Оптика экситонов в системах с резкими гетерограницами. Приближение сильно локализованной волновой функции экситона

© Г.Ф. Глинский, К.О. Кравченко

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет,
197376 Санкт-Петербург, Россия

В рамках приближения сильно локализованной волновой функции экситона расчитаны спектры оптического отражения от гетерограницы $Ga_{0.7}Al_{0.3}As/GaAs$. В основу расчета положены электронный Γ_6 и дырочный Γ_8 **kp**-гамильтонианы с позиционно зависящими параметрами.

Как показано в [1], при рассмотрении системы с гетерограницами неправомерно использовать **kp**-гамильтониан, полученный для объемного материала. При наличии гетерограниц эффективный **kp**-гамильтониан в x-представлении для произвольной вырожденной зоны содержит позиционно зависящие параметры и может быть представлен в виде

$$H_{mm'}(\mathbf{x}) = \big[E + \Delta E\theta(z)\big]\delta_{mm'} - \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial}{\partial x_i}[M^{ij}_{mm'}(z)]\frac{\partial}{\partial x_j} + \Delta U_{mm'}\delta(z), \quad (1)$$

где ΔE — разрыв зоны; $\theta(z)$ — ступенчатая функция; $M^{ij}_{mm'}(z)$ — позиционно зависящие параметры, определяющие матричные элементы гамильтониана; $\Delta U_{mm'}$ — поправки, характеризующие короткодействующую часть потенциала гетерограницы. В частности для полупроводников A_3B_5 **kp**-гамильтониан зоны Γ_6 будет характеризоваться двумя позиционно зависящими параметрами α_1 и α_2. Первый из них $\alpha_1(z) = m_0/m_e(z)$ определяет эффективную массу электрона в зоне Γ_6; второй $\alpha_2(z)$ обусловлен наличием гетерограницы и исчезает в объемном материале

$$H^{\Gamma_6} = I^{\mathrm{e}}(\hat{\mathbf{k}}\alpha_1\hat{\mathbf{k}}) + i\Big(\sigma_x[\hat{k}_y\alpha_2\hat{k}_z] + \sigma_y[\hat{k}_z\alpha_2\hat{k}_x] + \sigma_z[\hat{k}_x\alpha_2\hat{k}_y]\Big), \quad (2)$$

где I^{e} — единичная матрица 2×2, σ_i — матрицы Паули, $\hat{k}_j = -i\partial/\partial x_j$, $(\hat{\mathbf{k}}a\hat{\mathbf{k}}) = \hat{k}_xa\hat{k}_x + \hat{k}_ya\hat{k}_y + \hat{k}_za\hat{k}_z$, $[\hat{k}_ia\hat{k}_j] = \hat{k}_ia\hat{k}_j - \hat{k}_ja\hat{k}_i$.

Гамильтониан зоны Γ_8 при наличии гетерограницы наряду с тремя параметрами Латтинджера γ_1, γ_2, γ_3 будет характеризоваться дополнительными параметрами γ_4 и γ_5 (что уточняет данные, ранее полученные в [2])

$$\begin{aligned}H^{\Gamma_8} = {} & I^{\mathrm{h}}(\hat{\mathbf{k}}\gamma_1\hat{\mathbf{k}}) - (1/3)\Big[(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2) \\ & \times(2\hat{k}_z\gamma_2\hat{k}_z - \hat{k}_x\gamma_2\hat{k}_x - \hat{k}_y\gamma_2\hat{k}_y) + 3(J_x^2 - J_y^2) \\ & \times(\hat{k}_x\gamma_2\hat{k}_x - \hat{k}_y\gamma_2\hat{k}_y)\Big] - 4\Big[\{J_yJ_z\}\{\hat{k}_y\gamma_3\hat{k}_z\} \\ & + \{J_xJ_z\}\{\hat{k}_x\gamma_3\hat{k}_z\} + \{J_xJ_y\}\{\hat{k}_x\gamma_3\hat{k}_y\}\Big] \\ & + i2\Big(J_x[\hat{k}_y\gamma_4\hat{k}_z] + J_y[\hat{k}_z\gamma_4\hat{k}_x] + J_z[\hat{k}_x\gamma_4\hat{k}_y]\Big) \\ & + i8\Big(J_x^3[\hat{k}_y\gamma_5\hat{k}_z] + J_y^3[\hat{k}_z\gamma_5\hat{k}_x] + J_z^3[\hat{k}_x\gamma_5\hat{k}_y]\Big),\end{aligned} \quad (3)$$

где I^{h} — единичная матрица 4×4, J_i — матрицы момента 3/2, $\{J_iJ_j\} = (1/2)(J_iJ_j + J_jJ_i)$, $\{\hat{k}_ia\hat{k}_j\} = (1/2)(\hat{k}_ia\hat{k}_j + \hat{k}_ja\hat{k}_i)$.

Дополнительный параметр γ_4 может быть определен приближенно, если пренебречь **kp**-взаимодействием валентной зоны Γ^v_{15} с зонами Γ_{25}. В этом случае $\gamma_4 = -(1/3)(1 + \gamma_1 - 2\gamma_2 - 3\gamma_3)$. Параметры α_2 и γ_5 возникают только при учете спин-орбитального расщепления промежуточных состояний и равны

$$\alpha_2 = -\frac{\Delta_{\mathrm{co}}}{3E_g + 2\Delta_{\mathrm{co}}}\left(\frac{m_0}{m_e} - 1\right),$$

$$\gamma_5 = \frac{1}{18}(1 + \gamma_1 - 2\gamma_2)\frac{\Delta'_{\mathrm{co}}}{E'_g + \Delta'_{\mathrm{co}}},$$

где E_g и Δ_{co} — соответственно энергетический зазор $\Gamma^c_6 - \Gamma^v_8$ и спин-орбитальное расщепление валентной зоны Γ^v_{15}, E'_g и Δ'_{co} — соответственно энергетический зазор $\Gamma^c_7 - \Gamma^v_8$ и спин-орбитальное расщепление зоны проводимости Γ^c_{15}. При расчете α_2 мы учли **kp**-взаимодействие зоны проводимости Γ^c_1 только с валентной зоной Γ^v_{15}, а при расчете параметра γ_5 — взаимодействие валентной зоны Γ^v_{15} с ближайшей зоной проводимости Γ^c_{15}. Из условия эрмитовости гамильтониана (1), с учетом (2) и (3), можно вывести следующие граничные условия для волновой функции электрона в зоне Γ_6 и дырки в зоне Γ_8 на [001]-интерфейсе

$$\psi^{\mathrm{e,h}}(+0) = \psi^{\mathrm{e,h}}(-0),$$

$$(\hat{A}^{\mathrm{e,h}}_z\psi^{\mathrm{e,h}})|_{z=+0} - (\hat{A}^{\mathrm{e,h}}_z\psi^{\mathrm{e,h}})|_{z=-0} = B^{\mathrm{e,h}}_z\psi^{\mathrm{e,h}}(0),$$

$$\begin{aligned}\hat{A}^{\mathrm{h}}_z = {} & \gamma_1I^{\mathrm{h}}\hat{k}_z - (1/3)\gamma_2\Big[(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2)2\hat{k}_z\Big] \\ & - 2\gamma_3\Big[\{J_yJ_z\}\hat{k}_y + \{J_xJ_z\}\hat{k}_x\Big] + i2\gamma_4[-J_x\hat{k}_y + J_y\hat{k}_x] \\ & + i8\gamma_5[-J_x^3\hat{k}_y + J_y^3\hat{k}_x],\end{aligned}$$

$$\hat{A}^{\mathrm{e}}_z = \alpha_1I^{\mathrm{e}}\hat{k}_z + i\alpha_2[-\sigma_x\hat{k}_y + \sigma_y\hat{k}_x], \quad B^{\mathrm{e}}_z = (i/a_0)nI^{\mathrm{e}},$$

$$B^{\mathrm{h}}_z = (i/a_0)\Big[m_1I^{\mathrm{h}} + m_2(2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2) + m_3\{J_xJ_y\}\Big], \quad (4)$$

где n и $m_{1,2,3}$ — константы, определяющие матрицу $\Delta U_{mm'}$. В частности, m_3 смешивает состояния легких и тяжелых дырок на гетерогранице [3].

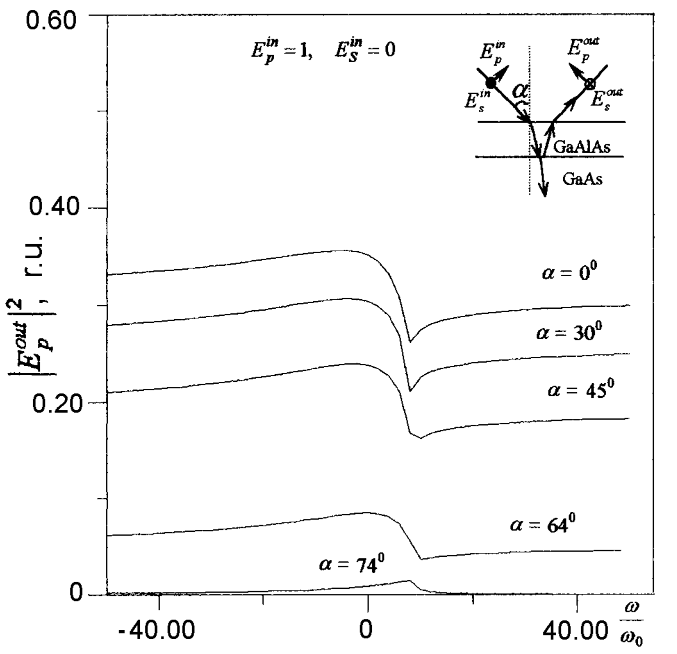

Рис. 1. Интенсивность отражения света p-поляризации E_p^{out} при различных углах падения вблизи экситонного резонанса для $E_p^{\text{in}} = 1$, $E_s^{\text{in}} = 0$. $\omega_0 = \left(E_{gx}^{\text{GaAs}}/\hbar\right)\left(E_{gx}^{\text{GaAs}}/2m_0c^2\right)\left(m_0/M_{ex}^{\text{GaAs}}\right)$.

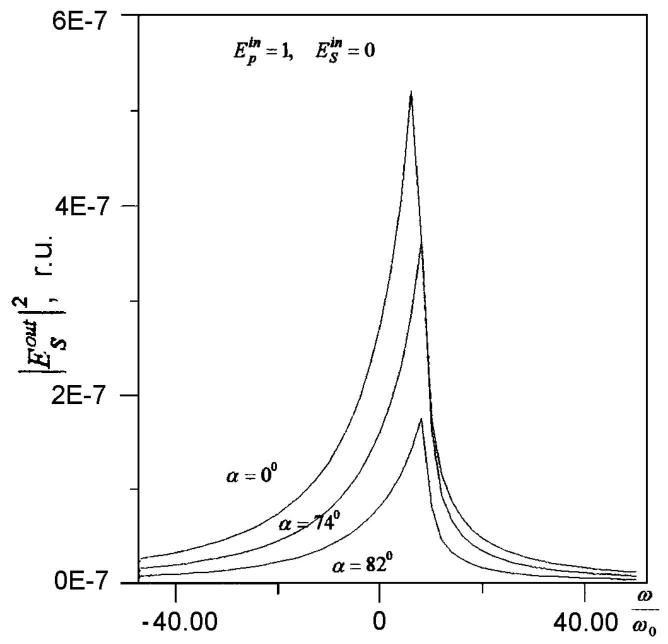

Рис. 2. Интенсивность отражения света s-поляризации E_s^{out} при различных углах падения вблизи экситонного резонанса для $E_p^{\text{in}} = 1$, $E_s^{\text{in}} = 0$. $\omega_0 = \left(E_{gx}^{\text{GaAs}}/\hbar\right)\left(E_{gx}^{\text{GaAs}}/2m_0c^2\right)\left(m_0/M_{ex}^{\text{GaAs}}\right)$.

Экситонный гамильтониан при наличии гетерограницы имеет вид

$$\hat{H}_{\text{ex}}(\mathbf{x}_\text{e}, \mathbf{x}_\text{h}) = H_{cc'}(\mathbf{x}_\text{e})\delta_{vv'} + H_{vv'}(\mathbf{x}_\text{h})\delta_{cc'} + U_{\text{Coul}}(\mathbf{x}_\text{e} - \mathbf{x}_\text{h})\delta_{vv'}\delta_{cc'}, \quad (5)$$

где $H_{cc',vv'}(\mathbf{x}_{\text{e,h}})$ — определяются выражением (1); U_{Coul} — оператор кулоновского взаимодействия.

В связи с позиционной зависимостью $M_{mm'}^{ij}(z)$ удобнее осуществить преобразование к системе центра масс не в гамильтониане (5), а рассмотреть для этого функцию Гамильтона

$$H = \langle\psi|\hat{H}_{\text{ex}}|\psi\rangle = \sum_{cvc'v'} \int d\mathbf{x}_\text{e} \int d\mathbf{x}_\text{h} \times \left\{\psi_{cv}^*(\mathbf{x}_\text{e}, \mathbf{x}_\text{h})\hat{H}_{\text{ex}}(\mathbf{x}_\text{e}, \mathbf{x}_\text{h})\psi_{c'v'}(\mathbf{x}_\text{e}, \mathbf{x}_\text{h})\right\}. \quad (6)$$

Это позволяет автоматически сохранить инвариантность тензорных уравнений, а также легко произвести усреднение по относительным координатам электрона и дырки.

Даже в отсутствие вырождения зон гетерограница не позволяет разделить трансляционное и относительное движения электронно-дырочной пары. Однако оно может быть выполнено приближенно с позиционно зависящими параметрами преобразования $\gamma_{\text{e,h}}(Z)$

$$\begin{cases} \mathbf{x}_\text{e} = \mathbf{R} + \gamma_\text{e}(Z)\mathbf{r}, \\ \mathbf{x}_\text{h} = \mathbf{R} - \gamma_\text{h}(Z)\mathbf{r}, \end{cases} \quad \gamma_\text{e}(Z) + \gamma_\text{h}(Z) = 1. \quad (7)$$

Параметры $\gamma_{\text{e,h}}(Z)$ можно определить, если в матрицах $M_{mm'}^{ij;\text{e,h}}\left(Z \pm \gamma_{\text{e,h}}(Z)z\right)$ выделить диагональные части $M^{\text{e,h}}\left(Z \pm \gamma_{\text{e,h}}(Z)z\right)\delta_{mm'}\delta_{ij}$ и разложить их в ряд по степеням z, ограничиваясь первыми членами разложения и требуя сокращения перекрестных членов вида $\dfrac{\partial\psi^*}{\partial\mathbf{R}} \cdots \dfrac{\partial\psi}{\partial\mathbf{r}}$ в (6). При этом волновую функцию экситона удобно искать в виде следующего разложения

$$\psi_{cv}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum_p \varphi_p(Z, \mathbf{r})\Phi_{cvp}(\mathbf{R}),$$

где $\varphi_p(Z, \mathbf{r})$ — решение вспомогательной параметрической задачи

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[M_\text{e}(Z) + M_\text{h}(Z)\right]\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{r}^2} + U_{\text{Coul}}(\mathbf{r})\right\}\varphi_p(Z, \mathbf{r}) = E\varphi_p(Z, \mathbf{r}).$$

В этом случае будем иметь ($J(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ — якобиан преобразования (7))

$$H = \langle\psi|\hat{H}_{\text{ex}}|\psi\rangle = \sum_{cvc'v'pp'} \iint \left\{\Phi_{cvp}^*(\mathbf{R})\varphi_p^*(Z, \mathbf{r}) \times \hat{H}_{\text{ex}}(\mathbf{R}, \mathbf{r})\varphi_{p'}(Z, \mathbf{r})\Phi_{c'v'p'}(\mathbf{R})\right\} J(\mathbf{R}, \mathbf{r})d\mathbf{r}d\mathbf{R}.$$

Отсюда в первом порядке теории возмущений для гамильтониана трансляционного движения $1S$-состояния экситона получаем следующее выражение

$$\hat{H}_{1S}(\mathbf{R}) = \int \varphi^*_{1S}(Z,\mathbf{r})\hat{H}_{\mathrm{ex}}(\mathbf{R},\mathbf{r})\varphi_{1S}(Z,\mathbf{r})J(\mathbf{R},\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (8)$$

При этом все резкие функции $M_{\mathrm{e,h}}(\mathbf{x}_{\mathrm{e,h}})$, $\theta_{\mathrm{e,h}}(\mathbf{x}_{\mathrm{e,h}})$, $\delta(\mathbf{x}_{\mathrm{e,h}})$ после усреднения (8) приобретают размытие порядка экситонного радиуса Бора a_{B}. Однако в оптическом диапазоне где $K_{\mathrm{ex}} \ll 1/a_{\mathrm{B}}$ этим размытием можно пренебречь. В этом случае задача с гамильтонианом (8) сводится к задаче с граничными условиями.

Используя в качестве экситонного гамильтониана выражение (8) и граничные условия, полученные из (4), мы рассчитали спектры оптического отражения от гетерограницы $\mathrm{Ga_{0.7}Al_{0.3}As/GaAs}$ при нормальном и наклонном падении света вблизи $\Gamma_6 \otimes \Gamma_8$-экситонного резонанса GaAs. При расчете спектров использовалась теория поляритонов, ранее развитая в работах [4–6]. Результаты расчета представлены на рис. 1, 2. Как видно, даже при угле Брюстера $\alpha \approx 74^\circ$ в области экситонного резонанса ($\omega = 0$) коэффициент отражения имеет ненулевое значение. Кроме того, смешивание состояний легких и тяжелых дырок на гетерограницы даже при нормальном падении света приводит к появлению в отражении запрещенных мод, интенсивность которых составляет $\approx 10^{-7}$ от интенсивности падающего света.

Список литературы

[1] G.F. Glinskii, K.O. Kravchenko. Proc. of Int. Symp. "Nanostructures-97: Physics and Technology". St.Petersburg (1997).
[2] B.A. Foreman. Phys. Rev. **B48**, *7*, 4964 (1993).
[3] E.L. Ivchenko, A.Yu. Kaminski, U. Rössler. Phys. Rev. **B54**, *8*, 5852 (1996).
[4] Z.G. Koinov, G.F. Glinskii. J. Phys. **A21**, *17*, 3431 (1988).
[5] G.F. Glinskii, Z.G. Koinov. Phys. Stat. Sol. (b) **155**, *2*, 501 (1989).
[6] Z.G. Koinov, G.F. Glinskii. Phys. Stat. Sol. (b) **155**, *2*, 513 (1989).