

ЭФФЕКТ МАГНИТОИНДУЦИРОВАННОЙ НЕПАРАБОЛИЧНОСТИ ДИСПЕРСИИ ЭКСИТОНА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С НЕВЫРОЖДЕННОЙ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНОЙ

Д. К. Логинов, А. Д. Чегодаев*

*Санкт-Петербургский государственный университет
1985034, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 9 декабря 2010 г.

Рассмотрен эффект непараболичности экситонной дисперсии, обусловленной смешиванием основного и возбужденных состояний экситона во внешнем магнитном поле, перпендикулярном направлению его движения. Предложена модель, описывающая этот эффект, и проведен расчет величины непараболичности для экситона в кристалле CdTe. Проведено сопоставление магнитоиндукционного эффекта экситонной непараболичности с эффектом, обусловленным непараболичностью дисперсии энергии электронов в зоне проводимости.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования экситонов и других водородоподобных систем, движущихся во внешних магнитных полях, ведутся не первое десятилетие. К одной из первых работ такого типа обычно относят работу [1], в которой рассмотрено влияние магнитного поля на тонкую структуру спектра атома водорода. Поскольку простейшей моделью экситона является водородоподобная модель, результаты этой работы представляют интерес для физики экситонов. В частности, в этой работе рассмотрено уравнение Шредингера, в котором учитывается влияние магнитного поля на движущуюся водородоподобную систему. Однако в работе [1] нет анализа возможных изменений кинетической энергии атома водорода, вытекающих из этого уравнения. Этот анализ был сделан в работе [2], авторы которой использовали результаты работы [1] и развили теорию экситона в сильном поперечном магнитном поле.

Экспериментальные исследования движущихся экситонов в магнитном поле долгое время не проводились, поскольку движущийся экситон не взаимодействует со светом и его наблюдение затруднено. Такие исследования стали возможны по мере развития технологии приготовления тонких кристаллов и

эпитаксиальных гетероструктур, в которых происходит квантование движения экситона. Преимущество экспериментов с такими объектами заключается в том, что в оптических спектрах широких квантовых ям (КЯ) или тонких кристаллов наблюдаются особенности, связанные с уровнями размерного квантования движения экситона, которые соответствуют состояниям с ненулевым волновым вектором трансляционного движения \mathbf{K} . Это позволяет непосредственно исследовать влияние магнитного поля на дисперсионную зависимость экситона $\mathbf{K}(\omega, \mathbf{B})$ [3–8].

Результаты первых экспериментальных исследований размерного квантования экситонов в широких КЯ во внешнем магнитном поле были опубликованы в работах [9–15]. Эксперименты показали, что в оптических спектрах пропускания и отражения экситонных поляритонов при приложении магнитного поля наблюдается ряд необычных эффектов, которые ранее не наблюдались ни в объемных материалах, ни в структурах с узкими КЯ.

Наибольший интерес для настоящего исследования представляют результаты работ [13–15], в которых экспериментально исследуются спектры отражения света от полупроводниковых структур CdTe/Cd_{0.3}Zn_{0.7}Te во внешнем магнитном поле B в геометрии Фогта. Авторам этих работ удалось наблюдать два эффекта. Первый из них состоит в том,

*E-mail: loginov999@gmail.com

что при приложении магнитного поля в спектрах отражения, наряду со спектральными осцилляциями, обусловленными интерференцией оптически активных $1s$ -экситонных поляритонных волн, начинают проявляться дополнительные спектральные осцилляции. Они были интерпретированы авторами как следствие возгорания оптически неактивных состояний ($1s$ -экситонов с угловым моментом 2), вызванное их смешиванием с оптически активными состояниями. Отметим, что этот эффект описывается членами гамильтониана Латтинжера, линейно зависящими от B [14]. Второй эффект состоит в том, что в магнитном поле $B \geq 6$ Тл, спектральное расстояние между соседними осцилляциями в спектре уменьшается: спектральные особенности «сбегают» к основному максимуму и происходит «сжатие спектра». В работе [15] было показано, что этот эффект обусловлен смешиванием основных $1s$ - и возбужденных $2p$ -состояний экситона и может быть интерпретирован как магнитоиндукционное увеличение эффективной массы экситона M . Следует отметить, что обсуждаемый в этих работах эффект проявляется в относительно небольших магнитных полях, слабо возмущающих тонкую структуру энергетических уровней экситона.

В работах [13–15] дисперсионные зависимости энергии поляритонной моды вычислялись не аналитически, а численно, что не позволило судить об истинном характере зависимости энергии поляритона от волнового вектора. Анализ характера магнитоиндукционных изменений дисперсионной зависимости в работе [15] был ограничен квадратичной аппроксимацией в узком диапазоне значений K . Вследствие этого остался невыясненным вопрос о том, насколько хорошо квадратичная аппроксимация описывает магнитоиндукционное изменение дисперсионных зависимостей энергии экситона для больших значений волновых векторов, и можно ли строго говорить о возникновении поправки к эффективной массе или это изменение не является квадратичным по K . Целью настоящей работы является строгое аналитическое решение задачи о дисперсии энергии движения экситона в поперечном магнитном поле и выяснение истинного характера магнитоиндукционного изменения его энергии. Как будет показано ниже, смешивание экситонных состояний магнитным полем приводит к непарabolичности, которую, таким образом, можно назвать магнитоиндукционной.

В разд. 2 настоящей работы рассмотрены основные уравнения и теоретические подходы. В разд. 3 представлены основные результаты и их обсужде-

ние. Заключительная часть содержит основные выводы по результатам проведенных исследований.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Задача о магнитоиндукционных эффектах дисперсии экситонной зоны будет рассматриваться в модели (аналогичной использованной в работах [13–15]), в которой трансляционное движение экситона направлено вдоль кристаллографического направления [001], а магнитное поле приложено поперек этого направления. При этом будем считать, что направление [001] совпадает в рассматриваемой системе отсчета с осью z , а вектор напряженности магнитного поля \mathbf{B} лежит в плоскости xy . Будем также считать, что проекции волнового вектора трансляционного движения $K_z = K$, $K_x = K_y = 0$. В такой постановке задачи можно отвлечься от анизотропии трансляционной массы экситона [16], что существенно упростит анализ и принципиально не повлияет на правильность полученных результатов.

Согласно работе [15], наблюдаемые в экспериментах [14] эффекты обусловлены смешиванием в поперечном магнитном поле различных экситонных состояний. Там же было показано, что основной вклад в эффект магнитоиндукционного изменения дисперсионных зависимостей экситонных зон вносит смешивание основного $1s$ -состояния с возбужденными $2p$ -состояниями тяжелого экситона. Легкий экситон не вносит заметного вклада в эффект, поскольку при ненулевом волновом векторе дисперсионные зависимости двух этих экситонов начинают быстро расходиться по шкале энергии, что приводит к резкому снижению эффективности их взаимодействия для состояний с большими значениями K [13, 14]. При малых же значениях волнового вектора эффект смешивания является также малым, поскольку пропорционален K . Кроме того, в ряде случаев дно зоны легкого экситона сдвинуто по энергии по отношению к дну зоны тяжелых экситонов, что также снижает эффективность магнитоиндукционного смешивания. Такая ситуация реализуется, например, для полупроводников с решеткой, имеющей симметрию вюрцита, либо в полупроводниковых гетероструктурах, в которых из-за разности постоянных решеток материалов существует сильное одноосное напряжение [13, 14]. По этой причине, как и в упомянутых выше работах, будут рассматривать состояния только тяжелого экситона.

Аналогично работе [15], гамильтониан экситона в магнитном поле составим из гамильтонианов элек-

трана и дырки. В отличие от [19], игнорируем светоэкситонное взаимодействие, поскольку его влияние является существенным только в области антипересечения световой и экситонной дисперсионных зависимостей. Его величину можно оценить по продольно-поперечному расщеплению экситона $\hbar\omega_{LT}$, которое мало. Критерием малости в данном случае может послужить неравенство: $\hbar\omega_{LT} \ll R_X$, где R_X — энергия связи основного экситонного состояния. Величина R_X в рамках приближений, использованных в настоящей работе, зависит только от свойств материала и при любых значениях индукции магнитного поля остается константой. В спектральной области, удаленной от точки антипересечения, светоэкситонное взаимодействие приводит только к сдвигу экситонных дисперсионных зависимостей на постоянную величину $\hbar\omega_{LT}$, но не влияет на их кривизну.

Как было показано в работе [15], гамильтониан экситона для такой задачи может быть записан в следующем виде:

$$\hat{H}_X = \hat{H}_{\mathbf{R}}(\mathbf{K}) + \hat{H}_{\mathbf{r}}(\mathbf{p}) + \hat{V}_1 + \hat{V}_2. \quad (1)$$

Первое слагаемое в этом выражении — гамильтониан трансляционного движения экситона:

$$\hat{H}_{\mathbf{R}}(\mathbf{K}) = E_g + \hbar^2 \hat{K}^2 / 2M + \Delta_J, \quad (2)$$

где E_g — ширина запрещенной зоны, $M = m_e + m_{h,\parallel}$ — трансляционная масса экситона (m_e — эффективная масса электрона, $m_{h,\parallel}$ — эффективная масса дырки при ее движении вдоль оси z), $\hbar\hat{K} = -i\hbar\partial/\partial Z$ — оператор импульса трансляционного движения экситона вдоль оси z (Z — проекция радиус-вектора трансляционного движения экситона на ось z), Δ_J — величина обменного расщепления для оптически активного и неактивного экситонных состояний ($J = 1, 2$). Второе слагаемое в выражении (1) — гамильтониан относительного движения электрона и дырки:

$$\hat{H}_{\mathbf{r}}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} - \frac{e}{\mu c^2} B^2 r^2, \quad (3)$$

где $\mathbf{p} = -i\hbar\partial/\partial\mathbf{r}$ — оператор импульса относительного движения электрона и дырки ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e$ — координата относительного движения электрона и дырки), e — заряд электрона, ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость среды, μ — приведенная масса экситона. Следует отметить, что приведенная масса является анизотропной, что обусловлено анизотропией массы дырки. Согласно работе [16] масса дырки имеет значение $m_{h,\parallel} = 1/(\gamma_1 - 2\gamma_2)$ для движения вдоль оси z и значение $m_{h,\perp} = 1/(\gamma_1 + \gamma_2)$ для

движения в плоскости, перпендикулярной к оси z (γ_1, γ_2 — параметры Латтинжера). Эффект анизотропии μ влияет на энергию связи R_X и радиус экситона a_B . Энергия связи экситона R_X определяется как низшее собственное значение оператора (3), взятое по модулю. Ее вычисление при наличии анизотропии приведенной массы является нетривиальной задачей, рассмотренной в работе [17] в рамках теории возмущений. В этой работе показано, что с точностью до членов второго порядка малости R_X и a_B правильно вычисляются при использовании изотропной приведенной массы μ , определяемой выражением $1/\mu = 1/m_e + \gamma_1/m_0$.

Последние два слагаемых в гамильтониане (1) являются возмущениями. Как было показано в работе [17], первое из них зависит только от магнитного поля:

$$\hat{V}_1 = \mu_B g \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (4a)$$

Второе слагаемое, рассмотренное в работе [15], зависит от произведения магнитного поля на оператор волнового вектора трансляционного движения:

$$\hat{V}_2 \sim - \left(\frac{\hbar e}{2cM} \right) \hat{K} (B_x y - i B_y x). \quad (4b)$$

В этих выражениях B_x, B_y — проекции магнитного поля на координатные оси, $\boldsymbol{\sigma}_{x,y,z}$ — матрицы Паули, приведенные, например, в работах [18–20], μ_B — магнетон Бора, x, y — координаты относительного движения электрона и дырки.

Для решения задачи в качестве базисных используем водородоподобные волновые функции состояний экситона, которые, как и в работе [19], будем обозначать $|n, L, J\rangle$, где L и J — проекции соответственно орбитального и углового моментов экситона на ось z , n — главное квантовое число.

Диагональные матричные элементы оператора (1) могут быть записаны в следующем виде:

$$\begin{aligned} H_{n,L,J} &= \langle n, J, L | \hat{H}_X | n, J, L \rangle = \\ &= E_g - R_n + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \Delta_J + D_L B^2. \end{aligned} \quad (5)$$

В последнем выражении R_n — энергия связи экситона в состоянии с главным квантовым числом n , D_L — константа, описывающая диамагнитный сдвиг состояния с проекцией орбитального момента на выделенную ось L . При этом $R_n = -e^2 \mu / (2\hbar^2 n^2 \epsilon_0^2)$ и $D_L = (1/\mu)(ea_B/c)^2 I_L B^2$, где $a_B = \mu e^4 / 2\hbar^2 \epsilon_0^2$ — боровский радиус экситона, $I_L = \langle n, L, J | \alpha^2 | n, L, J \rangle$ ($\alpha = x, y$). Прямое вычисление матричных элементов I_L на волновых функциях $1s$ - и $2p$ -состояний экситона дает следующие значения: $I_{L=0} = 1.3(a_B)^2$, $I_{L=1} = 6.6(a_B)^2$.

Оператор (4а) смешивает оптически активные и оптически неактивные состояния экситонов, и его матричный элемент равен [15]

$$\hat{V}_1 = \langle n_1, L_1, J_1 | \hat{V}_1 | n_2, L_2, J_2 \rangle = \\ = (1/2) \mu g B \delta_{L_1, L_2} \delta_{J_1, \pm 1} \delta_{J_2, \pm 2} \delta_{n_1, n_2}. \quad (6\text{a})$$

Матричный элемент оператора (4б) может быть записан следующим образом:

$$\hat{V}_2 = \frac{2\hbar e}{cM} K \left(iB_x I_N^{(y)} \pm B_y I_N^{(x)} \right) \times \\ \times \delta_{J_1, J_2} \delta_{L_1, 0} \delta_{L_2, \pm 1}. \quad (6\text{b})$$

Результаты непосредственного вычисления интегралов $I_N^{(\alpha)}$ на собственных функциях основного $1s$ -состояния и нескольких возбужденных состояний демонстрируют, что равны нулю все интегралы кроме

$$I_{\pm 1}^{(\alpha)} = \langle 1, 0, J | \alpha | 2, \pm 1, J \rangle \approx a_B \cdot 0.37, \quad J = \pm 1, \pm 2.$$

Таким образом, в дальнейшем анализе эффекта непараболичности следует ограничиться учетом смешивания $1s$ -состояний только с $2p_{x,y}$ -состояниями экситонов. Для этих состояний матричные элементы записываются окончательно в виде

$$V_2 = 0.37 \frac{2\hbar e a_B}{cM} K (iB_x + B_y) \delta_{J_1, J_2} \delta_{L_1, 0} \delta_{L_2, \pm 1}. \quad (7)$$

Всего в рассматриваемой задаче фигурируют двенадцать состояний. Из них четыре основных $1s$ -состояния $|n, L, J\rangle$ с $n = 1$, $J = \pm 1, \pm 2$ и $L = 0$ и восемь $2p$ -состояний с $n = 2$, $J = \pm 1, \pm 2$ и $L = \pm 1$. Вол-

новая функция смешанного состояния запишется в виде

$$\Psi(Z) = C_{1,0,1}(Z) |1, 0, 1\rangle + C_{1,0,2}(Z) |1, 0, 2\rangle + \\ + C_{2,1,1}(Z) |2, 1, 1\rangle + C_{2,1,2}(Z) |2, 1, 2\rangle + \\ + C_{2,-1,1}(Z) |2, -1, 1\rangle + C_{2,-1,2}(Z) |1, -1, 2\rangle, \quad (8)$$

где $C_{n,L,J}$ — коэффициенты, описывающие смешивание базисных состояний. Они находятся из системы уравнений, которую можно получить, умножая уравнение Шредингера $H_X \Psi = E\Psi$ слева поочередно на все базисные волновые функции с последующим интегрированием. Количество уравнений будет соответствовать количеству базисных состояний, рассматриваемых в задаче. При этом система уравнений может быть записана в матричном виде: $\mathbf{H}_X \mathbf{C} = E\mathbf{C}$, где \mathbf{H}_X — матрица размером 12×12 , а \mathbf{C} — вектор столбец, состоящий из коэффициентов $C_{n,L,J}$.

Как известно (см., например, работу [21]), чтобы получить дисперсионные зависимости энергии экситона, необходимо решить секулярное уравнение $\det|\mathbf{H}_X - EI| = 0$, где \mathbf{I} — единичная матрица. Секулярное уравнение является полиномом, степень которого равна размерности матрицы, т. е. двенадцати в данном случае. Возможность аналитического решения такого секулярного уравнения представляется неочевидной.

Для получения искомого решения заметим, прежде всего, что все экситонные состояния, различающиеся только знаком углового момента экситона, вырождены по энергии, т. е. $H_{n,L,J} = H_{n,L,-J}$ для $n = 1, 2$, $L = 0, 1$, $J = \pm 1, \pm 2$ и не смешиваются рассматриваемыми возмущениями. Поэтому матрица экситонного гамильтониана является блочно-диагональной, причем оба блока одинаковы и система уравнений для рассматриваемых 12 состояний может быть записано в виде

$$\mathbf{H}_X \mathbf{C} = \begin{pmatrix} H_{1,0,1} & V_1 & V_2 & 0 & V_2 & 0 & 0 \\ V_1^* & H_{1,0,2} & 0 & V_2 & 0 & V_2 & C_{1,0,1} \\ V_2^* & 0 & H_{2,1,1} & V_1 & 0 & 0 & C_{1,0,2} \\ 0 & V_2^* & V_1^* & H_{2,1,2} & 0 & 0 & C_{2,1,1} \\ V_2^* & 0 & 0 & 0 & H_{2,-1,1} & V_1 & C_{2,1,2} \\ 0 & V_2^* & 0 & 0 & V_1^* & H_{2,-1,2} & C_{2,-1,1} \\ & & & & & & C_{2,-1,2} \end{pmatrix} = E\mathbf{C}. \quad (9)$$

Здесь показан блок матрицы гамильтониана, вычисленный на волновых функциях $|n, L, J\rangle$ с положительной проекцией полного углового момента эксито-

на выделенную ось. Второй блок матрицы гамильтониана, вычисленный на волновых функциях $|n, L, -J\rangle$, имеет полностью аналогичный вид.

Следует заметить, что $2p$ -состояния, различающиеся знаком L , вырождены по энергии в невозмущенном состоянии ($H_{2,1,2} = H_{2,-1,2}$ и $H_{2,1,1} = H_{2,-1,1}$) и не смешиваются друг с другом непосредственно за счет возмущений (4)

и (5). Учитывая это и переходя к новому базису, $|2, \pm 1, 1\rangle^{(new)} = 0.5(|2, 1, 1\rangle \pm |2, -1, 1\rangle)$ и $|2, \pm 1, 2\rangle^{(new)} = 0.5(|2, 1, 2\rangle \pm |2, -1, 2\rangle)$, матрицу гамильтонiana в уравнении (9) можно привести к блочно-диагональному виду

$$\mathbf{H}_X = \begin{pmatrix} H_{1,0,1} & V_1 & 2V_2 & 0 & 0 & 0 \\ V_1^* & H_{1,0,2} & 0 & 2V_2 & 0 & 0 \\ 2V_2^* & 0 & H_{2,1,1} & V_1 & 0 & 0 \\ 0 & 2V_2^* & V_1^* & H_{2,1,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & H_{2,-1,1} & V_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & V_1^* & H_{2,-1,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_X^{(4)} & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_X^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Секулярное уравнение $\det(\mathbf{H}_X^{(4)} - E\mathbf{I}) = 0$ уже допускает аналитическое решение. Группируя члены по степеням E , его можно свести к виду

$$P_4^{(IV)}E^4 + P_3^{(IV)}E^3 + P_2^{(IV)}E^2 + P_1^{(IV)}E + P_0^{(IV)} = 0, \quad (11)$$

где коэффициенты $P_i^{(IV)}$ ($i = 1, 2, 3, 4$) не зависят от E и являются полиномами не выше четвертого порядка относительно K^2 (см. Приложение А).

Секулярное уравнение (11) есть однопараметрическое (с параметром K^2) уравнение четвертой степени относительно E . Решив это уравнение в общем виде, получаем четыре корня, что соответствует четырем рассматриваемым ветвям дисперсионных зависимостей для светлого $1s$, темного $1s$ и двух $2p$ -возбужденных экситонов. Общий вид решений имеет вид

$$E_i(K, B) = \alpha_i(B)K^2 + R_i(K, B), \quad i = 1, 2, 3, 4, \quad (12)$$

где $\alpha_i(B)$ и $R_i(K, B)$ — дробно-рациональные выражения. Явный вид решения не приводится ввиду чрезмерной громоздкости выражения. Уже непосредственно из выражения (12) видно, что добавка к энергии экситона, появляющаяся с включением магнитного поля, носит неквадратичный характер, что не позволяет трактовать ее как изменение трансляционной массы, как это было сделано в работе [15]. Заметим, что при достаточно больших волновых векторах K справедливо неравенство: $V_1 \ll V_2$, см. выражения (6). При пренебрежении взаимодействием V_1 решение секулярного уравнения (11) существенно упрощается и становится наиболее наглядным (см. Приложение В).

Секулярное уравнение $\det(\mathbf{H}_X^{(2)} - E\mathbf{I}) = 0$ пред-

ставляет полином второй степени по E , и его аналитическое решение можно записать в виде

$$E_{5,6} = \frac{1}{2} \left(H_{2,-1,1} + H_{2,-1,2} \pm \sqrt{(H_{2,-1,1} - H_{2,-1,2})^2 - 4V_1^2} \right), \quad (13)$$

где матричные элементы $H_{n,L,J}$ задаются выражениями (4), и для простоты использованы обозначения $V_1^2 = |V_1|^2$. Важно заметить, что это решение не зависит от взаимодействия V_2 , которое ответственно за эффект непараболичности. Поскольку возмущение V_1 , входящее в решение (13), не зависит от волнового вектора, должны существовать два возбужденных состояния, для которых зависимость их энергии от волнового вектора должна оставаться неизменной при включении внешнего магнитного поля.

3. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотрим эффект непараболичности экситонной дисперсии на примере кристалла CdTe. Для вычислений используем следующие значения материальных параметров этого полупроводника: $\varepsilon_0 = 10.56$ [22], $\gamma_1 = 5.29$, $\gamma_2 = 1.89$ [22], $m_e = 0.096m_0$ [22], $\gamma_3 = 2.46$ [23], $E_g = 1600$ мэВ [23]. Полученные в результате решения уравнения (11) дисперсионные зависимости $E_i(K, B)$ удобно анализировать графически. Для этого построим серию дисперсионных кривых для разных значений величины индукции поля (рис. 1).

При включении магнитного поля наблюдается не только снятие вырождения за счет смешивания состояний возмущением V_1 , но и изменение крутизны дисперсионных ветвей, обусловленное попарным смешиванием $1s$ - и $2p$ -состояний за счет возмущения V_2 .

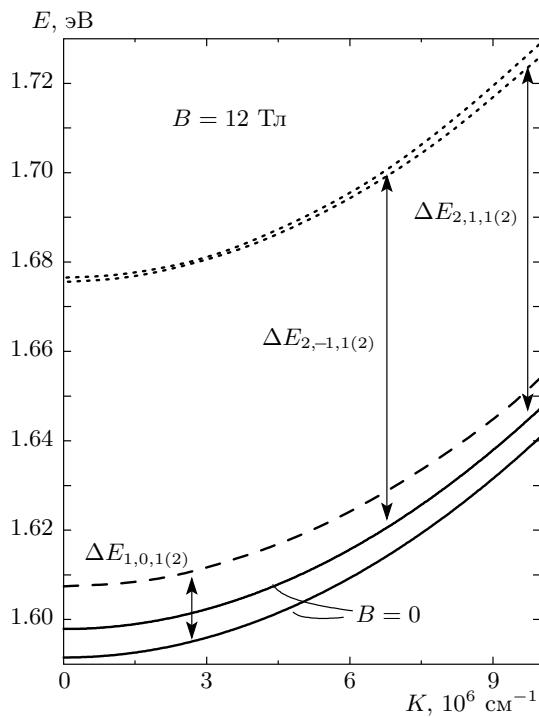


Рис. 1. Дисперсионные зависимости $1s$ - и $2p$ -состояний экситона для значений индукции магнитного поля $B = 0$ (сплошные линии) и $B = 12 \text{ Тл}$ (пунктирные и штриховые). Представлены дисперсионные кривые $|1, 0, 1\rangle$ и $|1, 0, 2\rangle$ в поле $B = 0$ (нижняя сплошная кривая) и $B = 12 \text{ Тл}$ (пунктирные кривые, не различимые в пределах толщины линии). Верхней сплошной кривой изображены $2p$ -состояния $|2, \pm 1, J\rangle^{(\text{new})}$ ($J = 1, 2$) в поле $B = 0$, не различимые в пределах ширины линии. Также представлены дисперсионные кривые $2p$ -состояний в поле $B = 12 \text{ Тл}$: $|2, 1, 1\rangle^{(\text{new})}$ и $|2, 1, 2\rangle^{(\text{new})}$ (верхняя пунктирная кривая) и $|2, -1, 1\rangle^{(\text{new})}$ и $|2, -1, 2\rangle^{(\text{new})}$ (нижняя пунктирная кривая). Стрелками показаны смещения дисперсионных кривых $1s$ - и $2p$ -состояний при включении поля $B = 12 \text{ Тл}$

Для дальнейшего анализа обсуждаемого эффекта удобно ввести величину $\Delta E_{n,L,J}$, являющуюся разницей энергий экситона в нулевом и ненулевом магнитных полях. Эта величина, фактически, является магнитоиндукционной добавкой к энергии экситона. На рис. 2 представлен график зависимости величин $\Delta E_{n,L,J}$ от волнового вектора K , вычисленный для $B = 12 \text{ Тл}$.

Можно видеть, что экситонные $1s$ - и $2p$ -состояния расщеплены примерно на 25 мэВ из-за диамагнитного сдвига. Имеются три серии кривых. При этом две кривые, соответствующие $1s$ -состояниям, $|1, 0, 1\rangle$ и $|1, 0, 2\rangle$, симметрично расходятся с двумя

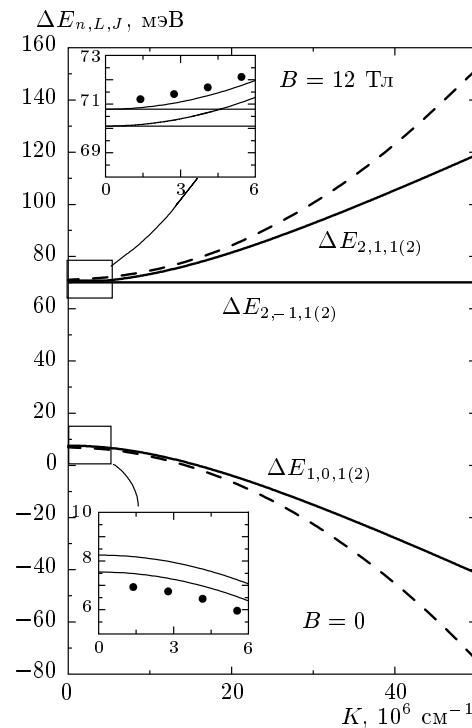


Рис. 2. Разность дисперсионных зависимостей $\Delta E_{n,L,J}$, рассчитанных для магнитных полей $B = 0$ и $B = 12 \text{ Тл}$. На вставках показаны детали зависимостей для малых значений волнового вектора ($K \leq 6 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$): на нижней вставке — для $1s$ -состояний $\Delta E_{1,0,1}$ и $\Delta E_{1,0,2}$ (соответственно верхняя и нижняя сплошные кривые), а на верхней вставке — для $2p$ -состояний $\Delta E_{2,1,1}$ и $\Delta E_{2,1,2}$ (соответственно верхняя и нижняя сплошные кривые) и $\Delta E_{2,-1,1}$ и $\Delta E_{2,-1,2}$ (соответственно верхняя и нижняя горизонтальные линии). Штриховой линией (на вставках точки) показана параболическая аппроксимация $\Delta E_{n,L,J}$, проделанная в области $K \leq 6 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$

мя кривыми, соответствующими $2p$ -состояниям, $|2, 1, 1\rangle^{(\text{new})}$ и $|2, 1, 2\rangle^{(\text{new})}$. В то же время, кривые для $2p$ -состояний $|2, -1, 1\rangle^{(\text{new})}$ и $|2, -1, 2\rangle^{(\text{new})}$, не зависят от волнового вектора и испытывают только слабое расщепление за счет V_1 в соответствии с формулой (13). Такое поведение зависимостей $\Delta E_{n,L,J}$ может показаться неожиданным, поскольку выглядит как нарушение симметрии задачи. Тем не менее решение является полностью симметричным, поскольку при смене знака магнитного поля дисперсионные зависимости для состояний $|2, -1, J\rangle^{(\text{new})}$ и $|2, 1, J\rangle^{(\text{new})}$ ($J = 1, 2$) меняются местами: $\Delta E_{n,L,J}$ для $|2, 1, J\rangle^{(\text{new})}$ не зависит от волнового вектора, в то время как состояния $|2, -1, J\rangle^{(\text{new})}$ получают положительную непараболическую добавку к

энергии.

На рис. 2 хорошо видно, что зависимость $\Delta E_{n,L,J}$ при больших значениях K носит линейный характер, что не позволяет трактовать ее в терминах изменения трансляционной массы экситона (которая подразумевает строго параболическую зависимость от K). Однако стоит отметить, что представленный диапазон волновых векторов существенно превышает наблюдаемый в эксперименте (выделен на рисунке прямоугольными рамками). На вставках рис. 2 представлены добавки к энергии в экспериментально наблюдаемом диапазоне (порядка 0.1 зоны Бриллюэна). В таком диапазоне добавка к энергии экситона $\Delta E_{n,L,J}$ действительно удовлетворительно приближается параболой, что позволило авторам статьи [15] добиться согласия расчета и эксперимента в приближении изменения трансляционной массы. На рис. 2 такая аппроксимация обозначена штриховой линией.

Для анализа зависимости магнитоиндукционной добавки к энергии экситона от магнитного поля были рассчитаны величины $\Delta E_{n,L,J}$ как функции волнового вектора K при различных значениях индукции магнитного поля в диапазоне от $B = 3$ Тл до $B = 12$ Тл. Они представлены на рис. 3. Для удобства сравнения, из всех зависимостей вычтены вклад от диамагнитного сдвига, являющийся константой при фиксированном значении поля. Таким образом, становится возможной наглядная демонстрация непосредственного вклада в энергию экситона эффекта смешивания $1s$ - и $2p$ -состояний.

На рисунке хорошо видно быстрое разбегание зависимостей для $1s$ - и $2p$ -состояний с ростом величины магнитного поля. Каждая из зависимостей становится практически линейной при достаточно большем волновом векторе и хорошо аппроксимируется функцией $\Delta E_{n,L,J} = \xi(B)k$. При значениях поля $B > 3$ Тл коэффициент $\xi(B)$ линейно зависит от поля по закону $\xi(B) = (6.33B - 2.63) \cdot 10^{-8}$ мэВ/Тл, где магнитное поле B измеряется в Теслах. Таким образом, при достаточно больших волновых векторах добавка к энергии линейна по K , а начиная с определенного значения магнитной индукции, также линейна и по B . Такая зависимость от волнового вектора и магнитного поля, по-видимому, связана с тем, что оператор V_2 , определяющий эффект непарabolичности, пропорционален произведению BK .

Чтобы оценить масштаб обсуждаемого эффекта, его величину следует сравнить с другими эффектами, которые могут влиять на закон экситонной дисперсии. Одним из наиболее существенных эффектов такого рода является непарabolичность дисперсии

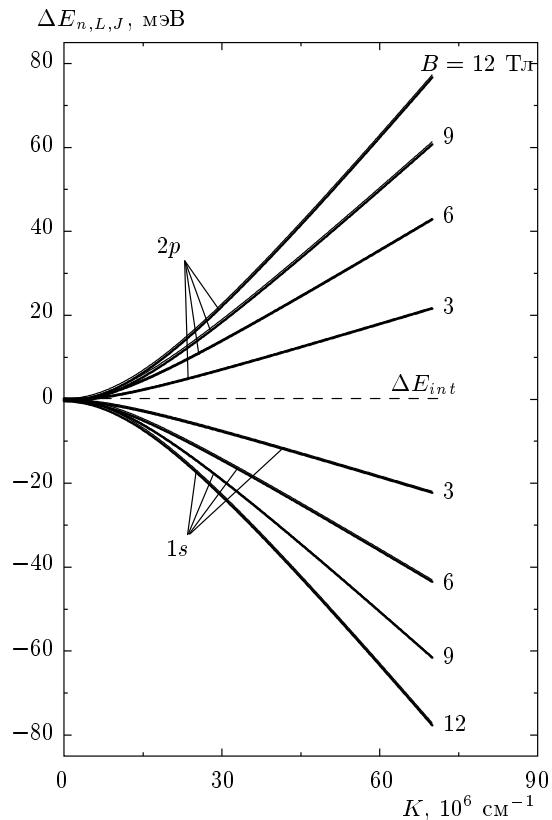


Рис. 3. Разность дисперсионных зависимостей $\Delta E_{n,L,J}$, рассчитанных для магнитного поля $B = 0$ и полей $B = 3, 6, 9, 12$ Тл. Сплошные линии — разность для состояний $1s$ - и $2p$ -экситонов; штриховая линия — изменение энергии экситона, связанное с собственной непарabolичностью зоны проводимости ΔE_{int}

электронов в зоне проводимости [24–26]. Согласно работе [24], в выражении для энергии электронов существуют слагаемые, пропорциональные четвертой степени волнового вектора электрона k :

$$\begin{aligned} \Delta E_{\pm,e} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \alpha_{0,e} k^4 + \\ + \beta_{0,e} (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) \pm \\ \pm \gamma_{0,e} \sqrt{k^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) - 9 k_x^2 k_y^2 k_z^2}. \quad (14) \end{aligned}$$

Следует иметь в виду, что в обсуждаемой задаче для экситона его волновой вектор K ориентирован вдоль оси z . Поэтому в формуле (14) учтем только z -компоненты волнового вектора электрона. При этом последние два слагаемых обращаются в нуль, а третья описывает эффект непарabolичности, который вычисляется согласно формуле (см., например, [24]):

$$\begin{aligned} \alpha_{0,e} k_e^4 = & \\ = -\frac{\left(1 - (m_e/m_0)^2\right) (3E_g^2 + 4E_g\Delta_{SO} + 2\Delta_{SO}^2)}{(3E_g + 2\Delta_{SO})(E_g + \Delta_{SO})} \times & \\ \times \left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\right)^2 k_e^4, \quad (14a) & \end{aligned}$$

где Δ_{SO} — величина спин-орбитального расщепления валентной зоны. Вообще говоря, существует также явление непараболичности для валентной зоны легких дырок, однако в настоящей работе этот эффект не учитывается, поскольку рассматриваются только тяжелые экситоны.

Для численной оценки непараболичности электронной дисперсии мы используем те же значения материальных параметров, что и ранее, а также величину $\Delta_{SO} = 910$ мэВ [22]. Чтобы оценить влияние электронной непараболичности на экситонную, нужно учесть, что волновой вектор трансляционного движения экситона K выражается через волновой вектор электрона \hat{k}_z^e с помощью коэффициента $m_e/M < 1$, который при подстановке в выражение (14) дает фактор малости $(m_e/M)^4 \ll 1$.

Вычислена по формуле (14а) зависимость добавки ΔE_{int} к энергии, обусловленной непараболичностью зоны проводимости, представлена на рис. 3 штриховой линией. Как можно видеть, магнитоиндукционная непараболичность значительно превышает собственную непараболичность экситонной дисперсии, обусловленную непараболичностью дисперсии электронов, во всем интервале волновых векторов при всех рассмотренных значениях магнитного поля.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ, выполненный в настоящей работе, показал, что эффекты, возникающие при смешивании основного и возбужденных экситонных состояний в магнитном поле, приводят к магнитоиндукционной непараболичности дисперсии энергии экситона, а не к изменению трансляционной массы, как это предполагалось ранее в работах [14, 15]. Установлено, что при достаточно больших значениях волнового вектора и магнитного поля магнитоиндукционная добавка к энергии экситона пропорциональна произведению B на K . Сопоставление величины обсуждаемого эффекта с собственной непараболичностью экситонной дисперсии, обусловленной непараболичностью зоны проводимости, показало, что магнитоиндукционная непараболичность доминирует в широком интервале волновых векторов

при всех рассмотренных значениях B . Установлено, что имеет место несимметричное расщепление возбужденных $2p$ -состояний, различающихся знаком проекции орбитального момента на ось z .

Авторы благодарят И. В. Игнатьева за плодотворное обсуждение работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Коэффициенты $P_i^{(IV)}$, входящие в выражение (11), можно записать в виде

$$\begin{aligned} P_4^{(IV)} &= 1, \\ P_3^{(IV)} &= H_{1,0,1} + H_{1,0,2} + H_{2,1,1} + H_{2,1,2}, \\ P_2^{(IV)} &= H_{2,1,2}H_{1,0,1} + H_{2,1,2}H_{1,0,2} + \\ &+ H_{2,1,2}H_{2,1,1} + H_{1,0,2}H_{1,0,1} + H_{2,1,1}H_{1,0,1} + \\ &+ H_{1,0,2}H_{2,1,1} - 2V_1^2 - 2V_2^2, \\ P_1^{(IV)} &= H_{1,0,2}H_{1,0,1}H_{2,1,1} + H_{2,1,2}H_{1,0,1}H_{1,0,2} + \\ &+ H_{2,1,2}H_{1,0,1}H_{2,1,1} + H_{2,1,2}H_{1,0,2}H_{2,1,1} - \\ &- H_{2,1,2}V_1^2 - H_{2,1,2}V_2^2 - H_{2,1,1}V_1^2 - H_{1,0,2}V_2^2 + \\ &+ H_{1,0,1}V_1^2 + H_{1,0,2}V_1^2 + H_{1,0,1}V_2^2 + H_{2,1,1}V_2^2, \\ P_0^{(IV)} &= H_{1,0,2}H_{1,0,1}H_{2,1,1}H_{2,1,2} - V_1^2H_{2,1,1}H_{2,1,1} - \\ &- V_2^2H_{1,0,1}H_{2,1,1} - V_2^2H_{1,0,2}H_{2,1,1} - V_1^2H_{1,0,2}H_{1,0,1} + \\ &+ V_1^4 + V_2^4 - 2V_1^2V_2^2, \end{aligned}$$

где матричные элементы $H_{n,L,J}$ задаются выражениями (4), и для простоты использованы обозначения: $V_1^2 = |V_1|^2$ и $V_2^2 = |V_2|^2$.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Рассмотрим приближение $V_1 \ll V_2$, в рамках которого при анализе эффекта непараболичности можно считать, что $V_1 = 0$. Учитывая малость обменного расщепления, можно положить также $\Delta = 0$. Тогда $H_{1,0,1} = H_{1,0,2}$ и $H_{2,1,1} = H_{2,1,2}$, и в любом магнитном поле попарно вырождены состояния $|1, 0, 1\rangle$ и $|1, 0, 2\rangle$, а также состояния $|2, 1, 1\rangle$ и $|2, 1, 2\rangle$. В этом случае простой перестановкой строк матрица $\mathbf{H}_X^{(4)}$ (см. выражение (10)) приводится к блочно-диагональному виду

$$\mathbf{H}_X^{(4)} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_X^{(2,1)} & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_X^{(2,2)} \end{pmatrix},$$

где

$$\mathbf{H}_X^{(2,1)} = \mathbf{H}_X^{(2,2)} = \begin{pmatrix} H_{1,0,1} & V_2 \\ V_2^* & H_{2,1,1} \end{pmatrix}.$$

Секулярное уравнение с таким гамильтонианом может быть сведено к решению характеристического уравнения второго порядка для одного из двух блоков, например, $\det(\mathbf{H}_X^{(2,1)} - E\mathbf{I}) = 0$. Нахождение дисперсионных зависимостей в этом случае является тривиальной задачей, поскольку энергии экситонных состояний являются корнями квадратного уравнения

$$E_{1,2} = E_{2,2} = 0.5 \left(H_{1,0,1} + H_{2,1,1} \pm \sqrt{(H_{2,1,1} - H_{1,0,1})^2 - 4V_2^2} \right).$$

Численная оценка для случая кристалла CdTe показывает, что это приближенное решение совпадает с точностью 1 % с решением уравнения (11) при величине волнового вектора $K > 4 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$ при любом значении B . Таким образом, такое приближенное решение практически совпадает с точным решением в широком интервале значений K .

ЛИТЕРАТУРА

1. W. E. Lamb, Phys. Rev. **85**, 259 (1952).
2. Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **53**, 717 (1967).
3. С. И. Пекар, ЖЭТФ **33**, 1022 (1957).
4. В. А. Киселев, Б. С. Разбирин, И. Н. Уральцев, Письма в ЖЭТФ **18**, 504 (1973).
5. В. А. Киселев, И. В. Макаренко, Б. С. Разбирин, И. Н. Уральцев, ФТТ **20**, 1348 (1977).
6. A. Tredicucci, Y. Chen, F. Bassani et al., Phys. Rev. B **47**, 10348 (1993).
7. С. И. Пекар, *Кристаллооптика и добавочные световые волны*, Наукова думка, Киев (1982), с. 178.
8. Д. К. Логинов, Е. В. Убыивовк, Ю. П. Ефимов и др., ФТТ **48**, 1979 (2006).
9. В. П. Кочерешко, Г. В. Михайлов, И. Н. Уральцев, ФТТ **82**, 2697 (1982).
10. V. P. Kochereshko, A. V. Platonov, G. V. Mikhailov et al., Int. J. Modern. Phys. B **21**, 1350 (2007).
11. J. J. Davies, D. Wolverton, V. P. Koshereshko et al., Phys. Rev. Lett. **97**, 187403 (2006).
12. A. Litvinov, V. P. Kochereshko, D. Loginov et al., Acta Phys. Pol. A **112**, 161 (2007).
13. D. Loginov, V. P. Kochereshko, A. Litvinov et al., Acta Phys. Pol. A **112**, 381 (2007).
14. Д. К. Логинов, В. П. Кочерешко, А. В. Платонов и др., ФТТ **51**, 1555 (2009).
15. Д. К. Логинов, ФТТ **52**, 68 (2010).
16. E. O. Kane, Phys. Rev. B **11**, 3850 (1975).
17. K. Cho, S. Suga, W. Dreybrodt, and F. Willmann, Phys. Rev. B **11**, 1512 (1975).
18. J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
19. K. Cho, Phys. Rev. B **14**, 4463 (1976).
20. E. L. Ivchenko and G. Pikus, *Superlattices and Other Microstructures*, Springer-Verlag, Berlin (1995).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, т. III, Наука, Москва (1989), с. 173.
22. K. K. Kanazawa and F. C. Brown, Phys. Rev. **135**, A1757 (1964).
23. P. Lawaetz, Phys. Rev. B **4**, 3460 (1971).
24. M. Broun and U. Rosler, J. Phys. C: Sol. St. Phys. **18**, 3365 (1985).
25. J. S. Blackmore, J. Appl. Phys. **53**, R123 (1982).
26. T. Rufand and M. Cardona, Phys. Rev. B **41**, 10747 (1990).

Поправки

к статье Д. К. Логинова, А. Д. Чегодаева

**«Эффект магнитоиндукционной
непараболичности дисперсии экситона
в полупроводниках с невырожденной
валентной зоной»,
опубликованной в ЖЭТФ
140, 574 (2011)**

Поступила в редакцию 1 сентября 2014 г.

1. В цитируемой работе приведены неточные значения для матричных элементов $I_{L=0}$ и $I_{L=1}$, входящие в формулу (5). Правильные значения $I_{L=0} = 1$ и $I_{L=1} = 6$, что уменьшает диамагнитный сдвиг $2P$ -состояний на 10 % и $1S$ -состояний на 30 % по сравнению со значениями, указанными в работе. Это уменьшение, однако, лишь незначительно изменит количественную оценку эффекта и не приведет к качественным изменениям.

2. Численная оценка матричных $I_{\pm 1}^{\alpha}$ элементов, входящих в выражение (6b), занижена приблизительно в полтора раза. Правильное значение $I_{\pm 1}^{\alpha} = 0.53$.

3. Выражение (6b) для возмущения V_2 записано некорректно. Правильное выражение:

$$V_2 = \frac{2\hbar e a_B}{c} \left(\frac{1}{\tilde{M}} - \frac{9\gamma_2 \tilde{m}}{4m_0 \tilde{M}} \right) K \left(B_x I_N^{(y)} + B_y I_N^{(x)} \right),$$

где $\tilde{m} = m_0 / (\gamma_1 + 5\gamma_2/2)$, $\tilde{M} = m_e + \tilde{m}$.

4. В формуле (1) следовало учесть еще одно возмущение вида

$$\hat{V}_3 = \left(\frac{eB_x}{2c\tilde{M}_h} \right) \left(\frac{m_e}{\tilde{m}_h} - \frac{\tilde{m}_h}{m_e} \right) (\hat{p}_z y - \hat{p}_y z).$$

В базисе с выделенной осью z , на которую проектируется угловой момент экситона, учет этого возмущения приведет к смешиванию $2p_{x,y}$ -состояний ($|2, \pm 1, J\rangle$, $J = \pm 1, \pm 2$) с $2p_z$ -состоянием ($|2, 0, J\rangle$), которое не рассмотрено в обсуждаемой работе. Учет этого возмущения приведет к незначительному расщеплению дисперсионных зависимостей возбужденных $2p_z$ - и $2p_y$ -состояний экситона. Это расщепление показано на рис. 1a.

Указанные выше поправки приводят к уменьшению непараболичности экситонной дисперсии приблизительно в 5 раз. Вместе с тем, эффект непараболичности должен наблюдаться, как это и предсказывается в цитируемой работе.

5. В заключение отметим, что на стр. 576 цитируемой работы были допущены опечатки в формулах для боровского радиуса a_B и энергии Ридберга экситона R_n . Правильные выражения для этих величин $a_B = \varepsilon_0 \hbar^2 / \mu e^2$ и $R_n = -\mu e^4 / 2\hbar^2 \varepsilon_0^2 n^2$.

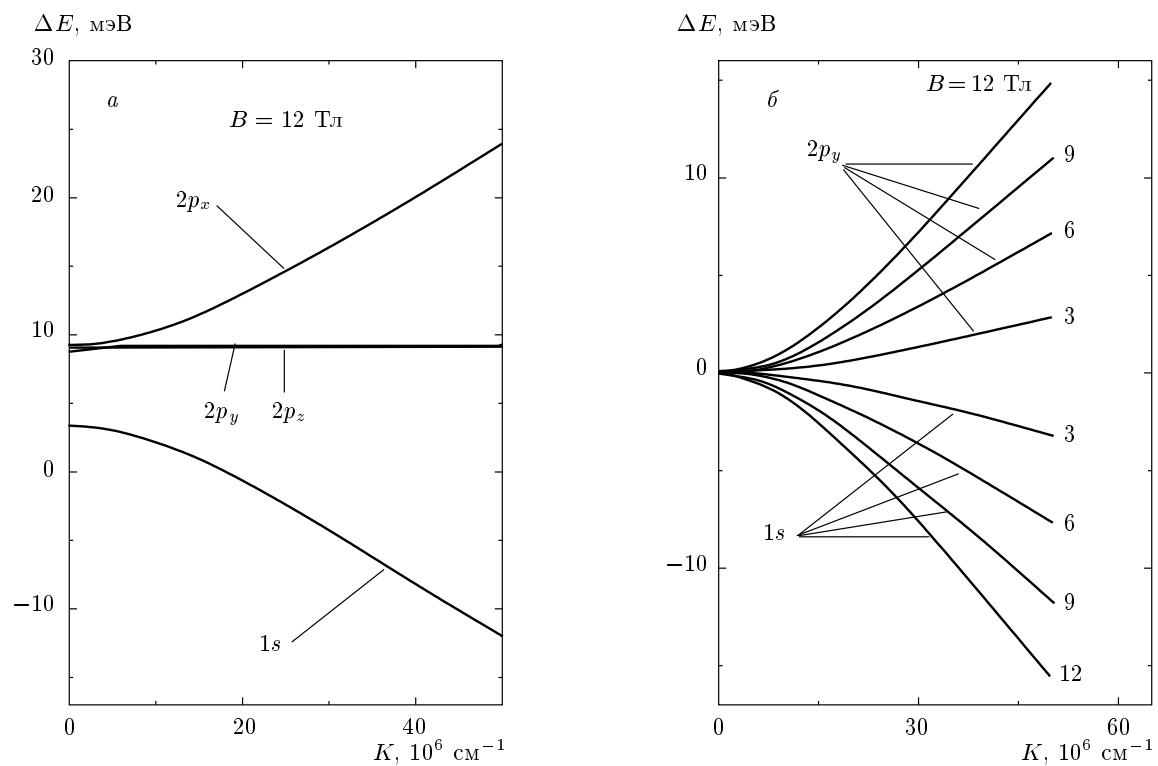


Рис. 1. а) Разности дисперсионных зависимостей, ΔE , рассчитанных в отсутствие магнитного поля и в магнитном поле $B = 12 \text{ Тл}$ (ср. с рис. 2 статьи). б) Зависимости ΔE , рассчитанные для магнитных полей $B = 3, 6, 9, 12 \text{ Тл}$ (ср. с рис. 3 статьи)