

Локализация электронно-дырочных комплексов на флуктуациях интерфейсов квантовых ям

© М.А. Семина[¶], Р.А. Сергеев, Р.А. Сурис

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

(Получена 15 марта 2006 г. Принята к печати 31 марта 2006 г.)

Теоретически изучена локализация двумерных электронно-дырочных комплексов на потенциале притяжения произвольной формы. Предложен общий метод построения простых и наглядных вариационных функций для вычисления энергии связи основного состояния таких комплексов. Проанализированы предельные случаи, соответствующие различным соотношениям между параметрами, характеризующими изучаемую систему. Разработанный метод проиллюстрирован конкретными расчетами для экситона в двумерной квантовой яме с дополнительным латеральным потенциалом.

PACS: 73.21.Nb, 71.35.Gg

1. Введение

Оптические свойства низкоразмерных полупроводниковых гетероструктур, вследствие их широкого практического применения, активно исследуются теоретически и экспериментально. Особый интерес при этом представляют связанные состояния электронно-дырочных комплексов (экситонов, X^+ - и X^- -трионов и т.д.), которые определяют особенности спектра структур вблизи нижнего края фундаментальной полосы поглощения. В узких квантовых ямах значительное влияние на эти комплексы оказывают эффекты их локализации в плоскости квантовой ямы на различных дефектах структуры — флуктуациях ширины ямы [1–5], неоднородностях состава [6–9], флуктуациях распределения встроенного заряда [10–12] и др. Так, например, энергия связи X -триона в узких глубоких квантовых ямах может оказаться даже больше, чем в гипотетическом пределе двумерной структуры.

Как правило, для вычисления энергии связи электронно-дырочных комплексов применяются вариационные методы. В последнее время наиболее распространенными из них являются методы, использующие пробные функции с большим количеством (порядка 1000) подгоночных параметров (см., например, [13,14]). С их помощью можно с очень высокой точностью найти не только энергию комплекса, но и его волновую функцию. Однако большинство подобных методов отличается крайней громоздкостью, а физическая интерпретация полученных с их помощью результатов часто бывает сильно затруднена. К тому же наибольшую эффективность эти методы проявляют при расчете конкретных структур с фиксированными параметрами. Если же требуется проследить зависимость энергии комплекса от параметров структуры в широком диапазоне их значений и выделить качественные закономерности, то точность этих методов становится избыточной.

Поэтому было бы важно сконструировать пробную волновую функцию, позволяющую вычислять энергию

связи электронно-дырочного комплекса, локализованного в плоскости квантовой ямы, пусть и с меньшей точностью, но простым и наглядным способом, применимым в самом общем случае. Такой подход позволил бы понять строение комплекса и оценить величину его энергии связи при произвольных параметрах локализующего потенциала без проведения трудоемкого расчета.

2. Выбор пробной волновой функции

Мы будем рассматривать узкие глубокие квантовые ямы, движение носителей заряда в которых можно считать двумерным. Взаимодействие электронов и дырок с дефектом будем характеризовать независимыми двумерными одночастичными потенциалами притяжения произвольной формы для электронов $U_e(\mathbf{r}_e)$ и дырок $U_h(\mathbf{r}_h)$, где \mathbf{r}_e и \mathbf{r}_h — двумерные координаты электрона и дырки. Так, можно описывать, например, флуктуации ширины квантовой ямы [1,15] или ее состава [6,15].

Рассмотрим электронно-дырочный комплекс, состоящий из N_e электронов и N_h дырок. Запишем в общем виде уравнение Шредингера для такой системы:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}}, \mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}}) = E\Psi(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}}, \mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}}), \quad (1)$$

где гамильтониан

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_h + \hat{V}_c + \hat{V}_e + \hat{V}_h. \quad (2)$$

Здесь \hat{T}_e и \hat{T}_h — оператор кинетической энергии электронной и дырочной подсистем; \hat{V}_c — оператор полного кулоновского взаимодействия между носителями; \hat{V}_e и \hat{V}_h — потенциалы взаимодействия электронной и дырочной подсистем с дефектом:

$$\hat{V}_e(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}}) = \sum_{i=1}^{N_e} U_e(\mathbf{r}_{e_i}), \quad (3)$$

$$\hat{V}_h(\mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}}) = \sum_{j=1}^{N_h} U_h(\mathbf{r}_{h_j}).$$

[¶] E-mail: msemina@yahoo.com

Энергией связи электронно-дырочного комплекса будем называть величину

$$E_b = N_e E_e^{(0)} + N_h E_h^{(0)} - E, \quad (4)$$

где $E_e^{(0)}$, $E_h^{(0)}$ — энергии основного состояния изолированных электрона и дырки в потенциалах $U_e(\mathbf{r}_e)$ и $U_h(\mathbf{r}_h)$, а E — минимальная собственная энергия гамильтониана (2), учитывающего кулоновское взаимодействие между носителями.

Энергию связи E_b будем искать с помощью вариационного метода. Для построения общего, но при этом простого и наглядного метода необходимо сконструировать пробную волновую функцию, удовлетворяющую следующим требованиям. Она должна:

1 — позволить вычислить энергию связи комплекса с хорошей точностью при произвольных параметрах потенциалов $U_{e,h}(\mathbf{r}_{e,h})$;

2 — обладать минимально возможным числом подгоночных параметров, которые должны иметь физический прозрачный смысл;

3 — иметь общий вид, не зависящий от конкретной формы потенциалов $U_{e,h}(\mathbf{r}_{e,h})$.

Для построения пробной функции, отвечающей этим требованиям, мы выделим предельные случаи соотношений между параметрами, характеризующими рассматриваемую систему, в которых вид волновой функции, описывающей комплекс с хорошей точностью, известен из общих соображений. Затем мы построим пробную функцию, обладающую минимальным числом подгоночных параметров и плавно переходящую между формами, соответствующими выделенным предельным случаям.

Введем следующие величины, характеризующие электронно-дырочный комплекс: E_c — типичная величина кулоновского взаимодействия между носителями; ΔE_e и ΔE_h — характерные расстояния между уровнями размерного квантования невзаимодействующих электронов и дырок в потенциалах $U_e(\mathbf{r}_e)$ и $U_h(\mathbf{r}_h)$ соответственно.

Соотношения между величинами E_c , ΔE_e и ΔE_h определяют качественное строение комплекса. Для удобства обозначим их:

$$W_e = \frac{\Delta E_e}{E_c}, \quad (5)$$

$$W_h = \frac{\Delta E_h}{E_c}.$$

Есть всего два качественно различных предельных случая, в которых уравнение Шредингера (1) упрощается и сводится к нескольким независимым уравнениям с меньшим количеством частиц.

Предельный случай 1. Выполнено условие

$$W_e, W_h \ll 1. \quad (6)$$

Тогда движение центра масс комплекса считается медленным по сравнению с относительным движением

составляющих его частиц, и в адиабатическом приближении его волновая функция представляется в виде

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1}) \\ = \Psi^{\text{C.M.}}(\mathbf{R}) \Psi^{\text{int}}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1}), \end{aligned} \quad (7)$$

где \mathbf{R} — координата центра масс, $\boldsymbol{\rho}_i$ ($i = 1 \dots N_e + N_h - 1$) — относительные координаты частиц в комплексе.

Волновая функция центра масс комплекса, $\Psi^{\text{C.M.}}(\mathbf{R})$, является решением уравнения Шредингера с гамильтонианом:

$$\hat{T}_{\text{C.M.}} = \hat{T}_{\text{C.M.}} + \hat{V}_e(\mathbf{R}) + \hat{V}_h(\mathbf{R}), \quad (8)$$

где $\hat{T}_{\text{C.M.}}$ — оператор кинетической энергии центра масс комплекса. Потенциалы $\hat{V}_e(\mathbf{R})$ и $\hat{V}_h(\mathbf{R})$ суть потенциалы (3), взятые при $\mathbf{r}_{ei}, \mathbf{r}_{hj} \equiv \mathbf{R}$, так что $\hat{V}_e(\mathbf{R}) = N_e U_e(\mathbf{R})$, $\hat{V}_h(\mathbf{R}) = N_h U_h(\mathbf{R})$.

Волновая функция относительного движения носителей в свободном двумерном комплексе, $\Psi^{\text{int}}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})$, является решением уравнения Шредингера с гамильтонианом:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \hat{T}_{\text{int}} + \hat{V}_c(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1}), \quad (9)$$

где \hat{T}_{int} — оператор кинетической энергии относительного движения носителей.

Предельный случай 2. Выполнено хотя бы одно из условий

$$W_e \gg 1 \quad (10)$$

или

$$W_h \gg 1, \quad (11)$$

т.е. либо взаимодействие электронов (выполнено (10)), либо дырок (выполнено (11)) с локализуемым потенциалом сильнее, чем кулоновское взаимодействие между носителями.

Пусть выполнено условие (10), но не выполнено (11). Тогда электронная подсистема является „быстрой“ и описывается следующим гамильтонианом нулевого приближения:

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{H}_{e1_i}, \quad (12)$$

$$\hat{H}_{e1} = \hat{T}_{e1} + U_e(\mathbf{r}_e), \quad (13)$$

где \hat{T}_{e1} — оператор кинетической энергии одиночного электрона. При этом волновая функция основного состояния электронной подсистемы имеет следующий вид:

$$\Phi_0^e(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}}) = \Psi_0^e(\mathbf{r}_{e_1}) \dots \Psi_0^e(\mathbf{r}_{e_{N_e}}), \quad (14)$$

где $\Psi_0^e(\mathbf{r}_e)$ — собственная функция основного состояния гамильтониана (13).

Поскольку дырочная подсистема является „медленной“, ее эффективный гамильтониан получаем путем

усреднения полного гамильтониана (2) по волновой функции (14):

$$\hat{H}_h = \sum_{i=1}^{N_h} \hat{H}_{h1_i} + \langle \Phi_0^e | \hat{V}_c | \Phi_0^e \rangle, \quad (15)$$

$$\hat{H}_{h1} = \hat{T}_{h1} + U_h(\mathbf{r}_h). \quad (16)$$

Здесь \hat{T}_{h1} — оператор кинетической энергии одиночной дырки.

Отметим, что гамильтонианы (12) и (15) описывают электронную и дырочную подсистемы полностью независимо, так как волновая функция (14), входящая в гамильтониан (15), определяется исключительно характеристиками одночастичного локализирующего потенциала U_e .

Выполнение только условия (11) аналогичным образом позволяет разделить электронную и дырочную подсистемы. Тогда гамильтониан электронной подсистемы

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{H}_{e1_i} + \langle \Phi_0^h | \hat{V}_c | \Phi_0^h \rangle, \quad (17)$$

где

$$\Phi_0^h(\mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}}) = \Psi_0^h(\mathbf{r}_{h_1}) \dots \Psi_0^h(\mathbf{r}_{h_{N_h}}). \quad (18)$$

Здесь $\Psi_0^h(\mathbf{r}_h)$ — собственная функция основного состояния одночастичного гамильтониана (16). Гамильтониан дырочной подсистемы будет следующим:

$$\hat{H}_h = \sum_{i=1}^{N_h} \hat{H}_{h1_i}. \quad (19)$$

В случае, если условия (10) и (11) выполнены одновременно, кулоновским взаимодействием между носителями можно пренебречь и координаты электронной и дырочной подсистем снова разделяются. Тогда электронная подсистема описывается гамильтонианом (12), а дырочная — гамильтонианом (19).

Покажем, что при выполнении условия (10) гамильтониан электронной подсистемы (17) переходит в (12). Действительно, выполнение данного условия означает, что E_c мало по сравнению с ΔE_e и вторым членом в (17) можно пренебречь. Таким образом, гамильтониан (17) описывает электронную подсистему как при выполнении (10), так и при выполнении (11). Аналогичным образом дырочная подсистема в обоих случаях описывается гамильтонианом (15).

В результате, если хотя бы одна из величин W_e или $W_h \gg 1$, переменные в гамильтониане (2) можно эффективно разделить, а волновую функцию электронно-дырочного комплекса представить в виде

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}}, \mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}}) \\ = \Phi^e(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}}) \Phi^h(\mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}}), \quad (20) \end{aligned}$$

где электронная функция $\Phi^e(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}})$ — решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (17), а дырочная функция $\Phi^h(\mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}})$ — с гамильтонианом (15).

Учитывая вышесказанное, мы вводим следующую пробную функцию, которая с помощью всего одного подгоночного параметра позволяет осуществить плавный переход между функциями (7) и (20) и объединить предельные случаи 1 и 2 (нормировочную константу здесь и далее опускаем):

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}}, \mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}}) \\ = [\Psi^{\text{C.M.}}(\mathbf{R}) \Psi^{\text{int}}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})]^\alpha \\ \times [\Phi^e(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}}) \Phi^h(\mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}})]^{1-\alpha}. \quad (21) \end{aligned}$$

Здесь α — подгоночный параметр, который имеет смысл меры корреляции движения носителей различных типов: $\alpha = 1$ отвечает предельному случаю 1; $\alpha = 0$ соответствует предельному случаю 2.

Отметим, что, несмотря на то что волновые функции $\Psi^{\text{C.M.}}(\mathbf{R})$, $\Psi^{\text{int}}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})$, $\Phi^e(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}})$ и $\Phi^h(\mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}})$ в общем случае нам неизвестны, они не меняются при вариационной процедуре и при фиксированных параметрах системы вычисляются лишь один раз. При этом эти функции являются решением независимых друг от друга уравнений Шредингера для систем с меньшим, чем исходная, числом частиц. Следовательно, их нахождение является задачей принципиально меньшей сложности. Необходимым условием применимости пробной функции (21) служит существование локализованных волновых функций $\Psi^{\text{C.M.}}(\mathbf{R})$, $\Psi^{\text{int}}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})$, $\Phi^e(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}})$ и $\Phi^h(\mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}})$ при любых значениях параметров, характеризующих потенциала $U_{e,h}(\mathbf{r}_{e,h})$.

Следующая пробная функция с четырьмя подгоночными параметрами, также обеспечивая плавный переход между предельными случаями 1 и 2, обладает значительно более высокой точностью и будет использоваться для проверки точности функции (21):

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}}, \mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}}) \\ = [\Psi^{\text{C.M.}}(\mathbf{R})]^{\alpha_R} [\Psi^{\text{int}}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})]^{\alpha_\rho} \\ \times [\Phi^e(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}})]^{\alpha_e} [\Phi^h(\mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}})]^{\alpha_h}. \quad (22) \end{aligned}$$

Функция (22) является удобной для сравнения с функцией (21), так как волновые функции $\Psi^{\text{C.M.}}(\mathbf{R})$, $\Psi^{\text{int}}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})$, $\Phi^e(\mathbf{r}_{e_1}, \dots, \mathbf{r}_{e_{N_e}})$ и $\Phi^h(\mathbf{r}_{h_1}, \dots, \mathbf{r}_{h_{N_h}})$, входящие в ее состав, уже найдены при расчете с функцией (21). Подгоночные параметры в функции (22) также имеют ясный физический смысл: α_e и α_h характеризуют независимое квантование подсистем электронов и дырок, а α_ρ и α_R — электронно-дырочный комплекс как целое.

Далее, в разд. 3 мы продемонстрируем применимость функций (21) и (22) на простейшем примере экситона, локализованного в параболическом потенциале. В разд. 4 обсудим, как зависит строение экситона от

параметров локализирующего потенциала. И в разд. 5 обсудим точность пробных функций (21) и (22) в случае локализирующего потенциала непараболической формы.

3. Экситон, локализованный в параболическом потенциале

Рассмотрим двумерный экситон, локализованный в изотропном параболическом потенциале. Носители заряда будем рассматривать в приближении эффективной массы, которая считается изотропной, а законы дисперсии электронов и дырок — параболическими. В качестве единиц измерения энергии и длины выберем энергию связи свободного трехмерного экситона $Ry = \mu e^4 / 2\epsilon^2 \hbar^2$ и трехмерный эффективный борковский радиус $a_B = \hbar^2 \epsilon / \mu e^2$, где $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ — приведенная масса, e — заряд электрона, ϵ — диэлектрическая постоянная, m_e и m_h — эффективные массы электрона и дырки. В качестве E_c естественно выбрать энергию кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в свободном двумерном экситоне $E_c = 4$ (например, [16]), а ΔE_e и ΔE_h выбираются равными расстояниям между уровнями размерного квантования изолированных электронов и дырки в параболических потенциалах $U_e(\mathbf{r}_e)$ и $U_h(\mathbf{r}_h)$.

Обезразмеренный гамильтониан (2) для двумерного экситона имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{\sigma+1} \Delta_e - \frac{\sigma}{\sigma+1} \Delta_h - \frac{2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + U_e(\mathbf{r}_e) + U_h(\mathbf{r}_h), \quad (23)$$

где $\sigma = m_e/m_h$ — отношение масс электрона и дырки. Локализирующие потенциалы для электрона и дырки вводятся следующим образом:

$$U_e(\mathbf{r}_e) = 4(1+\sigma)W_e^2 r_e^2, \quad (24)$$

$$U_h(\mathbf{r}_h) = 4\left(1 + \frac{1}{\sigma}\right)W_h^2 r_h^2, \quad (25)$$

где W_e и W_h определены согласно (5) и характеризуют жесткость потенциалов.

В рассматриваемом случае пробные функции (21) и (22) принимают следующий вид:

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = [\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho})]^\alpha [\Phi^e(\mathbf{r}_e)\Phi^h(\mathbf{r}_h)]^{1-\alpha} \quad (26)$$

и

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = [\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})]^{a_R} [\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho})]^{a_\rho} [\Phi^e(\mathbf{r}_e)]^{a_e} [\Phi^h(\mathbf{r}_h)]^{a_h}. \quad (27)$$

Здесь $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$ — координата относительного движения электрона и дырки, а $\mathbf{R} = (\sigma\mathbf{r}_e + \mathbf{r}_h)/(\sigma+1)$ — радиус-вектор центра масс экситона. Волновые функции

центра масс $\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})$ и внутреннего движения $\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho})$ соответственно равны

$$\Psi^{C.M.}(\mathbf{R}) = \exp\left[-\frac{(\sigma+1)^{3/2}}{\sigma} \sqrt{\sigma W_e^2 + W_h^2} R^2\right], \quad (28)$$

$$\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}) = \exp[-2\rho]. \quad (29)$$

Волновая функция $\Phi^e(\mathbf{r}_e)$ является решением следующего уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{1}{\sigma+1} \Delta_e + U_e(\mathbf{r}_e) + \tilde{V}_c^e(\mathbf{r}_e) - E_c\right] \Phi^e(\mathbf{r}_e) = 0, \quad (30)$$

где эффективный кулоновский потенциал для электронов

$$\tilde{V}_c^e(\mathbf{r}_e) = \left\langle \Psi_0^h(\mathbf{r}_h) \left| -\frac{2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right| \Psi_0^h(\mathbf{r}_h) \right\rangle.$$

Здесь волновая функция

$$\Psi_0^h(\mathbf{r}_h) = \sqrt{\frac{4}{\pi} \left(1 + \frac{1}{\sigma}\right) W_h} \exp\left[-\left(1 + \frac{1}{\sigma}\right) W_h r_h^2\right] \quad (31)$$

есть функция основного состояния изолированной дырки в потенциале $U_h(\mathbf{r}_h)$. Аналогичным образом волновая функция $\Phi^h(\mathbf{r}_h)$ является решением следующего уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{\sigma}{\sigma+1} \Delta_h + U_h(\mathbf{r}_h) + \tilde{V}_c^h(\mathbf{r}_h) - E_c\right] \Phi^h(\mathbf{r}_h) = 0, \quad (32)$$

$$\tilde{V}_c^h(\mathbf{r}_h) = \left\langle \Psi_0^e(\mathbf{r}_e) \left| -\frac{2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right| \Psi_0^e(\mathbf{r}_e) \right\rangle,$$

где

$$\Psi_0^e(\mathbf{r}_e) = \sqrt{\frac{4}{\pi} (1+\sigma) W_e} \exp[-(1+\sigma) W_e r_e^2] \quad (33)$$

есть волновая функция основного состояния изолированного электрона в потенциале $U_e(\mathbf{r}_e)$. Волновые функции $\Phi^e(\mathbf{r}_e)$ и $\Phi^h(\mathbf{r}_h)$ можно найти либо путем численного решения одночастичных уравнений Шредингера (30) и (32) соответственно, либо вариационным методом. Мы использовали второй подход со следующей пробной функцией:

$$\Phi^e(\mathbf{r}_e) = \exp(-A_e r_e - B_e r_e^2), \quad (34)$$

$$\Phi^h(\mathbf{r}_h) = \exp(-A_h r_h - B_h r_h^2), \quad (35)$$

где $A_{e,h}, B_{e,h}$ — подгоночные параметры.

Зависимости энергии связи экситона $E_b(W_h)$, полученные для различных W_e при расчете с функциями (26) и (27), представлены на рис. 1, a ($\sigma = 1$) и b ($\sigma = 0.3$). Как и следовало ожидать, при любых значениях параметров W_e и W_h энергия связи E_b превышает энергию связи свободного экситона $E_b^{2D} = 4$, так как при дополнительной локализации увеличивается эффективность

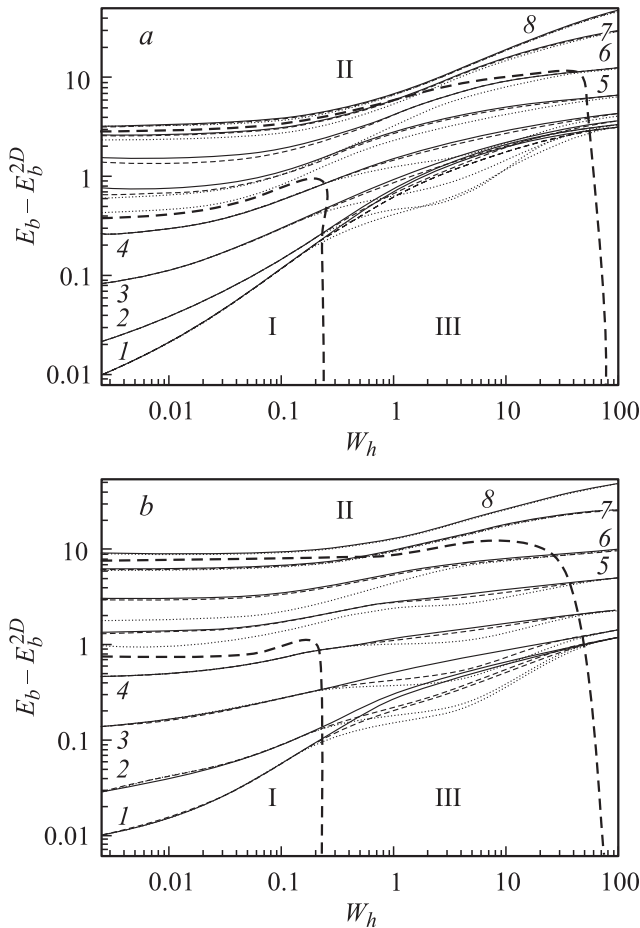


Рис. 1. Серия зависимостей энергии связи экситона $E_b(W_h)$ для разных значений W_e . За точку отсчета выбрана энергия связи свободного двумерного экситона E_b^{2D} . Рис. *a* и *b* соответствуют различным значениям отношения масс электрона и дырки σ : *a* — 1, *b* — 0.3. Кривые 1–8 соответствуют значениям W_e : 1 — 0.0025, 2 — 0.01, 3 — 0.0625, 4 — 0.25, 5 — 1, 6 — 4, 7 — 25, 8 — 100. Сплошные, штриховые и штрихпунктирные линии соответствуют результатам расчета с пробными функциями с четырьмя (27), двумя (36) и одним (26) подгоночными параметрами соответственно. Римскими цифрами обозначены области реализации различных предельных случаев: I — предельный случай 1 (выполнено условие (6)), II — предельный случай 2 (выполнено условие (10) или (11)). III — промежуточная область. Жирными пунктирными линиями показаны условные границы этих областей.

кулоновского притяжения между электроном и дыркой. Поэтому в качестве точки отсчета на графиках выбрана энергия связи свободного двумерного экситона.

Максимальное различие значений энергии связи, полученных с помощью простейшей пробной функции (26) и функции (27), не превышает 20%. В предельных случаях 1 и 2 энергии связи экситона, вычисленные с помощью (26) и (27), практически совпадают. В промежуточной области погрешность результатов функции (26) достигает наибольшего значения и при некоторых W_e

соответствующие зависимости $E_b(W_h)$ даже теряют монотонность. Условные границы областей реализации предельных случаев 1 и 2 показаны на рис. 1, *a* и 1, *b*. Граничными выбраны значения W_e и W_h , при которых различие результатов, полученных с использованием пробных функций (26) и (27), составляет 5%.

Одной из причин более высокой по сравнению с достигаемой при помощи функции (26) точности результата функции (27) есть то, что за счет большего количества параметров она позволяет значительно точнее описать асимптотическое поведение волновой функции экситона при переходе к предельным случаям 1 и 2. Так, отличие параметров α_e , α_h , α_p и α_R пробной функции (27) от ожидаемых предельных значений ($\alpha_e = \alpha_h = 0$ и $\beta = \alpha_R = 1$ в предельном случае 1 и $\alpha_e = \alpha_h = 1$ и $\alpha_p = \alpha_R = 0$ в предельном случае 2) позволяет учесть следующий порядок поправок к энергии по теории возмущений. Причем из-за различия масштабов волновых функций $\Psi^{CM}(\mathbf{R})$, $\Psi^{int}(\rho)$, $\Phi^e(\mathbf{r}_e)$ и $\Phi^h(\mathbf{r}_h)$, входящих в состав пробной функции (27), отличие подгоночных параметров от их ожидаемых предельных значений может оказаться большим. Так, в случае экситона, локализованного в параболическом потенциале, наибольшее отличие от предельного значения имеет подгоночный параметр β , который описывает коррелированность относительного движения электрона и дырки вследствие кулоновского взаимодействия между ними. Например, если $\sigma = 1$ и $W_e = W_h \rightarrow \infty$, то $\alpha_p \rightarrow 0.65$, вместо ожидаемого $\alpha_p \rightarrow 0$. Для учета этого мы добавили еще один параметр в пробную функцию (26):

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = [\Psi^{CM}(\mathbf{R})]^\alpha [\Psi^{int}(\rho)]^\beta [\Phi_e(\mathbf{r}_e)\Phi_h(\mathbf{r}_h)]^{1-\alpha}. \tag{36}$$

Результаты расчета с пробной функцией (36) также показаны на рис. 1. Отличие от результатов расчета с четырьмя параметрами составляет уже не более 4% при любых значениях W_e , W_h , а немонотонность исчезла.

Специфическим свойством параболических потенциалов (24) и (25) является возможность разделить переменные \mathbf{R} и ρ в гамильтониане (23) при выполнении условия [17]

$$W_e = W_h = W. \tag{37}$$

При этом энергия связи экситона E_b перестает зависеть от отношения эффективных масс электрона и дырки σ , и зависимости $E_b(W)$ при различных σ сливаются в одну универсальную кривую.

На рис. 2, *a* мы сравнили зависимости $E_b(W)$, полученные с помощью функций (26) и (27), с точной зависимостью для этого случая из работы [17]. На рис. 2, *b* показаны относительные погрешности результатов функций (26) и (27). Заметим, что максимальная погрешность энергии связи, полученной с применением простейшей однопараметровой пробной функции (26), составляет около 10%. В то время как погрешность расчета с функцией (27) не превышает 0.5%, и зависимость $E_b(W)$, полученная с ее помощью, практически

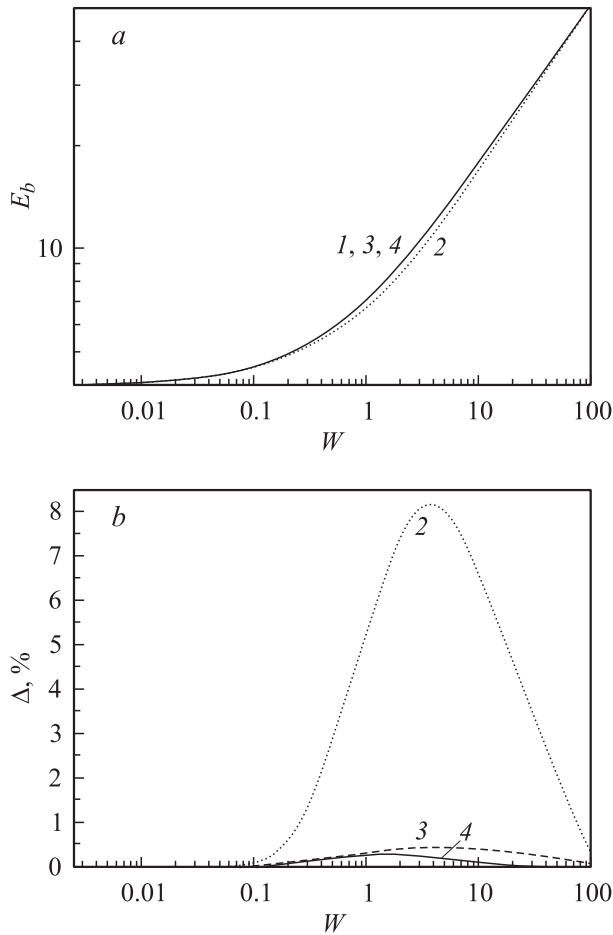


Рис. 2. *a* — зависимости энергии связи от $W_e = W_h = W$. 1 — точная зависимость из [18], 2, 3, 4 — вариационные расчеты с пробными функциями с одним (26), двумя (36) и четырьмя (27) подгоночными параметрами соответственно. 1, 3 и 4 на рисунке практически совпадают. *b* — зависимости относительной погрешности расчета с использованием пробных функций (26), (36) и (27).

сливается с точной. Это оправдывает использование функции (27) для определения точности результатов функции (26).

Таким образом, мы показали, что волновые функции (26) и (27) позволяют с хорошей точностью вычислить энергию связи экситона, локализованного в параболическом потенциале, при произвольных значениях жесткости потенциалов для электронов и дырок.

4. Зависимость строения экситона от параметров локализирующего потенциала

Предельные случаи 1 (выполнено (6)) и 2 (выполнено (10) или (11)), рассмотренные в разд. 2, соответствуют принципиально различной внутренней структуре экситона. В первом случае движение электрона и дырки

скоррелировано и экситон можно рассматривать как связанный комплекс в слабом внешнем потенциале. Напротив, во втором случае носители движутся независимо, каждый — в своем эффективном потенциале. В данном разделе мы анализируем, как меняется корреляция движения носителей при изменении параметров локализирующего потенциала.

В качестве меры корреляции движения электрона и дырки выберем следующее отношение:

$$Z(0)/Z(\pi), \quad (38)$$

где

$$Z(\varphi) = \int_0^\infty \int_0^\infty |\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)|^2 r_e dr_e r_h dr_h. \quad (39)$$

Здесь $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ — волновая функция экситона, φ — угол между радиус-векторами электрона \mathbf{r}_e и дырки \mathbf{r}_h .

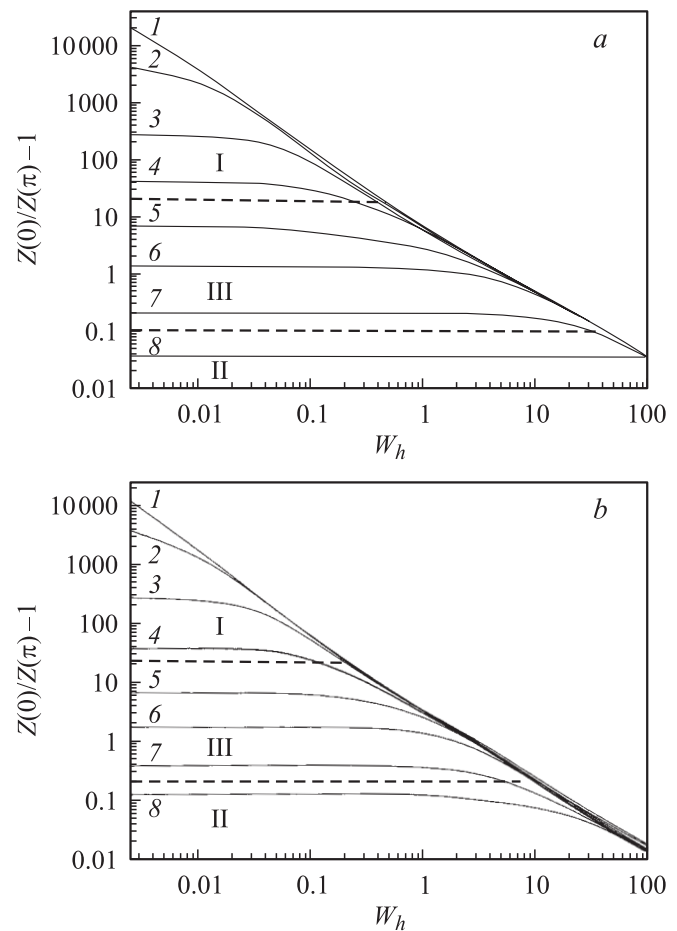


Рис. 3. Серия зависимостей $Z(0) = Z(\pi)$ для разных значений W_e . Рис. *a* и *b* соответствуют различным значениям отношения масс электрона и дырки σ : *a* — 1, *b* — 0.3. Кривые 1–8 соответствуют значениям W_e : 1 — 0.0025, 2 — 0.01, 3 — 0.0625, 4 — 0.25, 5 — 1, 6 — 4, 7 — 25, 8 — 100. Римскими цифрами обозначены области реализации различных предельных случаев: I — предельный случай 1 (выполнено условие (6)), II — предельный случай 2 (выполнено условие (10) или (11)), III — промежуточная область. Жирными пунктирными линиями показаны условные границы этих областей.

В предельном случае 1 угол между радиус-векторами электрона и дырки может с равной вероятностью принимать любые значения. Тогда $Z(\varphi) \rightarrow 1/\pi$, а $Z(0)/Z(\pi) \rightarrow 1$. В противоположном предельном случае 2 радиус-вектора электрона и дырки должны быть сонаправленными. Действительно, если локализирующий потенциал является слабым по сравнению со взаимодействием между электроном и дыркой, то размерами экситона можно пренебречь по сравнению с характерными размерами области, в которой локализован его центр масс ($R \gg \rho$), и $\mathbf{r}_e \approx \mathbf{r}_h \approx \mathbf{R}$. Тогда зависимость $Z(\varphi)$ должна иметь резкий максимум вблизи $\varphi = 0$ и $Z(0)/Z(\pi) \rightarrow \infty$.

Серия зависимостей величины $Z(0)/Z(\pi)$ от W_e при различных W_h , вычисленная с использованием функции (27), показана на рис. 3, а ($\sigma = 1$) и 3, б ($\sigma = 0.3$). На рис. 3 также показаны границы областей реализации предельных случаев 1 и 2, соответствующие изображенным на рис. 1. Заметим, что область реализации предельного случая 1 соответствует большим значениям отношения $Z(0)/Z(\pi)$, а область реализации предельного случая 2 соответствует $Z(0)/Z(\pi) \rightarrow 1$. Таким образом, есть прямая взаимосвязь между строением экситона и областями реализации предельных случаев 1 и 2, определенными из анализа точности расчетов с пробными функциями (26) и (27).

5. Точность вариационных расчетов в случае локализирующего потенциала произвольной формы

Мы показали применимость пробных функций (21) и (22) в частном случае, когда одночастичные потенциалы $U_e(\mathbf{r}_e)$ и $U_h(\mathbf{r}_h)$ имеют параболическую форму. Действительно, для потенциалов данного вида погрешность вычисления энергии связи с помощью функции (21) не превышает 20%. Посмотрим, что изменится в случае, если форма потенциалов $U_e(\mathbf{r}_e)$ и $U_h(\mathbf{r}_h)$ произвольна. Согласно нашему методу, погрешность результата, полученного с помощью пробных функций (21) и (22), будет минимальной в любом из двух предельных случаев 1 (выполнено условие (6)) или 2 (выполнено условие (10) или (11)) и будет достигать своего максимального значения в промежуточной области.

Поэтому лучше всего данные функции будут работать для локализирующих потенциалов $U_e(\mathbf{r}_e)$ и $U_h(\mathbf{r}_h)$, в которых переходная область между двумя описанными пределами минимальна. Это потенциалы, в которых расстояние между уровнями размерного квантования изолированных носителей быстро уменьшается с ростом номера уровня. В этом случае волновая функция соответствующей частицы будет состоять либо исключительно из функции основного состояния (соответствующее W_e или $W_h \gg 1$), либо сразу из большого пакета функций, отвечающих возбужденным состояниям (соответствующее W_e или $W_h \ll 1$), и переходная область

будет минимальной. В таких потенциалах максимальная погрешность результата функции (21) будет ниже в параболическом. Напротив, в потенциалах, в которых расстояние между уровнями размерного квантования увеличивается с номером уровня, погрешность будет выше.

Таким образом, зная качественную картину энергетических уровней в одночастичных потенциалах $U_e(\mathbf{r}_e)$ и $U_h(\mathbf{r}_h)$, можно предсказать точность вычисления энергии связи с помощью пробных функций (21) и (22). Например, для класса локализирующих потенциалов

$$U_{e,h}(\mathbf{r}_{e,h}) \propto (r_{e,h})^\gamma \tag{40}$$

максимальная погрешность расчета с пробными функциями (21) и (22) монотонно возрастает с ростом параметра γ . Таким образом, для всех потенциалов вида (40) при $\gamma < 2$ погрешность результата расчета с функцией (21) не должна превысить 20% при любых значениях параметров W_e и W_h , а при $\gamma > 2$ — быть несколько большей.

6. Заключение

В данной работе предложен универсальный метод построения вариационных волновых функций двумерных электронно-дырочных комплексов, локализованных на потенциале притяжения произвольной формы. Предложена пробная функция с одним подгоночным параметром, общий вид которой не зависит от конкретной формы локализирующего потенциала, позволяющая с хорошей точностью получить энергию связи комплекса при произвольных значениях параметров, характеризующих локализирующий потенциал. На примере экситона, локализованного в параболическом изотропном потенциале притяжения, показана применимость предложенного метода и проиллюстрировано изменение качественного строения комплекса при переходе между предельными случаями. Проведен анализ зависимости погрешности вариационного расчета от формы локализирующего потенциала.

Работа поддержана грантом РФФИ № 05-02-16679 и Федеральной программой поддержки ведущих научных школ.

Список литературы

- [1] G. Bastard, C. Delalande, M.H. Meynadier, P.M. Frijlink, M. Voos. Phys. Rev. B, **29**, 7042 (1984).
- [2] C. Delalande, M.H. Meynadier, M. Voos. Phys. Rev. B, **31**, 2497 (1985).
- [3] R.A. Sergeev, R.A. Suris, G.V. Astakhov, W. Ossau, D.R. Yakovlev. Eur. Phys. J. B, **47**, 541 (2005).
- [4] A.S. Bracker, E.A. Stinaff, D. Gammon, M.E. Ware, J.G. Tischler, D. Park, D. Gershoni, A.V. Filinov, M. Bonitz, F. Peeters, C. Riva. Phys. Rev. B, **72**, 035 332 (2005).
- [5] Л.Е. Голуб. ФТТ, **39** (10), 1871 (1997).

- [6] С.Д. Барановский, А.Л. Эфрос. ФТП, **12**, 2233 (1978).
- [7] S.D. Baranovskii, U. Doerr, P. Thomas, A. Naumov, W. Gebhardt. Phys. Rev. B, **48**, 17 149 (1995).
- [8] J. Christen, D. Bimberg. Phys. Rev. B, **42**, 7213 (1990).
- [9] V.I. Litvinov, M. Razeghi. Phys. Rev. B, **59**, 9783 (1998).
- [10] J.R. Haynes. Phys. Rev. Lett., **4**, 361 (1960).
- [11] B.V. Shanabrook, J. Comas. Surf. Sci., **142**, 504 (1984).
- [12] C.I. Harris, H. Kalt, P.O. Holtz, M. Sundaram, J.L. Merz, A.C. Cossard. Phys. Rev. B, **51**, 13 221 (1995).
- [13] A.V. Filinov, C. Riva, F.M. Peeters, Yu.E. Lozovik, M. Bonitz. Phys. Rev. B, **70**, 035 323 (2004).
- [14] L.C.O. Dacal, R. Ferreira, G. Bastard, J.A. Brum. Phys. Rev. B, **65**, 115 325 (2002).
- [15] A.L. Efros, C. Wetzel, J.M. Worlock. Phys. Rev. B, **52**, 8284 (1995).
- [16] C.Y.-P. Chao, S.L. Chuang. Phys. Rev. B, **43**, 6530 (1991).
- [17] W. Que. Phys. Rev. B, **45**, 11 036 (1992).

Редактор Л.В. Беляков

Localization of Electron-Hole Complexes on Interface Fluctuations of Quantum Wells

M.A. Semina, R.A. Sergeev, R.A. Suris

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

Abstract The localization of two-dimensional electron-hole complexes on the attraction potential of arbitrary shape is studied theoretically. A general method of the simple and clear trial function construction for calculation ground state binding energy of such complexes is suggested. Limiting cases corresponding to different relations between characteristic parameters are analyzed. The developed method is illustrated by particular calculations for the case of an exciton in two-dimensional quantum wells with an additional lateral confinement potential.