

Магнитоэкситоны в квантовых точках типа core-shell

А. В. Каламейцев⁺, А. В. Чаплик^{+*1)}

⁺Институт физики полупроводников им. Ржанова СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 4 июля 2014 г.

Вычислена энергия основного состояния “светлого” и “темного” экситонов в случае локализации электрона и дырки в тонкой сферической оболочке в сильном магнитном поле. Такая модель соответствует квантовой точке типа ядро–оболочка (core-shell). Сильное поле означает, что магнитная длина существенно меньше радиуса сферы. Отмечена нетривиальная зависимость от магнитного поля H энергии основного состояния “светлого” экситона: $E_0 \sim H^{2/3}$.

DOI: 10.7868/S0370274X14150077

Двухкомпонентные структуры core-shell, состоящие из двух полупроводников с заметно различающимися ширинами запрещенной зоны, являются сферическими аналогами хорошо известной системы квантовая яма–барьер. В последнее время этим квантовым точкам в литературе уделяется значительное внимание [1, 2]. Если толщина оболочки много меньше радиуса ядра, то можно говорить о 2D электронном газе на сферической поверхности. Одночастичный спектр носителей на поверхности сферы с учетом магнитного поля подробно изучен в работах [3–5]. Если направление магнитного поля задает полярную ось, то азимутальное квантовое число m играет роль сохраняющейся компоненты импульса в калибровке Ландау для задачи о двумерном “замагниченном” электроны. Соответственно оно определяет положение центра подвески осциллятора Ландау. Ясно, что из-за неоднородности нормальной к поверхности компоненты поля максимальная энергия основного состояния достигается для осцилляторов у полюсов сферы, а минимальная – на экваторе. Очевидно, что соответствующие особенности должны проявляться и в спектре магнитоэкситонов в квантовых точках core-shell.

Гамильтониан для экситона на поверхности сферы радиуса a в магнитном поле H , параллельном оси z , имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_\varphi + \hat{H}_\theta + U, \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_\varphi = \frac{\hbar^2}{2m_1 a^2 \sin^2 \theta_1} \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \lambda_1 \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_2 a^2 \sin^2 \theta_2} \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi_2} + \lambda_2 \right)^2, \quad (2)$$

$$\hat{H}_\theta = -\frac{\hbar^2}{2m_1 a^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta_1^2} + \cot \theta_1 \frac{\partial}{\partial \theta_1} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_2 a^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta_2^2} + \cot \theta_2 \frac{\partial}{\partial \theta_2} \right), \quad (3)$$

$$U = -\frac{\tilde{e}^2}{\sqrt{2}a} [1 - \cos \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)]^{-1/2}. \quad (4)$$

Здесь \tilde{e}^2 – квадрат эффективного заряда (с учетом фоновой диэлектрической проницаемости), $\varphi_{1,2}$ и $\theta_{1,2}$ – угловые координаты на сфере дырки и электрона, соответственно, $\lambda_1, \lambda_2 = \Phi_{1,2}/\Phi_0$, Φ_0 – квант магнитного потока, $\Phi_{1,2} = \pi a^2 H \sin^2 \theta_{1,2}$. Таким образом, $\lambda_{1,2}$ – числа квантов магнитного потока сквозь окружности, соответствующие полярным углам θ_1 и θ_2 . Потенциал $U(\theta_1, \theta_2, \varphi_1 - \varphi_2)$ описывает кулоновское притяжение электрона и дырки. Зависимость гамильтониана (1) лишь от разности $\varphi_1 - \varphi_2$ означает сохранение z -проекции полного момента экситона. Действительно, легко убедиться в том, что оператор $\hat{M}_z = \hbar \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi_1} - i \frac{\partial}{\partial \varphi_2} \right)$ коммутирует с гамильтонианом, т.е. ему соответствует некоторое квантовое число J . Вводя вместо азимутальных углов φ_1 и φ_2 новые переменные:

$$\varphi_0 = \frac{m_1 \varphi_1 + m_2 \varphi_2}{M}, \quad \psi = \varphi_1 - \varphi_2, \quad (5)$$

¹⁾e-mail: chaplik@isp.nsc.ru

где $M = m_1 + m_2$, видим, что $M_z = -i\hbar\partial/\partial\phi_0$ и волновую функцию двухчастичной системы можно искать в виде $\Psi = \exp(iJ\phi_0)F(\psi, \theta_1, \theta_2)$. После подстановки и сокращения на $\exp(iJ\phi_0)$ приходим к уравнению Шредингера на F :

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m_1a^2 \sin^2 \theta_1} \left(\frac{m_1}{M} J - i \frac{\partial}{\partial \psi} \right)^2 F + \\ & + \frac{\hbar^2}{2m_2a^2 \sin^2 \theta_2} \left(\frac{m_2}{M} J + i \frac{\partial}{\partial \psi} \right)^2 F - \\ & - \frac{ieH}{2\mu c} \frac{\partial F}{\partial \psi} + \frac{1}{8} \left(\frac{eHa}{c} \right)^2 \left(\frac{\sin^2 \theta_1}{m_1} + \frac{\sin^2 \theta_2}{m_2} \right) F + \\ & + (U + \hat{H}_\theta)F = EF; \quad \mu = m_1 m_2 / M. \end{aligned} \quad (6)$$

Чтобы исключить из (6) первую производную $\partial F/\partial\psi$, пишем $F = e^{i\Lambda\psi} f$ и подбираем $\Lambda(\theta_1, \theta_2)$:

$$\Lambda = -\frac{1}{2} \frac{eH}{\mu c} (\hbar/m_1 a^2 \sin^2 \theta_1 + \hbar/m_2 a^2 \sin^2 \theta_2)^{-1}. \quad (7)$$

Окончательно имеем

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2a^2} \left(\frac{1}{m_1 \sin^2 \theta_1} + \frac{1}{m_2 \sin^2 \theta_2} \right) \frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2} + \\ & + U(\psi, \theta_1, \theta_2)f + W(\theta_1, \theta_2)f + \\ & + e^{-i\Lambda\psi} \left[\hat{H}_\theta(\theta_1, \theta_2) e^{i\Lambda\psi} f \right] \end{aligned} \quad (8)$$

(разумеется, экспонента $e^{i\Lambda\psi}$ сокращается после вычисления действия оператора \hat{H}_θ на $f e^{i\Lambda\psi}$). Слагаемое $W(\theta_1, \theta_2)$ представляет собой часть эффективного потенциала, определяющего движение частиц вдоль меридианов. В сильном магнитном поле эти движения являются малыми колебаниями (с амплитудой порядка магнитной длины l_H) около центров подвески осцилляторов Ландау:

$$\begin{aligned} W(\theta_1, \theta_2) &= \frac{\hbar^2}{2a^2 (m_1 \sin^2 \theta_1 + m_2 \sin^2 \theta_2)} \times \\ & \times \left[J - \frac{\tilde{\Phi}}{\Phi_0} (\sin^2 \theta_1 - \sin^2 \theta_2) \right]^2, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\tilde{\Phi} = \pi a^2 H$ – магнитный поток через экваториальное сечение сферы.

Вторая часть эффективного потенциала, $\varepsilon(\theta_1, \theta_2)$, находится как собственное число укороченного уравнения (8), в котором θ_1 и θ_2 считаются фиксированными параметрами:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2a^2} \left(\frac{1}{m_1 \sin^2 \theta_1} + \frac{1}{m_2 \sin^2 \theta_2} \right) \frac{\partial^2 f_1}{\partial \psi^2} + \\ & + U f_1 = \varepsilon f_1. \end{aligned} \quad (10)$$

Такое приближение оправдано физической картиной движения: θ_1 и θ_2 отклоняются от своих средних значений, соответствующих положениям точек подвеса осцилляторов, на величины порядка $l_H/a \ll 1$, тогда как угол ψ изменяется в интервале $[-2\pi, 2\pi]$. Предлагаемая приближенная схема аналогична схеме, используемой в теории колебательно-вращательных спектров молекул: сначала решается задача о вращении молекулы как жесткого ротатора (все атомы закреплены в равновесных положениях), а затем приближенно учитываются малые колебания атомов (с амплитудами, много меньшими длин валентных связей). Таким образом, уравнение (10) описывает магнитоэкситоны в одномерном квантовом кольце, причем магнитное поле уже исключено преобразованием $F = e^{i\Lambda\psi} f$. Заметим, что теперь приведенная масса экситона и фаза Λ параметрически зависят от углов θ_1, θ_2 (см. (7) и (10)). Эта задача решена в работе [6]. В ней показано, что условия периодичности полной волновой функции по φ_1 и φ_2 приводят к следующим требованиям: J – целое число, ε – периодическая функция с периодом 2π .

Следующим шагом является учет флуктуаций величин θ_1, θ_2 , который требует решения уравнения

$$\left[\hat{H}_\theta + W(\theta_1, \theta_2) + \varepsilon(\theta_1, \theta_2) \right] f_2 = E f_2. \quad (11)$$

При этом в рамках описанной приближенной схемы следует пренебречь производными $\partial\Lambda/\partial\theta_1, \theta_2$, т.е. результатом действия оператора \hat{H}_θ в уравнении (8) на $\exp(i\Lambda\psi)$. Нас будет интересовать минимальная энергия экситона, т.к. обычно рекомбинационное излучение возникает уже после релаксации экситонов к основному состоянию как по внутренним степеням свободы, так и по движению центра тяжести. Величина $\varepsilon(\theta_1, \theta_2)$, как показано в [6], равна уровню энергии ε_0 в кулоновской яме $U(\theta_1, \theta_2)$ с добавлением осциллирующего вклада $\tilde{\varepsilon}$ (эффект типа Ааронова–Бома) за счет туннелирования электрона и дырки друг к другу вдоль кольца. Этот вклад экспоненциально мал, если эффективный борковский радиус меньше $2\pi a$. Таким образом, следует искать решение уравнения (11) вблизи минимума потенциала $W + \varepsilon_0$. Результаты оказываются качественно различными для “светлого” ($J = 0$) и темного ($J \neq 0$) экситонов.

Начнем со случая $J = 0$. Тогда функция

$$W = \frac{1}{8} \left(\frac{eHa}{c} \right)^2 \frac{(\sin^2 \theta_1 - \sin^2 \theta_2)^2}{m_1 \sin^2 \theta_1 + m_2 \sin^2 \theta_2} \quad (12)$$

в области определения углов θ_1, θ_2 от 0 до π достигает минимума (равного нулю) на прямых $\theta_1 = \theta_2$

и $\theta_1 + \theta_2 = \pi$. Если θ_0 – произвольная точка на одной из этих прямых, то разложение W вблизи минимумов $\theta_1, \theta_2 \approx \theta_0$ и $\theta_1 = \theta_0, \theta_2 = \pi - \theta_0$ имеет вид $W \approx \cos^2 \theta_0 (\theta_1 - \theta_2)^2$, т.е. абсолютному минимуму части эффективного потенциала W соответствует точка $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2$. Вводя малые отклонения $x = \theta_1 - \pi/2, y = \theta_2 - \pi/2$, приближенно получим

$$W = \frac{1}{8} \left(\frac{eHa}{c} \right)^2 (x^2 + y^2)^2, \quad (13)$$

$$\hat{H}_\theta = -\frac{\hbar^2}{2m_1 a^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - x \frac{\partial}{\partial x} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_2 a^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} - y \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (14)$$

(в операторе \hat{H}^θ кинетической энергии $\cot \theta_1, \theta_2$ разложен вблизи $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2$); $U \approx \tilde{e}^2/2a |\sin \psi/2|$.

Таким образом, для $J = 0$ основное состояние системы соответствует движению обеих частиц вдоль экватора сферы в кольце конечной ширины, которая определяется удерживающим (*confinement*) потенциалом (13). Последний в полярных координатах ρ, φ имеет вид $\rho^4 \cos^2 2\varphi$, т.е. отвечает двумерному анизотропному ангармоническому осциллятору. При этом вдоль четырех направлений, $\varphi = \pm\pi/4, \pm 3\pi/4$, частица может уйти на бесконечность. Однако множество таких траекторий имеет нулевую меру. Прямой вариационный метод с пробной функцией $f \sim \exp(-\alpha x^2 - \beta y^2)$ приводит к следующему выражению для энергии основного состояния в пределе сильного поля ($a/l_H \gg 1$):

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{4a^2} (a/l_H)^{4/3} \left[\frac{u_0}{m_1} + \frac{v_0}{m_2} + \frac{1}{4M} \left(\frac{3}{2u_0^2} + \frac{3}{2v_0^2} - \frac{1}{u_0 v_0} \right) \right] \dots, \quad (15)$$

где u_0, v_0 – положительные решения системы уравнений

$$\begin{aligned} \frac{u^3 v}{m_1} + \frac{u - 3v}{4M} &= 0, \\ \frac{v^3 u}{m_2} + \frac{v - 3u}{4M} &= 0. \end{aligned} \quad (16)$$

На рис. 1 показаны зависимости u_0 и v_0 от отношения масс m_1/m_2 . Из (15) мы видим, что поперечные (т.е. вдоль меридианов, продольному движению экситона как целого соответствует его перемещение вдоль параллелей) движения частиц при $J = 0$ приводят к вкладу в полную энергию, пропорциональному $H^{2/3}$. Результат численного решения для значения $m_1/m_2 = 0.3$ показан на рис. 2. Пунктирной кри-

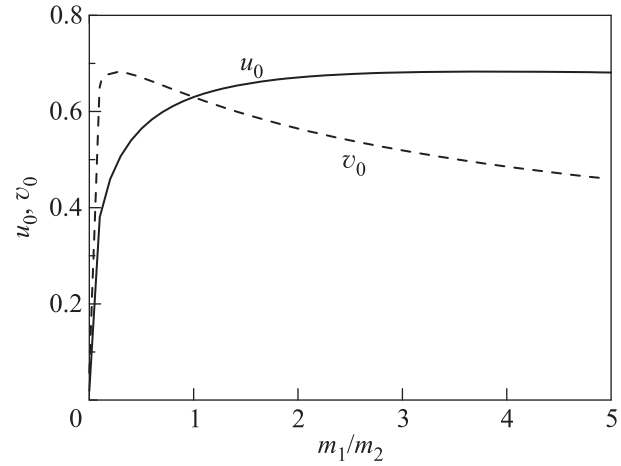


Рис. 1. Зависимости коэффициентов u_0, v_0 от отношения масс электрона и дырки

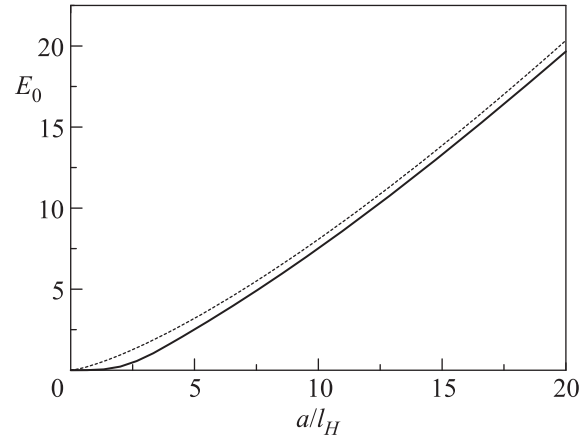


Рис. 2. Зависимость энергии основного состояния (в единицах $\hbar^2/2a^2\mu$) “светлого” ($J = 0$) экситона от магнитного поля. Пунктир – значение энергии основного состояния, рассчитанное по приближенной формуле (15)

вой на том же рисунке представлен результат вариационного расчета по формуле (15). Видно, что приближенное решение дает верное значение для энергии основного состояния экситона и ее зависимости от магнитного поля. Расхождение с точным решением определяется величиной следующего порядка малости по энергии.

При $J \neq 0$ (“темный” экситон) эффективный потенциал (9) имеет два эквивалентных абсолютных минимума: $\theta_{10} = \pi/2, \theta_{20} = 0.5 \arccos(2\Gamma - 1)$, где $\Gamma = J\Phi_0/\tilde{\Phi}$, и $\theta_{20} = \pi/2, \theta_{10} = 0.5 \arccos(2\Gamma - 1)$, т.е. либо электрон – на экваторе, дырка – на широте θ_2 , либо наоборот. Будем считать магнитное поле для данного J достаточно сильным, так что $\Gamma < 1$ и минимальное значение W равно нулю. Случай $\Gamma > 1$,

$\min W > 0$ может быть рассмотрен аналогично, хотя и требует несколько более громоздких выкладок. Снова вводя малые отклонения $x = \theta_1 - \pi/2$, $y = \theta_2 - \theta_{20}$, получим уравнение для меридионального движения частиц:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1 a^2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2 a^2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \sqrt{\frac{\Gamma}{1-\Gamma}} \frac{\partial}{\partial y} \right) f + [\varepsilon_0(\theta_{20}) + \tilde{\varepsilon}] f + \frac{\hbar^2 (a/l_H)^4}{2a^2 [m_1 + m_2(1-\Gamma)]} \times [x^2 + (2\Gamma - 1)y^2 + 2\sqrt{\Gamma(1-\Gamma)}y]^2 f = E f. \quad (17)$$

Здесь $\varepsilon_0(\theta_{20})$ – основной уровень в яме $U(\theta_1 = \pi/2, \theta_2 = \theta_{20})$ с U из уравнения (4). Это сглаженная кулоновская яма, не имеющая сингулярности в нуле. Уровень $\varepsilon_0(\theta_{20})$ зависит от магнитного поля и от J согласно определению величины θ_{20} .

Видно, что теперь разложение эффективного потенциала вблизи минимума начинается с квадратичного по $\theta_2 - \theta_{20}$ члена. В этом низшем приближении задача становится полностью эквивалентной своему “плоскому” аналогу: гармонические колебания по оси y и свободное движение по оси x . Чтобы учесть вклад от ангармонических членов, снова воспользуемся вариационным методом с той же, что и выше, пробной функцией. В данном случае вычисления оказываются более громоздкими. Поэтому сразу приведем результаты. Если $J \ll (a/l_H)^{2/3}$, то $\Gamma \ll 1$ и, как и должно быть, воспроизводятся полученные формулы (15), (16), т.е. $E_0 - (\varepsilon_0 + \tilde{\varepsilon}) \propto H^{2/3}$. Если же $J \gg (a/l_H)^{2/3}$, то Γ может быть и порядка единицы, а для энергии в главном порядке по l_H/a получается

$$E_0 - (\varepsilon_0 + \tilde{\varepsilon}) = \frac{3\hbar^2}{8a^2 m_2} \times \left\{ \frac{\Gamma(1-\Gamma)m_2}{[m_1 + m_2(1-\Gamma)]v} \right\}^{1/2} \frac{a^2}{l_H^2}. \quad (18)$$

Поскольку сама величина Γ зависит от поля ($\Gamma \sim 1/H$), формула (18) описывает довольно сложную зависимость энергии основного состояния экситона от магнитного поля. Численно найденная зависимость $E_0(H)$ представлена на рис. 3.

Характерной особенностью “темного” экситона является то, что минимуму энергии соответствует пространственное разделение электрона и дырки ($\theta_1 \neq \theta_2$), причем среднее расстояние между ни-

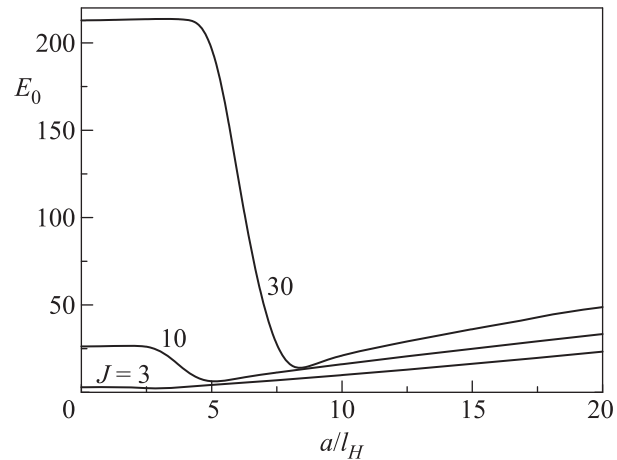


Рис. 3. Зависимость энергии основного состояния (в единицах $\hbar^2/2a^2\mu$) “темного” ($J \neq 0$) экситона от магнитного поля для значений углового момента $J = 3, 10, 30$

ми – свое для каждого J и зависит от магнитного поля. Эта картина напоминает радиально поляризованный экситон (электрон и дырка локализованы на двух концентрических окружностях), изученный в [7]. Как и в [3], с ростом магнитного поля роль основного состояния последовательно переходит к состояниям с разными J .

Итак, мы показали, что в квантовых точках типа core-shell, помещенных в магнитное поле, значительную роль играет неоднородность нормальной к поверхности компоненты поля. Энергия магнитоэкситона нетривиальным образом зависит от поля, причем эта зависимость существенно определяется значением момента центра тяжести.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант # 14-02-00135) и программы РАН.

1. B. O. Dabbousi, J. Rodriguez-Viejo, F. V. Mikulec, J.Ř. Heine, H. Mattoussi, R. Ober, K. F. Jensen, and M. G. Bawendi, *J. Phys. Chem.* **101**, 9463 (1997).
2. R. Gh. Chaudhuri and S. Paria, *Chem. Rev.* **112**, 2373 (2012).
3. H. Aoki and H. Suezawa, *Phys. Rev. A* **46**, R1163 (1992).
4. J. H. Kim, I. D. Vagner, and B. Sundaram, *Phys. Rev. B* **46**, 9501 (1992).
5. D. N. Aristov, *Письма в ЖЭТФ* **70**, 405 (1999).
6. A. V. Chaplik, *Письма в ЖЭТФ* **62**, 885 (1995).
7. A. O. Govorov, A. V. Kalameitsev, R. Warburton, K. Karrai, and S. E. Ulloa, *Physica E* **13**, 297 (2002).