

Возбужденные состояния межподзонного экситона

© В.Е. Бисти

Институт физики твердого тела Российской академии наук,
142432 Черноголовка, Московская обл., Россия
E-mail: bisti@issp.ac.ru

(Поступила в Редакцию 19 февраля 2002 г.)

Проведен расчет энергии межподзонных коллективных возбуждений спиновой и зарядовой плотностей в системе квазидвумерных электронов при определенных значениях проекции момента на нормаль к плоскости движения в приближении Хартри–Фока. Показано, что возбужденные состояния отвечают переходам электронов вблизи импульса Ферми. Рассмотрена дисперсия коллективных возбуждений.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 01-02-16430).

Квазидвумерные электронные системы возникают, когда вдоль одной из осей имеется ограничивающий потенциал. Наличие нескольких уровней размерного квантования приводит к появлению ряда особенностей в таких системах по сравнению с трехмерными и чисто двумерными. Одна из таких особенностей — существование межподзонных коллективных возбуждений, связанных с переходом электронов из одной подзоны размерного квантования в другую.

Межподзонные коллективные возбуждения исследуются уже довольно давно. Экспериментально эти возбуждения наблюдаются методами рамановского рассеяния [1–3] и инфракрасного поглощения [4]. Эти возбуждения делятся на возбуждения зарядовой плотности (CDE) и возбуждения спиновой плотности (SDE); это различие проявляется в поляризационной зависимости наблюдаемых линий. Иначе CDE и SDE можно интерпретировать как синглетные и триплетные межподзонные экситоны.

Теоретически эти возбуждения также исследованы весьма широко. Самое простое приближение — приближение хаотических фаз (RPA) — дает только один тип возбуждений — CDE [5]. Учет обменного взаимодействия приводит к существованию двух типов возбуждений. Методы расчета межподзонных возбуждений с учетом обменной энергии можно разделить на две основные группы. Первая группа включает в себя расчеты с применением приближения локальной плотности (LDA) и его модификаций [6–9], базирующихся на более общих методах функционала плотности [10–12]. Вторая группа использует прямые методы для нахождения функции отклика системы (поляризационного оператора) — диаграммный или применение матрицы плотности с последующим решением уравнения Бете–Солпитера [13–16]. Оба этих метода использовались для нахождения только самой нижней энергии для каждого типа возбуждений (триплетного или синглетного). Приближение LDA заключается в том, что взаимодействие, зависящее от импульсов, заменяется эффективной константой (контактное, т.е. локальное взаимодействие в координатном пространстве); при этом существует только одно коллек-

тивное возбуждение (связанное состояние). При решении уравнения Бете–Солпитера также рассматривалось только основное состояние межподзонного экситона.

Между тем в экспериментах по рамановскому рассеянию света в квантовых ямах, являющихся квазидвумерными структурами, наблюдается широкая неполяризованная линия, расположенная, как правило, между SDE и CDE [1,3]. Интерпретируется эта линия как результат рассеяния на одночастичных возбуждениях (SPE). Однако эта интерпретация вызывает сомнения даже у авторов экспериментов, поэтому стоит рассмотреть эту проблему подробнее.

В данной работе проведен расчет энергии как основных, так и возбужденных состояний межподзонного экситона в приближении Хартри–Фока. Предлагается интерпретировать линию SPE как результат рассеяния на возбужденных состояниях, в то время как линии SDE и CDE — рассеянием на основных состояниях.

Рассмотрим обычно используемую в экспериментах квантовую яму GaAs–AlGaAs с модулированным легированием. Это слой GaAs, окруженный с двух сторон широкими слоями AlGaAs, в одном из которых расположен слой доноров. (Подробное описание можно найти, например, в работе [4]). Энергии подзон E_n^H и волновые функции электронов $\phi_n(z)$ определяются в приближении Хартри из самосогласованного решения одночастичного уравнения Шредингера и уравнения Пуассона (ось z направлена по нормали к слою).

Гамильтониан такой квазидвумерной системы имеет вид

$$H = \sum_{nks} \left(E_n^H + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) c_{nks}^+ c_{nks} + \frac{1}{2} \sum_{nm'm's's'kk'} V_{nm}^{n'm'} c_{nk+qs}^+ c_{n'k-qs'}^+ c_{m'k's'} c_{mks}, \quad (1)$$

где m^* — эффективная масса электрона; n, n', m, m' — индексы подзон; s, s' — спиновые индексы;

$\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}$ — волновые векторы в плоскости движения электронов $x - y$

$$V_{nm}^{n'm'}(q) = \frac{e^2}{2\epsilon q} \times \int \phi_n^*(z) \phi_{n'}^*(z') \phi_{m'}(z') \phi_m(z) e^{-q|z-z'|} dz dz'. \quad (2)$$

В дальнейшем ограничимся рассмотрением только двух нижних подзон размерного квантования с энергиями E_1^H и E_2^H . Концентрация электронов такова, что заполнена только нижняя подзона.

Энергии коллективных возбуждений системы являются полюсами поляризационного оператора (поляризационной функции отклика системы) или, что то же самое, полюсами двухчастичной функции Грина, аналогичной функции Грина экситона при межзонных переходах. В приближении Хартри–Фока учитываются обменные поправки к собственным энергиям, деполаризационные (для $\mathbf{S} = 0$) и экситонные поправки. На диаграммном языке это соответствует обменной поправке в одночастичных функциях Грина и суммированию петлевых и лестничных диаграмм для двухчастичной функции Грина. Вывод этого уравнения через матрицу плотности приведен в работе [14].

В полюсном приближении уравнение на собственные значения, являющиеся энергиями межподзонного экситона, имеет вид

$$[E_2^{\text{HF}}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) - E_1^{\text{HF}}(\mathbf{k}) - E]P(\mathbf{k}, \mathbf{K}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int V(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K})P(\mathbf{k}', \mathbf{K}) d\mathbf{k}', \quad (3)$$

где E — собственное значение энергии, $P(\mathbf{k}, \mathbf{K})$ — волновая функция межподзонного экситона в импульсном представлении;

$$E_i^{\text{HF}}(\mathbf{k}) = E_i^H + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{(2\pi)^2} \int V_{i1}^{i1}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) d\mathbf{k}'; \quad (4)$$

для триплетных (SD) возбуждений ($\mathbf{S} = 1$)

$$V^{\text{SD}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}) = V_{11}^{22}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}), \quad (5)$$

а для синглетных (CD) возбуждений ($\mathbf{S} = 0$)

$$V^{\text{CD}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}) = V^{\text{SD}} - 2V_{12}^{21}(\mathbf{K}). \quad (6)$$

При $\mathbf{K} = 0$ система обладает аксиальной симметрией (сохраняется проекция момента на ось z), и решения уравнений (3) имеют вид

$$P_m(\mathbf{k}) = P_m(k) e^{im\varphi} \quad (7)$$

($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

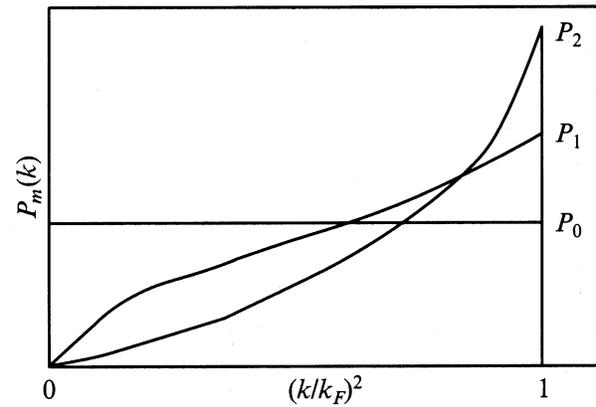


Рис. 1. Радиальные волновые функции межподзонных экситонов в импульсном представлении.

$P_m(k)$ и E_m определяются из уравнений

$$[E_2^{\text{HF}}(k) - E_1^{\text{HF}}(k) - E_m]P_m(k) = \frac{1}{2\pi} \int V_m(k, k') P(k') k' dk', \quad (8)$$

где

$$V_m(k, k') = \frac{1}{2\pi} \int V(\mathbf{k}, \mathbf{k}', 0) \cos m\varphi d\varphi. \quad (9)$$

Поскольку само приближение Хартри–Фока имеет вариационную природу, для каждого типа симметрии имеет смысл только нижнее состояние E_m , хотя уравнение (8) имеет много решений.

Численное решение уравнений проводилось для квантовых ям GaAs–AlGaAs толщиной 250 Å с концентрациями электронов $3 \cdot 10^{11}$ и $6 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Уравнения (3) и (8) решались численно; при этом решения (8) с различными m входят в решения (3) с $\mathbf{K} = 0$. На рис. 1 изображены $P_m(k^2/k_F^2)$, которые можно трактовать как радиальные волновые функции межподзонного экситона в импульсном представлении. Получившийся результат для P_0 объясняет хорошее совпадение результатов различных методов — это означает, что для основного состояния действительно можно ввести эффективное контактное взаимодействие; область корреляции между электроном в возбужденной подзоне и дыркой в основной подзоне имеет величину порядка межчастичного расстояния. Возбужденные состояния P_m с ненулевыми проекциями момента представляют собой возбуждения вблизи уровня Ферми. Решение уравнения (8) с $m = 0$ дает известные CD и SD возбуждения. Результат, полученный таким образом, совпадает с результатами [13,14]. При $m \neq 0$ $E_{+m} = E_{-m}$ — состояния с $\pm m$ вырождены; кроме того, эти состояния вырождены по спину.

Решение уравнения (3) дает закон дисперсии межподзонных экситонов. При $\mathbf{K} \neq 0$ возбужденные состояния уже не являются, строго говоря, состояниями с определенной проекцией момента. Вырождение снимается,

и одно из состояний может проявляться в рамановском рассеянии (при $\mathbf{K} = 0$ в рамановском рассеянии участвуют только основные состояния с $m = 0$). Закон дисперсии для активных мод приведен на рис. 2, 3. Дисперсия основных CD и SD возбуждений совпадает с полученной ранее [6,16]. SDE обнаруживают очень слабую квадратичную зависимость. Дисперсия CDE при малых \mathbf{K} определяется в основном $V_{12}^{21}(\mathbf{K})$. Для возбуж-

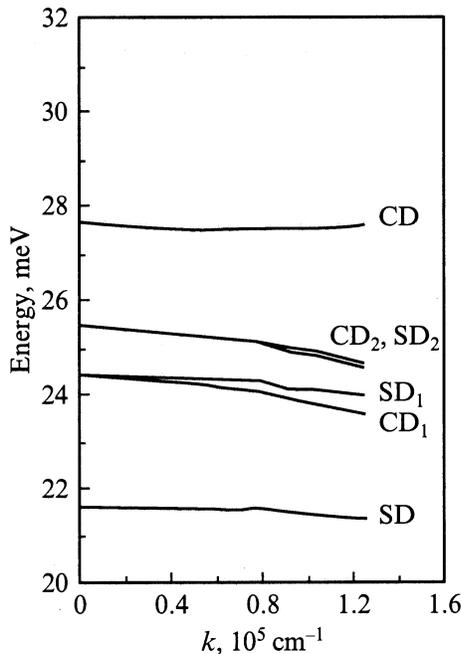


Рис. 2. Дисперсия межподзонных экситонов в квантовой яме GaAs–AlGaAs шириной 250 Å при $n_s = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

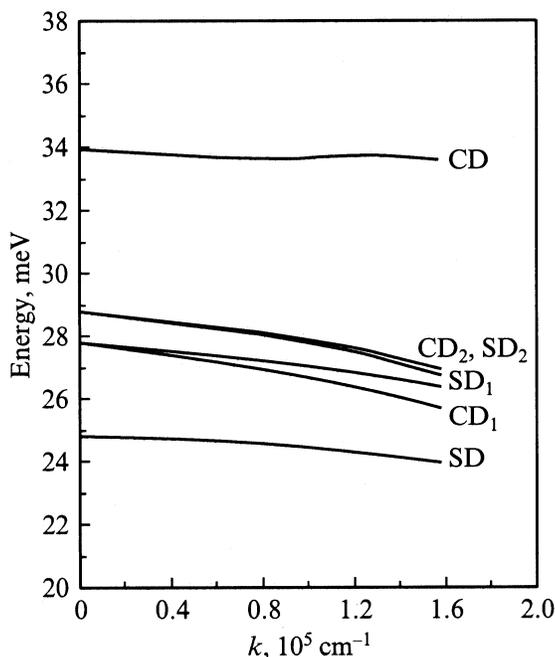


Рис. 3. Дисперсия межподзонных экситонов в квантовой яме GaAs–AlGaAs шириной 250 Å при $n_s = 6 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

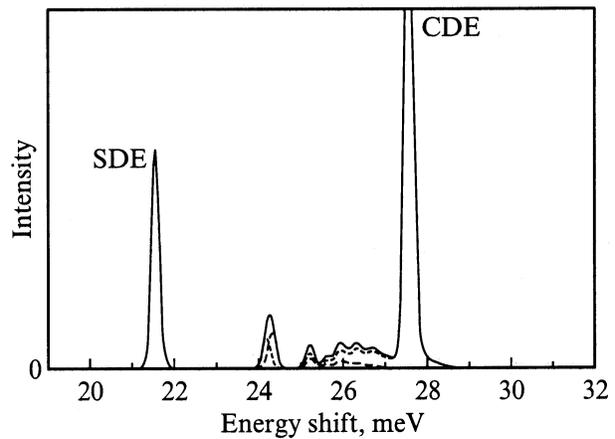


Рис. 4. Спектры рамановского рассеяния света на основных (SDE и CDE) и возбужденных межподзонных возбуждениях при $n_s = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $k = 0.63 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$. Пунктирной и штриховой линиями изображены спектры рассеяния SD и CD возбужденными состояниями соответственно, а сплошной линией — их сумма, а также вне области возбужденных состояний рассеяние основными состояниями.

денных состояний зависимость от импульса значительно сильнее и существенно не квадратична. При этом вырождение CD и SD мод снимается. Не проявляющие себя состояния расположены посередине и вырождены по спину.

На рис. 4 изображен общий вид спектра межподзонного комбинационного рассеяния, включающего в себя основные и возбужденные состояния. Соотношение интенсивностей основных и возбужденных состояний зависит от \mathbf{K} длины волны падающего света и размера области когерентности, поэтому экспериментальный спектр может заметно отличаться от изображенного на рис. 4.

Итак, в данной работе в рамках единого подхода (приближение Хартри–Фока) рассмотрена структура межподзонных переходов (основные и возбужденные состояния с различными значениями проекции момента). Утверждается, что так называемая линия одночастичных возбуждений на самом деле обусловлена в значительной степени рассеянием на возбужденных состояниях межподзонного экситона. Это обстоятельство может приводить к появлению у этой линии с ростом \mathbf{K} определенной структуры, которая может быть обнаружена экспериментально.

Автор выражает благодарность И.В. Кукушкину и Л.В. Кулику за полезные дискуссии и внимание к работе.

Список литературы

- [1] A. Pinczuk, S. Smitt-Rink, G. Danan, I.P. Valladares, L.N. Pfeiffer, K.W. West. Phys. Rev. Lett. **63**, 1633 (1989).
- [2] D. Gammon, B.V. Shanabrook, J.C. Ryan, D.S. Katzer. Phys. Rev. **B41**, 12 311 (1990).

- [3] В.Е. Кирпичев, И.В. Кукушкин, К. фон Клитцинг, К. Эберл. Письма в ЖЭТФ **67**, 196 (1998).
- [4] M. Ramsteiner, J.D. Ralston, P. Koidi, B. Discher, U. Biebi, I. Wagner, H. Ennen. J. Appl. Phys. **67**, 3900 (1990).
- [5] Jainendra, K. Jain, S. Das Sarma. Phys. Rev. **B36**, 5949 (1987).
- [6] I.K. Marmorkos, S. Das Sarma. Phys. Rev. **B48**, 1544 (1993).
- [7] A. Tselis, J.J. Quinn. Phys. Rev. **B29**, 3318 (1984).
- [8] K.W. Chui, J.J. Quinn. Phys. Rev. **B9**, 4724 (1974).
- [9] T. Ando. J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 3893 (1982).
- [10] P. Hohenberg, W. Kohn. Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [11] W. Kohn, L.J. Sham. Phys. Rev. **140**, F1133 (1965).
- [12] O. Gunnarsson, B.I. Lundqvist. Phys. Rev. **B13**, 4274 (1976).
- [13] S.L. Chuang, M.S.C. Luo, S. Schmitt-Rink, A. Pinczuk. Phys. Rev. **B46**, 1897 (1992).
- [14] M.S.-C. Luo, S.L. Chuang, S. Schmitt-Rink, A. Pinczuk. Phys. Rev. **B48**, 11 086 (1993).
- [15] J.C. Ryan. Phys. Rev. **B43**, 12 406 (1991).
- [16] D. Gammon, B.V. Shanabrook, J.C. Ryan, D.S. Katzer. Phys. Rev. Lett. **68**, 1884 (1992).