расчета. На рис. 5 представлены зависимости энергии $E_{jj'}$ и расщепления $E_{jj',x} - E_{jj',y}$ от длины одной из сторон прямоугольника при фиксированной длине $L_x = 950$ Å другой стороны. Наблюдавшаяся в [6] последовательность знаков расщепления воспроизводится в области $L_y = 420$ -480 Å. Согласно (15), знак расщепления $E_x - E_y \equiv \Delta E_x - \Delta E_y$ в основном определяется знаком разности средних квадратов $\langle q_x^2 \rangle$ и $\langle q_y^2 \rangle$. Используя (17), можно показать, что $\langle q_x^2 \rangle - \langle q_y^2 \rangle = (\varepsilon_y - \varepsilon_x) \cdot 2M/\hbar^2$. Очевидно, при j = j' расщепление уровней $E_{jj',x}$ и $E_{jj',y}$ отрицательно, если $L_y < L_x$, и положительно, если $L_y > L_x$, что согласуется с кривыми 11 и 22 на рис. 5. С ростом квантового числа *j* дисперсия $\langle q_{\nu}^2 \rangle$ возрастает, а энергия ε_{ν} соответственно уменьшается. Поэтому при близких L_x и L_y знаки разностей $E_{jj',x} - E_{jj',y}$ и j - j' совпадают.

Короткодействующее обменное взаимодействие также приводит к расщеплению состояний $|jj', x\rangle$, $|jj', y\rangle$. При расчете короткодействующего вклада нужно учесть индуцированное островком подмешивание к состояниям тяжелой дырки с проекцией момента $\pm 3/2$ состояний легкой дырки $\pm 1/2$. Оценки показывают, что этим вкладом в $E_x - E_y$ можно пренебречь по сравнению с аналогичным вкладом дальнодействующего обменного взаимодействия в меру малости ширины квантовой ямы по сравнению с размерами островка в плоскости интерфейсов.

Как уже отмечалось, вследствие прямоугольной симметрии локализующего потенциала, состояния $|j, j', \nu\rangle$ с четным j или j' не взаимодействуют с фотонами, распространяющимися вдоль оси z. Оптические переходы в возбужденные состояния локализованного экситона с нечетными j, j' разрешены, но вероятности таких переходов $w_{jj',\nu}$ $B \sim (jj')^2$ раз меньше по сравнению с возбуждением основного состояния с j = j' = 1. Наблюдение в спектре возбуждения фотолюминесценции [6] набора дублетов, компоненты которых поляризованы вдоль осей [110] и [110], можно объяснить, предполагая, что локализующий анизотропный островок вытянут вдоль одной из этих осей, но его форма не вполне инвариантна к отражению в плоскостях (110) и (110). Иными словами, при расчете обменного расщепления можно считать, что эти элементы симметрии в системе имеются, и для определенности выбрать островок в форме прямоугольника, а при расчете вероятностей переходов $w_{ij',\nu}$ учесть искажение формы островка, приводящее к подмешиванию к возбужденным состояниям $|j, j', \nu\rangle$ основного состояния $|1, 1, \nu\rangle$. Тогда вероятности $w_{ij',\nu}$ для всех возбужденных уровней будут отличны от нуля, но малы по сравнению с $w_{11,\nu}$. В качестве альтернативы можно предположить, что линии, наблюдавшиеся в спектре возбуждения фотолюминесценции, отвечают основным



Рис. 4. Энергия основного состояния (1,1) локализованного экситона в зависимости от длины L_y при фиксированном значении $L_x = 950$ Å (кривая 1), 700 Å (кривая 2) и 450 Å (кривая 3). Штриховая кривая рассчитана при $L_x = 450$ Å в модели бесконечно высоких барьеров



Рис. 5. Уровни энергии $E_{jj'}$ локализованного экситона (a) и расщепление $E_x - E_y$ между локализованными состояниями $|j, j', x\rangle$ и $|j, j', y\rangle$ (b) в зависимости от длины L_y при фиксированном значении $L_x = 950$ Å (см. вставку) в квантовой яме GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As шириной 28 Å (N = 10). У кривых приведены пары индексов jj', обозначающие экситонные состояния. Сплошные и штриховые участки кривых соответствуют положительным и отрицательным значения расщепления

состояниям экситонов, которые локализованы на различных островках, расположенных на малом расстоянии друг относительно друга, так что возможны индуцированные акустическими фононами туннельные переходы с одного островка на другой. В этом случае чередование знаков расщепления $E_{1\bar{1}0} - E_{110}$ означало бы, что одни островки ориентированы вдоль оси [110], а другие — вдоль оси [110], это находится в противоречии с рис. 1 из статьи [6], на котором представлена фотография поверхности GaAs, полученная сканирующим электронным микроскопом.

Таким образом, в рамках развитой теории удается объяснить наблюдавшиеся в [6] порядок величины и чередование знака расщепления основного и возбужденных состояний экситона, локализованного на анизотропном островке в структуре с квантовой ямой. Мы считаем, что расщепление радиационных экситонных состояний, обнаруженное в [19] в квантовых ямах GaAs/AlGaAs, также связано с анизотропией локализующих островков. В структурах с квантовыми ямами, исследованных Хеллером и Бокельманом [20], оптическая ориентация локализованных экситонов наблюдалась только при приложении внешнего магнитного поля, что естественно объясняется в предположении расщепления радиационного дублета. В заключение заметим, что характер ориентации анизотропных островков должен сильно зависеть от выбора гетеропары и технологии выращивания структуры. В частности, возможно и хаотическое распределение островков по направлениям, при котором в среднем структура изотропна в плоскости интерфейса. Тем не менее подавляющее большинство островков анизотропно, и эта локальная анизотропия, приводящая к расщеплению радиационных состояний локализованных экситонов, может эффективно исследоваться методом оптической ориентации и выстраивания экситонов в магнитном поле.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 95-02-06038), INTAS (грант 93-3657-Ext), а также Фондом Volkswagen.

Литература

- 1. T. Takagahara, J. Lumin. 44, 347 (1989).
- 2. H. Kalt, J. Collet, S. D. Baranovskii, R. Saleh, P. Thomas, Le Si Dang, and J. Cibert, Phys. Rev. B 45, 4253 (1992).
- 3. L. E. Golub, E. L. Ivchenko, and A. A. Kiselev, J. Opt. Soc. Amer. B 13, 1199 (1996).
- 4. G. Bastard, C. Delalande, M. H. Meynadier, P. M. Frijlink, and M. Voos, Phys. Rev. B 29, 7042 (1984).
- 5. L. E. Golub and A. A. Kiselev, in *Proc. 23rd Int. Symposium on Compound Semiconductors* (St. Petersburg, 1996), Inst. Phys. Conf. Ser. № 155: Chapter 9, р. 687; Л. Е. Голуб, ФТТ **39**, 167 (1997).
- 6. D. Gammon, E. S. Snow, B. V. Shanabrook, D. S. Katzer, and D. Park, Phys. Rev. Lett. 76, 3005 (1996).
- S. V. Goupalov, E. L. Ivchenko, and A. V. Kavokin, in Proc. Int. Symp. «Nanostructures: Physics and Technology» (St. Petersburg, 1996), p. 322; in Abstract Workbook of 9-th Int. Conf. on Superlattices, Microstructures and Microdevices (Liege, Belgium, 1996), p. MoPPT-14.
- 8. Г. Е. Пикус, Г. Л. Бир, ЖЭТФ 60, 195 (1971); 62, 324 (1972).
- 9. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, Наука, Москва (1972).
- 10. V. A. Kiselev, B. S. Razbirin, and I. N. Uraltsev, Phys. Stat. Sol.(b) 72, 161 (1975).
- 11. Е. М. Гамарц, Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, Б. С. Разбирин, А. Н. Старухин, ФТТ 22, 3620 (1980).
- Е. М. Гамарц, Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, Б. С. Разбирин, В. И. Сафаров, А. Н. Старухин, ФТТ 24, 2325 (1982).
- В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург, Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов, Наука, Москва (1979).
- 14. S. Jorda, U. Rössler, and D. Broido, Phys. Rev. B 48, 1669 (1993).
- 15. L. C. Andreani and F. Bassani, Phys. Rev. B 41, 7536 (1990).
- 16. Е. Л. Ивченко, ФТТ 33, 2388 (1991).
- 17. F. Tassone, F. Bassani, and L. C. Andreani, Phys. Rev. B 45, 6023 (1992).
- 18. G. Bastard and J. Y. Marzin, Solid State Commun. 91, 39 (1994).
- E. Blackwood, M. J. Snelling, R. T. Harley, S. R. Andrews, and C. B. T. Foxon, Phys. Rev. B 50, 14246 (1994).
- 20. W. Heller and U. Bockelmann, Phys. Rev. B 55, 4871 (1997).