

Экситоны Ваннье–Мотта в полупроводниках со сверхрешеткой

© Р.А. Сурис[¶]

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

(Получена 16 декабря 2014 г. Принята к печати 25 декабря 2014 г.)

Представлен анализ влияния движения экситона Ваннье–Мотта в полупроводниках со сверхрешеткой, образованной гетеропереходами, на энергию его связи и волновую функцию. Такая зависимость возникает вследствие того, что законы дисперсии электрона и дырки, образующих экситон в СР, отличаются от квадратичного. Рассмотрена одномерная сверхрешетка, состоящая из чередующихся слоев полупроводников с различающимися энергетическими положениями зон проводимости и валентных зон, т.е. с одномерными ямами и барьерами. Затем дан анализ экситонного состояния в сверхрешетке, состоящей из квантовых точек. Показано, что зависимость энергии связи от квазиимпульса экситона тем сильнее, чем ближе друг к другу эффективные массы электронов и дырки. Рассмотрена возможность смены при определенных значениях квазиволновых векторов экситона механизма передачи возбуждения между ячейками сверхрешетки от туннельного к диполь–дипольному.

1. Введение

Цель предлагаемой работы состоит в выяснении влияния движения центра инерции экситона Ваннье–Мотта в полупроводниках со сверхрешеткой (СР), образованной гетеропереходами, на энергию его связи и волновую функцию. Вопрос о такой зависимости возникает в связи с тем, что законы дисперсии электрона и дырки, образующих экситон в СР, существенно отличаются от квадратичного. Сначала мы рассмотрим одномерную (1D) СР, состоящую из чередующихся слоев полупроводников с различающимися энергетическими положениями зон проводимости и валентных зон, т.е. с одномерными ямами и барьерами. Затем мы обобщим наш анализ на трехмерную (3D) СР, состоящую из квантовых точек (КТ). Мы покажем, что энергия связи и структура экситона оказываются сильно зависящими от его движения как целого.

2. Слоистая сверхрешетка

Здесь речь пойдет о полупроводниковой структуре, состоящей из чередующихся слоев полупроводников с разными ширинами запрещенных зон, образующими периодическую последовательность потенциальных ям и барьеров для электронов и дырок. Всюду далее мы будем рассматривать СР с настолько высокими барьерами, что можно ограничиться туннельными амплитудами только между ближайшими потенциальными ямами как для дырок, так и для электронов.

Волновую функцию экситона ищем в виде¹

$$\Psi(x_e, \rho_e; x_h, \rho_h) = \sum_{n_e, n_h} \Phi(n_e, \rho_e; n_h, \rho_h) w_e(x_e - an_e) w_h(x_h - an_h). \quad (1)$$

Здесь использованы следующие обозначения: x_e и x_h — координаты электрона и дырки вдоль оси СР, a — ее период, ρ_e и ρ_h — координаты электрона и дырки в плоскости слоев СР, $w_e(x_e - an_e)$ и $w_h(x_h - an_h)$ — функции Ваннье [1] электрона и дырки, локализованные на слоях с номерами n_e и n_h соответственно, $\Phi(n_e, \rho_e; n_h, \rho_h)$ — огибающая функция, описывающая относительное движение электрона и дырки в экситоне и его движение как целого.

Мы предполагаем, что движение электрона и дырки вдоль слоев СР свободное и описывается с помощью соответствующих эффективных масс m_e и m_h .²

В приближении ближайших соседей уравнение для огибающей функции приобретает вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \rho_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{\partial^2}{\partial \rho_h^2} - V(\rho_e - \rho_h, n_e - n_h) \right] \times \Phi(n_e, \rho_e; n_h, \rho_h) + \frac{J_e}{2} \left[2\Phi(n_e, \rho_e; n_h, \rho_h) - \Phi(n_e + 1, \rho_e; n_h, \rho_h) - \Phi(n_e - 1, \rho_e; n_h, \rho_h) \right] + \frac{J_h}{2} \left[2\Phi(n_e, \rho_e; n_h, \rho_h) - \Phi(n_e, \rho_e; n_h + 1, \rho_h) - \Phi(n_e, \rho_e; n_h - 1, \rho_h) \right] = (E - E_G) \Phi(n_e, \rho_e; n_h, \rho_h). \quad (2)$$

Здесь J_e и J_h — электронный и дырочный резонансные интегралы, связывающие соседние ямы, E_G — ширина энергетической щели. Шкала энергии выбрана таким образом, что в отсутствие взаимодействия энергии электрона и дырки с нулевыми квазиимпульсами равны E_G и нулю соответственно.³ Потенциал, описывающий кулоновское притяжение между электроном в яме с номером n_e и координатой в плоскости ρ_e и дыркой в яме с

² Заметим, что эти массы и особенно масса дырки могут зависеть от толщины квантовых ям, образующих СР.

³ Естественно, величина зависит от ширины потенциальных ям, толщины и высоты барьеров.

[¶] E-mail: suris@theory.ioffe.ru

¹ Чтобы не загромождать изложение, в этой статье мы полагаем волновую функцию дырки скалярной.

номером n_h и координатой в плоскости ρ_h , есть

$$V(\rho_e - \rho_h, n_e - n_h) = -\frac{e^2}{\epsilon} \iint dx_e dx_h \times \frac{1}{\sqrt{(x_e - x_h)^2 + (\rho_e - \rho_h)^2}} w_e(x_e - an_e)^2 w_h(x_h - an_h)^2. \quad (3)$$

Чтобы не загромождать изложение, мы пренебрегаем здесь вариациями диэлектрической проницаемости ϵ от слоя к слою⁴ в силу их относительной малости в гетероструктурах на основе соединений $A^{III}B^{IV}$.

Ясно, что на расстояниях, меньших или сравнимых с толщиной образующих СР квантовых ям, амплитуда этого потенциала меньше кулоновского из-за размытия зарядов электрона и дырки, описываемого в выражении (3) квадратом функции Ванье.

В силу трансляционной инвариантности уравнения (2) в плоскости сверхрешетки можно, как обычно, выделить координаты центра масс и относительного движения:

$$\mathbf{R} = \frac{m_e \rho_e + m_h \rho_h}{m_e + m_h} \text{ и } \rho = \rho_e - \rho_h.$$

С учетом этого огибающая функция приобретает вид

$$\Phi(n_e, \rho_e; n_h, \rho_h) = e^{i\mathbf{P}\mathbf{R}} \varphi(n_e, n_h; \rho). \quad (4)$$

В силу периодичности СР уравнение для огибающей обладает инвариантностью относительно одинакового сдвига номеров узлов для электрона и дырки на целое число периодов N :

$$\{n_e; n_h\} \rightarrow \{n_e + N, n_h + N\}. \quad (5)$$

Удобно искать огибающую $\varphi(n_e, n_h; \rho)$ в виде

$$\varphi(n_e, n_h; \rho) = e^{i[Q/2 - \gamma(Q)]n_e + i[Q/2 + \gamma(Q)]n_h} \chi_Q(n; \rho), \quad (6)$$

где $n = n_e - n_h$.

При трансляции (5) волновая функция (6), как и должно, приобретает фазовый множитель $e^{iQ'N}$. Таким образом, параметр Q играет роль безразмерного квазиимпульса центра масс экситона в направлении оси СР и лежит в интервале между $-\pi$ и π . Фазу $\gamma(Q)$ следует подобрать так, чтобы получающееся уравнение для функции $\chi_Q(n_e - n_h; \rho)$ зависело только от разности $n_e - n_h$. Подставив функцию (6) в уравнение (2), получаем, что для этого нужно выбрать

$$\gamma(Q) = \arctan\left(\frac{J_e - J_h}{J_e + J_h} \tan \frac{Q}{2}\right).$$

В результате подстановки в (2) получаем следующее уравнение для функции $\chi_Q(n; \rho)$, описывающей экситон

⁴ Влияние различия диэлектрических проницаемостей на энергию связи экситонов в тонких пленках было рассмотрено в [2] и [3].

в системе относительных координат электрона и дырки:⁵

$$\left[-\frac{1}{2m_r} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - V(\rho, n) \right] \chi_Q(n; \rho) + \frac{J(Q; J_e, J_h)}{2} [2\chi_Q(n; \rho) - \chi_Q(n+1; \rho) - \chi_Q(n-1; \rho)] = \left[E - E_G - \frac{\mathbf{P}^2}{2(m_e + m_h)} - K(Q; J_e, J_h) \right] \chi_Q(n; \rho). \quad (7)$$

Здесь резонансный интеграл

$$J(Q; J_e, J_h) = \sqrt{(J_e + J_h)^2 - 2J_e J_h (1 - \cos Q)} \quad (8)$$

описывает относительное движение в электронно-дырочной паре с квазиимпульсом Q/a вдоль оси СР. Кинетическая энергия электронно-дырочной пары с квазиимпульсом центра масс Q/a вдоль оси СР есть

$$K(Q; J_e, J_h) = J_e + J_h - \sqrt{(J_e + J_h)^2 - 2J_e J_h (1 - \cos Q)}. \quad (9)$$

Кинетическая же энергия движения центра масс в плоскости слоев СР с импульсом \mathbf{P} есть, как обычно, $\mathbf{P}^2/2(m_e + m_h)$, а $m_r = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$ — приведенная масса в плоскости слоев.

Обсудим сначала выражение (9) для кинетической энергии движения экситона вдоль оси СР. При малых значениях Q получаем

$$K(Q; J_e, J_h) \approx \frac{1}{2} \frac{J_e J_h}{J_e + J_h} a^2 \left(\frac{Q}{a} \right)^2. \quad (10)$$

Заметим, что в приближении ближайших соседей кинетическая энергия движения электрона (дырки) с квазиимпульсом q/a вдоль оси СР есть

$$K_{e(h)}(q) = J_{e(h)} [1 - \cos(q)].$$

Поэтому величины компонент эффективных масс электронов и дырок вдоль оси СР вблизи дна минизоны ($|q| \ll \pi$) суть

$$m_e^{\parallel} = 1/J_e a^2, \quad m_h^{\parallel} = 1/J_h a^2.$$

Таким образом, кинетическая энергия движения экситона вдоль оси СР при малых импульсах (10) приобретает вполне естественную форму

$$K(Q; J_e, J_h) \approx \frac{1}{2} \frac{1}{m_e^{\parallel} + m_h^{\parallel}} \left(\frac{Q}{a} \right)^2, \quad (11)$$

в которой фигурирует суммарная масса электрона и дырки.

На границе зоны Бриллюэна СР ($Q = \pm\pi$)

$$K(Q; J_e, J_h) = J_e + J_h - |J_e - J_h|,$$

⁵ Всюду далее постоянную Планка мы полагаем равной единице: $\hbar = 1$.

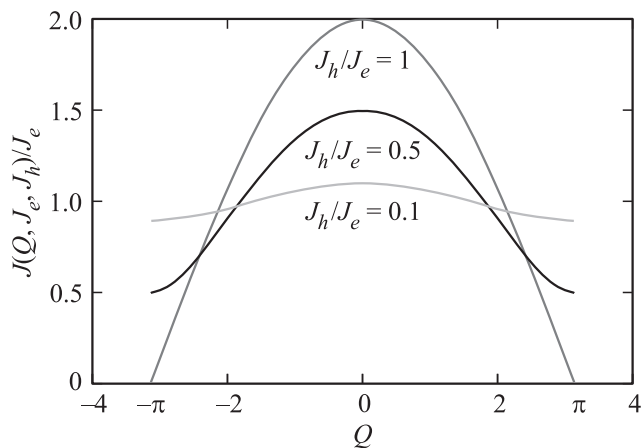


Рис. 1. Зависимость резонансного интеграла $J(Q; J_e, J_h)$ (в единицах J_e) от квазиимпульса для трех значений отношения J_h/J_e .

т. е.

$$K(Q; J_e, J_h) = 2 \min\{J_e, J_h\} = \frac{2}{a^2} \min\left\{\frac{1}{m_e^{\parallel}}, \frac{1}{m_h^{\parallel}}\right\}.$$

Итак, именно тяжелая частица определяет движение экситона вдоль оси сверхрешетки при всех значениях квазиимпульса Q/a , что вполне естественно. Естественно и то, что при $J_h \ll J_e$ экспонента в волновой функции (6) с учетом выражения для $\gamma(Q)$ превращается в e^{iQn_h} , что соответствует совпадению координаты центра инерции с координатой тяжелой частицы, в нашем случае дырки. Если же $J_h = J_e$ (равные компоненты масс электрона и дырки вдоль оси СР), то $\gamma(Q) = 0$ и экспонента $e^{iQ(n_h+n_h)/2}$ соответствует координате центра инерции на равном от них расстоянии.

Обратимся теперь к резонансному интегралу (8), описывающему относительное движение электрона и дырки вдоль оси СР в экситоне. При $Q = 0$

$$J(0; J_e, J_h) = J_e + J_h,$$

или с учетом (11)

$$J(0; J_e, J_h) = \left(\frac{1}{m_e^{\parallel}} + \frac{1}{m_h^{\parallel}}\right) \frac{1}{a^2}.$$

Таким образом, при $Q = 0$ относительное движение вдоль оси СР определяется продольной компонентой приведенной массы. С увеличением импульса центра масс резонансный интеграл уменьшается, и при $Q = \pm\pi$

$$J(\pm\pi; J_e, J_h) = \left|\frac{1}{m_e^{\parallel}} - \frac{1}{m_h^{\parallel}}\right| \frac{1}{a^2}.$$

Если резонансные интегралы, а значит, массы электронов и дырок близки, то относительное движение вдоль оси СР оказывается затрудненным. В пределе

равных масс⁶ $J(\pm\pi; J_e, J_h) = 0$ и электрон и дырка экситона оказываются локализованными, каждый в своей яме СР. Зависимость резонансного интеграла $J(Q)$ (в единицах J_e) от квазиимпульса для трех значений отношения J_h/J_e представлена на рис. 1.

3. Энергия связи экситона в слоистой сверхрешетке

Энергия связи экситона находится как собственное значение гамильтониана

$$\langle n | \hat{H}_{\text{exc}} | n' \rangle = \left[-\frac{1}{2m_r} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - V(\rho, n) \right] \delta_{n,n'} + \frac{J(Q; J_e, J_h)}{2} (2\delta_{n,n'} - \delta_{n+1,n} - \delta_{n-1,n'}), \quad (12)$$

где $\delta_{n,n'}$ есть символ Кронекера. Следует рассмотреть два предельных случая.

3.1. Экситон с заблокированным движением вдоль оси сверхрешетки, $J(Q; J_e, J_h) = 0$

Собственные функции гамильтониана (12) при нулевом значении резонансного интеграла $J(Q; J_e, J_h)$ имеют вид⁷

$$\chi_{Q,v}^N(n; \rho) = \delta_{n,N} \psi_{v,N}(\rho), \quad (13)$$

где v — совокупность собственного значения аксиального момента и номера состояния, а собственные энергии, E_v^N , зависят от числа периодов, разделяющих электрон и дырку, N , и играющего роль квантового числа. Волновые функции $\psi_{v,N}(\rho)$ в (13) — это собственные функции двумерного (2D) гамильтониана

$$-\frac{1}{2m_r} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - V(\rho, N),$$

которые описывают экситоны в собственном состоянии с квантовыми числами v . В пределе очень глубокой и узкой ямы потенциал (3) можно заменить на

$$V(\rho, N) = \frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + a^2 N^2}}. \quad (14)$$

При $N = 0$, мы имеем дело с 2D экситоном, энергия связи которого при $N = 0$ равна $4E_B$, где боровская энергия 3D экситона

$$E_B = \frac{e^4 m_r}{2\epsilon^2 \hbar^2}.$$

⁶ Это достижимо в структуре, где высота разделяющего ямы барьера для дырок меньше барьера для электронов.

⁷ Следует заметить, что набор функций (13) образует полную систему в рамках одноминимизного приближения для электронов и дырок:

$$\sum_{v,N} \chi_v^N(n; \rho) \bar{\chi}_v^N(n'; \rho') = \delta_{n,n'} \delta(\rho - \rho').$$

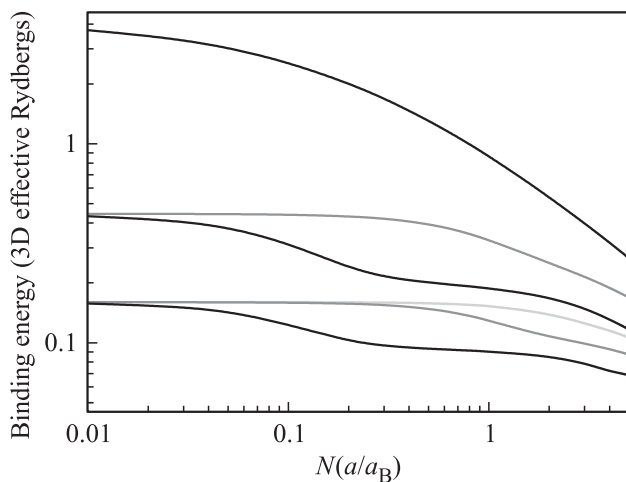


Рис. 2. Зависимость энергии связи экситона от расстояния между электроном и дыркой экситона вдоль оси сверхрешетки для трех первых значений углового момента в плоскости слоя сверхрешетки [5].

Энергии связи основного и возбужденных состояний экситона суть [4]

$$E_B/(s - 1/2)^2,$$

где $s = 1, 2, 3 \dots$ есть главное квантовое число ($s = 1$ отвечает основному состоянию). Из-за известного вырождения системы с кулоновским взаимодействием при $N = 0$ энергия связи не зависит от углового момента. Сразу же заметим, что в общем случае потенциала (3) это вырождение снимается [5].

Понятно, что собственная функция (13) и собственная энергия относительного движения в этом приближении не зависят от импульса центра инерции, коль скоро мы пренебрегли в (12) слагаемым с $J(Q; J_e, J_h)$. Последовательности значений $N = 0, 1, 2 \dots$ соответствуют экситон, состоящий из электрона и дырки в одной и той же потенциальной яме СР ($N = 0$), пространственно не прямые экситоны, в которых электрон и дырка разделены одним ($N = 1$), двумя ($N = 2$) и т.д. барьерами. Ясно, что чем больше N , тем меньше энергия связи экситона $E_{v,N}$.

На рис. 2 приведены зависимости энергий нескольких нижних состояний экситона E_v^N от параметра $(a/a_B)N$ в СР [5] в пределе очень глубокой и узкой ямы, когда потенциал электронно-дырочного взаимодействия представим в виде (14). Видно, что при $N \neq 0$ вырождение по угловому моменту снимается и уровни расщепляются [5].

При отличных от нуля величинах резонансного интеграла $J(Q; J_e, J_h)$ недиагональное по n слагаемое можно учесть по теории возмущений, если расстояния между уровнями энергии превосходят его величину. Для высоковозбужденных состояний экситона и/или больших N это не так и следует учитывать возможные резонансы состояний.

3.2. „Трехмерный“ экситон, $J(Q; J_e, J_h) \neq 0$

Под „трехмерным“ мы подразумеваем такой экситон, протяженность волновой функции которого вдоль оси 1D СР намного превосходит ее период. В этом случае гамильтониан (12) можно свести к континуальному пределу

$$\hat{H}_{\text{exc}} = -\frac{1}{2m_r} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{J(Q; J_e, J_h)a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - V(\rho, z). \quad (15)$$

Мы заменили в (12) номер ячейки СР n , умноженный на период a , непрерывной координатой z , направленной вдоль оси СР, а разностный оператор в последней скобке (12) — второй производной по z , умноженной на квадрат периода. Из (15) видно, что величина $M = 1/J(Q; J_e, J_h)a^2$ играет роль компоненты приведенной массы вдоль оси СР. Она отличается от приведенной массы в плоскости, как правило, превосходя ее.

Задача о кулоновском связанном состоянии частицы с анизотропной массой имеет давнюю историю. Она рассматривалась в связи с донорными состояниями в германии и кремнии, где изоэнергетические поверхности для электронов представляют собой вытянутые эллипсоиды вращения [4].

Если приведенная масса вдоль оси СР намного превосходит таковую вдоль слоев, то можно воспользоваться адиабатическим приближением и получить энергию основного состояния экситона с низшей поправкой по отношению масс точно так же, как это сделано в работе [4] для донорных состояний в Si и Ge:

$$E_0 = -4E_B [1 - 2.58(m_r J a^2)^{1/3}].$$

В том же приближении характерная протяженность волновой функции вдоль оси СР есть

$$\tilde{z} \sim a_B \left(\frac{m_r J a^2}{32} \right)^{1/3}.$$

Суть приближения, использованного в [4] и перефразированного для экситона, состоит в том, что „быстрое“ относительное движение формирует двумерный экситон, а „медленное“ движение вдоль оси СР квантуется в треугольной яме, образованной двумерным зарядом в пренебрежении краевым эффектом. Последнее применимо, коль скоро длина локализации вдоль оси СР много меньше радиуса двумерного экситона. С другой стороны, континуальное приближение справедливо, если эта длина больше периода СР:

$$a \ll \tilde{z} \ll a_B/2,$$

или с учетом того, что для основного состояния в чисто двумерном случае $a_B^{2D} = a_B/2$ и $E_B^{2D} = 4E_B$ (индекс 2D относится к двумерному экситону)

$$\frac{a}{a_B^{2D}} \ll \frac{J}{8E_B^{2D}} \ll \left(\frac{a_B^{2D}}{a} \right)^2. \quad (16)$$

Эти условия могут быть выполнены, если только период СР много меньше боровского радиуса двумерного экситона, $a/a_B^{2D} \ll 1$, а отношение ширины минизоны к боровской энергии лежит в довольно узком интервале. Заметим, что, хотя резонансный интеграл J и зависит от периода a степенным образом, наиболее существенна его экспоненциальная зависимость от высоты и толщины барьера, разделяющего потенциальные ямы. Поэтому мы рассматриваем резонансный интеграл как независимый параметр.

4. Сверхрешетка из квантовых точек

Кратко обсудим теперь свойства экситонов в СР из квантовых точек, опять же в одноминизонном приближении. Волновую функцию электронно-дырочной пары следует представить в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h} \Phi(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) w_e(\mathbf{r}_e - \mathbf{R}_e) w_h(\mathbf{R}_h - \mathbf{r}_h). \quad (17)$$

Здесь \mathbf{r}_e и \mathbf{r}_h — координаты электрона и дырки, $\Phi(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h)$ — огибающая функция электронно-дырочной пары, $\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h$ — координаты узлов квантовых точек в СР, $w_e(\mathbf{r}_e - \mathbf{R}_e)$ и $w_h(\mathbf{r}_h - \mathbf{R}_h)$ — функции Ваннье.

Чтобы не загромождать излишними деталями статью, здесь мы ограничимся рассмотрением простой кубической (или квадратной — в 2D структуре) СР из квантовых точек, учитывая туннельные амплитуды только между ближайшими соседями. Тогда уравнение (2) для огибающей превращается в

$$\begin{aligned} & [-V(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h)]\Phi(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) + \sum_i \frac{J_e}{2} \left[2\Phi(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) \right. \\ & \left. - \Phi(\mathbf{R}_e + a\mathbf{e}_i, \mathbf{R}_h) - \Phi(\mathbf{R}_e - a\mathbf{e}_i, \mathbf{R}_h) \right] \\ & + \sum_i \frac{J_h}{2} \left[2\Phi(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) - \Phi(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h + a\mathbf{e}_i) \right. \\ & \left. - \Phi(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h - a\mathbf{e}_i) \right] = (E - E_G)\Phi(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h). \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь $J_{e(h)}$ — по-прежнему резонансные интегралы электронов (дырок), a — период СР, \mathbf{e}_i — орты вдоль осей СР ($i = x, y, z$ или $i = x, y$ для 2D структуры).

Потенциал кулоновского взаимодействия есть

$$\begin{aligned} V(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h) &= \frac{e^2}{\epsilon} \iint d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \\ &\times w_e(\mathbf{r}_e - \mathbf{R}_e)^2 w_h(\mathbf{r}_h - \mathbf{R}_h)^2. \end{aligned} \quad (19)$$

Аналогично (6) представляем огибающую в виде

$$\Phi(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) = e^{i[\mathbf{Q}/2 - \gamma(\mathbf{Q})]\mathbf{R}_e + i[\mathbf{Q}/2 + \gamma(\mathbf{Q})]\mathbf{R}_h} \chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h) \quad (20)$$

и получаем уравнение для компонент параметров $\gamma_i(\mathbf{Q})$, обеспечивающих зависимость функции $\chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h)$

только от разности координат узлов $\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h$:

$$\gamma_i(\mathbf{Q}) = \arctan\left(\frac{J_e - J_h}{J_e + J_h} \tan \frac{Q_i}{2}\right). \quad (21)$$

Так же, как и для 1D СР, получаем уравнение для $\chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R})$:

$$\begin{aligned} & [-V(\mathbf{R})]\chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R}) + \sum_i \frac{J_i(\mathbf{Q}; J_e, J_h)}{2} \\ & \times \left[2\chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R}) - \chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R} + a\mathbf{e}_i) - \chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R} - a\mathbf{e}_i) \right] \\ & = [E - E_G - K(\mathbf{Q}; J_e, J_h)]\chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь i -я компонента резонансного интеграла есть

$$J_i(\mathbf{Q}; J_e, J_h) = \sqrt{(J_e + J_h)^2 - 2J_e J_h (1 - \cos Q_i)}, \quad (23)$$

а кинетическая энергия движения центра энергии экситона с квазиимпульсом \mathbf{Q}/a

$$\begin{aligned} K(\mathbf{Q}; J_e, J_h) &= 3(J_e + J_h) \\ &- \sum_i \sqrt{(J_e + J_h)^2 - 2J_e J_h (1 - \cos Q_i)}. \end{aligned} \quad (24)$$

При малых $|\mathbf{Q}|$ энергия движения центра масс экситона (23) описывается квадратичным законом дисперсии с суммарной массой электрона и дырки $(J_e^{-1} + J_h^{-1})a^{-2}$:

$$K(\mathbf{Q}; J_e, J_h) = \frac{\mathbf{Q}^2 a^2}{2(J_e^{-1} + J_h^{-1})}.$$

Что касается компонент резонансного интеграла (23), следует подчеркнуть их зависимость от компонент вектора квазиимпульса центра масс, тем более выраженную, чем ближе значения J_e и J_h . Поэтому энергия связи чувствительна как к величине вектора \mathbf{Q} , так и к его направлению, т. е. к направлению движения экситона как целого. Например, если $J_e = J_p$ и $Q_z = \pm\pi$, то $J_z(\mathbf{Q}; J_e, J_h) = 0$ и СР превращается в набор двумерных СР в нормальных к оси z слоях, не связанных друг с другом туннелированием.

В континуальном приближении, когда разностный оператор в скобках второго слагаемого в (22) заменяется второй производной и \mathbf{R} рассматривается как непрерывная переменная, уравнение (21) приобретает вид обычного уравнения Шредингера с анизотропной эффективной массой

$$\begin{aligned} & - \sum_i \frac{J_i(\mathbf{Q}; J_e, J_h) a^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial R_i^2} \chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R}) - V(\mathbf{R})\chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R}) \\ & = [E - E_G - K(\mathbf{Q}; J_e, J_h)]\chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (25)$$

Подчеркнем, что компоненты эффективной массы

$$m_i^* = 1/J_i(\mathbf{Q}; J_e, J_h) a^2$$

зависят как от величины, так и от направления безразмерного квазиимпульса центра инерции экситона \mathbf{Q} .

Континуальное приближение справедливо, коль скоро протяженность волновой функции $\chi_{\mathbf{Q}}(\mathbf{R})$ превосходит период СР. В этом случае потенциал $V(\mathbf{R})$ можно заменить на $(e^2/\epsilon)(1/|\mathbf{R}|)$ и уравнение (25) можно обезразмерить, выбрав в качестве единицы длины наименьшую из величин

$$\frac{\epsilon J_i(\mathbf{Q}; J_e, J_h) a^2}{e^2} = \frac{\epsilon}{m_i^*(\mathbf{Q}; J_e, J_h) e^2},$$

которая соответствует радиусу Бора частицы с приведенной эффективной массой вдоль i -й оси СР $m_i^*(\mathbf{Q}; J_e, J_h)$. Ясно, что континуальное приближение работает, если $\epsilon J_i(\mathbf{Q}; J_e, J_h) a^2 / e^2 \gg a$, или $J_i(\mathbf{Q}; J_e, J_h) \gg e^2 / \epsilon a$, т.е. если наименьший резонансный интеграл больше энергии кулоновского взаимодействия на расстоянии одного периода СР. Если в одном из направлений континуальное приближение неприменимо, рассматривать задачу следует так же, как и для слоистой сверхрешетки при малом резонансном интеграле. Если для 3D сверхрешетки малы резонансные интегралы вдоль двух осей, то мы имеем дело со слабо связанными квантовыми нитями. Их рассмотрение аналогично анализу двумерной системы с узлами из квантовых нитей, спектр экситонов в которых описан, например, в [6]. Отметим, что предыдущее рассмотрение очевидным образом обобщается на гетероструктуры второго рода, в которых электроны и дырки пространственно разделены.

Обсудим теперь возможность превращения рассматривавшегося до сих пор экситона Ваннье–Мотта в экситон Френкеля в полупроводниковой СР.

Для этого нужно, чтобы амплитуда переноса возбуждения от узла к узлу СР за счет диполь-дипольного взаимодействия была бы больше туннельной. Первая из них есть величина порядка $\mu^2 / \epsilon a^3$, где μ — дипольный момент экситонного перехода. Таким образом, необходимо, чтобы

$$\frac{\mu^2}{\epsilon a^3} \gg J_i(\mathbf{Q}; J_e, J_h). \quad (26)$$

Итак, в полупроводниковой СР может появиться любопытная особенность. Если резонансные интегралы электронов и дырок близки по величине, то в определенных направлениях квазиимпульса \mathbf{Q} и при его величинах, больше некоторой, главную роль в переносе будет играть диполь-дипольное взаимодействие. Таким образом, можно реализовать ситуацию, в которой экситон является одновременно и френкелевским, и ваннье-моттовским.⁸ Вообще говоря, такая же смена механизма переноса возможна и в слоистой сверхрешетке при выполнении условия, подобного (26).

⁸ Френкелевские экситоны в сверхрешетке из квантовых точек рассмотрены в [7].

5. Заключение

Перечислим основные результаты работы.

Показано, что резонансный интеграл, определяющий туннельную связь экситона Ваннье–Мотта в соседних ячейках сверхрешетки, зависит от квазиимпульса центра инерции экситона и эта зависимость тем сильнее, чем ближе резонансные интегралы электрона и дырки. Вследствие этого и энергия связи экситона, и его волновые функции в полупроводнике со сверхрешеткой зависят от квазиимпульса центра инерции экситона.

В континуальном приближении задача об экситоне сводится к известной задаче о кулоновском центре для частицы с анизотропной массой, решенной Коном и Латтинджером в 1955 г. [4] применительно к донорным состояниям в германии и кремнии. Найден интервал параметров, в пределе которого годится континуальное приближение, и показано, что он довольно узок.

Дан краткий анализ свойств экситонов в полупроводнике со сверхрешеткой из квантовых точек. Показано, что континуальное приближение годится, если (и это естественно) кулоновская энергия на периоде сверхрешетки меньше ширины минизоны для экситона как целого.

Показано, что при близких массах электрона и дырки и квазиимпульсе экситона, близком к границе зоны Бриллюэна, передача экситона от узла к узлу в направлении этого импульса может происходить за счет диполь-дипольного взаимодействия, как это имеет место для экситонов Френкеля.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 14-02-01223) и Программой Президиума РАН „Фундаментальные исследования нанотехнологии и наноматериалов“.

Список литературы

- [1] G.H. Wannier. Rev. Mod. Phys., **34**, 645 (1962) (DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.34.645>)
- [2] Н.С. Рытова. Вестник Московского университета, № 3, 30 (1967).
- [3] Л.В. Келдыш. Письма ЖЭТФ, **29**(11), 716 (1979) [L.V. Keldysh. JETP Lett., **29**(11), 658 (1979)].
- [4] W. Kohn, J.M. Luttinger. Phys Rev., **98**(4), 915 (1955).
- [5] М.А. Семина, Р.А. Сурис. Письма ЖЭТФ, **94**(7), 614 (2011) [M.A. Semina, R.A. Suris. JETP Lett., **94**(7), 574 (2011)].
- [6] М.А. Семина, Р.А. Сергеев, Р.А. Сурис. ФТП, **43**(9), 1222 (2009) [M.A. Semina, R.A. Sergeev, R.A. Suris. Semiconductors, **43**(9), 1182 (2009)]; М.А. Семина, Р.А. Сергеев, Р.А. Сурис. ФТП, **42**(12), 1459 (2008) [M.A. Semina, R.A. Sergeev, R.A. Suris. Semiconductors, **42**(12), 1427 (2009)].
- [7] A.S. Baimuratov, I.D. Rukhlenko, V.K. Turkov, A.V. Baranov, A.V. Fedorov. Scientific Reports, **3**(1727), 1 (2013) (DOI: [10.1038/srep01727](https://doi.org/10.1038/srep01727)).

Редактор Л.В. Шаронова

Wannier–Mott excitons in semiconductor with superlattice

R.A. Suris

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St.Petersburg, Russia

Abstract The analysis of the effect of the Wannier–Mott exciton motion on its binding energy and wave function in the semiconductor with superlattice formed by heterojunctions is presented. This effect arises from the fact that the dispersion laws of electrons and holes, which form an exciton in the superlattice, differ from the quadratic. It is considered a one-dimensional superlattice consisting of alternating layers of semiconductors with different energy position of the conduction and valence bands, i.e. with one-dimensional wells and barriers. Then an analysis of the exciton state in a superlattice consisting of the quantum dot array is given. It is demonstrated: closer the masses of the electron and hole stronger the binding energy dependence on the exciton center inertia quasi-wavenumber. For certain values of wavenumber, the possibility of change of the tunnel mechanism of excitation transfer between the superlattice cells by the transfer due to dipole–dipole interaction has been demonstrated.