

# Локализация экситонов на плоских дефектах в полупроводниковых кристаллах

М. М. Махмудиан<sup>+\*1)</sup>, А. В. Чаплик<sup>+\*1)</sup>

<sup>+</sup>Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

<sup>\*</sup>Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 18 июня 2020 г.

После переработки 27 июня 2020 г.

Принята к публикации 10 июля 2020 г.

Теоретически исследованы локализованные состояния экситона большого радиуса на плоском короткодействующем дефекте, который моделируется потенциалом  $-V\delta(z)$ . Отношение амплитуды  $V$  к  $e^2/\varepsilon$  ( $\varepsilon$  – диэлектрическая постоянная) определяет два асимптотических режима – слабая или сильная локализация. В обоих случаях радиационное время жизни экситона увеличивается с ростом  $V$  по степенным законам:  $V^{1/4}$  в случае слабой и  $V$  в случае сильной локализации.

DOI: 10.31857/S1234567820160053

**Введение.** В физике экситонов существенный интерес представляет проблема образования связанных состояний экситонов с разного рода дефектами. В случае заряженных примесных центров взаимодействие экситона с дефектом является дальнедействующим и приводит к образованию атомно-подобного комплекса. Типичный пример – локализация на заряженном доноре, наблюдавшаяся в квантовых ямах арсенида галлия [1]. Такая же локализация экситона по всем трем измерениям реализуется на флуктуациях толщины квантовой ямы [2]. Двумерные структурные дефекты решетки приводят к одномерной локализации экситона, когда движение его центра масс вдоль дефекта остается свободным. Такие дефекты могут соответствовать короткодействующему потенциалу. Примерами являются плоские дефекты упаковки (*stacking faults*), двойниковые границы (*twins*), границы блоков. В работе [3] исследовалось связанное состояние экситона на двойниковой границе. Авторы провели численные расчеты из первых принципов для GaAs и показали, в частности, что радиационное время жизни экситона в присутствии двойника возрастает. Работа [4] посвящена локализации экситона на плоском дефекте другого типа, когда существенно встроенное электрическое поле. Оно соответствует двойному слою и, следовательно, скачку потенциала при переходе через плоскость дефекта. В модели [4] эффективный потенциал дефекта упаковки состоит из прямоугольного барьера и дельта-образной ямы на его краю.

Основное состояние локализованного экситона найдено прямым вариационным методом, причем дырка считается жестко локализованной на плоскости дефекта (длина локализации равна нулю). В такой асимметричной системе экситон обладает большим дипольным моментом вдоль нормали к плоскости дефекта [5].

Особый интерес могут представить плоские дефекты с локализованными на них экситонами для исследования коллективных эффектов в экситонном газе. Коррелированная на макроскопических масштабах фаза в экситонной системе, аналогичная конденсату Бозе–Эйнштейна, изучается довольно давно (см. [6–11]). Обычно экспериментируют с двойными или широкими одинарными квантовыми ямами, в плоскости которых создаются электростатические ловушки (*traps*) для экситонов. В случае плоских дефектов возможно (как будет показано) существование более одного уровня поперечного квантования центра масс экситона. Это ставит интересный с общезначимой точки зрения вопрос о сосуществовании нескольких компонент конденсата.

Нам представляется интересным получить аналитическое описание экситона, локализованного на плоскости короткодействующего дефекта в рамках простой модели, позволяющей качественно выяснить зависимость характерных параметров связанного экситона (в том числе и времени жизни) от амплитуды потенциала взаимодействия с дефектом. Этому посвящена предлагаемая работа.

Пусть электрон и дырка взаимодействуют с плоским дефектом, расположенным при  $z = 0$  как

<sup>1)</sup>e-mail: mahmood@isp.nsc.ru; chaplik@isp.nsc.ru

с короткодействующим центром. Это взаимодействие моделируется дельта-образными потенциалами  $V_{1,2}\delta(z_{1,2})$ , где индексы 1 и 2 относятся к электрону и дырке соответственно. Постоянные  $V_1, V_2$  могут иметь любые знаки, но нас, естественно, будет интересовать случай, когда хотя бы одна из этих величин соответствует притяжению. Таким образом, исследуется вопрос об экситоне, локализованном на плоском дефекте.

Полная потенциальная энергия системы имеет вид

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + V_1(z_1) + V_2(z_2), \quad (1)$$

где  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость. Перейдя в двухчастичном уравнении Шредингера к координатам  $\mathbf{R}$  – центр масс и  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ , получим ( $\hbar = 1$ ):

$$\left[ -\frac{1}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{1}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} - \frac{e^2}{\varepsilon r} + V_1\delta\left(Z + \frac{m_2}{M}z\right) + V_2\delta\left(Z - \frac{m_1}{M}z\right) \right] \Psi = E\Psi. \quad (2)$$

Здесь  $M$  и  $\mu$  – полная масса экситона и приведенная масса электрона и дырки соответственно. Разложим искомое решение уравнения (2) по функциям свободного экситона и учтем, что импульс центра масс вдоль плоскости дефекта  $\mathbf{P}_{\parallel}$  сохраняется:

$$\Psi_{\mathbf{P}_{\parallel}}(Z, \mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{P}_{\parallel}\mathbf{R}_{\parallel}}}{\sqrt{S}} \sum_n C_n(Z)\varphi_n(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где  $\varphi_n(\mathbf{r})$  – волновая функция внутреннего движения экситона для  $n$ -го уровня энергии  $\varepsilon_n$ ,  $\mathbf{R}_{\parallel}$  – проекция  $\mathbf{R}$  на плоскость дефекта,  $Z$  – расстояние от дефектной плоскости до центра масс экситона,  $S$  – площадь системы в сечении, перпендикулярном оси  $z$ .

Дальнейшее вполне аналогично адиабатическому приближению в теории молекул (в данном случае двухатомных). Функции  $\varphi_n(\mathbf{r})$  соответствуют “быстрой” подсистеме, термы которой (аналог электронных термов молекулы) даются величинами  $\varepsilon_n$  – уровнями энергии внутреннего движения в экситоне. Роль ядерных волновых функций играют величины  $C_n(Z)$ , описывающие движение центра масс экситона. Особенность рассматриваемой нами ситуации состоит в том, что в отличие от обычных молекул функции  $\varphi_n(\mathbf{r})$  не зависят (параметрически) от “ядерной координаты”, т.е. от  $Z$ . Связь между быстрой и медленной подсистемами здесь реализуется только через взаимодействие электрона и дырки с

дефектом и определяется параметрами  $V_1, V_2$ . Матричный элемент этого взаимодействия  $U_{nn'}(Z)$  имеет вид:

$$U_{nn'}(Z) = \frac{M}{m_2}V_1\Phi_{nn'}\left(-\frac{M}{m_2}Z\right) + \frac{M}{m_1}V_2\Phi_{nn'}\left(\frac{M}{m_1}Z\right), \quad (4)$$

где  $\Phi_{nn'}(Z) = \int \varphi_{n'}^*(\boldsymbol{\rho}, Z)\varphi_n(\boldsymbol{\rho}, Z)d\boldsymbol{\rho}$ ,  $\boldsymbol{\rho}$  – проекция вектора относительного положения электрона и дырки на плоскость дефекта. Обычным путем получаем систему уравнений для функций  $C_n(Z)$ :

$$\frac{1}{2M}\frac{d^2C_n(Z)}{dZ^2} - \left(\frac{\mathbf{P}_{\parallel}^2}{2M} + \varepsilon_n - E\right)C_n(Z) = \sum_{n'} C_{n'}(Z)U_{nn'}(Z). \quad (5)$$

Исходные термы быстрой подсистемы “плоские”, т.е. не зависят от  $Z$  и равны просто  $\varepsilon_n + \frac{\mathbf{P}_{\parallel}^2}{2M}$ . Зависимость от  $Z$  потенциала, в котором движется центр масс экситона, дается диагональными элементами  $U_{nn}$ . Недиагональные элементы этой матрицы ответственны за неадиабатические переходы  $n \rightarrow n'$ , т.е. за связь движения экситона как целого с его внутренним движением.

Таким образом, вопрос о существовании связанных состояний экситона на плоском дефекте становится вполне аналогичным вопросу о существовании устойчивой молекулы в том или ином электронном состоянии. Конкретней: в зависимости от вида потенциала  $U_{nn}(Z)$  (и, разумеется, от параметров  $V_1, V_2$ ) в нем может существовать или не существовать уровень (уровни) энергии, отвечающие локализованным состояниям экситона. Адиабатическое приближение требует, чтобы частота внутреннего движения экситона, т.е. (деленный на  $\hbar$ ) эффективный ридберг  $\mu e^4/\varepsilon^2$ , была много больше частоты колебаний центра масс в потенциальной яме  $U_{nn}(Z)$ . Приведем для примера этот потенциал, соответствующий основному состоянию экситона в водородоподобной модели. Будем считать, что дефект притягивает лишь одну частицу, например, с массой  $m_1$  и не взаимодействует с другой. Простое вычисление дает:

$$U_{1s1s}(Z) = -\frac{|V_1|}{a_1}e^{-\frac{2|Z|}{a_1}}\left(\frac{1}{2} + \frac{|Z|}{a_1}\right), \quad (6)$$

где  $a_1$  – эффективный борковский радиус частицы 1. Видно, что если притягивается легкая частица, то потенциальная яма для центра масс получается более мелкой и широкой, чем в случае притяжения тяжелой, поскольку  $a_2 < a_1$ . Число уровней в яме, когда оно велико, равно

$$N = \frac{1}{2\pi} \int \sqrt{2M|U|} dZ \approx 0.3\sqrt{Ma_1|V_1|}. \quad (7)$$

Если  $N \gg 1$ , то нижние колебательные состояния можно описывать в гармоническом приближении:

$$U_{1s1s}(Z) \approx -\frac{|V_1|}{2a_1} + \frac{2|V_1|Z^2}{a_1^3}. \quad (8)$$

Частота колебаний центра масс равна при этом  $\omega = 2(|V_1|/Ma_1^3)^{1/2}$ , а условие адиабатичности требует выполнения неравенства  $\mu e^4/\varepsilon^2 \gg \omega$ . Если  $m_1 \ll M$ , то приведенная масса близка к массе легкой частицы  $m_1$ , и тогда критерий применимости адиабатического приближения принимает вид  $M/m_1 \gg \sqrt{Ma_1|V_1|}$ , т.е. отношение масс дырки и электрона должно быть существенно больше числа связанных состояний экситона на дефекте.

Если число уровней в яме не велико (например, всего один), то вместо  $\omega$  надо написать  $|V_1|/a_1$ . Это дает условие адиабатичности в виде  $\mu e^4/\varepsilon^2 \gg |V_1|/a_1$ , что эквивалентно  $|V_1| \ll e^2/\varepsilon$ . Интересно отметить (см. уравнение (7)), что при заданной амплитуде потенциала притяжения большее число уровней возникает, если притягивается электрон (более легкая частица, так как  $a_1 > a_2$ ).

На рисунке 1 приведен график потенциала  $U_{nn}(Z)$  для уравнения (6) и численно найденное положение нижнего уровня для  $m_1 = 0.1m_0$ . Значения использованных в расчете параметров приведены в подписи к рисунку. Зависимость положения нижнего уровня от  $m_1$  для тех же параметров приведена на рис. 2.

Совсем иная ситуация возникает в противоположном пределе, когда взаимодействие одной из частиц с плоским дефектом столь велико, что частота ее движения в связанном на дефекте состоянии превосходит ридберговскую частоту экситона.

Пусть притягивается тяжелая частица 2. Уровень ее энергии в потенциале  $-|V_2|\delta(z_2)$  равен  $-m_2V_2^2/2$  и существенно превышает (по модулю) величину  $\mu e^4/\varepsilon^2$ . Тогда медленной подсистемой становится внутреннее движение экситона. Оно соответствует движению частицы с анизотропной массой  $m_{xx} = m_{yy} = \mu$ ,  $m_{zz} = m_1$  в кулоновом поле заряда, который распределен в пространстве с плотностью  $e|\psi|^2$ , где  $\psi_2$  – волновая функция связанного состояния в потенциале  $-|V_2|\delta(z_2)$ :  $\psi_2 = \sqrt{m_2|V_2|} \exp(-m_2|V_2z_2|)$ . Спектр быстрой подсистемы состоит из одного дискретного уровня  $\varepsilon_0$  и непрерывного спектра  $E \geq 0$ . Поскольку предполагается выполненным условие адиабатичности ( $|\varepsilon_0| \gg \mu e^4/\varepsilon^2$ ), то в системе (5) можно оставить лишь одно уравнение на функцию  $\varphi(\rho, z_1)$ , описывающую

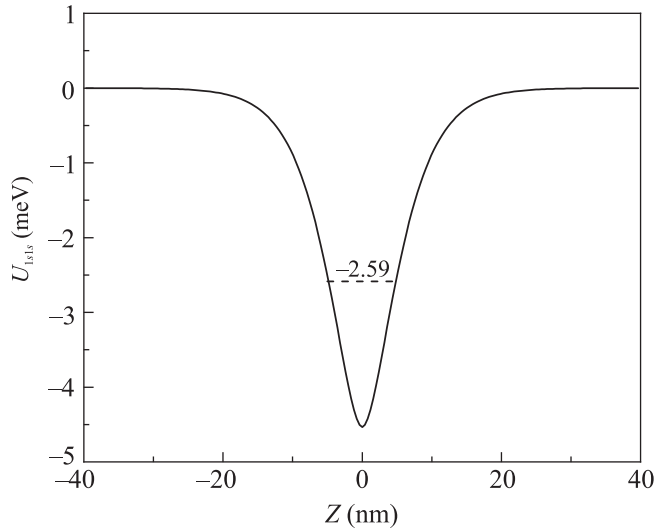


Рис. 1. График потенциала  $U_{nn}(Z)$  для уравнения (6) и численно найденное положение нижнего уровня для  $|V_1| = 60$  мэВ·нм,  $\varepsilon = 12.5$ ,  $m_1 = 0.1m_0$  ( $m_0$  – масса электрона)

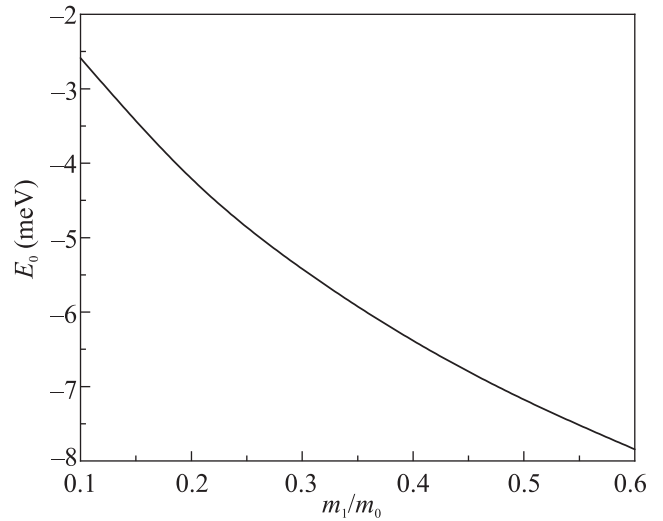


Рис. 2. Зависимость положения нижнего уровня от  $m_1$ . Параметры  $V_1, \varepsilon$  – те же, что и на рис. 1

относительное движение электрона и дырки в усредненном потенциале:

$$\bar{U}(\rho, z_1) = -\frac{e^2}{\varepsilon} m_2 |V_2| \int \frac{e^{-2m_2|V_2z_2|}}{\sqrt{\rho^2 + (z_1 - z_2)^2}} dz_2. \quad (9)$$

Это уравнение имеет вид:

$$-\frac{1}{2\mu} \Delta_\rho \varphi - \frac{1}{2m_1} \frac{d^2\varphi}{dz_1^2} + \left[ \bar{U}(\rho, z_1) + \frac{\mathbf{P}_\parallel^2}{2M} \right] \varphi = E\varphi, \quad (10)$$

и описывает движение частицы с анизотропной массой в поле заряженной нити с экспоненциально спа-

дающей от середины к краям линейной плотностью заряда  $\kappa(z) = m_2|V_2|\exp(-2m_2|V_2z|)$ . Если размер локализации дырки много меньше эффективного борновского радиуса электрона, т.е.  $m_2|V_2|a_1 \gg 1$ , то электрон движется в основном на больших расстояниях от дырки, на которых поле распределенного заряда можно представить разложением по мультиполям. Дипольный момент, очевидно, исчезает, а квадрупольный дает поправку, аналогичную поправке на несферичность атомного ядра. Квадрупольный момент локализованной дырки с волновой функцией  $\psi_2$  имеет вид:

$$D_{\alpha,\beta} = 0, \text{ при } \alpha \neq \beta; \\ D_{xx} = D_{yy} = -\frac{e}{4m_2^2V_2^2}, \quad D_{zz} = \frac{e}{2m_2^2V_2^2}. \quad (11)$$

Поправка к потенциалу точечного заряда равна

$$\delta U_Q = -\frac{3e^2}{2\epsilon m_2^2 V_2^2 r^3} \left(1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta\right), \quad (12)$$

где  $\theta$  – полярный угол сферической системы координат с осью  $z$ , нормальной к плоскости дефекта.

Возмущение (12) понижает симметрию экситона со сферической до цилиндрической, что снимает вырождение уровней в водородоподобной модели экситона по орбитальному числу  $l$  (магнитное число  $m$  сохраняется). В первом приближении по  $\delta U_Q$   $s$ -состояния не смещаются. Например, уровень с главным квантовым числом 2 расщепляется на три подуровня  $2s_0$ ,  $2p_0$  и  $2p_{\pm 1}$ :  $\delta E_{2s_0} = 0$ ,  $\delta E_{2p_0} = -e^2/40a_1^3V_2^2m_1^2$ ,  $\delta E_{2p_{\pm 1}} = e^2/80a_1^3V_2^2m_1^2$ . Здесь использовано приближение  $m_2 \gg m_1$ , когда  $\mu \approx m_1$ .

Таким образом, линия основного перехода в экситоне  $1s - 2p$  становится дублетом  $1s - 2p_0$ ,  $1s - 2p_{\pm 1}$ .

Имеется еще возмущение, связанное с анизотропией массы, которое мало по параметру  $m_1/m_2$  и дается оператором  $-\hat{p}_z^2/2m_2$ . Легко видеть из теоремы вириала, что это возмущение приводит к общему отрицательному сдвигу всех вырожденных состояний каждого уровня экситона на величину  $(-1/3)(m_1/m_2)|\epsilon_n|$  и, следовательно, не дает вклада в расщепление уровня. При этом центр тяжести линии перехода  $1s - 2p$  смещается (частота увеличивается) на  $(1/3)(m_1/m_2)(\epsilon_2 - \epsilon_1)$ .

Обсудим теперь влияние локализации на радиационное время жизни экситона. Вероятность перехода с образованием (или рекомбинацией) экситона определяется безразмерным параметром  $\mathcal{P} = \left| \int \Psi(\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{R}) d\mathbf{R} \right|^2$ . Поскольку двухчастичная волновая функция пропорциональна  $\exp(i\mathbf{P}_{\parallel} \mathbf{R}_{\parallel})$ , то интегрирование по  $\mathbf{R}_{\parallel}$  дает  $\delta(\mathbf{P}_{\parallel})$ : экситон рождается

с нулевым продольным импульсом. В рассмотренной выше осцилляторной модели в пределе  $R_y^* \gg \omega$ , т.е.  $(M/m_1)e^2/\epsilon \gg |V_1|$ , параметр  $\mathcal{P}$  для основного осцилляторного уровня равен (на единицу площади дефекта)

$$\mathcal{P}_n = |\varphi_n(0)|^2 (a_1^3/M|V_1|)^{1/4}. \quad (13)$$

Индекс  $n$  указывает на образование экситона в  $n$ -м состоянии по внутреннему движению. Видно, что вероятность перехода уменьшается, а радиационное время жизни растет с усилением локализации пропорционально  $|V_1|^{1/4}$ .

В случае сильно локализованной дырки ( $|V_2| \gg e^2/\epsilon$ ) имеем:  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_n(\boldsymbol{\rho}, z_1)\psi_2(z_2) \times \exp(i\mathbf{P}_{\parallel} \mathbf{R}_{\parallel})/\sqrt{S}$ . В водородоподобной модели для основного состояния  $n = 1$  получается

$$\mathcal{P}_1 = \frac{m_2|V_2|}{a_1^3(1/a_1 + m_2|V_2|)^2}. \quad (14)$$

Поскольку условие сильной локализации дырки требует выполнения неравенства  $m_2|V_2|a_1 \gg 1$ , то время жизни экситона растет пропорционально  $|V_2|$ .

Таким образом, в обеих рассмотренных модельных ситуациях локализация приводит к увеличению времени излучательной рекомбинации экситона, что согласуется с численными расчетами из первых принципов, проведенными в работе [3].

Авторы благодарят М. М. Глазова за возможность познакомиться с работой [4] до опубликования.

1. О. В. Волков, С. В. Товстоног, И. В. Кукушкин, К. фон Клитцинг, К. Эберл, Письма в ЖЭТФ **70**, 588 (1999).
2. П. С. Кошнев, Б. Я. Мельцер, И. Л. Уральцев, Ал. Л. Эфрос, Д. Р. Яковлев, Письма в ЖЭТФ **42**, 325 (1985).
3. K. Shimamura, Z. Yuan, F. Shimojo, and A. Nakano, Appl. Phys. Lett. **103**, 022105 (2013).
4. M. V. Durnev, M. M. Glazov, X. Linpeng, M. L. K. Viitaniemi, B. Matthews, S. R. Spurgeon, P. V. Sushko, A. D. Wieck, A. Ludwig, and K.-M. C. Fu, Phys. Rev. B **101**, 125420 (2020).
5. T. Karin, X. Linpeng, M. M. Glazov, M. V. Durnev, E. L. Ivchenko, S. Harvey, A. K. Rai, A. Ludwig, A. D. Wieck, and K.-M. C. Fu, Phys. Rev. B **94**, 041201(R) (2016).
6. L. V. Butov, A. C. Gossard, and D. S. Chemla, Nature **418**, 751 (2002).
7. А. В. Горбунов, В. Б. Тимофеев, Письма в ЖЭТФ **80**, 210 (2004).

8. А. В. Горбунов, В. Б. Тимофеев, Письма в ЖЭТФ **83**, 178 (2006).
9. А. В. Горбунов, В. Б. Тимофеев, Письма в ЖЭТФ **87**, 797 (2008).
10. A. A. Hish, T. T. Novitskaya, L. V. Butov, M. Hanson, and A. A. Gossard, *Science* **321**, 229 (2008).
11. G. Grosso, J. Graves, A. T. Hammak, A. A. Hish, L. V. Butov, M. Hanson, and A. C. Gossard, *Nature Photon.* **3**, 577 (2009).