

ДВУМЕРНЫЕ ЭКСИТОНЫ И ВОДОРОДОПОДОБНЫЕ ПРИМЕСИ НА ИСКРИВЛЕННОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Л.И.Магарилл, А.В.Чаплик

Институт физики полупроводников Сибирского отделения РАН
630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 18 июня 1998 г.

Найдены сдвиги и расщепления двумерного донора и экситона Ванье-Мотта на искривленной поверхности. Оценена тонкая структура экситонной линии люминесценции, обусловленная движением системы как целого в потенциале геометрического происхождения. Относительный вклад поправок на кривизну от кулоновского потенциала и от оператора кинетической энергии существенно зависит от геометрической формы поверхности.

PACS: 73.20.Dx

1. Свойства двумерных (2D) неплоских электронных систем привлекают внимание исследователей уже в течение ряда лет [1–6]. До самого последнего времени соответствующими объектами были либо макроскопические образцы с радиусом кривизны R порядка 0.1 см 2D (электронный газ на изогнутой подложке [7]), либо углеродные нанотрубки с радиусом, на шесть порядков меньшим. Этот большой интервал кривизны удается практически непрерывно заполнять благодаря оригинальной методике "сворачивания" первоначально напряженных слоев GaAs/InAs, предложенной в [8]. В частности, вполне реальными становятся объекты, радиус кривизны которых сопоставим (или всего на порядок превосходит) с эффективным боровским радиусом электрона в объеме полупроводника a_B^* . В [8] также показано, что внешняя нагрузка может деформировать трубку в эллиптический цилиндр.

Данная работа посвящена расчетам энергетического спектра экситонов и водородоподобных доноров, помещенных в изогнутую квантовую яму, толщина которой меньше a_B^* , то есть реализуется 2D предел. Будет показано, что кривизна поверхности, по которой движутся частицы, приводит к сдвигу и расщеплению уровней соответствующей плоской системы, причем относительная роль кулоновского взаимодействия и кривизны существенно зависит от геометрической формы поверхности при фиксированном отношении a_B^*/R .

2. Начнем с рассмотрения экситона на поверхности эллиптического цилиндра. Реально речь идет о пленке малой, но конечной толщины, свернутой в цилиндр. Как показано в [9], переход от 3D к 2D волновому уравнению приводит в этих условиях к возникновению адиабатического потенциала чисто геометрического происхождения (быстрым считается движение поперек пленки, то есть размерное квантование дает наибольший масштаб расстояния между уровнями энергии). Этот потенциал для цилиндрической пленки постоянной ширины имеет вид [9]

$$U_g(v) = \frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \frac{\zeta \varepsilon^4 \sin^2(2v)}{\xi(v)^3}, \quad (1)$$

где m^* – эффективная масса, a и ε – большая полуось и эксцентриситет эллипса, v – эллиптическая координата ($0 < v < 2\pi$), $\xi(v) = 1 - \varepsilon^2 \cos v^2$, $\zeta = (1 + 4\pi^2/3)/16$. Будем предполагать, что эффективный боровский радиус мал по сравнению с обеими полуосями эллипса. Тогда удобно перейти к переменным z (вдоль оси цилиндра) и s (длина эллиптической дуги). В этих переменных кулоновское взаимодействие электрона и дырки с точностью до первой поправки на кривизну записывается как

$$U_{eh} = U_{eh}^{(0)} + U_{eh}^{(1)}, \quad (2)$$

$$U_{eh}^{(0)} = -\frac{\bar{e}^2}{\rho}, \quad U_{eh}^{(1)} = -\frac{\bar{e}^2(1 - \varepsilon^2)s^4}{24\rho^3(\xi(V))^3 a^2} \equiv -\frac{\bar{e}^2 s^4}{24\rho^3 R(V)^2}, \quad (3)$$

где

$$\rho = \sqrt{z^2 + s^2}, \quad z = z_e - z_h, \quad s = s_e - s_h, \quad s_{e,h} = \int_0^{v_{e,h}} dt \sqrt{\xi(t)},$$

$R(V)$ – локальный радиус кривизны, $V = (m_e v_e + m_h v_h)/M$, $M = m_e + m_h$, $m_{e,h}$ – эффективные массы электрона и дырки, \bar{e}^2 – квадрат заряда электрона с учетом фоновой диэлектрической постоянной. После преобразования операторов кинетической энергии электрона и дырки к переменным центра масс S, Z и относительного движения s, z , а также преобразования искомой функции $\psi = \chi/(\xi(v_e)\xi(v_h))^{1/4}$ получаем для гамильтониана экситона

$$H = H^{(0)} + H^{(1)},$$

где $H^{(0)}$ – гамильтониан плоской системы (μ – приведенная масса):

$$H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{\partial^2}{\partial S^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right] + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{\bar{e}^2}{(s^2 + z^2)^{1/2}}, \quad (4)$$

а $H^{(1)}$ учитывает кривизну:

$$H^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\left(\zeta - \frac{5}{16} \right) \frac{\varepsilon^4 \sin^2(2V)}{\xi(V)^3} + \frac{\varepsilon^2 \cos(2V)}{2\xi(V)^2} \right] - \frac{\bar{e}^2 s^4}{24(s^2 + z^2)^{3/2} R(V)^2}. \quad (5)$$

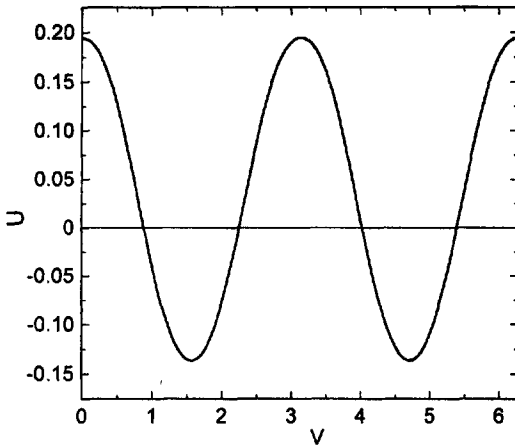
В возмущении $H^{(1)}$ мы пренебрегли членами порядка $(a_B^*/a)^4$. В формуле (5) переменная V должна быть выражена через S ; в главном порядке по a_B^*/a эта связь имеет вид $S = \int_0^V dt \sqrt{\xi(t)}$. Как видно из последнего слагаемого в (5), разделение относительного движения и движения центра масс экситона на искривленной поверхности невозможно.

В простейшем случае кругового цилиндра ($\varepsilon = 0$, $R(V) \equiv a$) геометрический потенциал исчезает. Сдвиги и расщепления уровней в этом случае возникают только благодаря изменению кулоновского взаимодействия. Для основного уровня получаем:

$$\Delta E_1 = -\frac{\hbar^2}{128\mu a^2}. \quad (6)$$

Для первого возбужденного (триплетного) уровня

$$\Delta E_2^{(1)} = -\frac{7\hbar^2}{128\mu a^2}, \quad \Delta E_2^{(2)} = -\frac{\hbar^2}{64\mu a^2}, \quad \Delta E_2^{(3)} = -\frac{5\hbar^2}{64\mu a^2}. \quad (7)$$



Адиабатический потенциал центра масс экситона; $\epsilon = 1/2$, $U(V)$ в единицах $\hbar^2/2\mu a^2$

Заметим, что первая поправка на кривизну не содержит заряда электрона и, следовательно, не зависит от эффективной диэлектрической проницаемости.

В случае эллиптического цилиндра экситон как целое движется в потенциале, зависящем от V . При условии $a_B^* \ll a$ это движение является медленным по сравнению с внутренним движением в экситоне. Усреднением U_{eh} по быстрому движению можно получить адиабатический потенциал для движения центра масс $U(V)$. График этого потенциала для основного состояния экситона при $\epsilon = 1/2$ приведен на рисунке. Как видно из формул (6), (7), из-за малых численных коэффициентов в выражении для ΔE кулоновский вклад в этом случае пренебрежимо мал. Он становится существенным для $\epsilon \leq 0.3$. Наиболее глубокие минимумы при любом ϵ соответствуют концам малой полуоси эллипса, то есть областям наименьшей кривизны. Таким образом, следует ожидать локализации экситонов в этих областях и пространственно неоднородной экситонной люминесценции. Нетрудно оценить, что число уровней энергии, соответствующих движению центра масс экситона в упомянутых минимумах, порядка $\sqrt{m_h/m_e}$. Поэтому для экситона тяжелой дырки нижние уровни описываются осцилляторным приближением. Соответствующая частота для основного состояния экситона дается выражением

$$\omega = \frac{\hbar}{a^2 \sqrt{2m_e m_h}} \left[\frac{2\pi^2}{3} \epsilon^4 - \frac{125}{32} \epsilon^4 + \frac{61}{32} \epsilon^2 \right]^{1/2}, \quad (8)$$

и для $\epsilon = 1/2$ $\omega \approx 0.567 \hbar/a^2 \sqrt{m_e m_h}$. Таким образом, экситонная линия люминесценции сопровождается тонкой структурой масштаба $\omega \sim \omega_B \sqrt{m_e/m_h} (a_B^*/a)^2$, где ω_B - боровская частота экситона.

3. Перейдем теперь к рассмотрению донорных состояний на искривленной поверхности. По-прежнему считаем боровский радиус малым по сравнению с характерными радиусами кривизны. В малой окрестности произвольной точки гладкую поверхность можно аппроксимировать параболоидом $z = -(x^2/2A + y^2/2B)$. Донор считаем расположенным в вершине параболоида. Для получения эффективного 2D гамильтониана снова рассматриваем пленку малой постоянной ширины, изогнутую в форме параболоида. Используя параболоидальные координаты, можно показать,

что адиабатический потенциал U_{ad} , возникающий при переходе к двум измерениям, имеет порядок $(\hbar^2/m^*)(s^2/A^4, s^2/B^4)$, где s – расстояние по поверхности от вершин параболоида. Поскольку существенные s порядка a_B^* , то вклад U_{ad} оказывается малым по сравнению с поправками, происходящими от оператора кинетической энергии и кулоновского потенциала. Эти поправки удобно вычислять, перейдя к переменным s, ϕ , где ϕ – азимутальный угол, а s отсчитывается по кривой, являющейся сечением параболоида плоскостью $\phi = \text{const}$. После довольно громоздких ¹⁾ вычислений получаем для основного уровня донора

$$\Delta E_1 = \frac{\hbar^2}{128m^*} \left[31 \left(\frac{1}{A^2} + \frac{1}{B^2} \right) - \frac{22}{AB} \right], \quad (9)$$

для первого возбужденного уровня

$$\begin{aligned} \Delta E_2^{(1)} &= \frac{\hbar^2}{128m^*} \left[25 \left(\frac{1}{A^2} + \frac{1}{B^2} \right) - \frac{26}{AB} \right]; \\ \Delta E_2^{(2,3)} &= \frac{\hbar^2}{128m^*} \left[26 \left(\frac{1}{A^2} + \frac{1}{B^2} \right) - \frac{4}{AB} \pm \left(\frac{1}{A^2} - \frac{1}{B^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Отметим, что отрицательные сдвиги от кулоновского взаимодействия оказываются численно малыми по сравнению с положительными вкладами от геометрического потенциала. Можно было бы ожидать, что предельные значения формул (9), (10) при $A = B$ или $B \rightarrow \infty$ дадут поправки к донорным уровням, соответственно, на сфере или цилиндре. Это, однако, не так. Расчеты показывают, что для сферы радиуса A

$$\Delta E_1 = -\frac{9\hbar^2}{48m^*A^2}; \quad (11)$$

$$\Delta E_2^{(1)} = \frac{11\hbar^2}{3m^*A^2}; \quad \Delta E_2^{(2,3)} = -\frac{\hbar^2}{8m^*A^2}, \quad (12)$$

а для эллиптического цилиндра с большой полуосью A

$$\Delta E_1 = U_0(v_0) - \frac{\hbar^2}{128m^*A^2}; \quad (13)$$

$$\Delta E_2^{(1)} = U_0(v_0) - \frac{7\hbar^2}{128m^*A^2}; \quad \Delta E_2^{(2,3)} = U_0(v_0) + \frac{\hbar^2}{64m^*A^2}(-3 \pm 2), \quad (14)$$

где

$$U_0(v_0) = \frac{\hbar^2}{2m^*R(v_0)^2} \frac{\varepsilon^2}{1 - \varepsilon^2} \left[\left(\zeta - \frac{1}{16} \right) \sin^2(2v_0) + \frac{\cos(2v_0) - \varepsilon^2 \cos^2 v_0}{2} \right]$$

(v_0 – эллиптическая координата донора). Таким образом, форма поверхности в целом сказывается уже начиная с членов порядка $(a_B^*/A)^2$.

Работа была выполнена при поддержке РФФИ (грант # 96-02-19058), программы "Физика твердотельных наноструктур", а также гранта INTAS (# 95-0657).

¹⁾ Для применения формул теории возмущений, когда в качестве нулевого приближения используются волновые функции плоской двумерной кулоновской задачи необходимо придать оператору возмущений эрмитовый вид. Это достигается преобразованием искомого функции, которое мы не выписываем ввиду его громоздкости.

-
1. В.М.Набутовский, Д.А.Романов, ЖЭТФ **90**, 232 (1986).
 2. H.Aoki and H.Suezawa, Phys. Rev. **A46**, R1163 (1992).
 3. C.L.Foden, M.L.Leadbeater, J.H.Burroughes, and M.Pepper, J.Phys.Cond.Matt. **6**, L127 (1994).
 4. В.В.Роткин, Р.А.Сулис, ФТТ **36**, 3569 (1994).
 5. M.L.Leadbeater, C.L.Foden, J.H.Burroughes et al., Phys. Rev. **B52**, 8629 (1995).
 6. Л.И.Магарилл, Д.А.Романов, А.В.Чаплик, Письма в ЖЭТФ **64**, 421 (1996); ЖЭТФ **113**, 1411 (1998).
 7. S.Böhm, A.Lorke, J.P.Kotthaus, to be published; S.Böhm, *Diploma Arbeit*, Ludwig Maximilian Universität, München, (1997).
 8. V.Ya.Prinz, V.A.Seleznev, V.A.Samoylov, and A.K.Gutakovsky, Microelectronic Engineering **30**, 439 (1996); V.Ya.Prinz, V.A.Seleznev, A.K.Gutakovsky, 24th Intern. Conf. on Semiconductor Physics, Jerusalem, Israel, 1998, Abstracts.
 9. Л.И.Магарилл, Д.А.Романов, А.В.Чаплик, ЖЭТФ **110**, 669 (1996).