

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. А.Ф. ИОФФЕ
Российской академии наук

на правах рукописи

Семина Марина Александровна

ТЕОРИЯ КУЛОНОВСКИХ КОМПЛЕКСОВ
В ПОЛУПРОВОДНИКАХ И НАНОСИСТЕМАХ

Специальность:

01.04.02 - теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург

2019

Оглавление

Введение	5
1 Общий метод расчета состояний электрон-дырочных комплексов в наноструктурах	14
1.1 Кулоновские комплексы в полупроводниках (обзор)	14
1.2 Экситоны и трионы в квазиодномерных системах	20
1.2.1 Энергия связи экситона в квантовой проволоке	22
1.2.2 Пробные функции и численные результаты для трионов	27
1.2.3 Оценка точности вариационного расчета	34
1.2.4 Адиабатическое приближение. Возбужденные состояния X^+ - триона.	35
1.3 Экситоны в квазидвумерных структурах с пространственным разделением носителей заряда	39
1.4 Электрон-дырочные комплексы, локализованные в наноструктурах	50
1.4.1 Гамильтониан электрон-дырочного комплекса	50
1.4.2 Предельные случаи	54
1.4.3 Выбор пробной функции	58
1.4.4 Энергия связи экситона, X^+ и X^- -трионов, локализованных в плоскости квантовой ямы на неоднородности ее интерфейса	60

1.4.5	Двумерные X^+ и X^- -трионы, локализованные в параболическом потенциале неоднородности	70
1.5	Краткие итоги	77
2	Связанные состояния в сложной валентной зоне и эффект Зеемана на дырках	80
2.1	Сложная структура валентной зоны полупроводников III-V и II-VI (обзор)	80
2.2	Энергия связи акцепторной примеси в наноструктурах	82
2.2.1	Постановка задачи	82
2.2.2	Модель	84
2.2.3	Энергия связи акцептора в квантовой яме	94
2.2.4	Энергия связи акцептора в квантовой проволоке	99
2.3	Фактор Ланд \acute{e} локализованной дырки	101
2.3.1	Постановка задачи	101
2.3.2	Модель и методы	103
2.3.3	Результаты и обсуждение	106
2.4	Краткие итоги	121
3	Кулоновские комплексы в эпитаксиальных и коллоидных квантовых точках	123
3.1	Введение. Особенности эпитаксиальных и коллоидных квантовых точек II-VI	123
3.2	Основное состояние дырок в квантовых точках с гладким профилем потенциала	126
3.2.1	Однозонное приближение	126

3.2.2	Сферически-симметричная модель для зоны Γ_8	129
3.3	Влияние одноосной анизотропии системы	131
3.4	Эффект Зеемана	136
3.4.1	Сопоставление теории и экспериментов	140
3.5	Биэкситон в квантовых точках с различным гетеропотенциалом	146
3.5.1	Одночастичные волновые функции электрона и дырки	149
3.5.2	Энергия связи экситона	152
3.5.3	Энергия связи биэкситона	155
3.6	Моделирование экситонных состояний в квантовых точках CdSe и эксперимент	161
3.6.1	Постановка задачи	161
3.6.2	Эксперимент	162
3.6.3	Моделирование и анализ результатов	163
3.7	Краткие итоги	167
4	Экситоны и трионы в двумерных кристаллах MX_2	170
4.1	Введение	170
4.2	Серия экситонных состояний в гетероструктурах с монослоями MX_2	172
4.2.1	Кулоновский потенциал в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах	173
4.2.2	Экситонная серия с учетом диэлектрического контраста	175
4.2.3	Экситонная серия в двухслойных системах	179
4.3	Трионы в монослоях MX_2	185
4.3.1	Строение и энергии связи трионов	188
4.3.2	Тонкая структура энергетического спектра трионов	196
4.3.3	Трионы в двухслойных ван-дер-ваальсовых гетероструктурах	201

4.4	Оптические спектры ван-дер-ваальсовых гетроструктур и эффект Парселла на экситонах	204
4.4.1	Метод матриц переноса для расчета оптического отклика многослоев MX_2	205
4.4.2	Эффект Парселла в ван-дер-ваальсовых гетроструктурах	207
4.5	Краткие итоги	216
5	Ридберговские экситоны в объемных полупроводниковых кристаллах	218
5.1	Введение	218
5.2	Тонкая структура экситонных состояний в отсутствии внешних полей	220
5.3	Скейлинг параметров экситонных состояний	227
5.4	Эффект Штарка	236
5.5	Диссоциация экситонов под действием статического электрического поля	245
5.6	Краткие итоги	256
	Заключение	258
	Список литературы	265

Введение

Актуальность темы диссертации. Оптическая спектроскопия объемных полупроводников и наносистем является мощнейшим инструментом исследования зонной структуры кристаллов и позволяет получать ключевые сведения об элементарных возбуждениях исследуемых объектов [1]. В полупроводниках край фундаментального оптического поглощения обусловлен оптическими переходами между заполненной валентной зоной и незаполненной зоной проводимости. Электрон, перешедший под действием света в зону проводимости, освобождает состояние в валентной зоне, в результате формируется электрон-дырочная пара. Кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой приводит к возникновению связанных состояний этих квазичастиц – экситонов [2, 3, 4, 5]. Экситоны большого радиуса или экситоны Ванье-Мотта контролируют оптические свойства наиболее распространенных полупроводников, включая кристаллы III-V и II-VI [6, 7].

Экситоны большого радиуса были открыты в пионерской работе Е.Ф. Гросса и Н.А. Каррыева в кристаллах закиси меди Cu_2O [8]. В оптических спектрах экситон проявляется в виде водородоподобной серии уровней, сгущающейся к краю фундаментального поглощения. Высокое качество природных кристаллов Cu_2O и развитие экспериментальных методик оптической спектроскопии позволяет наблюдать экситонную серию вплоть до состояний с главным квантовым числом $n = 25$, размер которых достигает микрометров [9]. Такие состояния во многом аналогичны состояниям высоковозбужденных, ридберговских атомов и являются крайне перспективными как для лабораторных исследований макроскопических квантовых объектов, так и с точки зрения возможных применений [10, 11]. Экспе-

риментальные исследования тонкой структуры энергетического спектра ридберговских экситонов, а также их отклика на внешние поля [12] выводят на повестку дня задачи о построении теории таких экситонных состояний.

Эффекты кулоновского взаимодействия между носителями заряда особенно ярко проявляются в наносистемах: квантовых ямах, проволоках, точках или нанокристаллах, экстремально двумерных полупроводниках, таких как графен и монослой дихалькогенидов переходных металлов. Изучение таких систем, где движение носителей заряда ограничено по крайней мере в одном пространственном направлении вылилось в бурно развивающуюся и наиболее актуальную область современной физики полупроводников – физику структур пониженной размерности [1, 13, 14]. В частности, энергия связи экситона в двумерном пределе возрастает в четыре раза по сравнению с аналогичным объемным полупроводником [1, 15]. Более того, многочастичные комплексы, наблюдение которых в свободном состоянии в объемных материалах фактически невозможно, ярко проявляются в оптических спектрах наноструктур. Например, возможность существования трехчастичных комплексов - трионов, представляющих собой заряженные экситоны и состоящие из двух электронов и дырки (X^- -трион) или из двух дырок и одного электрона (X^+ -трион) была предсказана еще в 1958 году Лампертом [16]. Однако первые надежные экспериментальные наблюдения X^- -триона были произведены в 1992 г. на структуре с квантовыми ямами на основе CdTe [17]. Технологические прорывы последнего десятилетия сделали возможным синтез ван-дер-ваальсовых гетероструктур, где атомарно-тонкие кристаллы графена и дихалькогенидов переходных металлов, перемежающиеся слоями диэлектрика, формируют систему, где можно управлять не только энергетическим спектром и силой кулоновского взаимодействия между электронами и дырками, но и формой закона взаимодействия носителей заряда [18, 19]. Экситоны и трионы в таких системах обладают значительными энергиями связи (сотни и десятки мэВ, соответственно), причем серия экситонных состояний существенно отличается от водородоподобной [19].

Возможности квантовомеханической инженерии: создания систем с заданными параметрами и свойствами, разработка приборов оптоэлектроники на наносистемах, приводят к острой необходимости в разработке универсальных методов, позволяющих вычислять энергии связи электрон-дырочных комплексов в наносистемах, пригодных к исследованию как традиционных низкоразмерных структур: квантовых ям, проволок и нанокристаллов, так и недавно появившихся систем с экстремальной двумерностью. Подобным требованиям отвечают как вариационный подход с применением простых пробных функций с малым числом подгоночных параметров, которые бы при этом имели ясный физический смысл, так и квантовомеханические расчеты, основанные на эффективной численной диагонализации гамильтониана кулоновского комплекса.

Сказанное выше определяет актуальность темы диссертации.

Целью работы является теоретическое исследование кулоновских комплексов: нейтральных и заряженных экситонов, их строения и энергетического спектра, включая тонкую структуру энергетического спектра, а также проявлений экситонов и трионов в оптических свойствах полупроводников и полупроводниковых наносистем.

Научная новизна и практическая значимость диссертационной работы состоит в развитии вариационного метода для расчета состояний электрон-дырочных комплексов в полупроводниковых системах различной размерности, включая нульмерные, одномерные и двумерные системы; разработке теории локализации носителей заряда и эффекта Зеемана в “сложной” зоне; построении теории экситонов и трионов в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов; развитии теории эффекта Парселла на экситонах в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах; разработке теории ридберговских состояний экситонов в объемных полупроводниковых кристаллах.

Основные положения выносимые на защиту:

1. Вариационные функции, построенные на основе волновых функций электрон-дырочных комплексов, найденных в предельных случаях, где допустимо разделение переменных в уравнении Шредингера, обеспечивают высокую точность вычисления энергии связи локализованных экситонов и трионов.
2. В полупроводниках с валентной зоной Γ_8 точечной группы T_d возможна немонотонная зависимость энергии связи дырки на акцепторе от ширины квантовой ямы или радиуса квантовой проволоки.
3. Орбитальный вклад в g -фактор основного состояния локализованной дырки валентной зоны Γ_8 полупроводников с решеткой цинковой обманки существенно зависит от формы гетеропотенциала и симметрии наноструктуры. Для потенциалов, связанных преобразованием подобия, g -факторы дырки одинаковы.
4. Величина и знак энергии связи биэкситона, локализованного в квантовой точке, определяется как корреляциями между носителями заряда одного знака, так и соотношением размеров областей локализации электронов и дырок. При достаточно большом различии последних энергия связи биэкситона отрицательна, и его линия в оптическом спектре лежит выше экситонной.
5. Ослабление кулоновского взаимодействия за счет диэлектрического окружения и интерференция света в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах с монослоями дихалькогенидов переходных металлов приводят к значительному изменению относительных сил осциллятора возбужденных экситонных состояний по сравнению с двумерной водородоподобной серией.
6. В атомарно-тонких кристаллах WS_2 и WSe_2 основное состояние X^- -триона запрещено в однофотонных переходах при нормальном падении света, а воз-

бужденные состояния проявляются в спектрах в виде дублета, расщепленного за счет короткодействующей части обменного взаимодействия. В монослоях MoS_2 и MoSe_2 основное состояние X^- -триона оптически активно.

7. Модель квантовых дефектов, обусловленных сложной структурой валентной зоны, спин-орбитальным и обменным электрон-дырочным взаимодействием, которые масштабируются с главным квантовым числом n как n^{-3} , позволяет описать ридберговскую экситонную серию в объемных полупроводниках.

Апробация работы. Результаты исследований, вошедших в диссертацию, докладывались на VII – XIII Российских конференциях по физике полупроводников (Звенигород, 2005, 2015; Екатеринбург, 2007, 2017; Новосибирск – Томск, 2009; Нижний Новгород, 2011; Санкт-Петербург, 2013), международных симпозиумах “Наноструктуры: физика и технология” (Санкт-Петербург, 2005, 2013, 2016, 2017; Новосибирск, 2007; Минск, 2009; Нижний Новгород, 2012), 14ой “Международной конференции по сверхрешеткам, наноструктурам и наноприборам” (Стамбул, Турция, 2006), Российско-швейцарском семинаре “Экситоны и экситонные конденсаты к локализованным полупроводниковым системам” (Москва, 2006), 2ой международной школе по нанофотонике (Маратая, Италия, 2007), 17ой “Международной конференции по электронным свойствам двумерных систем” (Генуя, Италия, 2007), 22ой “Общей конференции отделения физики конденсированного состояний Европейского физического общества” (Рим, Италия, 2008), XII школе молодых ученых “Актуальные проблемы физики” (Звенигород, 2008), 25ой “Международной конференции по дефектам в полупроводниках” (Санкт-Петербург, 2009), Международных конференциях по физике полупроводников (Цюрих, Швейцария, 2012; Монпелье, Франция, 2018), XX международном симпозиуме “Нанофизика и нанoeлектроника” (Нижний Новгород, 2016), а также были представлены приглашенными докладами на Международной зимней школе по физике полупроводников (Зеленогорск, 2012 и 2019), Международной конференции “Метаматериалы и нанофизика” (Варадеро, Куба 2015), XIV Российской конференции по

физике полупроводников (Новосибирск, 2019), Международном семинаре “Спинтроника и долиотроника в двумерных материалах” (Тэджон, Республика Корея, 2019), Международной конференции “Новые направления в квантовом свете и нанофизике” (Маратая, Италия, 2019), 1-3 Международных семинарах “Ридберговские экситоны в полупроводниках” (Санкт-Петербург 2017; Орхус, Дания, 2018; Дарем, Великобритания, 2019), XXI Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике. Результаты исследований представлялись и обсуждались также на семинарах ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербургского государственного университета, Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, Физического института им. Лебедева, Объединённого института высоких температур, Университета ИТМО, университетов Бильбао (Испания), Дортмунда (Германия), Клермон-Феррана (Франция). Основное содержание диссертации опубликовано в 27 научных статьях.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из Введения, шести глав, Заключения и списка литературы. Она содержит 310 страниц текста, включая 70 рисунков и 9 таблиц. Список цитируемой литературы содержит 402 наименования.

Первая глава диссертационной работы посвящена описанию предложенного автором общего метода расчета состояний электрон-дырочных комплексов в наноструктурах. Глава содержит краткий обзор литературы по кулоновским комплексам в полупроводниках и полупроводниковых наносистемах. Затем изложен вариационный метод для расчета энергий экситонов и трионов в квазиодномерных системах. Приведены результаты исследования экситонных состояний в квазидвумерных системах с пространственным разделением зарядов. Далее развивается вариационный метод для описания электрон-дырочных комплексов, локализованных в наноструктурах: на основе анализа предельных случаев предлагаются и апробируются пробные функции, обеспечивающие приемлемую точность во

всем диапазоне параметров локализации. Точность вариационных расчетов подтверждается для ряда ситуаций прямой диагонализацией экситонного и трионного гамильтонианов, а также сопоставлением результатов вариационного метода с другими приближенными методами, в частности, с результатами адиабатического приближения. Приведенные оценки показывают, что наблюдаемое в экспериментах увеличение энергий связи экситонов и трионов по сравнению с расчетами для идеализированных квазиодномерных и двумерных систем может быть связано с локализацией кулоновских комплексов на неоднородностях структур.

В наиболее распространенных полупроводниках III-V и II-VI валентная зона является сложной: дисперсия дырок состоит из близких по энергии веток, вырожденных в центре зоны Бриллюэна. Во второй главе разрабатывается теория локализации дырок в рамках гамильтониана Латтинжера. На примере простейшего кулоновского комплекса – акцепторной примеси – показано, что энергия связи может меняться немонотонно при переходе от объемной системы к двумерной или одномерной. Эффект обусловлен конкуренцией усиления кулоновского взаимодействия и уменьшения эффективной массы, сопровождающих понижение размерности системы. Развитый метод расчета локализованных дырочных состояний обобщен для учета внешнего магнитного поля. Приведены результаты расчета g -факторов локализованных дырок в различных наноструктурах. Получены аналитические выражения для зеемановского расщепления дырок в квазиодномерных системах.

Общие методы расчета кулоновских комплексов, разработанные в первых двух главах диссертации, применены в главе 3 к полупроводниковым квантовым точкам на основе материалов II-VI. Такие объекты активно исследуются экспериментально, отличаются значительными кулоновскими эффектами и плавным профилем гетеропотенциала, а энергетический спектр и магнитооптические свойства экситонов, трионов и биэкситонов в них обладают рядом особенностей, требующих теоретического описания. Приводится детальное исследование размерного кванто-

вания дырок в плавном потенциале и анализируются наиболее адекватные упрощенные модели, позволяющие описать как энергии связи, так и волновые функции носителей заряда, анализируется роль анизотропии системы. Результаты расчетов эффекта Зеемана на дырках в таких системах сопоставляются с данными экспериментов, выполненных в Техническом университете Дортмунда (Германия). Приводятся результаты моделирования экситонных состояний в квантовых точках CdSe, позволяющие описать особенности переноса энергии в массивах таких точек, наблюдавшиеся в ФТИ им. А.Ф. Иоффе. Также в главе развивается теория биэкситонных состояний, которые важны для описания радиационных каскадов в квантовых точках, обладающих перспективами для применений для генерации пар запутанных фотонов.

Четвертая глава диссертации посвящена теории нейтральных и заряженных экситонов в еще одной материальной системе, ставшей чрезвычайно популярной в последнее время – ван-дер-ваальсовых гетероструктурах на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов. В таких системах, с одной стороны, диэлектрический контраст приводит к заметному отклонению энергии кулоновского взаимодействия от закона $1/r$, где r – расстояние между частицами, а наличие двух долин в энергетическом спектре монослоя и значительное спин-орбитальное взаимодействие – к богатой тонкой структуре электрон-дырочных комплексов. В данной главе развита теория серии экситонных состояний в структурах с одним или двумя монослоями, учитывающая особенности экранировки кулоновского взаимодействия. Далее приводятся результаты теоретического исследования строения и тонкой структуры трионов в однослойных и двухслойных ван-дер-ваальсовых гетероструктурах. Развита теория эффекта Парселла на экситонах в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах и продемонстрирована, в согласии с экспериментом, возможность модуляции времени жизни экситона на порядок величины за счет изменения толщин слоев диэлектрика, окружающих монослой.

Пятая глава диссертационной работы содержит результаты теоретических ис-

следований ридберговских экситонов в объемных кристаллах закиси меди. Сложная структура зон, спин-орбитальное и обменное взаимодействия приводят к наблюдаемым отклонениям экситонной серии от водородоподобной. Развита теория тонкой структуры экситонных состояний и показано, что помимо P -состояний экситонов в однофотонных дипольных переходах могут участвовать и другие экситоны с нечетными огибающими, в частности, F -экситоны, проявляющиеся в виде триплетов в спектре пропускания. Предложен эффективный гамильтониан, позволяющий описать экситонные состояния с большим главным квантовым числом n , учитывающий по теории возмущений эффекты кристаллического окружения и обменного взаимодействия. На основе этого гамильтониана получены скейлинговые закономерности для зависимости основных экситонных параметров от главного квантового числа, подтвержденные экспериментом. Развита теория электрооптических эффектов на экситонах в закиси меди, дано количественное описание эффекта Штарка. Разработана теория диссоциации экситонов в Cu_2O под действием статического электрического поля и дано объяснение немонотонной зависимости поля диссоциации от энергии экситона, наблюдаемой в эксперименте.

В Заключении обобщены основные результаты работы.

Формулы и рисунки диссертации нумеруются по главам, нумерация литературы единая для всего текста.

Глава 1

Общий метод расчета состояний электрон-дырочных комплексов в наноструктурах

1.1 Кулоновские комплексы в полупроводниках (обзор)

История исследования электрон-дырочных комплексов в конденсированных средах начинается в 30-е годы прошлого века. Существование экситонов – связанных комплексов электрона и дырки в твердых телах – было предсказано Я.И. Френкелем в 1931 г. [2, 3]. В этих работах было обращено внимание на то, что поглощение света в кристалле может не сопровождаться ростом проводимости, если фото-возбужденные носители образуют связанное состояние. Речь в работах Френкеля шла об атомных кристаллах с сильной связью, в которых электрон-дырочное возбуждение было локализовано в пределах данного узла кристаллической решетки. Такие экситоны называют экситонами малого радиуса или экситонами Френкеля.

В большинстве полупроводников носители заряда относительно слабо связаны с узлами кристаллической решетки. Они могут образовывать водородоподобные электрон-дырочные комплексы, называемые также экситонами Ванье-Мотта (экситоны большого радиуса). Такие комплексы были предсказаны Г. Ванье [4] в 1937 г., а в дальнейшем их теория была развита Н. Моттом в 1938 г. [5]. Строение эк-

ситонов большого радиуса вполне аналогично атому водорода. Такие состояния описываются серией линий с энергиями

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (1.1)$$

отсчитанными от фундаментального края поглощения [20]. Здесь e – заряд электрона, μ – приведенная масса электрона и дырки, ε – диэлектрическая постоянная. Первое экспериментальное наблюдение экситонов произведено в 1951 году в закиси меди Е.Ф. Гроссом и Н.А. Каррыевым [8]. С тех пор началось интенсивное экспериментальное и теоретическое исследование экситонов. К началу 60-х годов была построена теория экситонов в идеальных кристаллах, выделены границы применимости моделей Френкеля и Ванье, рассмотрен экситон промежуточного радиуса. Также была построена теория поглощения света в твердых телах с учетом экситонных эффектов, начато изучение участия экситонов в явлениях переноса [21].

В реальных полупроводниках всегда присутствуют свободные носители заряда. Их наличие даже при очень низких температурах может быть связано как с намеренным легированием, так и с неизбежным присутствием технологических дефектов. Задача об электрон-дырочной паре в металле или полупроводнике с большой плотностью носителей заряда (т.е. в ситуации, когда фермиевская энергия электронов или дырок значительно превышает энергию связи свободного экситона) впервые была рассмотрена в 1967 году Г. Маханом. В его работе [22] было показано, что в спектре поглощения вырожденного полупроводника сохраняется особенность, связанная с кулоновским взаимодействием между электронами и фотовозбужденной дыркой. Задача об экситоне и экситонных комплексах в полупроводниках с малой концентрацией свободных носителей заряда является крайне трудной. Дополнительную сложность представляет то обстоятельство, что основное состояние электронного газа малой плотности (когда фермиевская энергия сравнима с энергией кулоновского отталкивания носителей или меньше ее) не может быть определено аналитически [23]. Предпринимались попытки проследить

эволюцию энергии связи экситона с увеличением плотности свободных электронов, с учетом хартри-фоковских поправок, обусловленных электрон-электронным взаимодействием, а также ортогональности волновых функций экситона занятым состояниям “ферми-моря” (соответствующие расчеты для квантовых ям приведены, например, в [24, 25, 26]). Экспериментально зависимость спектра поглощения от концентрации электронов была измерена, например, в работе [27]. При высоких концентрациях электронного газа виден асимметричный пик, связанный с махановской сингулярностью, при понижении концентрации он эволюционирует в набор максимумов, соответствующих экситону и трехчастичным электрон-дырочным комплексам.

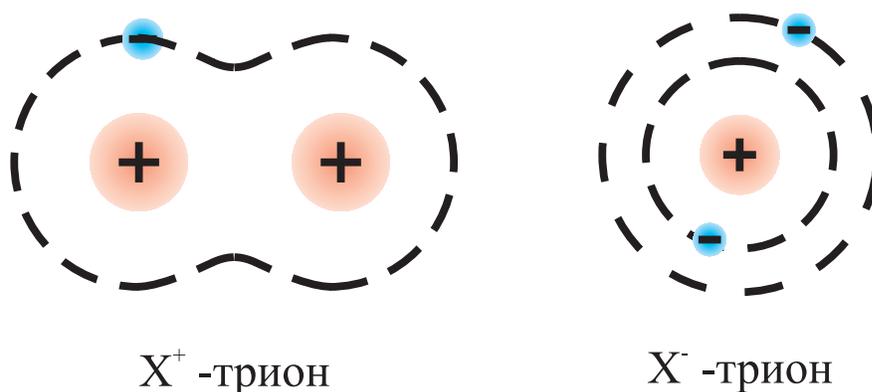


Рис. 1.1: Качественное строение X^+ и X^- -трионов.

Впервые возможность существования связанных трехчастичных электрон-дырочных комплексов в полупроводниках была предсказана в 1958 г. М. Лампертом [16]. Такие комплексы называются трионами, или заряженными экситонами. Качественное строение трионов показано на рис. 1.1. Схожими квантовомеханическими системами, состоящими из двух одинаковых частиц и третьей частицы, имеющей другую массу и электрический заряд противоположного знака, являются ион водорода H^- (соответствует X^- -триону в том случае, когда эффективная масса дырки много больше эффективной массы электрона) и молекулярный ион H_2^+ (соответствует X^+ -триону). Ионы H^- и H_2^+ впервые были теоретически изучены в конце 1920-х годов [28, 29]. Основное отличие отрицательно и положительно

заряженных трионов от водородоподобных систем заключается в том, что отношение масс электрона и дырки уже не есть малая величина. С точки зрения теории это приводит к тому, что координаты электронной и дырочной подсистем не разделяются, а расчеты их строения и энергий связи соответственно значительно усложняются. Стабильность обоих типов трионов при произвольном отношении эффективных масс электрона и дырки была теоретически доказана только в конце 70-х годов [30, 31, 32]. Недавно было показано, что задача о нахождении энергии связи объемного триона может быть решена точно [33].

Одна из важнейших характеристик трионов есть их энергия связи. Эта величина представляет собой энергию, необходимую для разделения триона на нейтральный экситон и несвязанный электрон (для X^- -триона) или дырку (для X^+ -триона), иначе говоря – это энергетическое расстояние между положениями экситонной и трионной линий в спектре люминесценции структуры. Энергия связи трионов в объемных материалах крайне мала и составляет несколько сотых энергии объемного экситона [32], что сильно затрудняет их обнаружение. Вследствие этого, экспериментальные наблюдения трионов в объемных материалах не были надежными [34, 35, 36].

Усиление интереса к исследованию электрон-дырочных комплексов связано с развитием технологии синтеза низкоразмерных полупроводниковых гетероструктур. Одним из главных эффектов понижения размерности системы является резкое усиление эффектов взаимодействия между частицами, что ведет к значительному увеличению энергии связи таких комплексов. Например, при переходе от объемного полупроводника к идеальной двумерной квантовой яме энергия связи экситона возрастает в четыре раза [37], а энергии связи трионов могут увеличиваться почти на порядок [38, 39, 40]. Впервые экспериментальные наблюдения X^- -триона были выполнены в 1992 году Хенгом и соавторами на структуре с квантовыми ямами на основе CdTe [17]. Несколькими годами позже, в 1996 году, были обнаружены X^+ -трионы [41].

Еще сильнее энергии связи электрон-дырочных комплексов возрастают при при дальнейшем понижении размерности и переходе к квантовым проволокам. Например, энергии связи экситона [42, 43] и обоих типов трионов [44, 45, 46] в квазиодномерных системах с конечным барьером могут превышать энергии связи соответствующих идеальных двумерных комплексов в 2 и более раз. Первое экспериментальное наблюдение X^- - триона в квантовой проволоке было произведено в 2002 г. [47], X^+ - триона в 2005 г. [46]. Электрон-дырочные комплексы также активно исследуются в углеродных нанотрубках (см., например, [48, 49, 50]) и структурах с квантовыми точками (см., например, [51, 52, 53]), где энергии их связи также значительно превышает энергии связи объемных систем.

Сравнение теоретических расчетов [54, 55] и экспериментальных данных для различных материалов (квантовые ямы на основе CdTe [56, 57, 58], GaAs [41, 59, 60, 61, 62] и ZnSe [63, 64, 65]) показывает, что расчеты, сделанные для идеальных квантовых ям, дают заметно меньшие значения энергий связи трионов нежели эксперимент. Экспериментальные результаты также сильнее зависят от ширины квантовой ямы, чем это предсказывает теория. Для узких квантовых ям расхождение может достигать двух раз [55]. Несоответствие между расчетами и экспериментом наблюдается также и для квантовых проволок [66].

Подобное увеличение энергии связи можно объяснить локализацией комплексов на различных дефектах, неизбежно содержащихся в реальных низкоразмерных структурах. Такими дефектами могут быть, например, флуктуации интерфейсов квантовых ям [67, 68, 69, 70, 71] и квантовых проволок [72, 73, 74], неоднородности состава [74, 75, 76, 77], флуктуации распределения встроенного заряда [78, 79, 80, 81] и др. На подобных дефектах структуры возможна локализация как отдельных носителей заряда, так и их связанных комплексов, см. например [68, 69, 82, 83]. Такие локализованные состояния кулоновских комплексов подобны экситонам и трионам в квантовых точках, которые также активно исследуются [84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93]. Дополнительная локализация усиливает куло-

новское взаимодействие, что может приводить к увеличению энергии связи комплексов.

Кроме того, в настоящее время активно ведутся экспериментальные [89, 90, 94, 95, 96, 97] и теоретические [98, 99, 100] исследования тонкой структуры спектров излучения электрон-дырочных комплексов в квантовых ямах и квантовых точках. Методики микрофотолюминесценции с высоким пространственным разрешением позволяют наблюдать расщепления линий излучения одиночных экситонов в квантовых точках, или локализованных на флуктуациях интерфейсов квантовых ям. Анализ экспериментальных данных позволяет судить о симметрии и геометрических параметрах потенциала локализации носителей и их комплексов.

Задача о нахождении волновых функций и энергий электрон-дырочных комплексов: экситонов, X^+ и X^- - трионов, локализованных в полупроводниковых гетероструктурах, не имеет, в общем случае, аналитического решения. Среди теоретических подходов, направленных на определение строения и энергий связи электрон-дырочных комплексов, можно выделить следующие:

1. Использование модельных потенциалов гетероструктуры и кулоновского взаимодействия электрона и дырки (см. [101] и ссылки, приведенные там). Волновые функции и энергии экситонов и трионов в таком методе могут быть выражены аналитически через параметры эффективных потенциалов, последние необходимо устанавливать из сопоставления результатов расчетов с экспериментальными данными.
2. Аналитические или вариационные оценки энергий связи электрон-дырочных комплексов в предельных случаях “слабого” или “сильного” локализирующего потенциала [102, 103, 104]. Данный подход обладает достаточной простотой и физической прозрачностью, однако имеет ограниченную область применимости. Проверка адекватности таких методов для конкретных структур должна проводиться независимо.

3. Вариационные методы с использованием пробных функций с большим (порядка 10^4) числом подгоночных параметров или численная диагонализация гамильтониана электрон-дырочного комплекса [105, 106], позволяющие вычислить с высокой точностью не только энергии связи комплексов, но и их волновые функции. Такие методы наиболее эффективны для расчета структур с конкретными параметрами. Однако для получения качественной картины зависимости энергий связи комплексов от параметров системы в широком диапазоне их изменения и выделения общих закономерностей очень высокая точность не требуется, а повышенная требовательность к вычислительным ресурсам может сильно затруднить реализацию расчетов.

Учет влияния локализации на неоднородности интерфейсов квантовых ям и квантовых проволок позволяет объяснить увеличение энергий связи экситона [107] и трионов [66, 105, 106] в некоторых конкретных структурах. При этом, существующие экспериментальные данные зависимости энергии связи трионов от ширины квантовой ямы (выраженные в боровских единицах) хорошо описываются универсальной зависимостью [108]. Таким образом, возникает естественная задача о разработке методов расчета энергий связи электрон-дырочных комплексов, локализованных в гетероструктурах, дающих, пусть даже за счет некоторой потери точности, физически наглядную картину строения локализованных экситонов и трионов. Решению этой задачи посвящена гл. 1 диссертации.

1.2 Экситоны и трионы в квазиодномерных системах

Полупроводниковые квантовые проволоки – это системы, в которых движение носителей заряда ограничено в двух пространственных измерениях и свободно в оставшемся. Если при переходе от трехмерной системы к двумерному пределу энергия связи экситона возрастает в четыре раза [109], а X^+ и X^- -трионов почти на порядок [38, 39, 40], то при переходе к одномерному пределу характерная

величина энергии кулоновского взаимодействия между носителями логарифмически расходится [110]. Вследствие этого, в изучаемых в экспериментах структурах с квантовыми проволоками конечного радиуса энергии связи комплексов значительно возрастают по сравнению с объемными материалами [42, 43, 45, 66, 44].

Существует ряд экспериментальных [66, 47] и теоретических [44, 111, 112, 113] работ, посвященных изучению трионов в квазиодномерных системах. Причем расчеты в работах [44, 112, 113] выполнены путем численной диагонализации гамильтониана. Громоздкость использованных методов затрудняет возможность проследить зависимости энергии связи и строения трионов от параметров структуры в широком диапазоне изменения последних. В работе [111] при помощи простого и наглядного вариационного метода рассмотрен предельный случай квантовых проволок очень малого радиуса.

В данном разделе приведены результаты вариационного исследования структуры свободных X^- и X^+ трионов в квазиодномерных системах, выполненного в работе [A1]. Предложены относительно пробные функции для нахождения энергий связи этих комплексов. В предельном случае очень тяжелых дырок ($\sigma \ll 1$) задача о нахождении энергии связи X^+ -триона также решена в адиабатическом приближении. Точность вариационных расчетов проверена непосредственной численной диагонализацией гамильтонианов комплексов. Сопоставление результатов, полученных различными методами, позволило выявить границы применимости адиабатического приближения.

Особенность теоретического описания электрон-дырочных комплексов (в частности, экситонов и трионов) в квантовых проволоках заключается в отсутствии одномерного предела. Энергия связи комплексов с кулоновским взаимодействием $\sim 1/r$, где r – расстояние между частицами, логарифмически расходится при стремлении радиуса проволоки к нулю. Следовательно, нельзя в качестве отправной точки для описания локализованных комплексов рассматривать квантовую проволоку нулевого радиуса по аналогии с квантовой ямой нулевой ширины, как

это часто делается. Это обстоятельство свидетельствует о необходимости исследования зависимости энергии связи экситонов и трионов от радиуса квантовой проволоки. Схожая ситуация при описании экситонов и трионов возникает в объемных полупроводниках в сильном магнитном поле, т.к. в плоскости, перпендикулярной полю, движение носителей квантовано, а вдоль поля – свободно.

1.2.1 Энергия связи экситона в квантовой проволоке

Рассмотрим экситон в цилиндрически симметричной квантовой проволоке. Гамильтониан системы удобно представить в безразмерных единицах, введя объемный боровский радиус и объемный экситонный ридберг

$$a_B = \hbar^2 \varepsilon / \mu e^2, \quad R_y = \mu e^4 / 2 \varepsilon^2 \hbar^2 \quad (1.2)$$

в качестве единиц длины и энергии, соответственно.. Здесь e – заряд электрона, ε – статическая диэлектрическая постоянная, m_e и m_h – эффективные массы электрона и дырки, $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ – их приведенная масса. В приближении эффективной массы безразмерный гамильтониан экситона имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{\sigma + 1} \Delta_e - \frac{\sigma}{\sigma + 1} \Delta_h - \frac{2}{\sqrt{(\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h)^2 + (z_e - z_h)^2}} + V_e(\boldsymbol{\rho}_e) + V_h(\boldsymbol{\rho}_h). \quad (1.3)$$

Здесь $\boldsymbol{\rho}_e$ и $\boldsymbol{\rho}_h$ – поперечные, а z_e и z_h – продольные координаты электрона и дырки соответственно, $V_e(\boldsymbol{\rho}_e)$ и $V_h(\boldsymbol{\rho}_h)$ – потенциалы квантовой проволоки для электрона и дырки. Здесь и далее кривые дисперсии электрона и дырки полагаются изотропными параболическими, влияние сложной валентной зоны на структуру электрон-дырочных комплексов рассмотрено в главе 2.

Пусть энергии размерного квантования электрона и дырки в направлении, перпендикулярном оси проволоки, E_{\perp} , значительно превосходят характерную энергию кулоновского взаимодействия между носителями заряда E_c (это приближение будет использовано в данном разделе всюду в дальнейшем):

$$E_{\perp} \gg E_c. \quad (1.4)$$

Условие (1.4) выполнено при $R \ll a_B$, где R – характерный радиус локализации носителей заряда в квантовой проволоке, a_B – боровский радиус объемного экситона. Тогда координаты, описывающие поперечное движение электрона и дырки, можно отделить, а волновую функцию системы записать как

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Psi_e^0(\boldsymbol{\rho}_e) \Psi_h^0(\boldsymbol{\rho}_h) \Phi(z_e, z_h). \quad (1.5)$$

Функции $\Psi_e^0(\boldsymbol{\rho}_e)$ и $\Psi_h^0(\boldsymbol{\rho}_h)$ суть волновые функции основного состояния поперечного движения электрона и дырки, рассчитанные без учета кулоновского взаимодействия между носителями заряда.

После усреднения гамильтониана (1.3) по переменным $\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h$ и отделения свободного движения центра масс экситона вдоль оси проволоки, получаем следующий гамильтониан, описывающий относительное движение электрона и дырки:

$$\hat{H}_{ex} = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \hat{V}_c(z). \quad (1.6)$$

Здесь $z = z_e - z_h$ и

$$\hat{V}_c(z) = - \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2}{\sqrt{(\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h)^2 + z^2}} |\Psi_e^0(\boldsymbol{\rho}_e)|^2 |\Psi_h^0(\boldsymbol{\rho}_h)|^2 d\boldsymbol{\rho}_e d\boldsymbol{\rho}_h \quad (1.7)$$

– эффективный одномерный потенциал взаимодействия между электроном и дыркой. Заметим, что при выполнении условия (1.4) задача о нахождении собственных уровней энергии гамильтониана (1.6) оказывается вполне аналогичной задаче об атоме водорода в сильном магнитном поле [110].

На больших, по сравнению с радиусом проволоки R , расстояниях между носителями заряда эффективный потенциал (1.7) сводится к одномерному кулоновскому

$$\hat{V}_c(z) \rightarrow -\frac{2}{|z|}, \quad |z| \gg R. \quad (1.8)$$

Если выполнено условие (1.4), то потенциал (1.7) отличается от асимптотики (1.8) только при $|z| \lesssim R$. При этом масштаб волновой функции относительного движения электрон-дырочной пары в экситоне a_{ex} много больше радиуса проволоки

$a_{ex} \gg R$. Это означает, что в области $|z| \lesssim R$ важна лишь интегральная мощность потенциала взаимодействия, а его конкретный вид оказывается не существенным. Поэтому в дальнейших расчетах применяется широко используемое приближение для эффективного потенциала взаимодействия между электроном и дыркой (см., например, [114, 115, 116, 117, 118, 119, 120]):

$$\widehat{V}_{eff}(z, a) = -\frac{2}{\sqrt{z^2 + a^2}}, \quad (1.9)$$

где параметр a играет роль эффективного радиуса квантовой нити. Отметим, что выбор эффективного потенциала взаимодействия в виде (1.7) не единственный [110, 121].

Кулоновское отталкивание между носителями заряда одного знака (двумя электронами или двумя дырками) описывается эффективным потенциалом, подобным (1.7), однако волновые функции размерного квантования, стоящие под интегралом, должны соответствовать носителям заряда одного типа, в отличие от выражения (1.7). Так как волновые функции поперечного движения электрона и дырки могут быть, в общем случае, различными, то получившийся эффективный радиус проволоки будет отличаться от стоящего в (1.9). Однако этим эффектом здесь пренебрегается, и в дальнейшем считается, что отталкивание между одинаковыми носителями описывается потенциалом

$$\widehat{V}'_{eff}(z, a) = -\widehat{V}_{eff}(z, a) = \frac{2}{\sqrt{z^2 + a^2}}, \quad (1.10)$$

отличающимся от потенциала притяжения между электроном и дыркой только знаком. Ниже будет показано, что характерная величина кулоновского взаимодействия между носителями заряда определяется логарифмом эффективного радиуса квантовой проволоки. Иными словами, эта зависимость является достаточно слабой, и, следовательно, приближение (1.10) не вносит существенной погрешности.

Для нахождения энергии связи экситонов (и трионов) в системе с потенциалом взаимодействия между носителями заряда в виде (1.9) будет применяться вариационный метод с пробной функцией, обладающей небольшим числом подгоночных

параметров. Для экситона выбрана простейшая пробная функцию $\varphi_\alpha(z)$ вида

$$\varphi_\alpha(z) = \exp(-\alpha|z|) \quad (1.11)$$

с единственным подгоночным параметром α . Здесь и далее нормировочная константа опущена. Известно, что энергия связи экситона в подобной системе зависит от ее радиуса логарифмический образом. Поэтому введем следующий параметр:

$$\gamma = \ln(a_B/a) \quad (1.12)$$

Зависимость энергии связи экситона от величины γ , вычисленная вариационным методом, показана на рис. 1.2 сплошной кривой.

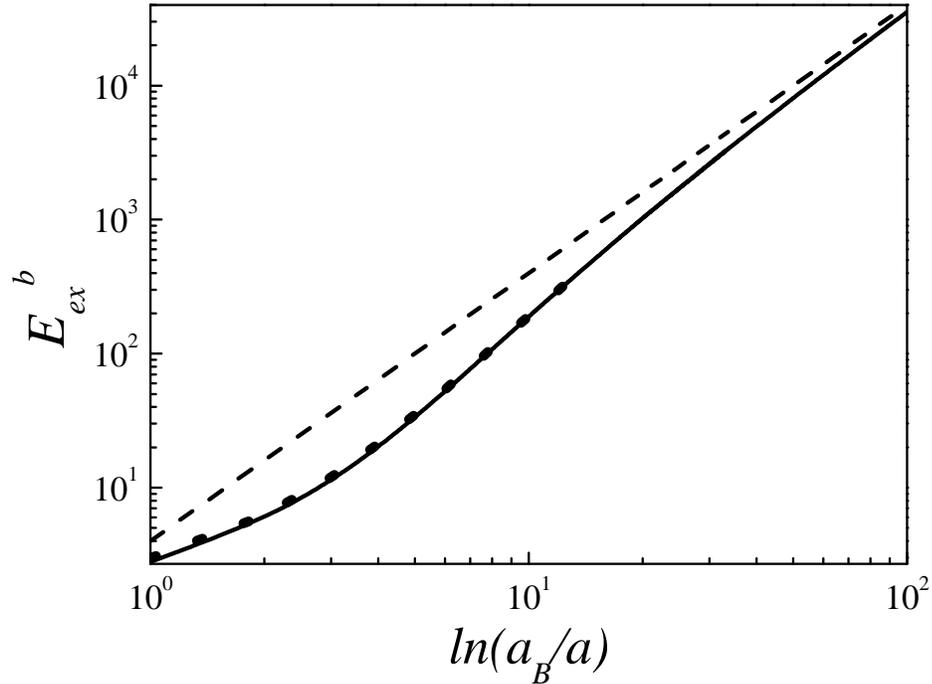


Рис. 1.2: Энергия связи экситона в зависимости от эффективного радиуса квантовой проволоки a . Сплошная кривая - полное решение вариационной задачи, пунктирная - приближенная зависимость (1.14), точки - точная зависимость, полученная с помощью численной диагонализации гамильтониана (1.6) с потенциалом (1.7).

В пределе квантовой проволоки малого радиуса,

$$\gamma \gg 1, \quad (1.13)$$

характерный размер пробной волновой функции, минимизирующей гамильтониан, $a_{ex} = \gamma^{-1}$ оказывается много больше характерного размера потенциала (1.9) $R_{eff} = e^{-\gamma}$. Следовательно, потенциал (1.9) можно рассматривать как δ -функциональный, что оправдывает выбор функции (1.11) в качестве пробной. При выполнении условия (1.13) энергию связи экситона можно записать в виде

$$E_b^{ex} = 4\gamma^2 = 4 \ln^2 \left(\frac{a_B}{a} \right). \quad (1.14)$$

Соотношение между радиусом квантовой проволоки R и параметром a разумно выбирать так, чтобы величины энергии связи экситона, вычисленные путем прямой диагонализации гамильтониана (1.6) с потенциалами (1.7) и (1.9), совпадали. Это соотношение зависит от конкретного вида потенциалов квантовой проволоки $V_e(\rho_e)$ и $V_h(\rho_h)$. При таком подборе соотношения между радиусом квантовой нити R и параметром a приближение (1.9) дает хорошее согласие с точным расчетом во всем рассматриваемом диапазоне изменения параметра γ , в том числе и в области ($\gamma \gtrsim 1$), которая соответствует реальным полупроводниковым системам с квантовыми проволоками. Например, если высота барьера квантовой проволоки бесконечна, а сама проволока – цилиндрически симметрична, оказывается, что $a \approx R/2$, где R – радиус квантовой проволоки.

На рис. 1.2 точками показана зависимость энергии связи экситона от параметра $\gamma = \ln(a_B/a)$, полученная с помощью численной диагонализации гамильтониана (1.6) для квантовой проволоки с бесконечным резким барьером. Из рис. 1.2 видно, что даже простейшая пробная функция (1.11) позволяет получить энергию связи экситона с хорошей точностью при любых значениях $\gamma \gtrsim 1$. В пределе $\gamma \gg 1$ результат вариационного расчета стремится к точному, но даже в области $\gamma \sim 1$, где функция (1.11) наименее точна, относительная погрешность вычисления энергии связи составляет не более 6%.

Пунктирной кривой на рис. 1.2 показана зависимость (1.14), здесь также считается, что $a = R/2$. Видно, что эта простая асимптотика реализуется только при очень больших значениях параметра γ ($\gamma > 50$). Это объясняется тем, что отно-

сительный вклад следующей поправки к (1.14) в энергию связи экситона:

$$E_1 = -8\gamma (\ln 2\gamma + 1.3) \quad (1.15)$$

убывает очень медленно с ростом γ . Необходимо отметить, что, например для параметров GaAs, уже при значении $\gamma = 4$ радиус квантовой проволоки оказывается сравним с межатомным расстоянием. Следовательно, область, в которой реализуется логарифмическая асимптотика (1.14), представляет лишь теоретический интерес и в реальных полупроводниковых системах не реализуется. В дальнейшем будет рассматриваться область значений $\gamma \gtrsim 1$.

1.2.2 Пробные функции и численные результаты для трионов

В данном разделе построены простые вариационные функции, пригодные для нахождения энергий связи основного и первого возбужденного состояний состояний X^+ и X^- -трионов в квантовых проволоках, кулоновское взаимодействие в которых описывается потенциалом (1.9).

Гамильтониан X^+ -триона в такой системе будет следующим:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_{h_1}^2} - \frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_{h_2}^2} - \frac{1}{\sigma+1} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \\ & + \hat{V}_{eff}(z_{h_1} - z_e, a) + \hat{V}_{eff}(z_{h_2} - z_e, a) - \hat{V}_{eff}(z_{h_1} - z_{h_2}, a). \end{aligned} \quad (1.16)$$

Напомним, что потенциал $\hat{V}_{eff}(z, a) < 0$ и является потенциалом притяжения.

Заменой переменных

$$z_1 = z_{h_1} - z_e, \quad z_2 = z_{h_2} - z_e, \quad Z = \frac{z_{h_1} + z_{h_2} + \sigma z_e}{\sigma + 2},$$

где Z - координата центра масс триона, а $z_{1,2}$ - относительные координаты носителей заряда, можно отделить движение центра масс триона, так как потенциалы взаимодействия, входящие в гамильтониан (1.16), зависят только от относительных координат носителей заряда. Для относительного движения носителей заряда

в трионе имеем следующий гамильтониан:

$$\widehat{H}_{tr}^+ = -\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - 2\frac{1}{\sigma+1} \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\partial}{\partial z_2} + \widehat{V}_{eff}(z_1, a) + \widehat{V}_{eff}(z_2, a) - \widehat{V}_{eff}(z_1 - z_2, a). \quad (1.17)$$

Гамильтониан для X^- -триона получается с помощью замены $e \leftrightarrow h$ и $\sigma \leftrightarrow 1/\sigma$ в гамильтониане X^+ -триона (1.17):

$$\widehat{H}_{tr}^- = -\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - 2\frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{\partial}{\partial z_1} \frac{\partial}{\partial z_2} + \widehat{V}_{eff}(z_1, a) + \widehat{V}_{eff}(z_2, a) - \widehat{V}_{eff}(z_1 - z_2, a), \quad (1.18)$$

где

$$z_1 = z_{e_1} - z_h, \quad z_2 = z_{e_2} - z_h, \quad Z = \frac{\sigma z_{e_1} + \sigma z_{e_2} + z_h}{2\sigma + 1}.$$

По аналогии с работой [108], в которой рассматривались свободные трионы в квантовых ямах, в качестве пробных функций для X^- и X^+ -трионов выбраны следующие:

$$\begin{aligned} \Psi^s(z_1, z_2) = & [\exp(-\alpha|z_1| - \beta|z_2|) + \exp(-\alpha|z_2| - \beta|z_1|)] \times \quad (1.19) \\ & \times \exp(-\delta ||z_1 - z_2| - R_0|) \end{aligned}$$

– для описания синглетного состояния трионов, т.е. состояния с полным спином пары тождественных частиц равным нулю и симметричной по отношению к перестановкам идентичных носителей заряда пространственной функцией (спины идентичных носителей заряда в таком трионе параллельны), и

$$\begin{aligned} \Psi^t(z_1, z_2) = & (z_1 - z_2) [\exp(-\alpha|z_1| - \beta|z_2|) + \exp(-\alpha|z_2| - \beta|z_1|)] \times \quad (1.20) \\ & \times \exp(-\delta ||z_1 - z_2| - R_0|) \end{aligned}$$

– для описания триплетного состояния. Функция (1.20) является антисимметричной относительно перестановки идентичных носителей заряда. Отметим, что в системах со сложной и, в особенности, с многодолинной зонной структурой, тонкая структура трионных состояний оказывается более богатой (см. главу 4). Подготовочные параметры α , β описывают взаимодействие носителей заряда с зарядом

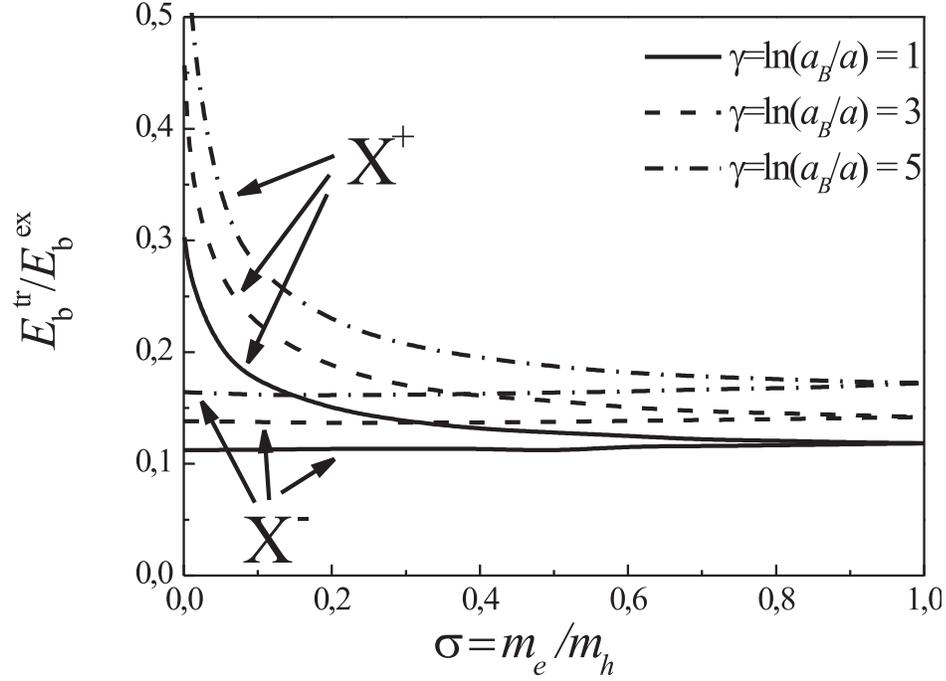


Рис. 1.3: Зависимости отношения энергии связи синглетного состояния X^+ и X^- -трионов к энергии связи экситона от отношения эффективных масс электрона и дырки σ , вычисленные для нескольких значений параметра γ . Использовалась пробная функция (1.19).

противоположного знака, параметры δ , R_0 – позволяют оптимизировать оттачивание идентичных носителей заряда. Необходимо отметить, что функция (1.19) представляет собой адаптированную для квазиодномерных систем пробную функцию для триона в идеальной двумерной системе, предложенную в работе [122]. Ниже будет показано, что пробная функция (1.19) описывает синглетное состояние X^+ и X^- -триона во всем диапазоне изменения отношения эффективных масс электрона и дырки с хорошей точностью.

Энергией связи триона называют величину E_b^{tr}

$$E_b^{tr} = E_{ex} + E_i - E_{tr}, \quad (1.21)$$

где E_{ex} и E_{tr} - полные энергии экситона и триона соответственно, E_i - энергия основного состояния изолированной третьей частицы (электрона в случае X^- триона и дырки в случае X^+ - триона), помещенной в ту же структуру. Иными словами, энергия связи триона - это величина, показывающая на сколько понизится полная

энергия системы, состоящей из экситона и изолированного носителя, вследствие включения кулоновского взаимодействия между ними. В рассматриваемой системе $E_i = 0$, так как вдоль проволоки движение носителей заряда в изучаемой структуре свободно. На рисунке 1.3 показаны зависимости отношения энергий связи синглетного состояния X^+ и X^- -трионов E_b^{tr} к энергии связи экситона E_b^{ex} от отношения эффективных масс электрона и дырки $\sigma = m_e/m_h$, вычисленные для нескольких значений параметра γ , связанного с радиусом квантовой проволоки, с использованием пробной функции (1.19). Видно, что энергии связи обоих типов трионов возрастают с уменьшением эффективного радиуса квантовой проволоки, что связано с увеличением эффективности кулоновского взаимодействия. Энергия связи X^+ -триона существенно зависит от отношения масс электрона и дырки, энергия связи X^- -триона, наоборот, почти не зависит от отношения масс, причем при фиксированном значении γ энергия связи X^+ -триона всегда больше энергии связи X^- -триона. Как и для двумерного триона, значительно более резкая зависимость энергии связи X^+ -триона от отношения масс электрона и дырки объясняется тем, что в нем, в отличие от X^- -триона, присутствуют две тяжелые частицы, увеличение массы которых сильнее сказывается на кинетической энергии относительного движения [122, 123]. Необходимо отметить, что представленные на рис. 1.3 результаты получены для одинаковых эффективных радиусов квантовой проволоки для электрона и дырки. Если эффективные радиусы разные, то один из типов трионов может оказаться даже энергетически невыгодным по сравнению с экситоном, например, в случае когда эффективный радиус для однотипных носителей заряда будет много меньше радиуса для непарного носителя заряда. Тогда кулоновского отталкивание двух одинаковых носителей заряда не сможет быть компенсировано притяжением к непарному.

Сравним полученные зависимости с аналогичными зависимостями для двумерных трионов (см., например, [122, 123]). Качественный вид зависимостей оказывается схожим. Однако в квантовой яме при изменении значения σ от 1 до 0

энергия связи X^- -триона меняется сильнее (на $\sim 13\%$ против $< 1\%$). Энергия связи в квантовой яме X^+ -триона, наоборот, меняется слабее (на $\sim 117\%$ против 170% для нити с $\gamma = 1$ и $> 170\%$ для больших значений γ), чем в квантовой проволоке. В предельном случае $\gamma \rightarrow \infty$ при $\sigma \rightarrow 0$ отношения энергии связи триона к энергии связи экситона стремятся к $E_b^+/E_b^{ex} \rightarrow 3$ и $E_b^-/E_b^{ex} \rightarrow 0.2$ для X^+ и X^- -триона соответственно. Приведенное здесь предельное значение для X^- -триона больше, чем в работе [111]. Это объясняется большей точностью пробных функций, примененных в диссертационной работе.

Проследим зависимость энергии связи трионов от радиуса квантовой проволоки в области $\gamma \gtrsim 1$, так как именно она соответствует реальным полупроводниковым системам. На рисунке 1.4 показаны отношения энергии связи синглетного состояния X^+ и X^- -трионов как функции параметра γ для различных отношений масс электрона и дырки. Из рисунка видно, что найденные зависимости для X^- -триона во всем диапазоне отношения масс, а для X^+ -триона при $\sigma > 0.1$, могут быть приближены линейно в виде

$$\frac{E_b^{+,-}}{E_b^{ex}} = C_1\gamma + C_2, \quad (1.22)$$

причем коэффициенты полученной аппроксимации зависят от отношения масс σ . Коэффициенты для линейной аппроксимации (1.22), вычисленные для некоторых значений σ , приведены в таблице 1.1.

Теперь рассмотрим триплетное состояние триона, которое является возбужденным. На рисунке 1.5 пунктиром показаны зависимости отношений энергии связи синглетного и триплетного состояний X^+ триона к энергии связи экситона от отношения эффективных масс электрона и дырки, вычисленные с использованием функций (1.19) и (1.20) для $\gamma = 1$. В пределе $\sigma \rightarrow 0$ энергии связи синглетного и триплетного состояний X^+ стремятся к одинаковому значению. Это связано с тем, что дырки в таком пределе можно рассматривать как классические частицы, поэтому эффекты обменного взаимодействия, которое приводит к расщеплению синглетного и триплетного состояний, ослабевают, и ими можно пренебречь.

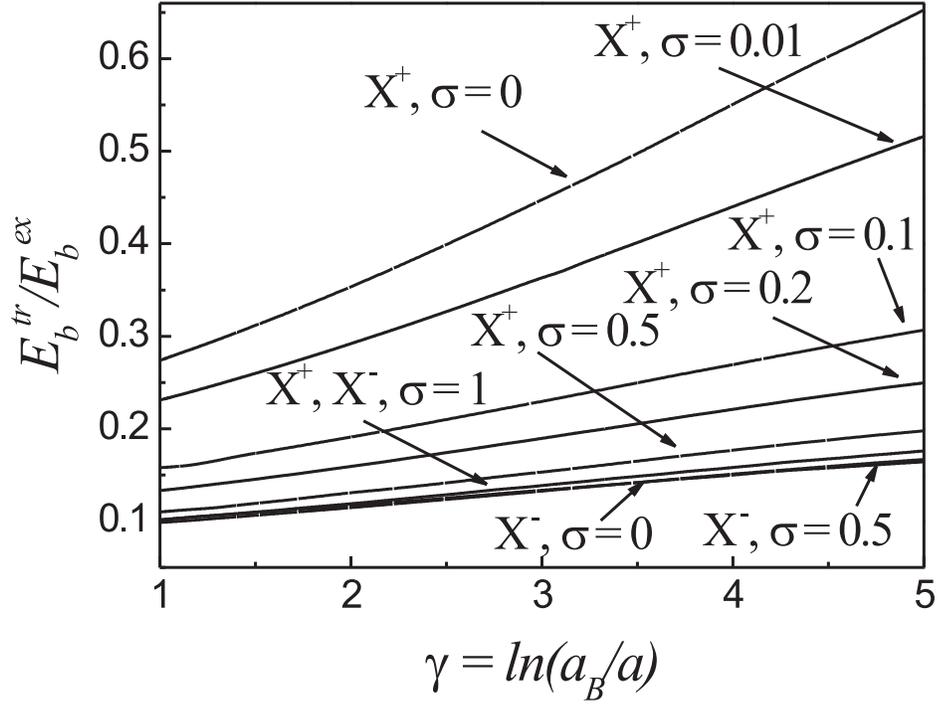


Рис. 1.4: Зависимости отношения энергии связи синглетного состояния X^+ и X^- -трионов от эффективного радиуса квантовой проволоки для различных отношений масс электрона и дырки. Кривые, соответствующие X^- -триону при $\sigma = 0$ и $\sigma = 0.5$ лежат близко друг к другу и на рисунке неразличимы.

Таблица 1.1: Коэффициенты линейной аппроксимации зависимости отношения энергии связи триона к энергии связи экситона $E_b^{+,-}/E_b^{ex} = C_1\gamma + C_2$ от логарифма эффективного радиуса квантовой проволоки.

Трион	σ	C_1	C_2
X^-	0	0.019	0.08
X^-	0.5	0.018	0.08
X^+, X^-	1	0.02	0.082
X^+	0.5	0.023	0.086
X^+	0.2	0.03	0.10
X^+	0.1	0.038	0.12

Небольшой “перехлест” в энергиях связи синглетного и триплетного состояний при небольших значениях отношения масс связан с сильно упрощенным выбором пробных функций (1.19), (1.20) и самостоятельного физического смысла не несет. Более точный расчет, результаты которого приведены ниже в разделе 1.2.3, показывает, что энергия связи синглетного состояния всегда больше энергии связи триплетного. Необходимо отметить, что триплетное состояние X^+ -триона оказывается связанным при любой величине отношения масс, а триплетное состояние X^- -триона существует при $0.95 \lesssim \sigma \leq 1$. Это качественно отличается от двумерной системы, где триплетное состояние X^- -триона вовсе не связано, а для X^+ -триона связано при отношении масс меньше некоторого критического значения $\sigma < \sigma_{cr} \approx 0.34$ [124].

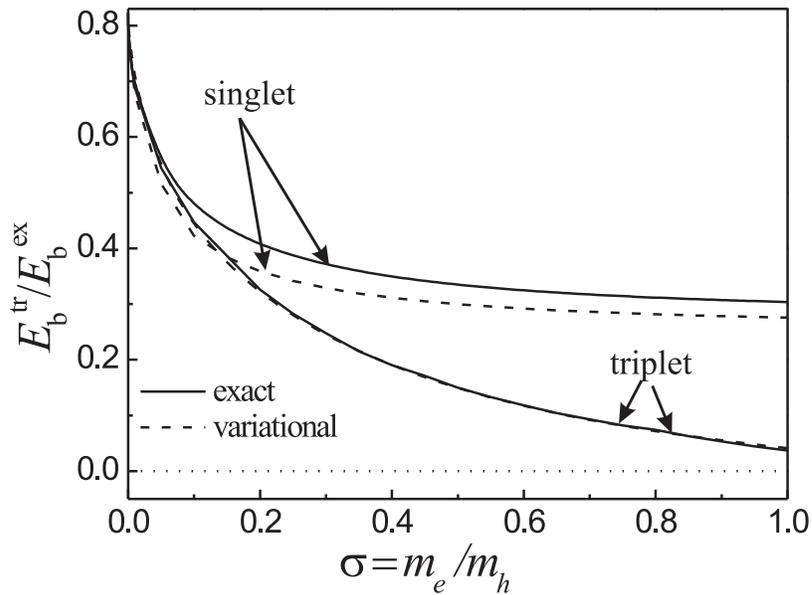


Рис. 1.5: Зависимости отношения энергии связи синглетного и триплетного состояний X^+ - триона к энергии экситона, вычисленные точно (сплошная кривая), и с использованием пробных функций (1.19), (1.20) - штриховая кривая. Все кривые вычислены для значения параметра $\gamma = 1$

1.2.3 Оценка точности вариационного расчета

Для оценки точности результатов, приведенных в параграфе 1.2.2 выполнялась прямая диагонализация матрицы гамильтониана трионов, вычисленной на следующем неортонормированном базисе:

$$\begin{aligned} \Psi_i(z_1, z_2) = & [\exp(-\alpha_i z_1^2) \exp(-\beta_i z_2^2) + \exp(-\alpha_i z_2^2) \exp(-\beta_i z_1^2)] \times \\ & \times \exp[-\delta_i(z_1 - z_2)^2], \end{aligned} \quad (1.23)$$

для синглетного состояния и

$$\begin{aligned} \Psi_i(z_1, z_2) = & (z_1 - z_2) [\exp(-\alpha_i z_1^2) \exp(-\beta_i z_2^2) + \exp(-\alpha_i z_2^2) \exp(-\beta_i z_1^2)] \times \\ & \times \exp[-\delta_i(z_1 - z_2)^2], \end{aligned} \quad (1.24)$$

для триплетного. Число базисных функций i бралось равным 400. Энергия наименьшего состояния затем минимизировалась по наборам параметров $\alpha_i, \beta_i, \delta_i$. Для ускорения расчета минимизация была выполнена методом статистических испытаний (параметры выбираются случайным образом).

На рисунке 1.5 сплошными линиями показаны зависимости отношения энергии связи синглетного и триплетного состояний X^+ -триона к энергии экситона при $\gamma = 1$, вычисленные с помощью численной диагонализации гамильтониана. Для сравнения пунктиром показаны те же зависимости, полученные с использованием пробных функций (1.19) и (1.20). Для данного значения γ погрешность результата, полученного с пробной функцией (1.19) не превышает 10%, а с функцией (1.20) - 2%. Еще раз отметим, что “перехлеста” зависимостей энергий связи синглетного и триплетного состояний в более точном расчете нет. Полученные нами результаты также хорошо согласуются с результатами численного расчета, приведенными в работах [44, 112].

1.2.4 Адиабатическое приближение. Возбужденные состояния X^+ - триона.

В предельном случае, когда эффективная масса дырок много больше эффективной массы электронов $\sigma = m_e/m_h \rightarrow 0$ решение уравнения Шредингера для X^+ -триона с гамильтонианом (1.16) может быть найдено в адиабатическом приближении, отделив при этом быстрое движение электрона от медленного квазиклассического движения дырок. Как и в предыдущем параграфе, движение центра масс триона (в адиабатическом приближении им является центр масс пары дырок) считаем независимым от относительного движения носителей заряда, составляющих трион. На первом шаге находится энергия электрона в зависимости от расстояния между дырками, которые считаются неподвижными. Найденная величина $V_{ad}(z_{hh}, a)$ является адиабатическим потенциалом для дырок, который впоследствии подставляется в уравнение Шредингера для волновой функции относительного движения дырок. Уравнение Шредингера для вычисления адиабатического потенциала записывается как

$$\left[-\frac{1}{\sigma + 1} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + \widehat{V}_{eff} \left(z_e - \frac{z_{hh}}{2}, a \right) + \widehat{V}_{eff} \left(z_e + \frac{z_{hh}}{2}, a \right) - \widehat{V}_{eff}(z_{hh}, a) \right] \Psi_e(z_e) = [V_{ad}(z_{hh}, a) + E_b^{ex}] \Psi_e(z_e). \quad (1.25)$$

Относительная координата дырок $z_{hh} = z_{h1} - z_{h2}$ входит в (1.25) в качестве параметра. Зависимость каждой из собственных энергий уравнения (1.25) от z_{hh} представляет собой адиабатический потенциал $V_{ad}(z_{hh}, a)$.

Эффективный гамильтониан, описывающий относительное движение дырок, имеет вид:

$$\widehat{H}_{ad} = -\frac{\sigma}{\sigma + 1} \frac{\partial^2}{\partial z_{hh}^2} + V_{ad}(z_{hh}, a). \quad (1.26)$$

Уравнения (1.25) и (1.26) зависят только от одной координаты и могут быть легко решены методом конечных разностей. Шаг сетки и границы интегрирования выбирались из условия сходимости алгоритма.

Рассмотрим потенциал $V_{ad}^0(z_{hh}, a)$, соответствующий основному состоянию га-

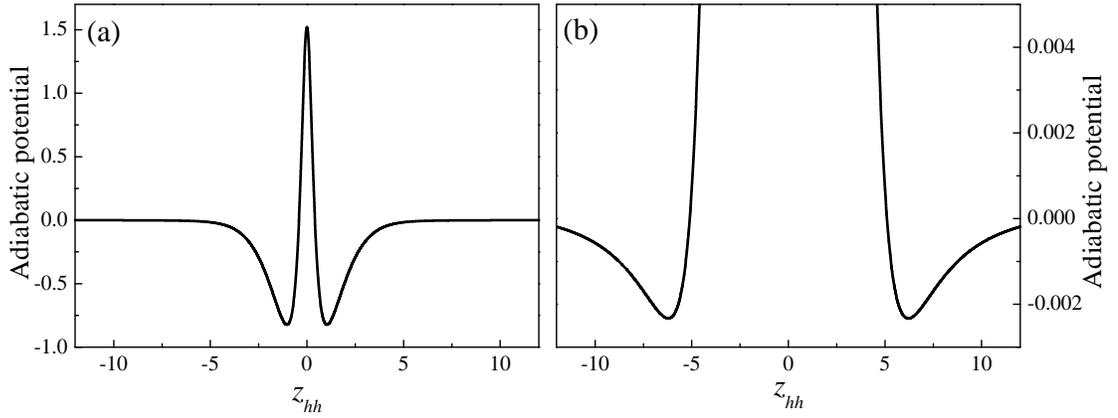


Рис. 1.6: Зависимости адиабатических потенциалов V_{ad}^0 (рис. 3.5a) и V_{ad}^1 (рис. 3.5b) от относительной координаты дырок z_{hh} . Эффективный радиус квантовой проволоки равен $a = e^{-1}a_B$ (что соответствует $\gamma = 1$), дырка бесконечно тяжелая $\sigma = m_e/m_h = 0$.

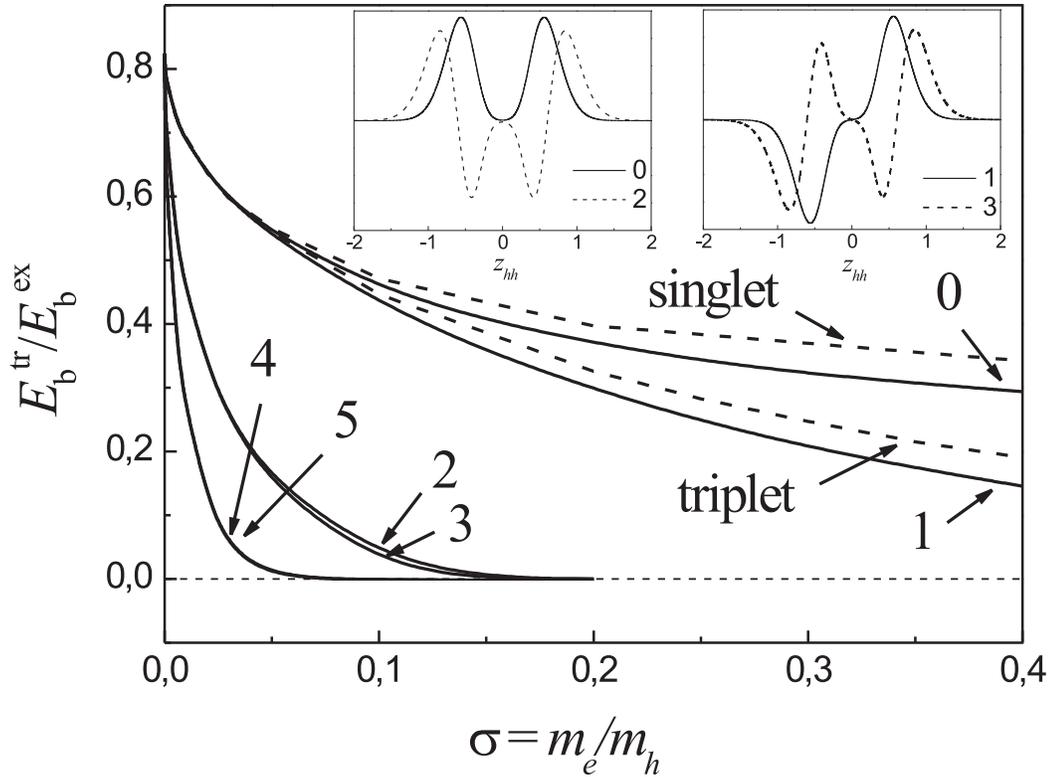


Рис. 1.7: Зависимость энергии связи 6 первых состояний в потенциале V_{ad}^0 от отношения масс электрона и дырки σ для $\gamma = 1$. Штриховые кривые - зависимости для синглетного и триплетного состояний X^+ триона, приведенные в параграфе 1.2.3. На вставках показаны ненормированные волновые функции нижних 4 состояний

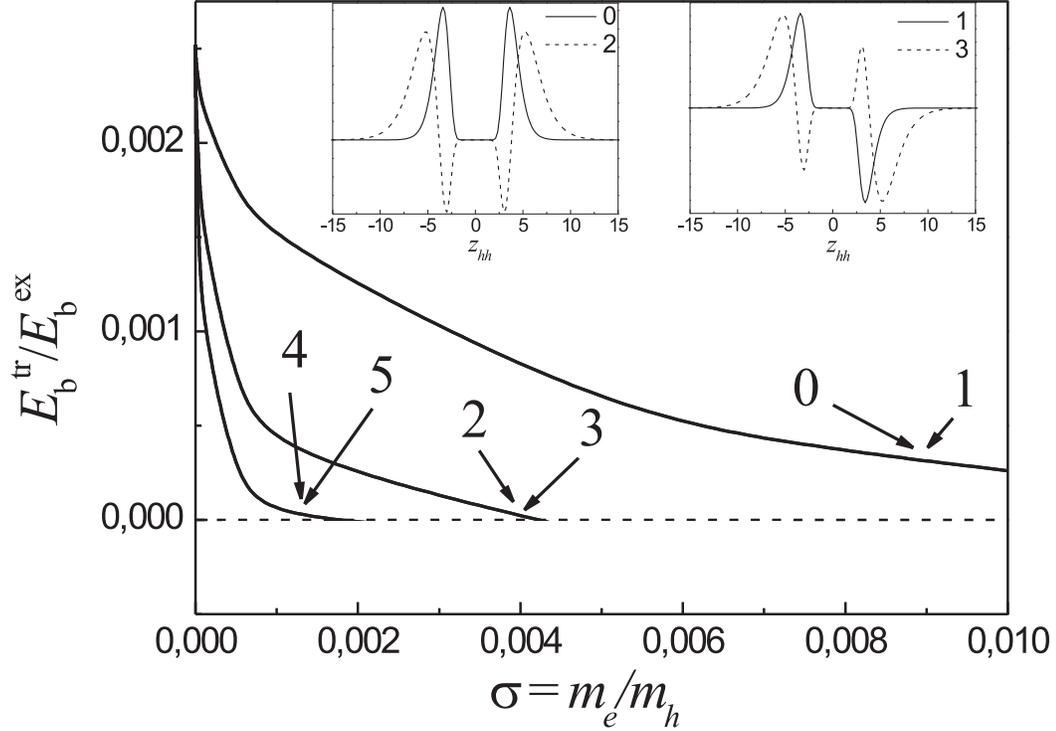


Рис. 1.8: Зависимости энергии связи 6 первых состояний в потенциале V_{ad}^1 от отношения масс электрона и дырки σ , вычисленные при $\gamma = 1$. На вставках показаны ненормированные волновые функции нижних 4 состояний.

милльтониана (1.25). Основное состояние дырок в нем соответствует рассмотренному выше синглетному состоянию X^+ -триона, а первое возбужденное - триплетному. Зависимость потенциала V_{ad}^0 от относительной координаты z_{hh} для случая бесконечно тяжелой дырки ($\sigma = 0$) показана на рисунке 1.6(a). Видно, что потенциал V_{ad}^0 имеет два симметричных минимума вследствие симметрии задачи относительно перестановки дырок. При $z_{hh} = 0$ он имеет максимум из-за кулоновского отталкивания между дырками. Если $z_{hh} \rightarrow \infty$, то $V_{ad}^0 \rightarrow 0$, так как при этом уравнение Шредингера (1.25) сводится к уравнению для свободного экситона с собственной энергией E_b^{ex} . Локализованные в рассматриваемом потенциале состояния дырок с четными номерами (имеющими вид $2k$, $k = 0, 1, 2, \dots$) имеют симметричную дырочную волновую функцию, а с нечетными номерами (имеющими вид $2k + 1$, $k = 0, 1, 2, \dots$) – антисимметричную.

На рисунке 1.7 показаны зависимости энергии связи первых 6 состояний в по-

тенциале V_{ad}^0 от отношения эффективных масс электрона и дырки σ , вычисленные при $\gamma = 1$. Штриховые линии соответствуют энергиям связи синглетного и триплетного состояний, приведенным в параграфе 1.2.3. Из рисунка 1.7 видно, что вблизи $\sigma = 0$ энергии связи убывают как $\sqrt{\sigma}$, причем пары уровней с номерами $2k$ и $2k + 1$ в области малых значений σ приближаются друг к другу. Это объясняется тем, что при малых значениях σ адиабатический потенциал можно хорошо приблизить параболическим и уравнение Шредингера с гамильтонианом (1.26), очевидно, сводится к уравнению для гармонического осциллятора. Можно показать, что энергетический спектр триона при малых значениях σ , вычисленный для $\gamma = 1$, имеет вид

$$E_b^{tr} \approx [0.8 - 2.8(k + 1/2)\sqrt{\sigma}] E_b^{ex}. \quad (1.27)$$

В пределе $\sigma \rightarrow 0$ результат, полученный в адиабатическом приближении, стремится к точному. Сравнение с результатами вариационного расчета (представленными на рисунке пунктиром) показывает, что при $\sigma < 0.2$ погрешность адиабатического приближения оказывается не более 10%.

Анализ уравнения (1.25) показывает, что связанными состояниями обладает не только адиабатический потенциал V_{ad}^0 , соответствующий основному состоянию электрона, но и потенциал V_{ad}^1 , представляющий первое возбужденное состояние гамильтониана (1.25), состояния триона в котором аналогичны антисвязывающим состояниям молекулярных ионов. Зависимость $V_1(z_{hh}, a)$ показана на рисунке 1.8 (b). Необходимо отметить, что потенциал V_{ad}^1 имеет гораздо менее выраженные минимумы по сравнению с V_{ad}^0 . Поэтому энергии связи локализованных состояний в нем будут значительно меньше, и убывать с ростом отношения масс σ они будут быстрее, чем энергии связи соответствующих состояний в потенциале V_{ad}^0 . Энергии связи первых 6 состояний, рассчитанные для адиабатического потенциала V_{ad}^1 , вычисленные также при $\gamma = 1$, показаны на рис. 1.8. Каждая кривая соответствует паре уровней с номерами $2k$ и $2k + 1$, $k=0,1,2$, которые на рисунке не различимы.

1.3 Экситоны в квазидвумерных структурах с пространственным разделением носителей заряда

Перейдем теперь от одномерных систем к квазидвумерным. Одним из важных свойств полупроводниковых наноразмерных структур является то, что с их помощью можно моделировать широкий круг квантовомеханических систем. Действительно, технологическая возможность встроить в полупроводник потенциал почти любого профиля позволяет получить искусственный объект с желаемыми свойствами. Исследования оптических свойств нанобъектов позволяют определить энергетический спектр носителей заряда и, таким образом, экспериментально проверить решение соответствующей квантовомеханической задачи. Задача о движении частицы в сферически-симметричном потенциальном поле $V(\mathbf{r}) \propto -1/r$, где r – расстояние до центра, широко известна (такой вид имеют кулоновское и гравитационное поля). В полупроводниковых структурах к такой задаче сводится, например, задача о нахождении уровней энергии донорной примеси или экситона Ванье-Мотта. Отличительным свойством кулоновского потенциала является “случайное” вырождение энергетических уровней, т.е. дополнительное многократное вырождение, не связанное с пространственной симметрией задачи. В данном случае это вырождение обусловлено наличием коммутирующего с гамильтонианом оператора Лапласа- Рунге- Ленца [125, 126]

$$\hat{\mathbf{A}} = (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{2me^2}{r}\mathbf{r}, \quad (1.28)$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{L}}$ – операторы импульса и момента импульса, e , m и \mathbf{r} – заряд, масса и радиус-вектор частицы, соответственно. Случайное вырождение также имеет место и для двумерной кулоновской задачи.

Еще одним особенным потенциалом является потенциал изотропного гармонического осциллятора $V(\mathbf{r}) \propto r^2$. В этом случае также имеется коммутирующий с гамильтонианом нетривиальный тензорный оператор. Его линейно-независимые компоненты можно записать следующим образом [127]:

$$\begin{aligned} \hat{A}_{xx} - \hat{A}_{yy}, \hat{A}_{yy} - \hat{A}_{zz}, \hat{A}_{xy} + \hat{A}_{yx}, \\ \hat{A}_{xz} + \hat{A}_{zx}, \hat{A}_{yz} + \hat{A}_{zy}, \end{aligned} \quad (1.29)$$

где

$$\hat{A}_{ij} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_i \hat{p}_j + m^2 \omega^2 x_i x_j), \quad i, j = x, y, z. \quad (1.30)$$

Здесь \hat{p}_i – декартовы компоненты оператора импульса, ω – собственная частота осциллятора. Таким образом, в гармоническом потенциале, так же как и в кулоновском, присутствует случайное вырождение энергетических уровней, однако кратность вырождения другая. Из классической механики известно, что кулоновский и гармонический потенциалы являются единственными сферически-симметричными потенциалами, в которых отсутствует прецессия траекторий, и все траектории, соответствующие связанным состояниям, являются замкнутыми. Также как и для кулоновской задачи, для двумерного гармонического потенциала также существует случайное вырождение.

Представляется интересным исследовать реальную систему, в которой потенциал взаимодействия в зависимости от параметров мог бы эволюционировать от кулоновского к потенциалу изотропного гармонического осциллятора. В такой системе можно было бы проследить изменение структуры энергетических уровней от одного предельного случая многократного вырождения к другому через область сильного расщепления вырожденных в обоих пределах уровней. Здесь представлены результаты работы [A2], где такой переход продемонстрирован.

В объемном материале простую систему с необходимыми свойствами не реализовать. Обратимся тогда к низкоразмерным структурам: рассмотрим электрон в узкой квантовой яме, взаимодействующий с донором, который расположен в барьере [128, 129]. Такая система естественным образом проявляется в δ -легированных структурах, когда легирующая примесь помещается в барьер. Эффективный потенциал взаимодействия электрона с заряженным центром может быть представлен в виде $V(\rho) \propto (\rho^2 + D^2)^{-1/2}$, где ρ – координата электрона в

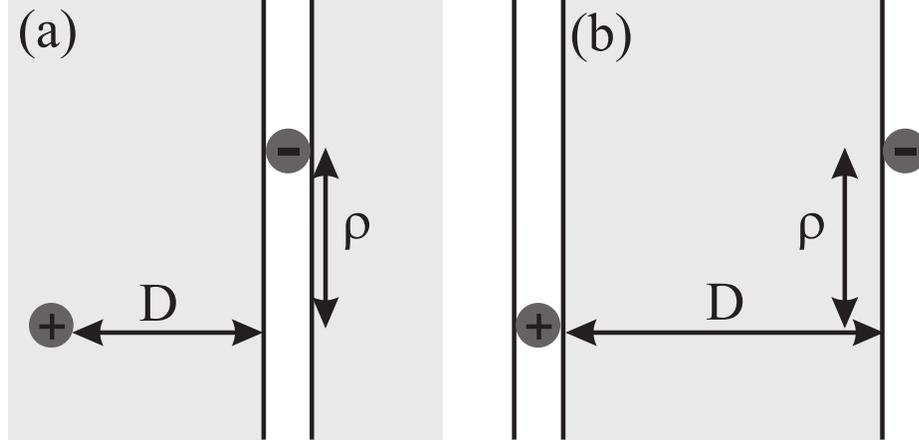


Рис. 1.9: Схематическое изображение двух реализаций исследуемой системы, (a) – заряженный донор в барьере, (b) – пространственно не прямой экситон.

плоскости квантовой ямы, D – расстояние от донора до квантовой ямы. Такой потенциал при изменении единственного параметра, D , переходит от двумерного кулоновского потенциала (донор в центре квантовой ямы) к потенциалу плоского изотропного гармонического осциллятора (донор глубоко в барьере). Другой подходящей системой является структура с двумя квантовыми ямами, в которой возбуждается пространственно-непрямой экситон: электрон в одной яме, а дырка – в другой. Здесь параметром, контролирующим переход между предельными случаями, является расстояние между квантовыми ямами. Пространственно-непрямые экситоны проявляют ряд интересных свойств, таких как, например, их бозе-конденсация [130, 131, 132]. Отметим, что исследуются и более сложные трехчастичные комплексы: пространственно-непрямые трионы [133, 134] (см. также главу 4, параграфы 4.2.3 и 4.3.3). Схематично обе системы показаны на рис. 1.9.

Для определенности далее рассматривается более простая из описанных выше систем – электрон, локализованный на доноре (см. рис. 1.9 (a)). Рассмотрим узкую квантовую яму, в которой движение электрона можно считать двумерным, т.е. расстояние между уровнями его размерного квантования много больше других

характерных энергий в системе, и ионизованный донор в барьере, находящийся на расстоянии D от квантовой ямы, и пусть концентрация электронов и заряженных центров достаточно мала, так чтобы каждый комплекс можно было рассматривать независимо друг от друга. В случае пространственно непрямого экситона необходимым условием также является малая концентрация носителей заряда для того, чтобы каждую связанную электрон-дырочную пару (экситон) можно было бы рассматривать независимо.

В модели простых параболических зон гамильтониан электрона, локализованного на доноре имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_e - \frac{e^2}{\varepsilon\sqrt{\rho^2 + D^2}}, \quad (1.31)$$

где Δ_e – двумерный оператор Лапласа, действующий на координаты электрона, ρ – радиус-вектор электрона в плоскости структуры, e – элементарный заряд и ε – диэлектрическая постоянная.

Выберем в качестве единиц измерения энергии и длины объемные Ридберг, $Ry = m_e e^4 / 2\varepsilon^2 \hbar^2$, и боровский радиус, $a_B = \hbar^2 \varepsilon / m_e e^2$, соответственно. Тогда гамильтониан (1.31) преобразуется к виду:

$$\hat{H} = -\Delta - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}}, \quad (1.32)$$

где Δ – безразмерный двумерный оператор Лапласа, d – безразмерное расстояние между донором и квантовой ямой.

Чтобы получить гамильтониан для непрямого экситона, нужно заменить радиус-вектор электрона, ρ , на координату относительного движения электрона и дырки $\rho = \rho_e - \rho_h$, а массу электрона m_e – на приведенную массу электрона и дырки, $\mu = (m_e m_h) / (m_e + m_h)$.

В предельном случае $d \rightarrow 0$ асимптотика потенциала взаимодействия следующая:

$$-\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} \approx -\frac{2}{\rho}, \quad (1.33)$$

и гамильтониан (1.32) соответствует гамильтониану двумерного атома водорода. В противоположном пределе, $d \rightarrow \infty$, асимптотика потенциала взаимодействия:

$$-\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} \approx -\frac{2}{d} + \frac{\rho^2}{d^3}, \quad (1.34)$$

и гамильтониан (1.32) описывает двумерный изотропный гармонический осциллятор. Таким образом, в рамках одной и той же структуры, можно смоделировать и двумерный атом водорода и плоский гармонический осциллятор.

Рассмотрим подробнее каждый из этих предельных случаев.

Предел двумерного атома водорода, $d \rightarrow 0$. Задача о двумерном атоме водорода хорошо известна [135]. Энергетические уровни имеют следующую структуру:

$$E_n = -\frac{1}{(n + 1/2)^2}, \quad (1.35)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$ – главное квантовое число, и $(2n+1)$ -кратно вырождены по магнитному квантовому числу m , которое при заданном значении n может принимать значения от $-n$ до n . Вырождение, как и в случае объемного атома водорода, является случайным. Для двумерного атома водорода существует безразмерный оператор, аналогичный оператору Лапласа-Рунге-Ленца, коммутирующий с гамильтонианом (1.32) при $d = 0$ [135]:

$$\widehat{\mathbf{A}} = (\widehat{\mathbf{p}} \times \widehat{\mathbf{L}}_z - \widehat{\mathbf{L}}_z \times \widehat{\mathbf{p}}) - \frac{2}{\rho} \boldsymbol{\rho}, \quad (1.36)$$

где $\widehat{\mathbf{L}}_z$ – безразмерный оператор z – компоненты момента импульса.

При $d \neq 0$ случайное вырождение снимается, остается только вырождение, связанное с цилиндрической симметрией задачи – уровни энергии, соответствующие состояниям с магнитным квантовым числом m и $-m$, при заданном квантовом числе n , совпадают.

Предел двумерного изотопного гармонического осциллятора. В пределе больших расстояний от донора до квантовой ямы, $d \rightarrow \infty$, гамильтониан исследуемой системы имеет вид:

$$\widehat{H} = -\Delta - \frac{2}{d} + \frac{\rho^2}{d^3}. \quad (1.37)$$

Это соответствует гамильтониану двумерного изотропного гармонического осциллятора с жесткостью потенциала $\kappa = 2/d^{3/2}$. Отсюда получаем выражение для собственных энергетических уровней:

$$E_p = -\frac{2}{d} + \frac{2}{d^{3/2}}(p+1), \quad (1.38)$$

где $p = 0, 1, 2, \dots$ – главное квантовое число. Энергетические уровни (1.38) также многократно вырождены. Для уровня с номером p кратность вырождения составляет $p+1$. В данном предельном случае вырождение связано с наличием коммутирующего с гамильтонианом (1.37), оператора, аналогичного (1.36). Компоненты этого оператора [136]:

$$S_x = p_x p_y + \frac{xy}{d^3}, \quad S_y = \frac{p_y^2 - p_x^2}{2} + \frac{y^2 - x^2}{2d^3}, \quad (1.39)$$

где x и y – декартовы координаты электрона относительно донора или относительные декартовы координаты электрона и дырки, p_x и p_y – соответствующие компоненты импульса. Они связаны с безразмерным тензорным оператором (1.30) как

$$S_x = \frac{1}{2}(A_{xy} + A_{yx}), \quad S_y = \frac{1}{2}(A_{yy} - A_{xx}), \quad (1.40)$$

В области реализации каждого предельного случая рассматриваемая задача решается аналитически и существуют две системы ортонормированных волновых функций. Собственные функции двумерного атома водорода ($d=0$) [135, 137]:

$$\begin{aligned} \psi_{nm}(\rho, \phi) = C_{n,m} \exp\left(-\frac{2\rho}{2n+1} - im\phi\right) \times \\ \times \left(\frac{4\rho}{2n+1}\right)^{|m|} L_{n_1-|m|}^{2|m|}\left(\frac{4\rho}{2n+1}\right), \\ m = -n, -n+1, \dots, n-1, n \end{aligned} \quad (1.41)$$

Здесь ϕ – полярный угол, $L_a^b(x)$ – обобщенные полиномы Лагерра, $C_{n,m}$ – нормировочная константа.

Вторым естественным базисным набором являются собственные функции плоского изотропного гармонического осциллятора ($d \rightarrow \infty$):

$$\begin{aligned} \psi_{pm}(\rho, \phi) = B_{p,m} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2d^{3/2}} - im\phi\right) \times \\ \times \left(\frac{\rho}{d^{3/2}}\right)^{|m|} L_{p/2-|m|/2}^{|m|}\left(\frac{\rho^2}{d^{3/2}}\right), \\ m = -p, -p+2, \dots, p-2, p, \end{aligned} \quad (1.42)$$

где $B_{p,m}$ –нормировочная константа.

В каждом из рассмотренных предельных случаев отклонение энергии каждого энергетического уровня от его предельного значения можно оценить по теории возмущений. В качестве малого возмущения выступает разница между потенциалом взаимодействия $-2/\sqrt{\rho^2 + d^2}$ и соответствующей асимптотикой, (1.33) или (1.34).

При малых значениях d отклонение потенциала взаимодействия от кулоновского можно записать в виде

$$V_1(\rho, d) = -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} + \frac{2}{\rho} \quad (1.43)$$

Матричные элементы возмущения (1.43) на функциях (1.41), $V_{1n_1, n_2}^{m_1 m_2}(d)$ могут быть вычислены аналитически, однако имеют громоздкий вид и здесь не приводятся.

Изучим их асимптотику при $d \rightarrow 0$. Так как возмущение (1.43) не смешивает состояния с различными магнитными квантовыми числами m_1 и m_2 , будем рассматривать случай $m_1 = m_2 = m$. Например, диагональные матричные элементы имеют вид

$$V_{1n,n}^{00}(\rho, d) \approx \frac{8}{(2n+1)^2} \frac{4d}{2n+1}, \quad (1.44)$$

$$V_{1n,n}^{11}(\rho, d) \approx \frac{2}{3(2n+1)} \left(\frac{4d}{2n+1}\right)^2, \quad n \geq 1, \quad (1.45)$$

$$V_{1n,n}^{22}(\rho, d) \approx \frac{1}{15(2n+1)} \left(\frac{4d}{2n+1}\right)^2, \quad n \geq 2, \quad (1.46)$$

и т.д. Таким образом при $m = 0$, матричные элементы линейны по d , при $|m| \geq 1$ – имеют квадратичную зависимость. Недиagonalные матричные элементы, вычисленные на волновых функциях, соответствующих состояниям с различными главными квантовыми числами $n_1 \neq n_2$, имеют тот же характер зависимости от d что и diagonalные, но с другим, меньшим, коэффициентом пропорциональности. Тем не менее, недиагональные матричные элементы имеют тот же порядок величины что и diagonalные. Таким образом, происходит не только расщепление уровней энергии по модулю магнитного квантового числа m , но и мешивание состояний с различными значениями главного квантового числа n .

Предельный случай двумерного атома водорода реализуется, если величины $V_{1n_1, n_2}^{m_1 m_2}(d)$ малы по сравнению с расстоянием между уровнями энергии атома водорода с номерами n и $n + 1$, что имеет место при

$$d \ll \frac{(2n + 1)(n + 1)}{(2n + 3)^2}. \quad (1.47)$$

В противоположном предельном случае, $d \rightarrow \infty$, естественным выбором базиса является (1.42). Здесь в качестве возмущения выступает:

$$V_2(d) = -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} + \frac{2}{d} - \frac{\rho^2}{d^3}. \quad (1.48)$$

Также как и в предыдущем предельном случае, матричные элементы возмущения (1.48) на базисе (1.41), $V_{2p_1, p_2}^{m_1 m_2}(d)$, вычисляются аналитически, но ввиду громоздкости, здесь не приводятся. Величины $V_{2p_1, p_2}^{m_1 m_2}(d)$ отличны от нуля только при $m_1 = m_2 = m$. Рассмотрим асимптотики diagonalных матричных элементов $V_{2p, p}^{mm}(d)$ при $d \rightarrow \infty$:

$$V_{2p, p}^{mm}(\rho) \approx \frac{C(p, |m|)}{d^2}, \quad (1.49)$$

где, например,

$$C(p, p) = -\frac{3(p + 1)(p + 2)}{4}, C(p, p - 2) = -\frac{3p(p + 5)}{4}, \dots \quad (1.50)$$

При больших p имеем $C(p, m) \propto p^2$. Недиagonalные матричные элементы $V_{2p_1, p_2}^{mm}(\rho)$: $\propto d^{-2}$ при $|p_1 - p_2| \leq 4$, и $\propto d^{-5/2}$ при $|p_1 - p_2| \geq 4$. Причем при

$|p_1 - p_2| \leq 4$ и не слишком больших значениях p_1, p_2 недиагональные матричные элементы оказываются сравнимыми с диагональными, что говорит о значительном перемешивании волновых функций соответствующих состояний.

Предельный случай гармонического осциллятора реализуется, если матричные элементы (1.48) малы по сравнению с расстоянием между энергетическими уровнями гармонического осциллятора. Это условие записывается как

$$\sqrt{d} \gg C(p, |m|) \propto p^2, p \rightarrow \infty. \quad (1.51)$$

Таким образом, чем больше номер уровня, тем больше значение параметра d , при котором происходит переход к предельному случаю гармонического осциллятора.

Расчет показал, что диагональные матричные элементы операторов (1.43) и (1.48), вычисленные на базисах (1.41) и (1.42), соответственно, того же порядка величины как и не равные нулю недиагональные. Поэтому для исследования зависимости энергетической структуры донора построения ряда теории возмущений только на волновых функциях, соответствующих одному энергетическому уровню в соответствующем предельном случае, недостаточно.

Проиллюстрируем с помощью численного расчета перестройку энергетических уровней донорной примеси и непрямого экситона от одной системы случайно вырожденных уровней к другой, через промежуточную область, в которой существенно не только расщепление энергетических уровней, но и перемешивание состояний с различными главными квантовыми числами.

При не слишком больших значениях параметра d ($d < 20$) наилучшую сходимость дает разложение гамильтониана (1.32) по базису собственных функций двумерного атома водорода (1.41). Для расчета энергий связи электрона на доноре при больших значениях d ($d > 100$) лучше подходит базис собственных функций двумерного осциллятора (1.42). Количество элементов в базисе выбиралось достаточным для сходимости расчета. В промежуточной области, ($20 < d < 100$), использовался как базис (1.41) так и базис (1.42), в этой области использование обоих базисов позволяет получить совпадающие результаты, что дополнительно

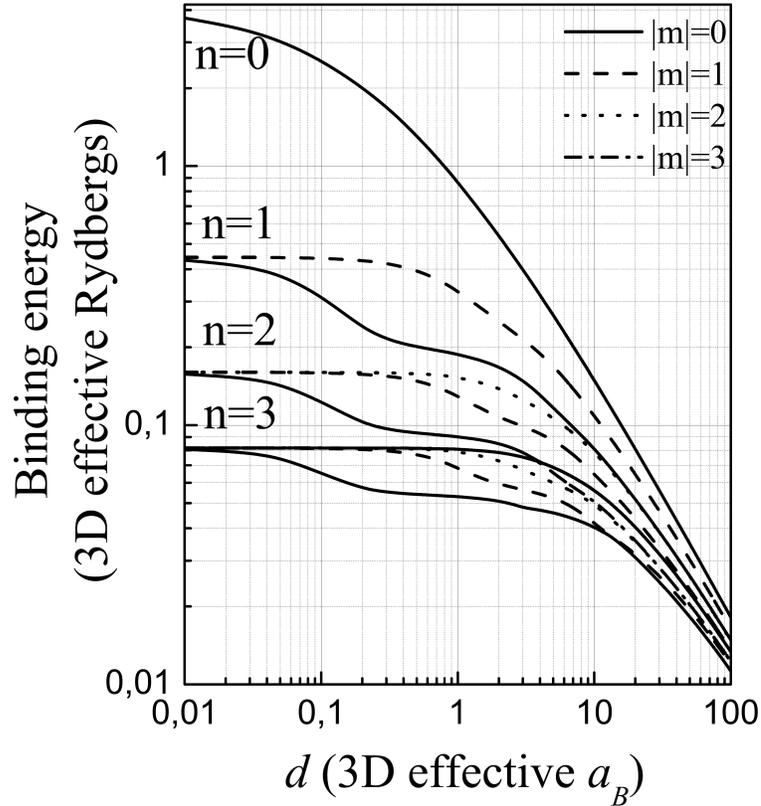


Рис. 1.10: Зависимость энергии связи экситона от расстояния между слоями, d . Показаны зависимости, соответствующие первым 4 уровням в предельном случае $d \rightarrow 0$

гарантирует точность полученных результатов.

На рис.1.10 представлена зависимость энергий связи состояний, соответствующих при $d = 0$ первым четырем уровням энергии. При $d \neq 0$ они расщепляются на четыре невырожденных состояния ($m = 0$) и на шесть двукратно вырожденных ($|m| = 1, 2$). При увеличении d начинается перестройка структуры уровней, в этой области становится существенным не только расщепление, но смешивание состояний, соответствующих различным энергетическим уровням (разным значениям n при $d = 0$).

Так как кратности вырождения в предельных случаях разные, то в переходной области происходит перегруппировка энергетических уровней. Например, трехкратно вырожденный уровень осциллятора с квантовым числом $p = 2$ получает-

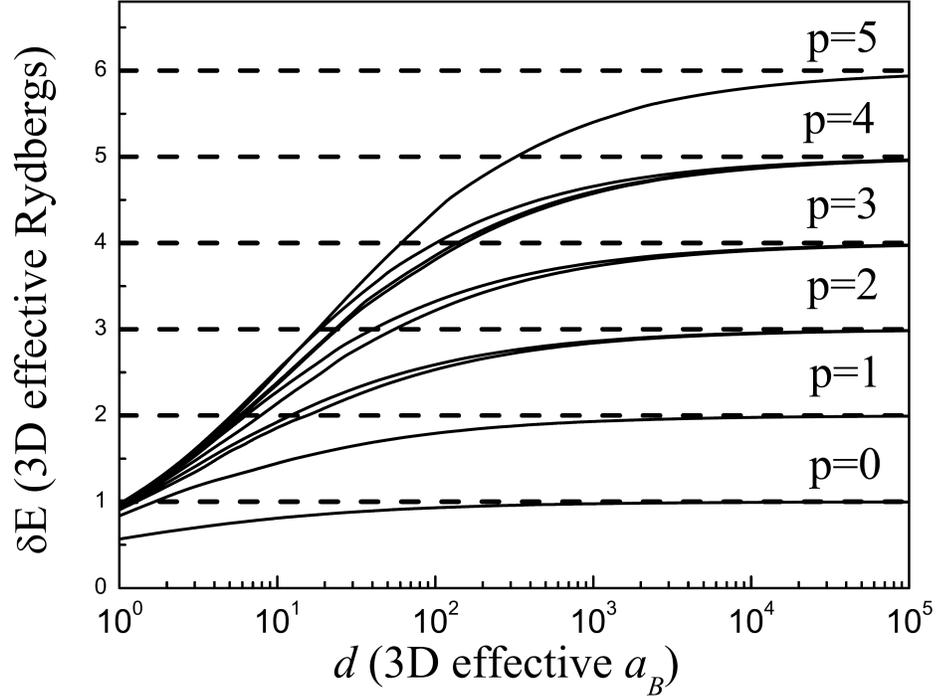


Рис. 1.11: Зависимость величины δE от d . Сплошные кривые соответствуют результатам численного расчета, пунктирные – предельному значению $p + 1$

ся, когда сходятся невырожденный уровень, которому при $d = 0$ соответствует состояние с квантовыми числами $n = 1$, $m = 0$ и двукратно вырожденный уровень, которому в пределе атома водорода соответствуют состояние с квантовыми числами $n = 2$, $m = \pm 2$. При дальнейшем увеличении d наблюдается переход к энергетической структуре двумерного осциллятора и уменьшение расщепления энергетических уровней.

Для наглядной иллюстрации перехода к пределу гармонического осциллятора, рассмотрим величину

$$\delta E = \frac{1}{2} \left(E_e + \frac{2}{d} \right) d^{3/2}, \quad (1.52)$$

где E_e – полная энергия электрона. С ростом d величина $\delta E \rightarrow (p + 1)$ и отличие δE от $p + 1$ показывает, насколько хорошо реализуется предельный случай гармонического осциллятора. Зависимость $\delta E(d)$ представлена на рис. 1.11. Видно,

что при больших d действительно происходит переход к энергетической структуре гармонического осциллятора (1.38), уровни которого показаны на рис. 1.11 пунктирными линиями.

Таким образом, на примере электрона в квантовой яме, локализованного на доноре, находящемся в барьере а также пространственно-непрямого экситона была исследована эволюция структуры энергетических уровней между двумя пределами, характеризующимися случайным вырождением. Показано, что в промежуточной области существенно не только расщепление энергетических уровней, но и перемешивание между состояниями с различными значениями главных квантовых чисел в обоих предельных случаях. Продемонстрировано, что область реализации каждого из предельных случаев зависит от номера энергетического уровня, т.е от характерного размера соответствующей волновой функции. Развита здесь модель далее обобщена в главе 4 на случай пространственно не прямых экситонов и трионов в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов.

1.4 Электрон-дырочные комплексы, локализованные в наноструктурах

1.4.1 Гамильтониан электрон-дырочного комплекса

Цель данного раздела – формулировка и апробация общего вариационного метода для расчета энергий кулоновских комплексов, локализованных в наносистемах на неоднородностях их потенциала. Здесь приведены результаты работ [A3], [A4], [A5], [A6].

Рассмотрим электрон-дырочную пару, локализованную в плоскости квантовой ямы на потенциале неоднородности, к качеству которой могут выступать флуктуации ширины квантовой ямы, неоднородности ее состава и т.п. Гамильтониан

экситона имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{\sigma+1}\Delta_e - \frac{\sigma}{\sigma+1}\Delta_h - \frac{2}{\sqrt{(\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h)^2 + (z_e - z_h)^2}} + V_e(z_e) + V_h(z_h) + U_e(\boldsymbol{\rho}_e) + U_h(\boldsymbol{\rho}_h), \quad (1.53)$$

где, как и выше, $\sigma = m_e/m_h$ – отношение эффективных масс носителей, $\boldsymbol{\rho}_{e,h}$ и $z_{e,h}$ – их координаты в плоскости квантовой ямы и вдоль ее оси роста, $V_e(z_e)$ и $V_h(z_h)$ – потенциалы квантовой ямы для электрона и дырки соответственно, $U_e(\boldsymbol{\rho}_e)$ и $U_h(\boldsymbol{\rho}_h)$ – эффективные потенциалы неоднородности, действующие на электрон и дырку. Здесь также используются боровские единицы для измерения длины и энергии (см. параграф 1.2).

Здесь рассматриваются узкие квантовые ямы, в которых характерные величины энергий размерного квантования электрона и дырки в направлении оси роста, E_\perp , много больше характерной энергии кулоновского взаимодействия между частицами E_c :

$$E_\perp \gg E_c. \quad (1.54)$$

Строго говоря, это условие выполнено при $L \ll a_B \sqrt{(\pi^2 \sigma)/(\sigma+1)}$, где L – эффективная ширина квантовой ямы, $\sigma = m_e/m_h$ – отношение масс электрона и дырки. Для большинства полупроводниковых материалов $\sigma \lesssim 0.3$ и при этом не слишком мало, поэтому условие (1.54) можно записать в виде $L \ll a_B$. Тогда координаты, описывающие движение частиц вдоль оси роста, можно отделить, а волновую функцию системы записать как [1]

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Psi_e^0(z_e) \Psi_h^0(z_h) \Phi(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h), \quad (1.55)$$

где $\Psi_e^0(z_e)$ и $\Psi_h^0(z_h)$ – волновые функции основного состояния электрона и дырки вдоль оси роста, рассчитанные без учета кулоновского взаимодействия между носителями заряда. Приближение (1.55) используется в дальнейшем в этом разделе.

Здесь и далее сложная структура валентной зоны не учитывается. Действительно, при выполнении условия (1.54) внедиагональные слагаемые гамильтониана Латтинжера малы по сравнению с расщеплением между подзонами тяжелых

(проекция момента $\pm 3/2$ на ось роста структуры) и легких дырок (проекция момента $\pm 1/2$ на ось роста) дырок, что делает возможным рассмотрение их подзон независимо друг от друга [1]. Пренебрежение эффектами сложной структуры валентной зоны накладывает ограничение на латеральный потенциал: характерная энергия квантования дырки в потенциале неоднородности $U_h(\boldsymbol{\rho}_h)$ не должна превышать энергию ее размерного квантования вдоль оси роста квантовой ямы. Однако, если условие (1.54) не выполнено, также не применимо приближение (1.55). Роль сложной структуры валентной зоны подробно проанализирована в гл. 2 и 3.

Также здесь пренебрегается эффектами, являющимися следствием различия диэлектрических проницаемостей в квантовой яме и в барьере. Их учет приводит к некоторому увеличению энергий связи электрон-дырочных комплексов, но не приводит к существенным изменениям результатов, т.к. в стандартных полупроводниковых гетероструктурах этот эффект мал [138, 139, 140]. Ситуация кардинально меняется в гетероструктурах на основе строго двумерных полупроводников (монослой MX_2 , графен и т.п.), взаимодействие между носителями заряда в которых существенно отличается кулоновского закона (см.гл. 4 диссертации).

После усреднения гамильтониана (1.53) по переменным z_e, z_h получаем следующий гамильтониан для описания движения электрона и дырки в плоскости квантовой ямы:

$$\hat{H}_{ex} = -\frac{1}{\sigma+1}\Delta_{\rho_e} - \frac{\sigma}{\sigma+1}\Delta_{\rho_h} + \hat{V}_c(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) + U_e(\boldsymbol{\rho}_e) + U_h(\boldsymbol{\rho}_h). \quad (1.56)$$

Здесь

$$\hat{V}_c(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) = -\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{\sqrt{(\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h)^2 + (z_e - z_h)^2}} |\Psi_e^0(z_e)|^2 |\Psi_h^0(z_h)|^2 dz_e dz_h \quad (1.57)$$

– эффективный двумерный потенциал взаимодействия между электроном и дыркой. В диссертации рассматривается предел узких глубоких квантовых ям, в которых $L \ll a_B$. Тогда движение носителей заряда можно считать полностью двумерным, а потенциал взаимодействия между носителями заряда (1.57) примет

вид двумерного кулоновского:

$$\widehat{V}_c(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) = -\frac{2}{|\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h|}. \quad (1.58)$$

Вышесказанное можно обобщить на случай электрон-дырочного комплекса, состоящего из N_e электронов и N_h дырок ($N_e, N_h = 1, 2, \dots$). В общем виде уравнение Шредингера для такой системы принимает вид:

$$(\widehat{H} - E)\Psi(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}}, \boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}) = 0, \quad (1.59)$$

где гамильтониан, описывающий движение носителей заряда в плоскости квантовой ямы \widehat{H} , имеет вид:

$$\widehat{H} = \widehat{T}_e + \widehat{T}_h + \widehat{V}_c + \widehat{V}_e + \widehat{V}_h. \quad (1.60)$$

Здесь \widehat{T}_e и \widehat{T}_h – операторы кинетической энергии электронной и дырочной подсистем; \widehat{V}_c – оператор полного кулоновского взаимодействия между носителями заряда; \widehat{V}_e и \widehat{V}_h – потенциалы взаимодействия электронной и дырочной подсистем с дефектом квантовой ямы, на котором происходит локализация:

$$\widehat{V}_e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}}) = \sum_{i=1}^{N_e} U_e(\boldsymbol{\rho}_{e_i}), \quad (1.61)$$

$$\widehat{V}_h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}) = \sum_{j=1}^{N_h} U_h(\boldsymbol{\rho}_{h_j}).$$

Энергия основного состояния гамильтониана (1.60) E будет вычисляться с помощью вариационного метода. Для построения общего, но при этом простого и наглядного, метода необходимо сконструировать пробную волновую функцию, удовлетворяющую следующим требованиям:

1. Позволять вычислить энергию основного состояния электрон-дырочного комплекса с хорошей точностью при произвольных параметрах потенциалов $U_{e,h}(\boldsymbol{\rho}_{e,h})$;
2. Обладать минимально возможным числом подгоночных параметров, которые должны иметь прозрачный физический смысл;

3. Не зависеть от конкретной формы одночастичных потенциалов $U_{e,h}(\boldsymbol{\rho}_{e,h})$.

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

Для того, чтобы выделить предельные случаи введем следующие величины, характеризующие электрон-дырочный комплекс: E_c – типичная величина кулоновского взаимодействия между носителями; ΔE_e и ΔE_h – характерные расстояния между энергетическими уровнями невзаимодействующих электронов и дырок в потенциалах $U_e(\boldsymbol{\rho}_e)$ и $U_h(\boldsymbol{\rho}_h)$ соответственно.

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

$$W_e = \frac{\Delta E_e}{E_c} \tag{1.62}$$

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

Есть всего два качественно различных предельных случая, в которых уравнение Шредингера (1.59) упрощается и сводится к нескольким независимым уравнениям с меньшим числом переменных.

1.4.2 Предельные случаи

Предельный случай 1 (“слабый” потенциал неоднородности)

Первый предельный случай характеризуется тем, что эффективные потенциалы неоднородности для обоих типов носителей заряда являются слабыми по сравнению с кулоновским взаимодействием между ними:

$$W_e, W_h \ll 1. \tag{1.63}$$

Тогда движение центра масс комплекса является медленным по сравнению с относительным движением составляющих его носителей заряда, и в адиабатическом приближении его волновая функция представляется в виде:

$$\Psi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1}) = \Psi^{C.M.}(\mathbf{R})\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1}), \quad (1.64)$$

где \mathbf{R} - координата центра масс, $\boldsymbol{\rho}_i$ ($i = 1 \dots N_e+N_h-1$) – относительные координаты частиц в комплексе. При выполнении условия (1.63) электрон-дырочный комплекс локализуется в эффективном потенциале неоднородности как целое.

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

$$\hat{H}_{C.M.} = \hat{T}_{C.M.} + \hat{V}_e(\mathbf{R}) + \hat{V}_h(\mathbf{R}), \quad (1.65)$$

где $\hat{T}_{C.M.}$ – оператор кинетической энергии центра масс комплекса. Потенциалы $\hat{V}_e(\mathbf{R})$ и $\hat{V}_h(\mathbf{R})$ суть потенциалы (1.61), взятые при $\boldsymbol{\rho}_{e_i}, \boldsymbol{\rho}_{h_j} \equiv \mathbf{R}$, так что $\hat{V}_e(\mathbf{R}) = N_e U_e(\mathbf{R})$, и $\hat{V}_h(\mathbf{R}) = N_h U_h(\mathbf{R})$ [101].

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

$$\hat{H}_{int} = \hat{T}_{int} + \hat{V}_c(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1}), \quad (1.66)$$

где \hat{T}_{int} – оператор кинетической энергии относительного движения носителей. Отметим, что волновая функция (1.64) обеспечивает точность нахождения энергии комплекса соответствующую первому порядку теории возмущений, где в качестве возмущения рассматривается потенциал неоднородности.

Предельный случай 2 (“сильный” потенциал неоднородности)

Второй предельный случай характеризуется тем, что эффективный потенциал неоднородности хотя бы для одного типа носителей заряда является сильным по

сравнению с кулоновским взаимодействием между ними. Иными словами, выполнено хотя бы одно из условий

$$W_e \gg 1 \quad (1.67)$$

или

$$W_h \gg 1, \quad (1.68)$$

то есть, либо взаимодействие электронов [выполнено (1.67)], либо дырок [выполнено (1.68)] с неоднородностью сильнее, чем кулоновское взаимодействие между ними. Тогда координаты электронной и дырочной подсистем комплекса можно разделить, так как одна из подсистем будет “быстрой”, а другая – “медленной”.

Пусть, для определенности, выполнено условие (1.67), но не выполнено (1.68). Тогда электронная подсистема является “быстрой” и описывается следующим гамильтонианом нулевого приближения:

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{H}_{e1i}, \quad (1.69)$$

$$\hat{H}_{e1} = \hat{T}_{e1} + U_e(\boldsymbol{\rho}_e), \quad (1.70)$$

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

$$\Phi_0^e(\boldsymbol{\rho}_{e1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{eN_e}) = \Psi_0^e(\boldsymbol{\rho}_{e1}) \dots \Psi_0^e(\boldsymbol{\rho}_{eN_e}), \quad (1.71)$$

где $\Psi_0^e(\boldsymbol{\rho}_e)$ – собственная функция основного состояния гамильтониана (1.70). То есть, в этом случае, локализация электронов в потенциале неоднородности достаточно сильная для того, чтобы квантование электронов можно было рассматривать независимо друг от друга.

Поскольку дырочная подсистема является “медленной”, ее эффективный гамильтониан получаем путем усреднения полного гамильтониана (1.60) по волновой функции электронной подсистемы (1.71):

$$\hat{H}_h = \sum_{i=1}^{N_h} \hat{H}_{h1i} + \langle \Phi_0^e | \hat{V}_c | \Phi_0^e \rangle, \quad (1.72)$$

$$\hat{H}_{h1} = \hat{T}_{h1} + U_h(\boldsymbol{\rho}_h). \quad (1.73)$$

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

Отметим, что гамильтонианы (1.69) и (1.72) описывают электронную и дырочную подсистемы полностью независимо, так как волновая функция (1.71), входящая в гамильтониан (1.72), определяется исключительно характеристиками одночастичного эффективного локализирующего потенциала U_e .

Выполнение только условия (1.68) аналогичным образом позволяет разделить электронную и дырочную подсистемы. Тогда гамильтониан электронной подсистемы есть:

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{H}_{e1_i} + \langle \Phi_0^h | \hat{V}_c | \Phi_0^h \rangle, \quad (1.74)$$

где

$$\Phi_0^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}) = \Psi_0^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}) \dots \Psi_0^h(\boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}). \quad (1.75)$$

Здесь $\Psi_0^h(\boldsymbol{\rho}_h)$ – собственная функция основного состояния одночастичного гамильтониана (1.73). Гамильтониан дырочной подсистемы будет следующим:

$$\hat{H}_h = \sum_{i=1}^{N_h} \hat{H}_{h1_i}. \quad (1.76)$$

В случае, если условия (1.67) и (1.68) выполнены одновременно, кулоновское взаимодействие между всеми носителями заряда можно рассматривать как возмущение, и координаты электронной и дырочной подсистем также разделяются. Тогда электронная подсистема описывается гамильтонианом (1.69), а дырочная – гамильтонианом (1.76). Заметим, что при выполнении условия (1.67) E_c мало по сравнению с ΔE_e , и вторым слагаемым в гамильтониане (1.74) можно пренебречь. Таким образом, гамильтониан (1.74) описывает электронную подсистему как при выполнении (1.67), так и при выполнении (1.68). Аналогичным образом дырочная подсистема описывается гамильтонианом (1.72) при выполнении любого из условий (1.67) или (1.68).

В результате, если эффективный потенциал неоднородности является сильным по сравнению с кулоновским взаимодействием хотя бы для одного сорта носите-

лей заряда, то переменные в гамильтониане (1.60) можно разделить, а волновую функцию электрон-дырочного комплекса представить в виде:

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}}, \boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}) = \Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}}) \Phi^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}), \quad (1.77)$$

где электронная функция $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}})$ – решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (1.74), а дырочная функция $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}})$ – с гамильтонианом (1.72). Волновая функция (1.77) позволяет вычислить энергию комплекса с точностью не хуже первого порядка теории возмущений, где как возмущение рассматривается кулоновское взаимодействие между электронами [выполнено (1.67)] или дырками [выполнено (1.68)].

1.4.3 Выбор пробной функции

Учитывая вышесказанное, была предложена следующая пробная функция, которая с помощью всего одного подгоночного параметра позволяет осуществить плавный переход между функциями (1.64) и (1.77) и объединить предельные случаи 1 и 2 (нормировочная константа опущена):

$$\begin{aligned} \Psi(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}}, \boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}) &= [\Psi^{C.M.}(\mathbf{R}) \Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})]^\alpha \times \\ &\times \left[\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}}) \Phi^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}) \right]^{1-\alpha}. \end{aligned} \quad (1.78)$$

Здесь α – подгоночный параметр, который имеет смысл меры корреляции движения носителей заряда различных типов: $\alpha = 1$ отвечает предельному случаю 1; $\alpha = 0$ соответствует предельному случаю 2. Действительно, при $\alpha = 1$ пробная функция (1.78) принимает вид

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}}, \boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}) = \Psi^{C.M.}(\mathbf{R}) \Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1}),$$

соответствующий квантованию электрон-дырочного комплекса как единого целого в эффективном потенциале неоднородности; в противоположном пределе $\alpha = 0$ пробная функция имеет вид

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}}, \boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}) = \Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}}) \Phi^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}),$$

соответствующий независимому квантованию электронной и дырочной подсистем комплекса.

В случае, если точности пробной функции (1.78) оказывается недостаточно, предлагается использовать более сложную пробную функцию с четырьмя подгонными параметрами:

$$\begin{aligned} \Psi(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}}, \boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}}) = & [\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})]^{\alpha_R} [\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})]^{\alpha_\rho} \times \\ & \times [\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}})]^{\alpha_e} [\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}})]^{\alpha_h}. \end{aligned} \quad (1.79)$$

Пробная функция (1.79), которая также обеспечивает плавный переход между предельными случаями 1 и 2, обладает значительно более высокой точностью и может использоваться для проверки точности расчетов с функцией (1.78). Действительно, волновые функции $\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})$, $\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})$, $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}})$ и $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}})$, входящие в ее состав, уже найдены при расчете с функцией (1.78) и их нахождение дополнительного расчета не требует. Подгонные параметры в функции (1.79) также имеют ясный физический смысл: α_e и α_h характеризуют независимое квантование подсистем электронов и дырок, а α_ρ и α_R – электрон-дырочный комплекс как целое.

Отметим, что несмотря на то, что функции $\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})$, $\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})$, $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}})$ и $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}})$ в общем случае неизвестны, они не меняются при вариационной процедуре и при фиксированных параметрах системы вычисляются лишь один раз. Кроме того, данные 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 пробных функций (1.78) и (1.79) служит существование локализованных волновых функций $\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})$, $\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \dots, \boldsymbol{\rho}_{N_e+N_h-1})$, $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{e_{N_e}})$ и $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \dots, \boldsymbol{\rho}_{h_{N_h}})$. Обратим внимание на то, что далее в диссертации рассматриваются комплексы, содержащие не более двух одинаковых частиц, основным состоянием которых является синглетная конфигурация спинов

идентичных носителей. Поэтому соответствующие координатные функции должны быть симметризованы. Так как сомножители, входящие в пробные функции, вычисляются независимо друг от друга, симметризация производится отдельно для каждого из них.

1.4.4 Энергия связи экситона, X^+ и X^- -трионов, локализованных в плоскости квантовой ямы на неоднородности ее интерфейса

В данном параграфе вариационный метод, разработанный выше, проиллюстрирован расчетами для двумерных экситона и трионов, локализованных в плоскости квантовой ямы на латеральном потенциале, обусловленном, например, флуктуациями ее интерфейсов. Для демонстрационных целей латеральные потенциалы выбраны параболическими и изотропными. Такая модель может быть использована для описания неоднородностей интерфейсов квантовых ям и для локализации носителей в квантовых точках [141, 142].

Для того, чтобы выделить предельные случаи, в качестве характерных энергий, введенных в параграфе 1.4 и использованных в формулах (1.62), выберем следующие величины: E_c естественно выбрать как энергию кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в свободном двумерном экситоне, которая в объемных боровских единицах (1.2) составляет $E_c = 4$ [143, 144], а в качестве ΔE_e и ΔE_h - расстояния между эквидистантными энергетическими уровнями невзаимодействующих электрона и дырки в параболических потенциалах $U_e(\boldsymbol{\rho}_e)$ и $U_h(\boldsymbol{\rho}_h)$.

Безразмерный гамильтониан (1.60) двумерного экситона таким образом имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{\sigma+1}\Delta_{\rho_e} - \frac{\sigma}{\sigma+1}\Delta_{\rho_h} - \frac{2}{|\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h|} + U_e(\boldsymbol{\rho}_e) + U_h(\boldsymbol{\rho}_h). \quad (1.80)$$

Здесь

$$U_e(\boldsymbol{\rho}_e) = 4(1+\sigma)W_e^2\rho_e^2 \quad (1.81)$$

и

$$U_h(\boldsymbol{\rho}_h) = 4 \left(1 + \frac{1}{\sigma}\right) W_h^2 \rho_h^2 \quad (1.82)$$

– эффективные потенциалы неоднородности для электрона и дырки, а W_e и W_h определены согласно (1.62) и характеризуют жесткость потенциалов.

Пробные функции (1.78) и (1.79) для экситона имеют следующий вид:

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) = [\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho})]^\alpha [\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_e)\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h)]^{1-\alpha} \quad (1.83)$$

и

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) = [\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})]^{\alpha R} [\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho})]^{\alpha \rho} [\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_e)]^{\alpha_e} [\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h)]^{\alpha_h}. \quad (1.84)$$

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

Уравнения Шредингера для нахождения волновых функций центра масс экситона $\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})$ и относительного движения электрона и дырки $\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho})$ в параболическом потенциале решаются аналитически, и соответствующие функции равны:

$$\Psi^{C.M.}(\mathbf{R}) = \exp \left[-\frac{(\sigma + 1)^{3/2}}{\sigma} \sqrt{\sigma W_e^2 + W_h^2} R^2 \right], \quad (1.85)$$

$$\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}) = \exp(-2\rho). \quad (1.86)$$

Одночастичная волновая функция для электрона, $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_e)$, есть решение уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{1}{\sigma + 1} \Delta_{\boldsymbol{\rho}_e} + U_e(\boldsymbol{\rho}_e) + \tilde{V}_c^e(\boldsymbol{\rho}_e) - E_e \right] \Phi^e(\boldsymbol{\rho}_e) = 0, \quad (1.87)$$

где эффективный кулоновский потенциал для электрона, $\tilde{V}_c^e(\boldsymbol{\rho}_e)$, имеет вид

$$\tilde{V}_c^e(\boldsymbol{\rho}_e) = - \left\langle \Psi_0^h(\boldsymbol{\rho}_h) \left| \frac{2}{|\boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h|} \right| \Psi_0^h(\boldsymbol{\rho}_h) \right\rangle. \quad (1.88)$$

Для рассматриваемой системы волновая функция

$$\Psi_0^h(\boldsymbol{\rho}_h) = \exp \left[- \left(1 + \frac{1}{\sigma}\right) W_h \rho_h^2 \right] \quad (1.89)$$

– есть волновая функция основного состояния одиночной дырки в потенциале $U_h(\boldsymbol{\rho}_h)$. Аналогичным образом, волновая функция $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h)$ является решением следующего уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{\sigma}{\sigma+1}\Delta_h + U_h(\boldsymbol{\rho}_h) + \tilde{V}_c^h(\boldsymbol{\rho}_h) - E_h \right] \Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h) = 0, \quad (1.90)$$

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

где

$$\Psi_0^e(\boldsymbol{\rho}_e) = \exp \left[- (1 + \sigma) W_e \rho_e^2 \right] \quad (1.91)$$

есть волновая функция основного состояния одиночного электрона в потенциале $U_e(\boldsymbol{\rho}_e)$. Для вычисления волновых функций $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_e)$ и $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h)$ есть две возможности: прямое численное решение соответствующих одночастичных уравнений Шредингера, либо использование вариационного метода. В диссертации использован второй подход со следующими пробными функциями:

$$\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_e) = \exp \left(-A_e \rho_e - B_e \rho_e^2 \right) \quad (1.92)$$

$$\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h) = \exp \left(-A_h \rho_h - B_h \rho_h^2 \right), \quad (1.93)$$

где $A_{e,h}, B_{e,h}$ – подгоночные параметры. Параметры $A_{e,h}$ описывают локализацию носителей заряда за счет кулоновского взаимодействия с носителями другого типа, а параметры $B_{e,h}$ – за счет взаимодействия с эффективным потенциалом неоднородности. Применение вариационного метода для вычисления функций $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_e)$ и $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h)$ делает возможным получить их в аналитическом виде, что значительно упрощает техническую сторону дальнейших вычислений.

Серия зависимостей энергии связи экситона от параметра, характеризующего эффективный потенциал неоднородности для дырки $E_b^{ex}(W_h)$, полученных при фиксированных значениях параметра W_e при использовании пробных функций (1.83) и (1.84), представлена на рис. 1.12 (а) и 1.12 (b) для отношений эффективных масс электрона и дырки $\sigma = 1$ и $\sigma = 0.3$ соответственно. Такие значения σ были выбраны потому, что $\sigma = 1$ соответствует равенству масс электрона и

дырки, $m_e = m_h$, и облегчает проверку результатов расчета, а $\sigma = 0.3$ лежит в области значений, соответствующей реальным полупроводниковым структурам на основе полупроводников III-V и II-VI. При любых значениях параметров W_e и W_h энергия связи локализованного экситона E_b превышает энергию связи свободного двумерного экситона $E_b^{2D} = 4$. Действительно, при дополнительной локализации электрона и дырки увеличивается эффективность кулоновского притяжения между ними, что и приводит к увеличению энергии связи. Поэтому, для наглядности, в качестве начала отсчета энергии на графиках выбрана энергия связи свободного двумерного экситона.

Расчет показал, что максимальное различие значений энергии связи экситона, полученных с помощью простейшей пробной функций (1.83) с единственным подгоночным параметром и функции (1.84) с четырьмя подгоночными параметрами, не превышает 20%. В предельных случаях 1 и 2 энергии связи экситона, вычисленные с помощью (1.83) и (1.84), практически совпадают, что и ожидалось, исходя из того как пробные функции построены. В промежуточной области погрешность результатов функции (1.83) достигает наибольшего значения, и при некоторых W_e соответствующие зависимости $E_b(W_h)$ даже теряют монотонность (которая не имеет специального физического смысла). Анализ погрешностей позволяет определить условные границы областей реализации предельных случаев 1 [выполнено условие (1.63)], 2 [выполнено условие (1.67) или (1.68)] и промежуточной области. Соответствующие кривые показаны на рисунках 1.12а и 1.12b жирными пунктирными линиями. Граничными выбраны значения W_e и W_h , при которых различие результатов, полученных с использованием пробных функций (1.83) и (1.84), составляет 5%.

В области I, где локализация на неоднородности слабо влияет на внутреннюю структуру экситона, увеличение его энергии связи за счет дополнительной лока-

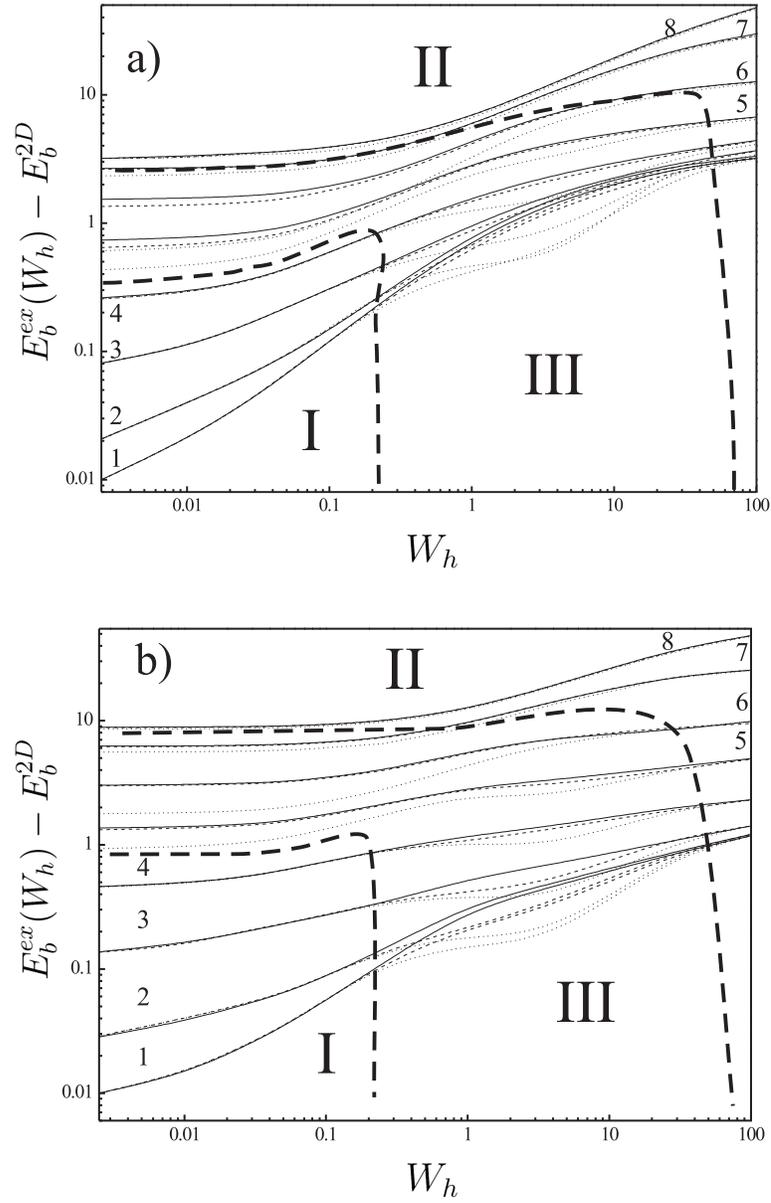


Рис. 1.12: Зависимости энергии связи экситона $E_b(W_h)$ для разных значений W_e . За начало отсчета выбрана энергия связи свободного двумерного экситона E_b^{2D} . Рисунки а) и б) соответствуют различным значениям отношения масс электрона и дырки: а) $\sigma = 1$, б) $\sigma = 0.3$. Кривые 1-8 соответствуют: 1) $W_e = 2.5 \cdot 10^{-3}$, 2) 10^{-2} , 3) $6.25 \cdot 10^{-2}$, 4) 0.25, 5) 1, 6) 4, 7) 25, 8) 10^2 . Сплошные, пунктирные и точечные линии соответствуют результатам расчета с пробными функциями с четырьмя (1.84), двумя (1.95) и одним (1.83) подгоночными параметрами соответственно. Римскими цифрами обозначены области реализации предельных случаев: I – предельный случай 1 [выполнено условие (1.63)], II – предельный случай 2 [выполнено условие (1.67) или (1.68)], III – промежуточная область. Жирными пунктирными линиями показаны условные границы этих областей.

лизации электрона и дырки записывается в виде

$$E_b^{ex} - E_b^{2D} = 4 \left(W_e + W_h - \sqrt{\frac{\sigma W_e^2 + W_h^2}{\sigma + 1}} \right). \quad (1.94)$$

В случае, если $W_e \rightarrow 0$ и $W_h \gg 1$, дырка оказывается сильно локализована за счет взаимодействия с потенциалом неоднородности, а локализация электрона происходит в основном за счет кулоновского притяжения к дырке. В этом предельном случае $E_b^{ex} - E_b^{2D} \approx \sigma E_b^{2D} = 4\sigma$. В противоположном случае $W_h \rightarrow 0$ и $W_e \gg 1$, аналогично $E_b^{ex} - E_b^{2D} \approx 1/\sigma E_b^{2D} = 4/\sigma$. В пределе $\sigma W_e = W_h \gg 1$, когда электрон и дырка локализуются независимо друг от друга, и радиусы их локализации совпадают, $E_b^{ex} - E_b^{2D} \approx 3.55\sqrt{W_h(1+1/\sigma)} - 4 = 3.55\sqrt{W_e(1+\sigma)} - 4$.

Одна из причин более высокой, по сравнению с достигаемой при помощи функции (1.83), точности результата функции (1.84) есть то, что за счет большего количества параметров она позволяет значительно точнее описать поведение волновой функции экситона в промежуточной области III, а также ее асимптотическое поведение при переходе к предельным случаям. Так, отличие параметров α_e , α_h , α_ρ и α_R пробной функции (1.84) от ожидаемых предельных значений ($\alpha_e = \alpha_h = 0$ и $\alpha_\rho = \alpha_R = 1$ в предельном случае 1, и $\alpha_e = \alpha_h = 1$ и $\alpha_\rho = \alpha_R = 0$ в предельном случае 2) позволяет учесть большую часть поправок к энергии следующего порядка. Причем, из-за различия масштабов волновых функций $\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})$, $\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho})$, $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_e)$ и $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h)$, входящих в состав пробной функции (1.84), отличие подгоночных параметров от их ожидаемых предельных значений может оказаться существенным. Наибольшее отличие от предельного значения демонстрирует подгоночный параметр α_ρ , который описывает степень коррелированности относительного движения электрона и дырки вследствие кулоновского взаимодействия между ними. Например, если $\sigma = 1$ и $W_e = W_h \gg 1$, то в результате минимизации получаем $\alpha_\rho \rightarrow 0.65$, вместо ожидаемого $\alpha_\rho \rightarrow 0$. Точность расчетов с пробной функцией (1.83) можно значительно улучшить, если добавить в нее второй подгоночный параметр β :

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) = [\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})]^\alpha [\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho})]^\beta [\Phi_e(\boldsymbol{\rho}_e)\Phi_h(\boldsymbol{\rho}_h)]^{1-\alpha}. \quad (1.95)$$

Результаты расчета с пробной функцией (1.95), имеющей два подгоночных параметра, также показаны на рис. 1.12. Отличие от результатов расчета с четырьмя параметрами составляет уже не более 4% при любых значениях W_e , W_h , а неомонотонный участок в зависимости энергии связи от жесткости потенциала неоднородности пропадает.

Предельные случаи 1 [выполнено условие (1.63)] и 2 [выполнено (1.67) или (1.68)], рассмотренные в параграфах 1.4.2 и 1.4.2, 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 квантуются независимо, каждый - в своем эффективном потенциале. Проанализируем изменение корреляции движения носителей при изменении параметров неоднородности.

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

$$Z(0)/Z(\pi), \quad (1.96)$$

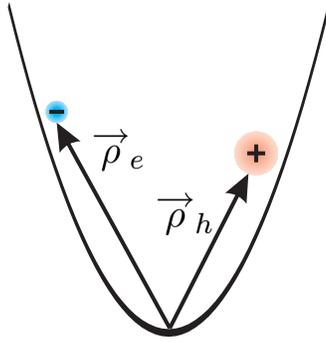
где

$$Z(\varphi) = \int_0^\infty \int_0^\infty |\Psi(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h)|^2 \rho_e d\rho_e \rho_h d\rho_h. \quad (1.97)$$

Здесь $\Psi(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h)$ – волновая функция экситона, φ – угол между радиус-векторами электрона $\boldsymbol{\rho}_e$ и дырки $\boldsymbol{\rho}_h$. Функция $Z(\varphi)$ описывает угловую корреляцию электрона и дырки.

Строение экситона в предельных случаях схематично изображено на рисунке 1.13. В пределе “сильного” локализирующего потенциала 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 “слабого” локализирующего потенциала радиус-вектора электрона и дырки должны быть сонаправленными. Действительно, если эффективный потенциал неоднородности является слабым по сравнению с характерной энергией взаимодействия между электроном и дыркой, то размерами экситона можно пренебречь

“сильная” неоднородность



“слабая” неоднородность



Рис. 1.13: Схематичное строение экситона в предельных случаях “сильного” и “слабого” потенциалов неоднородности.

по сравнению с характерными размерами области, в которой локализован его центр масс ($R \gg \rho$), и $\rho_e \approx \rho_h \approx \mathbf{R}$. Тогда зависимость $Z(\varphi)$ имеет резкий максимум вблизи $\varphi = 0$ и $Z(0)/Z(\pi) \rightarrow \infty$.

Серии зависимостей величины $Z(0)/Z(\pi)$ от W_e при различных W_h , вычисленные с использованием пробной функции с четырьмя подгоночными параметрами (1.84), показаны на рис. 1.14 (а) ($\sigma = 1$) и 1.14 (b) ($\sigma = 0.3$). На рис. 1.14 также показаны границы областей реализации предельных случаев “сильного” и “слабого” потенциалов неоднородности, соответствующие изображенным на рис. 1.12.

Как и ожидалось, в предельном случае 1 ($W_{e,h} \ll 1$) величина $Z(0)/Z(\pi)$ принимает очень большие значения. Это означает высокую степень корреляции движения электрона и дырки, что соответствует квантованию экситона в потенциале неоднородности как единого целого. В предельном случае 2 (выполнено хотя бы одно из условий $W_e \gg 1$ или $W_h \gg 1$) величина $Z(0)/Z(\pi) \rightarrow 1$. Это соответствует независимому квантованию электрона и дырки. Из рисунка видно, что при изменении параметров W_e и W_h значения $Z(0)/Z(\pi)$ меняются плавно и монотонно. Таким образом было проиллюстрировано наличие прямой взаимосвязи между строением экситона и значениями параметров неоднородности W_e и W_h .

Специфическим свойством модельных параболических потенциалов (1.81) и

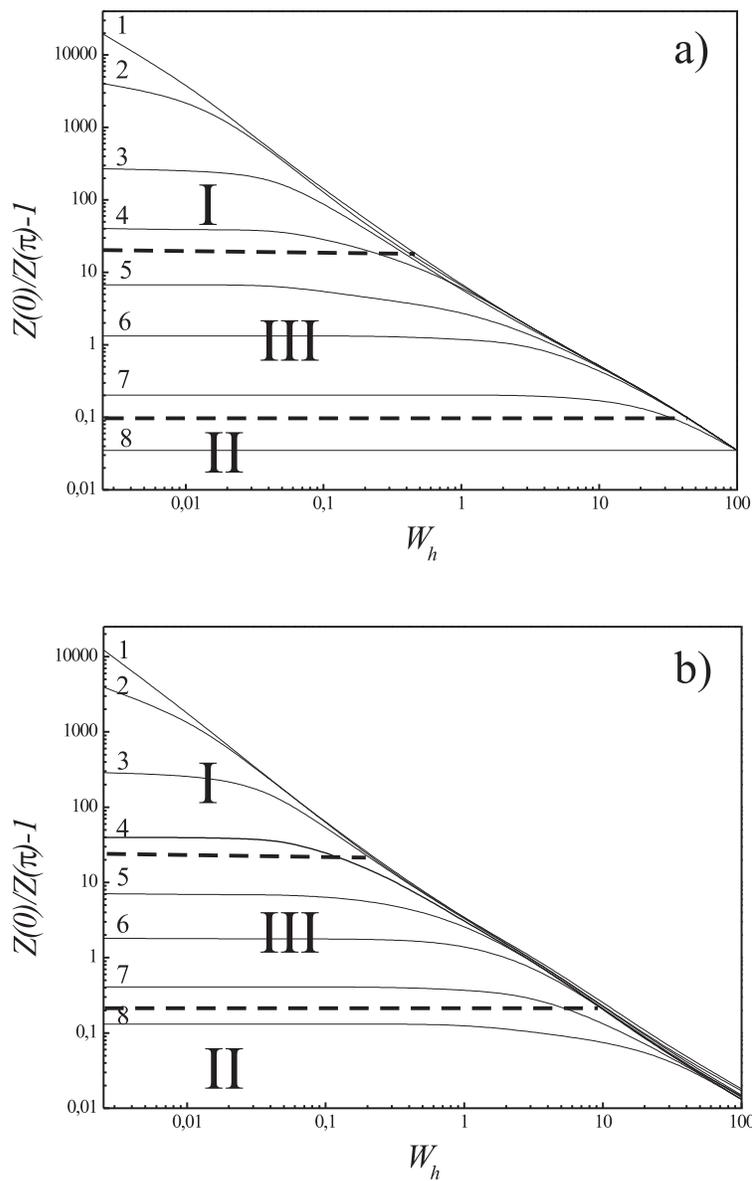


Рис. 1.14: Серия зависимостей $Z(0)/Z(\pi)$ для разных значений W_e . Рисунки а) и б) соответствуют различным значениям отношения масс электрона и дырки: а) $\sigma = 1$, б) $\sigma = 0.3$. Кривые 1-8 соответствуют: 1) $W_e = 2.5 \cdot 10^{-3}$, 2) 10^{-2} , 3) $6.25 \cdot 10^{-2}$, 4) 0.25, 5) 1, 6) 4, 7) 25, 8) 10^2 . Римскими цифрами обозначены области реализации различных предельных случаев: I – предельный случай 1 [выполнено условие (1.63)], II – предельный случай 2 [выполнено условие (1.67) или (1.68)], III – промежуточная область. Жирными пунктирными линиями показаны условные границы этих областей.

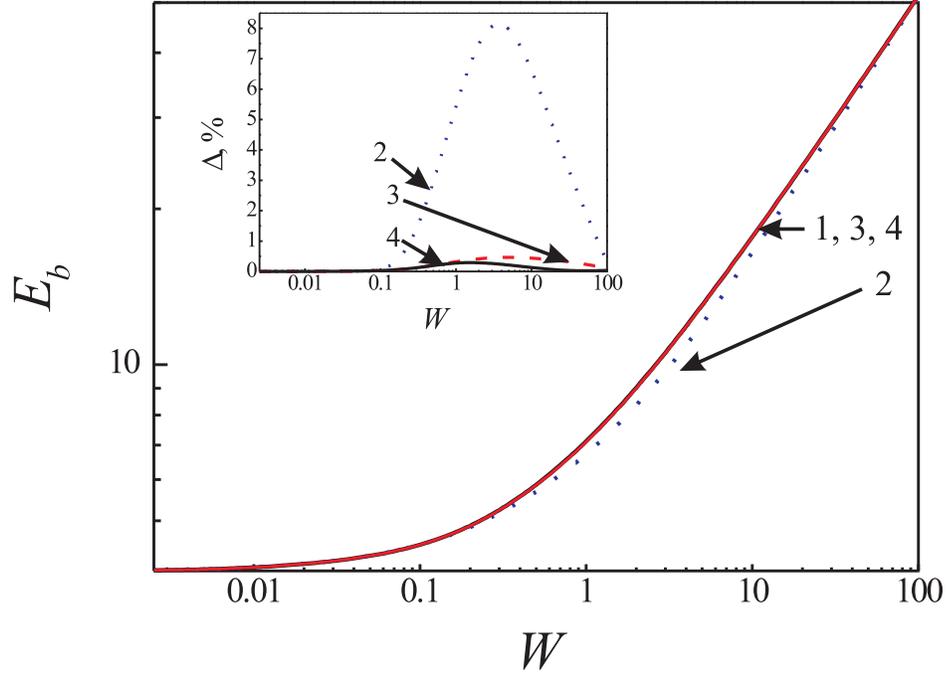


Рис. 1.15: Зависимости энергии связи экситона от $W = W_e = W_h$. Кривая 1 - точная зависимость из [142], кривые 2, 3, 4 - вариационные расчеты с пробными функциями с одним (1.83), двумя (1.95) и четырьмя (1.84) подгоночными параметрами соответственно. Кривые 1, 3 и 4 на рисунке практически не различимы. На врезке к рис. 1.15 показаны зависимости относительной погрешности расчета с использованием пробных функций (1.83), (1.95) и (1.84).

(1.82) при выполнении условия:

$$W_e = W_h = W. \quad (1.98)$$

является возможность разделить переменные \mathbf{R} и $\boldsymbol{\rho}$ в гамильтониане (1.80) и задача может быть легко решена точно [142]. 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, представленную линией 1 на рис. 1.15.

На рис. 1.15 также показаны зависимости $E_b(W)$, полученные с помощью функций с одним (1.83), двумя (1.95) и четырьмя (1.84) подгоночными параметрами. На врезке к рис. 1.15 показаны относительные погрешности результатов функций (1.83) и (1.84). Максимальная погрешность в вычислении энергии связи с при-

менением простейшей однопараметрической пробной функции (1.83), составляет около 10%. В то время как погрешность расчета с функцией (1.84) не превышает 0.5%, и соответствующая зависимость $E_b(W)$ практически сливается с точной. Это оправдывает использование результатов, полученных при помощи (1.84), в качестве точки отсчета для определения точности результатов функции (1.83).

Таким образом, было показано, что волновые функции (1.83) и (1.84) позволяют с хорошей точностью вычислить энергию связи экситона, локализованного в параболическом потенциале, при произвольных значениях жесткости потенциалов для электронов и дырок.

1.4.5 Двумерные X^+ и X^- -трионы, локализованные в параболическом потенциале неоднородности

В данном параграфе с помощью разработанного метода исследован частный случай X^+ и X^- -трионов, локализованных в плоскости квантовой ямы на неоднородности параболической формы. Полученные результаты позволяют объяснить наблюдаемое в экспериментах увеличение энергии связи трионов в узких квантовых ямах по сравнению с результатами расчетов, не учитывающих эффект локализации на неоднородностях квантовых ям.

Для определенности рассмотрим X^- -трион. Согласно (1.60) безразмерный гамильтониан двумерного триона имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{\sigma+1}\Delta_{\rho_{e_1}} - \frac{1}{\sigma+1}\Delta_{\rho_{e_2}} - \frac{\sigma}{\sigma+1}\Delta_{\rho_h} - \frac{2}{|\rho_{e_1} - \rho_h|} - \frac{2}{|\rho_{e_2} - \rho_h|} + \frac{2}{|\rho_{e_1} - \rho_{e_2}|} + U_e(\rho_{e_1}) + U_e(\rho_{e_2}) + U_h(\rho_h). \quad (1.99)$$

Для нахождения энергии связи триона будет использоваться пробная функция с четырьмя подгоночными параметрами (обоснование такого выбора дано ниже):

$$\Psi(\rho_{e_1}, \rho_{e_2}, \rho_h) = [\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})]^{\alpha_R} [\Psi^{int}(\rho_1, \rho_2)]^{\alpha_\rho} [\Phi^e(\rho_{e_1}, \rho_{e_2})]^{\alpha_e} [\Phi^h(\rho_h)]^{\alpha_h}, \quad (1.100)$$

где $\mathbf{R} = (\sigma\rho_{e_1} + \sigma\rho_{e_2} + \rho_h)/(2\sigma+1)$ - радиус-вектор центра масс триона, $\rho_1 = \rho_{e_1} - \rho_h$ и $\rho_2 = \rho_{e_2} - \rho_h$ - координаты относительного движения электронов и дырки, α_R ,

α_ρ , α_e , α_h – подгоночные параметры. Параметры α_R и α_ρ характеризуют степень коррелированности триона как целого, параметры α_e и α_h характеризуют степень независимости его электронной и дырочной подсистем.

Рассмотрим волновые функции $\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})$, $\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$, $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \boldsymbol{\rho}_{e_2})$ и $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h)$, использующиеся в расчете. Функция

$$\Psi^{C.M.}(\mathbf{R}) = \exp\left(-\frac{\sigma+1}{\sigma}\sqrt{2\sigma+1}\sqrt{2\sigma W_e^2 + W_h^2 R^2}\right) \quad (1.101)$$

описывает квантование движения центра масс триона. Она является точным решением соответствующего уравнения Шредингера [ср. с (1.85)].

Функция $\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$ является решением уравнения Шредингера со следующим гамильтонианом, описывающим движение электронов относительно дырки:

$$\hat{H}_{int} = -\Delta_{\rho_1} - \Delta_{\rho_2} - \frac{2\sigma}{\sigma+1}\nabla_{\rho_1}\nabla_{\rho_2} - \frac{2}{\rho_1} - \frac{2}{\rho_2} + \frac{2}{|\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2|}. \quad (1.102)$$

Это уравнение решалось вариационным методом с пробной функцией

$$\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) = \frac{\exp(-A\rho_1 - B\rho_2) + \exp(-A\rho_2 - B\rho_1)}{1 + d(|\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2| - R_0)^2}, \quad (1.103)$$

где A , B , d и R_0 – подгоночные параметры. Параметры A и B отвечают за орбитальное движение электронов, локализованных на дырке за счет кулоновского взаимодействия, параметр d описывает колебания электронов относительно друг друга, параметр R_0 – среднее расстояние между идентичными носителями. Пробная функция (1.103) является несколько упрощенной функцией из работы [122] и обеспечивает хорошую точность описания внутреннего движения носителей в двумерных трионах обоих типов при произвольном отношении масс электрона и дырки (точность вычисления энергии связи составляет 5 – 7%).

Функция $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \boldsymbol{\rho}_{e_2})$ описывает движение электронной подсистемы в эффективном потенциале, равном сумме потенциалов неоднородности, кулоновского отталкивания между электронами и усредненного потенциала их кулоновского взаимодействия с дыркой. Она является решением уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{1}{\sigma+1}\Delta_{\rho_{e_1}} - \frac{1}{\sigma+1}\Delta_{\rho_{e_2}} + U_e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}) + U_e(\boldsymbol{\rho}_{e_2}) + \tilde{V}_c^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \boldsymbol{\rho}_{e_2}), \quad (1.104)$$

где эффективный кулоновский потенциал для электронов, $\tilde{V}_c^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \boldsymbol{\rho}_{e_2})$, имеет вид

$$\tilde{V}_c^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \boldsymbol{\rho}_{e_2}) = - \left\langle \Psi_0^h(\boldsymbol{\rho}_h) \left| \frac{2}{|\boldsymbol{\rho}_{e_1} - \boldsymbol{\rho}_h|} + \frac{2}{|\boldsymbol{\rho}_{e_2} - \boldsymbol{\rho}_h|} \right| \Psi_0^h(\boldsymbol{\rho}_h) \right\rangle + \frac{2}{|\boldsymbol{\rho}_{e_1} - \boldsymbol{\rho}_{e_2}|}, \quad (1.105)$$

где функция $\Psi_0^h(\boldsymbol{\rho}_h)$ в соответствии с общим методом определяется выражением (1.89). $\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \boldsymbol{\rho}_{e_2})$ также вычисляется вариационным методом со следующей пробной функцией:

$$\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}, \boldsymbol{\rho}_{e_2}) = \frac{\exp(-A_e \rho_{e_1} - B_e \rho_{e_2}) + \exp(-A_e \rho_{e_2} - B_e \rho_{e_1})}{1 + d(|\boldsymbol{\rho}_{e_1} - \boldsymbol{\rho}_{e_2}| - R_{0e})^2}, \quad (1.106)$$

где A_e , B_e , d_e и R_{0e} – подгоночные параметры, физический смысл которых вполне аналогичен соответствующим параметрам функции (1.103).

Наконец, функция $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h)$ является решением уравнения Шредингера с гамильтонианом, учитывающем взаимодействие дырки с неоднородностью структуры и электронами:

$$\hat{H} = -\frac{\sigma}{\sigma + 1} \Delta_{\rho_h} + U_h(\boldsymbol{\rho}_h) + \tilde{V}_c^h(\boldsymbol{\rho}_h), \quad (1.107)$$

где эффективный кулоновский потенциал для дырки, $\tilde{V}_c^h(\boldsymbol{\rho}_h)$, имеет вид

$$\tilde{V}_c^h(\boldsymbol{\rho}_h) = - \left\langle \Psi_0^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}) \Psi_0^e(\boldsymbol{\rho}_{e_2}) \left| \frac{2}{|\boldsymbol{\rho}_{e_1} - \boldsymbol{\rho}_h|} + \frac{2}{|\boldsymbol{\rho}_{e_2} - \boldsymbol{\rho}_h|} \right| \Psi_0^e(\boldsymbol{\rho}_{e_1}) \Psi_0^e(\boldsymbol{\rho}_{e_2}) \right\rangle, \quad (1.108)$$

а функция $\Psi_0^e(\boldsymbol{\rho}_e)$ определяется выражением (1.91). Мы вычисляем $\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h)$ вариационным методом с пробной функцией

$$\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_h) = \exp(-A_h \rho_h - B_h \rho_h^2), \quad (1.109)$$

где A_h и B_h – подгоночные параметры. Параметр A_h описывает локализацию дырки за счет взаимодействия с электроном, а параметр B_h – в параболическом потенциале дефекта.

Пробные функции и уравнения для них для X^+ триона получаются путем замены индексов $e \leftrightarrow h$ и $\sigma \rightarrow 1/\sigma$. Действительно, при замене $\sigma \rightarrow 1/\sigma$ эффективные массы электрона m_e и дырки m_h меняются местами, а замена $e \leftrightarrow h$ меняет местами координаты электрона и дырки. В итоге пробная функция для X^+ -триона имеет вид:

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \boldsymbol{\rho}_{h_2}, \boldsymbol{\rho}_e) = [\Psi^{C.M.}(\mathbf{R})]^{\alpha_R} [\Psi^{int}(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)]^{\alpha_\rho} [\Phi^h(\boldsymbol{\rho}_{h_1}, \boldsymbol{\rho}_{h_2})]^{\alpha_h} [\Phi^e(\boldsymbol{\rho}_e)]^{\alpha_e}, \quad (1.110)$$

где $\mathbf{R} = (\sigma \boldsymbol{\rho}_e + \boldsymbol{\rho}_{h_1} + \boldsymbol{\rho}_{h_2}) / (\sigma + 2)$ - радиус-вектор центра масс триона, $\boldsymbol{\rho}_1 = \boldsymbol{\rho}_{h_1} - \boldsymbol{\rho}_e$ и $\boldsymbol{\rho}_2 = \boldsymbol{\rho}_{h_2} - \boldsymbol{\rho}_e$ - координаты относительного движения дырок и электрона.

По определению, энергиями связи X^- и X^+ -трионов называют следующие величины [см. например [106]]:

$$E_b^- = E_{ex} + E_e - E_{tr}^-, \quad (1.111)$$

$$E_b^+ = E_{ex} + E_h - E_{tr}^+, \quad (1.112)$$

где E_{ex} - полная энергия экситона, $E_{e,h}$ - энергия одиночного электрона (дырки), локализованного на неоднородности, E_{tr}^- и E_{tr}^+ - полные энергии X^- - и X^+ -трионов. В выражения для энергий связи трионов (1.111) и (1.112) входит разница полных энергий экситона и триона, вычисляемых вариационным методом. Поскольку при вычитании двух сравнимых величин, относительная погрешность конечного результата может существенно возрасти, для сохранения приемлемой точности расчета необходимо повышение точности вычисления каждой из величин, входящих в формулы (1.111) и (1.112). Кроме этого, для повышения надежности результата, пробные волновые функции для трионов и экситонов необходимо выбрать так, чтобы они учитывали различные эффекты одинаковым образом. Поэтому и для экситона и для трионов были выбраны пробные функции с четырьмя подгоночными параметрами (1.84), (1.100) и (1.110).

На рисунках 1.16(a) и 1.16(b) показаны рассчитанные зависимости энергий связи X^- и X^+ -трионов от параметров эффективных локализующих потенциалов неоднородности W_e и W_h , вычисленные при отношении масс $\sigma = 0.3$. В отличие от энергии связи экситона, показанной на рис. 1.12, энергии связи трионов E_b^- и E_b^+ зависят от параметров W_e и W_h немонотонно, причем поведение E_b^- и E_b^+ различается. Зафиксируем, например, значение параметра W_e . Тогда с ростом W_h дырка в X^- -трионе становится более локализованной, и ее притяжение к электронам становится более эффективным, и, как следствие, энергия связи X^- -триона возрастает. С другой стороны, в X^+ -трионе две дырки при увеличении W_h при фиксированном W_e сильнее прижимаются друг к другу вследствие чего резко

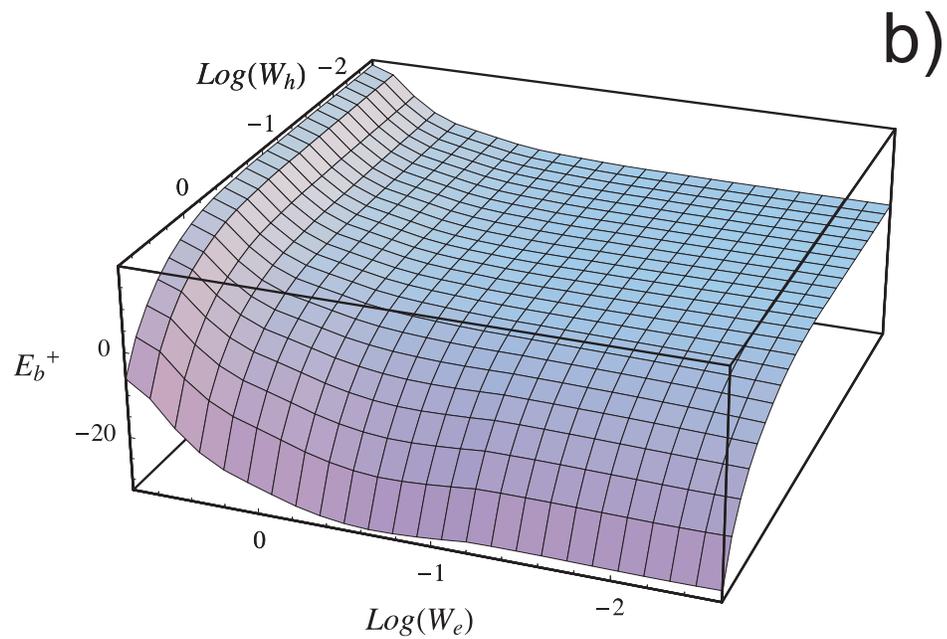
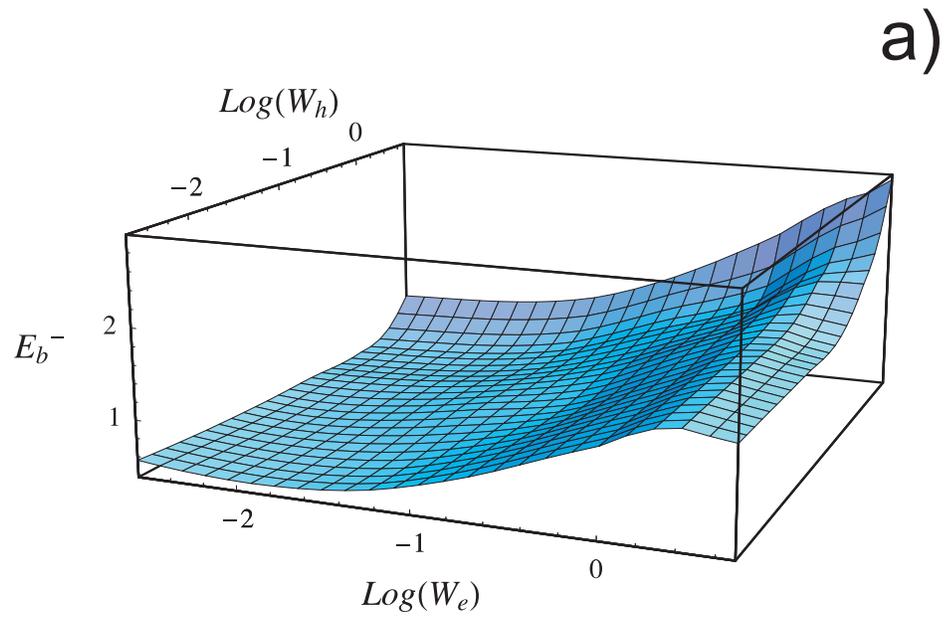


Рис. 1.16: Энергии связи X^- (a) и X^+ -трионов (b) как функции параметров потенциала неоднородности W_e и W_h , вычисленные для отношения эффективных масс электрона и дырки $\sigma = 0.3$

возрастает их отталкивание, что ведет к уменьшению энергии связи X^+ -триона. Таким образом, с ростом W_h энергия связи X^- -триона монотонно возрастает, а энергия связи X^+ -триона монотонно убывает. При фиксированном значении W_h зависимость E_b^- от W_e немонотонна. Это связано с тем, что с ростом W_e возрастает эффективность обменного взаимодействия между электронами, что сначала ведет к росту энергии связи X^- -триона. При дальнейшем увеличении W_e вклад кулоновского отталкивания между электронами преобладает, и энергия связи уменьшается. В случае X^+ -триона при фиксированном значении W_e немонотонности в зависимости E_b^+ от W_h при $\sigma = 0.3$ не наблюдается. Это объясняется большей массой дырки и, соответственно, меньшей ролью обменного взаимодействия.

В предельном случае “слабых” локализирующих потенциалов ($W_e, W_h \ll 1$) энергии связи обоих типов трионов стремятся к их значениям для свободных двумерных комплексов соответствующего типа. При этом $E_b^+ > E_b^-$ в соответствие с работой [122]. В этом пределе взаимодействие с неоднородностью может быть учтено по теории возмущений, а увеличение энергий связи X^- и X^+ -трионов представлено в виде в виде

$$\Delta E_b^- = 4 \left(\sqrt{\frac{\sigma W_e^2 + W_h^2}{\sigma + 1}} + W_e - \sqrt{\frac{2\sigma W_e^2 + W_h^2}{2\sigma + 1}} \right) \quad (1.113)$$

и

$$\Delta E_b^+ = 4 \left(\sqrt{\frac{\sigma W_e^2 + W_h^2}{\sigma + 1}} + W_h - \sqrt{\frac{\sigma W_e^2 + 2W_h^2}{\sigma + 2}} \right), \quad (1.114)$$

соответственно.

Из рис. 1.16 видно, что при разных соотношениях между W_e и W_h соотношение между величинами энергий связи X^+ и X^- -трионов может быть разным. Например, если выполнено условие $W_e \gg \max(1, W_h)$, то E_b^- больше чем E_b^+ , в противоположном пределе [$W_h \gg \max(1, W_e)$] X^- -трион имеет большую энергию связи. Расчет показывает, что при некоторых значениях параметров энергия связи триона может стать отрицательной. Это происходит при $W_e \gg 1 \gg W_h$ для X^- -триона и при $W_e \ll 1 \ll W_h$ для X^+ -триона. При таких значениях пара-

метров два идентичных носителя заряда оказываются сильно локализованными и кулоновское отталкивание между ними не может быть скомпенсировано обменным взаимодействием и притяжением третьему носителю заряда. Несмотря на то, что в случае $E_b^-(E_b^+) < 0$ и соответствующая спектральная линия по энергии лежит выше экситонной, все три носителя остаются локализованными в потенциале неоднородности. Это является следствием использования параболического потенциала в качестве модельного для описания неоднородности: в нем все носители заряда локализованы при любой энергии.

Если выполнено условие $\sigma W_e = W_h \gg 1$, носители заряда в потенциале неоднородности квантуются независимо, а размеры областей, на которых локализованы их волновые функции оказывается равными. Тогда величины энергий связи трионов обоих типов $E_b^{+,-} \ll 1$. Действительно, в этом случае энергии связи трионов в первом порядке теории возмущений по кулоновскому взаимодействию равны нулю. Расчетные значения энергий связи отличаются от нуля лишь в меру учета предложенной пробной функцией поправок более высоких порядков. В предельных случаях точность вычисления энергии связи X^+ и X^- -трионов с помощью пробных функций (1.100) и (1.110) можно оценить как 5 – 10% из сопоставления вариационного расчета с асимптотиками, полученными по теории возмущений. В промежуточной области точность результата может быть несколько меньше.

Приведем оценку изменения энергий связи трионов за счет дополнительной локализации для реалистичных величин параметров неоднородности. Рассмотрим структуру с квантовой ямой на основе GaAs, содержащую неоднородность, в которой ширина ямы увеличивается на один монослой. Пусть ее радиус составляет 270 Å. В работе [106] продемонстрировано, что такой неоднородности в узкой квантовой яме можно сопоставить прямоугольный потенциал высотой 10 meV для электрона и 15 meV для дырки. В разработанной модели такой потенциал соответствует значениям $W_e \approx 0.08$ и $W_h \approx 0.008$ (эти значения выбирались так, чтобы энергии локализации электронов и дырок в прямоугольном и параболическом по-

тенциалах совпадали). В таком потенциале прирост энергии связи экситона, X^+ и X^- -трионов составляет 5%, 15% и 80% от соответствующих значений для свободных двумерных комплексов.

Эти величины меньше, чем полученные в [106], что объясняется тем, что в [106] рассмотрена квантовая яма конечной ширины, в которой энергии связи электрон-дырочных комплексов, вычисленные без учета локализации на неоднородности, меньше соответствующих значений для идеально двумерной модели, использованной в диссертации. Однако сами величины прироста энергий связи определяются неоднородностью, поэтому можно ожидать, что для двух разных моделей они окажутся сопоставимыми. Действительно, энергии связи экситона, X^+ и X^- -трионов, полученные в нашем расчете, увеличиваются за счет локализации комплексов на 1.17 meV, 0.44 meV и 1.67 meV соответственно. Это отличается от результатов [106] на 20–25% и является хорошим показателем при сравнении результатов расчетов, полученных для неоднородностей интерфейса различной формы.

Таким образом, разработанный метод позволяет вычислить энергию связи основного состояния простейших электрон-дырочных комплексов с хорошей точностью и объяснить увеличение энергии связи X^- -триона, наблюдаемое экспериментально (см. [108] и ссылки приведенные там).

Аналогичным образом можно описать электрон-дырочные комплексы, локализованные на флуктуациях квантовых проволок, соответствующие расчеты приведены в работе [A6]. Метод, предложенный для составления пробных функций кулоновских комплексов, локализованных на неоднородностях интерфейсов наноструктур, также может быть использован для расчета энергий связи комплексов в наносистемах без неоднородностей в ситуациях, когда можно выделить предельные случаи, в которых задача упрощается.

1.5 Краткие итоги

В главе 1 получены следующие основные результаты:

- Развита вариационный подход для расчета энергий связи синглетного и триплетного состояний трионов в цилиндрически-симметричной квантовой проволоке во всем диапазоне величин отношения эффективных масс электрона и дырки $\sigma = m_e/m_h$. Применимость предложенного метода проконтролирована при помощи численной диагонализации гамильтонианов экситона и трионов. Показано, что в соответствующей реальным полупроводниковым структурам области значений параметра $\gamma = \ln(a_B/a) \gtrsim 1$, где a – эффективный радиус квантовой проволоки, а a_B – боровский радиус объемного экситона, зависимость отношения энергий связи триона и экситона от γ может быть аппроксимирована линейной функцией, с коэффициентами, зависящими от σ .
- В пределе малого отношения масс электрона и дырки в адиабатическом приближении исследована структура возбужденных состояний X^+ -триона, локализованного в идеальной квантовой проволоке. Изучены семейства состояний, соответствующие основному и первому возбужденному состоянию электрона в потенциале дырок. Путем сопоставления с точными результатами показано, что адиабатическое приближение применимо при $m_e/m_h \lesssim 0.2$.
- Предложен универсальный метод построения пробных функций с небольшим числом подгоночных параметров, позволяющих найти энергию связи основного состояния электрон-дырочных комплексов, локализованных на неоднородностях интерфейсов квантовых ям и квантовых проволок, с хорошей точностью. Указанные функции могут принимать формы, соответствующие предельным случаям, допускающим разделение переменных в соответствующем уравнении Шредингера, и плавно интерполируют между ними. На примере неоднородности с эффективным потенциалом параболической формы вычислены зависимости энергий связи экситона, X^+ и X^- -трионов от параметров, характеризующих неоднородность, в широком диапазоне их значений. Произведена оценка точности полученных результатов.

- Показано, что энергии связи экситона монотонно зависят от параметров, характеризующих отношение характерных энергий размерного квантования носителей заряда, локализованных на неоднородностях интерфейсов квантовых ям или квантовых проволок, к характерной энергии кулоновского взаимодействия между ними. Энергии связи трионов могут демонстрировать немонотонное поведение. Продемонстрировано, что дополнительная локализация на неоднородности влияет на энергию связи X^- -триона сильнее по сравнению с X^+ -трионом за счет меньшей эффективной массы электронов.
- Продемонстрировано, что наблюдающееся в экспериментах увеличение энергии связи трионов в узких квантовых ямах, а также в квантовых проволоках, по сравнению с предсказанными теорией для идеальных структур, может быть объяснено их локализацией на неоднородностях интерфейсов.

Глава 2

Связанные состояния в сложной валентной зоне и эффект Зеемана на дырках

2.1 Сложная структура валентной зоны полупроводников III-V и II-VI (обзор)

В классических полупроводниках таких, как GaAs или CdTe и им подобные, зона проводимости формируется, главным образом, атомными орбиталями s -типа. Орбитальная часть блоховской амплитуды зоны проводимости в центре зоны Бриллюэна (Γ -точке) является инвариантом. С учетом спина в центре зоны Бриллюэна состояния электрона проводимости оказываются двукратно вырожденными, а по мере увеличения абсолютной величины квазиволнового вектора k спиновое расщепление возникает пропорционально кубу волнового вектора [1, 145, 146]. Напротив, валентная зона сформирована из атомных орбиталей p -типа. С учетом спина, но без учета спин-орбитальной связи состояния вершины валентной зоны шестикратно вырождены, а учет спин-орбитального взаимодействия приводит к расщеплению состояний на дублет и квадруплет [1, 146, 147, 148], подобно тому, как p -состояния атома расщепляются на состояния с полным моментом $J = 3/2$ и $J = 1/2$. В кристаллах с решеткой цинковой обманки эти состояния преобразуются по неприводимым представлениям Γ_8 и Γ_7 точечной группы T_d , соответственно.

Здесь и далее используются обозначения, введенные в [149].

В наиболее распространенных полупроводниковых соединениях, в частности, в системах III-V и II-VI с кубической симметрией, состояния вершины валентной зоны формируются из блоховских функций, обладающих полным моментом $J = 3/2$ (представление Γ_8). Четверка этих состояний расщепляется при $k \neq 0$, поскольку даже в сферически-симметричном приближении хорошим квантовым числом оказывается лишь проекция момента на волновой вектор. Как правило, в объемных материалах эффективная масса дырок с проекциями момента $\pm 3/2$ на направление волнового вектора (зона тяжелых дырок) значительно превосходит массу состояний с проекциями $\pm 1/2$ (зона легких дырок). Кубическая симметрия кристаллов проявляется в гофрировке валентной зоны – зависимости масс дырок от направления волнового вектора, а отсутствие центра инверсии – в линейных и кубических по волновому вектору спин-зависимых слагаемых, которые полностью снимают вырождение дырочных состояний при $k \neq 0$ [150].

Как правило спин-орбитальное расщепление валентной зоны Δ , т.е. энергетический зазор между подзонами Γ_8 и Γ_7 , велико и составляет сотни миллиэлектронвольт. Это позволяет при исследовании кулоновских эффектов в объемных материалах и наноструктурах в большинстве случаев рассматривать подзоны Γ_8 и Γ_7 независимо. Исключение, в частности, составляют кристаллы закиси меди, см. главу 5. Состояния подзоны Γ_8 принято описывать в рамках гамильтониана Латтинжера, который можно представить в следующем виде [147, 151, 1]:

$$\mathcal{H}_L = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(1 + \frac{5\gamma}{2}\right) k^2 - 2\gamma_2 \sum_{\alpha} \{k_{\alpha}^2 J_{\alpha}^2\} - 2\gamma_3 \sum_{\alpha \neq \beta} \{J_{\alpha} J_{\beta}\} k_{\alpha} k_{\beta} \right], \quad \alpha, \beta = x, y, z. \quad (2.1)$$

Здесь γ_2 и γ_3 – параметры Латтинжера, J_{α} – компоненты оператора углового момента $3/2$, \mathbf{k} – оператор волнового вектора дырки, \mathbf{r} – радиус-вектор дырки, $\mathbf{k} = -i\partial/\partial\mathbf{r}$, фигурные скобки обозначают симметризованное произведение операторов: $\{k_{\alpha} k_{\beta}\} = (k_{\alpha} k_{\beta} + k_{\beta} k_{\alpha})/2$.

Соответственно, задачи о размерном квантовании дырок в структурах с кван-

товыми ямами, проволоками и точками, а также об исследовании экситонных эффектов оказываются нетривиальными благодаря матричной структуре гамильтониана. Для ряда модельных случаев найдены удобные аналитические решения, в частности, для структур с квантовыми ямами с прямоугольными барьерами и сферически-симметричных квантовых точек [152, 153, 154, 155]. Для кулоновских комплексов, в частности, для дырок, связанных на акцепторах, и экситонов детально проанализированы предельные случаи и имеется ряд достаточно эффективных приближенных методов [156, 157, 158, 159, 160]. В общем случае, однако, каждая конкретная задача требует отдельного анализа. Особенно интересными и необычными являются эффекты конкуренции размерного квантования и кулоновского взаимодействия.

В данной главе, написанной по результатам работ [A7] и [A8], приведено решение следующих задач:

- Проанализировано влияние локализации на смешивание состояний тяжелых и легких дырок в наносистемах и показано, что энергии связи кулоновских комплексов могут немонотонно зависеть характерного размера области локализации
- Развита теория эффекта Зеемана для дырок, локализованных в наноструктурах, квантовых ямах, проволоках и точках. Сопоставлению результатов, полученных развитыми здесь методами, и экспериментальных данных посвящена следующая глава диссертации.

2.2 Энергия связи акцепторной примеси в наноструктурах

2.2.1 Постановка задачи

Как правило, переход от объемных материалов к низкоразмерным структурам сопровождается усилением межчастичного взаимодействия и увеличения энергий

связи локализованных носителей заряда и их комплексов. Здесь будет продемонстрировано, что в системах со сложной структурой зон размерное квантование может приводить к уменьшению энергии связи кулоновских комплексов. В качестве примера рассматривается нейтральная акцепторная примесь (A^0), представляющая собой комплекс, состоящий из дырки, локализованной на отрицательно заряженном центре. Акцепторные примеси в значительной мере определяют оптические свойства вблизи края поглощения в структурах p -типа в объемных материалах [161, 156, 157, 162, 163, 164] и квантовых ямах [165, 166].

Напомним, что в рамках модели простой зоны энергии связи водородоподобного комплекса в объемном материале, идеальной двумерной квантовой яме и в квантовой проволоке малого радиуса составляют [13, 15, 110], см. также гл. 1:

$$E_b^{3D} = \frac{e^4 m_{3D}}{2\hbar^2 \varepsilon^2}, \quad (2.2a)$$

$$E_b^{2D} = \frac{2e^4 m_{2D}}{\hbar^2 \varepsilon^2}, \quad (2.2b)$$

$$E_b^{1D} = \frac{2e^4 m_{1D}}{\hbar^2 \varepsilon^2} \ln^2 \left(\frac{a_B}{R} \right), \quad (2.2c)$$

где e – заряд электрона, ε – статическая диэлектрическая постоянная, m_{3D} , m_{2D} , m_{1D} – эффективные массы в объеме, в плоскости квантовой ямы и вдоль оси квантовой проволоки, соответственно, R – радиус квантовой проволоки, $a_B = \hbar^2 \varepsilon / m_{1D} e^2$ – эффективный боровский радиус.

Считается общепринятым, что при переходе от объемного материала к низкоразмерной структуре энергия связи водородоподобного комплекса растет за счет увеличения эффективности кулоновского взаимодействия [15]. Например, как видно из формул (2.2a) – (2.2c), если зона простая и, соответственно, эффективные массы носителей заряда в объемном материале, в плоскости квантовой ямы и вдоль оси квантовой проволоки равны, $m_{3D} = m_{2D} = m_{1D}$, то энергия связи комплекса при переходе от объемного материала к двумерной системе увеличивается в 4 раза [15], а при переходе к квазиодномерной – логарифмически расходится [110],[A1] и гл. 1. При этом, так как увеличение энергии связи с уменьшением

области локализации при неизменной эффективной массе происходит только за счет увеличения эффективности кулоновского взаимодействия, то энергия связи монотонным образом зависит от размера системы.

Для дырки в сложной валентной зоне ситуация усложняется. Локализация дырки в квантовой яме или в квантовой проволоке приводит, как правило, к уменьшению её эффективной массы. Это, в свою очередь, может приводить к уменьшению энергии связи дырки на акцепторе. Таким образом, уменьшение размеров системы приводит к двум противоположным эффектам: усилению кулоновского взаимодействия, приводящему в росту энергии связи акцептора, и уменьшению эффективной массы, напротив, приводящему к ее уменьшению. Следовательно, в некоторых случаях возможно появление немонотонной зависимости энергии связи акцептора от размеров структуры, а также уменьшение энергии связи акцептора в узкой квантовой яме по сравнению с объемным материалом. Оценки по формулам (2.2a) и (2.2b) показывают, что, например, для параметров InAs выполнено соотношение $E_b^{2D} < E_b^{3D}$, т.е. локализация в узкой по сравнению с размером объемного акцептора квантовой яме приводит к уменьшению энергии связи акцептора.

Ниже проводится детальное исследование влияния локализации в наноструктурах на энергию связи акцептора в рамках вариационного метода, учитывающего сложную структуру валентной зоны. Рассмотрены переходы от объемного материала к двумерной квантовой яме и к квантовой проволоке малого радиуса.

2.2.2 Модель

Рассмотрим дырочные состояния, относящиеся к представлению Γ_8 точечной группы T_d (тяжелые и легкие дырки). Спин-орбитальное расщепление валентной зоны предполагается существенно большим чем все остальные характерные энергии системы. В граничных условиях здесь не учитываются члены, приводящие к смешиванию тяжелых и легких дырок в квантовых ямах с резкой границей при нулевом волновом векторе дырки в плоскости ямы. Их учет не приводит к качественному и заметному количественному изменению результатов для энергий

связи [167, 168], но, в тоже время, необходим для изучения тонкой структуры акцепторных состояний. Зонные параметры и диэлектрическая постоянная полагаются одинаковыми внутри квантовой ямы или проволоки и вне ее. Считается, что акцептор расположен в центре квантовой ямы или на оси квантовой проволоки.

Состояния дырки, взаимодействующей с акцептором в квантовой яме (проволоке), описываются в рамках сферически-симметричного приближения для безразмерного гамильтониана Латтинжера (ср. с (2.1) при $\gamma_2 = \gamma_3$):

$$\hat{H} = \left(1 + \frac{5\gamma}{2\gamma_1}\right) k^2 - \frac{2\gamma}{\gamma_1} \sum_{\alpha,\beta} \{k_\alpha k_\beta\} \{J_\alpha J_\beta\} - \frac{2}{r} + V_{ext}(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

в который также включены кулоновское притяжение дырки к заряженному центру (член $-2/r$) и потенциал квантовой ямы (проволоки), $V_{ext}(\mathbf{r})$. В качестве единиц измерения энергии и длины используются эффективные Ридберг, $Ry^* = m_0 e^4 / 2\gamma_1 \varepsilon^2 \hbar^2$, и боровский радиус, $a_B^* = \hbar^2 \gamma_1 \varepsilon / m_0 e^2$, где m_0 – масса свободного электрона. Далее будут рассмотрены два вида потенциала квантовой ямы (проволоки), $V_{ext}(\mathbf{r})$: параболический, $V_1^{well(wire)}$, и прямоугольный с бесконечным барьером, $V_2^{well(wire)}$, соответственно:

$$V_1^{well}(z) = \kappa z^2, \quad V_1^{wire}(\rho) = \kappa \rho^2, \quad (2.4a)$$

$$V_2^{well}(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq \frac{L}{2} \\ \infty, & |z| > \frac{L}{2} \end{cases}, \quad (2.4b)$$

$$V_2^{wire}(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho \leq R \\ \infty, & \rho > R \end{cases}, \quad (2.4c)$$

где z – координата вдоль оси роста квантовой ямы, ρ – координата в плоскости квантовой ямы и в поперечном сечении квантовой проволоки, κ – жесткость потенциала квантовой ямы (проволоки), L – ширина квантовой ямы, R – радиус квантовой проволоки. Считается что ось роста квантовой ямы и ось квантовой проволоки направлены вдоль направления $z \parallel [001]$.

Для построения пробной волновой функции для вычисления энергии связи дырки, локализованной на акцепторе, мы будем действовать согласно методу, развитому в гл. 1. Выделим предельные случаи, в которых общий вид волновой функ-

ции известен из физических соображений. В рассматриваемой задаче таких пределов два. Первым из них является случай, когда энергия размерного квантования одиночной дырки в квантовой яме или проволоке мала по сравнению с энергией связи объемного акцептора. Тогда структура волновой функции акцептора определяется, в основном, кулоновским взаимодействием дырки с заряженным центром. Второй предельный случай соответствует узкой квантовой яме или тонкой квантовой проволоке, когда характерная энергия размерного квантования дырки велика по сравнению с характерной энергией кулоновского взаимодействия. В этом пределе движение дырки определяется кулоновским взаимодействием лишь в тех направлениях, в которых движение носителей заряда свободно.

Предельный случай объемного акцептора

В предельном случае объемного материала, $V_{ext}(\mathbf{r}) \rightarrow 0$, волновая функция основного состояния акцептора имеет следующий вид [156] (здесь и далее нормировочные константы опущены):

$$\begin{aligned} \Psi_{3D}(\mathbf{r}) = & f(r)|L = 0, J = 3/2, F = 3/2, F_z = \pm 3/2\rangle \\ & + g(r)|L = 2, J = 3/2, F = 3/2, F_z = \pm 3/2\rangle, \end{aligned} \quad (2.5)$$

где $f(r)$ и $g(r)$ – радиальные функции, которые необходимо определить из уравнения Шредингера с гамильтонианом (2.3) при $V_{ext}(\mathbf{r}) = 0$, и $|L, J, F, F_z\rangle$ обозначает угловую часть, имеющую орбитальный момент L , спин J , полный момент (сумму спина и орбитального момента) F и проекцию полного момента на ось z , F_z . Необходимо отметить, что состояния дырок в вершине валентной зоны Γ_8 четырехкратно вырождены по проекции спина F_z . Указанная функция (2.5) является точной в сферическом приближении [156, 169].

В данной работе функции $f(r)$ и $g(r)$ вычисляются при помощи вариационного метода, где в качестве пробных волновых функций выбраны следующие:

$$f(r) = \exp(-\alpha_0 r), \quad g(r) = C_2 r \exp(-\alpha_2 r), \quad (2.6)$$

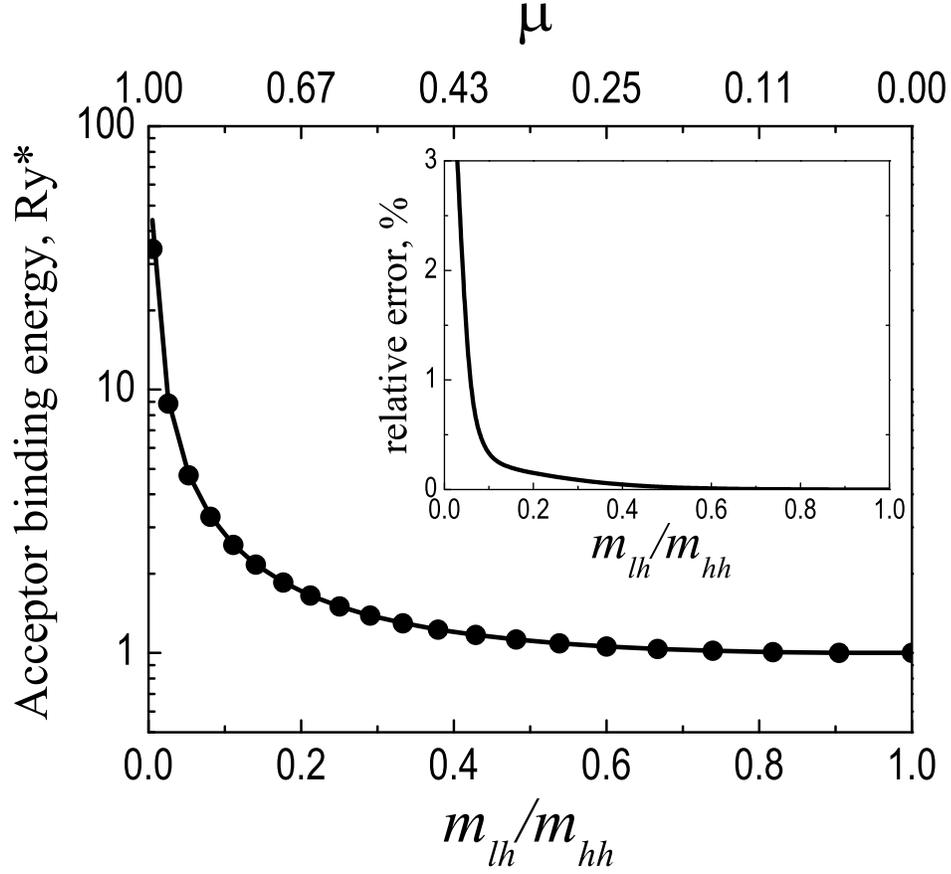


Рис. 2.1: Зависимость энергии связи объемного акцептора от отношения масс легкой и тяжелой дырки $m_{lh}/m_{hh} = (1 - \mu)/(1 + \mu)$, где $\mu = 2\gamma/\gamma_1$. Сплошная кривая и точки отвечают результатам вариационного и численного расчетов. Вставка показывает погрешность вариационного расчета. Энергия связи акцептора измеряется в эффективных Ридбергах: $Ry^* = m_0 e^4 / 2\gamma_1 \epsilon^2 \hbar^2$.

где C_1 и $\alpha_{1,2}$ – подгоночные параметры, нормировочные константы здесь и далее опускаем. Параметры $\alpha_{0,2}$ описывают притяжение дырок с различным орбитальным моментом $L = 0, 2$ к заряженному центру, а параметр C_1 – долю состояния с моментом $L = 2$.

Для оценки применимости пробных функций проведено сравнение результатов вариационного расчета с пробной функцией (2.6) (сплошная кривая на рис. 2.1) и численного расчета сделанного по методу, описанному в работе [156] с использованием базиса, состоящего из 80 элементов (точки на рис. 2.1). Энергия свя-

зи акцептора показана как функция отношения масс легкой и тяжелой дырки $\sigma = m_{lh}/m_{hh}$. Это отношение удобно выразить через параметр $\mu = 2\gamma/\gamma_1$, введенный в работе [156], который определяет энергию связи объемного акцептора в используемой модели:

$$\sigma = \frac{m_{lh}}{m_{hh}} = \frac{1 - \mu}{1 + \mu}. \quad (2.7)$$

Вставка к рис. 2.1 показывает относительную погрешность вариационного расчета энергии связи объемного акцептора. Из графика можно видеть, что точность выбранной пробной функции (2.6) весьма высокая: погрешность не превышает 3% в области физически разумных значений отношения масс дырок.

Акцептор в узкой квантовой яме

Волновая функция основного состояния акцептора в пределе идеальной узкой квантовой ямы имеет определенное значение проекции спина дырки на ось роста ямы и имеет следующий вид:

$$\Psi_{2D}(\mathbf{r}) = e^{-\rho/a_{2D}^*} \Psi_{0z}(z) | \pm 3/2 \rangle, \quad (2.8)$$

где $\Psi_{0z}(z)$ – волновая функция основного состояния тяжелой дырки в потенциале квантовой ямы, $a_{2D}^* = a_B^*(\gamma_1 + \gamma)/2\gamma_1$ – двумерный эффективный борковский радиус для тяжелой дырки, и $|3/2\rangle$ – волновая функция, отвечающая проекции спина $J_z = 3/2$ на ось роста квантовой ямы. Здесь предполагается, что эффективная масса вдоль оси z для дырки с проекцией спина $J_z \pm 3/2$ (тяжелые дырки) больше, чем для дырки с $J_z \pm 1/2$ (легкие дырки). Тогда в узкой квантовой яме состояния тяжелых и легких дырок оказываются сильно расщеплены и их смешиванием вследствие кулоновского притяжения дырки к заряженному центру можно пренебречь. Отметим, что, в соответствии с теоремой Крамерса, все состояния акцептора двукратно вырождены по проекции спина дырки J_z . В дальнейшем будет рассматриваться только одно из этих состояний.

Для параболической квантовой ямы (2.4a) и для ямы с бесконечным барьером (2.4b) волновые функции основного состояния поперечного квантования дырки

имеют следующий вид [170]:

$$\Psi_{0z}(z) = e^{-\frac{\sqrt{\kappa}}{2} \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 2\gamma} \right)^{1/2} z^2}, \quad (2.9)$$

$$\Psi_{0z}(z) = \begin{cases} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right), & |z| \leq L/2, \\ 0, & |z| > L/2. \end{cases} \quad (2.10)$$

Акцептор в квантовой проволоке малого радиуса

В отличие от квантовой ямы, где для дырки, неподвижной в плоскости ямы, состояния с проекциями спина на ось роста структуры $J_z = \pm 3/2$ и $J_z = \pm 1/2$ не смешиваются, в квантовой проволоке состояния с разными проекциями спина на ось системы смешиваются даже, если дырка неподвижна, т.е. при $k_z = 0$, где k_z – волновой вектор вдоль оси проволоки, [171, 172, 173]. Поэтому, при произвольном соотношении между параметрами Латтинжера γ_1 и γ волновая функция основного состояния акцептора в данном предельном случае должна определяться с учетом смешивания состояний дырок с $J_z = \pm 1/2$ и $J_z = \pm 3/2$. Такая волновая функция, тем не менее, будет иметь определенную проекцию полного момента на ось квантовой проволоки. Здесь стоит обратить внимание на то, что эффективная масса дырок с $J_z = \pm 1/2$ в поперечном сечении квантовой проволоки оказывается больше чем эффективная масса дырок с $J_z = \pm 3/2$, однако, по традиции, тяжелыми будут называться дырки с $J_z = \pm 3/2$.

В зависимости от параметров системы волновая функция основного состояния дырки в цилиндрически-симметричной квантовой проволоке может иметь одну из следующих форм [171, 172, 173]:

$$\Psi_{1D}^{(1)}(\boldsymbol{\rho}, z) = C_3 \Psi_{-2\rho}^{(3/2)}(\rho) \psi_1(z) e^{-2i\varphi} |3/2\rangle + \Psi_{0\rho}^{(-1/2)}(\rho) \psi_2(z) | - 1/2\rangle, \quad (2.11a)$$

$$\Psi_{1D}^{(2)}(\boldsymbol{\rho}, z) = C_3 \Psi_{1\rho}^{(3/2)}(\rho) \psi_1(z) e^{-i\varphi} |3/2\rangle + \Psi_{1\rho}^{(-1/2)}(\rho) \psi_2(z) e^{+i\varphi} | - 1/2\rangle, \quad (2.11b)$$

где φ – азимутальный угол радиус-вектора дырки, C_3 – подгоночный параметр, описывающий долю состояния с $J_z = 3/2$, $\psi_{1,2}(z)$ – волновые функции движения дырки с $J_z = 3/2$ и $J_z = -1/2$ вдоль оси квантовой проволоки. Отметим, что для

свободной дырки $\psi_{1,2}(z) = e^{ik_{1,2}z}$, где $k_{1,2}$ – волновые вектора тяжелой и легкой дырок при заданной энергии. Волновые функции $\Psi_{m\rho}^{(J_z)}(\rho)$ суть волновые функции квантования дырки в плоскости поперечного сечения проволоки, которые отвечают низшему по энергии состоянию со значениями проекции спина на ось проволоки, J_z , и углового момента m . Здесь необходимо отметить, что волновая функция (2.11b) является суперпозицией волновых функций p -состояний поперечного квантования тяжелой и легкой дырки. Соответствующее ей состояние может оказаться ниже по энергии, чем состояние с функцией (2.11a) за счет более эффективного смешивания между состояниями дырки с $J_z = 3/2$ и $J_z = -1/2$.

Отметим, что прямая диагонализация гамильтониана Латтинжера (2.3) в отсутствие потенциала акцептора, выполненная на базисе из 50 элементов, показывает, что в параболической квантовой проволоке при любых параметрах системы волновая функция основного состояния дырки имеет форму (2.11a). В проволоках с бесконечным барьером при $\sigma \gtrsim 0.14$ ($\mu \lesssim 0.75$) волновая функция основного состояния дырки также имеет форму (2.11a), а при $\sigma \lesssim 0.14$ ($\mu \gtrsim 0.75$) принимает форму (2.11b). Численный расчет также показывает, что, если волновая функция акцептора принимает форму (2.11a), то параметр C_3 оказывается малым, т.е. она, в основном, состоит из состояния $1/2$. Если же волновая функция имеет вид (2.11b), то оказывается $C_3 \sim 0.5$, что отвечает суперпозиции состояний дырки с $J_z = 3/2$ и $J_z = -1/2$ и угловыми моментами орбитальной части ∓ 1 .

Для параболической квантовой проволоки (2.4a) волновые функции поперечного квантования дырки имеют следующий вид:

$$\Psi_{-2\rho}^{3/2}(\rho) = \rho^2 e^{-\frac{\sqrt{\kappa}}{2} \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma} \right)^{1/2} \rho^2}, \quad \Psi_{0\rho}^{-1/2}(\rho) = e^{-\frac{\sqrt{\kappa}}{2} \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 - \gamma} \right)^{1/2} \rho^2}. \quad (2.12)$$

В случае квантовой проволоки с резким бесконечным барьером (2.4c) имеем:

$$\Psi_{-2\rho}^{3/2}(\rho) = \begin{cases} J_2 \left(\frac{k_{20}}{R} \rho \right), & \rho \leq R \\ 0, & \rho > R \end{cases}, \quad (2.13a)$$

$$\Psi_{0\rho}^{-1/2}(\rho) = \begin{cases} J_0 \left(\frac{k_{00}}{R} \rho \right), & \rho \leq R \\ 0, & \rho > R \end{cases}, \quad (2.13b)$$

$$\Psi_{-1\rho}^{3/2}(\rho) = \Psi_{1\rho}^{-1/2}(\rho) = \begin{cases} J_1\left(\frac{k_{10}}{R}\rho\right), & \rho \leq R \\ 0, & \rho > R \end{cases}, \quad (2.13c)$$

где k_{m0} – первый корень функции Бесселя $J_m(\rho)$.

Для дырки, локализованной на акцепторе волновые функции $\psi_{1,2}(z)$, которые входят в состав функций (2.11a) и (2.11b) и которые в общем случае неизвестны, будут вычисляться в виде

$$\psi_1(z) = e^{-\delta_1|z|}, \quad \psi_2(z) = e^{-\delta_2|z|}, \quad (2.14)$$

где $\delta_{1,2}$ - подгоночные параметры, характеризующие притяжение одномерной дырки к заряженному центру.

Построение пробной функции

Выше были рассмотрены физически-различные предельные случаи, в которых вид волновой функции акцептора установлен из решения соответствующих уравнений Шредингера с меньшим числом переменных. Далее требуется построить функцию, которая при изменении подгоночных параметров переходит между формами, соответствующими предельным случаям объемного акцептора (2.5) и случаям узкой квантовой ямы (2.8) или проволоки малого радиуса (2.11a)-(2.11b).

В данной задаче пробная функция – трехкомпонентная (как было сказано выше, из двух вырожденных по проекции спина состояний учитывается только одно и тогда можно ограничиться трехкомпонентной функцией), соответственно каждая компонента должна плавно переходить между предельными формами.

Пробная функция для акцептора в квантовой яме выбирается в следующей форме:

$$\Psi_{well} = f_1(\mathbf{r}) \left| \frac{3}{2} \right\rangle + f_2(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{2} \right\rangle + f_3(\mathbf{r}) \left| -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (2.15)$$

Где \mathbf{r} – радиус-вектор дырки. Функции $f_{1,2,3}(\mathbf{r})$ для квантовой ямы с параболическим потенциалом выбираются следующими:

$$f_1(\mathbf{r}) = e^{-\alpha_1 r - \beta_1 \rho - \delta_1 z^2} Y_{00}(\theta, \varphi) +$$

$$\begin{aligned}
& + \sqrt{\frac{1}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_1 \rho - \delta_1 z^2} Y_{20}(\theta, \varphi), \\
f_2(\mathbf{r}) & = -\sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_2 \rho - \delta_2 z^2} Y_{21}(\theta, \varphi), \\
f_3(\mathbf{r}) & = \sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_2 \rho - \delta_2 z^2} Y_{22}(\theta, \varphi),
\end{aligned}$$

здесь $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферические функции, $C_1, \alpha_{1,2}, \beta_{1,2}, \delta_{1,2}$ – подгоночные параметры. Здесь и далее $\boldsymbol{\rho}$ – координата дырки в плоскости квантовой ямы, z – координата вдоль оси структуры, $r = \sqrt{\rho^2 + z^2}$.

Внутри квантовой ямы с бесконечным барьером ($|z| \leq L/2$) пробные функции принимают вид:

$$\begin{aligned}
f_1(\mathbf{r}) & = e^{-\alpha_1 r - \beta_1 \rho} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) Y_{00}(\theta, \varphi) + \\
& + \sqrt{\frac{1}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_1 \rho} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) Y_{20}(\theta, \varphi), \\
f_2(\mathbf{r}) & = -\sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_2 \rho} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) Y_{21}(\theta, \varphi), \\
f_3(\mathbf{r}) & = \sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r - \beta_2 \rho} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) Y_{22}(\theta, \varphi),
\end{aligned}$$

где $C_1, \alpha_{1,2}, \beta_{1,2}$ – подгоночные параметры. Здесь параметры $\alpha_{1,2}$ и $\beta_{1,2}$ характеризует притяжение объемной и двумерной дырки с проекциями спина $3/2$ и $\pm 1/2$ к центру, параметры $\delta_{1,2}$ описывают локализацию тяжелых и легких дырок в параболической квантовой яме, параметр C_1 – характеризует смешивание состояний дырок с различным орбитальным моментом. Вне ямы с бесконечным прямоугольным потенциалом (2.4b), при $|z| > L/2$, имеем $\Psi_{well} = 0$.

Таким образом, пробная функция (2.15) может принимать форму как соответствующую случаю объемного акцептора ($\beta_{1,2} = 0, \delta_{1,2} = 0$) так и случаю акцептора в узкой квантовой яме ($C_1 = 0, \alpha_{1,2} = 0$). Явный вид пробных функций аналогичен для бесконечного барьера и параболического потенциала. В случае системы с бесконечным барьером волновая функция поперечного движения фиксирована

граничными условиями, а для параболического потенциала она является пробной, имеющей при этом форму, соответствующую волновой функции поперечного квантования дырки в предельном случае узких квантовых ям.

Аналогично пробная функция для вычисления энергии связи основного состояния акцептора в квантовой проволоке имеет вид:

$$\Psi_{wire} = g_1(\mathbf{r}) \left| \frac{3}{2} \right\rangle + g_2(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{2} \right\rangle + g_3(\mathbf{r}) \left| -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (2.16)$$

В случае квантовой проволоки с параболическим потенциалом имеем:

$$\begin{aligned} g_1(\mathbf{r}) &= e^{-\alpha_1 r} Y_{00}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{1}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{20}(\theta, \varphi) + C_2 \rho^2 e^{-\beta_1 \rho^2 - \delta_1 |z| - 2i\varphi}, \\ g_2(\mathbf{r}) &= -\sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{21}(\theta, \varphi), \\ g_3(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{22}(\theta, \varphi) + C_3 e^{\beta_2 \rho^2 - \delta_2 |z|}, \end{aligned}$$

где $C_{1,2,3}$, $\alpha_{1,2}$, $\beta_{1,2}$ и $\delta_{1,2}$ – подгоночные параметры.

Для квантовой проволоки с бесконечным барьером в случае $\sigma \gtrsim 0.14$ ($\mu \lesssim 0.75$), т.е. когда акцептор в тонкой проволоке описывается функцией (2.11a), внутри проволоки ($\rho \leq R$):

$$\begin{aligned} g_1(\mathbf{r}) &= e^{-\alpha_1 r} Y_{00}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{1}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{20}(\theta, \varphi) + C_2 J_2 \left(\frac{k_{02\rho}}{R} \right) e^{-\delta_1 |z| - 2i\varphi}, \\ g_2(\mathbf{r}) &= -\sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{21}(\theta, \varphi), \\ g_3(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{22}(\theta, \varphi) + C_3 J_0 \left(\frac{k_{00\rho}}{R} \right) e^{-\delta_2 |z|}, \end{aligned}$$

а в случае $\sigma \lesssim 0.14$ ($\mu \gtrsim 0.75$), когда акцептор в тонкой проволоке описывается функцией (2.11b), при $\rho \leq R$:

$$\begin{aligned} g_1(\mathbf{r}) &= e^{-\alpha_1 r} Y_{00}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{1}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{20}(\theta, \varphi) + C_2 J_1 \left(\frac{k_{01\rho}}{R} \right) e^{-\delta_1 |z| - i\varphi}, \\ g_2(\mathbf{r}) &= -\sqrt{\frac{2}{5}} C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{21}(\theta, \varphi), \end{aligned}$$

$$g_3(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{5}}C_1 r e^{-\alpha_2 r} Y_{22}(\theta, \varphi) + C_3 J_1\left(\frac{k_{01}\rho}{R}\right) e^{-\delta_2|z|+i\varphi},$$

где $C_{1,2,3}$, $\alpha_{1,2}$, и $\delta_{1,2}$ – подгоночные параметры. Здесь $\alpha_{1,2}$, и $\delta_{1,2}$ описывают притяжение объемной и одномерной дырки с проекциями спина $3/2$ и $\pm 1/2$ к центру, $\beta_{1,2}$ – характеризуют локализацию тяжелых и легких дырок в поперечном сечении квантовой проволоки, C_1 описывает смешивание состояний объемных дырок с различным орбитальным моментом, $C_{2,3}$ – характеризуют долю состояний одномерных дырок с проекциями момента $3/2$ и $1/2$ на ось проволоки. Вне квантовой проволоки с бесконечным потенциалом (2.4c), при $\rho > R$, имеем $\Psi_{wire} = 0$.

Функция (2.16) принимает форму как соответствующую случаю объемного акцептора ($C_{3,4} = 0$) так и случаю акцептора в квантовой проволоке малого радиуса ($C_2 = 0$, $C_{3,4} \rightarrow \infty$). Отметим, что введением дополнительных подгоночных параметров можно объединить пробные функции, соответствующие формам (2.11a) и (2.11b), однако это не приводит к существенному росту точности расчета.

Таким образом, были построены пробные функции для вычисления энергии связи основного состояния акцептора в квантовой яме и в квантовой проволоке, учитывающие особенности строения сложной валентной зоны. Предложенные функции содержат небольшое число физически осмысленных подгоночных параметров и позволяют проследить переход от объемного материала к узкой квантовой яме или квантовой проволоке малого радиуса. Ниже представлены результаты вариационных расчетов и их обсуждение. Необходимо отметить, что в диссертации рассматривается ситуация, когда акцептор расположен в центре квантовой ямы или на оси квантовой проволоки.

2.2.3 Энергия связи акцептора в квантовой яме

Напомним, что энергией связи акцептора называется разность энергий основных состояний акцептора (E_A) и одиночной дырки, помещенной в тот же внешний потенциал (E_h) (ср. с энергией связи триона (1.21)):

$$E_b = E_A - E_h. \quad (2.17)$$

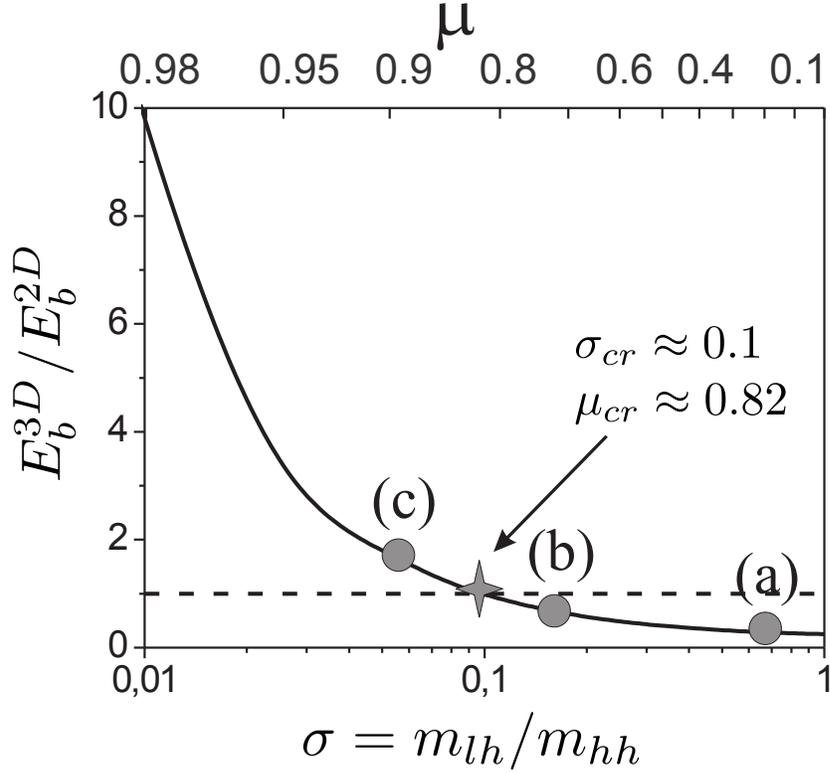


Рис. 2.2: Отношение предельных значений энергий связи объемного E_b^{3D} и двумерного E_b^{2D} акцептора в зависимости от отношения эффективных масс легкой и тяжелой дырки в объемном материале σ . Точки, отмеченные (a), (b) и (c) соответствуют значениям σ , использованным в расчете.

Если пренебречь смешиванием состояний дырки с различными значениями проекции спина на ось роста квантовой ямы, то в пределе очень узких квантовых ям масса тяжелой дырки в плоскости ямы задается выражением $m_{2D} = m_0/(\gamma_1 + \gamma)$. Тогда энергия связи акцептора может быть выражена аналитически согласно (2.2b):

$$E_b = \frac{8Ry^*}{2 + \mu} = \frac{8Ry^*(1 + \sigma)}{3 + \sigma}. \quad (2.18)$$

На рис. 2.2 показано отношение предельных значений энергий связи акцептора в узких квантовых ямах (E_b^{2D}) и в объемном материале (E_b^{3D}) в зависимости от отношения масс легкой и тяжелой дырок $\sigma = m_{lh}/m_{hh}$. Вариационные расчеты энергии связи объемного акцептора были выполнены при трех различных значениях параметра σ : $\sigma = 0.67$, $\sigma = 0.14$ (соответствует GaAs), $\sigma = 0.052$ (соответствует

InAs), (параметр $\mu = 0.2, 0.75$ и 0.9). Эти значения выделены как (a), (b) и (c) на рис. 2.2. Из рисунка видно, при малом отношении масс $\sigma < \sigma_{cr} \approx 0.1$ энергия связи акцептора в узкой квантовой яме меньше, чем в объемном материале.

Локализация в квантовой яме начинает заметным образом менять структуру акцептора, когда ширина ямы становится сравнима или меньше характерного размера волновой функции объемного акцептора, R_a , который можно ввести как среднеквадратичный размер волновой функции водородоподобного комплекса с соответствующей энергией связи в рамках модели простой зоны:

$$R_a = \frac{\sqrt{3}}{E_b^{3D}}.$$

Зависимость R_a от отношения масс легкой и тяжелой дырки представлена на вставке к рис. 2.3. На основных панелях рис. 2.3 показаны зависимости энергии связи акцептора от эффективной ширины квантовой ямы, вычисленные для разных отношений масс тяжелой и легкой дырки для квантовых ям с параболическим (2.4a) и прямоугольным бесконечным потенциалом (2.4b). На графике в качестве единицы измерения энергии выбрана энергия объемного акцептора при соответствующем значении σ (см. рис. 2.1). В качестве единицы измерения ширины ямы выбран характерный размер волновой функции объемного акцептора, R_a при том же отношении масс (см. вставку к рис. 2.3).

В случае квантовой ямы с параболическим потенциалом, $V_1^{well}(z) = \kappa z^2$, эффективная ширина ямы, L_{eff} , связана с жесткостью ее потенциала, κ , следующим соотношением

$$L_{eff} = \pi \sqrt[4]{\frac{1-\mu}{\kappa}} = \pi \sqrt[4]{\frac{2\sigma}{\kappa}}.$$

Здесь L_{eff} определяется как ширина квантовой ямы с бесконечными стенками, в которой дырка имеет такую же энергию размерного квантования.

Если величина параметра σ достаточно близка к 1 [кривые (a) на верхней и нижней панелях рис. 2.3], то влияние сложной структуры валентной зоны незначительно и изменение эффективной массы дырки за счет ее локализации в квантовой яме мало. Основную роль в изменении энергии связи акцептора играет уве-

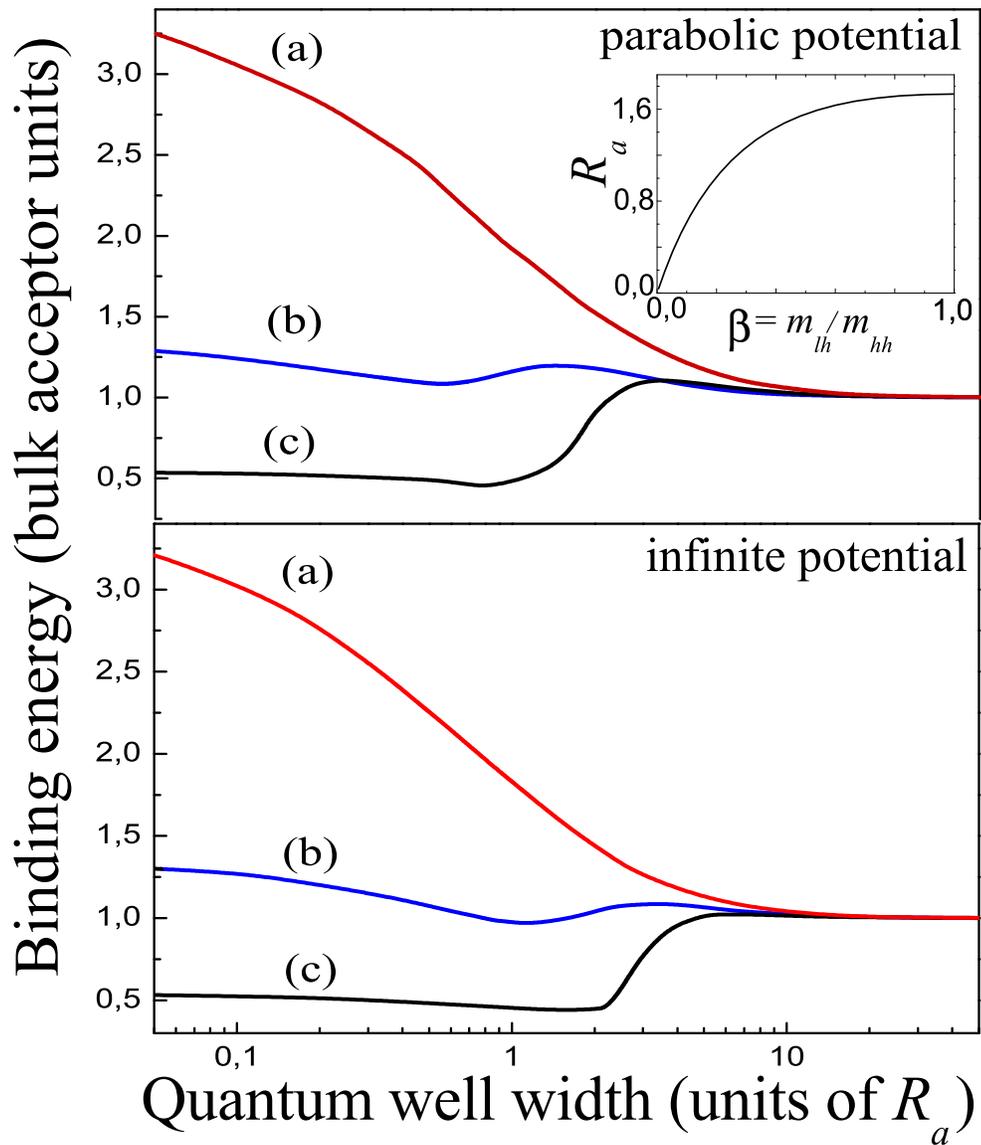


Рис. 2.3: Энергия связи акцептора как функция эффективной ширины квантовой ямы для параболического и прямоугольного бесконечного потенциала. Кривые (a), (b) и (c) соответствуют различным отношениям масс легкой и тяжелой дырки σ : $\sigma = 0.67$; 0.14 ; 0.052 , соответственно. На вставке показана зависимость характерного размера объемного акцептора R_a от отношения масс легкой и тяжелой дырки $\sigma = m_{lh}/m_{hh}$.

личение эффективности кулоновского взаимодействия. В этом случае происходит монотонное увеличение энергии связи акцептора при уменьшении эффективной ширины квантовой ямы. С уменьшением величины σ зависимость энергии связи акцептора от ширины квантовой ямы становится немонотонной, это связано с усилением влияния сложной структуры валентной зоны и более существенным изменением эффективной массы дырки при переходе между объемным материалом и двумерной квантовой ямой [см. кривые (b)]. Немонотонное поведение энергии связи акцептора как функции эффективной ширины квантовой ямы ожидается наиболее выраженным при $\sigma < \sigma_{cr} \approx 0.1$ (при большой разнице между эффективными массами легкой и тяжелой дырок), когда энергия связи акцептора в пределе двумерной квантовой ямы меньше чем в объемном материале [см. кривые (c)].

Кроме того, был выполнен вариационный расчет с использованием пробных функций вида (2.15) при учете гофрировки изоэнергетических поверхностей, т.е. с учетом дополнительного вклада в гамильтониан Латтинжера, равного [ср. с (2.1) при $\gamma_2 \neq \gamma_3$]

$$\hat{H}_1 = \frac{\gamma_2 - \gamma_3}{\gamma_1} \sum_{i' \neq i} (J_{i'} J_i + J_i J_{i'}) k_{i'} k_i.$$

Расчет показал, что поведение энергий связи качественно аналогично представленному на рис. 2.3, имеются лишь количественные отличия, не превышающие 8% в случае GaAs. Эти отличия связаны, в основном, с тем, что учет гофрировки приводит к изменению значения энергии акцептора в двумерном случае по сравнению с изотропным приближением.

Необходимо обратить внимание также на то, что отличия между соответствующими кривыми для моделей параболического и прямоугольного потенциалов очень малы в предельных случаях, т.е. вдали от переходной области, где возможно проявление немонотонности. Различия существенны лишь непосредственно в области немонотонной зависимости, которая имеет место при несколько разной ширине ямы и носят количественный характер. Это свидетельствует об универсальном характере зависимостей, приведенных в одинаковых единицах измерения.

2.2.4 Энергия связи акцептора в квантовой проволоке

В предыдущем параграфе было продемонстрировано, что немонотонность зависимости энергии связи акцептора от ширины квантовой ямы связана с перестройкой дырочных состояний и уменьшением эффективной массы движения дырки в плоскости при уменьшении ширины ямы. Иная ситуация наблюдается при переходе от объемного материала к квазиодномерной системе – квантовой проволоке малого радиуса. Основное состояние свободной дырки в такой системе является смесью состояний с проекциями спина на ось структуры $\pm 1/2$ и $\pm 3/2$, причем основной вклад, в большинстве случаев, вносят состояния с проекцией спина $\pm 1/2$. Это приводит к тому, что изменение эффективной массы при уменьшении радиуса проволоки может оказываться менее существенным, чем для квантовых ям. Вторым важным отличием квазиодномерных систем является отсутствие предельного значения для энергии связи акцептора, соответствующего проволоке нулевого радиуса. При уменьшении радиуса квантовой проволоки энергия связи акцептора логарифмически расходится [см. гл. 1, [110],[A1]. Оба указанных обстоятельства позволяют ожидать, что немонотонность зависимости энергии связи от размера системы будет заметно меньше в структурах с квантовыми проволоками, чем с квантовыми ямами.

На рис. 2.4 представлены зависимости энергии связи акцептора от эффективного радиуса квантовой проволоки с параболическим (2.4a) и прямоугольным потенциалом с бесконечным барьером (2.4c), вычисленные для тех же величин отношения масс легких и тяжелых дырок σ , что и для квантовой ямы (см. рис. 2.3). Также как и для квантовых ям, в качестве единиц измерения энергии и радиуса проволоки на рис. 2.4 выбраны энергия связи, E_b^{3D} и характерный радиус, R_a , акцептора в объемном материале с соответствующим значениям σ . Аналогично случаю параболических квантовых ям, для параболической квантовой проволоки с потенциалом $V_1^{wire}(\rho) = \kappa\rho^2$ ее эффективный радиус, R_{eff} , связан с жесткостью

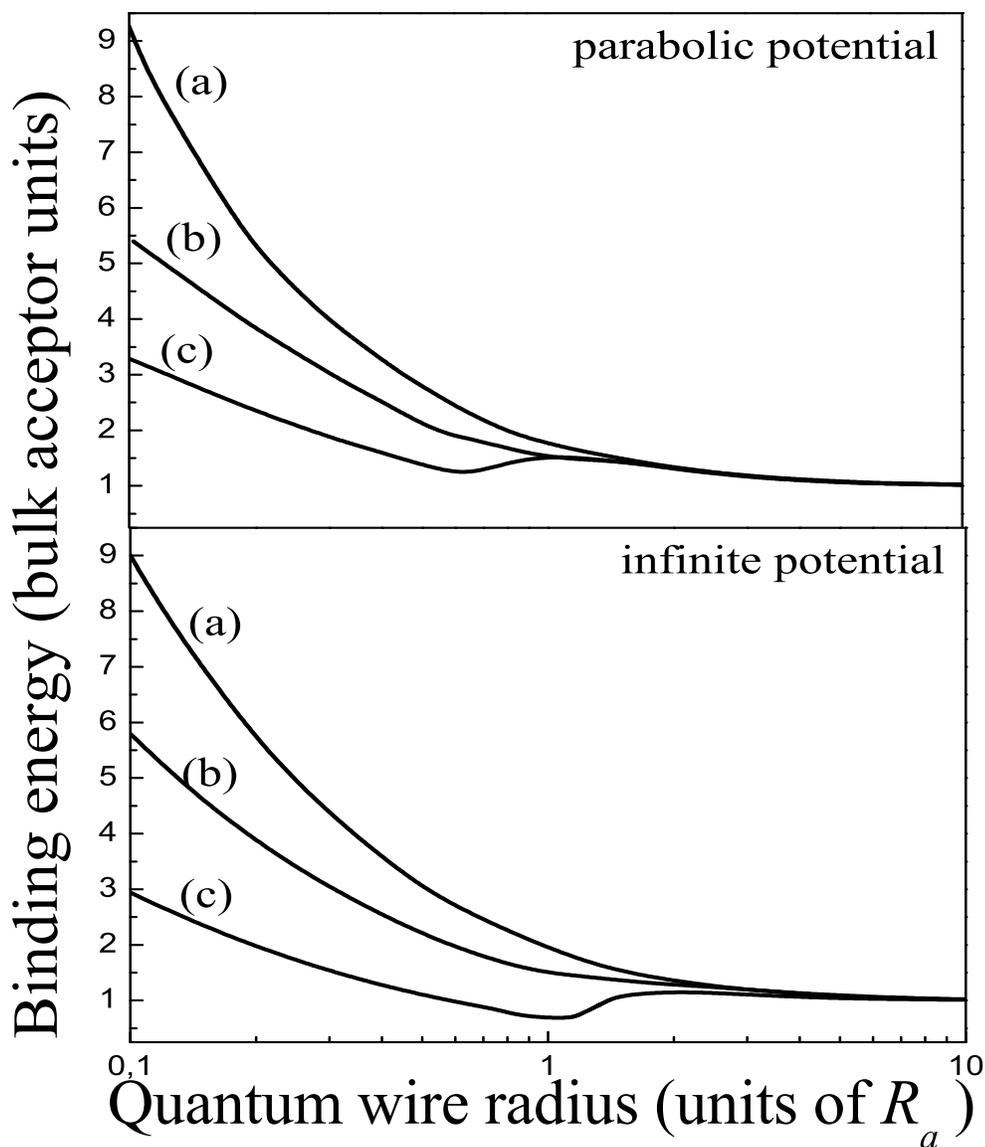


Рис. 2.4: Энергия связи акцептора как функция радиуса квантовой проволоки, для параболического и прямоугольного бесконечного потенциалов. Кривые (a), (b) и (c) соответствуют различным величинам отношения масс легкой и тяжелой дырки: $\sigma = 0.67, 0.14, 0.052$, использованным в расчете для квантовой ямы.

потенциала κ соотношением

$$R_{eff} = \frac{k_{00}}{\sqrt{2}} \sqrt[4]{\frac{2 - \mu}{2\kappa}} = \frac{k_{00}}{\sqrt{2}} \sqrt[4]{\frac{1 + 3\sigma}{2\kappa}}.$$

Здесь R_{eff} – радиус квантовой проволоки с бесконечным барьером в модели простой зоны в которой энергия размерного квантовая дырки такая же, как и в параболической проволоке.

Рисунок 2.4 показывает значительное ослабление немонотонности в зависимости энергии связи акцептора от радиуса квантовой проволоки. Кривая (b) теперь демонстрирует монотонную зависимость от эффективного радиуса квантовой проволоки, а немонотонность кривой (c) выражена значительно слабее, чем в случае квантовых ям. Также, как и для систем с квантовыми ямами, имеется хорошее согласие между результатами расчетов для двух разных потенциалов квантовой проволоки, что обусловлено универсальностью рассчитанных зависимостей.

2.3 Фактор Ландэ локализованной дырки

2.3.1 Постановка задачи

Последнее десятилетие отмечено бурным ростом интереса к исследованию спин-зависимых эффектов в полупроводниковых наноструктурах [146]. Благодаря понижению симметрии системы при переходе от объемных материалов к низкоразмерным системам спин-зависимые эффекты усиливаются, что открывает перспективы создания приборов, использующих не только заряд электрона или дырки, но и их спин.

Отклик спина на внешнее магнитное поле определяется g -фактором или множителем Ландэ. В полупроводниках за счет параметрически сильного спин-орбитального взаимодействия этот важнейший параметр существенно отличается от g -фактора свободного электрона, равного двум [174]. Например, для электронов в зоне проводимости объемного GaAs величина эффективного g -фактора составляет $g \approx -0.44$, а для InAs $g \approx -15$. В наноструктурах размерное кван-

тование приводит к дополнительной перенормировке множителя Ланде, а также к возникновению анизотропии спиновой расщепления энергии электронов в магнитном поле [175, 176, 177, 178]. Основные механизмы перенормировки g -фактора зоны проводимости хорошо известны, а имеющиеся теоретические расчеты количественно описывают данные эксперимента [178].

Более сложная ситуация имеет место для дырок в валентной зоне. Хорошо известно, что в объемных материалах типа GaAs состояния вершины валентной зоны четырехкратно вырождены. При этом отклик дырок на магнитное поле описывается двумя параметрами κ и q (магнитные параметры Латтинжера), и он качественно отличается от отклика электронов [151]. Более того, даже слабый внешний потенциал, например, кулоновский потенциал мелкого акцептора приводит к существенной перенормировке спиновых расщеплений дырки [159].

Размерное квантование также приводит к качественной перестройке структуры дырочных состояний. Например, при переходе от объемного материала к квантовой яме формируются подзоны тяжелых и легких дырок, величины спиновых расщеплений которых значительно отличаются от их значений в объемном полупроводнике [179, 180, 181]. Подобная ситуация имеет место и в нанокристаллах с формой, близкой к сферической [104, 182], а также в самоорганизованных квантовых точках [183]. К настоящему времени установлено, что все эти эффекты обусловлены именно сложной структурой валентной зоны. Несмотря на то, что ряд теоретических расчетов находится в согласии с имеющимися экспериментальными данными [180, 184, 92, 185], детального исследования взаимосвязи структуры валентной зоны и значений g -факторов для дырок не предпринималось. Цель данного раздела, написанного по материалам работы [A8], состоит в восполнении указанного пробела.

Ниже рассчитаны спиновые расщепления дырочных состояний в магнитном поле в структурах с квантовыми точками с произвольным соотношением между протяженностями вдоль осей координат. Для описания дырочных состояний

используется гамильтониана Латтинжера, а для описания эффектов размерного квантования – модель параболического потенциала квантовой точки. Непрерывное изменение параметров потенциала квантовой точки приводит к плавному изменению геометрии структуры, позволяя проследить переход между предельными случаями квантовой ямы, сферически-симметричной квантовой точки и квантовой проволоки. При этом происходит изменение структуры основного дырочного состояния и, как показывает анализ, существенные изменения величины g -факторов. Полученные результаты имеют общий характер, так как и структура дырочных состояний, и g -фактор, главным образом, определяются геометрией системы.

2.3.2 Модель и методы

Сформулируем используемую в работе модель квантовой точки и методы расчетов энергетического спектра и g -фактора дырки. Состояния дырки в наноструктуре мы описываем в рамках сферического приближения для гамильтониана Латтинжера [ср. с (2.1) при $\gamma_2 = \gamma_3$]:

$$\hat{H}_L = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma \right) k^2 - 2\gamma \sum_{\alpha, \beta=x, y, z} \{k_\alpha k_\beta\} \{J_\alpha J_\beta\} \right] + V_{ext}(\mathbf{r}). \quad (2.19)$$

В гамильтониане (2.19) $V_{ext}(\mathbf{r})$ – параболический потенциал квантовой точки:

$$V_{ext}(\mathbf{r}) = \kappa_x x^2 + \kappa_y y^2 + \kappa_z z^2. \quad (2.20)$$

Здесь параметры $\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z$ – жесткости потенциала вдоль кубических осей x || [100], y || [010], z || [001]. Отметим, что в рассматриваемом сферическом приближении для гамильтониана Латтинжера привязка осей координат к кристаллографическим направлениям может быть, в общем случае, произвольной. Параметры Латтинжера внутри квантовой точки и вне ее считаются одинаковыми. Учет гофрировки валентной зоны ($\gamma_2 \neq \gamma_3$), как будет показано ниже в параграфе 2.3.3, приводит к некоторому количественному изменению результатов, но качественный вид полученных результатов сохраняется.

Выбор параболического потенциала в качестве модельного обусловлен, с одной стороны, физической разумностью такого потенциала, поскольку любой гладкий потенциал вблизи минимума может быть аппроксимирован параболическим, а с другой, тем обстоятельством, что использование параболического потенциала значительно облегчает техническую сторону расчетов. Кроме того, параболический потенциал широко используется для описания эффектов размерного квантования в полупроводниковых квантовых точках [182, 186, 86, 187]. Ниже, в гл. 3, разработанный метод будет обобщен для квантовых точек с гауссовым гетеропотенциалом.

При наличии внешнего постоянного магнитного поля \mathbf{B} гамильтониан дырки (2.19), во-первых, приобретает дополнительный зеемановский вклад [174, 151]

$$\hat{H}_Z = -2\mu_B \varkappa (\mathbf{J}\mathbf{B}), \quad (2.21)$$

где μ_B – магнетон Бора, \varkappa – магнитная константа Латтинжера, а во-вторых, в (2.3) оператор \mathbf{k} заменяется на $\mathbf{k} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$, где \mathbf{A} – векторный потенциал магнитного поля. Здесь и далее используется дырочное представление, где $\gamma_1, \gamma > 0$, $e = |e|$ – элементарный заряд. Анизотропный вклад в эффект Зеемана $\propto q(B_x J_x^3 + B_y J_y^3 + B_z J_z^3)$, описываемый параметром q , в большинстве структур мал по сравнению с изотропным (2.21) [188], поэтому в дальнейшем он не учитывается. Случаи, когда анизотропный вклад может играть главную роль рассмотрены отдельно.

Пусть магнитное поле \mathbf{B} направлено вдоль оси z , напомним, что при использовании сферического приближения для гамильтониана Латтинжера это не приводит к ограничению общности полученных результатов, и векторный потенциал выбран в калибровке Ландау, $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$. В качестве единиц измерения энергии и длины выберем эффективные Ридберг, $Ry^* = m_{hh}e^4/2\varepsilon^2\hbar^2$, и борковский радиус, $a_B^* = \hbar^2\varepsilon/m_{hh}e^2$, определяемые эффективной массой тяжелой дырки $m_{hh} = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma)$. Безразмерный гамильтониан дырки принимает вид:

$$\hat{H}_h = \frac{2\gamma_1 + 5\gamma}{2(\gamma_1 - 2\gamma)} k^2 - \frac{2\gamma}{\gamma_1 - 2\gamma} (\mathbf{k}\mathbf{J})^2 + \tilde{V}_{ext}(\mathbf{r}) + \hat{H}_Z + \hat{H}_B. \quad (2.22)$$

Здесь $V_{ext}(\mathbf{r}) = \tilde{\kappa}_x x^2 + \tilde{\kappa}_y y^2 + \tilde{\kappa}_z z^2$, $\tilde{\kappa}_{x,y,z}$ – безразмерные жесткости потенциала кван-

товой точки, $\widehat{H}_Z = -2\kappa(\gamma_1 - 2\gamma)^{-1}\tilde{B}J_z$ – безразмерный гамильтониан (2.21), \widehat{H}_B – безразмерный гамильтониан, описывающий орбитальный эффект магнитного поля:

$$\widehat{H}_B = \frac{2\gamma_1 + 5\gamma}{2(\gamma_1 - 2\gamma)} \left(-2\tilde{B}xk_y + \tilde{B}^2x^2 \right) + \quad (2.23)$$

$$+ \frac{2\gamma}{\gamma_1 - 2\gamma} \left[J_y^2 \left(2\tilde{B}xk_y - \tilde{B}^2x^2 \right) + (J_yJ_z + J_zJ_y) \tilde{B}xk_z + (J_yJ_x + J_xJ_y) \left(\tilde{B}xk_x - \frac{i\tilde{B}}{2} \right) \right],$$

где $\tilde{B} = (ea_B^2/c\hbar)B$ – безразмерное магнитное поле.

Выбор единиц для измерения длины и энергии не влияет на техническую сторону численного расчета (описанный ниже метод эффективно сходится при любых физически разумных параметрах структуры), поэтому нами были выбраны боровские единицы. При таком выборе и магнитное поле и жесткости потенциала квантовой точки входят в уравнение Шредингера в виде независимых параметров. Напротив, если выбрать в качестве единиц измерения магнитную длину и энергию первого уровня Ландау, то в безразмерном уравнении Шредингера не будет присутствовать в явном виде величина магнитного поля, что снизит наглядность полученных результатов.

Для расчета энергетического спектра дырки в магнитном поле проводилась численная диагонализация матрицы гамильтониана (2.22), вычисленной на базисе

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \psi_{n_x}(x)\chi_{n_y}(y)\phi_{n_z}(z), \quad n_x, n_y, n_z = 1 \dots N, \quad (2.24)$$

где

$$\psi_{n_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^{n_x}n_x!}} \left(\frac{1}{\pi\tilde{l}_x^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2\tilde{l}_x^2}\right) H_{n_x}\left(\frac{x}{\tilde{l}_x}\right),$$

$$\chi_{n_y}(y) = \frac{1}{\sqrt{2^{n_y}n_y!}} \left(\frac{1}{\pi\tilde{l}_y^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{y^2}{2\tilde{l}_y^2}\right) H_{n_y}\left(\frac{y}{\tilde{l}_y}\right),$$

$$\phi_{n_z}(z) = \frac{1}{\sqrt{2^{n_z}n_z!}} \left(\frac{1}{\pi\tilde{l}_z^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{z^2}{2\tilde{l}_z^2}\right) H_{n_z}\left(\frac{z}{\tilde{l}_z}\right)$$

– собственные функции линейного гармонического осциллятора с характерными длинами $\tilde{l}_x = [(\gamma_1 + \gamma)/(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{A}_x]^{1/4}$, $\tilde{l}_y = [(\gamma_1 + \gamma)/(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{A}_y]^{1/4}$, $\tilde{l}_z = \tilde{A}_z^{-1/4}$,

$H_n(x)$ – полиномы Эрмита [189]. Такой базис соответствует собственным функциям дырки, сформированной блоховскими состояниями с проекцией момента $J_z = \pm 3/2$ на направление приложенного магнитного поля. Для проверки сходимости численного расчета использовался также дополнительный базис, соответствующий дыркам с блоховскими амплитудами, характеризуемыми $J_z = \pm 1/2$, где характерные длины вводятся согласно $\tilde{l}_x = [(\gamma_1 - \gamma)/(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{\kappa}_x]^{1/4}$, $\tilde{l}_y' = [(\gamma_1 - \gamma)/(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{\kappa}_y]^{1/4}$ и $\tilde{l}_z' = [(\gamma_1 + 2\gamma)/(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{\kappa}_z]^{1/4}$, соответственно.

Далее представлены результаты расчетов энергетического спектра дырки в квантовых точках в зависимости от величины приложенного магнитного поля, и проанализирована зависимость g -фактора ее основного состояния от геометрии потенциала квантовой точки, описываемой соотношением констант $\tilde{\kappa}_x$, $\tilde{\kappa}_y$ и $\tilde{\kappa}_z$.

2.3.3 Результаты и обсуждение

Уровни размерного квантования

Проанализируем влияние внешнего магнитного поля на структуру энергетических уровней дырки в квантовых точках различной формы. Введем характерный (безразмерный) размер квантовой точки вдоль оси i ($i = x, y, z$) как:

$$L_i = \frac{1}{\sqrt[4]{\tilde{\kappa}_i}}. \quad (2.25)$$

При этом, для сферически симметричной квантовой точки $L_x = L_y = L_z$, для квантового диска $L_z \ll L_x, L_y$, для квантовой проволоки $L_z \gg L_x, L_y$. Магнитное поле характеризуется безразмерной магнитной длиной, введенной выше согласно $L_B = 1/\sqrt{\tilde{B}}$.

На рис. 2.5 представлены зависимости энергий нескольких первых уровней размерного квантования дырки в аксиально-симметричных наноструктурах различной геометрии, в которых $L_x = L_y$, а L_z – произвольно, от квадрата отношения $(L_{\perp,||}^i/L_B)^2 \propto \tilde{B}$, где $L_{\perp,||}^i$ – характерная длина локализации тяжелой ($i = hh$) или легкой ($i = lh$) дырки в перпендикулярном или параллельном плоскости структуры направлении: $L_{\perp}^{hh,lh} = [(\gamma_1 \mp 2\gamma)/((\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{\kappa}_z)]^{1/4}$, $L_{||}^{hh,lh} =$

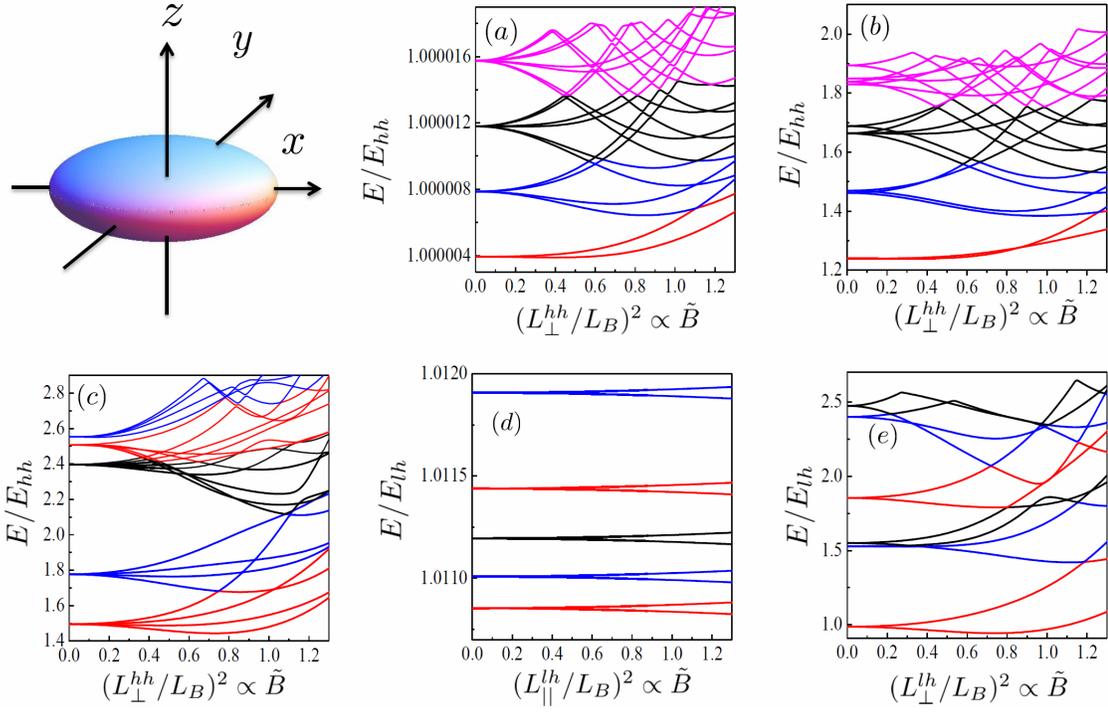


Рис. 2.5: Зависимость энергий нескольких нижних уровней энергии дырки в аксиально-симметричной структуре, $L_x = L_y = L$, вычисленная для разных соотношений между L_z и L , от квадрата отношения характерной длины локализации дырки $(L_{\perp,||}^i)$ к магнитной длине для изолированной тяжелой дырки, $L_B = 1/\sqrt{\tilde{B}}$: (a) для тонкого квантового диска, $L_z/L \rightarrow 0$; (b) для квантового диска конечной толщины, $L_z/L = 0.25$; (c) для сферически симметричной квантовой точки, $L_z = L$; (d) для удлиненной квантовой точки, $L_z \gg L$; (e) для квантовой проволоки, $L_z \rightarrow \infty$. Численный расчет выполнен для параметров Латтинжера, соответствующих GaAs, см. пояснения в тексте.

$[(\gamma_1 \pm \gamma)/((\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{\kappa}_x)]^{1/4} = [(\gamma_1 \pm \gamma)/((\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{\kappa}_y)]^{1/4}$. Численный расчет выполнен для параметров Латтинжера, соответствующих системе на основе GaAs: $\gamma_1 = 6.98$, $\gamma = 2.58$ [190].

Панель (а) рис. 2.5 соответствует предельному случаю тонкого квантового диска, где толщина структуры много меньше ее поперечного размера: $L_z \ll L_x = L_y = L$. Здесь энергия нормирована на энергию основного состояния поперечного квантования изолированной тяжелой дырки, $E_{hh}^{\parallel} = 1/L_z^2$. В этом пределе в нулевом магнитном поле тяжелые и легкие дырки не смешиваются, и состояния характеризуются модулем проекции спина дырки на ось z : $j_z = \pm 3/2$ и $j_z = \pm 1/2$. Все показанные на графике энергетические уровни отвечают основному уровню размерного квантования тяжелой дырки вдоль оси z и различным уровням размерного квантования в плоскости структуры. Основное состояние дырки при $B = 0$ двукратно вырождено по проекции полного момента $\pm 3/2$ на ось структуры. Возбужденные состояния дырки также вырождены, причем помимо крамерсова вырождения, обусловленного инвариантностью системы при $B = 0$ к инверсии времени, имеет место также дополнительное вырождение, связанное с наличием нетривиального инварианта в двумерном параболическом потенциале, см. подробнее [136] и разд. 1.3. Если магнитное поле слабое, т.е. L_B велико по сравнению с поперечным размером квантового диска L , то происходит линейное по магнитному полю расщепление энергетических уровней, вырожденных при $B = 0$ (эффект Зеемана). В достаточно сильном магнитном поле становятся заметными эффекты, квадратичные по магнитному полю (диамагнитный сдвиг).

Увеличение толщины диска приводит к снятию случайного вырождения как показано на рис. 2.5(b). В нулевом магнитном поле состояния характеризуются модулем проекции полного момента $F_z = m_z + j_z$ на ось структуры, где m_z – проекция орбитального момента огибающей функции дырки на ось роста. Например, основное состояние остается двукратно вырожденным: $F_z = \pm 3/2$. Первое возбужденное состояние, четырехкратно вырожденное в тонком диске, в диске конечной

толщины расщепится на два двукратно вырожденных состояния с $F_z = \pm 1/2$ и $F_z = \pm 5/2$. Приложение магнитного поля полностью снимает вырождение по $|F_z|$.

Если выполнено условие $L = L_z$, то реализуется случай квантовой сферы, рис. 2.5(с). В нулевом магнитном поле уровни энергии дырки квантованы по величине полного момента $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{L}$, где \mathbf{J} – спин дырки и \mathbf{L} – ее орбитальный момент, и вырождены по его проекции на направление магнитного поля F_z [156]. Например, основное состояние дырки в сферической квантовой точке соответствует величине полного момента $F = 3/2$ и его волновая функция может быть записана как [156, 159] (здесь использованы стандартные обозначения, введенные в [156], см. пояснения к (2.5).)

$$\begin{aligned} \Psi_{S_{3/2}}^{sph}(\mathbf{r}) = & f_1(r)|L = 0, J = 3/2, F = 3/2, F_z\rangle \\ & + g_1(r)|L = 2, J = 3/2, F = 3/2, F_z\rangle, \end{aligned} \quad (2.26)$$

а волновая функция первого возбужденного состояния имеет вид:

$$\begin{aligned} \Psi_{P_{3/2}}^{sph}(\mathbf{r}) = & f_2(r)|L = 1, J = 3/2, F = 3/2, F_z\rangle \\ & + g_2(r)|L = 3, J = 3/2, F = 3/2, F_z\rangle. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Здесь $f_{1,2}(r)$ и $g_{1,2}(r)$ – радиальные функции, которые рассчитывались по методу, описанному в 2.2.2, где вместо кулоновского потенциала мелкого акцептора необходимо взять параболический потенциал квантовой точки. На рис. 2.5(с) $E_{hh} = 3/L^2 = 3/L_z^2$ – энергия основного состояния размерного квантования изолированной тяжелой дырки в соответствующей квантовой сфере. В слабом магнитном поле происходит линейное расщепление вырожденных по F_z при $B = 0$ уровней. При увеличении магнитного поля становится более выраженным квадратичный по величине магнитного поля диамагнитный сдвиг.

На рис. 2.5 (d) проиллюстрированы дырочные уровни в случае, когда $L_z \gg L$. На графике E_{lh}^\perp – энергия основного состояния размерного квантования изолированной легкой дырки в поперечном сечении структуры. Отметим, что основное

состояние дырки в такой удлиненной квантовой точке сформировано, в основном, блоховскими функциями с $J_z = \pm 1/2$ [173], ср. с (2.11a). Здесь состояния дырки характеризуются, также как в случае квантового диска, проекцией полного момента на ось структуры $F_z = J_z + m_z$. В нулевом магнитном поле все состояния двукратно вырождены. Из рисунка видно, что даже если магнитная длина мала по сравнению с высотой квантовой точки, весь эффект от магнитного поля сводится к линейному расщеплению уровней. Это связано с тем, что магнитное поле, направленное вдоль оси z , не влияет на зависимость волновой функции дырки от соответствующей координаты. Более того, во всем диапазоне, показанном на рисунке, магнитное поле остается достаточно слабым, чтобы не влиять на квантование дырки в поперечном сечении квантовой точки.

Наконец, рассмотрим предельный случай квантовой проволоки, где $L_z \rightarrow \infty$ и локализация вдоль оси z отсутствует, см. рис. 2.5(e). В слабых магнитных полях, где $L_B \gg L$, наблюдается линейное расщепление двукратно вырожденных по проекции полного момента F_z уровней энергии. Если же магнитная длина становится сравнимой с поперечным размером проволоки, то доминируют эффекты, квадратичные по магнитному полю.

Спиновое расщепление в магнитном поле

Как уже отмечалось, включение магнитного поля приводит к полному снятию вырождения уровней дырки в квантовой точке. В слабых магнитных полях расщепление вырожденных при $B = 0$ уровней ΔE линейно по величине поля, что позволяет ввести эффективный g -фактор согласно

$$g = \frac{\Delta E}{\mu_B B}. \quad (2.28)$$

Знак ΔE и, соответственно, g -фактора определяется следующим образом. Если при приложении магнитного поля вдоль оси z ниже по энергии оказывается состояние с отрицательной проекцией полного момента на эту ось, то g -фактор считается положительным. Если ниже по энергии состояния с положительной проекцией

спина на направление магнитного поля, то g -фактор считается, соответственно, отрицательным. Определение (2.28) имеет смысл в случае, если в нулевом магнитном поле уровень энергии двукратно вырожден по модулю проекции полного момента на направление магнитного поля. В случае, если в нулевом магнитном поле кратность вырождения состояния больше двух, разумно определять g -фактор отдельно для каждой пары состояний с заданным модулем проекцией момента на направление магнитного поля. Отметим, что для параболического потенциала величина g -фактора зависит только от соотношения между размерами квантовой точки L_x, L_y, L_z , но не от их абсолютных значений. Аналогичная ситуация имеет место быть и для произвольных потенциалов размерного квантования, связанных преобразованием подобия $V'(\mathbf{r}) = V(\alpha\mathbf{r})$, α – константа. Это подробно обсуждается в гл. 3 (разд. 3.4).

Начнем анализ зависимости g -фактора от параметров квантовой точки со случая аксиально-симметричной структуры. На рисунке 2.6(а) показана зависимость g -фактора основного состояния дырки от отношения высоты точки к ее диаметру, L_z/L . Отметим, что при $L_z = L$ (квантовая сфера) основное состояние дырки четырехкратно вырождено, и скачок g -фактора анализируется отдельно ниже. Во всех остальных случаях основное состояние дырки двукратно вырождено и ее g -фактор определяется согласно формуле (2.28). Расчет выполнен для нескольких наборов параметров Латтинжера γ_1, γ , соответствующих AlAs [190], CdTe [191], GaAs [190], InAs [190].

В предельном случае квантового диска, $L_z \ll L$, величина g -фактора дырки близка к его значению в квантовой яме [179]:

$$g_{2d} = -6\kappa + 12 \frac{\hbar^2}{m_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\langle lh_{2n} | \gamma \hat{k}_z | hh_1 \rangle|^2}{E_{lh_{2n}} - E_{hh_1}}, \quad (2.29)$$

где $|hh_1\rangle$ – основное состояние тяжелой дырки при нулевом волновом векторе в плоскости квантовой ямы, $|lh_{2n}\rangle$ – четные возбужденные состояния легкой дырки, E_{hh_1} и $E_{lh_{2n}}$ – соответствующие энергии. Формула (2.29) может быть представлена

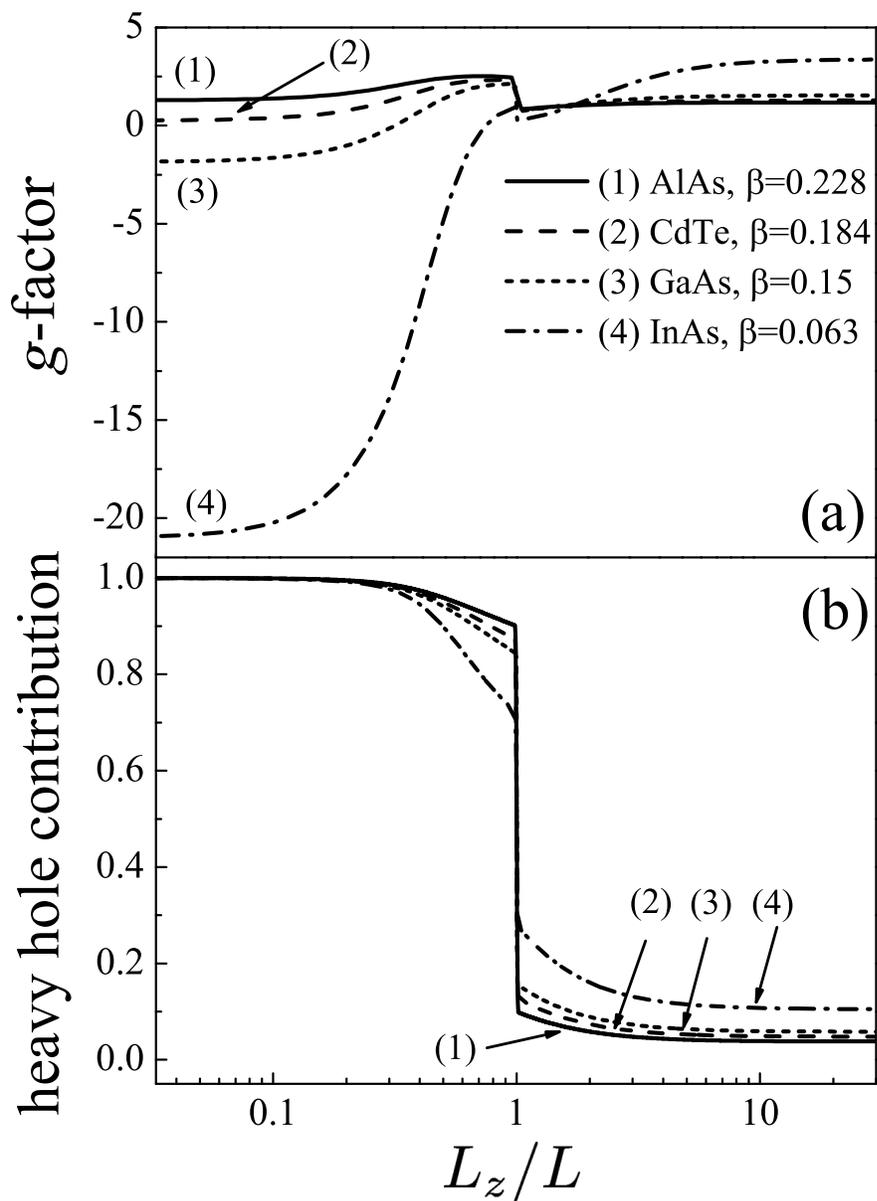


Рис. 2.6: Зависимость g -фактора и вклада тяжелой дырки для основного состояния в цилиндрически симметричной квантовой точке $L_x = L_y = L$ от отношения высоты точки к диаметру L_z/L для нескольких наборов параметров, соответствующих различным полупроводниковым материалам.

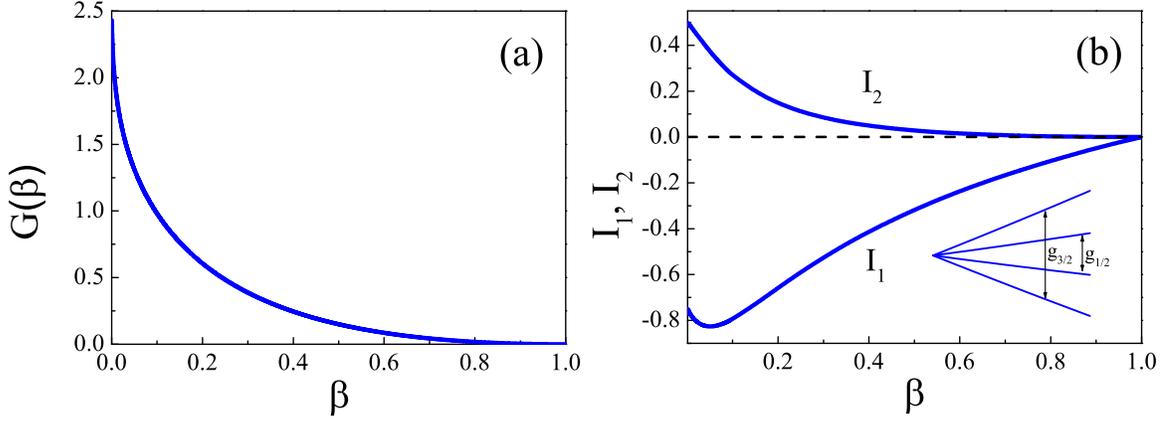


Рис. 2.7: Зависимость безразмерных функций G (уравнение (2.30)) и I_1 , I_2 (формула (2.32)) от отношения масс легкой и тяжелой дырки β для квантового диска и квантовой сферы с параболическим потенциалом.

в виде

$$g_{2d} = -6\kappa + \gamma_1 G_1(\beta), \quad (2.30)$$

где

$$\beta = \frac{\gamma_1 - 2\gamma}{\gamma_1 + 2\gamma}$$

– отношение эффективных масс легкой и тяжелой дырки, а $G(\beta)$ – безразмерная функция, зависящая только от вида потенциала квантовой ямы, график которой для параболического потенциала представлен на рисунке 2.7(а). В этом пределе основное состояние дырки описывается, главным образом, блоховскими функциями с проекцией момента $\pm 3/2$ (тяжелых дырок). Перенормировка g -фактора по отношению к его значению $g^{bulk} = -6\kappa$ для тяжелой дырки в объемном кристалле связана с магнитоиндуцированным смешиванием с состояниями легкой дырки [180, 179]. В зависимости от параметров материала значение g -фактора основного состояния дырки в предельном случае квантового диска может быть как положительным (например, AlAs, CdTe), так и отрицательным (GaAs, InAs), и оно больше в материалах с большим значением отношения масс легкой и тяжелой дырки β .

Увеличение высоты квантовой точки приводит к увеличению g -фактора за счет сближения по энергии состояний тяжелой и легкой дырки и более эффективно-

го их смешивания. Если в пределе квантового диска g -фактор отрицателен, то при некоторой высоте квантовой точки он обращается в нуль за счет компенсации объемного вклада (2.21) и вклада, связанного с магнитоиндуцированным смешиванием дырок [192]. В квантовой точке со сферически-симметричным потенциалом размерного квантования в нулевом магнитном поле основное состояние дырки четырехкратно вырождено. В магнитном поле основное состояние расщепляется на эквидистантные в малом поле подуровни, см. рис. 2.5(с). В изотропном сферическом случае определение эффективного g -фактора (2.28) таким образом теряет смысл. Разрыв на графике связан с тем, что в слегка сплюснутых квантовых точках ($L_z < L$) основное состояние дырки соответствует, в основном, блоховским функциям с проекцией момента $J_z = \pm 3/2$ (тяжелым дыркам), а в слегка вытянутых – $J_z = \pm 1/2$ (легким дыркам). Поэтому в пределе $L_z \rightarrow L - 0$ g -фактор соответствует расщеплению двух крайних состояний квадруплета, а в пределе $L_z \rightarrow L + 0$ – двух средних состояний, что приводит к скачку на графике в 3 раза. Соответствующая схема энергетических уровней показана на вставке рис. 2.7 (b). Согласно [159], в изотропном потенциале (см. подробнее в разделе 3.4)

$$g_{1/2}^{sph} = \frac{g_{3/2}^{sph}}{3} = -2\kappa + \frac{8}{5}\gamma I_1 - \frac{4}{5}[\gamma_1 - 2(\gamma + \kappa)] I_2 \quad (2.31)$$

где

$$I_1 = \int_0^\infty r^3 g_1(r) \frac{df_1(r)}{dr} dr, \quad I_2 = \int_0^\infty r^2 g_1^2(r) dr \quad (2.32)$$

определяются радиальными функциями $f_1(r)$ и $g_1(r)$, введенными в (2.26). Зависимости величин I_1 и I_2 от отношения масс легкой и тяжелой дырки показаны на рис. 2.7(b). Здесь необходимо отметить, что выражение (2.31) в работе [159] приведена с противоположным знаком. Это связано с противоположным знаком в определении g -фактора дырки в [159] и (2.28). Также в [159] в определении g -фактора в знаменателе присутствует дополнительный множитель $|J_z|$, тогда скачка в зависимости $g(L_z/L)$ при $L = L_z$ не будет, такое определение распространено в физике коллоидных нанокристаллов.

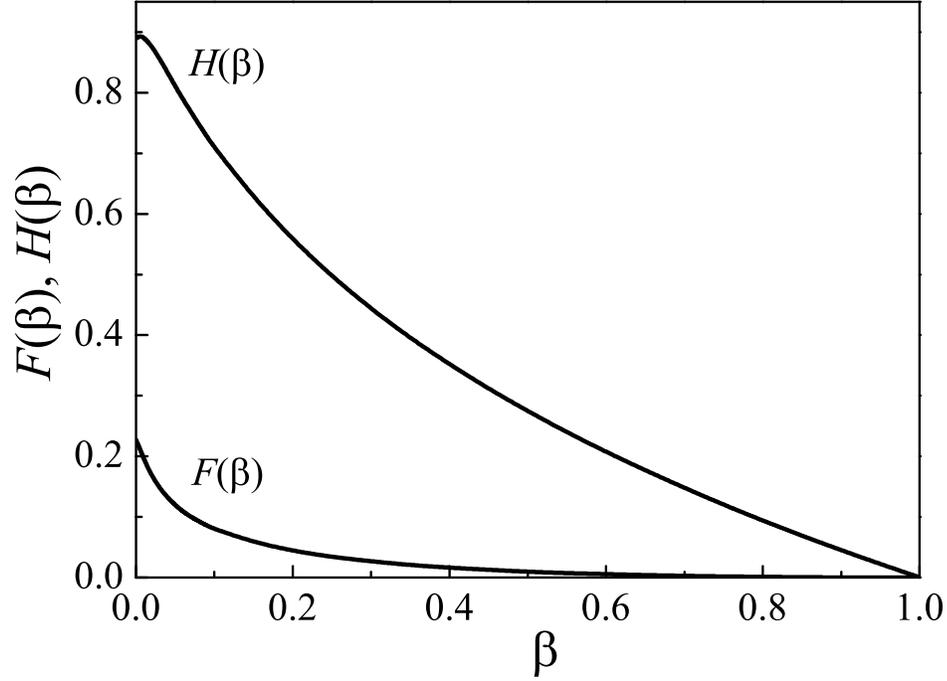


Рис. 2.8: Зависимость безразмерных величин F и H , введенных в (2.35), от отношения масс легкой и тяжелой дырки β для квантовой проволоки с параболическим потенциалом.

При дальнейшем увеличении высоты квантовой точки достигается предел квантовой проволоки. В этом пределе в нулевом магнитном поле основное состояние дырки двукратно вырождено, и ему соответствуют следующие собственные состояния (ср. с (2.11a)):

$$\Psi_{\pm 1/2}^{wire} = \psi_1(\rho) |J_z = \pm 1/2\rangle + \psi_2(\rho) \exp(\mp 2i\varphi) |J_z = \mp 3/2\rangle, \quad (2.33)$$

где ρ и φ – полярные координаты в поперечном сечении квантовой проволоки, $\psi_1(\rho)$ и $\psi_2(\rho)$ – радиальные функции, зависящие от отношения масс β . При приложении магнитного поля вырождение снимается, и g -фактор основного состояния дырки в квантовой проволоке может быть представлен в виде:

$$g^{wire} = -2\kappa - 4(\gamma_1 + \gamma - 2\kappa) F(\beta) + 2\sqrt{3}\gamma H(\beta), \quad (2.34)$$

где

$$F(\beta) = \int_0^{\infty} \psi_2^2(\rho) \rho d\rho, \quad H(\beta) = \int_0^{\infty} \left[\left(\psi_2(\rho) \frac{d\psi_1(\rho)}{d\rho} - \psi_1(\rho) \frac{d\psi_2(\rho)}{d\rho} \right) \rho^2 - 2\rho\psi_1(\rho)\psi_2(\rho) \right] d\rho \quad (2.35)$$

– безразмерные интегралы от функций $\psi_1(\rho)$ и $\psi_2(\rho)$, введенных в (2.33). Зависимости $F(\beta)$ и $H(\beta)$ показаны на рисунке 2.8. Здесь зависимость предельного значения величины g -фактора дырки от отношения масс легкой и тяжелой дырки β противоположно той, которая имеет место для квантового диска: чем меньше величина β , тем больше предельное значение.

Зависимость g -фактора дырки от геометрии потенциала размерного квантования коррелирует с изменением вклада тяжелой дырки в волновую функцию основного состояния. Полная доля блоховских состояний с проекциями момента $J_z = \pm 3/2$ в дырочной волновой функции представлена на рис. 2.6(b). Из рисунка видно, что в пределе квантового диска волновая функция основного состояния дырки практически полностью состоит из тяжелых дырок вне зависимости от отношения масс легкой и тяжелой дырки β . При увеличении высоты диска увеличивается доля легких дырок, что приводит не только к росту g -фактора, но даже, в некоторых случаях, к изменению его знака. При $L_z = L$, когда потенциал размерного квантования становится изотропным, происходит переход от состояния, в котором доминирует тяжелая дырка, к состоянию, основной вклад в которое вносит легкая дырка. Это соответствует скачку g -фактора и скачку на зависимости вклада тяжелой дырки в волновую функцию как показано на рис. 2.6(a) и (b). В предельном случае квантовой проволоки вклад тяжелой дырки тем больше, чем меньше параметр β , что отражается и на предельном значении g -фактора.

Роль анизотропии системы

Теперь перейдем к наиболее общему случаю полностью анизотропного потенциала квантовой точки, в которой $L_x \neq L_y \neq L_z$. На рис. 2.9 (а) показана зависимость g -фактора основного состояния дырки от отношений L_z/L_x и L_z/L_y , а на рис. 2.9

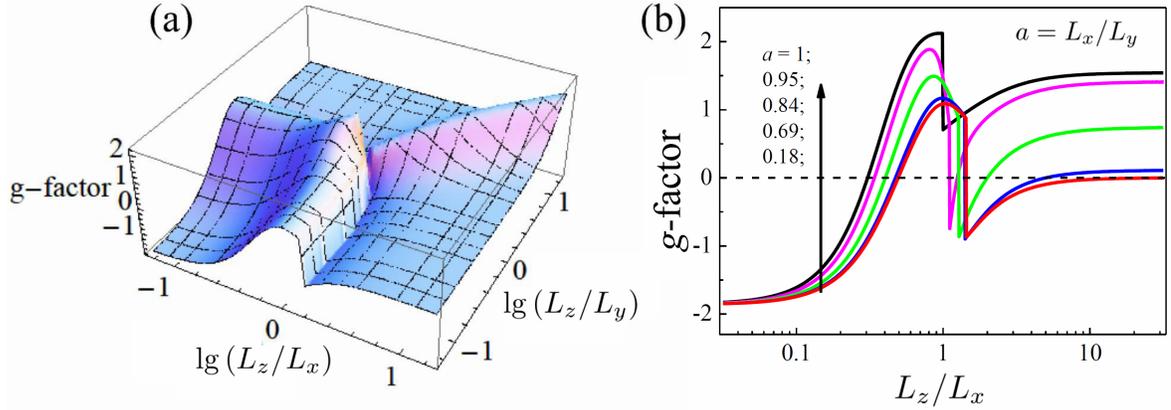


Рис. 2.9: Зависимость g -фактора основного состояния дырки в анизотропной квантовой точке, $L_x \neq L_y$: (a) от $\lg(L_z/L_x)$ и $\lg(L_z/L_y)$, где \lg – десятичный логарифм; (b) от L_z/L_x при фиксированном значении L_x/L_y (от 1 до 0.18). Расчет выполнен для параметров Латтинжера, соответствующих GaAs.

(b) показаны зависимости g -фактора от L_z/L_x , рассчитанные при фиксированном отношении $a = L_x/L_y$ (от 1 до 0.18) для параметров GaAs. Качественный ход кривых на рис. 2.9 (b) одинаков, однако положение точки скачка и величина разрыва g -фактора зависят от отношения L_x/L_y , характеризующего анизотропию потенциала в плоскости структуры, перпендикулярной магнитному полю.

При $L_x \neq L_y$ зависимость g -фактора от отношения L_z/L_x может иметь два нуля (например, для параметров GaAs). Природа первого из них (при $L_z < L_x < L_y$) уже обсуждалась выше и обусловлена конкуренцией двух вкладов в эффект Зеемана. Дырочный g -фактор обращается в нуль второй раз при $L_z/L_x = L_y/L_x$, т.е. когда квантовая точка становится изотропной в плоскости (zy), содержащей магнитное поле. Этот нуль имеет симметричную природу и имеет место при любых параметрах Латтинжера: при $L_z = L_y > L_x$ основное состояние дырки в нулевом магнитном поле соответствует проекциям полного момента $F_x = +3/2$ и $F_x = -3/2$ на ось x , вдоль которой квантование самое сильное. В рассматриваемой модели вклады кубической анизотропии в (2.19) и (2.21) не учитываются, и магнитное поле может смешивать только состояния с разностью проекций момента ± 1 .

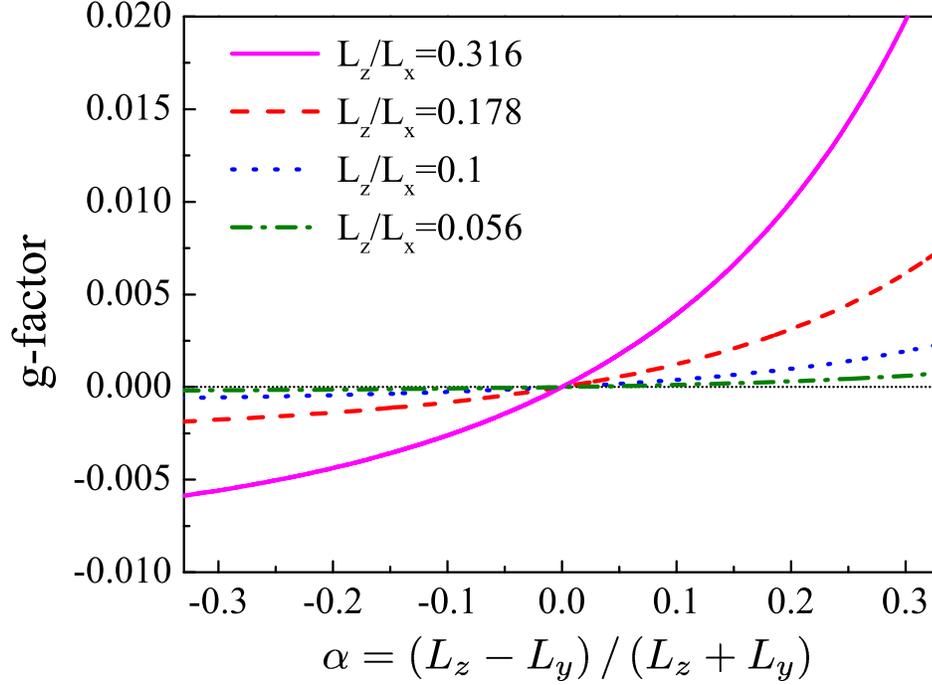


Рис. 2.10: Зависимость g -фактора основного состояния дырки в кантовом диске с осью роста вдоль оси x от анизотропии латерального потенциала диска $\alpha = (L_z - L_y)/(L_z + L_y)$. Расчет выполнен для параметров Латтинжера, соответствующих GaAs.

Подобная ситуация имеет место в широко используемой в экспериментах геометрии, когда магнитное поле приложено в плоскости квантового диска или квантовой ямы, где $L_z \ll L_x, L_y$ и $B \parallel x$: соответствующая компонента g -фактора тяжелой дырки как правило мала [188]. Проанализируем относительные вклады в g -фактор тяжелой дырки в плоскости квантовой точки от кубических членов, связанных с параметром q [151]:

$$\hat{H}_3 = -2q\mu_B(J_x^3 B_x + J_y^3 B_y + J_z^3 B_z), \quad (2.36)$$

которые приводят к появлению ненулевого поперечного g -фактора $g_\perp = -3q$ [188], и от анизотропии формы точки $\alpha = (L_z - L_y)/(L_z + L_y)$ при использовании сферического приближения для гамильтониана Латтинжера. Последний представлен на рис. 2.10 для различных отношений L_z/L_x (от 0.056 до 0.316) для параметров, соответствующих GaAs. При малых значениях α зависимости могут быть апрокс-

кимированы линейной функцией:

$$g = C \sqrt{\frac{L_z}{L_x}} \alpha \quad (2.37)$$

где C – константа. Из графика видно, что при параметрах GaAs, когда $g_{\perp} = -3q \approx 0.06$ и достаточно малом отношении высоты точки к ее латеральному размеру, вклад анизотропии формы квантовой точки в g -фактор пренебрежимо мал. Описание эффекта Зеемана в квантовых дисках в магнитном поле, приложенном в плоскости структуры, требует, таким образом, учета эффектов кубической анизотропии, а также интерфейсного смешивания тяжелой и легкой дырок [167], рассмотрение которых выходит за рамки диссертации.

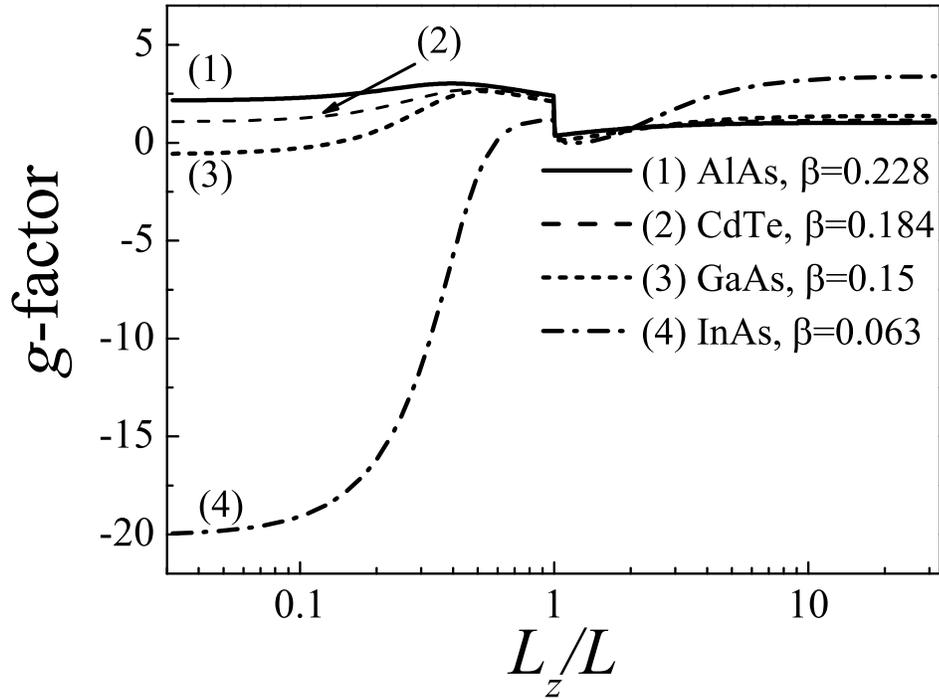


Рис. 2.11: Зависимость g -фактора основного состояния дырки в цилиндрически симметричной квантовой точке $L_x = L_y = L$ от отношения высоты точки к диаметру L_z/L для нескольких наборов параметров, соответствующих различным полупроводниковым материалам, рассчитанная с учетом гофрировки валентной зоны для структуры, выраженной вдоль направления z || [001].

Теперь рассмотрим ситуацию, в которой магнитное поле, направлено под углом к главным осям структуры. Во всех случаях кроме изотропного (в котором

оси можно направить произвольно) основное состояние дырки двукратно вырождено, и для его описания можно ввести оператор псевдоспина $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, где σ_i – матрицы Паули, $i = x, y, z$ – главные оси структуры. Тогда зеемановское расщепление основного состояния слабых полях может быть записано как

$$\hat{H}_Z = \frac{\mu_B}{2} (g_{xx}\sigma_x B_x + g_{yy}\sigma_y B_y + g_{zz}\sigma_z B_z), \quad (2.38)$$

где g_{ii} – компоненты тензора g -фактора вдоль главных осей, B_i – соответствующие компоненты магнитного поля. В этом случае расщепление уровня можно записать как:

$$\Delta E = \mu_B \sqrt{g_{xx}^2 B_x^2 + g_{yy}^2 B_y^2 + g_{zz}^2 B_z^2}. \quad (2.39)$$

Компоненты тензора g -фактора g_{xx} , g_{yy} , g_{zz} могут быть вычислены независимо друг от друга в рамках нашей модели путем поворота структуры так, чтобы интересующее нас направление (x или y) совпало с осью z . Величины g_{xx} , g_{yy} , g_{zz} в общем случае независимы, в аксиально-симметричной структуре с осью вдоль z выполнено $g_{xx} = g_{yy}$, в симметричном квантовом диске $g_{xx} = g_{yy} = 0$.

В конце раздела кратко проанализируем влияние гофрировки валентной зоны на g -фактор основного состояния дырки. На рис. 2.11 показаны зависимости g -фактора основного состояния дырки в цилиндрически симметричной квантовой точке $L_x = L_y = L$ от отношения высоты точки к диаметру L_z/L для нескольких наборов параметров Латтинжера, рассчитанные с учетом гофрировки валентной зоны. Сравнение кривых на рис. 2.11 с соответствующими зависимостями на рис. 2.6 (а), вычисленными в рамках сферического приближения, показывает, что качественный вид зависимостей аналогичен, различия только количественные. Например, для параметров GaAs в пределе квантового диска, в котором погрешность сферического приближения оказывается наибольшей, различие в вычислении поправки к величине объемного g -фактора составляет не более 20%. Таким образом, в рамках сферического приближения в большинстве случаев можно хорошо оценить величину g -фактора основного состояния дырки в квантовой точке. Выход

за рамки сферического приближения необходим, если величина g -фактора, вычисленного с его применением оказывается близкой к нулю, либо требуется большая точность расчета.

2.4 Краткие итоги

В главе 2 получены следующие основные результаты:

- Развита вариационный метод для построения волновых функций и вычисления энергий связи простейших кулоновских комплексов с учетом сложной структуры зон. Выполнены расчеты энергии связи нейтральной акцепторной примеси в квантовых ямах и в квантовых проволоках в рамках гамильтониана Латтинжера для состояний валентной зоны. Построенные пробные функции имеют ясный физический смысл, небольшое число вариационных параметров и плавно переходят между формами, отвечающими предельными случаям, при изменении подгоночных параметров.
- Продемонстрировано, что при переходе от объемного акцептора к двумерному или одномерному пределу, существенно меняется не только величина энергии кулоновского притяжения дырки к примеси, но и происходит перестройка структуры волновой функции акцептора. Последняя связана с особенностями структуры валентной зоны и может быть интерпретирована как изменение эффективной массы дырки с шириной квантовой ямы или радиусом квантовой проволоки. В результате возможна немонотонная зависимость энергии связи акцептора от ширины ямы или радиуса проволоки и даже уменьшение энергии связи акцепторной примеси в узкой квантовой яме по сравнению с объемным материалом.
- Проведено теоретическое исследование эффекта Зеемана в валентной зоне Γ_8 полупроводниковых наноструктур с решеткой цинковой обманки. На примере аксиально-симметричной квантовой точки исследованы энергетический

спектр дырки в магнитном поле и зависимость g -фактора основного состояния от отношения высоты точки к ее поперечному размеру. Подробно изучены частные случаи квантового диска, сферически-симметричной квантовой точки и квантовой проволоки, а также переходы между ними. Для случаев квантового диска и квантовой сферы результаты численного расчета g -фактора дырки согласуются с известными аналитическими формулами. Для предела квантовой проволоки получено универсальное выражение для величины g -фактора основного состояния дырки, зависящее только от параметров Латтижера и вида потенциала структуры.

- Выполнен расчет зависимости g -фактора основного состояния дырки от формы квантовой точки при произвольном соотношении между размерами точки вдоль осей координат. Исследован случай латерально-анизотропного квантового диска и магнитного поля, приложенного в плоскости структуры. Показано, что вклад в g -фактор дырки от такой анизотропии в типичных полупроводниках мал по сравнению со вкладом от кубических членов, связанных с параметром q . Продемонстрирована корреляция между изменением структуры волновой функции дырки и величиной ее g -фактора. Показано, что сферическое приближение для гамильтониана Латтинжера достаточно хорошо применимо для вычисления g -фактора основного состояния дырки в квантовой точке.

Глава 3

Кулоновские комплексы в эпитаксиальных и коллоидных квантовых точках

3.1 Введение. Особенности эпитаксиальных и коллоидных квантовых точек II-VI

Объемные полупроводники II-VI и наноструктуры на их основе привлекают повышенный интерес исследователей сильными экситонными эффектами [6, 7]. В последние годы возникла волна повышенного интереса к квантовым точкам на основе систем II-VI из-за широких перспектив их применения. В частности, эпитаксиальные точки CdSe/Zn(S,Se) успешно используются в качестве активной области в лазерных гетероструктурах [193, 194]. Кроме того, они были признаны многообещающими кандидатами для излучения одиночных фотонов при комнатной температуре и генерации пар запутанных фотонов [195, 196, 197]. В первых работах [198, 199, 200] эпитаксиальная система $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}$ рассматривалась как разупорядоченная квантовая яма, содержащая области с повышенным содержанием Cd, так называемые «наноостровки». Более детальные исследования [96] способствовали пониманию того, что такие наноостровки до определенной степени могут рассматриваться как изолированные квантовые точки. Исследования методом спектроскопии фотолюминесценции возбуждения показали, что появле-

ние изолированных островков характерно для структур с небольшим количеством осажденного CdSe [201]. Сопоставление оптических и структурных свойств образцов с различной номинальной толщиной вставки CdSe позволило сделать вывод, что при низкой температуре большинство наноструктур является хорошо изолированными квантовыми объектами, между которыми, однако, возможен резонансный перенос энергии [A10], [202]. Важно отметить, что изменение концентрации элементов II^{ой} и VI^{ой} группы между областями квантовой точки и барьером в эпитаксиальных гетероструктурах CdSe/Zn(S,Se) является не резким, а плавным из-за процессов диффузии и сегрегации.

Ожидается, что квантовые точки II-VI с плавным изменением состава обладают хорошими характеристиками в качестве излучателей. Действительно, в химически синтезированных коллоидных квантовых точках с резкими границами высокая скорость безызлучательной оже-рекомбинации приводит к понижению квантового выхода люминесценции. Показано, что оже-процессы подавляются в нанокристаллических гетероструктурах на основе CdSe с постепенно меняющимся составом, подобных синтезированных в [203], за счет сглаживания гетеропотенциала [204, 205, 206, 207]. Дальнейший прогресс в исследовании оптических явлений в квантовых точках II-VI и создании эффективных наноизлучателей “квантового света” (одиночных фотонов, пар запутанных фотонов) требуют детального описания модели размерно квантованных состояний носителей заряда в эллипсоидальных квантовых точках гладким потенциальным профилем. Среди разнообразных теоретических методов, в том числе, атомистических подходов [208, 209, 210], метод $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теории возмущений оказывается особенно предпочтительным для наноструктур с гладким профилем потенциала, где интерфейсные эффекты играют незначительную роль.

В самой простой модели эффективной массы (с невырожденной параболической зоной) были изучены различные виды удерживающих потенциалов для квантовых точек: резкий потенциал с бесконечными и конечными барьерами,

[103, 211, 212, 213, 214, 215], параболический потенциал [186, 216] и различные виды гладкого потенциала с конечной высотой [217, 218, 219, 220]. Было также показано, что параболический потенциал является хорошим приближением для описания гладкого потенциального профиля в плоскости самоорганизованных квантовых точек в форме линзы [221]. Однако, чтобы правильно описать энергетический спектр дырок, локализованных в квантовых точках, необходимо учитывать сложную структуру валентной зоны.

Такой учет был выполнен для сферических квантовых точек с бесконечным барьером [104, 222, 223] и квантовых точек в виде диска [215]. Было показано, что смешивание состояний тяжелых и легких дырок может существенно изменить энергетический спектр и волновые функции основного состояния, а также тонкую структуру основного состояния, обусловленную как анизотропией формы точки, кристаллическим полем или внешним магнитным полем [154]. Позже, полный многозонный $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метод применялся для сферических квантовых точек [224], а также различных гетероструктур как с резкими [225, 226, 227, 228], так и плавными потенциальными барьерами [229, 182], [A8]. Однако, квантовые точки с плавным барьером конечной высоты исследовались только в рамках однозонного приближения в методе эффективной массы, этот подход не применим для эпитаксиальных наноструктур на основе CdSe/ZnSe и коллоидных точек CdSe/CdS с плавно меняющимся составом [230, 231, 203]. В данной главе диссертации, написанной на основе работ [A9],[A10],[A11],[A12],[A13],[A14], дано теоретическое описание дырочных, экситонных и биэкситонных состояний в рамках гамильтониана Латтинжера в квантовых точках с плавным потенциальным профилем на основе методов, предложенных в гл. 1 и 2.

3.2 Основное состояние дырок в квантовых точках с гладким профилем потенциала

3.2.1 Однозонное приближение

Для анализа специфики локализации носителей заряда в структурах с плавным потенциалом $V(\mathbf{r})$ кратко рассмотрим случай, когда кинетическая энергия частицы описывается в однозонном приближении параболическим законом

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m^*}. \quad (3.1)$$

Здесь, как и выше, $\mathbf{k} = -i\nabla$ – оператор волнового вектора, а $m^* = m_{e(h)}$ – эффективная масса электрона (e) или дырки (h).

В задачах, обладающих сферической симметрией, в качестве предельного случая рассматривается параболический потенциал (ср. с гл. 1)

$$V_0(r) = \frac{\kappa}{2} r^2, \quad (3.2)$$

где κ – жесткость потенциала. Параболический потенциал, с одной стороны, является хорошим приближением для описания структуры с гладким потенциальным профилем, с другой, делает техническую часть вычислений значительно проще, что облегчает анализ полученных результатов. Одночастичные волновые функции квантования в параболическом потенциале имеют вид

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\Theta),$$

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{L^{3/2+l}} \left[\frac{2n!}{\Gamma(n+l+3/2)} \right]^{1/2} r^l \exp \left[-\frac{r^2}{2L^2} \right] L_n^{l+1/2} \left[\frac{r^2}{L^2} \right], \quad (3.3)$$

а соответствующие собственные энергии записываются как

$$E_N = \hbar\omega(N + 3/2) \quad N = 2n + l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.4)$$

Здесь $\omega = \sqrt{\kappa/m^*}$ и $L = \sqrt{\hbar/m^*\omega}$ – характерные частота и “длина” осциллятора, n, l, m – главное, орбитальное и магнитные квантовые числа, Y_{lm} – сферические гармоники [232], $L_n^{l+1/2}$ – обобщенные полиномы Лагерра [233].

Для описания структур с конечной величиной разрыва зон, V_{off} , вводится модель гауссова потенциала

$$V_G(r) = V_{\text{off}} \left[1 - \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right) \right], \quad (3.5)$$

где a – характерный радиус квантовой точки. При $r \ll a$ потенциал (3.5) можно приблизить параболическим $V_G(r) \approx V_0(r)$ с жесткостью $\kappa = 2V_{\text{off}}/a^2$. При $r \gg a$ $V_G(r)$ выходит на константу V_{off} . Далее в качестве единицы энергии используется энергия основного состояния осциллятора

$$E_0 = 3\hbar\omega/2, \quad (3.6)$$

а в качестве единицы длины – осцилляторная длина L , соответствующие безразмерные значения параметров обозначаются тильдой. Так, $\tilde{V}_{\text{off}} = V_{\text{off}}/E_0$ и $\tilde{r} = r/L$.

Поскольку для потенциала в форме (3.5) аналитическое решение одночастичного уравнения Шредингера отсутствует, были выполнены как вариационные расчеты энергии основного состояния, так и численная диагонализация матрицы гамильтониана, вычисленной на базисе (3.3). Вариационная радиальная волновая функция $\tilde{R}_0(\tilde{r}) = R_0(r/L)L^{3/2}$ была выбрана в простейшем виде

$$\tilde{R}_0 = \frac{2\alpha^{3/4}}{\pi^{1/4}} \exp\left[-\frac{\alpha\tilde{r}^2}{2}\right] \quad (3.7)$$

где α – единственный варьируемый параметр. Энергия основного состояния в зависимости от α описывается выражением:

$$E(\alpha)/E_0 = \frac{\alpha}{2} + \tilde{V}_{\text{off}} - \frac{3\sqrt{3}\alpha^{3/2}\tilde{V}_{\text{off}}^{5/2}}{\left(1 + 3\alpha\tilde{V}_{\text{off}}\right)^{3/2}}, \quad (3.8)$$

экстремум которого легко найти стандартными методами. Сравнение энергии основного состояния в вариационном и численном расчетах показано на рис. 3.1(а), а на панели (b) приведены значения вариационного параметра α и эффективного радиуса локализации

$$\tilde{r}_{\text{loc}} = r_{\text{loc}}/L = \sqrt{\langle\tilde{r}^2\rangle} = \sqrt{\int_0^\infty \tilde{R}_0^2 \tilde{r}^4 d\tilde{r}}$$

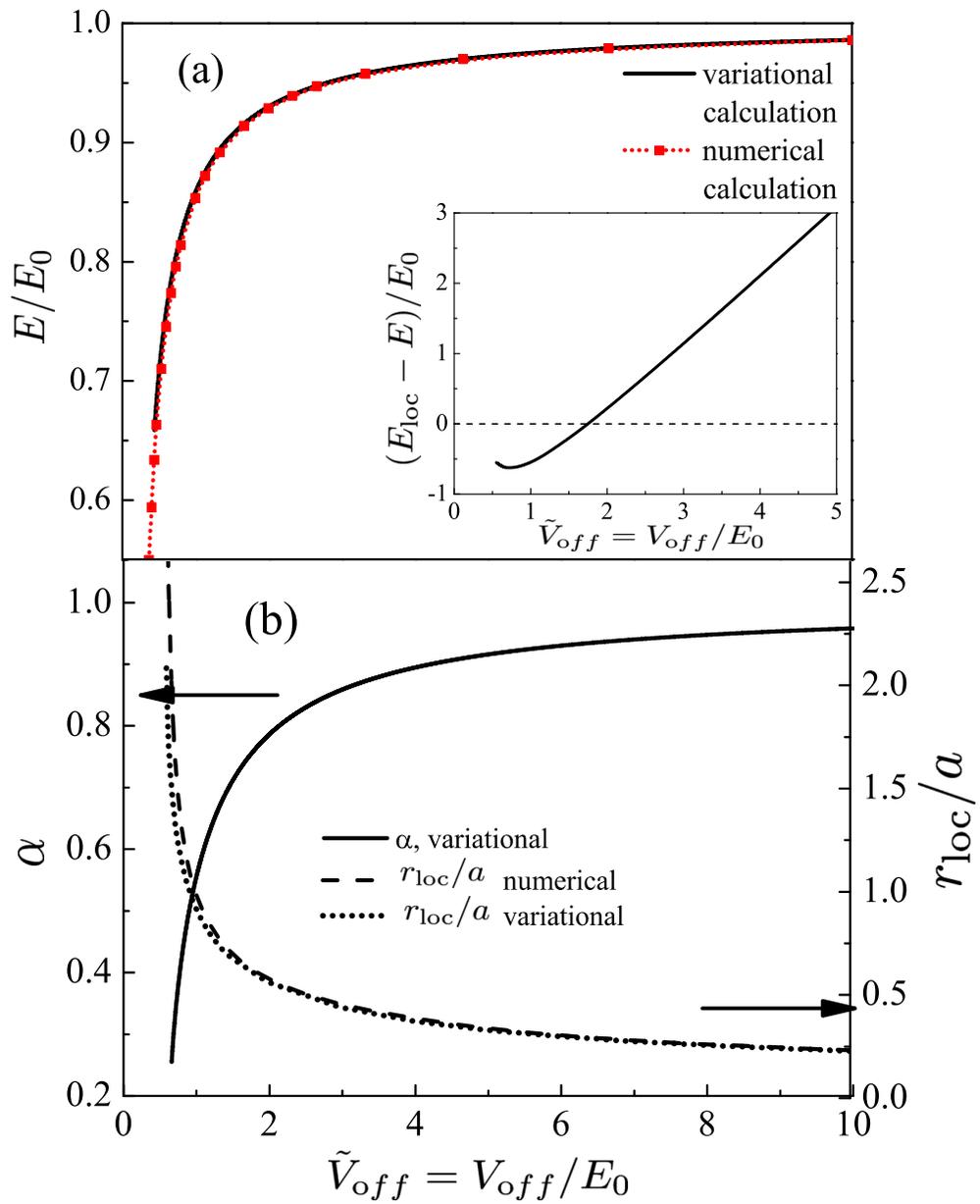


Рис. 3.1: (a) Зависимость энергии основного состояния дырки E/E_0 от $\tilde{V}_{off} = V_{off}/E_0$, вставка показывает безразмерную разность между энергией локализации и энергией частицы; (b) Зависимости вариационного параметра α и радиуса локализации r_{loc}/a от \tilde{V}_{off} .

от величины разрыва зон.

Как видно из рис. 3.1, с увеличением \tilde{V}_{off} энергия и волновая функция частицы все точнее описываются моделью параболического потенциала, поскольку с ростом \tilde{V}_{off} проникновение волновой функции в подбарьерную область уменьшается. С уменьшением разрыва зон \tilde{V}_{off} падает как энергия размерного квантования E/E_0 , так и энергия локализации $E_{\text{loc}}/E_0 = (V_{\text{off}} - E)/E_0$, см. вставку к рис. 3.1(a). Численный расчет демонстрирует, что связанное состояние существует при $\tilde{V}_{\text{off}} > 0.55$, вариационный подход дает, ожидаемо, чуть худшую оценку $\tilde{V}_{\text{off}} \approx 0.65$. Из панели (b) рисунка видно, что во всем диапазоне изменения параметров, где вариационный расчет дает связанное состояние, он адекватно описывает и длину локализации волновой функции \tilde{r}_{loc} .

3.2.2 Сферически-симметричная модель для зоны Γ_8

В этом разделе будут приведены результаты для четырехкратно вырожденной зоны Γ_8 , считая, что энергия размерного квантования дырки значительно меньше, чем величина спин-орбитального расщепления валентной зоны. Кристаллическая анизотропия и анизотропия формы квантовой точки не учитываются. Напомним, что оператор кинетической энергии для зоны Γ_8 в сферическом приближении имеет вид (2.1)

$$\hat{H}_L = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma \right) \hat{k}^2 - 2\gamma \sum_{\alpha,\beta} \{k_\alpha k_\beta\} \{J_\alpha J_\beta\} \right]. \quad (3.9)$$

Здесь m_0 – масса свободного электрона, \mathbf{J} – матрицы оператора углового момента $3/2$, γ_1 и γ – параметры Латтинжера в сферическом приближении, связанные с массами легких (l) и тяжелых (h) дырок согласно: $m_{l,h} = m_0/(\gamma_1 \pm 2\gamma)$. Отметим, в сферическом приближении параметр γ можно выразить через γ_2 и γ_3 как $\gamma = (2\gamma_2 + 3\gamma_3)/5$. Волновую функцию основного состояния с полным моментом $F = 3/2$ ($\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{l}$, где \mathbf{l} – угловой момент огибающей функции) запишем в виде эквивалентном (2.26), но в несколько других обозначениях, удобных в данной

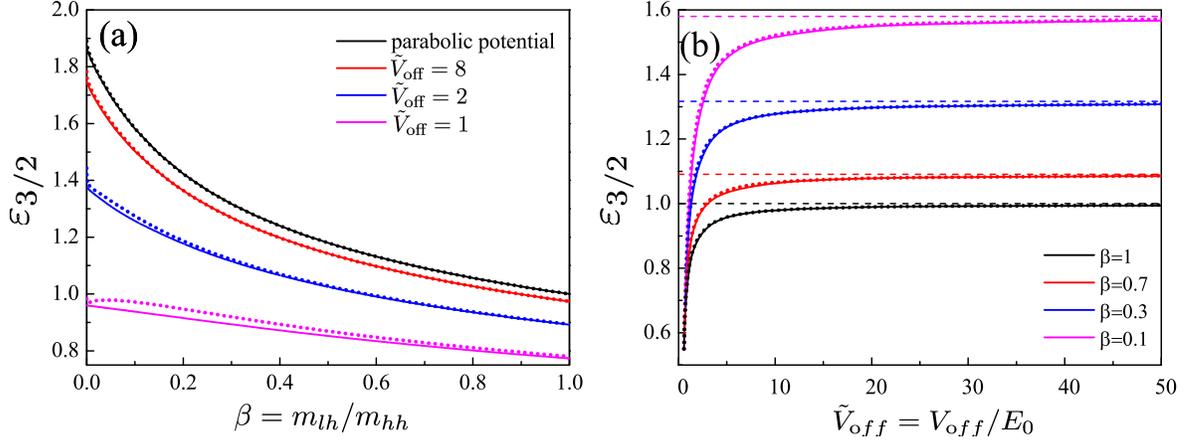


Рис. 3.2: Безразмерная энергия основного состояния дырки $\epsilon_{3/2}$ как функция β для параболического потенциала и для потенциалов Гаусса с $\tilde{V}_{\text{off}} = 8; 2; 1$ (a) и как функция \tilde{V}_{off} для $\beta = 0.1; 0.3; 0.7; 1$ (b). Сплошные кривые отвечают численному расчету, пунктирные линии отвечают вариационному расчету. Штриховые линии на панели (b) показывают энергию в пределе гармонического осциллятора для соответствующих значений β .

главе (ср. с [158]):

$$\Psi_M = 2 \sum_{l=0,2} (-1)^{M-3/2} (i)^l R_l(r) \sum_{m+\mu=M} \begin{pmatrix} l & 3/2 & 3/2 \\ m & \mu & -M \end{pmatrix} Y_{l,m} u_\mu, \quad (3.10)$$

где $\begin{pmatrix} i & k & l \\ m & n & p \end{pmatrix}$ – $3j$ -символы Вигнера, u_μ ($\mu = \pm 1/2, \pm 3/2$) – блоховские функции потолка валентной зоны, взятые в дырочном представлении. Радиальные волновые функции R_0 и R_2 нормируются условием: $\int (R_0^2 + R_2^2) r^2 dr = 1$. Необходимо обратить внимание, что множитель $(i)^l$ введен постольку, поскольку использовано определение сферических гармоник Y_{lm} согласно [232], в то время как в [158] сферические гармоники определены согласно [189].

Энергия основного состояния дырки $E_{1S_{3/2}}(\beta)$ записывается в единицах E_0 , введенной в (3.6) с $m^* = m_h$ согласно

$$E_{1S_{3/2}}(\beta) = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{m_h L^2} \epsilon_{3/2}(\beta) = E_0 \epsilon_{3/2}(\beta). \quad (3.11)$$

На рис. 3.2(a) показана зависимость $\epsilon_{3/2}(\beta)$, найденная вариационно с пробными функциями, предложенными А.А. Головатенко:

$$R_2(r) = \frac{C}{L^{3/2}} \cdot \frac{\alpha \tilde{r}^2}{2} \left[\exp\left(-\frac{\alpha \tilde{r}^2}{2}\right) - \alpha_2 \exp\left(-\frac{\alpha \beta^{0.3} \tilde{r}^2}{2}\right) \right] \quad (3.12)$$

$$R_0(r) = \frac{C}{L^{3/2}} \cdot \frac{3}{2} \left[\exp\left(-\frac{\alpha \tilde{r}^2}{2}\right) + \alpha_0 \exp\left(-\frac{\alpha \beta^{0.3} \tilde{r}^2}{2}\right) \right] - R_2(r), \quad (3.13)$$

где α , α_0 и α_2 – подгоночные параметры, C – нормировочная константа, осцилляторная длина L была взята с эффективной массой тяжелой дырки, а также численно путем разложения по большому базису, как для параболического, так и для гауссового потенциала с разрывом зоны $\tilde{V}_{\text{off}} = 8; 2; 1$. На панели (b) рис. 3.2 представлена зависимость $\epsilon_{3/2}$ от разрыва зон \tilde{V}_{off} при нескольких фиксированных значениях β $\beta = 0.1; 0.3; 0.7; 1$. Также численный и вариационный расчет дают близкие (в пределах 5%) значения радиусов локализации дырки $r_{\text{loc}} = \sqrt{\int_0^\infty (R_0^2 + R_2^2) r^4 dr}$ в случае, когда r_{loc} дырка хорошо локализована, в случае слабосвязанной дырки (\tilde{V}_{off} близко к критическому для заданного β) отличие в результатах численного и вариационного методов может быть значительным [A9].

3.3 Влияние одноосной анизотропии системы

Для большей общности приведем теперь основные результаты для анизотропных, но аксиально-симметричных квантовых точек с плавным потенциалом, уделяя основное внимание анализу в рамках теории возмущений, а также выявлению роли кристаллического поля. Для квантовых точек с параболическим потенциалом детальное рассмотрение эффектов анизотропии было приведено в разделе 2.3. Подробности расчетов для анизотропного гауссового потенциала приведены в [A9], а также в диссертационной работе А.В. Родиной.

Рассматривается анизотропный гауссов потенциал вида

$$V_G^a(r, z) = V_{\text{off}} \left[1 - \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{a_x^2} - \frac{z^2}{a_z^2}\right) \right], \quad (3.14)$$

где $a_x \neq a_z$. Такая одноосная анизотропия характерна для структур, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Основное состояние для такого

потенциала можно найти численно, раскладывая волновую функцию по волновым функциям гармонического осциллятора, а можно учесть анизотропию по теории возмущений представив

$$V_G^a(r, z) \approx V_G(r) + \Delta V_p^a(r, z, \mu), \quad \Delta V_G^a(r, z) = \kappa\mu \left(z^2 - \frac{1}{3}r^2 \right) \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right), \quad (3.15)$$

где $V_G(r)$ дается формулой (3.5) с эффективным радиусом $a = \sqrt{3}a_x a_z / \sqrt{a_x^2 + 2a_z^2}$, параметры

$$\kappa = (2\kappa_\rho + \kappa_z)/3, \quad \mu = \frac{3(\kappa_z/\kappa_\rho - 1)}{2(\kappa_z/\kappa_\rho + 2)} = \frac{(\kappa_z - \kappa_\rho)}{2\kappa}, \quad (3.16)$$

отвечают за “среднюю” жесткость и анизотропию потенциала, а величины $\kappa_\rho = 2V_{\text{off}}/a_x^2$ и $\kappa_z = 2V_{\text{off}}/a_z^2$ введены по аналогии со сферическим случаем.

Для получения аналитических результатов удобно вместо преобразования (3.15) сделать замену координат согласно $x \rightarrow x(a_x/a)$, $y \rightarrow y(a_x/a)$ и $z \rightarrow z(a_z/a)$ [189]. Потенциальная энергия оказывается изотропной, а оператор кинетической энергии приобретает анизотропную добавку [234, 182, 235]¹:

$$\hat{H}_k^a = \frac{2\mu}{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma)(\hat{k}^2 - 3\hat{k}_z^2) - 2\gamma[(\hat{\mathbf{k}}\mathbf{J})^2 - 3\{(\hat{\mathbf{k}}\mathbf{J})\hat{k}_z J_z\}] \right], \quad (3.17)$$

где $\{ab\} = (ab + ba)/2$.

Несложно убедиться в том, что оператор \hat{H}_k^a не приводит в первом порядке по μ к общему сдвигу квадруплета Γ_8 , а лишь расщепляет его на два двукратно вырожденных подуровня с проекцией полного момента $M = \pm 3/2$ и $\pm 1/2$ на ось анизотропии z . Отметим, что кристаллическая анизотропия вюрцитных полупроводников приводит, в рамках квазикубического приближения [236, 237] к аналогичному расщеплению, описываемому оператором

$$\hat{V}^{\text{cr}} = \Delta_{\text{cr}}(5/8 - j_z^2/2), \quad (3.18)$$

где Δ_{cr} – параметр кристаллического расщепления в объемном материале. В результате для подуровней Γ_8 можно записать

$$E_{1S_{3/2}, M} = E_{1S_{3/2}}^a + \frac{\Delta}{2} \left[\frac{5}{4} - M^2 \right], \quad (3.19)$$

¹в работе [234] допущена опечатка, необходимо заменить m_0 в уравнении (8) на $2m_h$

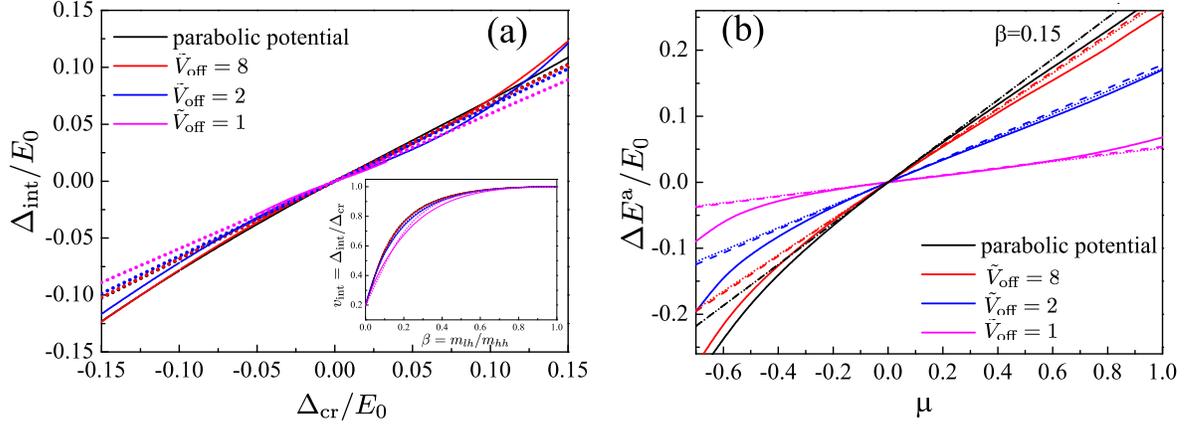


Рис. 3.3: (а) Расщепление основного состояния дырки, вычисленное для $\beta = 0.15$, в зависимости от параметра Δ_{cr}/E_0 для параболического потенциала и потенциала Гаусса при $\tilde{V}_{off} = 8; 2; 1$; Вставка: безразмерная величина $v_{int}(\beta)$ как функция отношения эффективных масс легкой и тяжелой дырки β . Сплошные кривые – результаты численного расчета, пунктирные – теория возмущений с использованием вариационного метода. (б) Безразмерное расщепление основного состояния дырки $\Delta E^a/E_0$, вычисленное численно, (сплошные кривые), и по теории возмущений: Δ_p^a/E_0 (пунктирные линии), и Δ_k^a/E_0 (штриховые линии), с помощью вычисленных численно волновых функций $R_0(r)$ и $R_2(r)$ для квантовых точек с параболическим и гауссовым потенциалами.

где $\Delta = \Delta_{int} + \Delta E^a$, Δ_{int} описывает эффект кристаллического поля, $\Delta E^a = E_{1S_{3/2, 1/2}} - E_{1S_{3/2, 3/2}}$ и $E_{1S_{3/2}}^a = (E_{1S_{3/2, 1/2}} + E_{1S_{3/2, 3/2}})/2$, описывают общий сдвиг и расщепление уровней, обусловленное анизотропией. В рамках первого порядка теории возмущений по μ и Δ_{cr}/E_0 имеем [234, 238, 154]

$$\Delta^a = \frac{\mu \hbar^2}{3m_h} \left[I_1^a - \frac{1}{5} I_2^a + \frac{4}{5} I_3^a - \frac{1}{\beta} \left(I_1^a - \frac{1}{5} I_2^a - \frac{4}{5} I_3^a \right) \right], \quad (3.20)$$

где

$$I_1^a = \int r^2 dr \left[\frac{dR_0(r)}{dr} \right]^2, \quad (3.21a)$$

$$I_2^a = \int r^2 dr \left(\left[\frac{dR_2(r)}{dr} \right]^2 + \frac{6R_2(r)^2}{r^2} \right), \quad (3.21b)$$

$$I_3^a = \int r^2 dr R_2(r) \left[\frac{d^2 R_0(r)}{dr^2} - \frac{dR_0(r)}{r dr} \right], \quad (3.21c)$$

и

$$\Delta_{int} = \Delta_{cr} \int dr r^2 [R_0^2(r) - (3/5)R_2^2(r)]. \quad (3.22)$$

На рисунке 3.3 представлены результаты расчета численными методами (сплошные кривые) и по теории возмущений с использованием вариационных функций (пунктирные кривые) кристаллического расщепления основного состояния дырки [панель (а)] и расщепления дырки, связанного с анизотропией потенциала [панель (b)]. Хорошее согласие численного и вариационного подходов в широком диапазоне параметров анизотропии μ и Δ_{cr}/E_0 подтверждают адекватность выбора пробных функций и возможность использования теории возмущений.

Отличительной чертой квантовых точек на основе полупроводников II-VI, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии, таких как квантовые точки CdSe/ZnSe, является не только одноосная анизотропия формы. Ей сопутствует композиционная неоднородность: содержание Cd максимально в центре, где оно достигает $80 \div 100$ мол.%, будучи в $2 - 3$ раза меньше на краях. Причем, резкость границ различна в направлении роста (не более $2 \div 3$ постоянных решетки) и в ее плоскости, где градиент изменения состава более плавный и только в редких случаях выходит на чистый ZnSe [230, 231, 239]. Это обстоятельство приводит к уменьшению высоты барьера в плоскости квантовой точки по сравнению с его высотой вдоль оси роста. В работе [A14] исследована локализация электронов и дырок в градиентных сфероидальных квантовых точках с учетом различия размеров и высоты барьеров вдоль оси роста структуры и в ее плоскости.

Рассмотрим сферическую квантовую точку с анизотропией состава. Для описания различной высоты барьера в плоскости структуры и вдоль оси ее роста потенциал квантовой точки (3.5) был модифицирован следующим образом:

$$V_G(r) = \frac{V_{\text{off}}}{\xi_p} \left[1 - \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right) \right] + \frac{V_{\text{off}}(\xi_p - 1)}{\xi_p} \left[1 - \exp\left(-\frac{z^2}{a^2}\right) \right], \quad (3.23)$$

где параметр $\xi_p \geq 1$ характеризует анизотропию высоты потенциального барьера. Согласно (3.23), высота барьера вдоль оси роста структуры V_{off} , в ее плоскости $V_0 = V_{\text{off}}/\xi_p$. На рис. 3.4 (а) показана зависимость безразмерного уровня энергии ε носителей заряда в пределе простых зон, $\beta = 1$, в квантовой точке от анизотропии потенциального барьера $V_0/V_{\text{off}} = 1/\xi_p$ при сферически симметричном разме-

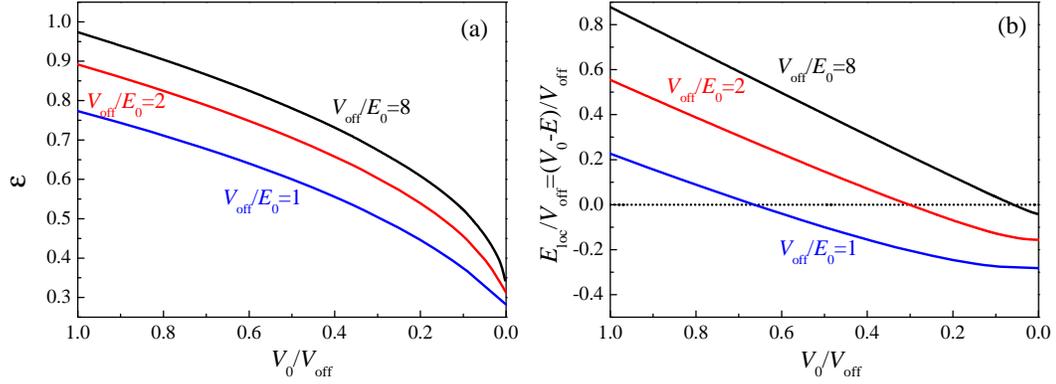


Рис. 3.4: Зависимость безразмерной энергии уровня (а) и энергии локализации в плоскости квантовой точки (б) от параметра анизотропии потенциального барьера $V_0/V_{\text{off}} = 1/\xi_p$ для трех значений безразмерного потенциального барьера вдоль оси z $V_{\text{off}}/E_0 = 1, 2$ и 8 . Горизонтальная пунктирная линия соответствует порогу локализации в плоскости структуры. Расчет сделан для $\beta = 1$.

ре квантовой точки и при трех значениях безразмерного потенциального барьера V_{off}/E_0 вдоль оси роста структуры. При исчезновении потенциального барьера в плоскости, $V_0 = 0$ и $\xi_p \gg 1$, уровни энергии стремятся к уровням размерного квантования в двумерной квантовой яме с барьером V_{off} . При этом энергия локализации носителя заряда вдоль оси z , определенная как $E_{\text{loc}}^z = (V_{\text{off}} - E)$ возрастает при фиксированном значении V_{off} , а энергия локализации носителя в плоскости $E_{\text{loc}} = (V_0 - E)$ убывает. На рис. 3.4 (б) показана зависимость энергии локализации носителей в плоскости структуры от анизотропии потенциального барьера $V_0/V_{\text{off}} = 1/\xi_p$. Видно, что чем больше V_{off}/E_0 , тем при меньших значениях V_0/E_0 возможна локализация носителя заряда в плоскости. При $V_{\text{off}}/E_0 = 1$, порог локализации в плоскости соответствует $V_0/E_0 \approx 0.65$, в то время как при $V_{\text{off}}/E_0 = 2$, порог локализации в плоскости соответствует значению $V_0/E_0 \approx 0.55$, что совпадает с порогом локализации, полученным выше для сферически-симметричных квантовых точек. При отрицательной энергии локализации вероятность обнаружить носитель заряда между квантовыми точками в плоскости возрастает экспоненциально. Однако в области положительных, хотя и малых энергий локали-

зации вероятность обнаружить электроны и дырки на расстоянии большим чем удвоенный эффективный радиус от центра квантовой точки, как показывает расчет, исчезающе мала. В работе [A14] также исследован случай $\beta \neq 1$, а также квантовые точки, в которых одновременно присутствует и анизотропия формы и анизотропия высоты потенциального барьера.

Таким образом, анизотропия высоты потенциального барьера может быть причиной резкого падения интенсивности узких линий экситонной фотолюминесценции в квантовых точках на основе II-VI с ростом температуры [240] при достаточной, на первый взгляд, энергии локализации носителей. Расчет (см. [A14]) показывает, что в квантовых точках CdSe/ZnSe с латеральным размером $d_x = 6$ nm и высотой $d_x = 3$ nm при остаточной концентрации кадмия между точками 20 мол.% существуют локализованные состояния и электронов и дырок, что допускает их резонансное оптическое возбуждение. При дальнейшем увеличении концентрации Cd между квантовыми точками до 40 мол.% и соответствующем понижении потенциальных барьеров в плоскости, локализация основных уровней энергии как дырки, так и электрона пропадает. При небольших энергиях локализации уровней в плоскости структуры, повышение температуры может приводить к тепловому выбросу носителей из квантовой точки в плоскость структуры что может проявляться в уширении линии фотолюминесценции.

3.4 Эффект Зеемана

Кратко проанализируем эффект Зеемана в квантовых точках с различными профилями потенциала. Мы используем метод расчета, предложенный в разделе 2.3. В квантовой точке со сферически-симметричным потенциалом линейное по внешнему магнитному полю расщепление уровней записывается в виде [ср. с (2.28)]

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\mu_B g_h (\mathbf{F}\mathbf{B}), \quad (3.24)$$

где эффективный g -фактор выражается через радиальные функции R_0 и R_2 по формуле (2.31)

$$g_h = 2\kappa + \frac{8}{5}\gamma I_1^g + \frac{4}{5}[\gamma_1 - 2(\gamma + \kappa)] I_2^g, \quad (3.25)$$

причем

$$I_1^g = \int_0^\infty r^3 R_2(r) \frac{dR_0(r)}{dr} dr, \quad I_2^g = \int_0^\infty r^2 R_2^2(r) dr. \quad (3.26)$$

Интегралы I_1^g и I_2^g зависят от отношения масс легкой и тяжелой дырок β . Напомним, что при $\beta = 1$ смешивание дырок отсутствует и $g_h(\beta = 1) = 2\kappa$, а в противоположном предельном случае $\beta \rightarrow 0$, имеем $I_1^g = -3/4$ и $I_2^g = 1/2$, откуда следует, что

$$g_h(\beta = 0) = \frac{6}{5}\kappa + \frac{2}{5}\gamma_1 - 2\gamma. \quad (3.27)$$

Здесь, в отличие от раздела 2.3.3, g -фактор считается положительным, если при приложении магнитного поля вдоль оси z ниже по энергии оказывается состояние с положительной проекцией полного момента на эту ось, а также величина g -фактора дырки дополнительно делится на $2M$, где M – проекция момента \mathbf{F} на направление магнитного поля. Таким образом, в сферически симметричной квантовой точке дырки с проекциями момента $\pm 3/2$ и $\pm 1/2$ будут характеризоваться одинаковым g -фактором.

Зависимости интегралов I_1^g и I_2^g от параметра β , рассчитанные с помощью вариационного метода (пунктирные кривые) и численно (сплошные кривые) приведены на рис. 3.5 для случаев параболического и гауссового потенциалов (для последнего $\tilde{V}_{\text{off}} = 1$), а также для сферически-симметричной точки с бесконечным барьером (штриховая кривая, аналитический расчет). Из рисунка видно, что интегралы существенно отличаются для резкого потенциала, по сравнению с плавными потенциалами, а различие между гауссовым и параболическим потенциалом практически отсутствует. Анализ показывает, что результаты расчета для гауссового и параболического потенциалов близки независимо от конкретной величины \tilde{V}_{off} , если только в гауссовом потенциале существует локализованное состояние (вол-

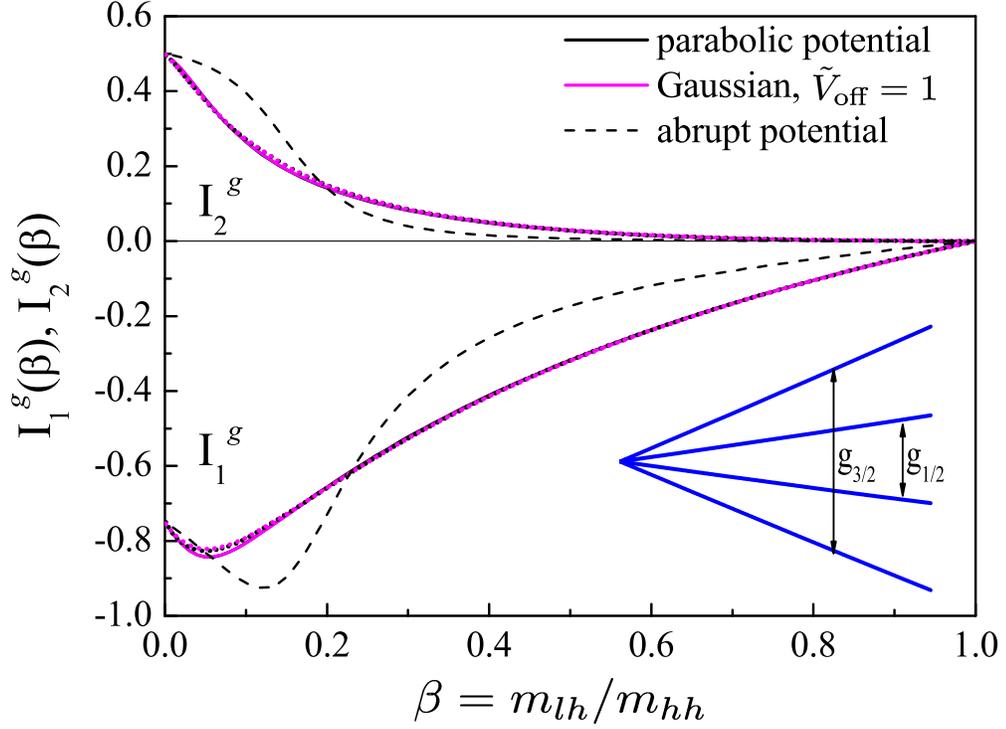


Рис. 3.5: Безразмерные интегралы, I_1^g и I_2^g , определяющие g -фактор основного состояния дырки в сферической квантовой точке, Eq. (3.26), с параболическим потенциалом, потенциалом Гаусса с $\tilde{V}_{\text{off}} = 1$ и резким потенциалом с бесконечным барьером [154] в зависимости от β . Сплошные кривые отвечают результатам вариационного расчета, пунктирные – численному расчету, штриховые – резкому потенциалу с бесконечным барьером.

новые функции при этом довольно сильно отличаются). Имеет место следующая аппроксимационная формула для интегралов:

$$I_1^g \approx e^{-5.145\beta}(1 - \beta) (-29.77\beta^5 - 37.97\beta^3 + 7.15\beta^2 - 7.77\beta - 0.75), \quad (3.28)$$

$$I_2^g \approx 0.5e^{-7.35\beta^{1.127}}(1 - \beta) (14.23\beta^{2.58} + 1), \quad (3.29)$$

которая применима для плавных потенциалов, описывающих размерное квантование дырок в зоне Γ_8 .

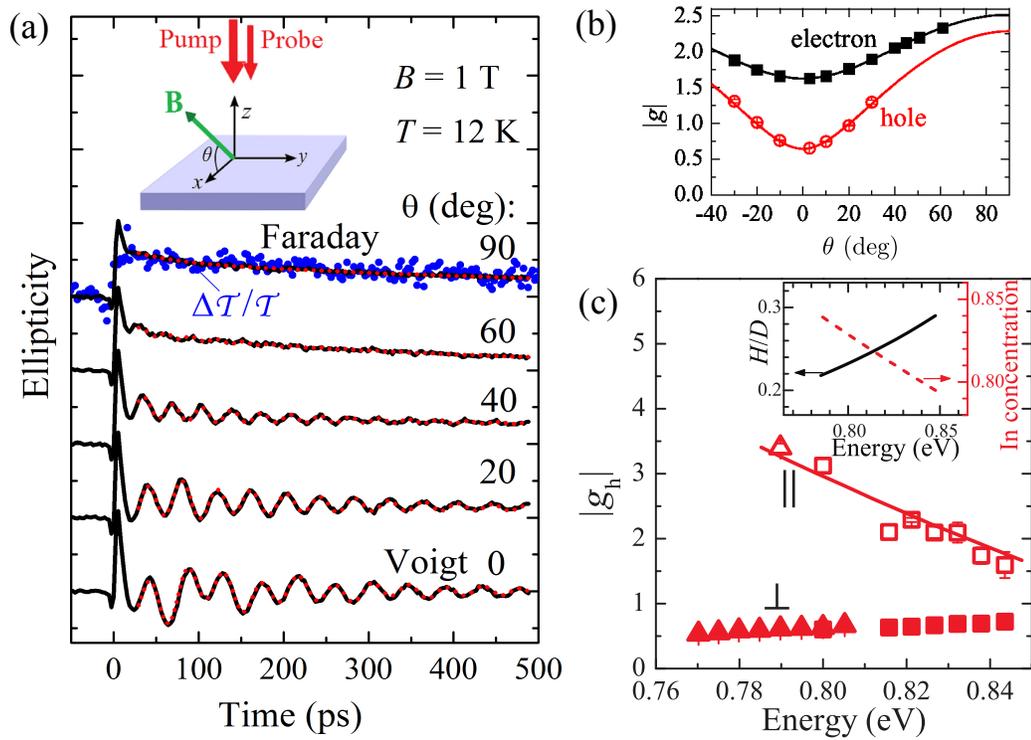


Рис. 3.6: (a) Временная динамика сигнала эллиптичности для различных значений углов магнитного поля θ с плоскостью образца при поле $B = 1$ Т. Углы $\theta = 0^\circ$ и $\theta = 90^\circ$ отвечают геометрии Фойгта и Фарадея, соответственно. Кривые сдвинуты по вертикали для наглядности. Красные пунктирные линии соответствуют подгонке экспериментальных данных. Синие символы показывают временную зависимость дифференциального пропускания в нулевом поле $B = 0$ Т при температуре $T = 12$ К. Энергия лазера 0.82 eV. На вставке показана геометрия измерения. (b) Зависимость величины g -фактора электрона (сплошные символы) и дырки (открытые символы) от угла наклона магнитного поля θ . Сплошные линии результат подгонки экспериментальных данных выражением (3.30), (a,b) – данные для нелегированного образца А. (c) Зависимость дырочного g -фактора от энергии перехода. Сплошные и открытые символы показывают поперечный и продольный g -факторы, соответственно. Данные, отвечающие нелегированному образцу А и легированному образцу В показаны, соответственно, квадратами и треугольниками. Сплошная кривая показывает вычисленную при помощи развитой здесь модели зависимость продольного g -фактора от энергии оптического перехода. На вставке показаны вычисленные соответствующие зависимости отношения высоты к диаметру (сплошная кривая, левая вертикальная ось) и содержания индия (пунктирная кривая, правая ось) от энергии излучения квантовой точки.

3.4.1 Сопоставление теории и экспериментов

Продольный g -фактора дырки в InAs/InAlGaAs квантовых точках

Здесь разработанный метод апробирован для расчета дырочного g -фактора в хорошо изученных модельных структурах с квантовыми точками на основе полупроводников III-V. В экспериментальной группе М. Байера и Д.Р. Яковлева в Техническом университете Дортмунда (Германия) было проведено экспериментальное исследование g -фактора электронов и дырок в квантовых точках InAs/In_{0.53}Al_{0.24}Ga_{0.23}As [A15], излучающих в диапазоне 1.5–1.6 μm (около 0.8 eV). Особенный интерес к такого рода структурам связан с тем, что диапазон длин волн, излучаемых этими точками, совместим с телекоммуникационным. Исследованные образцы были выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии на (001)-ориентированной InP подложке. Квантовые точки формировались нанесением 5.5 монослоев InAs на слой In_{0.53}Al_{0.24}Ga_{0.23}As, который также использовался как покрывающий слой для структуры [241]. Плотность точек около 10^{10} cm^{-2} , диаметр и высота оптически активных точек около $40 \div 50$ и $9 \div 13 \text{ nm}$, соответственно. Образец А был не легирован, образец В содержит слой, легированный Si на 15 nm ниже слоя, содержащего квантовые точки InAs. Образцы в основном отличаются энергией излучения. Спектр фотолюминесценции квантовых точек для обоих образцов состоит из неоднородно уширенной линии шириной $\sim 60 \text{ meV}$ с центром $\sim 0.81 \text{ eV}$ для образца А и с центром $\sim 0.78 \text{ eV}$ для образца В [241]. В ходе эксперимента были измерены все компоненты g -фактора, а также его изменение в рамках ансамбля квантовых точек. Ось z выбрана вдоль оси роста структуры [001], оси x и y выбраны в плоскости структуры таким образом что ось x либо вдоль направления [110] или $[1\bar{1}0]$. В экспериментах измерялась временная эволюция z -компоненты спиновой поляризации, S_z , посредством измерения спиновой эллиптичности с временным разрешением. Подробное описание моделей такого рода экспериментов приведено, например, в книгах [146, 242].

Временная зависимость спиновой поляризации, измеренной методом накачки-

зондирования для сигнала эллиптичности в геометрии Фойгта (поле приложено перпендикулярно оси роста), демонстрирует типичные особенности спиновой прецессии: степень эллиптичности осциллирует вокруг нулевого уровня [243] (см. нижнюю кривую на рис. 3.6(a)). В исследованных образцах осцилляции происходят на двух разных частотах, которые линейно зависят от напряженности магнитного поля. В образце А более высокочастотные осцилляции отвечают прецессии спинов электронов с $|g_{e,x}| \approx 1.6$, в то время как низкочастотные осцилляции отвечают прецессии спинов дырок с g -фактором $|g_{h,x}| \approx 0.6$ [241].

Измеренные зависимости электронного и дырочного g -факторов от угла магнитного поля θ с плоскостью образца показаны на рисунке 3.6(b) символами. Для описания угловой зависимости g -факторов было использовано выражение:

$$|g| = \sqrt{(g_x \cos \theta)^2 + (g_z \sin \theta)^2}, \quad (3.30)$$

где g_z и g_x соответствующие компоненты тензора факторов Ланде́. Сплошные линии на рис. 3.6(b) показывают подгонку экспериментальных данных при помощи выражения (3.30) для электронов и дырок. Из подгонки были получены следующие значения для x и z компонент g -фактора: $|g_{e,x}| = 1.63$, и $|g_{e,z}| = 2.52$ для электрона, и $|g_{h,x}| = 0.64$ и $|g_{h,z}| = 2.29$ для дырки. Аналогичным образом исследовалась анизотропия g -фактора в плоскости структуры и было показано (см. [A15]), что для электрона она значительно слабее показанной на рис. 3.6(b), а для дырки практически отсутствует.

Оригинальным результатом автора является исследование зависимости величины продольного g -фактора дырки g_z от энергии оптического перехода. Зависимости продольного (сплошные символы, $g_{h,z}$) и поперечного (открытые символы, $g_{h,x}$) g -факторов показаны на рис. 3.6(c). Данные, отвечающие нелегированному образцу А и легированному образцу В показаны квадратами и треугольниками.

Для расчета продольного g -фактора дырки, $g_{h||}$, использовался метод, разработанный выше. Потенциал квантовой точки описывался в аксиально симметричной

модели функцией Гаусса: $V_{e(h)}$:

$$V_{e(h)}(r, z) = V_{c(v)} \left[1 - \exp \left(-\frac{4r^2}{D^2} - \frac{4z^2}{H^2} \right) \right]. \quad (3.31)$$

Здесь $V_{c(v)}$ – разрыв зоны проводимости (валентной зоны) между материалами квантовой точки и барьера, D и H – эффективные диаметр и высота квантовой точки, соответственно. Предполагается, что состав квантовой точки постепенно меняющимся от центра, $\text{In}_p\text{Al}_q\text{Ga}_q\text{As}$, $p + 2q = 1$, к барьеру, $\text{In}_{0.53}\text{Al}_{0.24}\text{Ga}_{0.23}\text{As}$. Отношение $V_c : V_v$ взято равным 6 : 4 [241]. Зависимость ширины запрещенной зоны от состава взята из работы [190]. Остальные параметры зонной структуры линейно интерполировались между значениями, соответствующими чистым InAs , AlAs и GaAs , которые также были взяты из [190]. В расчете влиянием экситонных эффектов на энергию оптического перехода в квантовой точке пренебрегалось ввиду малости энергии связи экситона в исследованной системе (единицы meV).

Расчет показал, что продольный g -фактор дырки $g_{h||}$ определяется отношением высоты к диаметру квантовой точки, H/D , и, в меньшей степени, составом точки. С другой стороны, энергия излучения квантовой точки существенно сильнее зависит от ее состава, нежели чем от ее формы. Сплошная кривая на рис. 3.6(с) показывает рассчитанную зависимость для точки высотой $H = 11$ nm, диаметр, D , изменялся от 50 до 38 nm, содержание индия в центре точки изменялось от 84 до 80 мол.%. Соответствующие зависимости отношения H/D (сплошная кривая, левая ось) и состава (пунктирная кривая, правая ось) от энергии излучения квантовой точки показаны на вставке к рисунку 3.6(с). Таким образом, показано, что с увеличением энергии излучения квантовой точки увеличивается отношение H/D , а концентрация In падает. Сделанный расчет позволил оценить размер и состав исследованных квантовых точек. Отметим, что здесь использовалось определение g -фактора дырки из раздела 2.3, принятое в физике гетероструктур. Сопоставление расчетов и эксперимента для модельной системе квантовых точек III-V и хорошее согласие результатов позволяет применить этот метод и для описания менее изученной структуры на основе II-VI.

Фактор Ландé дырки

Еще одной привлекательной с точки зрения исследования магнитооптических и спиновых явлений являются так называемые коллоидные двумерные наноплателеты (nanoplatels) – “плоские” квантовые точки. Наноплателеты могут быть синтезированы на основе многих материалов (органических галлоидных перовскитов [244], PbS [245] PbSe [246], Cu_{2-x}S [247], GeS и GeSe [248] CdTe[249], CdS [249], ZnS[250], и HgTe[251], обзор приведен в работе [252]). Привлекательной особенностью этих систем – широкий диапазон изменения энергий оптических переходов от синего до инфракрасного спектрального диапазона.

В группе М. Байера и Д. Яковлева из Технического университета Дортмунда исследовались коллоидные наноплателеты CdSe/CdS с толстой оболочкой посредством широкого круга методик, включая стационарную и времязрешенную фотолюминесценцию в магнитном поле, рамановское рассеяние света с переворотом спина и метод накачка-зондирование [A16]. Использовались магнитные поля вплоть до 30 Т. Оригинальным результатом, представленным в диссертации, является оценка g -фактора дырки, локализованной в наноплателете, демонстрация роли формы локализуемого потенциала, а также влияния кристаллической структуры (кубическая или вюрцитная) ядра CdSe.

Комплексные экспериментальные исследования показывают, что в слабых магнитных полях компонента g -фактора дырки, описывающее эффект Зеемана в магнитном поле, приложенном перпендикулярном плоскости наноплателета, равна $g_h = -0.4$. Эта величина находится в разумном согласии с теоретической оценкой g_h для квантовой ямы на основе CdSe. С ростом магнитного поля эффект Зеемана становится нелинейным и в сильных полях g -фактор дырки приближается к -0.7 . Это значение близко к экспериментально измеренной величине g -фактора в сферических квантовых точках: для точек CdSe/CdS с толстой оболочкой $g_h = -0.54$, [253], для точек без оболочки $g_h = -0.73$ [254]. В данном параграфе используется g -фактор дырки, определенный согласно [159] (см. параграф 3.4) как это принято

в физике коллоидных нанокристаллов.

Так как дырки локализованы, в основном, в ядре CdSe, для оценки g -фактора дырки использовалась модель, описанная в разделе 2.3. Рассчитанные значения g -фактора дырки в различных структурах сведены в таблице 3.1. Значения параметров Латтинжера γ_1 и γ были взяты из литературы, значение магнитного параметра Латтинжера \varkappa оценивалось по приближенной формуле [174]:

$$\varkappa \approx -2/3 + 5\gamma/3 - \gamma_1/3. \quad (3.32)$$

Величина g -фактора объемной дырки представлена в колонке g_{bulk} . Гетеропотенциал смешивает легкие и тяжелые дырки, причем степень смешивания зависит от потенциала и от величины отношения эффективных масс легкой и тяжелой дырки $\beta = (\gamma_1 - 2\gamma)/(\gamma_1 + 2\gamma)$. Колонки $g_{\text{sph}}^{(\text{par})}$ и $g_{\text{sph}}^{(\text{box})}$ показывают значения эффективного g -фактора основного состояния дырки g_h в сферической квантовой точке с параболическим потенциалом и потенциалом с резким бесконечным барьером, соответственно, колонки $g_{\text{QW}}^{(\text{par})}$ и $g_{\text{QW}}^{(\text{box})}$ отвечают g_h в узкой квантовой яме (т.е., рассчитанные в пренебрежении размерным квантованием в плоскости наноплателета). Отметим, что оценочные значения g -фактора дырки во всех конфигурациях не зависят от характерного размера системы. Как можно видеть, для сферических квантовых точек g_h находится в диапазоне $-0.8 \div -1.2$ и слабо зависит от типа потенциала и кристаллической структуры. Для квантовых ям, напротив, g -фактор дырки для кубического CdSe (c-CdSe) зависит от типа потенциала и, что важно, от параметризации зонной структуры: например, он может в зависимости от выбранной параметризации иметь разный знак. Для вюрцитного CdSe (w-CdSe) значения g -фактора дырки находится почти в тех же пределах, что и для сферических квантовых точек для обоих типов потенциала и всех использованных параметризаций.

В исследованных CdSe/CdS наноплателетах, экспериментально измеренные величины g_h лежат в пределах от $g_h = -0.4$ в слабых полях до $g_h = -0.7$ в поле $15 T$, что находится между значениями для квантовой ямы с параболическим по-

тенциалом и сферической квантовой точки для с-CdSe и далеко от оценки для прямоугольной квантовой ямы. Хотя потенциал наноплателета вдоль его оси роста скорее резкий чем гладкий, он может быть сглажен эффектами кулоновского взаимодействия, так как g -фактор измерялся для дырки в отрицательно заряженном трионе. Кроме того, увеличение магнитного поля влияет на пространственное распределение волновой функции дырки (приводит к дополнительной локализации дырки в плоскости наноплателета) и может вызывать появление зависимости $g_h(B)$, наблюдавшейся в эксперименте. Толщина ядра с-CdSe составляет 1.2 nm, а его латеральный размер много больше, 30 ± 5 nm, тогда, как следует из результатов раздела 2.3.3, оценки g -фактора дырки для квантовых ям должны быть хорошо применимы для ядра наноплателета. Достаточно существенное отличие измеренной величины g -фактора дырки от оценок даже в слабом магнитном поле говорит о необходимости дальнейших исследований, что выходит за рамки данной диссертации. Необходимо отметить, что в недавних экспериментах был измерен g -фактор дырки в отрицательном трионе в CdSe наноплателетах без оболочки, получившаяся величина $g_h = -0.1$ [255] оказалась близкой к оценкам для квантовой ямы с параболическим потенциалом. Это говорит о том, что отличие измеренного g -фактора дырке в наноплателетах с оболочкой от оценок, возможно, связано с различной областью локализации электронов (в наноплателетах с оболочкой электроны в ядре не локализованы).

В материалах с вюрцитной кристаллической структурой присутствует “кристаллическое” поле, которое расщепляет дырки с проекцией спина $|J_z| = 3/2$ и $|J_z| = 1/2$ на кристаллическую ось. Это может быть учтено путем добавления в дырочный гамильтониан вклада следующего вида [238]:

$$\hat{H}_{cr} = -\frac{1}{2}\Delta_{cr} \left(J_z^2 - \frac{1}{4} \right) \quad (3.33)$$

Величина Δ_{cr} достаточно мала по сравнению с энергией размерного квантования дырки и \hat{H}_{cr} обычно можно учитывать по теории возмущений. Наши оценки показывают, что в рассмотренных системах учет \hat{H}_{cr} не приводит к существенному

Таблица 3.1: g -факторы дырки, вычисленные для наноструктур на основе кубической (c) и вюрцитной (w) модификаций ряда полупроводников II-VI.

Материал	γ_1	γ	\varkappa	g_{bulk}	β	$g_{\text{sph}}^{(\text{par})}$	$g_{\text{sph}}^{(\text{box})}$	$g_{\text{QW}}^{(\text{par})}$	$g_{\text{QW}}^{(\text{box})}$	Источник
c-CdSe	5.51	1.78	0.4633	0.926	0.215	-0.78	-0.94	-0.113	0.36	[256]
c-CdSe	3.265	1.33	0.4627	0.925	0.1	-0.83	-1.12	-0.13	0.46	[257]
w-CdSe	2.52	0.83	-0.1233	-0.246	0.2	-0.98	-1.05	-0.74	-0.5	[258]
w-CdSe	1.7	0.4	-0.567	-1.133	0.36	-1.32	-1.29	-1.3	-1.23	[259]
w-CdSe	2.04	0.58	-0.38	-0.76	0.275	-1.16	-1.12	-1.05	-0.93	[260]
w-CdSe	2.1	0.55	-0.45	-0.9	0.312	-1.23	-1.19	-1.16	-1.05	[223]
w-CdSe	1.67	0.56	-0.29	-0.58	0.197	-1.04	-1.09	-0.92	-0.76	[261]
c-ZnSe	3.94	1.312	0.207	0.413	0.2	-0.86	-0.94	-0.38	-0.004	[256]
c-ZnSe	3.77	1.5	0.57	1.14	0.11	-0.79	-1.16	0.003	0.63	[262]
c-ZnTe	4	1.112	-0.147	-0.29	0.28	-0.56	-1.03	-0.26	-0.03	[263]
c-ZnTe	3.8	1.136	-0.04	-0.08	0.25	-1	-0.98	-0.69	-0.42	[264]
c-ZnTe	3.9	1.112	-0.11	-0.22	0.27	-1.07	-0.97	-0.79	-0.55	[265]
c-ZnTe	3.8	1.068	-0.15	-0.306	0.28	-1.1	-1.01	-0.84	-0.62	[266]
c-CdTe	4.14	1.4	0.3	0.6	0.19	-0.82	-1.04	-0.27	0.15	[267]
c-CdTe	5.3	1.88	0.7	1.4	0.17	-0.69	-1.1	0.17	0.78	[264]
c-CdTe	4.11	1.6	0.63	1.26	0.12	-0.76	-1.2	0.078	0.72	[268]

изменению g -факторов в случае, если расщепление состояний дырок, вызванное кристаллическим полем, меньше расстояния по энергии до возбужденного состояния размерного квантования дырки в наноструктуре (тогда разница составляет несколько %). Это условие выполнено в наноплателетах и сферических нанокристаллах малых размеров (радиус $\lesssim 5 - 6$ nm). В противном случае необходимо учитывать эффективное кристаллическое не прибегая к теории возмущений.

3.5 Биэкситон в квантовых точках с различным гетеропотенциалом

Современное развитие нанофотоники во многом основано на использовании полупроводниковых квантовых точек, которые отличаются методами получения, формой, размером и, соответственно, спектром экситонных состояний. Ввиду сильной

локализации носителей заряда в квантовых точках возрастает роль их кулоновского взаимодействия по сравнению с объемным материалом. Одним из проявлений этого эффекта является большая энергия связи биэкситона в квантовых точках на основе соединений типа II-VI, которая может дополнительно возрасти за счет диэлектрического контраста между материалом точки и матрицы [269]. Например, в эпитаксиальных квантовых точках $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$, формируемых при внедрении монослоев CdSe в матрицу ZnSe , энергия связи биэкситона может достигать 20 мэВ [96, 87, 270, 271], тогда как в объемном CdSe она лишь около 5 мэВ [272].

Отличительной особенностью квантовых точек $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии, является плавное изменение состава от центра к внешней границе, вызванное процессами диффузии и сегрегации, происходящими в процессе роста. По данным просвечивающей электронной микроскопии концентрация Cd в центре наностроек может достигать $x = 0.8-0.85$, тогда как на периферии она не превышает ~ 0.2 [231]. Подобное градиентное изменение концентрации приводит к уменьшению эффективного размера квантовой точки. Это способствует проявлению квантоворазмерных эффектов, несмотря на то что размеры наностроек в плоскости роста могут быть достаточно велики, достигая 10 – 12 нм. Ранее на примере коллоидных нанокристаллов на основе CdSe со структурой ядро-оболочка, которые также имеют плавное изменение состава от центра к границе, было показано, что в них возможно подавление безызлучательной рекомбинации, которая не позволяет наблюдать биэкситон в нанокристаллах с резким потенциалом [203, 204, 205, 206]. Ожидается, что аналогичное подавление безызлучательной рекомбинации биэкситонов существует и в эпитаксиальных квантовых точках $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$ с плавным профилем потенциала, рассматриваемых в качестве потенциальных источников одиночных фотонов, работающих при комнатной температуре [195, 196, 197]. То обстоятельство, что биэкситоны характеризуются меньшим временем жизни по сравнению с экситонами, делает их предпочтительными для создания однофотонных излучателей с

повышенным быстродействием [273]. Более того, каскадная рекомбинация биэкситонных состояний считается на данный момент наиболее эффективным способом создания запутанных пар одиночных фотонов [274].

Ранее при расчетах энергии связи биэкситона в квантовых точках использовался, как правило, модельный потенциал с резкими границами и бесконечной высотой барьера [269, 275, 276, 277, 182, 278]. В реальных квантовых точках $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$, как отмечалось, локализирующий потенциал является плавным и высота барьера конечна. Поэтому представляется интересным теоретическое сравнение зависимости энергии связи биэкситона, локализованного в квантовых точках с различным модельным потенциалом. Ключевой параметр – энергия связи биэкситона – зависит от корреляций между состояниями электронов и дырок, определяющих баланс между кулоновским притяжением и отталкиванием. В предшествующих работах учет корреляций производился в рамках методов псевдопотенциала [279] и сильной связи [208], метода численной матричной диагонализации [280], теории возмущений второго [275] и третьего [276] порядков, а также с применением вариационного расчета в рамках $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории возмущений [269, 182, 277, 278]. Причем вариационный метод обеспечивает компромисс между точностью и трудоемкостью вычислений. Для плавного потенциала, где влияние интерфейсных эффектов минимально, использовать вариационный метод тем более удобно, поскольку отсутствует проблема постановки граничных условий. В предыдущих работах расчет энергии связи биэкситона вариационным методом осуществлялся для модельного потенциала с бесконечно высокими барьерами в приближении простой валентной зоны [269] и сложной валентной зоны [182]. Расчет энергии связи биэкситона с плавным потенциалом производился для случая тонкого квантового диска с параболической зависимостью потенциала в плоскости диска без учета сложной структуры валентной зоны [278].

В этом разделе, написанном по результатам работы [A13], представлены результаты расчетов энергии связи экситона и биэкситона в различных сфериче-

ски симметричных локализирующих потенциалах на примере материальной системы $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$. Проведено сравнение двух модельных потенциалов с бесконечной высотой барьера: прямоугольной сферической ямы (потенциал с резкими границами и бесконечным барьером) и гармонического осциллятора (плавный потенциал). Исследование влияния конечной высоты потенциального барьера осуществляется на примере плавного гауссового потенциала (3.5), который является хорошим приближением к реальному гетеропотенциалу в эпитаксиальных квантовых точках [A9],[A11]. Поскольку разница диэлектрических проницаемостей между материалом квантовой точки и матрицы в системе $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$ мала, то они считаются равными, а вклады, обусловленные наличием диэлектрического контраста [269, 277], не учитываются. Для вычисления энергий связи экситона и биэкситона используется вариационный метод в рамках $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории возмущений, анализируется влияние на энергию связи биэкситона наличия дополнительных поляризационных членов в волновых функциях электронной и дырочной подсистем, позволяющих учесть корреляции между одноименными носителями заряда, а также сложной структуры валентной зоны.

3.5.1 Одночастичные волновые функции электрона и дырки

В разд. 3.2 вариационным методом с учетом сложной структуры валентной зоны было получено решение задачи об одиночной дырке, локализованной в сферически симметричных потенциалах гармонического осциллятора и потенциала Гаусса (3.5) для произвольного отношения масс легкой и тяжелой дырки $\beta = m_{lh}/m_{hh}$. В данном разделе речь пойдет об энергии связи биэкситона – четырехчастичного комплекса, состоящего из двух электронов и двух дырок.

Чтобы проследить зависимость от параметра β энергии связи и строения биэкситона рассмотрим два предельных случая $\beta = 1$ и $\beta \rightarrow 0$. Так как используемые в вариационном расчете для биэкситона пробные функции электронов и дырок построены на основе одночастичных волновых функций, рассмотрим сначала невзаимодействующие электрон и дырку. В предельном случае $\beta = 1$, что соответствует

простой валентной зоне, для потенциалов гармонического осциллятора и сферического прямоугольного потенциала основным состояниям невзаимодействующих электрона и дырки соответствуют следующие волновые функции и энергии:

$$\psi_{\text{box}}^0(r) = \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{\sin(\pi r/a)}{r} Y_{00}(\Omega), \quad E_{\text{box}}^0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_{e,h} a^2} \quad (3.34a)$$

$$\psi_{\text{osc}}^0(r) = \frac{2}{L_{e,h}^{3/2} \sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{r^2}{2L_{e,h}^2}\right) Y_{00}(\Omega), \quad E_{\text{osc}}^0 = \frac{3\hbar^2}{2m_{e,h} L_{e,h}^2}, \quad (3.34b)$$

где характерная длина $L_{e,h}$ связана с жесткостью потенциала осциллятора соотношением $k_{e,h} = \hbar^2/2m_{e,h}L_{e,h}^4$. Здесь и далее нижние индексы “box” соответствуют сферически симметричному прямоугольному потенциалу с бесконечным барьером (a – радиус потенциала), а “osc” – потенциалу гармонического осциллятора (3.2). Для потенциала Гаусса можно использовать пробные функции с одним вариационным параметром $\alpha_{e,h}$, которые хорошо описывают основное состояние в предельном случае $\beta = 1$ [ср. с формулой (3.34)]:

$$\psi_{\alpha}(r_{e,h}) = \frac{2\alpha_{e,h}^{3/4}}{L_{e,h}^{3/2} \sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{\alpha_{e,h} r_{e,h}^2}{2L_{e,h}^2}\right) Y_{00}(\Omega). \quad (3.35)$$

В предельном случае $\beta = 0$ вид волновой функции дырки существенно изменится. Радиальные функции R_0 и R_2 из выражения (3.10) принимают вид:

$$R_0(r) = N \exp\left(-\frac{\alpha r^2}{2L^2}\right) - R_2(r), \quad R_2(r) = N \frac{\alpha r^2}{2L^2} \exp\left(-\frac{\alpha r^2}{2L^2}\right), \quad (3.36)$$

где α – вариационный параметр, N – нормировочная константа. Для квантовой точки с резким потенциалом и бесконечными барьерами радиальные волновые функции дырки при $\beta = 0$ имеют вид [104]:

$$R_0(r) = N \left[j_0\left(\frac{\varphi_2 r}{a}\right) - j_0(\varphi_2) \right], \quad R_2(r) = N j_2\left(\frac{\varphi_2 r}{a}\right), \quad (3.37)$$

где $j_0(r)$, $j_2(r)$ – сферические функции Бесселя, $\varphi_2 \approx 5.76346$ – первый корень функции $j_2(r)$, N – нормировочная константа.

Энергии связи экситона и биэкситона сильно зависят от соотношения размеров областей локализации электронов и дырок. Если в случае прямоугольного потенциала с бесконечными барьерами электрон и дырка всегда будут ограничены в

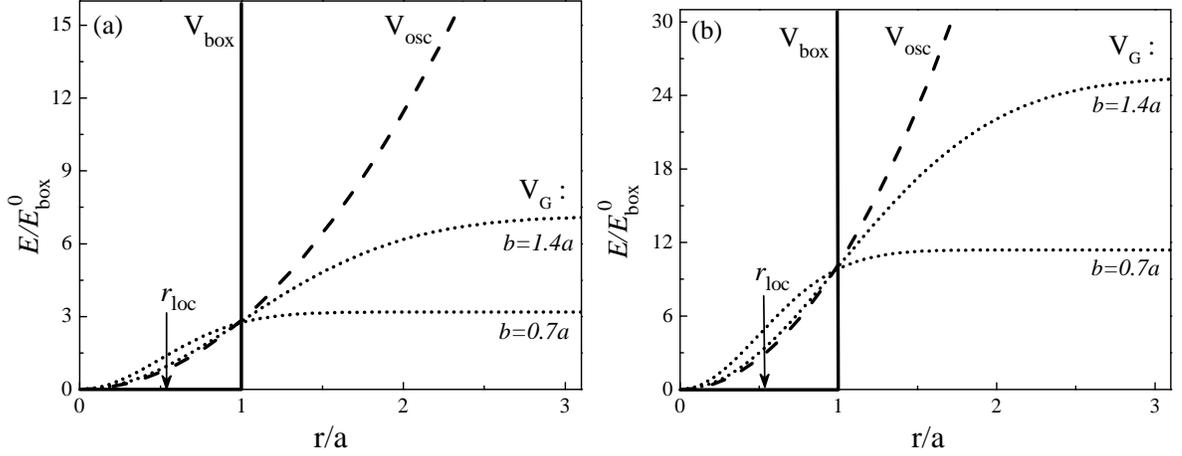


Рис. 3.7: Вид исследуемых потенциалов: прямоугольного с бесконечным барьером (сплошная линия), гармонического осциллятора (пунктирная линия) и Гаусса (точечные линии) с одинаковым размером области локализации (а) в пределе $\beta = 1$ для электрона и дырки (б) в пределе $\beta \rightarrow 0$ для дырки. В качестве единиц измерения энергии в потенциалах для электронов и дырок использованы соответствующие энергии E_{box}^0 электронов и дырок из выражения (3.34).

одинаковом объеме границей квантовой точки, совпадающей с радиусом прямоугольного потенциала a , то для плавных потенциалов осциллятора и Гаусса это не так. Поэтому для анализа влияния типа локализирующего потенциала необходимо задать критерий для их сравнения. Было выбрано следующее условие: параметры потенциалов гармонического осциллятора и Гаусса должны быть такими, что среднеквадратичные значения координат изолированных носителей заряда, вычисленные на одночастичных волновых функциях, будут равны среднеквадратичным значениям координат в прямоугольном потенциале. В случае потенциала гармонического осциллятора при $\beta = 1$ равенство примет вид:

$$r_{\text{loc}} = \sqrt{\langle \psi_{\text{osc}}^0(r_{e,h}) | r_{e,h}^2 | \psi_{\text{osc}}^0(r_{e,h}) \rangle} = \sqrt{\langle \psi_{\text{box}}^0(r_{e,h}) | r_{e,h}^2 | \psi_{\text{box}}^0(r_{e,h}) \rangle} \quad (3.38)$$

Отсюда получается соотношение между радиусом квантовой точки a и осцилляторной длиной: $L_{e,h} = 0.434a$. Если массы электрона и дырки различны, то из условия $L_e = L_h$ следует, что жесткости потенциалов $k_{e,h}$ будут также различны.

В пределе $\beta \rightarrow 0$ для прямоугольного потенциала радиус локализации дырки почти не изменится ($r_{\text{loc}} = 0.55a$ при $\beta \rightarrow 0$ и $r_{\text{loc}} = 0.53a$ при $\beta = 1$), тогда как в

потенциале гармонического осциллятора при той же жесткости k_h он увеличится в 1.4 раза. Поэтому при $\beta \rightarrow 0$ соотношение между радиусом квантовой точки a и осцилляторной длиной дырки L_h принимает вид $L_h = 0.434a/1.4 = 0.31a$. Для потенциала Гаусса (3.5) такого однозначного соответствия установить нельзя, так как локализация частиц зависит одновременно и от высоты потенциального барьера V_{off} и от характерной длины b (здесь b – то же самое, что a в (3.5)). Поэтому для каждого значения V_{off} необходимо подбирать соответствующую величину b , при которой будет выполняться условие одинакового размера области локализации. Вид используемых при дальнейших расчетах потенциалов с одинаковым размером области локализации представлен на рис. 3.7.

3.5.2 Энергия связи экситона

Поскольку энергия связи биэкситона определяется как разность энергии двух невзаимодействующих экситонов и полной энергии биэкситона: $E_{\text{XX}}^b = 2E_X - E_{\text{XX}}$, E_X – энергия экситона, а E_{XX} – энергия биэкситона, E_{XX}^b дает энергетическое расстояние спектральными линиями биэкситона и экситона, то необходимо сначала вычислить энергию экситона. Используя представленные выше одночастичные функции, учтем кулоновское взаимодействие между одним электроном и одной дыркой в рамках режима сильного размерного квантования ($a \ll a_B$, где a_B – экситонный боровский радиус), см. разд. 1.4.1. В рассматриваемом предельном случае полная волновая функция экситона может быть представлена в виде произведения одночастичных волновых функций электрона и дырки.

В режиме сильного размерного квантования энергия связи экситона может быть вычислена в рамках первого порядка теории возмущений. Для этого необходимо усреднить оператор кулоновского взаимодействия

$$-\frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|},$$

где ε – диэлектрическая проницаемость среды (контрастом диэлектрических проницаемостей пренебрегаем), на одночастичных волновых функциях ψ_{osc}^0 либо ψ_{box}^0

в случае потенциала гармонического осциллятора и прямоугольного потенциала, соответственно. Отношение полученной таким образом величины энергии связи, E_c , к энергии размерного квантования изолированных носителей заряда оказывается $\propto a/a_B$, и не зависит явно от отношения эффективных масс электрона и дырки. Чтобы проследить зависимость энергии связи экситона от отношения масс найдем ее вариационным методом. В предельном случае простой валентной зоны, $\beta = 1$, для потенциалов гармонического осциллятора и Гаусса пробные функции для экситона имеют вид [104], [ср. с формулой (1.77) для общего случая для электрон-дырочного комплекса в пределе сильного размерного квантования]:

$$\Psi_{\text{osc,G}}^{\text{ex}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi_{\alpha_e}(r_e)\psi_{\alpha_h}(r_h), \quad (3.39)$$

Для прямоугольного потенциала имеем следующую пробную функцию:

$$\Psi_{\text{box}}^{\text{ex}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi_{\text{box}}^0(r_e)\psi_{\text{box}}^0(r_h) \exp(-\alpha_e r_e^2 - \alpha_h r_h^2), \quad (3.40)$$

где α_e и α_h – подгоночные параметры, позволяющие учесть изменение одночастичных волновых функций, возникающее вследствие кулоновского притяжения между электроном и дыркой. Отметим, что параметры α_e и α_h для экситона всегда положительны.

При фиксированном радиусе квантовой точки a , зависимость вычисленной вариационным методом энергии связи экситона, E_X^b , от масс носителей заряда будет определяться двумя факторами. Первый заключается в росте энергии связи экситона с увеличением приведенной массы экситона μ , что вызвано увеличением роли кулоновского взаимодействия по сравнению с размерным квантованием, то есть ослаблением условия $a \ll a_B$. Второй фактор проявляется при уменьшении отношения m_e/m_h при постоянном μ . В этом случае, хотя экситон как целое будет находиться в режиме сильного размерного квантования, при малых m_e/m_h энергия размерного квантования электрона будет много больше энергии размерного квантования дырки. Тогда становится применимым адиабатическое приближение, когда дырку можно рассматривать как движущуюся в суммарном потенциале кван-

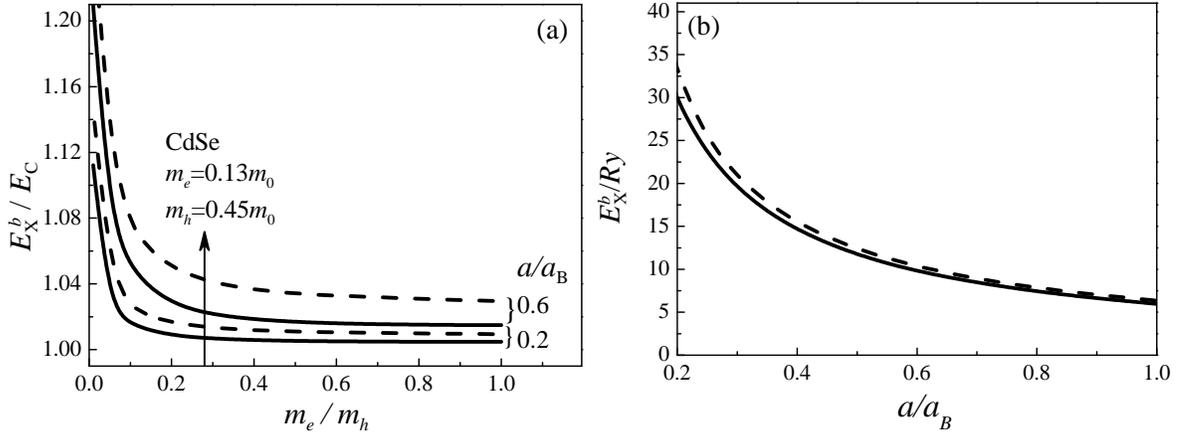


Рис. 3.8: (а) Зависимость E_X^b/E_C от отношения масс электрона и дырки при фиксированной величине приведенной массы экситона $\mu = 0.1m_0$ в прямоугольном потенциале (сплошные линии) и потенциале гармонического осциллятора (пунктирные линии) для $a/a_B=0.6$ и $a/a_B=0.2$. (б) Зависимость энергии связи экситона E_X^b для прямоугольного потенциала (сплошная линии), а также потенциалов гармонического осциллятора и Гаусса (пунктирная линия) от радиуса квантовой точки. Представленные зависимости с высокой точностью совпадают для $\beta = 1$ и $\beta = 0$.

товой точки и потенциала кулоновского взаимодействия, усредненного на волновой функции электрона [103], см. также раз. 1.4.2, формулы (1.72),(1.73). Из рис. 3.8(а) можно увидеть, что вариационный метод позволяет проследить переход от режима сильного размерного квантования для обоих носителей к адиабатическому режиму для дырки. Стоит отметить, что эффективный потенциал, действующий на дырку в адиабатическом приближении в случае потенциала ящика, с высокой точностью может быть аппроксимирован потенциалом Гаусса вплоть до границы квантовой точки:

$$V_{ad}(x) = \frac{e^2}{\epsilon a} \left\{ -2.348 + 0.508 \frac{\pi^2}{3} [1 - \exp(-x^2/0.508)] \right\}, \quad (3.41)$$

где $x = r/a$.

На рис. 3.8 стрелкой выделено отношение масс электрона и дырки для CdSe. Видно, что для масс электрона и дырки $m_e = 0.13m_0$ и $m_h = 0.45m_0$ роль корреляций еще не столь существенна, и адиабатическое приближение для дырки не применимо. Вариационный метод дает в этом случае результат, лишь на несколько процентов отличающийся от результата, полученного по теории возмущений.

Зависимости энергии связи экситона E_X^b , выраженной в единицах экситонного Ридберга $Ry = \mu e^4 / 2\varepsilon^2 \hbar^2$, от радиуса квантовой точки a , выраженной в экситонных боровских радиусах $a_B = \hbar^2 \varepsilon / \mu e^2$ (1.2), для прямоугольного потенциала, а также потенциалов гармонического осциллятора и Гаусса показаны на рис. 3.8(b). Зависимости E_X^b для потенциалов Гаусса с различной характерной длиной b практически точно совпадают с зависимостью для потенциала гармонического осциллятора (на графике они неотличимы). Следует отметить, что значения E_X^b при $\beta \rightarrow 0$ мало отличается от значений, полученных при $\beta = 1$, для всех исследуемых потенциалов. Таким образом, для экситона величина его энергии связи E_X^b при условии одинаковой области локализации одиночных носителей заряда слабо зависит от вида потенциала и величины β , несмотря на то, что сами значения полной энергии экситона E_X могут быть существенно различны.

3.5.3 Энергия связи биэкситона

Если для экситона теория возмущений первого порядка позволяет довольно точно оценить энергию связи $E_X^b \approx E_c$, то в случае биэкситона при $\beta = 1$ энергия связи E_{XX}^b будет тождественно равна нулю, ввиду равенства энергий кулоновского притяжения и отталкивания, а в случае $\beta \rightarrow 0$ такая оценка даст отрицательную величину E_{XX}^b из-за разного вида волновых функций электронов и дырок [104]. Это обстоятельство можно преодолеть, воспользовавшись вариационным методом. Как и в случае экситона, в пределе сильного размерного квантования полная волновая функция биэкситона может быть факторизована на произведение волновых функций электронной и дырочной подсистем, каждая из которых состоит из двух соответствующих носителей заряда. Волновая функция биэкситона с учетом спина должна быть антисимметричной относительно перестановок тождественных носителей заряда между собой. Это приводит к условию симметричности координатных частей волновых функций электронной и дырочной подсистем. Для решения задачи в квантовой точке с потенциалом гармонического осциллятора и потенциалом Гаусса используются двухчастичные симметризованные волновые функции

электронов и дырок, образованные из соответствующих одночастичных функций $\psi_\alpha(r)$ в (3.35):

$$\varphi(r_1, r_2) = \psi_{\alpha_1}(r_1)\psi_{\alpha_2}(r_2) + \psi_{\alpha_2}(r_1)\psi_{\alpha_1}(r_2) \quad (3.42)$$

Для прямоугольного потенциала с бесконечным барьером использовалась следующая комбинация:

$$\varphi(r_1, r_2) = \psi_{\text{box}}^0(r_1)\psi_{\text{box}}^0(r_2) [\exp(-\alpha_1 r_1^2 - \alpha_2 r_2^2) + \exp(-\alpha_2 r_1^2 - \alpha_1 r_2^2)]. \quad (3.43)$$

Чтобы оптимизировать баланс между кулоновским отталкиванием одноименно заряженных частиц и притяжением разноименно заряженных носителей заряда, дополнительно включены поляризационные члены по аналогии с тем, как это делалось при описании состояний трионов в простой зоне в гл. 1.1 (выражения (1.19) и (1.103)). Общий вид модифицированной двухчастичной волновой функции для двух электронов (дырок) в случае $\beta = 1$ для каждого из исследуемых потенциалов будет таков:

$$\varphi_p(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N\varphi(r_1, r_2)(1 + C_p|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2) \quad (3.44)$$

где C_p - поляризационный вариационный параметр, N - нормировочный множитель. Необходимо отметить, что для прямоугольного потенциала допускаются отрицательные значения вариационных параметров α_1 и α_2 в функции (3.43), что позволяет дополнительно оптимизировать энергию кулоновского взаимодействия между носителями заряда.

В случае $\beta \rightarrow 0$ основное состояние двух дырок характеризуется их полным моментом $\mathbf{F} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$, $J_1 = J_2 = 3/2$. Из таких дырок можно сформировать два типа состояний дырочной подсистемы биэкситона, удовлетворяющих условию антисимметричности полной двухчастичной волновой функции относительно перестановки дырок: одно с полным моментом дырок $F = 2$, а другое - с $F = 0$. Соответствующие данным состояниям волновые функции имеют вид [182]:

$$\Phi_{F, F_z}^{1,2} = (-1)^{F_z} \sqrt{2F+1} \sum_{M_1+M_2=F_z} \begin{pmatrix} 3/2 & 3/2 & J \\ M_1 & M_2 & -F_z \end{pmatrix} \Psi_{M_1}^1(r_1) \Psi_{M_2}^2(r_2), \quad (3.45)$$

где F_z - проекция момента F . Здесь у $\Psi_M^{1,2}$ введен верхний индекс, отражающий возможность двух наборов радиальных функций $R_0^{1,2}$ и $R_2^{1,2}$, определенных в ур.(11,12) и отличающихся параметром α (α_1 и α_2). Если радиальные функции отличаются ($\alpha_1 \neq \alpha_2$), то пробная двухчастичная функция выбирается в виде антисимметричной комбинации собственных функций полного момента

$$\zeta_{F,F_z} = \frac{1}{2}[\Phi_{F,F_z}^{1,2}(r_1, r_2) - \Phi_{F,F_z}^{1,2}(r_2, r_1)] \quad (3.46)$$

Основному состоянию экситона соответствует состояние дырок с $F = 2$.

Для анализа влияния корреляций на энергию связи биэкситона в пределе $\beta = 1$ мы производим расчет без поляризационных членов, $C_{ph} = C_{pe} = 0$, с одним поляризационным членом, $C_{ph} = 0$ и $C_{pe} \neq 0$, либо $C_{ph} \neq 0$ и $C_{pe} = 0$, а также с двумя поляризационными членами $C_{ph} \neq 0$ и $C_{pe} \neq 0$. Для $\beta = 0$ был произведен расчет без поляризационных членов, а также с поляризационным членом только для электронов. Учет поляризационного члена для дырок в сложной зоне по аналогии с тем, как было сделано для электронов, приводит к расходимости кинетической энергии дырок и требуется отдельное исследование, выходящее за рамки диссертационной работы.

На рис. 3.9 представлены зависимости энергии биэкситона E_{XX}^b от радиуса квантовой точки a , вычисленные для различных наборов поляризационных параметров в волновой функции биэкситона для прямоугольных потенциалов (а) и потенциала гармонического осциллятора (б). Сплошными линиями выделены результаты расчетов E_{XX}^b с поляризационными членами для электронов и дырок, когда $C_{ph} \neq 0$ и $C_{pe} \neq 0$. Расчеты с меньшим числом поляризационных вкладов представлены на рисунке символами. На рис. 3.10 (а) представлены зависимости энергии связи биэкситона E_{XX}^b от радиуса квантовой точки a для всех исследуемых потенциалов в предельном случае простой валентной зоны $\beta = 1$, полученные с учетом обоих поляризационных членов, а на рис. 3.10 (б) представлены зависимости энергии связи биэкситона с $F = 2$ в потенциалах гармонического осциллятора и Гаусса при $\beta \rightarrow 0$ с поляризационным членом только для электронов.

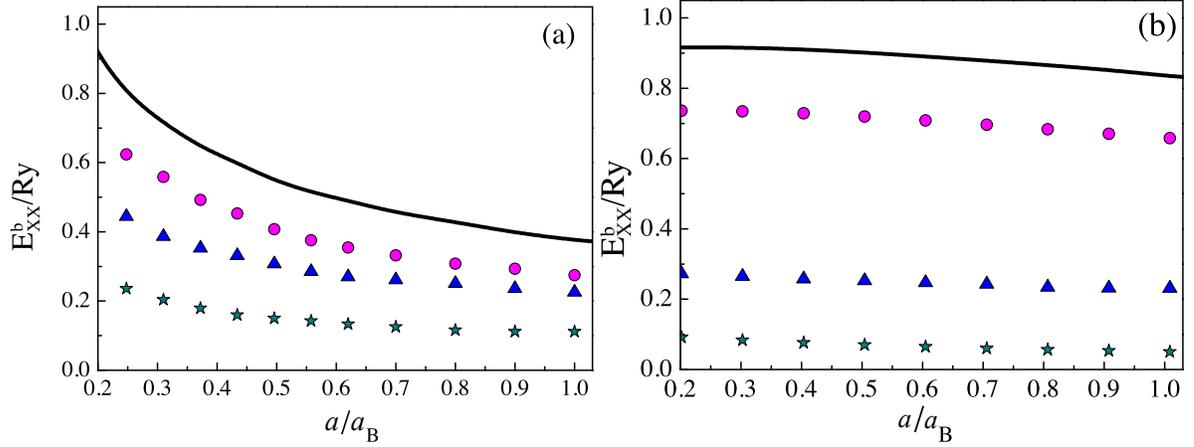


Рис. 3.9: Зависимость энергии связи биэкситона, E_{XX}^b , от радиуса квантовой точки a в пределе $\beta = 1$ для прямоугольного потенциала (а) и потенциала гармонического осциллятора (б). Сплошными линиями показаны зависимости E_{XX}^b , вычисленные с поляризационными членами для дырок и электронов, круглыми символами – только для дырок, треугольными символами – только для электронов, звездочками показан результат, полученный без поляризационных членов.

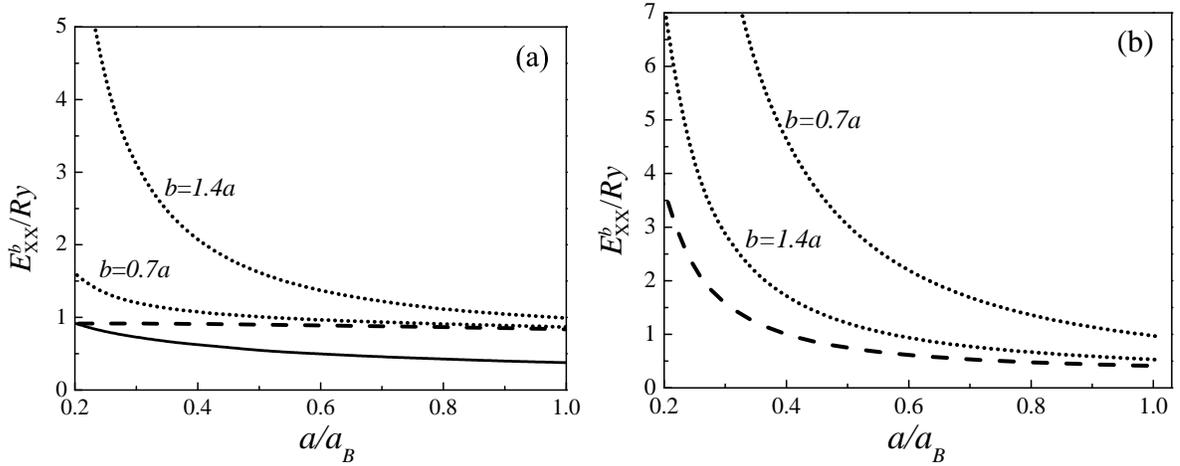


Рис. 3.10: Зависимость энергии связи биэкситона, E_{XX}^b , от радиуса квантовой точки a для прямоугольного потенциала (сплошная линия), потенциалов гармонического осциллятора (пунктирная линия) и Гаусса (точечные линии) с различной характерной длиной b в пределе $\beta = 1$, рассчитанные с двумя поляризационными членами (б) для потенциала гармонического осциллятора и Гаусса в пределе $\beta \rightarrow 0$ с поляризационным членом только для электронов на примере биэкситона с $F = 2$.

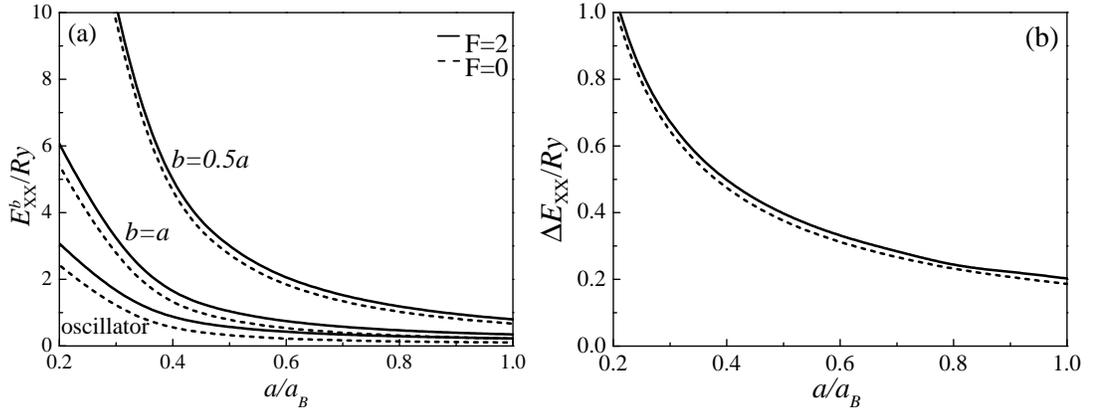


Рис. 3.11: (а) Зависимость энергии связи, E_{XX}^b , состояний биэкситона с $F = 2$ (сплошные линии) и $F = 0$ (пунктирные линии) от радиуса квантовой точки a , вычисленные для квантовой точки с параболическим потенциалом и потенциалом Гаусса с различными b при $\beta \rightarrow 0$. (б) Зависимость расщепления между биэкситонными состояниями с $F = 2$ и $F = 0$ от радиуса квантовой точки a , вычисленная вариационным методом для потенциалов гармонического осциллятора и Гаусса с различным b (сплошные линии), а также по теории возмущений для потенциала гармонического осциллятора (пунктирная линия). Зависимости, вычисленные вариационным методом для всех исследованных потенциалов очень близки и на рисунке не различимы.

Естественно, наибольший выигрыш в энергии связи биэкситона E_{XX}^b достигается при учете поляризационных членов в волновой функции как для дырок, так и для электронов. Анализ величин энергии связи, вычисленных с одним поляризационным членом, показывает, что более важным является учет корреляций между наиболее тяжелыми частицами, которыми в изучаемом случае являются дырки. При этом энергия связи E_{XX}^b , найденная для потенциала гармонического осциллятора, почти не меняется с увеличением размера квантовой точки, независимо от количества учтенных поляризационных членов при $\beta = 1$, в отличие от прямоугольного потенциала, где она резко вырастает с уменьшением a/a_B .

Полученные результаты наглядно демонстрируют, что при условии одинаковой локализации наибольшее значение энергии связи биэкситона E_{XX}^b достигается в потенциале Гаусса (Рис. 3.10). Величина E_{XX}^b максимальна при малых значениях b , не превышающих характерный размер точки a . При увеличении b величина

E_{XX}^b начинает убывать и асимптотически стремится к значению энергии связи для потенциала гармонического осциллятора. Положительную энергию связи биэкситона в предельном случае $\beta \rightarrow 0$ удалось вычислить только для плавных потенциалов (рис. 3.10 (b)). Вероятно, это связано с тем, что для $\beta \rightarrow 0$ учитывался только один поляризационный член для электронов, который дает наименьший выигрыш в энергии E_{XX}^b . Для прямоугольного потенциала энергия связи биэкситона, вычисленная по теории возмущений и без поляризационных членов [104] отрицательна, и учет только электронного поляризационного члена не позволяет скомпенсировать кулоновское отталкивание между дырками. Однако даже при неполной компенсации энергия E_{XX}^b в потенциалах гармонического осциллятора и Гаусса оказывается больше для $\beta \rightarrow 0$, чем E_{XX}^b , вычисленная с двумя поляризационными членами для $\beta = 1$. Также возникает выраженная зависимость энергии связи биэкситона в потенциале гармонического осциллятора от размера квантовой точки, отсутствующая в предельном случае $\beta = 1$.

Как было сказано выше, в пределе $\beta \rightarrow 0$ существуют два биэкситонные состояния, отличающихся полным угловым моментом двух дырок, $F = 2$ и $F = 0$. Зависимости соответствующих энергий связи от радиуса квантовой точки для квантовых точек с гармоническим потенциалом и потенциалом Гаусса показаны на рис. 3.10 (а). Зависимости расщепления между состояниями биэкситона с $F = 2$ и $F = 0$ от размера квантовой точки практически одинаковы для потенциала гармонического осциллятора и потенциалов Гаусса с различным b , рис. 3.10 (b). Следует отметить, что величина расщепления, вычисленная вариационным способом, не зависит от количества поляризационных членов и хорошо совпадает с величиной, найденной в рамках теории возмущений первого порядка. Таким образом, хотя теория возмущений первого порядка дает отрицательное значение энергии связи биэкситона, что может не соответствовать точному расчету, она позволяет довольно точно оценить величину расщепления между биэкситонными состояниями для дальнейшего анализа тонкой энергетической структуры.

В заключение раздела необходимо еще раз отметить, что при близком размере областей локализации электронов и дырок основной вклад в энергию связи биэкситона вносят корреляции между носителями заряда одного знака. Такая ситуация реализуется, например, в коллоидных нанокристаллах, где потенциальный барьер для носителей заряда резкий и высокий и их области локализации определяются, в основном, геометрией структуры. Иная ситуация в эпитаксиальных квантовых точках. В них размеры областей локализации электронов и дырок могут существенно отличаться, и тогда величину энергии связи биэкситона будет определять, в основном, нескомпенсированное в первом порядке теории возмущений отталкивание между одноименными носителями заряда. В этом случае энергия связи биэкситона будет отрицательной.

3.6 Моделирование экситонных состояний в квантовых точках CdSe и эксперимент

3.6.1 Постановка задачи

Широкозонные квантовые точки на основе соединений групп II-VI, создаваемые методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МВЕ) посредством осаждения дробного количества монослоев CdSe в широкозонную матрицу активно исследуются с конца прошлого века [281]. Сопоставление оптических и структурных характеристик исследованных образцов вызывает ряд вопросов. К примеру, линия фотолюминесценции из массивов CdSe квантовых точек имеет сравнительно небольшую ширину $40 \div 60$ meV при низких температурах, характерную для узкого распределения квантовых точек по размерам и составу. Эффективность излучения II-VI лазерных структур также достаточно высока, что могло бы реализовываться в случае массивов с низкой дисперсией параметров точек [282]. Однако проведенные исследования методом просвечивающей микроскопии свидетельствуют обратное: массивы представляют собой неоднородные ансамбли квантовых точек, различающихся как размерами, так и содержанием кадмия [230, 239]. Рассмотрение таких

планарных массивов в модели разупорядоченных квантовых ям проблематично, поскольку при низкой температуре рекомбинирующие носители должны быть хорошо локализованы. Согласование этих противоречивых моментов потребовало в работе [200] включения в состав структуры nanoостровков различных типов: изолированных, перекрывающихся и метастабильных.

В работах [A10],[A11],[A12] был предложен альтернативный подход для объяснения нетривиальных свойств эпитаксиальных II-VI квантовых точек, заключающийся в возможности ферстеровского резонансного переноса энергии [283] из ансамбля маленьких точек (с большой энергией экситона), именуемых “донорами”, в ансамбль излучающих точек (с меньшей энергией экситона) – “акцепторов”. В полупроводниковых системах ферстеровский перенос экспериментально исследовался ранее в ансамблях коллоидных точек [284, 285], вертикально-связанных массивах эпитаксиальных точек [286] и квантовых ям [287]. Теоретическое описание ферстеровского резонансного переноса энергии в рамках существующих модельных представлений и необходимые ссылки приведены в обзоре [288]. Этот нерadiационный механизм основан на диполь-дипольном взаимодействии между микроскопическими осцилляторами – экситонами и не предполагает реального переноса носителей заряда. Необходимое условие для его реализации – пространственная близость “доноров” и “акцепторов”, поскольку эффективность переноса спадает $\propto R^{-6}$ с увеличением расстояния R между точками. Высокая латеральная плотность квантовых точек ($\sim 10^{11}$ см $^{-2}$) способствует осуществлению ферстеровского переноса в массивах эпитаксиальных квантовых точек II-VI. Отметим, что перенос энергии в структурах с II-VI квантовыми точками традиционно рассматривался как процесс туннелирования или прыжков экситонов [289] или (при меньшей плотности) как передача энергии излучением [290].

3.6.2 Эксперимент

В группе Т.В. Шубиной (лаб. С.В. Иванова, ФТИ им. Иоффе) исследовались два типа структур: 1) одиночные вставки планарных массивов квантовых точек CdSe

в ZnSe; 2) двойные вставки, разделенные барьером толщиной w , изменяемой в диапазоне $6 \div 13$ nm, что позволило изучить перенос энергии в зависимости от расстояния между точками-“донорами” и точками-“акцепторами”. Номинальная толщина CdSe в акцепторной вставке была 2.7 монослоя, что соответствовало концентрации $80 \div 85$ мол.% Cd в центре квантовых точек. В донорной вставке номинальная толщина варьировалась в диапазоне $1.4 \div 1.8$ монослоя (~ 50 мол.% Cd). Данные о статистике распределения латеральных размеров квантовых точек были получены в результате исследований методом просвечивающей электронной микроскопии структур с одиночными вставками (см. подробнее в [A11]), которые показали наличие крупных nanoостровов ($6 \div 8$ nm и более), окруженных большим количеством маленьких точек. Вследствие сегрегации и диффузии Cd в процессе роста часть из них расположена выше крупных nanoостровов (в пределах $5 \div 7$ nm). Предполагается, что это обстоятельство в стандартной геометрии оптических экспериментов должно облегчать возбуждение маленьких квантовых точек с последующим переносом энергии в нижележащие nanoострова.

Структуры исследовались методом спектроскопии возбуждения фотолюминесценции (подробности приведены в [A10]). Кривые затухания PL регистрировались из максимума полосы излучения при 5 K. Отличительной чертой спектрального изменения селективно возбуждаемой фотолюминесценции является смещение ее пика в коротковолновую сторону при энергии 2.6 eV. Смещение достигает $15 \div 20$ meV, рис. 3.12. Подобный сдвиг линии отсутствует как в структурах с малой плотностью квантовых точек, так и во вставках с низкой концентрацией Cd и высокой энергией излучения. Как показано ниже, подобный сдвиг является индикатором существования специфического ферстеровского переноса энергии, осуществляемого с участием возбужденных экситонных уровней.

3.6.3 Моделирование и анализ результатов

Анализ результатов оптических исследований опирался на численный расчет уровней энергии электронов и дырок в сфероидных квантовых точках с гауссовым по-

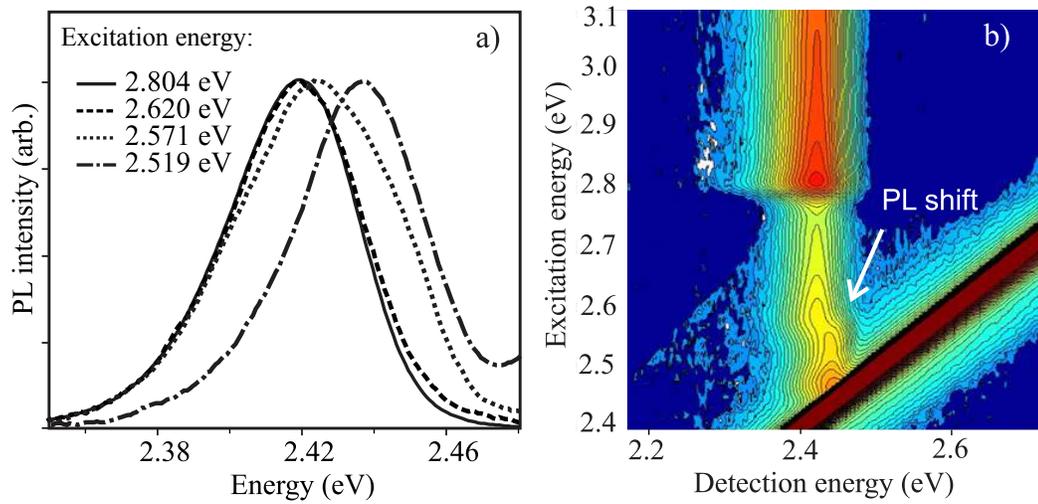


Рис. 3.12: (а) Спектры селективно-возбуждаемой фотолуминесценции для структуры с одиночной вставкой CdSe, имеющей номинальную толщину 2.7 монослоя. (б) Развертка спектра фотолуминесценции по энергии возбуждения и детектирования.

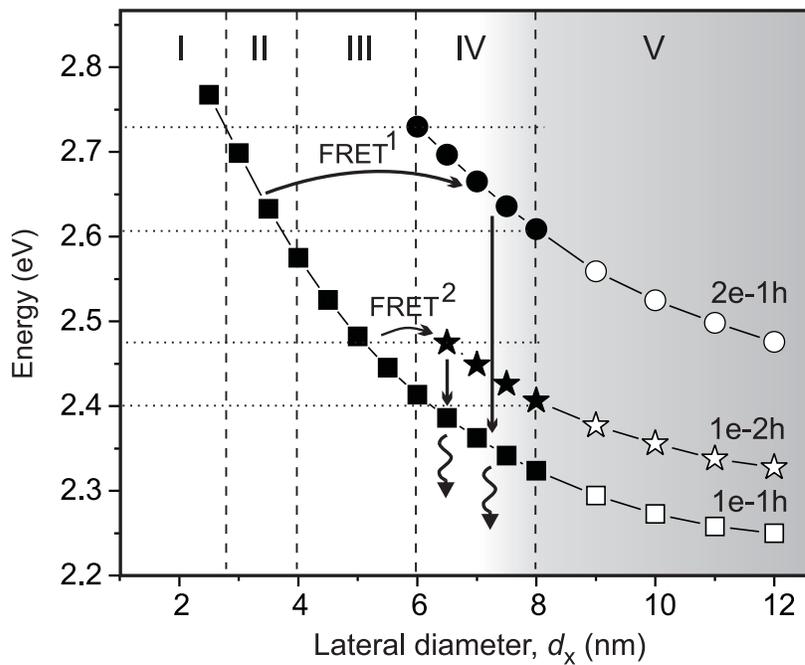


Рис. 3.13: Теоретические зависимости энергии основного экситонного уровня (1e-1h) и возбужденных уровней от латерального размера CdSe/ZnSe квантовых точек с 85 мол.% Cd в их центре. Области (I)-(IV) соответствуют различной вовлеченности квантовых точек в ферстеровский резонансный перенос энергии; область (V) содержит в основном дефектные неизлучающие наноструктуры.

тенциальным профилем в рамках модели, развитой выше. Эффективные массы электронов, тяжелых и легких дырок внутри квантовой точки считались постоянными и вычислялись по линейной интерполяции между ZnSe и CdZnSe с использованием усредненного состава, что допустимо, поскольку данные параметры близки во всех этих материалах. Расчет проводился с учетом степени анизотропии точек, нарастающей с увеличением их латерального диаметра d_x как $\mu = (d_x[nm] - 2)/10$. Размер точки в направлении роста структуры при этом записывался как $d_z = d_x \sqrt{(1 - 2/3\mu)/(1 + 4/3\mu)}$. При таком определении точки размером 2 нм являются сферическими, тогда как квантовые точки большего размера имеют форму сплюснутых в направлении роста сфероидов, что соответствует данным просвечивающей электронной микроскопии.

Из найденных возможных возбужденных экситонных уровней выбирались такие, которые содержат ненулевую примесь сферической компоненты и, следовательно, допускают по правилам симметрии перенос энергии к ним от основных состояний “доноров” — маленьких точек. Зависимости энергий основных и возбужденных экситонных уровней от латерального диаметра точек, рассчитанные для квантовых точек с 85 мол. % Cd в центре, приведены на рис. 3.13. На этих зависимостях можно выделить несколько характерных областей латеральных размеров. Затемненная область (V) соответствует размерам больше критического по уровню допустимых напряжений. Эти точки изобилуют дефектами и являются, как правило, оптически неактивными. Минимальное значение определяет нижнеэнергетическую границу излучения CdSe квантовых точек при стандартной технологии молекулярно-пучковой эпитаксии. Область (I) содержит те точки, для основного экситонного уровня которых нет соответствующего возбужденного уровня квантовых точек—“акцепторов” и, следовательно, специфический механизм типа ферстеровского переноса с быстрой релаксацией возбуждения на нижний экситонный уровень для них невозможен. Следует отметить, что граница между областью (I) и (II) спектрально приблизительно совпадает с краем подвижности

в неоднородном ансамбле квантовых точек (см. [A9]). Квантовые точки, размеры которых попадают в область (II), могут участвовать в переносе энергии по механизму ферстеровского переноса на возбужденные уровни ($2e-1h$) в квантовых точках из области (IV). Для данной концентрации Cd эти уровни появляются в nanoостровках размером более 6 nm. Область (III) включает такие квантовые точки, которые не участвуют в процессе переноса энергии с использованием обсуждаемого механизма вплоть до появления при более низких энергиях возбужденного уровня ($1e-2h$), когда резонансный перенос возбуждения становится возможным.

Таким образом, при возбуждении ниже 2.6 eV механизм переноса энергии должен изменяться. Причем как перенос энергии с помощью фононов, так и резонансный перенос по ферстеровскому механизму будут приводить к сдвигу полосы излучения в сторону высоких энергий. Первый – потому что в благоприятной для этого механизма ситуации оказываются, прежде всего, квантовые точки на верхнеэнергетическом краю потенциальных “акцепторов”. Второй – поскольку возможность излучения с участием ферстеровского переноса на уровни ($2e-1h$) исчезает ниже по энергии, чем начинает действовать ферстеровский перенос на уровни ($1e-2h$). Аналогичные зависимости были рассчитаны для различных концентраций Cd в центре точек в диапазоне $50 \div 100$ мол.%. Их анализ позволяет говорить об общности отмеченных особенностей.

Экспериментально наблюдаемая энергия резкого сдвига максимума полосы излучения около 2.6 eV хорошо совпадает с теоретически найденной границей смены доминирующего механизма переноса энергии. Ниже этой границы спектры фотолюминесценции содержат всплески интенсивности, соответствующие переходам с участием LO фононов. Отсутствие заметного сдвига в структурах с малой плотностью определяется резким падением эффективности ферстеровского переноса с увеличением расстояния между квантовыми точками. При низкой же концентрации Cd сдвиг не проявляется в спектрах, поскольку в этом случае возбужденные уровни появляются только в nanoостровках размером более 8 nm, попадающих

в область критических размеров (V). Перенос энергии на уровни таких nanoостровков (как правило, дефектных) не имеет смысла. Ширина линии PL ~ 50 мэВ, противоречащая спектрально-уширенной плотности состояний, рассчитанной в соответствии с данными просвечивающей электронной микроскопии [A11], в предлагаемой модели объясняется узостью размерной области (VI), где осуществляется наиболее эффективный ферстеровский перенос на уровни (2e-1h). Эта область с одной стороны ограничена критическим размером точек, необходимым для появления возбужденных уровней, с другой стороны – диаметром, соответствующим началу дефектообразования в nanoостровках. Поскольку число излучающих точек в области (VI), собирающих энергию со всего ансамбля, сравнительно невелико, оказывается возможным наблюдение ограниченного числа узких линий вместо сплошной полосы излучения, ожидаемой при высокой латеральной плотности квантовых точек [A10].

Полученные результаты и проведенный анализ проясняют ряд противоречивых оптических свойств эпитаксиальных квантовых точек на основе соединений II-VI. Показано, что существенное влияние на кинетику фотолюминесценции в плотных массивах CdSe/ZnSe квантовых точек оказывает ферстеровский резонансный перенос возбуждения. Установлено, что резкий сдвиг максимума полосы излучения связан с изменением доминирующего механизма переноса энергии в неоднородных ансамблях точек. Можно предположить, что направленное создание массивов квантовых точек с бимодальным распределением размеров будет полезно для спектрально-селективного увеличения эффективности нанолазеров и других нанопотонных приборов.

3.7 Краткие итоги

В главе 3 получены следующие основные результаты:

- Исследовано основное состояние дырок в валентной зоне Γ_8 в квантовых точках с гладким потенциальным профилем на примере параболического и

гауссова потенциалов. Предложенный в гл. 2 численный метод обобщен для квантовых точек с гауссовым потенциальным профилем. Продемонстрирована применимость теории возмущений для описания одноосной анизотропии формы квантовой точки и влияния внешнего магнитного поля.

- Исследовано влияние анизотропии состава, приводящей к понижению потенциального барьера квантовой точки в плоскости структуры, на энергетический спектр квантовых точек. Показано, что подобная анизотропия может быть причиной резкого падения интенсивности узких линий экситонной фотолюминесценции в квантовых точках на основе II-VI с ростом температуры, наблюдающегося в экспериментах.
- Рассчитана зависимость величины продольного g -фактора дырки от энергии оптического перехода в квантовых точках $\text{In}_p\text{Al}_q\text{Ga}_q\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Al}_{0.24}\text{Ga}_{0.23}\text{As}$, $p + 2q = 1$, имеющих форму диска. Показано, что продольный g -фактор дырки определяется, в основном, отношением высоты квантовой точки к диаметру, H/D , и, в меньшей степени, составом. Энергия оптического перехода, напротив, сильнее зависит от состава, чем от геометрии точки. Сопоставление с экспериментом показало хорошее согласие результатов расчета и эксперимента, а также позволило оценить соотношение между H/D и составом эпитаксиальных квантовых точек. Оценена величина g -фактора дырки, локализованной в коллоидных наноплателетах CdSe/CdS с толстой оболочкой. Продемонстрирована существенная роль формы и вида локализирующего потенциала, а также кристаллической структуры (кубическая или вюрцитная) ядра CdSe на величину g -фактора дырки.
- Предложены пробные функции для расчета энергии связи биэкситона в сферически симметричных квантовых точках в пределе сильного размерного квантования, позволяющие учесть корреляцию между идентичными носителями заряда. Показано, что значительный вклад в энергию связи биэкситона,

локализованного в квантовой точке, вносит корреляция между носителями заряда одного знака. При этом знак энергии связи биэкситона определяется соотношением между размерами областей локализации легких и тяжелых носителей заряда, и может быть как положительным, так и отрицательным, последнее реализуется в случае если разница в размерах областей локализации велика. Вычислены зависимости энергии связи биэкситона от радиуса квантовой точки для прямоугольного, параболического и гауссова гетеропотенциалов при условии равенства эффективного радиуса квантовой точки для электронов и дырок в пределах $\beta \rightarrow 1$ (соответствует простой валентной зоне) и $\beta \rightarrow 0$. Продемонстрирована применимость теории возмущений первого порядка для оценки величины расщепления между биэкситонными состояниями с различным полным моментом дырок.

- Выполнен расчет энергий электронов и дырок, локализованных в квантовых точках CdSe/ZnSe, выращенных по методу молекулярно-пучковой эпитаксии. Показано, что смещение пика селективно возбуждаемой фотолюминесценции в коротковолновую сторону при энергии 2.6 eV на энергию до $15 \div 20$ meV, наблюдающееся экспериментально, может являться следствием существования ферстеровского переноса энергии, осуществляемого с участием возбужденных энергетических уровней.

Глава 4

Экситоны и трионы в двумерных кристаллах MX_2

4.1 Введение

В последние два десятилетия физика наноструктур обогатилась новым классом двумерных систем – двумерными кристаллами – в первую очередь графеном, монослоями нитрида бора, двумерным черным фосфором, а также мономолекулярными слоями дихалькогенидов переходных металлов. Последние описываются химической формулой MX_2 (где M – переходной металл, как правило, Mo , W , а X – халькоген, в наиболее распространенных случаях, S , Se , Te). В отличие от графена, где валентная зона и зона проводимости смыкаются в точках \mathbf{K} и \mathbf{K}' (иногда обозначаемых как \mathbf{K}_\pm) на границах зоны Бриллюэна, наличие различных атомов в элементарной ячейке монослоев MX_2 приводит к открытию щели в этих точках [291, 292, 293]. Схематически зонная структура таких монослоев представлена на рис. 4.1. С монослоями дихалькогенидов переходных металлов связывают значительные перспективы применений в электронике и оптоэлектронике благодаря тому, что такие системы являются прямозонными полупроводниками с $E_g \approx 2$ эВ [294, 18, 295, 296, 297, 298]. К настоящему времени имеются широкие возможности создания ван-дер-ваальсовых гетероструктур, где монослои дихалькогенидов переходных металлов, графен и другие двумерные полупроводники перемежаются гексагональным нитридом бора, обеспечивающим туннельно-

непрозрачные барьеры и значительно улучшающим оптические свойства таких систем [299].

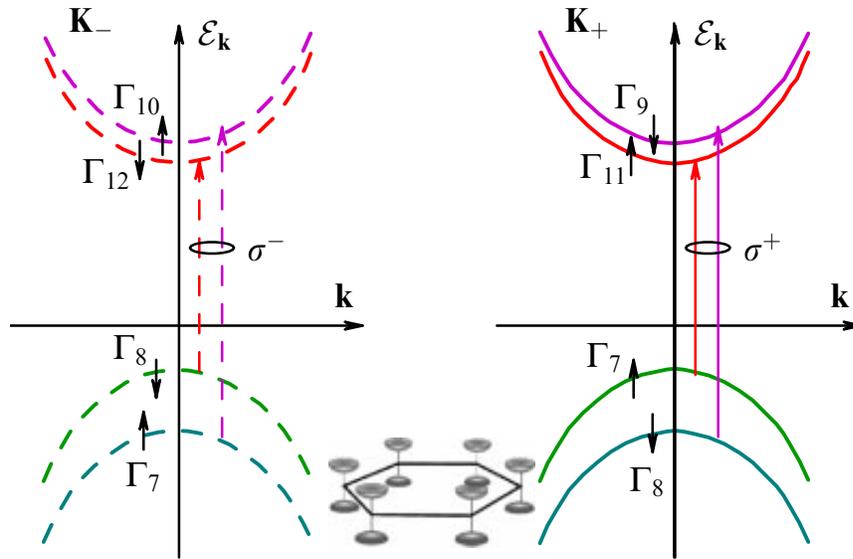


Рис. 4.1: Схематическое изображение энергетической дисперсии вблизи \mathbf{K} -точек зоны Бриллюэна и правил отбора при освещении светом циркулярной поляризации для монослоев MoS_2 и MoSe_2 . В случае монослоев WS_2 и WSe_2 спиновые подзоны зоны проводимости имеют другой порядок. На вставке схематично изображена зона Бриллюэна и параболическая дисперсия вблизи точек \mathbf{K}_{\pm} (Рисунок взят из [300]).

С точки зрения оптической спектроскопии ключевыми особенностями монослоев MX_2 , а также ван-дер-ваальсовых гетероструктур на их основе являются киральные правила отбора, приводящие к тому, что электрон-дырочные пары в долинах \mathbf{K}_+ и \mathbf{K}_- возбуждаются фотонами с противоположным знаком циркулярной поляризации (см. рис. 4.1), а также исключительно сильные эффекты кулоновского взаимодействия [292, 293, 301]. В частности, энергия связи экситона достигает нескольких сотен мэВ, а триона десятков мэВ. Тем самым, экситоны и трионы доминируют в оптическом отклике дихалькогенидов переходных металлов [19, 300].

Также важной особенностью электрон-дырочных комплексов в таких структурах является нетривиальная экранировка кулоновского взаимодействия. Значи-

тельный диэлектрический контраст между материалом монослоя и окружающей средой (вакуумом или воздухом для свободно подвешенного монослоя или нитридом бора в инкапсулированных структурах) приводит к тому, что закон взаимодействия носителей заряда отличается от кулоновского. На больших расстояниях r электрическое поле проникает в окружающую среду и потенциальная энергия взаимодействия спадает с увеличением расстояния как $1/r$, однако на малых расстояниях поле концентрируется в монослое и взаимодействие описывается логарифмическим законом [138, 139, 302]. На необходимость учета диэлектрического контраста при описании экситонных эффектов в монослойных кристаллах обращалось внимание в литературе см., например, [301, 303, 304], тем не менее развитие последовательной теории экситонных и трионных состояний в монослойных и двухслойных дихалькогенидах переходных металлов с учетом диэлектрического контраста является актуальной задачей. Кроме того, при сопоставлении расчетных и экспериментальных оптических спектров ван-дер-ваальсовых гетероструктур необходимо учитывать эффекты, связанные с распространением электромагнитных волн в слоистой среде [A17], что приводит, в частности, к значительной модификации сил осциллятора экситонов за счет эффекта Парселла [305, 306, 307, 308].

В настоящей главе, написанной по результатам работ [A17], [A18], [A19], [A20], [A21], развита теория экситонных состояний в монослоях MX_2 , изучен эффект Парселла в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах, предложены и апробированы вариационные функции для описания трионов в монослоях дихалькогенидов переходных металлов, а также исследованы экситоны и трионы в двухслойных структурах на основе MX_2 с учетом диэлектрического контраста.

4.2 Серия экситонных состояний в гетероструктурах с монослоями MX_2

В данном разделе развивается теория экситонной серии в монослоях дихалькогенидов переходных металлов. Основное внимание уделяется отличиям энергий

связи экситонных состояний и их сил осциллятора от полученных в рамках двумерной водородоподобной модели.

4.2.1 Кулоновский потенциал в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах

Данный параграф носит вводный и методический характер, его цель проиллюстрировать отличие потенциала межчастичного взаимодействия от кулоновского в моно- и бислойных гетероструктурах с учетом диэлектрического контраста. Для общности будет рассматриваться двухслойная система, где два монослоя MX_2 находятся в диэлектрической среде и расположены на расстоянии d друг от друга. Переход к случаю одного монослоя соответствует пределу $d \rightarrow \infty$. Приведенные здесь результаты будут использоваться далее для описания электрон-дырочных комплексов как в монослойных, так и двухслойных системах.

Диэлектрический отклик слоев описывается двумерными поляризуемостями α_1 и α_2 первого и второго слоя соответственно, диэлектрическая проницаемость окружающей среды ϵ и полагается константой. Отличие данного подхода от классического, предложенного в работах [138, 139] состоит в том, что слои считаются строго двумерными. При этом учитывать размытие заряда на толщине слоя не требуется, так как боровский радиус экситона в монослоях дихалькогенидов переходных металлов значительно превышает постоянную решетки, а использование двумерной поляризуемости позволяет избежать сложностей с применением электродинамики сплошных сред на масштабах постоянной кристаллической решетки: микроскопические поля считаются усредненными по многим элементарным ячейкам в плоскости структуры и по толщине слоя. Эффектами экранировки за счет свободных носителей заряда здесь пренебрегается, она не существенна при расчете энергий связи электрон-дырочных комплексов в MX_2 , см., например, [309].

Пусть точечный заряд $e < 0$ находится слое 1, поляризация \mathbf{P} (дипольный

момент единицы объема) в исследуемой системе может быть записана как

$$\mathbf{P} = \delta(z - z_1)\alpha_1\mathbf{E}_{||} + \delta(z - z_2)\alpha_2\mathbf{E}_{||}, \quad (4.1)$$

где $\mathbf{E}_{||}$ – компоненты электрического поля в плоскости структуры, z_1 и z_2 – координаты слоев вдоль оси z , являющейся нормалью к слоям. Плотность “внешнего” заряда в слое 1:

$$n_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = e\delta(z - z_1)\delta(\boldsymbol{\rho}), \quad (4.2)$$

где $\boldsymbol{\rho}$ – координата в плоскости структуры. По теореме Гаусса

$$\delta\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\varepsilon}n(\mathbf{r}), \quad (4.3)$$

где полная плотность заряда $n(\mathbf{r}) = n_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + n_{\text{ind}}(\mathbf{r})$, и $n_{\text{ind}}(\mathbf{r})$ – плотность наведенного заряда:

$$n_{\text{ind}}(\mathbf{r}) = -\text{div } \mathbf{P}. \quad (4.4)$$

Электрическое поле в плоскости системы выражается стандартным образом через компоненты градиента потенциала, $\mathbf{E}_{||} = -\nabla_{\boldsymbol{\rho}}\varphi(z, \boldsymbol{\rho})$. В результате, уравнение для потенциала, создаваемого точечным зарядом принимает вид:

$$\begin{aligned} \delta\varphi(z, \boldsymbol{\rho}) = \\ -\frac{4\pi e}{\varepsilon}\delta(z - z_1)\delta(\boldsymbol{\rho}) - 4\pi\alpha_1\delta(z - z_1)\delta_{\boldsymbol{\rho}}\varphi(z, \boldsymbol{\rho}) - 4\pi\alpha_2\delta(z - z_2)\delta_{\boldsymbol{\rho}}\varphi(z, \boldsymbol{\rho}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Переходя к преобразованию Фурье по координатам в плоскости монослоев получаем в согласии с [310] следующие выражения

$$\tilde{\varphi}_1 = \frac{2\pi e}{\varepsilon q} \frac{1 + qr_2(1 - \xi^2)}{(1 + qr_2) \left(1 + qr_1 - \frac{q^2 r_1 r_2 \xi^2}{1 + qr_2}\right)} \quad (4.6)$$

для фурье-образа эффективного потенциала взаимодействия для зарядов, находящихся в одном слое,

$$\tilde{\varphi}_2 = -\frac{qr_1\tilde{\varphi}_1\xi}{1 + qr_2} + \frac{2\pi e\xi}{\varepsilon q(1 + qr_2)} \quad (4.7)$$

для фурье-образа эффективного потенциала взаимодействия для зарядов, находящихся в разных слоях. Здесь $r_1 = 2\pi\alpha_1$ и $r_2 = 2\pi\alpha_2$ – эффективные радиусы

экранировки в первом и втором слое, соответственно, $\xi = e^{-q|z_1 - z_2|} = e^{-qd}$ – безразмерный параметр, определяющий эффективность электростатического взаимодействия слоев. Таким образом, путем решения самосогласованной задачи были получены выражения (4.6) и (4.6) для эффективных двумерных потенциалов взаимодействия между носителями заряда в двуслойной структуре.

В предельном случае большого расстояния между слоями $d \rightarrow \infty$, $\xi \rightarrow 0$, когда влиянием второго слоя можно пренебречь, задача сводится к рассмотрению одного слоя, фурье-образ потенциала взаимодействия носителей заряда внутри слоя (4.6) принимает простой вид:

$$\tilde{\varphi}_1 = \frac{2\pi e}{\varepsilon q(1 + qr_1)}. \quad (4.8)$$

При малых волновых векторах q (большие расстояния) $\tilde{\varphi}_1 \propto 1/q$ и потенциал взаимодействия двух зарядов описывается законом Кулона $e/(\varepsilon r)$, а при больших q (малые расстояния) $\tilde{\varphi}_1 \propto 1/q^2$, что приводит к логарифмической зависимости потенциала от расстояния $\propto (e/r_1) \ln(r/r_1)$. Выражение (4.8) можно преобразовать в координатное пространство в согласии с [138, 139, 303, 311, 312]

$$\varphi(r) = \frac{\pi e}{2\varepsilon r_1} \left[\mathbf{H}_0 \left(\frac{r}{r_1} \right) - Y_0 \left(\frac{r}{r_1} \right) \right]. \quad (4.9a)$$

Здесь \mathbf{H}_0 и Y_0 – функции Струве и Неймана. Отметим, что в ряде работ вместо параметра r_1 вводят новый радиус экранировки $\tilde{r}_1 = \varepsilon r_1$, что позволяет записать потенциал как

$$\varphi(r) = \frac{\pi e}{2\tilde{r}_1} \left[\mathbf{H}_0 \left(\frac{\varepsilon r}{\tilde{r}_1} \right) - Y_0 \left(\frac{\varepsilon r}{\tilde{r}_1} \right) \right]. \quad (4.9b)$$

Выбор выражения (4.9a) или (4.9b) диктуется лишь соображениями удобства. Выражения (4.9) называют в литературе потенциалом Рытовой-Келдыша. Необходимо отметить, что аналогичная задача для сверхрешеток решена в [313].

4.2.2 Экситонная серия с учетом диэлектрического контраста

На рисунке (4.2) представлены результаты расчета энергетического спектра экситонной серии [панель (a)], а также нормированные на силу осциллятора основ-

ного состояния силы осциллятора экситонов в зависимости от главного квантового числа [панель (b)]. Для сравнения открытыми символами показаны энергии и силы осцилляторов, рассчитанные в рамках водородоподобной модели, где диэлектрическим контрастом пренебрегается. Для иллюстрации на рис. (4.2)(c) показана потенциальная энергия электрон-дырочного взаимодействия как с учетом экранировки, так и в пренебрежении диэлектрическим контрастом, а также положения уровней экситонной серии. Параметры расчета соответствуют монослою MoS₂, окруженному гексагональным нитридом бора. Образец представлен на рис. 4.3(a,b): приведенная масса электрон-дырочной пары $\mu = 0.25 m_0$ [303], диэлектрическая проницаемость окружающей среды $\kappa = 4.5$ [314]. В качестве единственного подгоночного параметра выступает радиус экранировки \tilde{r}_1 в выражении (4.9b), его значение $\tilde{r}_1 = 2.95 \pm 0.1$ nm было взято из сопоставления рассчитанных положений состояний с $n = 1, 2$ и 3 с экспериментальными данными по спектрам отражения от таких структур, полученными в университете Тулузы в группе Кс. Мари, Б. Урбажека и Т. Амана, см. рис. 4.3(c) и статью [A17]. Полученное в результате расчета значение длины экранировки \tilde{r}_1 находится в разумном согласии с атомистическими расчетами восприимчивости монослоя [303].

Отличие потенциала электрон-дырочного взаимодействия от закона $1/r$ также приводят к отклонениям сил осцилляторов экситонной серии, f_n , от идеальной двумерной водородоподобной модели экситонов [315]:

$$f_n = f_1 / (2n - 1)^3.$$

Этот эффект представлен на рис. 4.2, где изображено отношение f_n/f_1 , показывающее сильное увеличение относительных сил осциллятора возбужденных состояний экситона для экранированного взаимодействия по сравнению со неэкранированным кулоновским потенциалом при тех же параметрах диэлектрического окружения. Фактически, основное и первое возбужденные состояния формируются, как показано на рис. 4.2(c), в гораздо более мелком, $\propto \ln(r/r_0)$ эффективном потенциале. Следовательно, сила осциллятора, пропорциональная вероятности най-

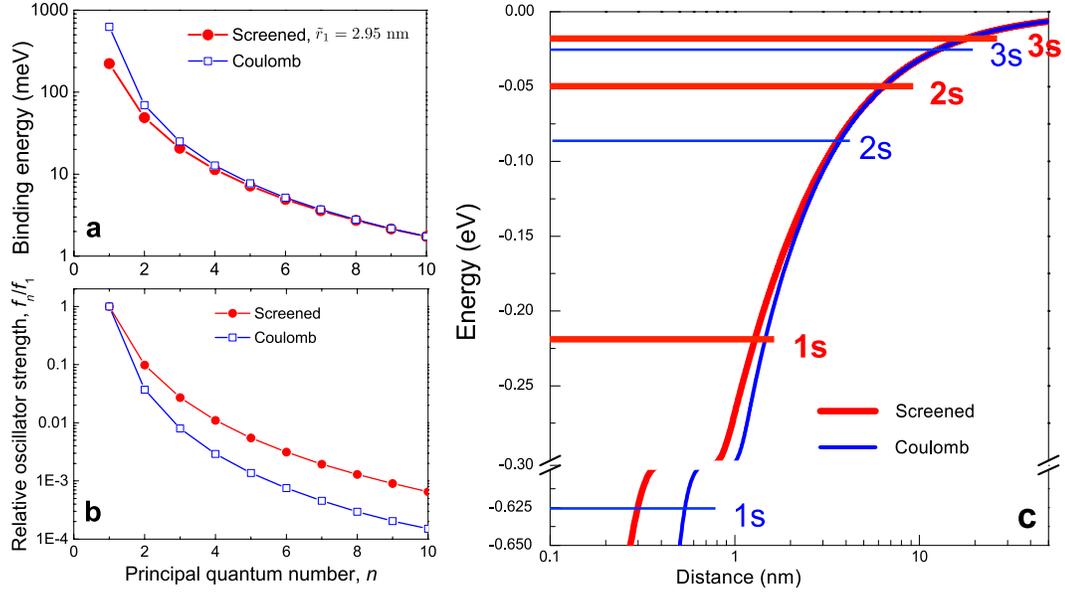


Рис. 4.2: (а) Энергия связи экситона для экранированного (сплошные красные кружки) и кулоновского (открытые синие кружки) потенциала в зависимости от главного квантового числа n в монослое MoS_2 . (б) Относительные силы осциллятора экситонной серии, нормированные на силу осциллятора основного состояния. (в) Схематическая иллюстрация положений уровней экситона для экранированного (красный) и неэкранированного (синий) потенциалов взаимодействия электрона и дырки.

ти электрон и дырку в одной элементарной ячейке, меньше для экранированного, чем для идеального кулоновского потенциала. Чем больше главное квантовое число n , тем ближе экранированный потенциал к его асимптотике $1/(4\pi r)$. В результате силы осциллятора приближаются к их значениям в кулоновском потенциале. Следовательно, уменьшение f_n/f_1 слабее, чем для идеального 2D-экситона, из-за меньших сил осциллятора для состояний с низким n . Отметим, что сравнительно сильные резонансы возбужденных экситонных состояний также предсказываются расчетами оптического отклика монослоев MoS_2 , см., например, [316].

На рис. 4.3(с) представлены результаты исследования спектров отражения монослоя MoS_2 вблизи экситонных резонансов. Измеренный спектр дифференциального отражения (черные точки)

$$\frac{DR}{R} = \frac{R_{ML} - R_{sub}}{R_{sub}}, \quad (4.10)$$

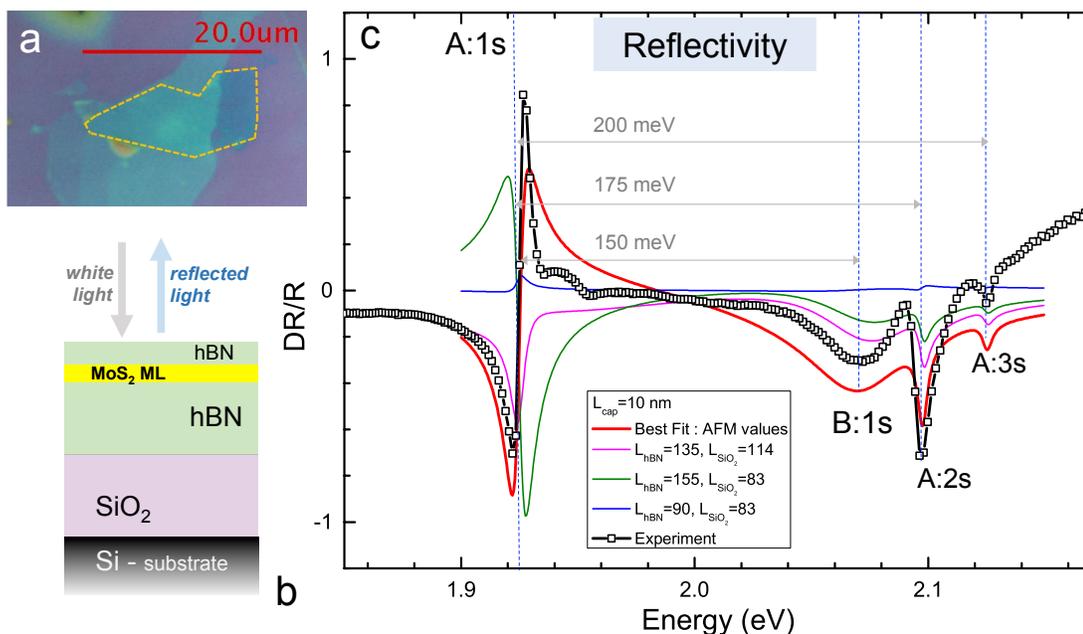


Рис. 4.3: (а) Изображение в оптическом микроскопе слоя MoS_2 , инкапсулированного в гексагональный нитрид бора (hBN). (б) Схема структуры: верхний (нижний) слой hBN имеет толщину 7 ± 3 нм (130 ± 5 нм) согласно атомно-силовой микроскопии (АСМ), слой SiO_2 имеет толщину 83 нм. (в) Спектр дифференциального отражения DR/R (4.10), измеренный с помощью стабилизированной по мощности белой галогенной лампы. Моделирование с использованием толщин hBN , определенных с помощью АСМ, показано жирной красной кривой. Дополнительные расчеты (фиолетовая, зеленая и синяя кривые) для разных толщин hBN и SiO_2 показывают, как глубина и форма экситонных резонансов зависит от толщины отдельных слоев. В расчете энергия основного состояния экситона выбрана равной энергии пика $A : 1s$, энергии возбужденных состояний соответствуют расчету на рис. 4.2(а); радиационное затухание основного состояния $\Gamma_{0,A:1s} = \Gamma_{0,B:1s} = 1$ meV, для возбужденных состояний силы осциллятора соответствуют рис. 4.2(б); нерадиационное затухание $\Gamma_A = 2.5$ meV, $\Gamma_B = 25$ meV. Показатели преломления: $n_{\text{hBN}} = 2.2$, $n_{\text{SiO}_2} = 1.46$, $n_{\text{Si}} = 3.5$.

где R_{ML} – коэффициент отражения структуры с монослоем MoS_2 , а R_{sub} – той же структуры, но без монослоя, демонстрирует четыре пика, три из которых (более узкие) соответствуют основному и возбужденным состояниям А-экситона, т.е. электрон-дырочной пары, сформированной состояниями верхней валентной зоны и нижней зоны проводимости (эти переходы показаны красными стрелками на рис. (4.1)). Еще один более широкий пик соответствует основному состоянию В-экситона, в котором электрон и дырка находятся в спин-орбитально отщепленных зонах. Положения пиков в спектре хорошо согласуется с расчетом (подгонка одного параметра \tilde{r}_1 позволяет надежно воспроизвести два энергетических зазора). Кроме того, эксперимент показывает, что возбужденные состояния А-экситона $2s$ и $3s$ демонстрируют значительный оптический отклик, что качественно согласуется с расчетом сил осциллятора, представленном на рис. 4.2(b). Однако, в теории пик $2s$ экситона должен быть примерно на порядок слабее, чем пик $1s$ состояния, однако в спектрах амплитуда пика второго состояния сопоставима по величине с амплитудой пика основного состояния. Кроме того, форма резонансов отличается от ожидаемой. Это указывает на необходимость учета многократного отражения света в ван-дер-ваальсовой гетероструктуре, рис. 4.3(b), за счет фонового диэлектрического контраста и обусловленный этим эффект Парселла. Соответствующая теория представлена далее в разделе 4.4 после обсуждения экситонной серии в двухслойных ван-дер-ваальсовых гетероструктурах (разд. 4.2.3) и трионов в монослоях и двухслойных структурах MX_2 (разд. (4.3)). Расчет, выполненный с учетом многократного отражения света в системе хорошо согласуется с экспериментом (красная кривая на рис. 4.3(c)).

4.2.3 Экситонная серия в двухслойных системах

Для вычисления энергии основного состояния экситона в двухслойных системах был использован вариационный метод, являющийся хорошим компромиссом между точностью расчета и требуемыми вычислительными затратами (см. главу 1). Гамильтониан относительного движения электрона и дырки в экситоне (напом-

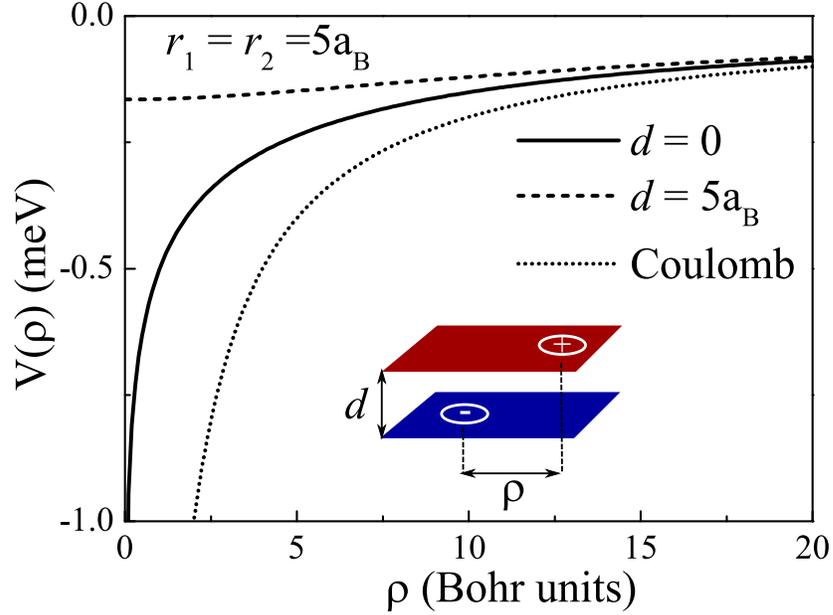


Рис. 4.4: Эффективные потенциалы взаимодействия $V_{eh}(\rho)$ для расстояний между слоями $d \rightarrow 0$ и $d = 5a_B$, также для сравнения показан кулоновский потенциал. На вставке показана схема структуры.

ним, что в рассматриваемой электрон и дырка находятся в разных слоях) есть:

$$\hat{H}_{ex} = -\Delta_\rho + V_{eh}(\rho), \quad (4.11)$$

где

$$V_{eh}(\rho) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty dq \tilde{\varphi}_2 J_0(q\rho). \quad (4.12)$$

Здесь δ_ρ – оператор Лапласа, в качестве единиц измерения длины и энергии были выбраны $a_B = \varepsilon \hbar^2 / (\mu e^2)$, $Ry = \mu e^4 / (2\varepsilon^2 \hbar^2)$, соответственно, μ – приведенная масса электрон-дырочной пары. Эффективные потенциалы взаимодействия $V_{eh}(\rho)$ для расстояний между слоями $d \rightarrow 0$ (модель монослоя) и $d = 5a_B$ при $r_1 = r_2 = 5a_B$, а также также кулоновский потенциал для сравнения показаны на рис. 4.4.

При малых расстояний между слоями $d \rightarrow 0$ потенциал (4.12) переходит в потенциал Рытовой-Келдыша. В противоположном пределе, $d \rightarrow \infty$ (и не слишком малых расстояниях между электроном и дыркой, $\rho > r_{1,2}$) потенциал взаимодействия, аналогично случаю без диэлектрического контраста, может быть прибли-

жен потенциалом гармонического осциллятора.¹

$$V_{eh}(\rho) \approx -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} \approx -\frac{2}{d} - \frac{\rho^2}{d^{3/2}}. \quad (4.13)$$

Тогда уравнение Шредингера для экситона может быть решено аналитически, а энергия связи экситонных состояний может быть записана как [134],[A2] (ср. с (1.38))

$$E_b^{ex} \approx \frac{2}{d} - \frac{2}{d^{3/2}}(n + 1), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.14)$$

где n – номер уровня.

В качестве пробной функции была выбрана следующая:

$$\Psi_{ex}(\rho, \alpha_1, \alpha_2, \beta, \delta) = e^{-\alpha_1 \rho - \beta \rho^2} + \delta \rho e^{-\alpha_2 \rho}, \quad (4.15)$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \beta, \delta$ – подгоночные параметры. Вид выбранной функции обоснован следующими обстоятельствами: 1) при $d \rightarrow 0$ потенциал $V_{eh}(\rho)$ существенно отличается от кулоновского вблизи начала координат, и второй член при $\delta \neq 0$ позволяет учесть соответствующее отклонение от водородоподобной модели; 2) при больших значениях d потенциал $V_{eh}(\rho)$ хорошо аппроксимируется гармоническим, формула (4.13). Тем самым оправдано введение гауссова множителя в пробную функцию (4.15). Для того, чтобы проверить точность выбранной пробной функции, а также дополнительно исследовать энергии связи возбужденных состояний экситона был сделан численный расчет энергии экситона, основанный на разложении волновой функции по базису гауссовых функций. На рис. 4.5(а) сплошными кривыми показаны зависимости энергии связи первых 6 экситонных уровней с z -компонентов углового момента $m = 0$ (s -состояния экситона), пунктирной кривой показана асимптотика в пределе больших d для основного состояния экситона. С целью проследить более подробно переход к пределу гармонического осциллятора,

¹Отметим, что в статьях [317, 318] использовался потенциал Рытовой-Келдыша, в котором в качестве аргумента выступает $\sqrt{\rho^2 + d^2}$. Такой подход не учитывает самосогласованное экранирование в двуслойной системе. При этом в пределе больших расстояний между слоями параболическая зависимость потенциала взаимодействия также имеет место.

на рис. 4.5(b) показаны зависимости от d параметра

$$\delta E = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{d} - E_B^{ex} \right) d^{3/2}, \quad (4.16)$$

который должен стремиться к $n + 1$, $n = 0, 2, 4, ..$ для первых 6 уровней с $m = 0$ [A2]. На графике хорошо видно выполнение этого условия. Напомним, что потенциал двумерного гармонического осциллятора интересен тем, что он, наряду с кулоновским (как объемным так и двумерным), характеризуется дополнительным вырождением уровней, не связанным с пространственной симметрией задачи, и вызванным наличием дополнительного нетривиального оператора, коммутирующего с гамильтонианом (см. разд. 1.3, так называемое случайное вырождение).

Для оценки величины энергии связи экситона в реальных структурах энергия связи экситона E_{ex}^b была рассчитана для следующих параметров, что приближенно отвечает структурам на основе WSe₂ [A19]: $r_1 + r_2 = 3.3$ нм, $\varepsilon = 1.2$, приведенная масса экситона взята $\mu = 0.16m_0$ [A19], где m_0 – масса свободного электрона. Результаты вариационного расчета показаны на рис. 4.6. Были рассмотрены два частных случая, позволяющих наиболее четко проиллюстрировать метод. В первом случае считается, что эффективный радиус экранировки в одном слое $r_1 = 3.3$ нм, а во втором $r_2 = 0$ (предел полностью асимметричной экранировки). Вторым случаем отвечает симметричной системе, где эффективные радиусы экранировки в обоих слоях одинаковы $r_1 = r_2 = 1.65$ нм. Как видно из рис. 4.6, энергии связи экситона для двух случаев совпадают, когда слои близко друг к другу ($d \rightarrow 0$), и эффективный потенциал взаимодействия сводится к потенциалу Рытовой-Келдыша с радиусом экранировки $r_1 + r_2$, а также при $d \rightarrow \infty$, когда особенности экранировки перестают быть важными. При промежуточных величинах расстояний между слоями d наблюдаются отличия между этими ситуациями. Энергия связи экситона для случая асимметричной экранировки оказывается больше, что вызвано связано с тем, что в этом случае глубина эффективного потенциала взаимодействия $V_{eh}(\rho)$ оказывается больше, см. вставку к рис. 4.6.

Подчеркнем, что выбор достаточно сложной пробной функции в виде (4.15)

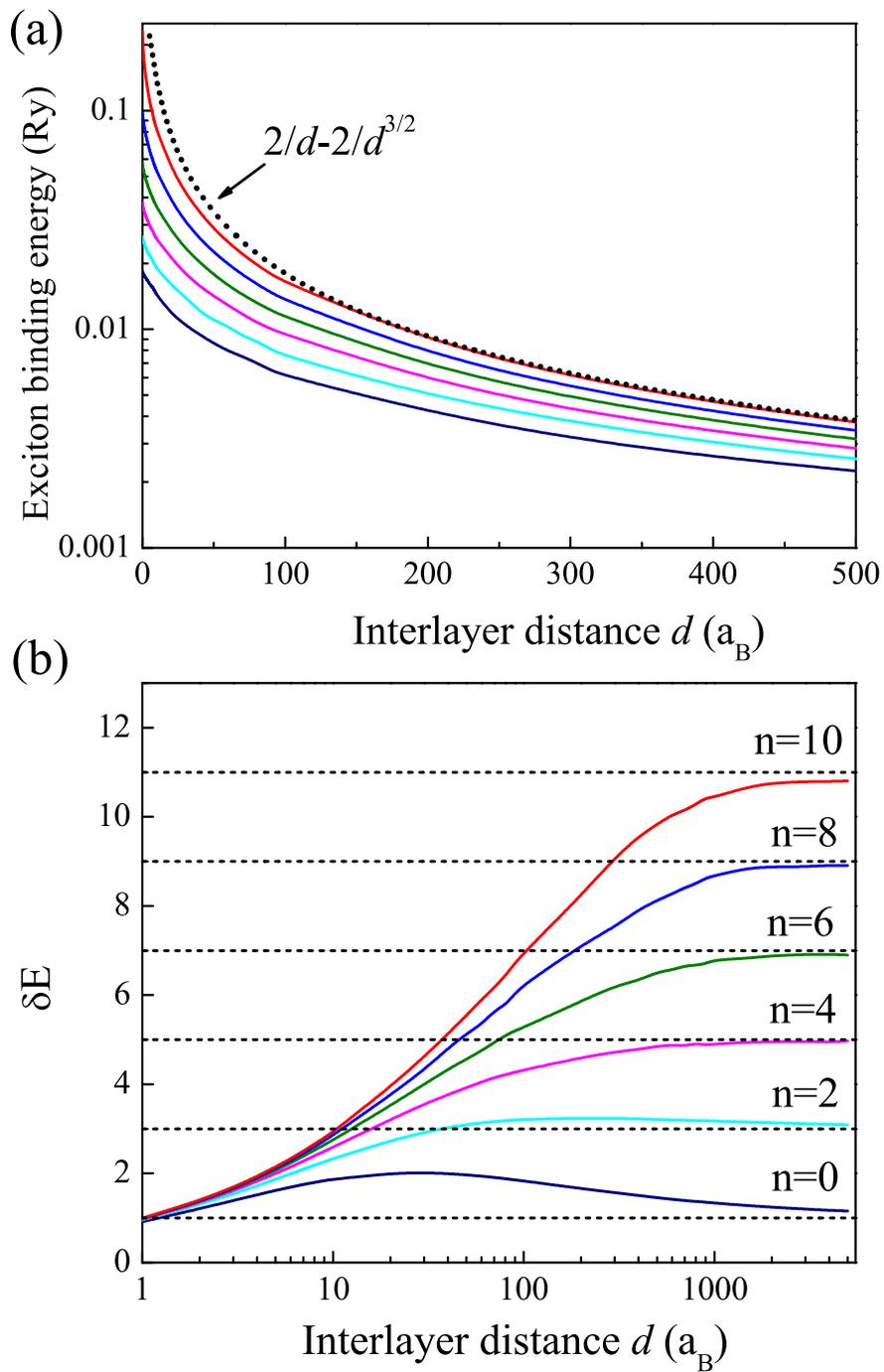


Рис. 4.5: (а) Энергии связи первых 6 s -состояний экситона и асимптотика (4.14) энергии основного состояния (пунктирная кривая) в боровских единицах в зависимости от межслоевого расстояния d ; (б) величина δE (4.16) в зависимости от d . Параметры экранировки $r_1 = r_2 = 6a_B$.

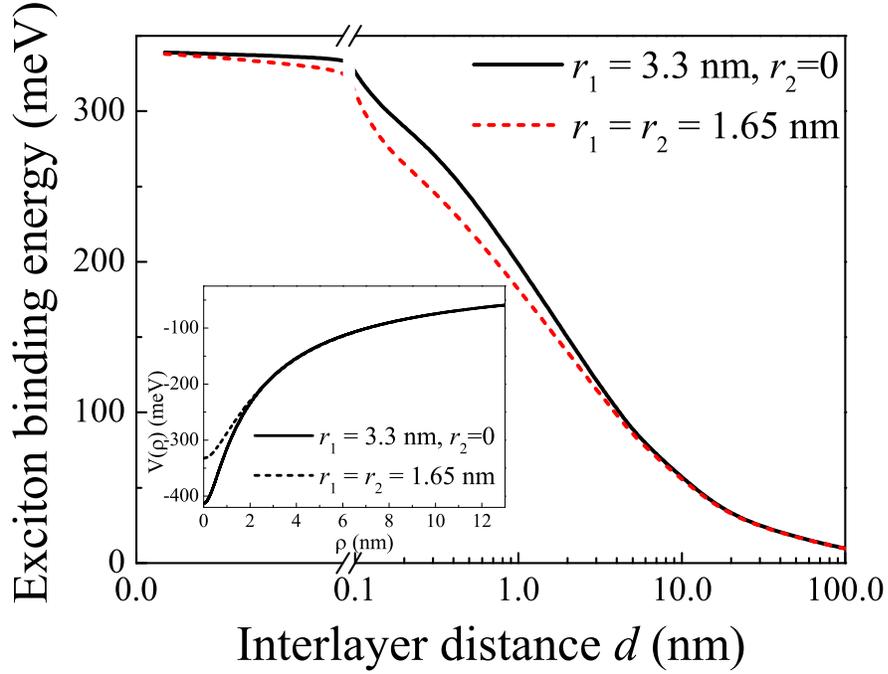


Рис. 4.6: Энергия связи экситона в зависимости от расстояния между слоями для $r_1 = 3.3$ nm и $r_2 = 0$ (сплошная кривая) и $r_1 = r_2 = 1.65$ nm (пунктирная кривая). На вставке показаны эффективные потенциалы взаимодействия $V_{ee}(\rho)$ для $r_1 = 3.3$ nm и $r_2 = 0$ (сплошная кривая) и $r_1 = r_2 = 1.65$ nm (пунктирная кривая), вычисленные для $d = 0.5$ nm. Приведенная масса экситона $\mu = 0.16m_0$.

обусловлен намерением получить более точный результат для в области значений d , при которых отличие энергий связи экситона в двух рассмотренных случаях экранировки максимально. Если зафиксировать подгоночный параметр $\delta = 0$, то рассчитанная энергия связи экситона уменьшится чуть более, чем на 10%. Учет ненулевого значения параметра β по сравнению с функцией без гауссова множителя приводит к увеличению энергии связи экситона лишь на несколько процентов. Это обстоятельство не слишком существенно для расчета основного состояния экситона, однако оказывается важным для расчета трионных состояний (разд. 4.3.3), чья энергия связи есть разница энергий экситона и изолированного электрона (нуль в рассматриваемом случае) и на порядок меньше, чем энергия связи экситона. Таким образом, требуется выбор согласованных пробных функций как для двух, так и для трехчастичного комплекса, обладающих максимальной точно-

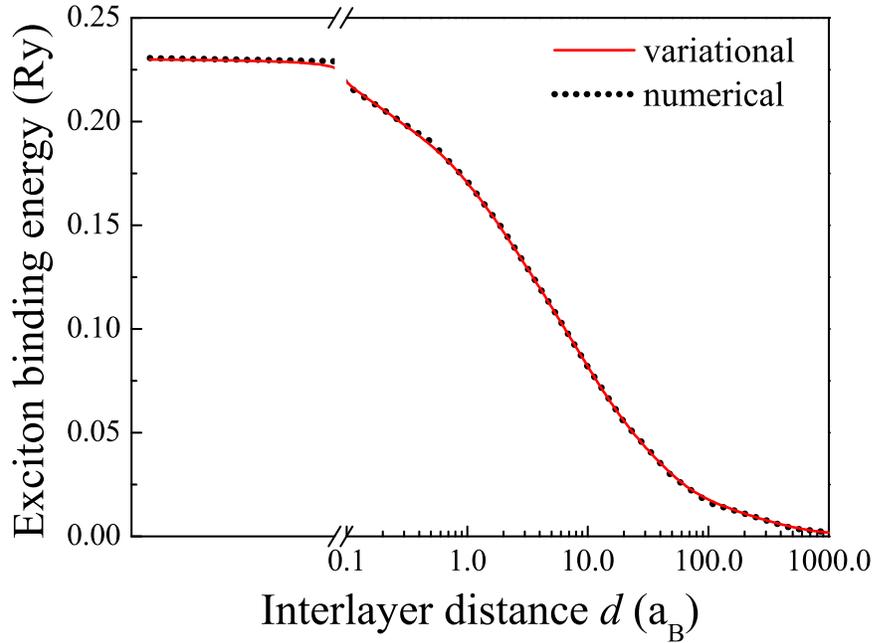


Рис. 4.7: Сравнение результатов вариационного (сплошная кривая) и численного (пунктирная кривая) расчетов энергии связи основного состояния экситона; параметры экранировки $r_1 = r_2 = 6a_B$.

стью при сохранении разумной сложности (подробности см. в гл. 1). Для проверки точности полной пробной функции на рис. 4.7 показаны зависимости энергии связи экситона от расстояния между слоями d , найденные вариационным методом с полной пробной функцией (4.15) (сплошная кривая) и в численном расчете (пунктирная кривая) для конфигурации с симметричной экранировкой ($r_1 = r_2 = 6a_B$). Видно, что на графике результаты неразличимы, что свидетельствует об очень высокой точности выбранной пробной функции (4.15).

4.3 Трионы в монослоях MX_2

В данном разделе выполнен анализ трионов – трехчастичных электрон-дырочных комплексов – в двумерных кристаллах на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов. Первые наблюдения трионов в монослоях MX_2 , выполненные в работах [319, 320], показали, что эти комплексы обладают довольно большой энер-

гией связи около 30 meV. По сравнению с классическими полупроводниковыми двумерными структурами – квантовыми ямами заряженные экситоны в монослоях дихалькогенидов переходных металлов обладают специфическими особенностями. Во-первых, трионы наблюдаются при температурах вплоть до комнатной, что связано с их значительной энергией связи [321, 322, 323]. Во-вторых, наличие двух долин \mathbf{K} и \mathbf{K}' в зонной структуре монослоев, а также спиновое расщепление зоны проводимости MX_2 обуславливает наличие нескольких различных спиновых и долинных конфигураций для носителей заряда. В частности, в X^- трионе два электрона могут находиться в одной долине, но при этом в разных спиновых состояниях, или в разных долинах, тогда их спины могут быть как параллельны, так и антипараллельны [324].

Здесь развит вариационный подход к расчету состояний заряженных экситонов в монослоях дихалькогенидов переходных металлов с учетом диэлектрического контраста. Пробные функции для свободных трионов, введенные в главе 1, апробированы для монослоев MX_2 . В рамках вариационного подхода описаны данные по энергии связи трионов в монослоях WSe_2 , полученные в экспериментах в группе Кс. Мари, Б. Урбажека и Т. Амана в университете Тулузы. Также обсуждается тонкая структура X^- -триона.

На рисунке 4.8 представлены основные экспериментальные данные из работы [A19], которые мотивировали теоретические исследования, представленные в этой главе. Исследовался образец с монослоем WSe_2 инкапсулированный в гексагональный нитрид бора. Образец был помещен в структуру с электродами, см. схему на рис. 4.8(а), приложение напряжения к которым позволяло контролировать концентрацию и тип резидентных носителей заряда в монослое. На рис. 4.8(с) показан спектр дифференциального отражения DR/R [ср. с (4.10)]. В режиме p -легирования, когда уровень Ферми находится валентной зоне, наблюдается положительно заряженный трион (X^+) при энергии 1.70 eV, т.е. на 21 meV ниже нейтрального экситона. В нейтральном режиме, когда уровень Ферми находится

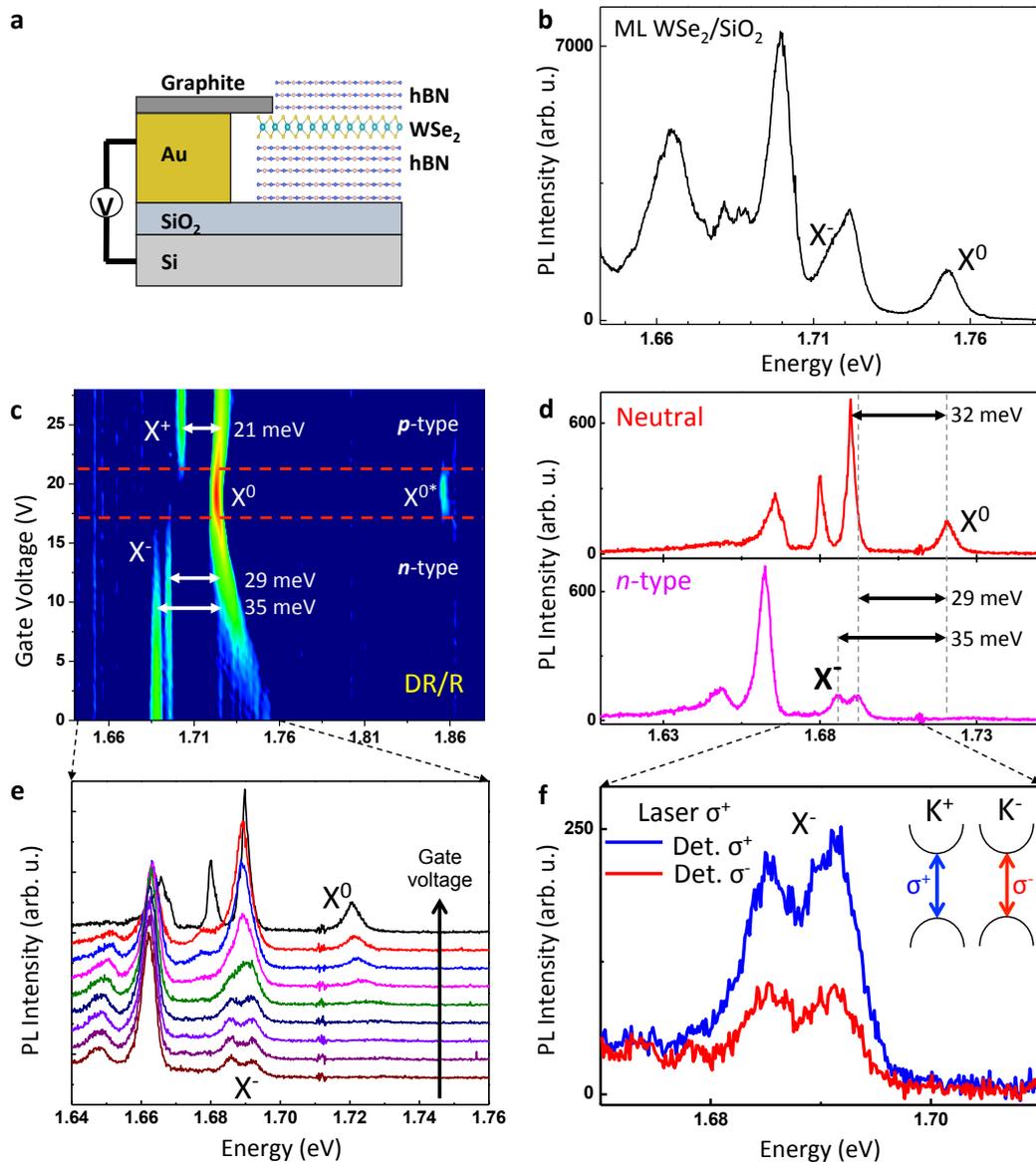


Рис. 4.8: (a) Схема ван-дер-ваальсовой гетероструктуры с контролем зарядового состояния монослоя WSe_2 . (b) Типичный спектр фотолюминесценции монослоя WSe_2 на SiO_2 без инкапсуляции. Обозначены пики триона (X^-) и нейтрального экситона (X^0). (c) Дифференциальное отражение DR/R инкапсулированного в гексагональный нитрид бора образца WSe_2 [панель (a)]. Обозначены диапазоны напряжений на затворе, соответствующие n - и p -легированию. (d) Спектры фотолюминесценции в нейтральном режиме (вверху) и при наличии резидентных электронов (внизу). (e) Эволюция фотолюминесценции при изменении режима легирования от нейтрального до n -типа. (f) Фотолюминесценция X^- триона при возбуждении σ^+ светом в двух поляризациях детектирования (σ^+ – синий и σ^- – красный).

между валентной зоной и зоной проводимости, наблюдается только нейтральный экситон (X^0) с энергией перехода 1.72 eV и его возбужденное состояния (X^{0*}) ($2s$ состояние, ср. с разд. 4.2.2). В режиме n -легирования, когда уровень Ферми находится в зоне проводимости, в спектре виден X^- -трион, причем его линия представляет собой дублет, расщепленный на 6 meV: два перехода наблюдаются на 29 и 35 meV ниже линии нейтрального экситона X^0 . Такое расщепление связано с тонкой структурой триона (см. ниже в разд. 4.3.2). Трионы также наблюдаются в спектрах фотолюминесценции (панели (d), (e), (f) рис. 4.8). В неинкапсулированном образце (рис. 4.8 (b)) линии излучения заметно шире, чем в инкапсулированном, однако линия, соответствующая X^- -триону также видна.

4.3.1 Строение и энергии связи трионов

Для расчета энергий связи X^+ и X^- -трионов требуется корректный выбор пробных функций, учитывающих специфику зонной структуры монослоев MX_2 . Вследствие значительного ($\gtrsim 100$ meV) спин-орбитального расщепления валентной зоны достаточно учесть дырочные состояния в самой верхней валентной зоне [325], т. е. в данной долине учитываются только одно возможное (основное) спиновое состояние дырки. Для электрона в общем случае необходимо учитывать оба спиновых состояния, так как расщепление зоны проводимости меньше и составляет десятки meV. Блоховская функция дырки будет характеризоваться одним квантовым числом $\tau_v = \pm 1$, обозначающим незанятое состояние в долине \mathbf{K}_\pm . Это соответствует электронному представлению, где блоховская функция дырки имеет вид $\mathcal{U}_{\tau_v}^h(\mathbf{r}_h) = \hat{\mathcal{K}}\mathcal{U}_{-\tau_v}^{v.b.}(\mathbf{r}_h)$, где $\mathcal{U}_\tau^{v.b.}(\mathbf{r})$ – функция Блоха электрона в валентной зоне, а $\hat{\mathcal{K}}$ – оператор обращения времени [1]. Уравнение $\mathcal{U}_{\tau_v}^h(\mathbf{r}_h) = \hat{\mathcal{K}}\mathcal{U}_{-\tau_v}^{v.b.}(\mathbf{r}_h)$ означает, что при инверсии времени состояние в долине \mathbf{K}_\pm переходит в состояние \mathbf{K}_\mp . В частности, пустое электронное состояние в долине \mathbf{K}_+ эквивалентно дырочному состоянию в долине \mathbf{K}_- . Блоховское состояние электрона зоны проводимости, $\mathcal{U}_{s\tau}^{c.b.}(\mathbf{r})$, нумеруется двумя квантовыми числами $s = \pm 1/2$ и $\tau = \pm 1$, где τ обозначает долину, а s различает спиновые состояния в долине. Здесь и далее радиус-вектор

записывается как $\mathbf{r} = (\boldsymbol{\rho}, z)$, где z – его нормальная компонента, а $\boldsymbol{\rho}$ – двумерный радиус-вектор в плоскости монослоя. Волновая функция трехчастичного комплекса имеет вид

$$\Psi_{i,j;k}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) = \frac{e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}}}{\sqrt{S}} \varphi(\boldsymbol{\rho}_i, \boldsymbol{\rho}_j) \mathcal{U}_{ij}^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \mathcal{U}_k^{(1)}(\mathbf{r}_k), \quad (4.17)$$

где нижние индексы i и j обозначают два тождественных носителя заряда (два электрона e_1 и e_2 в X^- -трионе или две дырки h_1 и h_2 в X^+ -трионе) k обозначает неспаренный носитель заряда. В выражении (4.17) $\mathbf{R} = [m_i(\boldsymbol{\rho}_i + \boldsymbol{\rho}_j) + m_k \boldsymbol{\rho}_k]/M$ – координата центра масс триона в плоскости монослоя, \mathbf{K} – его волновой вектор для движения как целого, S – нормировочная площадь, m_i (m_k) масса одного из тождественных (неспаренного) носителя заряда, $M = 2m_i + m_k$ – трансляционная масса триона, $\varphi(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$ – огибающая функция, описывающее относительное движение носителей заряда в трионе, причем $\boldsymbol{\rho}_{1,2} = \boldsymbol{\rho}_{i,j} - \boldsymbol{\rho}_k$, а $\mathcal{U}_{ij}^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ [$\mathcal{U}_k^{(1)}(\mathbf{r}_k)$] – блоховские функции тождественных частиц (неспаренной частицы). Согласно общим правилам квантовой статистики волновая функция (4.17) должна быть антисимметризована по отношению к перестановкам тождественных носителей заряда i и j [189]. Для выполнения требования антисимметрии по отношению к перестановкам частиц двухчастичную функцию Блоха $\mathcal{U}_{ij}^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ можно записать либо в антисимметричном, либо в симметричном виде:

$$\mathcal{U}_{ij}^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} \mathcal{U}_i(\mathbf{r}_i) \mathcal{U}_j(\mathbf{r}_j) - \mathcal{U}_i(\mathbf{r}_j) \mathcal{U}_j(\mathbf{r}_i), \\ \mathcal{U}_i(\mathbf{r}_i) \mathcal{U}_j(\mathbf{r}_j) + \mathcal{U}_i(\mathbf{r}_j) \mathcal{U}_j(\mathbf{r}_i). \end{cases} \quad (4.18)$$

Соответственно, огибающая функция относительного движения $\varphi(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$ должна быть симметрична по отношению к перестановкам $\boldsymbol{\rho}_1 \leftrightarrow \boldsymbol{\rho}_2$ для блоховской функции в верхней строке формулы (4.18) и антисимметрична для блоховской функции в нижней строке. (4.18). Здесь и далее такие трионы будем называть *симметричными* (*symmetric*) или *антисимметричными* (*antisymmetric*) в соответствии с перестановочной симметрией *огибающей* функции $\varphi(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$. Для симметричных трионов два тождественных носителя заряда не могут находиться в одной и той же

зоне, т.е. их спиновые и/или долинные индексы должны различаться. В гетероструктурах на основе полупроводников III-VI и II-VI, где отсутствуют долинные степени свободы, используются термины “синглетный” трион для симметричного состояния и “триплетный” трион для антисимметричного, обозначающие соответствующую спиновую конфигурацию пары электронов или дырок (см. гл. 1).

Напомним, что в приближении эффективной массы огибающая волновая функция триона $\varphi(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$ является собственной функцией двухчастичного гамильтониана [ср. с (1.18), (1.102)]

$$\mathcal{H}_{tr} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\Delta_1 + \Delta_2 + \frac{2\sigma}{\sigma+1} \nabla_1 \nabla_2 \right] + V(\rho_1) + V(\rho_2) - V(|\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2|), \quad (4.19)$$

где Δ_i и ∇_i – операторы Лапласа и градиента, действующие на функции $\boldsymbol{\rho}_i$, $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ – приведенная масса электрон-дырочной пары, $\sigma = m_i / m_k$ – отношение масс одного из тождественных носителей заряда к неспаренному, т.е. $\sigma = m_e / m_h$ для X^- -триона, и $\sigma = m_h / m_e$ для X^+ -триона, $V(\boldsymbol{\rho})$ – эффективная потенциальная энергия взаимодействия, которую согласно (4.9) можно представить в виде

$$V(\rho) = -\frac{\pi e^2}{2r_0 \varepsilon} \left[H_0 \left(\frac{\rho}{r_0} \right) - Y_0 \left(\frac{\rho}{r_0} \right) \right]. \quad (4.20)$$

Здесь в соответствии с [A19] использованы следующие обозначения: r_0 – эффективный радиус экранировки в монослое, ε – эффективная диэлектрическая проницаемость окружения. Для структур с монослоем эффективные потенциалы взаимодействия тождественных и разноименных носителей заряда считаются одинаковыми по величине и отличающимися только знаком. Разница может проявиться лишь в меру отношения толщины слоя к борновскому радиусу экситона и триона, это отношение в теории считается бесконечно малым.

Энергия связи триона определяется как разность энергии триона – собственной энергии гамильтониана (4.19) и энергии нейтрального экситона. Последняя была рассчитана путем минимизации энергии, определяемой гамильтонианом электрон-дырочной пары

$$\mathcal{H}_X = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\rho), \quad (4.21)$$

где ρ – расстояние между электроном и дыркой. Минимизация энергии экситона выполнялась как с водородоподобной пробной функцией (нормировочные множители, как и выше, опущены)

$$\varphi_{ex}(\rho) \propto \exp(-\alpha\rho), \quad (4.22a)$$

с единственным подгоночным параметром α , так и с более сложной функцией [ср. с (4.15)]

$$\varphi_{ex}(\rho) \propto \exp(-\alpha\rho) + \delta\rho \exp(-\beta\rho), \quad (4.22b)$$

содержащей два дополнительных подгоночных параметра δ и β .

Для расчета энергий связи *симметричных* трионов при произвольном отношении масс σ использовалась пробная функция, введенная в работах [122],[A5] [ср. с (1.103)]

$$\varphi_s(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) \propto \frac{\exp(-\rho_1/a_1 - \rho_2/a_2) + \exp(-\rho_1/a_2 - \rho_2/a_1)}{1 + d(|\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2| - R_0)^2} \times (1 + c|\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2|) \exp(-s|\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2|), \quad (4.23)$$

с подгоночными параметрами a_1 , a_2 , c , d , R_0 , и s . Сопоставление результатов расчета энергий связи триона с расчетами квантовым методом Монте-Карло из работы [326] показывает хорошую точность пробной функции (4.23) (типичная погрешность менее 5%). Также были вычислены энергии связи *антисимметричных* трионов, у которых огибающая функция является нечетной при замене $\boldsymbol{\rho}_1 \leftrightarrow \boldsymbol{\rho}_2$. Такие состояния являются возбужденными, а пробная функция должна быть ортогональной функции (4.23). Ее естественно взять в виде [124]

$$\varphi_a(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) \propto |\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2| e^{i\vartheta_{12}} \varphi_s(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2), \quad (4.24)$$

где ϑ_{12} – угол между вектором $\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2$ и какой-либо осью в плоскости, $\varphi_s(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$ введена в (4.23).

Рассчитанное соотношение энергий связи триона E_{tr}^b и экситона E_{ex}^b в зависимости от параметра экранирования r_0 в (4.20) для равных эффективных масс

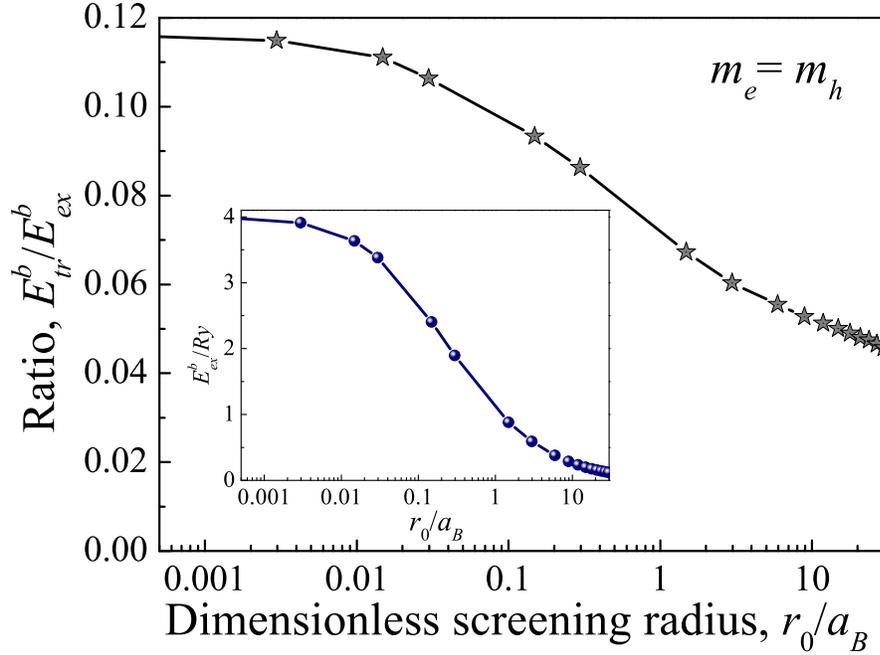


Рис. 4.9: Отношение энергии связи триона E_{tr}^b к энергии связи экситона E_{ex}^b в зависимости от радиуса экранировки r_0 при равных массах электрона и дырки. На вставке показана энергия связи экситона в зависимости от r_0 . Использовались следующие единицы энергии $Ry = \mu e^4 / (\hbar \epsilon^*)^2$ и длины $a_B = \epsilon^* \hbar / (\mu e^2)$.

электронов и дырок показано на рис. 4.9. На вставке показана энергия связи экситона E_{ex}^b . На этом рисунке использованы безразмерные единицы, соответствующие экситону в объемной системе с приведенной массой μ и диэлектрической постоянной ϵ : энергия измеряется в экситонных ридбергах $Ry = \mu e^4 / (\hbar \epsilon)^2$, а длина измеряется в экситонных боровских радиусах $a_B = \epsilon \hbar / (\mu e^2)$. Радиус экранирования $r_0 = 0$ соответствует строго двумерному пределу для кулоновской задачи, где энергия связи экситона составляет $4Ry$, а энергия связи триона составляет около $0.12E_{ex}^b$ [1, 40, 123, 122]. С увеличением эффективного радиуса экранировки r_0 потенциал взаимодействия становится более мелким, и энергии связи и экситона и триона уменьшаются. По той же причине отношение E_{tr}^b/E_{ex}^b также уменьшается.

Рисунок 4.10 показывает результаты расчета энергий связи трионов (основная панель) и энергии связи экситонов (вставка) в зависимости от радиуса экранировки r_0 в размерных единицах. Здесь для простоты было положено $\epsilon^* = 1$, при-

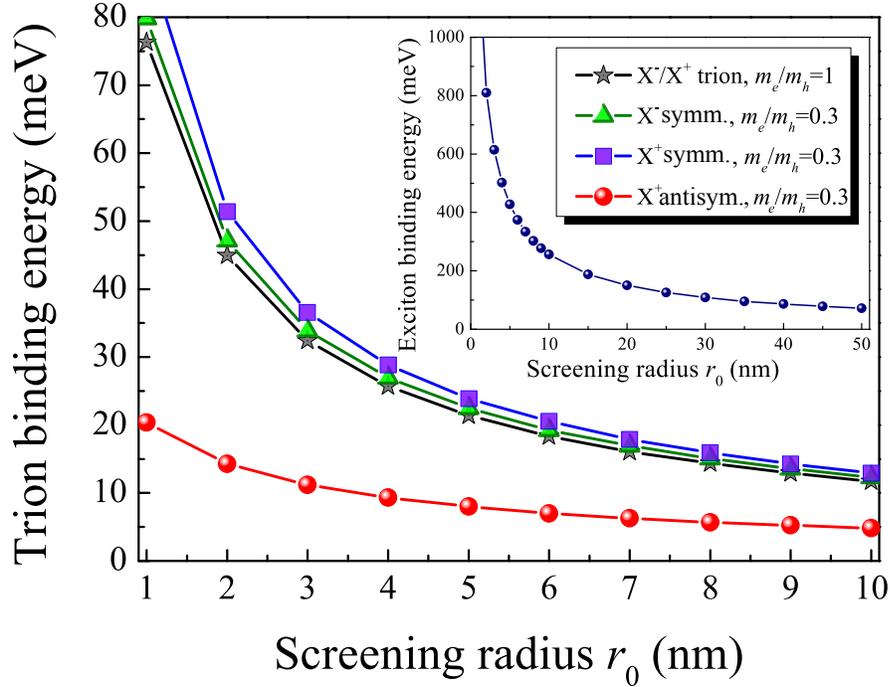


Рис. 4.10: Энергии связи X^+ и X^- -трионов для различных значений отношения масс и фиксированной приведенной массы, $\mu = 0.16m_0$, $\varepsilon^* = 1$. На вставке показана энергия связи экситона в зависимости от r_0 в размерных единицах

веденная масса взята $\mu = 0.16m_0$ и рассмотрено два соотношения эффективных масс $m_e/m_h = 1$ и $m_e/m_h = 0.3$. Получены энергии связи экситонов в диапазоне $\sim 100 \dots 1000$ meV и энергии связи трионов порядка $10 \dots 100$ meV в согласии с литературными данными [301, 303, 326]. Важно отметить, что энергии связи обоих типов трионов не слишком чувствительны к отношению эффективных масс m_e/m_h в диапазоне, использованном в расчете и соответствующем эксперименту. На рисунке также показана энергия связи антисимметричного X^+ -триона (красные точки), рассчитанная для отношения массы электрона к дырке $m_e/m_h = 0.3$. При $m_e/m_h = 1$ антисимметричный трион оказывается не стабильным относительно распада на экситон и свободный носитель заряда.

Из рис. 4.10 видно, что в предложенной модели трион с двумя более тяжелыми носителями (в нашем случае X^+ -трион) имеет бóльшую энергию связи. Чтобы изучить этот эффект более подробно, были выполнены расчеты для фиксирован-

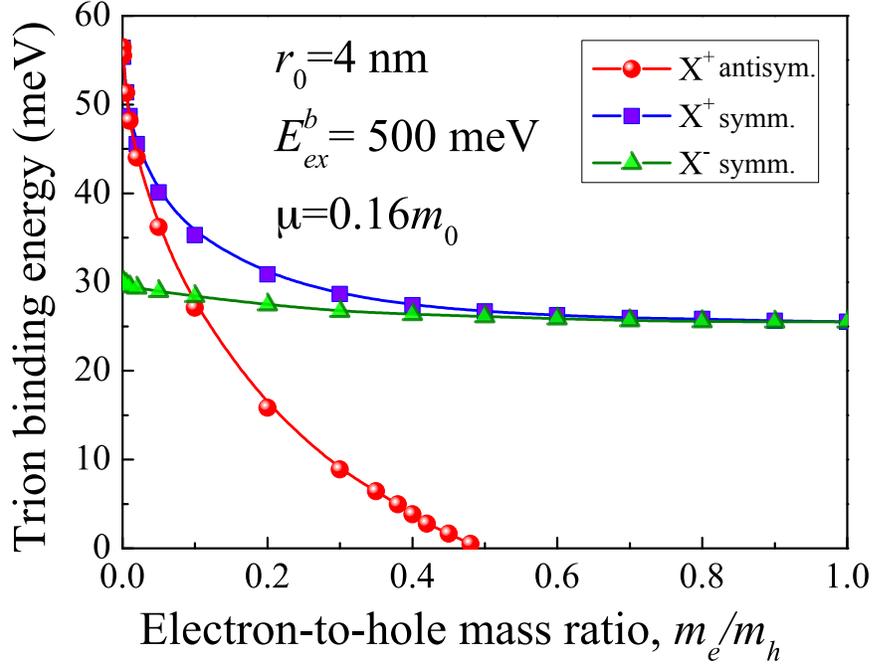


Рис. 4.11: Энергии связи трионов в зависимости от отношения эффективных масс σ при фиксированной приведенной массе $\mu = 0.16 m_0$ и радиусе экранировки $r_0 = 40 \text{ \AA}$, $\epsilon^* = 1$.

ных значений $\mu = 0.16m_0$ и $r_0 = 40 \text{ \AA}$, что соответствует энергии связи экситона для WSe_2 , равной 500 meV. Результаты расчетов сведены на рис. 4.11. При $\sigma = m_e/m_h \rightarrow 1$ энергии связи X^+ и X^- -трионов становятся равными, при уменьшении отношения масс $\sigma \rightarrow 0$ энергии связи трионов увеличивается. Хотя увеличение энергии связи триона X^- мало, увеличение энергии связи X^+ -триона весьма значительно. Более того, при некотором критическом массовом соотношении $\sigma_{cr} \approx 0.5$ антисимметричное состояние X^+ -триона с огибающей (4.24) становится стабильным. Его энергия связи монотонно возрастает с уменьшением m_e/m_h . При малом отношении эффективных масс электрона и дырки $\sigma \lesssim 0.1$ энергия связи антисимметричного состояния X^+ -триона превышает энергию связи X^- -триона и приближается к энергии связи симметричного X^+ -триона при $\sigma \rightarrow 0$. Подобный эффект для одномерных систем обсуждался в разделе 1.2.2.

Кратко обсудим соответствие результатов расчетов с данными эксперимента.

Используя эффективные массы $m_e = 0.28 m_0$, $m_h = 0.36 m_0$ [291], $\varepsilon = 1$ и параметр экранировки $r_0 = 40 \text{ \AA}$ мы получаем энергию связи нейтрального экситона $E_{ex}^b = 500 \text{ meV}$, согласующуюся с экспериментами [301, 327, 328], и энергии связи X^+ и X^- трионов $E_{X^-}^b \approx E_{X^+}^b = (26 \pm 1) \text{ meV}$, см. рис. 4.11. Эта величина находится в разумном согласии с экспериментальными данными, представленными на рис. 4.8(с): немного больше, чем измеренная энергия связи X^+ -триона (21 meV) и немного меньше, чем “средняя” (по положению центра масс дублета) энергия связи X^- -триона (32 meV). Анализ показывает, экспериментальные данные можно разумно описать и при значении $\varepsilon \neq 1$, например, при $\varepsilon = 3.3$ и $\mu = 0.16 m_0$, $r_0 = 6.4 \text{ \AA}$ можно получить $E_{ex}^b = 283 \text{ meV}$ и $E_{tr}^b = 20.6 \text{ meV}$. Необходимо также отметить, что эксперимент также показывает, что энергия связи X^+ -триона меньше, чем энергия связи X^- -триона. В литературе преобладает точка зрения, что в монослоях MX_2 $m_e \lesssim m_h$ [291], при таком соотношении масс соотношение между энергиями связи трионов должно быть обратное, см. рис. 4.11. При этом, даже, если утверждать, что в WSe_2 $m_e > m_h$, то для разницы в 10 meV между энергиями связи X^+ и X^- -трионов отношение эффективных масс электрона и дырки σ должно быть нереалистично большим для исследуемой системы: $\sigma > 10$. Необходимо отметить, что новые данные по магнитотранспорту [329, 330] и анализ роли поляронных эффектов в монослоях MX_2 [331], позволяют говорить, что эффективная масса электрона может быть больше, чем масса дырки. Однако получающееся отношение масс $m_e/m_h \lesssim 2$ все равно не может объяснить разность энергий связи X^- и X^+ -трионов, наблюдающуюся в эксперименте. Кроме того, различие эффективных масс также не может описать расщепление линии X^- триона. Эти экспериментальные факты находят объяснение в модели, учитывающей тонкую структуру трионных состояний и короткодействующие вклады в электрон-электронное и электрон-дырочное обменное взаимодействие.

4.3.2 Тонкая структура энергетического спектра трионов

В данном разделе выполнен анализ специфики тонкой структуры энергетического спектра и состояний X^+ и X^- трионов в монослоях дихалькогенидов переходных металлов, обусловленной наличием как спиновых, так и долинных степеней свободы носителей заряда. Как отмечалось выше, благодаря существенному ~ 100 meV спиновому расщеплению валентной зоны достаточно учесть дырки только в верхних спиновых подзонах валентной зоны. Для электрона необходимо учитывать обе спиновые подзоны зоны проводимости.

Таблица 4.1: Состояния симметричного X^+ -триона. Указаны неприводимые представления точечной группы D_{3h} описывающей симметрию монослоя MX_2 в обозначениях книги [149].

#	Состояние		Неприводимое представление группы D_{3h}	
	s_e	τ_e		
1	+1/2	+1	Γ_9	σ^+
2	-1/2	-1		σ^-
3	-1/2	+1	Γ_8	запрещенные
4	+1/2	-1		

Тонкая структура состояний *симметричного* X^+ триона весьма проста: в согласии с общей формулой (4.18) две дырки формируют спиновый и долинный синглет, а электрон находится в одном из четырех возможных состояний зоны проводимости. Результаты симметричного анализа этих состояний приведены в таблице 4.1, там же сформулированы правила отбора при оптических переходах. Из четверки состояний X^+ -триона два являются темными, а два оптически активны в циркулярных поляризациях σ^\pm при нормальном падении излучения по отношению к монослою. Примеры светлого и темного состояний X^+ -триона приведены на рис. (4.12). Таким образом, при заданной поляризации имеется лишь одно оптически активное состояние положительно заряженного экситона, что соответствует экспериментальным данным, рис. 4.8(с).

Для отрицательно заряженных трионов ситуация оказывается значительно бо-

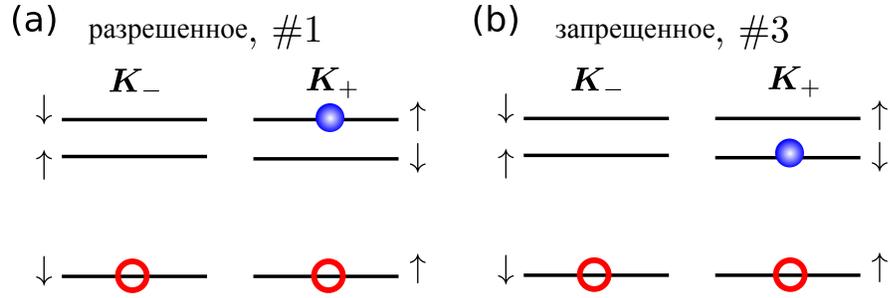


Рис. 4.12: Схематическая иллюстрация симметричных X^+ трионов: (a) состояние # 1 и (b) состояние # 3 в таблице 4.1. Синие кружки обозначают зону проводимости электрона, а незакрашенные кружки – незаполненные состояния в валентной зоне. Порядок подзон проводимости соответствует WSe_2 .

лее богатой, так как электрон может занимать как нижнюю так и верхнюю спиновую подзону зоны проводимости. Анализ показывает, что существует 12 состояний X^- -триона, см. таб. 4.2, отличающихся спиновыми/долинными конфигурациями носителей заряда. Из 12 симметричных X^- -трионов три вырожденных по Крамерсу пары состояний оптически активны: (1, 2), (3, 4) и (7, 8). Однако, разрешенные состояния X^- -триона 1 и 2 содержат электроны из верхних подзон проводимости, см. рис. 4.13. Расщепление зоны проводимости для монослоя WSe_2 составляет около 40 meV [332]. В результате при экспериментально достижимых концентрациях электронов, $n_e \lesssim 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, и при криогенных температурах заселенность возбужденных подзон незначительна. Следовательно, трионные состояния # 1 и 2 не активны в поглощении/отражении, поскольку они не могут быть сформированы в процессе однофотонного поглощения. Следовательно, в условиях эксперимента только две пары состояний (3, 4) и (7, 8), рис. 4.13(b, c), ответственны за два наблюдаемые линии в отражении, рис. 4.8(c). Этот же дублет проявляется и в спектрах люминесценции. В соответствии с симметричным анализом пары светлых (1, 2) и темных (11, 12) состояний образуют два эквивалентных базиса одного и того же неприводимого представления Γ_7 и поэтому могут смешиваться, однако такое смешивание не проявляется в эксперименте. С точки зрения теории смешивание не значительно из-за большого спинового расщепления зоны проводимости.

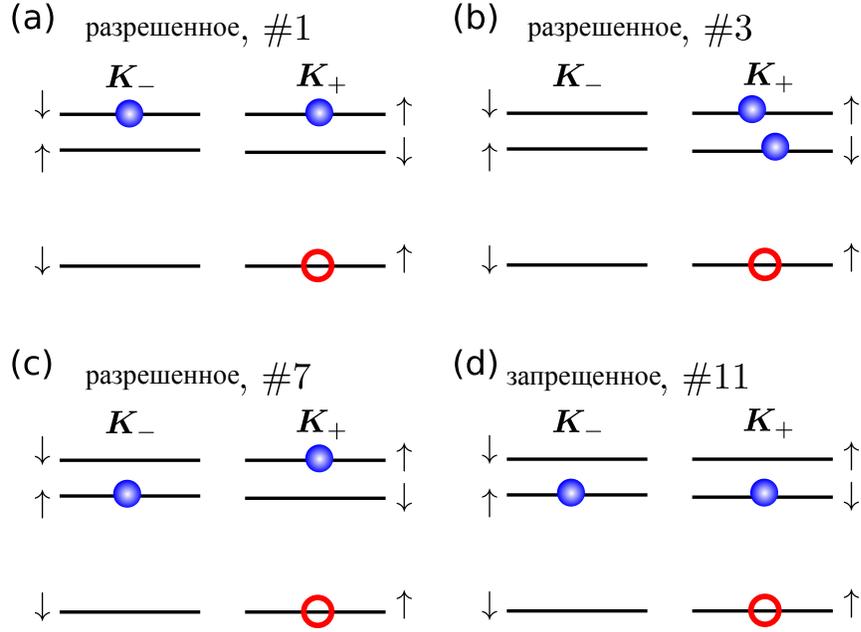


Рис. 4.13: Примеры симметричных X^- трионов: (a-c) оптически-активные состояния, (d) темное состояние (см. таблицу 4.2). Синие кружки обозначают зону проводимости электрона, а незакрашенные кружки – незаполненные состояния в валентной зоне. Порядок подзон проводимости соответствует WSe_2 .

В рамках метода эффективной массы две пары X^- -трионов (3, 4) и (7, 8) имеют одну и ту же энергию. Расщепление между ними, а также различие в энергиях связи X^+ и X^- трионов может быть обусловлено короткодействующими вкладами в межэлектронное обменное взаимодействие [333]. Подобно обменному взаимодействию электрона и дырки, короткодействующий вклад в электрон-электронный обмен формируется за счет различия двухэлектронных блоховских функций $\mathcal{U}_{ij}^{(2)}$ на масштабе элементарной ячейки. В рамках метода эффективного гамильтониана короткодействующий вклад в электрон-электронное взаимодействие имеет вид

$$\hat{V}^{ee}(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2) = \delta(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2) \mathcal{H}_{\text{exch}}^{ee}, \quad (4.25)$$

где матричные элементы оператора $\langle s'_1, \tau'_1; s'_2, \tau'_2 | \mathcal{H}_{\text{exch}}^{ee} | s_1, \tau_1; s_2, \tau_2 \rangle$ выражаются че-

Таблица 4.2: Состояния симметричного X^- -триона. В скобках указаны неприводимые представления, по которым преобразуются двухэлектронные состояния в группе симметрии монослоя D_{3h} . Верхний индекс различает эквивалентные неприводимые представления. Дырочное состояние преобразуется по двумерному представлению Γ_7 .

#	Состояние					Представление группы D_{3h}	
	s_1	τ_1	s_2	τ_2	τ_v		
1	+1/2	+1	-1/2	-1	+1	$\Gamma_7 (\mathcal{U}_{ij}^{(2)} : \Gamma_1^{(1)})$	σ^+
2	+1/2	+1	-1/2	-1	-1		σ^-
3	+1/2	+1	-1/2	+1	+1	$\Gamma_9 (\mathcal{U}_{ij}^{(2)} : \Gamma_6)$	σ^+
4	+1/2	-1	-1/2	-1	-1		σ^-
5	+1/2	+1	-1/2	+1	-1	$\Gamma_8 (\mathcal{U}_{ij}^{(2)} : \Gamma_6)$	запрещенные
6	+1/2	-1	-1/2	-1	+1		
7	+1/2	-1	+1/2	+1	+1	$\Gamma_7 (\mathcal{U}_{ij}^{(2)} : \Gamma_5)$	σ^+
8	-1/2	-1	-1/2	+1	-1		σ^-
9	+1/2	-1	+1/2	+1	-1	$\Gamma_9 (\mathcal{U}_{ij}^{(2)} : \Gamma_5)$	запрещенные
10	-1/2	-1	-1/2	+1	+1		
11	-1/2	+1	+1/2	-1	+1	$\Gamma_7 (\mathcal{U}_{ij}^{(2)} : \Gamma_1^{(2)})$	запрещенные
12	-1/2	+1	+1/2	-1	-1		

рез блоховские функции согласно:

$$\langle s'_1, \tau'_1; s'_2, \tau'_2 | \mathcal{H}_{\text{exch}}^{ee} | s_1, \tau_1; s_2, \tau_2 \rangle = - \int d\mathbf{r}_{e1} d\mathbf{r}_{e2} U(\mathbf{r}_{e1} - \mathbf{r}_{e2}) [\mathcal{U}_{s'_1 \tau'_1}(\mathbf{r}_{e2}) \mathcal{U}_{s'_2 \tau'_2}(\mathbf{r}_{e1})]^* \mathcal{U}_{s_1 \tau_1}(\mathbf{r}_{e1}) \mathcal{U}_{s_2 \tau_2}(\mathbf{r}_{e2}). \quad (4.26)$$

Здесь $\mathcal{U}_{s\tau}(\mathbf{r})$ – функция Блоха электрона, нормированная на площадь элементарной ячейки s_0 :

$$\int_{v_0} d\mathbf{r} |\mathcal{U}_{s\tau}(\mathbf{r})|^2 = s_0,$$

и $U(\mathbf{r}_{e1} - \mathbf{r}_{e2})$ – потенциальная энергия межэлектронного взаимодействия, которую можно приближенно описывать законом Кулона, см. подробности в [334, 335, 336].

Интегрирование в (4.26) ведется по объему элементарной ячейки v_0 , \mathbf{r}_{e1} , \mathbf{r}_{e2} – трехмерные радиус-векторы. В базисе состояний пары электронов, преобразующихся по неприводимым представлениям $\nu = \Gamma_1^{(1)}, \Gamma_1^{(2)}, \Gamma_5, \Gamma_6$, см. таб. 4.2,

$$\mathcal{H}_{\text{exch}}^{ee} = a_0^2 \begin{pmatrix} E_{\Gamma_1^{(1)}} & V_{\Gamma_1} & 0 & 0 \\ V_{\Gamma_1} & E_{\Gamma_1^{(2)}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{\Gamma_5} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{\Gamma_6} \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

где a_0 – постоянная решетки, а параметры E_ν , V_{Γ_1} имеют размерность энергии и по порядку величины соответствуют атомной энергии $1 \dots 10$ eV.

Для оценки эффекта будем считать, что эффективные массы электрона m_e и дырки m_h близки по величине. В таком случае для описания трионов достаточно использовать упрощенную волновую функцию (см. главу 1)

$$\varphi_s(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) \propto \exp\left(-\frac{\rho_1}{a_1} - \frac{\rho_2}{a_2}\right) + \exp\left(-\frac{\rho_1}{a_2} - \frac{\rho_2}{a_1}\right), \quad (4.28)$$

с двумя подгоночными параметрами a_1 и a_2 . Погрешность такой функции составляет около 10%. Расчет короткодействующего вклада обменного взаимодействия в энергию триона по формулам (4.25) и (4.27) с пробной функцией (4.28) дает

$$\delta E_{sr} = \frac{1}{2\pi} \frac{E_\nu a_0^2}{2 \left(\frac{a_1 a_2}{a_1 + a_2}\right)^2 + \frac{(a_1 + a_2)^2}{8}} = \frac{E_\nu a_0^2}{2\pi a_{\text{eff}}^2}, \quad (4.29)$$

где

$$a_{\text{eff}} = \sqrt{2 \left(\frac{a_1 a_2}{a_1 + a_2}\right)^2 + \frac{(a_1 + a_2)^2}{8}}.$$

Для постоянной решетки $a_0 = 3 \text{ \AA}$ оценки показывают, что разумная разница в $|E_{\Gamma_5} - E_{\Gamma_6}| \approx 2$ eV достаточна для того, чтобы получить разность энергий связи трионов на ~ 6 meV в соответствии с наблюдаемым в эксперименте расщеплением линий X^- -триона. Подобный порядок величины имеют также вклады в тонкую структуру трионов от электрон-дырочного обмена. Аналогично, короткодействующие вклады могут привести к различиям энергий X^+ и X^- -трионов. Расчет показывает, что учет короткодействующих вкладов может также привести к некоторому различию сил осцилляторов верхней и нижней линий дублета X^- -триона, наблюдаемому в эксперименте, см. рис. 4.8(с). Таким образом, приведенный выше анализ позволяет связать тонкую структуру X^- триона и различие энергий связи X^+ и X^- -трионов с короткодействующими вкладами в обменное взаимодействие между электронами. Для монослоев MoX_2 , в которых спиновое расщепление зоны проводимости имеет противоположный знак при низких температурах тонкой структуры X^- триона не ожидается.

4.3.3 Трионы в двухслойных ван-дер-ваальсовых гетероструктурах

В этом разделе будут приведены результаты расчетов энергии связи трионов в двухслойных ван-дер-ваальсовых гетероструктурах. Здесь рассмотрен случай, где два одноименных носителя заряда находятся в одном слое, а третий – во втором слое. Такая ситуация естественным образом реализуется, например, в структурах с затвором, где приложенное электрическое поле приводит к пространственному разделению электронов и дырок. Принципиально возможны и другие ситуации: например, экситон в одном слое, а дополнительный носитель заряда – в другом, или все носители заряда, составляющие трион находятся в одном слое. Эти задачи требуют отдельного рассмотрения, которое выходит за рамки данной работы.

Гамильтониан, описывающий относительное движение носителей заряда в трионе (движение центра масс триона исключаем, считая его свободным):

$$\hat{H}_{tr} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\Delta_1 + \Delta_2 + \frac{2\sigma}{\sigma+1} \nabla_1 \nabla_2 \right] + V_{eh}(\rho_1) + V_{eh}(\rho_2) + V_{ee}(|\rho_1 - \rho_2|), \quad (4.30)$$

где $\rho_{1,2}$ – координаты идентичных носителей заряда относительно носителя заряда противоположного знака, Δ_i и ∇_i – операторы Лапласа и градиента, действующие на функции ρ_i , $\sigma = m_i/m_k$ – отношение эффективных масс парных носителей заряда к эффективной массе одиночного. Потенциальная энергия электрон-дырочного взаимодействия дается (4.12), а взаимодействие идентичных носителей описывается аналогичным выражением с заменой $\tilde{\varphi}_2$ на $\tilde{\varphi}_1$, а также знака:

$$V_{ee}(\rho) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dq \tilde{\varphi}_1 J_0(q\rho). \quad (4.31)$$

Отличие приведенного выражения от гамильтониана (4.19) заключается в различии потенциальных энергий взаимодействия разноименных и тождественных носителей заряда.

Поскольку эффективные массы электронов и дырок в монослоях дихалькегенидов переходных металлов близки друг к другу, то для простоты и без существенного ограничения общности рассмотрим X^- -трион (два электрона и неспаренная

дырка) при отношении эффективных масс электрона и дырки $\sigma = 1$. Рассмотрено основное состояние триона, полная волновая функция которого антисимметрична относительно перестановки двух электронов. Здесь антисимметричной будет блоховская функция двух электронов (с учетом спиновых и долинных индексов), в то время как координатная часть огибающей волновой функции будет симметричной по отношению к перестановкам тождественных частиц, в рассматриваемом частном случае – электронов. Анализ тонкой структуры энергетического спектра трионов может быть выполнен методами, развитыми в выше в разд. 4.3.2.

Близость эффективных масс носителей заряда в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов позволяет упростить форму пробной функции для трионов. В частности, использовать волновую функцию в универсальной форме, позволяющей описать весь диапазон изменения отношения масс электрона и дырки для обоих типов трионов нет необходимости, и достаточно ограничиться функцией с 9 подгоночными параметрами в виде

$$\Psi_{tr} = [\Psi_{ex}(\rho_1, \alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \delta_1)\Psi_{ex}(\rho_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_2, \delta_2) + \Psi_{ex}(\rho_2, \alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \delta_1)\Psi_{ex}(\rho_1, \alpha_3, \alpha_4, \beta_2, \delta_2)] \times (1 + c|\rho_1 - \rho_2|), \quad (4.32)$$

где Ψ_{ex} – пробная волновая функция экситона в двухслойной системе, введенная в уравнении (4.15), а $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_1, \beta_2, \delta_1, \delta_2, c$ – подгоночные параметры. Форма предложенной пробной функции имеет ясное обоснование: множитель в квадратных скобках есть симметризованное произведение экситонных волновых функций (4.15), описывающих относительное движение электрона и дырки. Параметры в этих функциях свободные и позволяют “подстроить” экситонные состояния с учетом межэлектронного отталкивания. Множитель $(1 + c|\rho_1 - \rho_2|)$ учитывает поляризационные эффекты. Он играет существенную роль при ненулевом расстоянии между слоями. Указанная волновая функция хорошо зарекомендовала себя как для описания трионов в структурах с пренебрежимо малым диэлектрическим контрастом (см. главу 1), так и для монослоев дихалькогенидов переходных металлов (см. разд. 4.3.1), где эффективные массы электрона и дырки не сильно

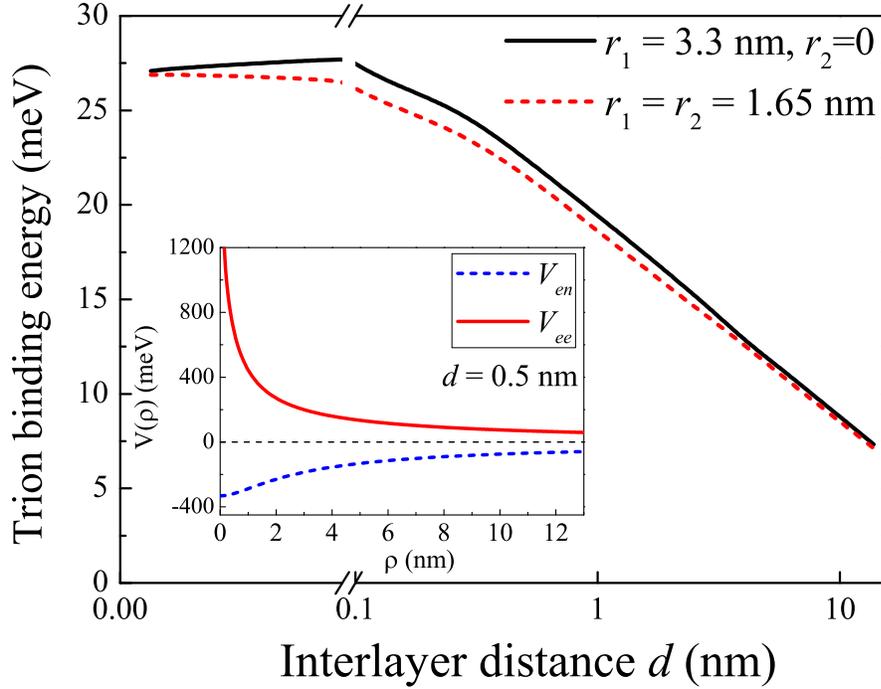


Рис. 4.14: Энергия связи триона в зависимости от расстояния между слоями для $r_1 = 3.3$ nm и $r_2 = 0$ (сплошная кривая) и $r_1 = r_2 = 1.65$ nm (пунктирная кривая). На вставке показаны эффективные потенциалы взаимодействия $V_{ee}(\rho)$ (сплошная кривая) и $V_{eh}(\rho)$ (пунктирная кривая), вычисленные для $r_1 = r_2 = 1.65$ nm и $d = 0.5$ nm. Приведенная масса $\mu = 0.16m_0$, $m_e = m_h$.

отличаются друг от друга (и составляют примерно $0.5m_0$, см. подробнее в [331]).

Результаты расчета энергии связи триона показаны на рис. 4.14. Как и для экситона (см. разд. (4.2.3)) рассмотрены две ситуации: (а) оба слоя имеют одинаковые эффективные радиусы экранировки $r_1 = r_2 = 1.65$ nm; и (б) электроны находятся в слое с $r_1 = 3.3$ nm, дырка – в слое с $r_2 = 0$. Отметим, что в противоположном случае, $r_1 = 0, r_2 \neq 0$, т.е. когда электроны находятся в слое без экранировки, энергия связи триона становится нулевой при конечных значениях r_2 за счет сильного, по сравнению с притяжением к дыркам, кулоновского отталкивания между электронами. Даже при $r_1 = r_2$ отталкивание между электронами оказывается сильнее их притяжения к дырке, см. вставку к рис. 4.14, за счет пространственного разделения между носителями заряда разных знаков. Из рис. 4.14

видно, что энергия связи триона, также как и энергия связи экситона, быстро убывает с ростом d . Энергия связи триона в случае (а) оказывается больше чем в случае (b) за счет более сильного кулоновского взаимодействия, так же как и для энергии связи экситона. Существенным обстоятельством является то, что даже при больших ~ 10 nm расстояниях между слоями энергия связи триона составляет единицы мэВ и может быть надежно измерена в экспериментах.

Необходимо отметить, что в отличие от энергии связи экситона, которая при большом расстоянии между слоями d имеет асимптотику (4.14) и всегда положительна, энергия связи триона обращается в нуль при некотором критической величине расстояния между слоями $d \sim 30a_B$ [134]. Это связано с тем, что электроны находятся в одном слое и отталкивание между ними начиная с определенного значения d не может быть скомпенсировано притяжением к дырке, находящейся в удаленном слое.

4.4 Оптические спектры ван-дер-ваальсовых гетероструктур и эффект Парселла на экситонах

Вернемся теперь к анализу оптических спектров ван-дер-ваальсовых гетероструктур с монослоями дихалькогенидов переходных металлов, представленных на рис. 4.3. Как отмечалось выше в разделе 4.2.2, интенсивности пиков, соответствующих возбужденным состояниям экситона ($2s$, $3s$) значительно превосходят величины, ожидаемые из расчета сил осциллятора. В этом разделе, написанном по результатам работ [A17], [A20], дается объяснение этому неожиданному результату, основанное на учете эффектов многократного переотражения света от границ слоев в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах. Также демонстрируется возможность управления радиационным временем жизни экситона за счет эффекта Парселла.

4.4.1 Метод матриц переноса для расчета оптического отклика монослоев MX_2

Для расчета оптических спектров развит метод матриц переноса [1, 337]. Амплитудный коэффициент отражения света от монослоя в спектральной области экситонных резонансов записывается в виде

$$r(\hbar\omega) = \sum_n \frac{i\Gamma_{0,A:ns}}{E_{A:ns} - \hbar\omega - i(\Gamma_{0,A:ns} + \Gamma_A)} + \frac{i\Gamma_{0,B:1s}}{E_{B:1s} - \hbar\omega - i(\Gamma_{0,B:1s} + \Gamma_B)}. \quad (4.33)$$

Здесь $E_{A:ns}$ – энергии экситонных резонансов серии А, $E_{B:1s}$ – энергия основного состояния экситона В (напомним, что этот экситон сформирован носителями заряда в спин-орбитально отщепленных зонах, учет возбужденных состояний серии В легко выполнить, но он не требуется для сопоставления с экспериментом), Γ_0 и Γ с соответствующими нижними индексами – радиационные и нерадиационные затухания соответствующих экситонов. Считается, что расщепления между экситонными состояниями значительно превышают радиационное затухание экситонов, это позволяет рассматривать экситонные состояния в сумме (4.33) независимо друг от друга. Матрицы переноса через отдельные элементы системы записываются стандартным образом

для *монослоя* MX_2 :

$$\hat{T}_{ML} = \frac{1}{t} \begin{pmatrix} t^2 - r^2 & r \\ -r & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.34a)$$

где r – коэффициент отражения в виде (4.33), $t = 1 + r$ – амплитудный коэффициент пропускания через монослой;

для *однородного слоя*:

$$\hat{T}_{ML} = \begin{pmatrix} \exp(iqL) & 0 \\ 0 & \exp(-iqL) \end{pmatrix}, \quad (4.34b)$$

где $q = \omega n/c$, n – показатель преломления слоя, L – его толщина ;

для *интерфейса между слоями*:

$$\hat{T}_{n_1 \rightarrow n_2} = \frac{1}{2n_1} \begin{pmatrix} n_1 + n_2 & n_2 - n_1 \\ n_2 - n_1 & n_2 + n_1 \end{pmatrix}, \quad (4.34c)$$

где предполагается, что свет падает из слоя с показателем преломления n_1 в слой с показателем преломления n_2 .

Матрица переноса для структуры, исследованной в [A17] (рис. 4.3(b)), записывается в следующем виде

$$\hat{T}_{tot} = \hat{T}_{\text{SiO}_2 \rightarrow \text{Si}} \hat{T}_{\text{SiO}_2} \hat{T}_{\text{hBN} \rightarrow \text{SiO}_2} \hat{T}'_{\text{hBN}} T_{\text{air} \rightarrow \text{hBN}} \hat{T}_{\text{MoS}_2} \hat{T}_{\text{air} \rightarrow \text{hBN}}^{-1} \hat{T}_{\text{hBN}} \hat{T}_{\text{air} \rightarrow \text{hBN}}. \quad (4.35)$$

Здесь штрих сверху обозначает матрицу переноса через нижний слой гексагонального нитрида бора. Учет множителей $\hat{T}_{\text{air} \rightarrow \text{hBN}}$ и $\hat{T}_{\text{air} \rightarrow \text{hBN}}^{-1}$, охватывающих матрицу переноса через монослой \hat{T}_{MoS_2} , связано с тем, что мы относим экситонные параметры к излучению в вакуум (а не в hBN). Толщина кремниевой значительно превышает длину поглощения света, поэтому в расчете толщина подложки полагается бесконечной. В методе матриц переноса имеется связь между коэффициентами отражения, r_{tot} , и пропускания, t_{tot} , через всю структуру:

$$\hat{T}_{tot} \begin{pmatrix} 1 \\ r_{tot} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{tot} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

Отметим, что абсорбанс монослоя (доля поглощенной энергии) выражается простым соотношением

$$\mathcal{A} = 1 - |r_{tot}|^2 - |t_{tot}|^2/n_{\text{Si}}. \quad (4.37)$$

Рассчитанные спектры дифференциального отражения (ср. с (4.10)) представлены на рис. 4.3(c) сплошными кривыми. Спектр при толщинах слоев, соответствующих параметрам образца, полученным методом атомно-силовой микроскопии, хорошо описывают экспериментальные данные. Это позволяет сделать вывод о том, что эффекты распространения света в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах играют важную роль в формировании спектров. Также из рисунка видно, что небольшие изменения в толщинах слоев, составляющих структуру, может приводить к существенному изменению вида спектра отражения. Это обстоятельство открывает широкие возможности управления спонтанным излучением экситонов. Ниже будут теоретически описаны результаты экспериментов по управлению тем-

пом излучательной рекомбинации экситонов в монослоях дихалькогенидов переходных металлов и предложено их модельное описание.

4.4.2 Эффект Парселла в ван-дер-ваальсовых гетроструктурах

Одной из важнейших задач современной оптики является создание источников излучения с заданными оптическими характеристиками, включая возможность управления темпом излучения. Управление процессом спонтанного излучения в структурах с резонаторами на основе эффекта Парселла [305] было реализовано в ряде атомных и твердотельных систем [338, 339, 340, 341, 342]. Как было показано выше, темп радиационного распада экситона в монослоях MX_2 сравним и даже превышает темп их нерадиационного распада, а спектры отражения крайне чувствительны к диэлектрическому окружению монослоя, поэтому структуры на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов обладают большими перспективами для контроля радиационного времени жизни экситонов.

На рисунке 4.15 представлены данные об образцах, исследованных в экспериментах, инициированных в Университете Тулузы автором диссертации, см. подробности в работе [A20]. Исследовались образцы с монослоями MoSe_2 MLs, инкапсулированными в гексагональный нитрид бора на подложке, состоящей из 80 nm слоя SiO_2 на кремнии. Исследовались различные образцы: в образцах I и II толщина нижнего слоя hBN составляла $d=180$ и 273 nm, соответственно, что отвечает положению монослоя в пучности и узле электромагнитного поля в такой структуре, соответственно. В образце III на подложке были террасы и ступени, благодаря чему толщина слоя нитрида бора менялась и принимала значения $d = 205, 240$ и 255 nm в зонах A, B и C, соответственно, рис. 4.15(b). Толщина верхнего слоя hBN была невелика – в пределах от 7 до 9 nm, этот слой не играл существенной роли. Спектры отражения структуры без монослоя MoSe_2 , рассчитанные методом матриц переноса, изложенным выше, рис. 4.15(c), хорошо согласуются со измеренными спектрами отражения, рис. 4.15(b).

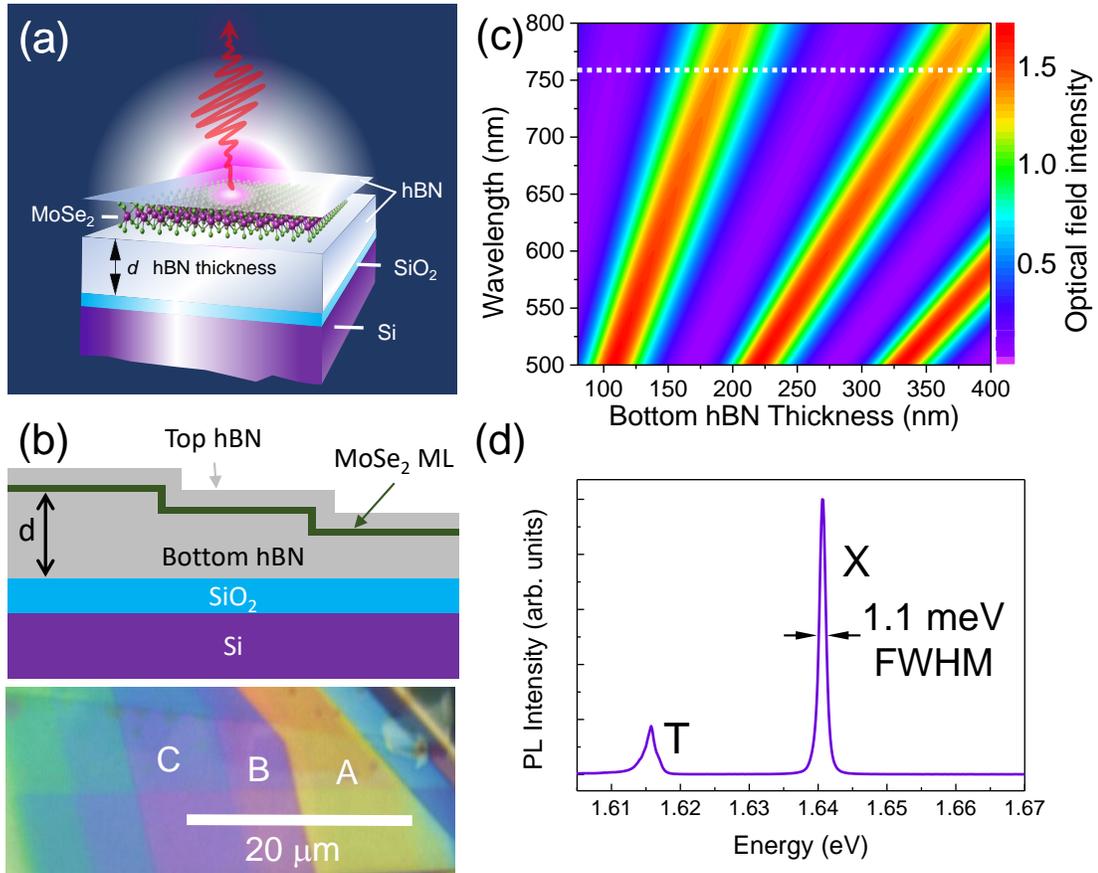


Рис. 4.15: (а) Схематическое изображение исследованной структуры на основе монослоя MoSe_2 , инкапсулированного в гексагональный нитрид бора. (б) Схема сечения образца и его изображение в оптическом микроскопе (образец III с варьируемой толщиной нижнего слоя hBN d). (с) Зависимость интенсивности поля в месте расположения монослоя от длины волны и толщины нижнего слоя нитрида бора. Белая горизонтальная пунктирная черта соответствует длине волны излучения нейтрального экситона ($\approx 756 \text{ nm}$). (д) Спектр фотолюминесценции образца I ($d = 180 \text{ nm}$) при $T = 7 \text{ K}$, отмечены пики излучения нейтрального и заряженного экситонов.

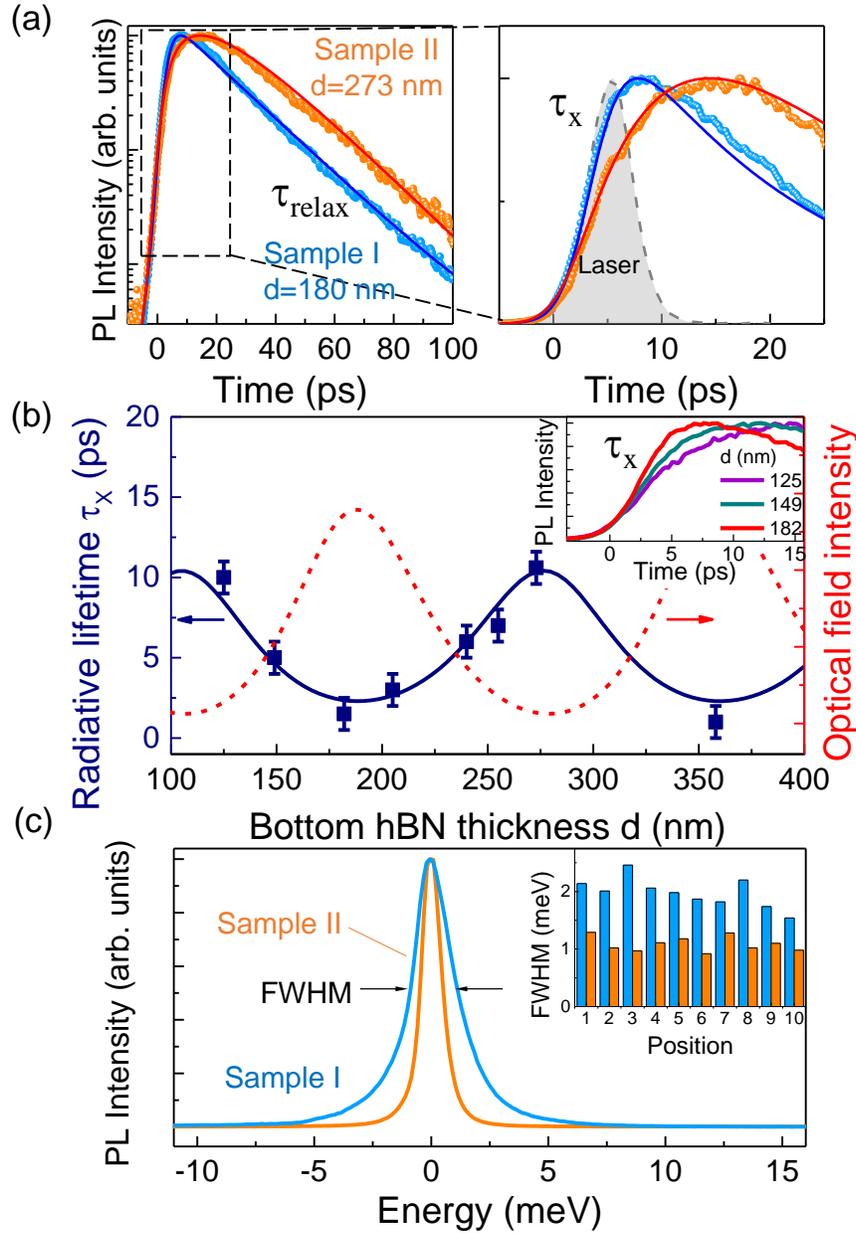


Рис. 4.16: (a) Слева: нормированная интенсивность фотолюминесценции экситона (логарифмическая шкала) в зависимости от времени на образце I ($d = 180$ nm) и II ($d = 273$ nm); сплошные кривые представляют результаты двухэкспоненциальной подгонки по формулам (4.38), (4.39). Справа: область возрастания сигнала фотолюминесценции в увеличенном масштабе. (b) Рассчитанные (сплошная кривая) и измеренные (квадраты) времена радиационного затухания экситона в зависимости от толщины нижнего слоя hBN d . Красный пунктир – нормированная интенсивность электромагнитного поля в структуре. На вставке представлена зависимость интенсивности фотолюминесценции от времени для трех точек на образце III. (c) Нормированные спектры фотолюминесценции образцов I и II (положение пиков в спектрах было слегка сдвинуто для совпадения максимумов). На вставке показаны ширины спектров (полная ширина на полувысоте), измеренные в 10 различных точках образца.

В этих образцах методом спектроскопии фотолюминесценции с временным разрешением исследовалась динамика излучения экситонов. Основные экспериментальные результаты сведены на рис. 4.16. Панель (а) демонстрирует кинетику фотолюминесценции нейтрального экситона в образцах I и II при нерезонансном возбуждении. Время спада фотолюминесценции в образцах одинаково (приблизительно 18 ps), а время роста значительно отличается. В образце I оно несколько меньше пикосекунды (и ограничено разрешением экспериментальной установки), а в образце II достигает ≈ 10 ps. Такое, на первый взгляд, необычное поведение кинетики находит свое объяснение в рамках простой модели, учитывающей резервуар “горячих” экситонов с концентрацией частиц n_{hot} , который формируется при нерезонансной накачке, и излучающие состояния экситонов (в световом конусе, т.е. с волновым вектором центра масс $K < \omega/c$, где ω – частота экситонного излучения) с концентрацией n_X . Уравнения кинетики в пренебрежении безызлучательной рекомбинацией (для экситонов в исследованных образцах данное приближение оказывается оправдано) принимают простой вид

$$\frac{dn_{hot}}{dt} = -\frac{n_{hot}}{\tau_{relax}}, \quad (4.38a)$$

$$\frac{dn_X}{dt} = -\frac{n_X}{\tau_X} + \frac{n_{hot}}{\tau_{relax}}, \quad (4.38b)$$

где τ_{relax} – время релаксации горячих экситонов в излучающие состояния, и τ_{rad} – время радиационного распада экситона. Временная зависимость интенсивности люминесценции записывается как

$$I(t) \propto \frac{n_{hot}^{(0)}}{\tau_{relax} - \tau_X} \left[\exp\left(-\frac{t}{\tau_{relax}}\right) - \exp\left(-\frac{t}{\tau_X}\right) \right], \quad (4.39)$$

где $n_{hot}^{(0)}$ – начальная концентрация фоторожденных экситонов. При условии быстрой излучательной рекомбинации экситонов, когда $\tau_{rad} < \tau_{relax}$, спад фотолюминесценции определяется более медленным временем релаксации в излучающие состояния, а рост – коротким временем рекомбинации. Именно такая ситуация и была реализована в описываемых экспериментах.

Время рекомбинации экситона τ_X , найденное из кинетики фотолюминесценции, действительно зависит от диэлектрического окружения монослоя, см. рис. 4.16(a) и (b). Дополнительным подтверждением этого эффекта служит представленное на панели (c) рисунка сопоставление ширин спектров излучения – более узкие спектры фотолюминесценции наблюдаются на образце с более длинным τ_X . Такая вариация времени излучательной рекомбинации экситона находится в качественном согласии с эффектом Парселла: в образцах, где монослой оказывается в пучности электромагнитного поля, рекомбинация идет быстрее, а в образцах, где монослой находится в узле поле, рекомбинация подавляется.

Количественное описание экспериментальных данных оказалось возможным в рамках метода матриц переноса, изложенного выше с единственным подгоночным параметром. Согласно общей теории [1, 343] полюса функций отклика, в частности, коэффициентов отражения $r_{tot}(\omega)$ или пропускания $t_{tot}(\omega)$ всей структуры (уравнения (4.36)), а также особенность в абсорбансе $\mathcal{A}(\omega)$ [формула (4.37)], соответствуют собственным модам системы. В спектральной окрестности экситонного резонанса функции $r_{tot}(\omega)$ и $t_{tot}(\omega)$ можно представить в виде

$$r_{tot}(\omega) = \frac{Z_r}{\omega_0^{\text{eff}} - \omega - i(\Gamma_0^{\text{eff}} + \Gamma)} + \dots, \quad (4.40a)$$

$$t_{tot}(\omega) = \frac{Z_t}{\omega_0^{\text{eff}} - \omega - i(\Gamma_0^{\text{eff}} + \Gamma)} + \dots, \quad (4.40b)$$

где точки обозначают регулярную часть, Z_r и Z_t – комплексные константы, а величины ω_0^{eff} и Γ_0^{eff} представляют собой частоту экситонного резонанса и его затухание, перенормированные взаимодействием с электромагнитным полем. Аналогично,

$$\mathcal{A}(\omega) \approx \frac{\mathcal{A}_0}{(\omega_0^{\text{eff}} - \omega)^2 + (\Gamma_0^{\text{eff}} + \Gamma)^2}. \quad (4.40c)$$

Таким образом, для расчета темпа радиационного затухания

$$\Gamma_0^{\text{eff}} = \frac{1}{2\tau_X}, \quad (4.41)$$

рассчитывался абсорбанс, $\mathcal{A}(\omega)$, при $\Gamma \rightarrow 0$ полученная частотная зависимость, подгонялась формулой (4.40c), а из полученного значения Γ_0^{eff} определялось время



Рис. 4.17: Схема упрощенной структуры, используемая в аналитической модели.

излучательной рекомбинации экситона в ван-дер-ваальсовой гетероструктуре в зависимости от толщины d нижнего слоя гексагонального нитрида бора. В этом подходе пренебрегается возможной асимметрией спектров за счет экситон-фононного взаимодействия, которая приводит к частотной зависимости $\Gamma(\omega)$ [344],[A21] (этот эффект несущественен в наших образцах). Результаты такого расчета представлены на рис. 4.16(b) сплошной кривой. В качестве единственного подгоночного параметра выступал темп радиационной рекомбинации экситона в монослое MoSe_2 в вакуум ($\Gamma_{0,A:1s}$ в формуле (4.33) для коэффициента отражения уединенного монослоя) соответствующее время рекомбинации составило 2.7 ps.

Для более детального понимания эффекта представим упрощенную аналитическую модель эффекта, в которой пренебрегается наличием верхнего (покрывающего) слоя hBN, см. рис. 4.17. Введем коэффициент r_{0b} , описывающий отражение света от трехслойной системы “hBN/SiO₂/Si”. Этот коэффициент можно выразить через вспомогательные коэффициенты отражения [ср. с (4.34)]

$$r_1 = \frac{1 - n_{\text{hBN}}}{1 + n_{\text{hBN}}}, \quad \text{vacuum} \rightarrow \text{hBN}, \quad (4.42a)$$

$$r_2 = \frac{n_{\text{hBN}} - n_{\text{SiO}_2}}{n_{\text{hBN}} + n_{\text{SiO}_2}}, \quad \text{hBN} \rightarrow \text{SiO}_2, \quad (4.42b)$$

$$r_3 = \frac{n_{\text{SiO}_2} - n_{\text{Si}}}{n_{\text{SiO}_2} + n_{\text{Si}}}, \quad \text{SiO}_2 \rightarrow \text{Si}. \quad (4.42c)$$

Ниже будут использоваться обозначения $r'_j = -r_j$ для коэффициентов пропускания света через соответствующий интерфейс, но в противоположном направлении,

коэффициенты пропускания записываются в виде $t_j = 1 + r_j$, $t'_j = 1 + r'_j$, соответственно, $j = 1, \dots, 3$. Волновые векторы света и толщины слоев обозначаем, соответственно, q_j и L_j , в частности, q_1 – волновой вектор света в hBN, $L_1 \equiv d$. Коэффициент отражения света (падающего из нитрида бора) на структуру SiO₂/Si записывается в виде

$$r_{23} = r_2 + \frac{t_2 t'_2 r_3 e^{2iq_2 L_2}}{1 - e^{2iq_2 L_2} r_3 r'_2}, \quad (4.43)$$

а коэффициент отражения света всей трехслойной системы выражается как

$$r_{0b} = r_1 + \frac{t_1 t'_1 r_{23} e^{2iq_1 L_1}}{1 - e^{2iq_1 L_1} r_{23} r'_1}. \quad (4.44)$$

В рамках электродинамического подхода $r_{tot}(\omega)$ несложно вычислить либо перемножив соответствующие матриц переноса, либо просуммировав вклады от всевозможных переотражений света между монослоем и трехслойной системой “hBN/SiO₂/Si”. В результате получаем

$$r_+ = r + \frac{t^2 r_{0b}}{1 - r r_{0b}} = \frac{r_{0b} [\omega_0 - \omega - i(-\Gamma_0^{\text{vac}} + \Gamma)] + i\Gamma_0^{\text{vac}}}{\omega_0 - \omega - i[\Gamma_0^{\text{vac}}(1 + r_{0b}) + \Gamma]}. \quad (4.45)$$

Для простоты здесь пренебрегается вкладами всех экситонных состояний, кроме $A : 1s$ и его резонансная частота и затухание для уединенного монослоя обозначены как ω_0 и Γ_0^{vac} . Приводя формулу (4.45) к виду (4.40) легко найти перенормировки затухания и резонансной частоты экситона, вызванные электродинамическими эффектами

$$\Gamma_0^{\text{eff}} = \Gamma_0^{\text{vac}}(1 + \text{Re}\{r_{0b}\}), \quad \omega_0^{\text{eff}} - \omega_0 = \Gamma_0^{\text{vac}} \text{Im}\{r_{0b}\}. \quad (4.46)$$

Осциллирующая зависимость Γ_0^{eff} и τ_X от толщины слоя нитрида бора d связана с интерференцией световых волн, отраженных от переднего и заднего интерфейсов hBN, см. знаменатель в r_{0b} , формула (4.44). Этот эффект можно интерпретировать как эффект Парселла, т.е. изменение скорости спонтанного излучения диполя при помещении его в резонатор. В качестве “открытого” резонатора (или эталона Фабри-Перо) в данном случае выступает трехслойная структура, показанная на

рис. 4.17. Соответственно, можно ввести фактор Парселла, описывающий изменение скорости излучательной рекомбинации как

$$F_p = \frac{\Gamma_0^{\text{eff}}}{\Gamma_0^{\text{vac}}} = 1 + \text{Re}\{r_{0b}\}. \quad (4.47)$$

Этот же результат можно получить и в квантовомеханическом подходе, используя золотое правило Ферми для расчета темпа радиационного затухания экситона. Удобно воспользоваться следующим формальным приемом: рассмотреть трехслойную систему как среду с эффективным коэффициентом отражения r_{0b} , считая, что при $z \rightarrow \infty$ ее эффективный показатель преломления плавно выходит на 1. Это позволяет избежать проблемы с различной дисперсией световых волн слева и справа от структуры. Кроме того, в квантовомеханическом подходе среду необходимо считать непоглощающей. Моды электромагнитного поля при $z \rightarrow \pm\infty$ можно записать в виде:

$$E^{(1)}(z) = E_0 \times \begin{cases} e^{iq_z z} + r_{0b} e^{-iq_z z}, & z \rightarrow -\infty \\ t_{0b} e^{iq_z z}, & z \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (4.48a)$$

$$E^{(2)}(z) = E_0 \times \begin{cases} t'_{0b} e^{-iq_z z}, & z \rightarrow -\infty \\ e^{-iq_z z} + r'_{0b} e^{iq_z z}, & z \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (4.48b)$$

Амплитуда поля $|E_0|$ определяется стандартным условием нормировки энергии на один фотон,

$$\frac{1}{8\pi} \int d\mathbf{r} \{|E_0|^2 + |B_0|^2\} = \frac{\mathcal{V}|E_0|^2}{4\pi} = \frac{\hbar\omega}{2}, \quad |E_0| = |B_0| = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{\mathcal{V}}}, \quad (4.49)$$

\mathcal{V} – нормировочный объем, t_{0b} и t'_{0b} соответствующие коэффициенты пропускания. Моды электромагнитного поля относятся к непрерывному спектру и нормируются по асимптотическому поведению при $z \rightarrow \pm\infty$, в выполнении условия нормировки можно убедиться воспользовавшись соотношениями [345]

$$|r_{0b}|^2 + |t_b|^2 = 1, \quad |r'_b|^2 + |t'_b|^2 = 1, \quad r_{0b}^* t'_b + r'_b t_b^* = 0. \quad (4.50)$$

Воспользуемся теперь золотым правилом квантовой механики в виде

$$\frac{1}{\tau_X} = 2\Gamma_0^{\text{eff}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{q_z, i} |\langle \text{exc} | \hat{V}^{(i)} | 0 \rangle|^2 \delta(\hbar c q_z - \hbar\omega_0), \quad (4.51)$$

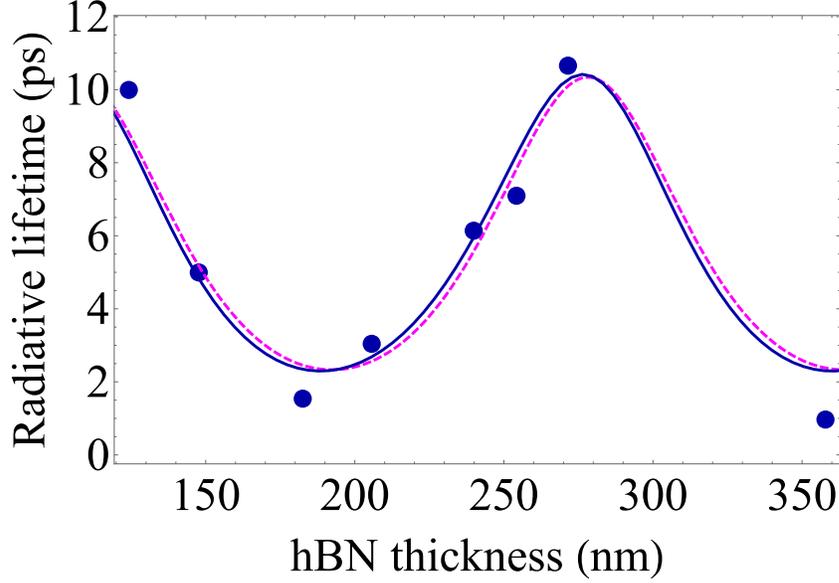


Рис. 4.18: Радиационное время жизни экситона в зависимости от толщины слоя hBN d . Параметры расчета: $1/(2\Gamma_0^{\text{vac}}) = 2.7$ ps, толщина слоя SiO_2 80 nm, $\hbar\omega_0 = 1.64$ meV, показатели преломления $n_{\text{hBN}} = 2.2$, $n_{\text{SiO}_2} = 1.46$, $n_{\text{Si}} = 3.5$. Темная кривая показывает результаты расчета в методе матриц переноса с учетом покрывающего слоя hBN толщиной в 10 nm [сплошная кривая из рис. 4.16(b)], фиолетовая кривая – аналитической расчет по формулам (4.46) и (4.47). Точки – экспериментальные данные из рис. 4.16(b).

где $V^{(i)}$ – оператор возмущения для взаимодействия с волнами 1 и 2, $\hat{V} = -\frac{1}{c} \int dr j \mathbf{A}$. Суммирование по q_z преобразуется в интеграл согласно

$$\sum_{q_z, i} \dots = \frac{\mathcal{V}}{\mathcal{S}} \sum_i \int_0^\infty \frac{dq_z}{2\pi} \dots \quad (4.52)$$

Расчет показывает, что

$$F_p = \frac{\Gamma_0^{\text{eff}}}{\Gamma_0^{\text{vac}}} = \frac{|1 + r_{0b}|^2 + |t'_{0b}|^2}{2}. \quad (4.53)$$

Выражение (4.53) может быть приведено к (4.47) с учетом двух соотношений, которые следуют из симметрии к обращению хода времени $|t'_b|^2 = |t_b|^2$, и из (4.50):

$$|1 + r_{0b}|^2 + |t'_{0b}|^2 = |1 + r_{0b}|^2 + |t_{0b}|^2 = 1 + |r_{0b}|^2 + 2 \text{Re}\{r_{0b}\} + |t_{0b}|^2 = 2 + 2 \text{Re}\{r_{0b}\}.$$

На рис. 4.18 сравниваются результаты полного и приближенного расчетов. Видно, что аналитическая модель не только качественно, но и количественно описывает зависимость времени излучательной рекомбинации экситона от параметров

структуры. Отметим, что учет конечной числовой апертуры объектива, используемого в экспериментах, что приводит к детектированию излучения экситонов с различными волновыми векторами в плоскости монослоя, не меняет заметным образом результатов этого анализа [A20]. Также, вариация толщины нижнего слоя гексагонального нитрида бора в диапазоне ~ 100 nm не сказывается существенным образом на силе осциллятора основного состояния экситона, так как изменения экранировки кулоновского взаимодействия при таких толщинах слоев неважны.

В заключение еще раз подчеркнем, что эффекты распространения электромагнитного излучения в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах на основе монослоев дихалькогенидов переходных металлов могут кардинальным образом модифицировать оптический отклик экситонов, приводя, в частности, к перенормировке времени излучательной рекомбинации больше, чем на порядок величины.

4.5 Краткие итоги

В главе 4 получены следующие основные результаты:

- Построена теория экситонов в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах с монослоями дихалькогенидов переходных металлов. Рассчитана экситонная серия в однослойных и двухслойных гетероструктурах с учетом диэлектрического контраста. Показано, что в структурах с монослоем экспериментально измеренная экситонная серия может быть описана потенциалом Рытовой-Келдыша с единым набором параметров. Рассчитана серия экситонных состояний в двухслойной структуре в зависимости от расстояния между слоями d . Предложена пробная функция, позволяющая вычислить энергию связи экситона в гетероструктурах с двумя монослоями MX_2 с высокой точностью при произвольном расстоянии между слоями.
- Разработана теория строения и энергетического спектра заряженных экситонов (трионов) в монослоях дихалькогенидов переходных металлов. Вариационным методом рассчитана зависимость энергии связи симметричного и

антисимметричного состояний трионов от эффективного радиуса экранировки и от отношения эффективных масс электрона и дырки. Симметричному состоянию X^+ -триона, соответствует 4 различных спиновых и долинных конфигураций носителей заряда, две из которых оптически активны в циркулярных поляризациях σ^\pm . Для X^- -триона существует 12 состояний, из которых 3 пары оптически активны в циркулярных поляризациях σ^\pm . Показано, что наблюдающееся различие между энергиями связи X^+ и X^- -трионов, а также тонкая структура X^- -триона в соединениях на основе W могут быть обусловлены короткодействующей частью обменного взаимодействия между носителями заряда.

- Предложена пробная функция, позволяющая вычислить энергия связи триона в двухслойной ван-дер-ваальсовой гетероструктуре в случае когда носители заряда одного знака находятся в одном слое, в носители заряда противоположного знака – во другом слое, при произвольном расстоянии между слоями и при близких величинах эффективных масс электрона и дырки. Показано, что при реалистичных расстояниях между слоями (до ~ 10 нм) энергия связи трионов может составлять единицы мэВ.
- Исследовано влияние диэлектрического окружения на оптические спектры ван-дер-ваальсовых гетероструктур. Показано, что изменение толщин слоев, входящих в ван-дер-ваальсову структуру за счет интерференционных эффектов существенным образом влияет на формы линий и относительные силы осциллятора основного и возбужденных экситонных состояний в спектрах отражения. Продемонстрирована возможность управления радиационным временем жизни экситона за счет эффекта Парселла. Вариация толщины нижнего слоя гексагонального нитрида бора приводит к изменению радиационного времени жизни экситона почти на порядок. Результаты расчета хорошо согласуются с данными эксперимента.

Глава 5

Ридберговские экситоны в объемных полупроводниковых кристаллах

5.1 Введение

Закись меди является уникальным материалом, в котором сочетаются большая энергия связи экситона ≈ 87 meV и высокое качество природных кристаллов. Именно на кристаллах Cu_2O Е.Ф. Гросс и Н.А. Каррыев сделали открытие – впервые обнаружили проявления экситонов Ванье-Мотта в оптических спектрах [8]. Исследования, выполненные Гроссом и его учениками, заложили основы физики экситонов в полупроводниках и явились спусковым крючком ко всем последующим работам, посвященным физике электрон-дырочных пар в кристаллах. В первом приближении энергетический спектр экситонов описывается в рамках водородоподобной модели и энергии состояний экситона с главным квантовым числом n , отсчитанные от края сплошного спектра, описываются выражением (5.1):

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (5.1)$$

Уже в первых работах наблюдалось до 8 [346] возбужденных состояний экситона в Cu_2O . Вторая волна интереса к экситонам в кристаллах закиси возникла сравнительно недавно, в 2014 г., после наблюдения в группе М.Байера и Д.Фрелиха из Технического университета Дортмунда (Германия) в этом материале высоко-возбужденных состояний экситона с главным квантовым числом, достигающим

$n = 25$ [9]. Оценки показывают, что характерный размер состояния с $n = 25$ составляет около 1 мкм (для сравнения: боровский радиус основного состояния с $n = 1$ около 1 нм). О таких высоковозбужденных состояниях экситона можно говорить как о гигантских, или ридберговских, — по аналогии с возбужденными состояниями атомов, где внешний электрон переносится на оболочку с $n \gg 1$ [347].

Описание экситонов в рамках водородоподобной модели особенно распространено для полупроводников кубической симметрии, таких как GaAs или Cu₂O, спектр носителей заряда в которых в первом приближении является параболическим и изотропным. Однако, отклонение энергетического спектра электронов и дырок от простой модели, характеризуемой скалярными эффективными массами, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -смешивание различных зон, отклонение закона притяжения электрона и дырки от кулоновского за счет особенностей экранировки, обменное взаимодействие электрона и дырки приводят к количественным и качественным отклонениям экситонной серии от водородоподобной. Для основного и ближайших возбужденных состояний экситона методы вычислительной математики позволяют эффективно диагонализировать гамильтониан взаимодействующих электронов и дырки с учетом особенностей зонной структуры и специфики взаимодействия квазичастиц в полупроводниках, находить энергии связи и тонкую структуру спектра экситонов с достаточно высокой точностью, см. [156, 157, 348, 349, 350], [A22], [A24], а также предыдущие главы диссертации.

Ситуация оказывается качественно иной для возбужденных состояний экситонов. Это обусловлено тем, что с увеличением главного квантового числа n , характеризующего наряду с орбитальным моментом l и магнитным квантовым числом m собственные функции водородоподобных состояний, резко $\propto n^2$ возрастает кратность вырождения мультиплета. Таким образом прямой расчет экситонных волновых функций оказывается очень ресурсоемким. С другой стороны, во-первых, кристаллическое окружение снимает вырождение по l и m , что с неизбежностью требует учета отличий экситонной серии от водородоподобной (к при-

меру, в кубическом кристалле с точечной группой симметрии O_h или T_d отсутствуют векторные представления размерности больше трех, поэтому даже в кубическом кристалле d -состояния экситона с $l = 2$ оказываются расщепленными), а во-вторых, именно возбужденные состояния экситонов с главными квантовыми числами $n \gtrsim 5$ привлекают особый интерес исследователей в последнее время. Изучение таких состояний позволяет провести аналогии с физикой ридберговских атомов, свойства которых в значительной мере отличаются от свойств состояний с малыми n [10]. Ридберговские состояния атомов обладают исключительно большим откликом на внешние поля, демонстрируют эффективное ван-дер-ваальсово взаимодействие, а также потенциально могут найти применения для решения задач метрологии и квантовой информатики [11]. Эти обстоятельства диктуют необходимость теоретического и экспериментального изучения возбужденных состояний экситонов в Cu_2O , и ставят вопрос о разработке и применении новых теоретических методов для анализа свойств ридберговских экситонов.

В работах [A22], [A23], [A24], [A25], [A26], [A27] автором развивалась теория тонкой структуры энергетического спектра возбужденных экситонных состояний в Cu_2O , скейлинговых зависимостей параметров экситонной серии, отклика ридберговских экситонов на внешнее статическое электрическое поле. В данной главе представлены результаты этих работ.

5.2 Тонкая структура экситонных состояний в отсутствии внешних полей

Кристаллическая и зонная структура Cu_2O показаны схематично на рис. 5.1 (а) и (б), соответственно. Закись меди — центросимметричный кристалл с группой симметрии O_h . В Cu_2O зона нижняя зона проводимости и верхняя валентная зона образованы орбиталями одинаковой четности S -типа и D -типа, соответственно. С учетом электронного спина состояния зоны проводимости преобразуются по неприводимому представлению Γ_6^+ точечной группы O_h , а вершина валент-

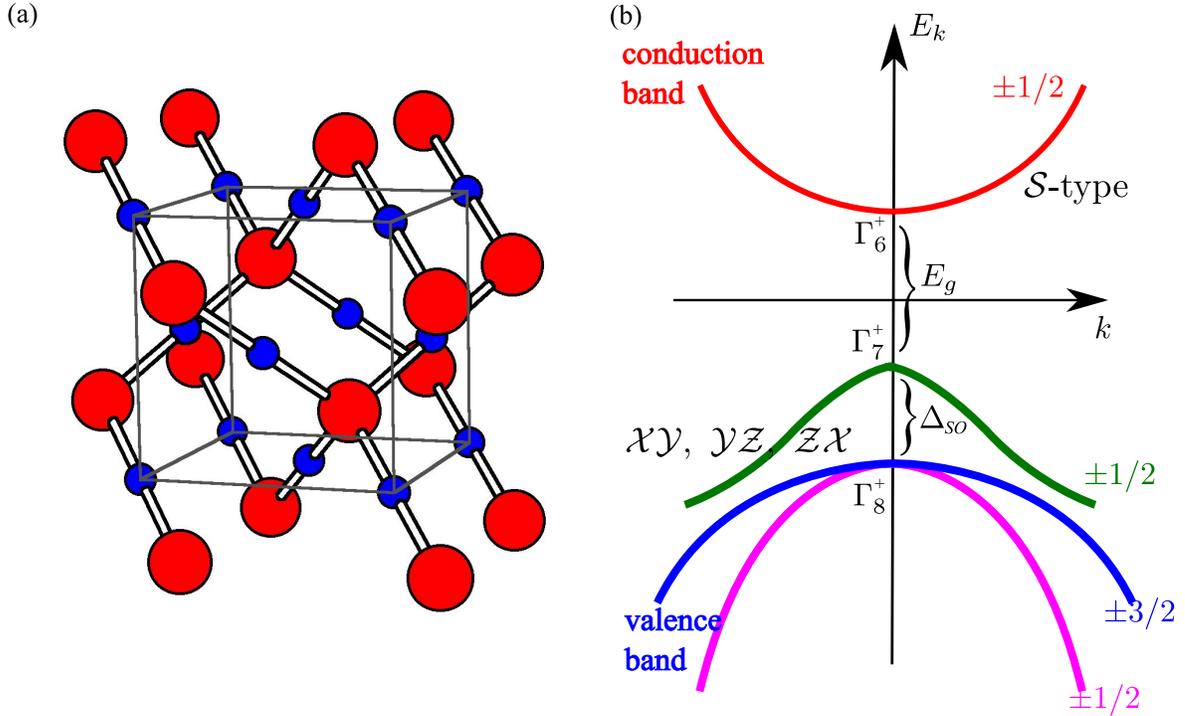


Рис. 5.1: (а) Кристаллическая и (b) зонная структура закиси меди. Большие сферы – кислород, маленькие сферы – медь.

ной зоны, сформированная из орбитальных состояний типа xy , yz и z (векторное представление Γ_5^+) расщепляется спин-орбитальным взаимодействием на двукратно вырожденную зону Γ_7^+ (потолок валентной зоны) и четырехкратно вырожденную зону Γ_8^+ . Основное внимание уделяется, главным образом, состояниям “желтой” экситонной серии, сформированные из электрона в зоне Γ_6^+ и дырки в зоне Γ_7^+ .¹

Одинаковая четность зон приводит к тому что оптически активными в дипольном приближении являются P -состояния экситона, а не S -состояния как в популярных полупроводниках III-V, II-VI и дихалькогенидах переходных металлов, исследованных в главах 1 – 4. Таким образом, в экспериментах, использующих однофотонное возбуждение, в Cu_2O наблюдаемая экситонная серия начинается с

¹Несколько выше по энергии лежит “зеленая” экситонная серия, связанная с переходами между зоной проводимости и спин-отщепленной валентной зоной, преобразующейся по представлению Γ_8^+ , также наблюдаются переходы “голубой” и “фиолетовой” серий, в которых участвуют экситоны с электроном в возбужденной зоне проводимости Γ_8^- (на рис. 5.1(b) не показаны.)

$n = 2$ [8, 346]. Здесь и далее, где это не приводит к путанице, состояния экситона будут характеризоваться набором квантовых чисел n , l и m , соответствующих модели атома водорода. Как уже было отмечено, строго говоря, квантовые числа n, l, m не являются хорошими квантовыми числами для описания состояний в кубическом кристалле, поскольку состояния с $l \geq 2$ преобразуются по приводимым представлениям группы O_h . Тем не менее, зачастую удобно использовать квантовые числа n, l, m для обозначения базисных функций. Кроме того, в закиси меди расщепление между уровнями с разными n значительно превышает расщепления внутри мультиплета – их тонкую структуру [349, 351], [A22]. Ширина запрещенной зоны закиси меди составляет около 2.2 eV, а экситонный Ридберг около 90 meV. При этом величина энергии связи основного состояния экситона сравнима с величиной спинового расщепления валентной зоны $\Delta_{SO} = 134$ meV [352], что приводит к необходимости учета как валентной зоны Γ_6^+ , так и валентной зоны Γ_8^+ для описания тонкой структуры экситонных состояний [352].

Развитие современных методов спектроскопии позволило наблюдать состояния “желтой” экситонной серии вплоть до $n = 25$. Пример спектра поглощения кристалла показан на рис. 5.2 (а) [9]. При его более подробном рассмотрении [см. рис. 5.2 (б)] начиная с $n = 4$ можно видеть с высокоэнергетичной стороны вблизи основных пиков, соответствующих P - состояниям, дополнительные особенности, представляющие собой триплеты. Начиная с $n = 6$ появляется еще одна особенность, тонкую структуру которой в эксперименте разрешить не удастся [A22]. Цель данного параграфа – объяснить наличие триплетов в экситонном спектре.

Начнем с симметричного анализа. Волновая функция экситона «желтой» серии преобразуется по представлению $\mathcal{D}_x = \Gamma_6^+ \times \Gamma_7^+ \times \mathcal{D}_r$, где \mathcal{D}_r – представление группы симметрии, отвечающее огибающей волновой функции относительного движения электрона и дырки. Здесь и далее мы рассматриваем экситоны в состоянии покоя, считая, что волновой вектор трансляционного движения электрон-дырочной пары как целого равен нулю. Дисперсии экситонов в объемных полупроводниках, а

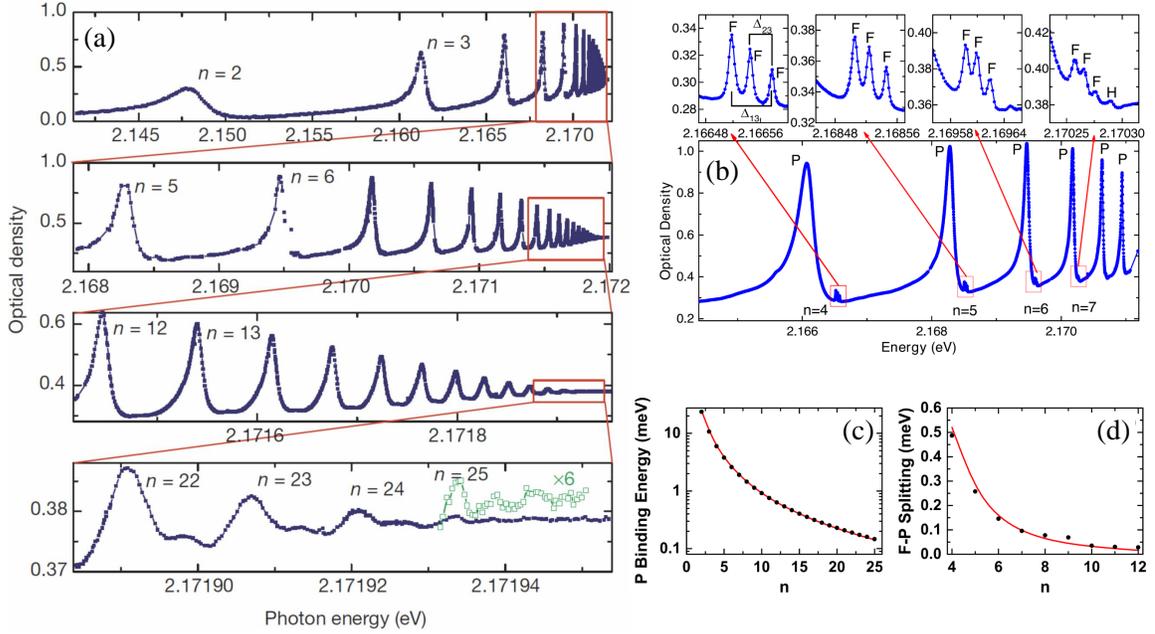


Рис. 5.2: (a) Спектр поглощения закиси меди [9]; (b) Спектр поглощения “желтой” экситонной серии Cu_2O в диапазоне энергии, соответствующем состояниям с $n = 4 - 9$. Верхние панели показывают высокоэнергетичную окрестность пиков, соответствующих P -состояниям экситона с $n = 4 - 7$ [A22]; (c) Зависимость энергии связи P - экситонов, а также (d) расщепления между P - и F - состояниями экситона от номера уровня n . Точки показывают экспериментальные данные, результаты расчета показаны линиями, соединяющими точки, вычисленные для дискретных значений n [A22]. Параметры, использованные в расчете: $\mathcal{R} = 87 \text{ meV}$, $\mu = (6\gamma_3 + 4\gamma_2)/5/(\gamma_1 + m_0/m_e) = 0.47$, $\Delta_{SO} = 134 \text{ meV}$ [352].

также поляритонным эффектам, неизбежным благодаря оптической активности экситонов, посвящен ряд работ [160, 353, 336, 354, 355, 356, 357]. Эти эффекты не существенны для данной задачи. Произведение представлений блоховских функций валентной зоны и зоны проводимости приводимо:

$$\Gamma_6^+ \times \Gamma_7^+ = \Gamma_2^+ + \Gamma_5^+.$$

Для того, чтобы состояние было оптически активно в однофотонных процессах в дипольном приближении его представление \mathcal{D}_x должно содержать представление Γ_4^- , отвечающее компонентам вектора – оператора дипольного момента. Симметричный анализ показывает, что в закиси меди в дополнение к P -состояниям экситона оптически активными будут F -, H - и т.д. состояния с нечетной огибающей [A22]. Отметим, что представления, по которым преобразуются функции относительного движения электрона и дырки F ($l = 3$) и H ($l = 5$) экситонов, являются приводимыми: $\mathcal{D}_F = \Gamma_2^- + \Gamma_4^- + \Gamma_5^-$ and $\mathcal{D}_H = \Gamma_3^- + 2\Gamma_4^- + \Gamma_5^-$. Легко убедиться в том, что в прямом произведении $\mathcal{D}_F \times \Gamma_5^+$ содержится $3\Gamma_4^-$, а в произведении $\mathcal{D}_F \times \Gamma_2^+$ – еще одно неприводимое представление Γ_4^- . Таким образом, F -экситоны могут привести к наличию 4 линий в спектре однофотонного поглощения, однако одно из этих состояний содержит блоховскую функцию параэкситона Γ_2^+ , такая линия может быть слабой. Аналогичный анализ показывает, что в прямом произведении $\mathcal{D}_H \times (\Gamma_2^+ + \Gamma_5^+)$ содержится $5\Gamma_4^-$, поэтому от H -экситона ожидается до пяти линий.

Для микроскопического описания тонкой структуры спектра поглощения закиси в меди был проведен расчет экситонных состояний, в котором были учтены состояния спин-отщепленной валентной зоны Γ_8^+ . Для этого с использованием аппарата неприводимых тензоров был получен эффективный гамильтониан, описывающий относительное движение электрона и дырки:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{2}{r} - \frac{\mu}{3\hbar^2} (P^{(2)} \cdot I^{(2)}) + \frac{2}{3}\bar{\Delta}(1 + \mathbf{I} \cdot \mathbf{s}_h) + \mathcal{H}_c. \quad (5.2)$$

Здесь \mathbf{p} – импульс относительного движения электрон-дырочной пары, \mathbf{I} – матрицы оператора углового момента $I = 1$, действующего в базисе трех орбиталь-

ных блоховских амплитуд $\mathcal{Y}\mathcal{Z}$, $\mathcal{X}\mathcal{Z}$, $\mathcal{X}\mathcal{Y}$, преобразующихся по представлению Γ_5^+ , \mathbf{s}_h – оператор спина дырки. В (5.2) энергии измеряются в единицах $\mathcal{R}^* = e^4 m_0 / (2\hbar^2 \varepsilon^2 \gamma_1')$, расстояния в единицах $a^* = \hbar^2 \varepsilon \gamma_1' / (e^2 m_0)$, ε – статическая диэлектрическая проницаемость объемного кристалла, $\bar{\Delta} = \Delta_{SO} / \mathcal{R}^*$ безразмерное спин-орбитальное расщепление зоны Γ_7^+ и Γ_8^+ , $\gamma_1' = \gamma_1 + m_0 / m_e$, $\mu = (6\gamma_3 + 4\gamma_2) / (5\gamma_1')$, m_e – масса свободного электрона, γ_i ($i = 1, 2, 3$) параметры Латтинжера. Последний член в (5.2) учитывает кубическую симметрию кристалла

$$\mathcal{H}_c = \frac{\delta}{3\hbar^2} \left(\sum_{k=\pm 4} [P^{(2)} \times I^{(2)}]_k^{(4)} + \frac{\sqrt{70}}{5} [P^{(2)} \times I^{(2)}]_0^{(4)} \right), \quad \delta = (\gamma_3 - \gamma_2) / \gamma_1'. \quad (5.3)$$

В формулах (5.2) и (5.3) введены неприводимые тензоры второго ранга $P^{(2)}$ и $I^{(2)}$, составленные из произведений компонент оператора импульса $p_\alpha p_\beta$ и углового момента $I_\alpha I_\beta$, соответственно, $\alpha, \beta = x, y, z$ и используются кубические оси, $x||[100]$, $y||[010]$, $z||[001]$.

На рис. 5.2 (с) и (d) показаны зависимости энергии связи P -состояний, а также расщепления между P -состоянием и центром триплета, связанного с F -состояниями. Для расчета использовались параметры из работы [352] без дополнительных подгоночных параметров. Для диагонализации гамильтониана (5.2) (при $\mathcal{H}_c = 0$) использовался метод, аналогичный развитому в главах 2 и 3 для прямой диагонализации гамильтониана Латтинжера и основанный на разложении многокомпонентной блоховской функции по набору гауссианов, а кубическая гофрировка спектра учитывалась по теории возмущений. Как видно из рисунка, расчет дает хорошие согласие с экспериментом. Для описания тонкой структуры F -состояний был проведен расчет с одним подгоночным параметром δ , характеризующим гофрировку валентной зоны. Сравнение с экспериментом позволило оценить значение параметра, определяющего гофрировку валентной зоны $\delta \approx -0.1$. Таким образом, получается, что δ имеет знак, противоположный знаку в распространенных материалах Si, Ge, GaAs. Это согласуется с расчетами микроскопическими методами [358, 359] и с оценками параметров Латтинжера, выполненными в 1980-е годы на основе спектроскопии диамагнитных эффектов на экситонах и циклотронного

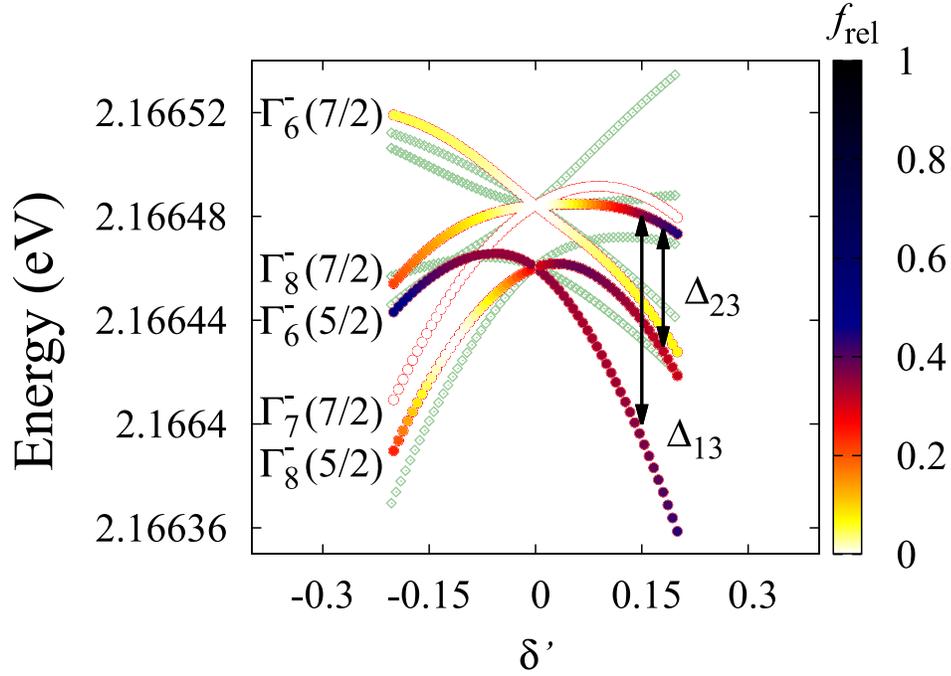


Рис. 5.3: Тонкая структура мультиплета F -состояний для главного квантового числа $n = 25$, рассчитанная в [A22] (зеленые символы) и уточненным методом [351] (цвет символа соответствует силе осциллятора перехода). Состояния обозначены по неприводимым представлениям произведения $\mathcal{D}_F \times \Gamma_7^+$ (симметрия дырки в экситоне), а в скобках указан полный угловой момент дырки. Параметры, использованные в расчете: $\mathcal{R} = 87$ meV, $\mu = (6\gamma_3 + 4\gamma_2)/5/(\gamma_1 + m_0/m_e) = 0.47$, $\Delta_{SO} = 134$ meV [352].

резонанса в Cu_2O [360, 361]. Отметим, что в первом расчете тонкой структуры F -экситонов в закиси меди в работе [A22] была допущена неточность, в результате чего состояния F -экситонов с большой и малой силой осциллятора были перепутаны. В работе [351] приведен уточненный расчет тонкой структуры возбужденных состояний экситона, выходящий за рамки теории возмущений по \mathcal{H}_c . Для примера на рис. 5.3 представлены результаты расчета из работы [A22] (зеленые символы) и уточненного расчета, выполненного Ф. Швайнером с соавторами из университета Штутгарта [351] (цветные символы) для мультиплета F -состояний с $n = 4$, цветом представлена сила осциллятора состояний. Подробный анализ, приведенный в работе [351] показывает, что тонкая структура F -состояний согласуется с экспериментом при различных наборах параметров μ и δ . К настоящему времени

знак параметра $\delta < 0$ можно считать установленным, однако вопрос о конкретных значениях параметров δ и μ по-прежнему открыт и требует дальнейших исследований. В полупроводниках с другой симметрией зон тонкая структура экситонных состояний может быть иной, однако, ее картину также можно получить при помощи симметричного анализа.

5.3 Скейлинг параметров экситонных состояний

Кратность вырождения уровней экситона в рамках водородоподобной модели возрастает как квадрат номера уровня n [189], поэтому детальное описание тонкой структуры высоковозбужденных состояний экситона, особенно во внешнем электрическом или магнитном полях представляет большую и часто не оправданную вычислительную сложность. Другим подходом является выявление общих закономерностей, в частности законов, согласно которым масштабируются свойства экситонных состояний с изменением номера уровня, его главного квантового числа. На наличие такого рода масштабных или скейлинговых закономерностей указывает аналогия с атомной физикой, где показано, что экранировка кулоновского потенциала за счет глубоких электронных оболочек может быть включена в описание ридберговских атомов в виде простой модели квантовых дефектов, причем энергия состояний с квантовыми числами n и l записывается в виде [10]

$$E_{nl} = \frac{\mathcal{R}}{(n - \delta_{n,l})^2} \approx \frac{\mathcal{R}}{n^2} \left(1 + \frac{2\delta_l}{n} \right). \quad (5.4)$$

Здесь $\delta_{n,l}$ – квантовый дефект, который, как правило, мал по сравнению с единицей и слабо зависит от n (в рамках квазиклассического описания квантовых дефект возникает как сдвиг главного квантового числа в условии квантования Бора-Зоммерфельда). Таким образом, например, поправки к энергиям ридберговских состояний масштабируются как $1/n^3$. В работе [351] было отмечено, что с определенными ограничениями модель (5.4) применима и к экситонным состояниям в закиси меди, хотя природа квантовых дефектов существенно отличается от

атомной. К отклонениям от водородоподобной серии состояний экситона в Cu_2O приводит, в основном, сложная структура валентной зоны закиси меди, обусловленная спин-орбитальной связью, а также обменное взаимодействие между электроном и дыркой.

Перечисленные выше обстоятельства делают актуальным подробное сравнение скейлинговых закономерностей для ридберговских экситонов в закиси меди и для атомов. В этом параграфе, основанном на работе [A23], исследуются масштабные закономерности для следующих ключевых экситонных параметров:

- энергетическая ширина мультиплета с заданным главным квантовым числом, обусловленная тонкой структурой экситонных состояний в отсутствие внешних полей (т.е. поведение квантовых дефектов);
- во внешнем магнитном поле:
 - величина поля перехода от кулоновского экситона к магнитоэкситону, где электрон и дырка занимают соответствующие уровни Ландау, а кулоновское взаимодействие оказывается малой поправкой;
 - величина магнитного поля, при котором происходит первый резонанс между соседними мультиплетами с разными главными квантовыми числами;
- во внешнем электрическом поле:
 - величина поля, при котором происходит первый резонанс между соседними мультиплетами;
 - энергия антипересечения мультиплетов с разными главными квантовыми числами n в электрическом поле;
 - поляризуемость экситонных состояний;
 - величина электрического поля ионизации.

Для построения теоретической модели скейлинга параметров экситонных состояний использовалась теория возмущений. В качестве невозмущенного взят гамильтониан водородоподобной системы:

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\varepsilon r}, \quad (5.5)$$

где μ – приведенная масса экситона, ε – диэлектрическая проницаемость. Энергия связи экситонных состояний с главным квантовым числом $n \geq 4$ оказывается $\lesssim 5$ meV, что много меньше спинового расщепления валентной зоны $\Delta_{SO} = 134$ meV. Это делает возможным для состояний с $n \geq 4$ учитывать сложную структуру валентной зоны по теории возмущений, где поправки описываются следующим эффективным гамильтонианом:

$$\hat{H}_d = \mathcal{A}p^4 + \frac{e^2}{\varepsilon r^3} [\mathcal{B}_e(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}_e) + \mathcal{B}_h(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}_h)] + \mathcal{C}\delta(\mathbf{r})(\mathbf{s}_e \cdot \mathbf{s}_h). \quad (5.6)$$

Здесь первое слагаемое описывает непараболичность валентной зоны, второе – спин-орбитальное взаимодействие, третье – короткодействующее обменное взаимодействие между электроном и дыркой. В этом разделе мы отвлекаемся от кубической симметрии кристалла и используем сферическое приближение. В рамках теории возмущений первого порядка получены следующие оценки для вкладов в гамильтониан (5.6) [189, 362]:

$$\langle p^4 \rangle_{nlm} = \left(\frac{\hbar}{a_B} \right)^4 \frac{4}{n^3(l+1)}, \quad (5.7a)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nlm} = \frac{1}{a_B^3} \frac{1}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}, \quad (5.7b)$$

$$\langle \delta(\mathbf{r}) \rangle_{nlm} = \frac{\delta_{l,0}^K}{\pi} \frac{1}{a_B n^3}, \quad (5.7c)$$

где $\langle \dots \rangle_{nlm}$ обозначает квантово-механическое усреднение соответствующей величины по волновой функции экситонного состояния $\Psi_{nlm}(\mathbf{r})$, $a_B = \hbar^2 \varepsilon / (\mu e^2) \approx 1.11$ nm – боровский радиус экситона, подходящий для описания серии P -состояний,² $\delta_{a,b}^K$

²Для S -экситонов и, в особенности, для $1S$ -состояния экситона отклонения от водородоподобной модели вследствие смешивания зон и короткодействующего обменного взаимодействия, а также пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости настолько велики, что эффективный боровский радиус $1S$ -состояния экситона оказывается около 0.8 nm, см., например, [363].

– δ -символ Кронекера. В результате вклады в гамильтониан \mathcal{H}_d приводят к сдвигу энергетических уровней и расщеплениям $\propto 1/n^3$. Таким образом, уровни энергии экситона могут быть описаны при помощи независимых от n квантовых дефектов, $\delta_{n,l} \equiv \delta_l$, аналогично тому, как это делается в атомной физике по формуле (5.4).

Таким образом, наличие квантового дефекта приводит к снятию вырождения по величине орбитального момента, имеющему место для атома водорода. Анализ показывает, что основной вклад в величину квантового дефекта для экситонов дает непараболичность валентной зоны. Теоретическая оценка для величины

$$\delta_l \approx \frac{8\gamma_2^2}{m_0^2 \Delta_{SO} \mathcal{R}(l+1)} \left(\frac{\hbar}{a_B} \right)^4. \quad (5.8)$$

находится в хорошем согласии с экспериментальными результатами, приведенными в [A23]: для S экситонов $\delta_{n,l=0} \approx 0.65$, для P -экситонов $\delta_{n,l=1} = 0.34$, для D - и F -состояний 0.18 и 0.12, соответственно. Оценки по формуле (5.8) при $\gamma_2 = 0.8$ [349, 360, 361, 364], [A22] дают $\delta_{n,l=0} = 0.87$, $\delta_{n,l=1} = 0.43$, $\delta_{n,l=2} = 0.28$ и $\delta_{n,l=3} = 0.21$, что находится в разумном согласии с данными экспериментов.

Другим подходом к оценке квантовых дефектов является анализ энергетической ширины мультиплета экситонных состояний с заданным главным квантовым числом n при отсутствии внешних полей. На рис. 5.3(а)-(с) показана вторая производная спектра поглощения в зависимости от приложенного к образцу напряжения. Различное число линий на панелях (а) и (с), соответствующих разной геометрии эксперимента, связано с анизотропией кубического кристалла [365, 366] этот эффект подробно обсуждается ниже в разделе 5.4. На рис. 5.3(d) показана зависимость от главного квантового числа ширины мультиплета состояний с заданным n [в теории эта ширина определяется по порядку величины вторым слагаемым в (5.4)]. На рисунке символы показывают экспериментальные данные с учетом погрешности, сплошная кривая – подгонка со скейлинговой зависимостью, полученной из теоретической модели, заштрихованная область – подгонка экспериментальных данных степенной функцией со свободной степенью с учетом экспериментальной погрешности. Как видно из формулы (5.4), используемая мо-

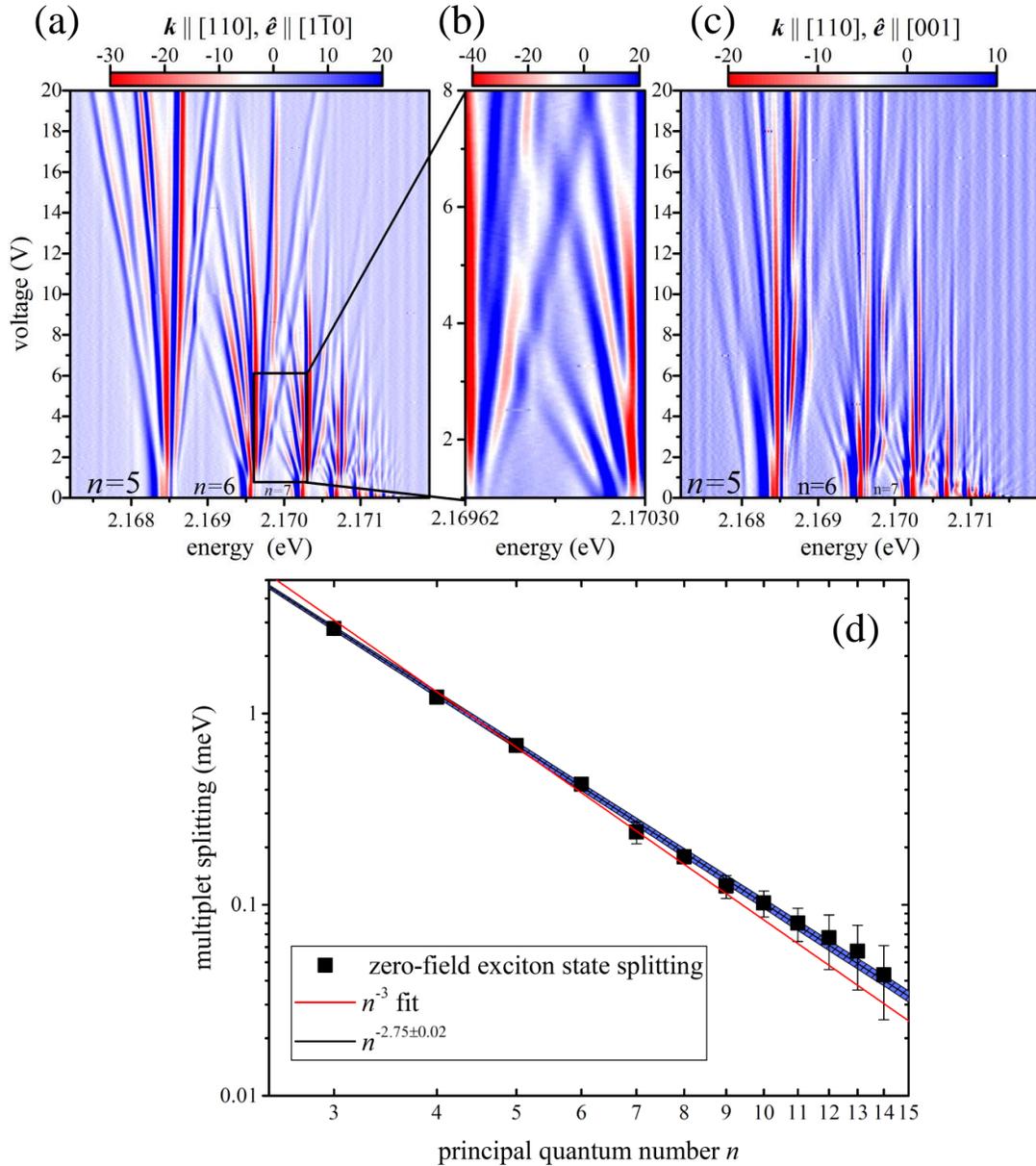


Рис. 5.4: Верхние панели (a-c) показывают вторую производную спектра поглощения в зависимости от приложенного к образцу напряжения. Спектр получен при возбуждении белым светом при температуре $T = 1.3$ K на кристалле Cu_2O с ориентацией $[110]$. Свет поляризован вдоль $[1\bar{1}0]$ на левой панели (a) и вдоль $[001]$ на правой панели (c). На средней панели (b) показана область левой панели, выделенная прямоугольником, для демонстрации антипересечения при первом резонансе между мультиплетами с $n = 6$ и $n = 7$. Слабые вертикальные штрихи на левой и правой панели являются артефактами обработки данных. (d) Зависимость ширины мультиплета, состоящего из состояний с заданным главным квантовым числом. Символы показывают экспериментальные данные с учетом погрешности, сплошная кривая – подгонка со скейлинговой зависимостью, полученной из теоретической модели, заштрихованная область – подгонка экспериментальных данных степенной функцией со свободной степенью с учетом погрешности.

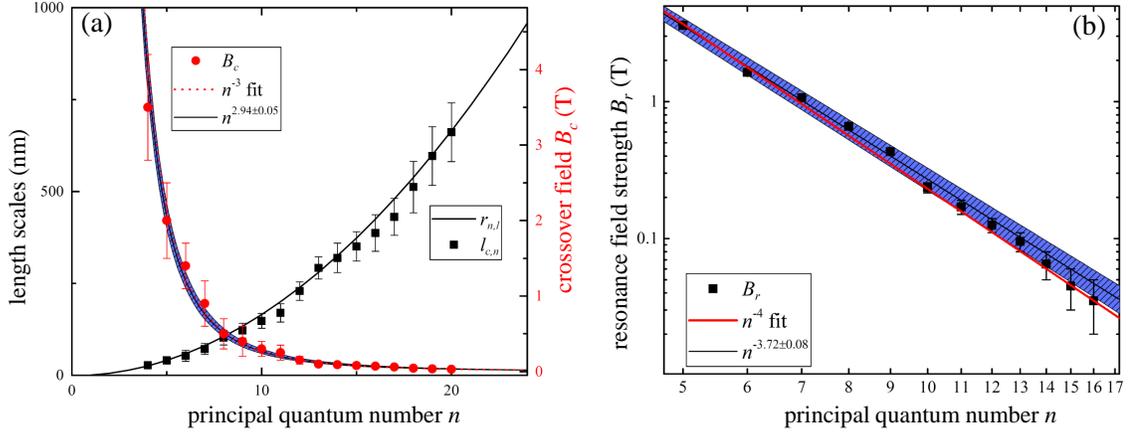


Рис. 5.5: (a) Красные кружки: поле перехода $B_{c,n}$ от кулоновского экситона к магнитоэкситону как функция главного квантового числа. Красная пунктирная кривая – подгонка экспериментальных данных зависимостью $\propto n^{-3}$, полученной из теории. Синие кривые – подгонка экспериментальных данных степенной зависимостью n^{-d} со свободной степенью d (в результате получено $d = -2.94 \pm 0.05$, что соответствует теории в пределах погрешности). Черные квадраты: радиус уровня Ландау $\ell_{c,n}$, (5.10), соответствующий $B_{c,n}$ как функция n . Черная сплошная кривая показывает средний радиус волновой функции согласно водородоподобной модели, Eq. (5.9), $\propto n^2$. Подгонка со свободной степенью здесь не показана, так как она практически полностью совпадает с предсказанием теории. (b) Квадратами в двойном логарифмическом масштабе показана величина магнитного поля резонанса, B_r , при котором происходит первое пересечение между состояниями, принадлежащими мультиплетам с n и $n + 1$, как функция главного квантового числа n . Красная кривая – подгонка экспериментальных данных законом $\propto n^{-4}$. Синие кривые вместе со штриховкой показывают результат подгонки зависимостью со свободной степенью n^{-d} (получено $d = 3.72 \pm 0.08$).

дель предсказывает зависимость ширины мультиплета $\sim n^{-3}$, подгонка экспериментальных данных дает зависимость $n^{-2.75 \pm 0.02}$, при этом кривая $\sim n^{-3}$ лежит в пределах экспериментальной погрешности. Такая скейлинговая зависимость полностью повторяет соответствующую зависимость для ридберговских атомов, за исключением атома водорода, в котором состояния в нулевом поле вырождены по величине орбитального момента.

Перейдем теперь к анализу скейлинговых закономерностей в магнитном поле. В первую очередь такой анализ оказался необходимым для подтверждения оценки боровского радиуса ридберговских экситонов, выполненной в работе [9], где

использовалась известная формула [189]

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{a_B}{2} [3n^2 - l(l+1)] \approx \frac{3a_B}{2} n^2. \quad (5.9)$$

Оценка показывает, что характерный размер состояния с $n = 25$ (максимальное главное квантовое число, надежно разрешаемое в спектре [рис. 5.2(а)]) составляет порядка $1 \mu\text{m}$. Радиус экситона можно оценить независимо проанализировав диамагнитный сдвиг экситона и переход от водородоподобного строения волновой функции экситона к состоянию диамагнитного экситона [367, 368, 369], где движение носителей заряда в плоскости, перпендикулярной полю описывается уровнями Ландау, а вдоль направления поля электрон и дырка слабо связаны кулоновским взаимодействием наподобие того, как это было проанализировано для квазиодномерных систем в разд. 1.2 диссертации. Грубая оценка для магнитного поля, в котором происходит переход к диамагнитному экситону, может быть получена из сопоставления характерного радиуса уровня Ландау с номером n

$$\ell_{c,n} \approx \ell_c n^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar c n}{eB}} \quad (5.10)$$

и размера экситона в нулевом поле $\langle r \rangle_{nlm}$. В первом приближении можно считать, что экситон в состоянии с главным квантовым числом n трансформируется в состояние пары с тем же номером уровня Ландау [370, 371], а переход к диамагнитному экситону имеет место при

$$\ell_{c,n} \approx \langle r \rangle_{nlm}. \quad (5.11)$$

Следует сделать оговорку, что это условие соответствует критерию выполнения адиабатического приближения для движения электрон-дырочной пары вдоль поля [выражение (3) из работы [367]], в отличие от распространенного критерия $(a_B/\ell_c)^2 n^2 \sim 1$ [формула (3) из [369]].

Экспериментально для определения критического поля $B_{c,n}$ перехода к диамагнитному экситону на измеренной зависимости положения данного состояния

от поля B находилась точка перехода от квадратичного диамагнитного сдвига к линейной зависимости от поля, характерной для квантования Ландау. На рис. 5.5(а) красными кружками показано экспериментально найденное $B_{c,n}$, которое демонстрирует зависимость $\propto n^{-3}$ (красный пунктир), соответствующую соотношению (5.11). Подгонка со свободной степенью n^{-d} дает $d = -2.94 \pm 0.05$ (сплошная линия), что подтверждает приведенный выше анализ. Это позволяет без дополнительных параметров найти $\ell_{c,n}$ (черные квадраты), при $n = 20$ радиус экситона составляет около $0.7 \mu\text{м}$, экстраполяция зависимости к $n = 25$ дает величину $\approx 1 \mu\text{м}$, подтверждая оценку, сделанную по формуле (5.9).

Обратимся теперь к резонансам между мультиплетами с главными квантовыми числами n и $n+1$, возникающими в магнитном поле. Интересной особенностью экспериментальных данных, представленных в [A23] является то обстоятельство, что при условиях первого резонанса наблюдается пересечение термов. Зависимость резонансного поля B_r от n представлена на рис. 5.5(b). Подгонка экспериментальных данных зависимостью n^{-d} дает $d = 3.72 \pm 0.08$, что существенно отличается от скейлинга $B_r \propto n^{-6}$, известного для ридберговских атомов [10]. Эту зависимость легко понять в рамках водородоподобной модели, представив сдвиг уровня экситона с заданными n и l с точностью до членов $\propto B^2$ в виде [в качестве единицы энергии выступает $2\mathcal{R} = \mu e^4 / (\varepsilon^2 \hbar^2)$, единицы длины – a_B , единицы магнитного поля – $\hbar c / (ea_B^2)$]

$$E_{nl} \approx -\frac{1}{2n^2} + \frac{mB}{2} + A_l n^4 B^2. \quad (5.12)$$

Здесь A_l – не зависит от n , $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ – магнитное квантовое число, и при выводе (5.12) было учтено, что диамагнитный сдвиг

$$\langle r^2 \rangle_{nlm} = \frac{n^2}{2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] \propto n^4 \quad (5.13)$$

для достаточно больших n . Поскольку в спектре доминируют P -экситоны с $l = 1$ (в отличие от атомов где, как правило, изучаются состояния с $l = 0$), то пересечения состояний возникают уже при учете орбитального члена $\propto mB$. Резонансное поле

для ближайших уровней $n, l = n - 1, m = n - 1$ и $n + 1, l = n, m = -n$ можно оценить как

$$B_r(n) \propto \frac{1}{n^4}, \quad (5.14)$$

в хорошем согласии с данными, представленными на рис. 5.5(b). Для атомов вклад $mB/2$ отсутствует и резонансы возникают за счет квадратичного по B диамагнитного сдвига.

Также в работе [A23] были представлены теоретические и экспериментальные результаты по скейлинговым закономерностям при наличии внешнего электрического поля \mathbf{F} . Из данных по квадратичному эффекту Штарка (подробно электрооптические явления на экситонах в закиси меди анализируются в разд. 5.4 и 5.5)

$$\Delta E_{nl}^{(2)} = -\alpha_{nl} F^2,$$

была вычислена поляризуемость экситонов α_{nl} в зависимости от главного квантового числа для серий S - и P -состояний. В рамках водородоподобной модели квадратичный эффект Штарка возникает за счет смешивания мультиплетов с различными n , а поляризуемость масштабируется как $\alpha_{nl} \propto n^6$ [189]. Отличия от водородоподобной модели приводят к расщеплению состояний экситона с различными значениями углового момента при фиксированном n в нулевом поле, что обеспечивает квадратичный по полю штарковский сдвиг в рамках одного мультиплета. С учетом того, что матричные элементы координаты r масштабируются как n^2 (ср. с (5.9)), а зазоры между уровнями в рамках мультиплета как $1/n^3$ (ср. с (5.4)), то скейлинговый закон для поляризуемости имеет вид

$$\alpha_{nl} \propto n^7. \quad (5.15)$$

Также в режиме эффекта Штарка анализировались величины резонансных полей, при которых наблюдаются антипересечения (ср. с резонансами в магнитном поле) уровней с соседними n , соответствующие $F_r \propto n^{-5}$ в согласии с развитой моделью, величины энергий антикорсингов в резонансе $\delta E_{ac} \propto n^{-4}$, а также скейлинг для

Таблица 5.1: Сравнение скейлинговых законов (от главного квантового числа n) для ридберговских атомов и ридберговских экситонов.

	ридберговские атомы	ридберговские экситоны
<i>Нулевое поле</i> расщепление мультиплета	$\propto n^{-3}$	$\propto n^{-3}$
<i>Электрическое поле</i> поляризуемость	$\propto n^7$ ($\propto n^6$ для атома водорода)	$\propto n^7$
поле резонанса состояний из мультиплетов с n и $n + 1$	$\propto n^{-5}$	$\propto n^{-5}$
энергия антипересечения	$\propto n^{-4}$	$\propto n^{-4}$
поле ионизации	$\propto n^{-4}$	$\propto n^{-4}$
<i>Магнитное поле</i> поле перехода к магнитоэкситону	$\propto n^{-3}$	$\propto n^{-3}$
поле первого резонанса состояний из мультиплетов с n и $n + 1$	$\propto n^{-6}$	$\propto n^{-4}$

поля диссоциации мультиплета (подробная теория диссоциации ридберговских экситонов в статическом электрическом поле приведена в разд. 5.5) $F_i \propto n^{-4}$. Основные скейлинговые зависимости для ридберговских атомов и экситонов приведены в таблице 5.1

5.4 Эффект Штарка

Наиболее ярко особенности ридберговских атомов и экситонов проявляются во внешних полях. Например, как уже отмечалось выше, поляризуемость экситона растет с главным квантовым числом как n^7 , см. выражение (5.15) и таб. 5.1. Это приводит к гигантскому отклику высоковозбужденных состояний экситона на внешнее электрическое поле. В этом параграфе, составленном по результатам работы [A24], исследуются особенности электрооптического отклика ридберговских экситонов в закиси меди. Для полноты картины отметим, что влияние магнитного поля на возбужденные состояния экситонов в Cu_2O изучалось в работах [350, 372, 373, 374, 375].

Уже в ранних работах [346, 365, 366, 376, 377, 378, 379, 380], последовавших за пионерской статьей Е.Ф. Гросса и Н.А. Каррыева [8], были выполнены исследования влияния внешних электрических и магнитных полей, а также упругих

деформаций кристалла на спектр экситонов в закиси меди. Одним из ярких электрооптических явлений, обнаруженных на экситонах Cu_2O было наблюдение оптической анизотропии кубического кристалла, связанной с проявлением квадрупольных переходов [381]. Ряд основных особенностей экситонных спектров и эффекта Штарка на экситонах в закиси меди был понят в 1970-е годы [366], однако развитие экспериментальных методик оптической спектроскопии с высоким разрешением и значительное продвижение в методах расчетов экситонных состояний открыли новые возможности для количественного описания спектров экситонов во внешнем электрическом поле.

Электрическое поле, как известно, смешивает состояния экситона с огибающими волновыми функциями относительного движения противоположной четности (с орбитальным квантовым числом, отличающемся на единицу), что делает оптически активными в дипольном приближении четные состояния, $S-$, $D-$ и т.д., запрещенные в дипольном приближении в нулевом поле. Наличие сложной валентной зоны, спин-орбитального взаимодействия, обменного взаимодействия, кубической симметрии кристалла, и т.д., приводит к появлению богатой тонкой структуры экситонных состояний в электрическом поле [348, 366]. При этом мультиплеты, сформированные состояниями с разными главными квантовыми числами n , вообще говоря, нельзя рассматривать независимо: как отмечалось в разделе 5.3 для $n \geq 3$, расщепление между соседними мультиплетами оказывается достаточно малыми, чтобы электрические поля, необходимые для пересечения состояний, происходящих из соседних мультиплетов были легко достижимы в лабораторных условиях. Кроме того, в электрическом поле очень ярко проявляются отличия экситонных состояний от водородоподобной модели. Как хорошо известно [189] для кулоновского потенциала межчастичного взаимодействия и параболических зон уравнение Шредингера относительного движения зарядов при наличии электрического поля допускает разделение переменных в параболической системе координат, это приводит к независимым сериям уровней от мультиплетов с различ-

ными n . Отклонения от водородоподобной модели приводят к антипересечению состояний (см. выше, а также [A24], [A23]). Более того, в электрическом поле, вообще говоря, пропадает дискретный спектр состояний относительного движения, происходит ионизация экситонов. Параметрически поля, в которых проявляются антипересечения мультиплетов, и ионизация экситонов отличаются (их величины масштабируются с главным квантовым числом как $1/n^5$ и $1/n^4$, соответственно, поэтому существует область полей, в которых эффектами ионизации (рассмотренными ниже в разд. 5.5) можно пренебречь, а тонкая структура экситонных уровней уже очень богата.

В работе [A24] представлены результаты подобного экспериментального и теоретического исследования эффекта Штарка для экситона в закиси меди для состояний с $n = 3 - 5$ в геометрии на пропускание. Для приложения электрического поля образец помещался в плоский конденсатор так, что электрическое поле было направлено вдоль оптической оси системы: $\mathbf{F} \parallel \mathbf{k}$, в противоположность ранним работам [346, 365, 366], в которых использовалась геометрия $\mathbf{F} \perp \mathbf{k}$. Ключевая особенность экспериментов состояла в необходимости прикладывать к образцу существенные электрические поля без создания упругих напряжений, что достигалось использованием специального держателя [382], [A24]. Здесь представлены и описаны результаты для двух образцов, в обоих случаях внешнее электрическое поле было приложено вдоль нормали образца: (1) $\mathbf{F} \parallel \mathbf{k} \parallel [001]$, для данной ориентации две ортогональные линейные поляризации света $\mathbf{e} \parallel [100]$ и $\mathbf{e} \parallel [010]$ эквивалентны, и (2) $\mathbf{F} \parallel \mathbf{k} \parallel [110]$, для которой поляризации света $\mathbf{e} \parallel [001]$ и $\mathbf{e} \parallel [0\bar{1}0]$ в кристалле с группой симметрии O_h оказываются неэквивалентными.

Влияние внешнего статического электрического поля на состояния покоящегося экситона описывается эффективным гамильтонианом [348, 365]

$$\mathcal{H}_E = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{F}, \quad (5.16)$$

действующим на плавные огибающие, где \mathbf{r} – координата относительного движения электрона и дырки, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$, e – заряд электрона. В рамках дипольного

приближения и в отсутствии поля оптический отклик кубического кристалла изотропен, тензор диэлектрических проницаемостей сводится к скаляру, $\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon\delta_{\alpha\beta}$. Приложение электрического поля кардинально меняет ситуацию. При $\mathbf{F} \parallel [001]$ (образец 1), симметрия системы “образец+поле” понижается с кубической группы O_h до группы C_{4v} . Если же поле приложено вдоль направления $[110]$ или эквивалентного ему, как это имеет место в образце 2, то симметрия понижается еще сильнее, до точечной группы C_{2v} . Экспериментальные спектры экситонного поглощения в электрическом поле для различных геометрий эксперимента, представленные на рис. 5.6 и 5.7 (средние и нижние панели), наглядно демонстрируют такую анизотропию электрооптических свойств кубического кристалла.

Для теоретического описания экспериментальных результатов, полученных при изучении эффекта Штарка для экситона была использована модель, сформулированная в разд. 5.3, которая учитывает расщепление состояний экситона с различными значениями орбитального квантового числа в нулевом поле (ср. с [365], где в расчете также учитывается расщепление экситонных мультиплетов в нулевом поле, но рассматриваются только смешивание P -состояния экситона с S - и D -состояниями внутри одного мультиплета). Спин-орбитальное и обменное взаимодействие, эффекты кубической симметрии кристалла, а также взаимодействие с внешним электрическим полем учтены по теории возмущений. Для этого был использован базис экситонных состояний

$$|n, l, m, s_e, s_h\rangle = |n, l, m\rangle|s_e, s_h\rangle = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|s_e, s_h\rangle, \quad (5.17)$$

где $r = |\mathbf{r}|$, ϑ и φ – полярный и азимутальный углы вектора \mathbf{r} , $R_{nl}(r)$ – водородоподобные радиальные огибающие, $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ – сферические гармоники, а множитель $|s_e, s_h\rangle$ описывает произведение блоховских амплитуд электрона и дырки в Γ -точке зоны Бриллюэна, $s_e, s_h = \pm 1/2$. Эффективный гамильтониан записываем в виде [ср. с (5.5), (5.6)]

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{so} + \mathcal{H}_{exch} + \mathcal{H}_{cubic} + \mathcal{H}_E, \quad (5.18)$$

где часть \mathcal{H}_0 учитывает наряду с водородоподобным гамильтонианом вклады

от непараболичности спектра, \mathcal{H}_{so} описывает спин-орбитальное взаимодействие, \mathcal{H}_{exch} – обменное взаимодействие, и \mathcal{H}_{cubic} – поправки, связанные с кубической симметрией кристалла. Матричные элементы диагональной части гамильтониана

$$\langle n, l, m, s_e, s_h | \mathcal{H}_0 | n, l, m, s_e, s_h \rangle = E_{nl}^0, \quad (5.19)$$

определяются квантовыми дефектами (5.4). Для упрощения модели спин-орбитальное взаимодействие учитывается лишь в валентной зоне

$$\Delta_{nl}^{(so)}(\hat{\mathbf{s}}_h \cdot \hat{\mathbf{l}}), \quad (5.20)$$

где $\Delta_{nl}^{(so)}$ – соответствующие константы, $\hat{\mathbf{s}}_h = \boldsymbol{\sigma}_h/2$ – оператор спина дырки, $(\sigma_{h,y}, \sigma_{h,z})$ – набор матриц Паули, действующих в пространстве дырочных блоховских амплитуд Γ_7^+ , $\hat{\mathbf{l}} = (l_x, l_y, l_z)$ – оператор орбитального углового момента (в частности, $\hat{l}_z Y_{lm} = m Y_{lm}$).

Отметим, что эффективный гамильтониан $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{so}$ вполне аналогичен соответствующему гамильтониану для ридберговских атомов [383]. Естественно, он обладает сферической симметрией и позволяет классифицировать состояния в атомной номенклатуре согласно главному квантовому числу n , орбитальному моменту l и полному моменту f , где $\hat{\mathbf{f}} = \hat{\mathbf{s}}_h + \hat{\mathbf{l}}$, а также z -компоненты f_z и компоненты электронного спина s_e . Собственные функции и энергии гамильтониана \mathcal{H}_1 записываются в виде [189]

$$|n, l, f, f_z, s_e\rangle = \sum_{m, s_h} C_{lm; 1/2s_h}^{ffz} |n, l, m, s_e, s_h\rangle, \quad (5.21a)$$

$$E_{nlf}^1 = E_{nl}^0 + \frac{\Delta_{nl}^{(so)}}{2} [f(f+1) - l(l+1) - 3/4]. \quad (5.21b)$$

Здесь $C_{lm; 1/2s_h}^{ffz}$ – коэффициенты Клебша-Гордана.

Оставшиеся вклады \mathcal{H}_{exch} и \mathcal{H}_{cubic} учитывают специфику экситонов в полупроводниках. В модели учитывается лишь короткодействующая часть обменного взаимодействия [384] (дальнодействующей частью для “запрещенных” экситонов

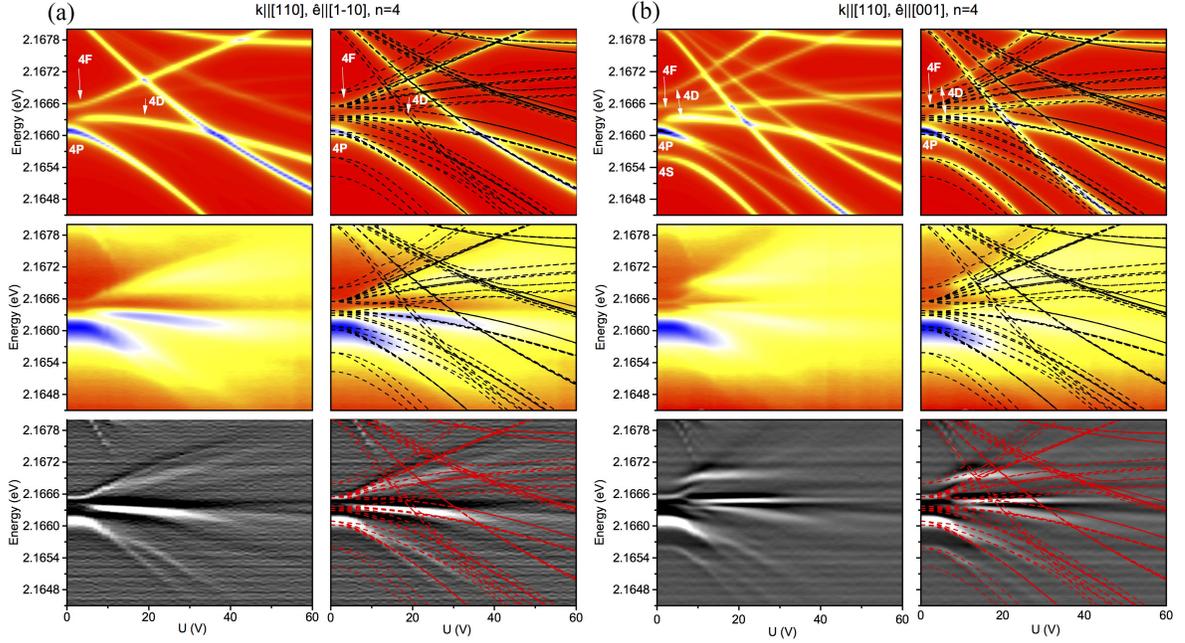


Рис. 5.6: Спектр поглощения для состояния экситона с $n = 4$ для геометрии $\mathbf{F}||\mathbf{k}||[110]$ и поляризации света (a) $\mathbf{e}||[1-11]$ и (b) $\mathbf{e}||[001]$. Верхние панели – результаты расчета, средние – результаты эксперимента, нижние – вторая производная от экспериментально измеренного спектра. На правых панелях штриховыми кривыми показаны все собственные состояния экситона (включая оптически запрещенные). При пересчете напряжения в элеткрическое поле использовался подгоночный фактор, учитывающий перезарядку поверхности кристалла, подробнее см. в [A24].

можно пренебречь, см. подробнее в [349, 385, 386]). С учетом того, что S - и D -экситоны (симметрии Γ_5^+ суммарный угловой момент электрона и дырки $\mathbf{J} = \hat{\mathbf{s}}_e + \hat{\mathbf{f}}$ равен 1) в закиси меди смешаны [352], здесь учитывается короткодействующий вклад как для S -, так и для D -состояний. Он параметризуется двумя константами J_n^s и J_n^d , соответственно:

$$J_n^S(\hat{\mathbf{s}}_e \cdot \hat{\mathbf{s}}_h), \quad J_n^D(\hat{\mathbf{s}}_e \cdot \hat{\mathbf{f}}). \quad (5.22)$$

Смешивание S - и D -экситонов с $J = 1$ характеризуется двумя параметрами

$$J_n^{SD} = \langle nS, J = 1, J_z | \mathcal{H}_{exch} | nD_{3/2}, J = 1, J_z \rangle, \quad (5.23)$$

где J_z – z -компонента полного углового момента пары \mathbf{J} . Здесь используются заимствованные из атомной физики обозначения S_M, P_M, D_M, \dots , где нижний индекс M

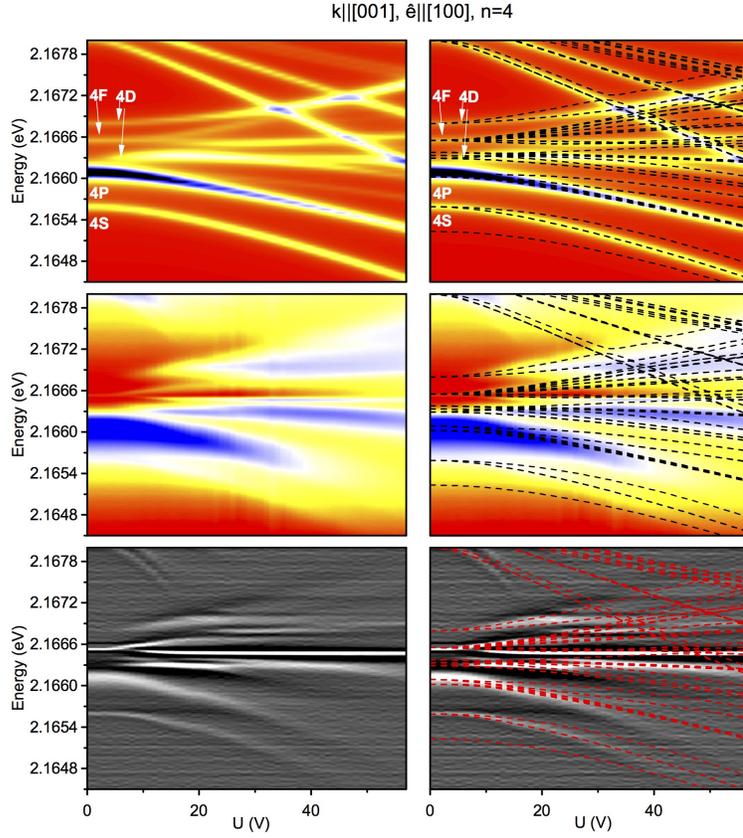


Рис. 5.7: То же, что на рис. 5.6 но для $\mathbf{F}||\mathbf{k}||[001]$ и $\mathbf{e}||[100]$.

описывает угловой момент дырки в сложной зоне. Члены \mathcal{H}_{cubic} понижают симметрию системы до точечной группы O_h и приводят к расщеплению экситонных состояний с заданным полным угловым моментом $\hat{\mathbf{f}}$. Мы параметризуем матричные элементы \mathcal{H}_{cubic} в базисе состояний с заданным f согласно

$$\mathcal{H}_{cubic,nd} = \frac{\delta_{cubic,nd}}{18} (\hat{f}_x^4 + \hat{f}_y^4 + \hat{f}_z^4). \quad (5.24)$$

Выражение (5.24) выписано для набора состояний $D_{5/2}$, которые преобразуются по приводимому представлению $\Gamma_8^+ + \Gamma_6^+$, $\delta_{cubic,nd}$ – параметр. Аналогичные инварианты учитывались и для других состояний. Микроскопически причина такого расщепления заключается в различии параметров Латтинжера γ_2 и γ_3 в гамильтониане (5.3), описывающем валентную зону, см. разд. 5.2.

Для расчета оптических спектров кристалла вычислялись матричные элемен-

Таблица 5.2: Энергии (в eV) S - и D -экситонов. Для состояний с $n = 6$ оптимизация энергий не проводилась.

n	$E(S_{1/2})$	$E(P_{3/2})$	$E(P_{1/2})$	$E(D_{3/2})$	$E(D_{5/2})$
3	2.1607	2.16135	2.1608	2.1622	2.16249
4	2.16577	2.16609	2.16602	2.1664	2.1664
5	2.16808	2.16829	2.16827	2.16847	2.16848
6	2.1693	2.1694	2.16939	2.16955	2.16949

Таблица 5.3: Энергии (в eV) F - и H -экситонов.

n	$E(F_{5/2})$	$E(F_{7/2})$	$E(G_{7/2})$	$E(G_{9/2})$	$E(H_{9/2})$	$E(H_{11/2})$
4	2.16655	2.16655	-	-	-	-
5	2.16853	2.16853	2.16861	2.16861	-	-
6	2.1696	2.1696	2.16965	2.16965	2.1697	2.1697

ты полного гамильтониана (5.18), полученная матрица диагонализировывалась численными методами и рассчитывался спектр мнимой части диэлектрической проницаемости образца по общему выражению

$$\mathcal{A}(E; \hat{e}) = \sum_{N_x} \frac{|M(N_x; \hat{e})|^2}{(E - E_{N_x})^2 + \Gamma_{N_x}^2}, \quad (5.25)$$

где $M(N_x; \hat{e})$ – матричный элемент оптического перехода в соответствующее состояние. В расчете были учтены как дипольные, так и квадрупольные переходы, матричные элементы которых вычислялись по приведенным ниже правилам. Для дипольного перехода, сопровождающегося возбуждением P -экситона с огибающей $\Phi_{n,\beta}$, $\beta = x, y, z$, матричный элемент γ -компоненты дипольного момента записывается как [21, 349, 365]

$$\langle \mathcal{S} | \hat{d}_\gamma | \mathcal{U}_\alpha \Phi_{n,\beta} \rangle = \varkappa_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{D} \left(\frac{R_{n1}(r)}{r} \right)_{r \rightarrow 0}. \quad (5.26)$$

Здесь \mathcal{U}_α орбитальная базисная функция вершины валентной зоны $\mathcal{U}_x \propto \mathcal{Y}\mathcal{Z}$, $\mathcal{U}_y \propto \mathcal{Z}\mathcal{X}$, $\mathcal{U}_z \propto \mathcal{X}\mathcal{Y}$, \mathcal{D} – параметр. Аналогично, для квадрупольного перехода в S -экситонное состояние

$$\langle \mathcal{S} | iz\hat{d}_\gamma | \mathcal{U}_\alpha \Phi_{n,s} \rangle = \varkappa_{\alpha z\gamma} i\mathcal{Q}R_{n0}(0), \quad (5.27)$$

где \mathcal{Q} – параметр. В расчете ширина линий была взята несколько меньше наблюдаемой в эксперименте для более наглядного сравнения. На рис. 5.6 и 5.7 показано сопоставление результатов расчета и эксперимента для $n = 4$ для различной геометрии эксперимента. Величины использованных параметров приведены в таблицах 5.2 – 5.5, $ka_B\mathcal{Q}/\mathcal{D} = 0.2$ (k – волновой вектор света на частоте основного экситонного резонанса). Положения уровней энергии в нулевом поле были взяты из эксперимента, величины остальных параметров были оптимизированы для лучшего согласия расчета и эксперимента. В расчете учтены все состояния экситона с $n = 1 \dots 6$, в том числе учтено смешивание между состояниями, происходящим из мультиплетов с различными главными квантовыми числами. Анализ результатов показал существенную зависимость спектра экситона в электрическом поле как от ориентации электрического поля относительно кристаллических осей, так и от поляризации света в случае $\mathbf{F}||\mathbf{k}||[110]$.

Таблица 5.4: Параметры обменного взаимодействия (в μeV).

n	J_n^S	$J_{n,3/2}^D$	J_n^{SD}
3	1320	-160	1228.5
4	718.2	-30	552
5	108	-14	209.7
6	10.8	-1.4	21

Таблица 5.5: Параметры кубической анизотропии (в μeV).

n	3	4	5	6
$\delta_{cubic,nd}$	-220	-40	-20	0

Подробное сравнение расчетов и экспериментальных данных показано на рис. 5.6 и 5.7 для энергетической окрестности состояний с $n = 4$. Для геометрии $\mathbf{F}||\mathbf{k}||[110]$ и $\mathbf{e}||[001]$, в отличие от $\mathbf{e}||[1\bar{1}1]$, разрешены как дипольные, так и квадрупольные переходы. При этом S - и D - экситоны, которые смешиваются обменным взаимодействием уже в нулевом электрическом поле, оказываются оптически

активными, см. рис. 5.6. Для света, распространяющегося вдоль кубической оси $\mathbf{F} \parallel \mathbf{k} \parallel [001]$ (рис. 5.7), все поляризации света оказываются эквивалентными. Как видно из рисунка, результаты расчета хорошо описывают экспериментальные данные. При приложении электрического поля экситонные состояния расщепляются и сдвигаются. Из рисунка также можно видеть, что при некотором приложенном напряжении происходит сближение верхних состояний с $n = 4$ и нижних состояний с $n = 5$. Картина уровней оказывается исключительно богатой, однако сопоставление численного расчета с данными эксперимента позволяет определить происхождение основных линий в спектре и детально описать их эволюцию с увеличением электрического поля. Подчеркнем, что выполненные расчеты (учитывающие состояния экситонов с n от 1 до 6) требуют заметных вычислительных затрат даже с учетом того, что параметры эффективного гамильтониана определяются из сопоставления с экспериментом. Кроме того, с ростом n значительно сужается диапазон полей, в которых можно пренебрегать диссоциацией экситонов. Поэтому для состояний экситона в ридберговском режиме (условно говоря, при $n \gtrsim 6$) такое полное описание спектров представляется избыточным, но при этом требуется детальное исследование эффекта диссоциации экситонов, представленное в следующем разделе.

5.5 Диссоциация экситонов под действием статического электрического поля

Экспериментальные данные, приведенные на рис. 5.6 и 5.7, показывают, что помимо штарковских сдвигов и сложных антипересечений уровней, в достаточно больших электрических полях линии экситонов резко уширяются и практически пропадают из спектра. Это есть свидетельство эффекта ионизации экситона: в сильном электрическом поле электрон и дырка могут туннелировать под барьером, сформированным потенциалами кулоновского притяжения и внешнего электрического поля. Расчет спектра поглощения экситонов с учетом эффекта ионизации является

исключительно сложной задачей, для этого, как правило, используется квазиклассическое приближение [189]. В полупроводниках с “разрешенным” междузонным оптическим переходом задача об электропоглощении с учетом экситонного эффекта была решена И.А. Меркуловым [387] и несколько более общим методом (позволяющим корректно найти коэффициент поглощения в области междузонных переходов) А.Г. Ароновым и А.С. Иоселевичем [388]. Ионизация P -экситонов изучалась в последующей работе [389]. В этих статьях использовалась водородоподобная модель, а эффектами сложной структуры зон пренебрегалось. Фактически параллельно с этим велись расчеты ионизации атома водорода, решение для состояний с произвольными n и l было получено С.Ю. Славяновым [390]. Учет отклонений спектра от водородоподобной серии исследовалось, насколько автору известно, лишь для атомов в модели квантовых дефектов (см., например, [391]).

На рис. 5.8(а) представлены измеренные экспериментально спектры поглощения в области экситонных состояний с главным квантовым числом $n = 5$ и 6. Эксперименты проводились на кристалле закиси меди, ориентированном вдоль направления [110]. Он был помещен в держатель, обеспечивающий отсутствие упругих напряжений, с помощью которого можно было прикладывать электрическое поле при температуре $T = 1.3$ К [382], [A24]. Поле было приложено в продольной конфигурации, т. е. вдоль оптической оси, совпадающей с направлением [110]. Поглощение измерялось с помощью широкополосного источника белого света. Свет был линейно поляризован вдоль направления [001], так что помимо дипольно-разрешенных P -экситонов можно было наблюдать квадрупольно-разрешенные переходы, связанные с S - и D -экситонами [A24]. После прохождения через кристалл белый свет диспергировался двойным монохроматором и детектировался CCD камерой, при этом обеспечивалось спектральное разрешение лучше $10 \mu\text{eV}$.

В спектре поглощения в нулевом поле главными являются P -экситоны с $n = 5$ и $n = 6$, каждый из которых сопровождается слабой высокоэнергетической особенностью, связанной с F -экситонами, исследованными в разд. 5.2. Как и ранее,

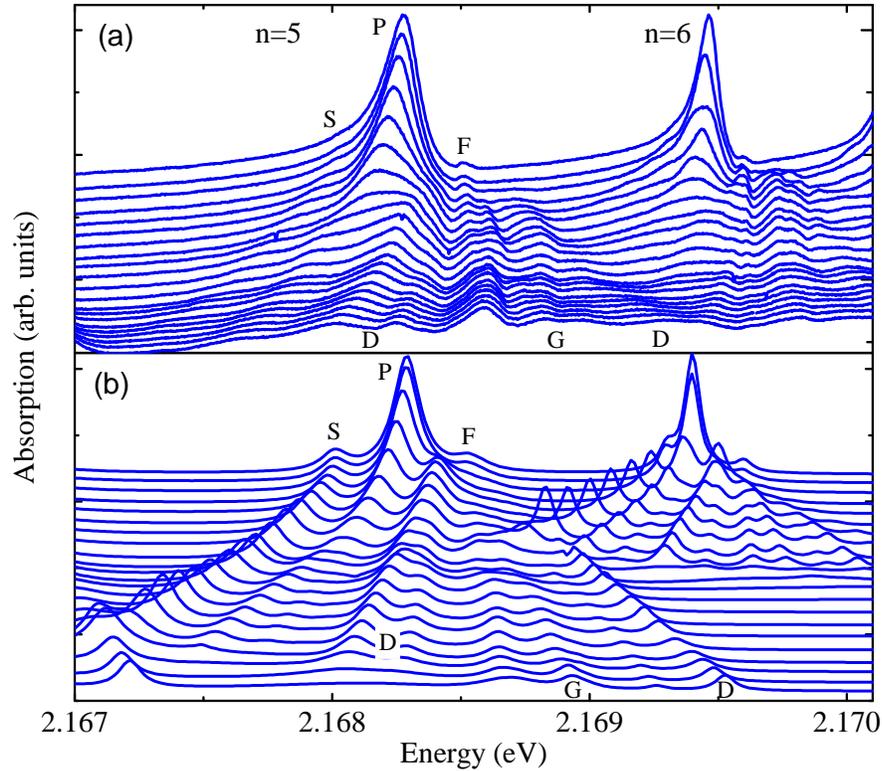


Рис. 5.8: (а) Спектр поглощения в диапазоне энергий экситонов с $n=5$ и 6 при различных напряжениях, возрастающих от $U = 0$ до 20 В с шагом в 1 В, соответствующих электрическому полю, приложенному вдоль оси $[110]$. Свет был линейно поляризован по оси $[001]$. (б) Рассчитанный спектр поглощения для состояний с $n = 5$ и 6 .

здесь используются атомные обозначения S, P, D, \dots для экситонных состояний с орбитальным моментом $l = 0, 1, 2, \dots$, хотя эти состояния смешиваются даже в нулевом поле из-за кристаллического окружения, а также дополнительно смешиваются в электрическом поле. При приложении поля поведение мультиплетов схожее, поэтому, в качестве примера, подробно обсудим мультиплет с $n = 5$, поскольку для него легче разрешить изменения в спектре, поскольку в нем меньше спектральных линий чем в мультиплетах с большими n . С ростом электрического поля P -экситон демонстрирует квадратичный штарковский сдвиг в сторону меньших энергий, а F -экситон слабо смещается в сторону более высоких энергий. Также в спектре появляются дополнительные особенности из-за смешивания состояний, обусловленного понижением симметрии индуцированной полем. Например,

на низкоэнергетической стороне P -экситона имеется слабое плечо, связанное с квадрупольно-разрешенным S -экситоном, которое становится более выраженным в ненулевом поле. Оно сдвигается в основном параллельно P -экситону. Такое поведение характерно для эффекта Штарка на экситонных состояниях, см. разд. 5.4. С ростом поля обе экситонные линии пропадают из спектра, причем лежащий ниже по энергии S -экситон исчезает при меньшей напряженности поля, чем P -экситон.

Между P - и F -экситонами появляется дублет D -состояний, сила осциллятора которого достигает максимума в промежуточных полях, а затем уменьшается с ростом поля. Примечательно, что эти две особенности, расположенные выше по энергии S - и P -экситонов, сохраняются даже в том диапазоне полей, где S и P -экситоны уже практически исчезли. При более высоких энергиях в виде широких полос, составленных из множества отдельных линий, наблюдаются F - и G -экситоны. Заметим, что в спектре присутствует особенность, связанная с еще одним D -экситоном, расположенным выше этих состояний, который сильно сдвигается в сторону больших энергий с увеличением напряжения. Опять же, состояния данного мультиплета с большей энергией сохраняются в спектре вплоть до максимальных напряжений, приложенных к образцу.

Аналогичная эволюция спектров в электрическом поле наблюдается для мультиплета с главным квантовым числом $n = 6$. Однако, для достижения сопоставимых расщеплений требуется приложение меньших напряжений. Тем не менее, особенности при больших энергиях более стабильны, чем особенности на низкоэнергетической стороне мультиплета. Кроме того, диссоциация происходит в меньших полях, чем те, которые требуются для экситонов с $n = 5$, поэтому мультиплет с $n = 6$ полностью исчезает при тех напряжениях, когда мультиплет с $n = 5$ еще заметен. Аналогичное поведение наблюдается на состояниях с главным квантовым числом $n = 10$ (экспериментальные данные для мультиплетов с $n = 8 \dots 10$ приведены ниже на рис. 5.12).

Таким образом, на основе представленных экспериментальных данных мож-

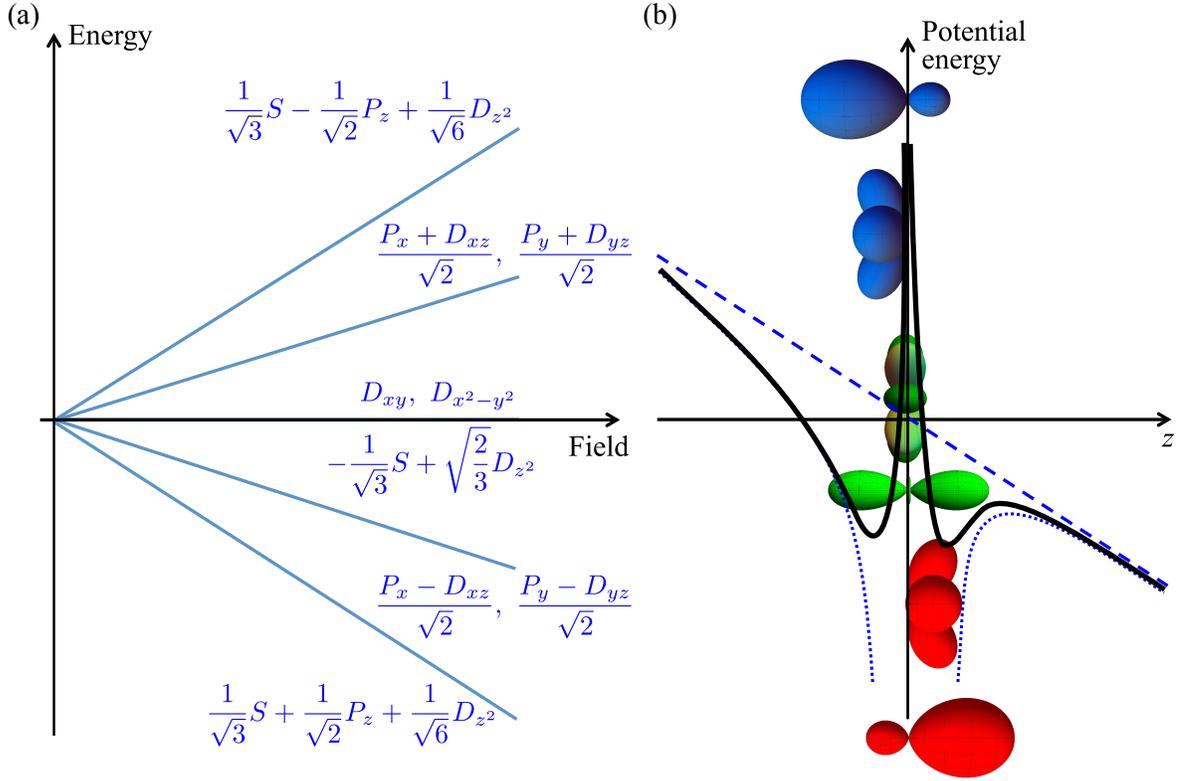


Рис. 5.9: (а) Схема штарковских уровней для мультиплета с $n = 3$. Уровни обозначены по собственным функциям нулевого приближения в электрическом поле. (б) Схематичное изображение собственных функций и потенциала в электрическом поле. Более низкие (высокие) по энергии состояния обозначенные красным (синим) цветом, имеют более высокую электронную плотность при $z > 0$ ($z < 0$), т. е. ближе к барьеру (дальше от барьера). С другой стороны, состояния, не приобретающие дипольного момента (обозначены зеленым), симметричны по отношению к направлению приложения поля и не испытывают энергетического сдвига.

но заключить, что с ростом n поле, необходимое для диссоциации, уменьшается с увеличением главного квантового числа. Такое поведение вполне ожидаемо из общих соображений. Напротив, диссоциация в пределах мультиплета с данным n демонстрирует неочевидное поведение: состояния с большими энергиями (т.е. меньшими энергиями связи) более устойчивы ко внешнему электрическому полю, чем линии с меньшими энергиями. Такое поведение требует теоретического описания, которое было развито в работах [A25], [A26] и представлено ниже.

Качественное понимание эффекта можно получить в рамках водородоподобной модели. Рассмотрим базисные состояния в виде (5.17) $\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$,

где ϑ и φ углы радиус-вектора \mathbf{r} в сферической системе координат с осью $z \parallel \mathbf{F}$, $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ – угловые гармоники, $R_{nl}(r)$ – радиальные функции. Радиальное движение (при $\mathbf{F} = 0$) происходит в потенциальном поле, которое содержит помимо кулоновского члена $\propto -1/r$ центробежный вклад $V_c(r) = \hbar^2 l(l+1)/(2\mu r^2)$, действующий на состояния с $l \neq 0$. Электрическое поле понижает симметрию системы, но сохраняет ось вращения z , поэтому при $\mathbf{F} \neq 0$ состояния с различными l , но одним и тем же магнитным квантовым числом m смешиваются. Из состояний $\Psi_{nlm}(\mathbf{r})$ можно составить линейные комбинации, обладающие тем или иным дипольным моментом вдоль поля, как это показано на схеме 5.9 на примере мультиплета с $n = 3$. Приведенные комбинации базисных состояний являются правильными волновыми функциями нулевого приближения по \mathbf{F} в рамках теории возмущений для вырожденных уровней. Наличие электрического поля приводит к эффекту Штарка, причем состояния, дипольный момент которых направлен противоположно полю обладают большей энергией, а состояния, чей дипольный момент направлен по полю – меньшей. Таким образом у более высокоэнергетических состояний плотность вероятности относительного движения электрона и дырки находится дальше от туннельного барьера (рис. 5.9(b), высокоэнергетические “синие” состояния), а у состояний с меньшей энергии плотность вероятности смещена к барьеру (низкоэнергетические красные состояния). В результате, туннелирование оказывается облегченным именно для низкоэнергетических состояний с большей энергией связи, эти состояния ионизируются в более слабых электрических полях, по сравнению с верхними по энергии уровнями мультиплета.³

В рамках водородоподобной модели в гамильтониане экситона в электрическом поле

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon r} - eFz, \quad (5.28)$$

в параболической системе координат можно разделить переменные и ввести базисные функции $\Phi_{m_1 n_2 m}(\mathbf{r})$, характеризуемые “параболическими” квантовыми чис-

³Это явление известно в атомной физике с конца 1920х годов [392].

лами n_1 и n_2 , связанными с главным и магнитным квантовыми числами согласно $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$. При наличии электрического поля в параболических координатах существует регулярная процедура расчета энергий и скоростей ионизации экситонных состояний [189, 387, 388, 389, 393, 394]:

$$E_{n_1 n_2 m}(F) = -\frac{1}{2n^2} + \frac{3}{2}Fn(n_1 - n_2) - \frac{F^2 n^4}{16} [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19], \quad (5.29a)$$

$$\Gamma_{n_1 n_2 m}(F) = \frac{1}{n^3 n_2! (n_2 + |m|)!} \left(\frac{4}{Fn^3} \right)^{2n_2 + |m| + 1} \exp \left[3(n_1 - n_2) - \frac{2}{3Fn^3} \right]. \quad (5.29b)$$

Здесь и далее используются атомные единицы, т.е. удвоенный Ридберг $2\mathcal{R} = \mu e^4 / (\varepsilon^2 \hbar^2)$ – в качестве единиц энергии, боровский радиус $a_B = \hbar^2 \varepsilon / (\mu e^2)$ – в качестве единицы длины, $F_B = 2\mathcal{R} / (|e| a_B)$ – в качестве единицы поля. В штарковских сдвигах учитываются линейные и квадратичные по F вклады, а в затухании $\Gamma_{n_1 n_2 m}(F)$ лишь главные вклады. Отметим, что именно благодаря подбарьерному туннелированию $\Gamma_{n_1 n_2 m} \neq 0$. Формально говоря, в электрическом поле спектр экситона перестает быть дискретным, но его можно приближенно описывать, вводя комплексные энергии $\mathcal{E}_{n_1 n_2 m} = E_{n_1 n_2 m} - i\Gamma_{n_1 n_2 m}$, причем $2\Gamma_{n_1 n_2 m}$ описывает темп ионизации.

Прежде, чем переходить к исследованию зависимости темпа ионизации от положения состояния внутри мультиплета, проанализируем зависимость поля ионизации от главного квантового числа. Для грубой оценки эффекта можно воспользоваться следующим критерием ионизации: состояния пропадает, если его уширение $\Gamma_{n_1 n_2 m}$ становится порядка расстояния до соседнего мультиплета $\propto n^{-3}$. С учетом (5.29b) можно получить

$$F_i(n) = \frac{F^*}{n^4}. \quad (5.30)$$

Эта оценка с константой $F^* \approx 0.2$, найденной численно, соответствует квазиклассическому подходу, в рамках которого состояние считается ионизованным, если для него отсутствует туннельный барьер. Соответствующий скейлинг подтверждается более продвинутыми расчетами [391, 395, 396, 397, 398].

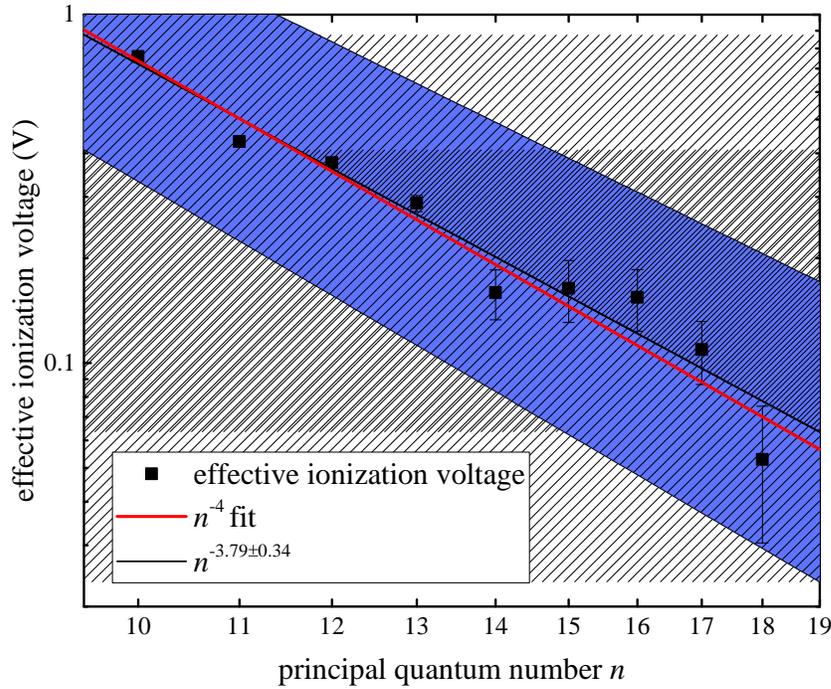


Рис. 5.10: Зависимость напряжения диссоциации от главного квантового числа. Красная кривая показывает подгонку зависимостью n^{-4} . Синяя область соответствует результату подгонки экспериментальных данных со свободной степенью n^{-d} : $d = 3.79 \pm 0.34$.

Экспериментально измеренная зависимость напряжения ионизации от главного квантового числа показана на рис. 5.10. Данные могут быть хорошо описаны зависимостью n^{-4} (5.30). Для сравнения данные также были подогнаны степенной зависимостью n^{-d} . В результате было получено значение $d = 3.79 \pm 0.34$, что находится в хорошем согласии с предсказанным теорией.

Таким образом, с ростом главного квантового числа n поле, необходимое для диссоциации экситонных состояний убывает. Анализ выражений (5.29a) и (5.29b) также показывает, что внутри мультиплета с данным n диссоциация наступает в меньших полях для состояний с меньшей энергией в согласии с качественным рассмотрением, представленным выше. Для количественного описания экспериментальных наблюдений, однако, требуется принять во внимание тонкую структуру экситонных состояний в нулевом поле.

Поскольку аналитическое решение задачи об ионизации ионизации возможно

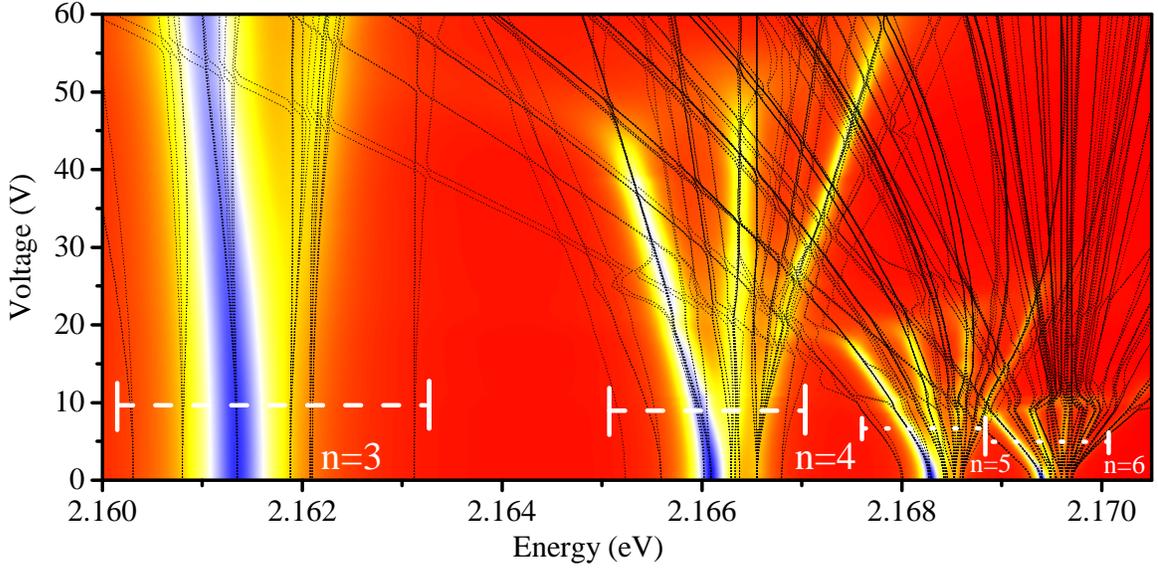


Рис. 5.11: Оптическая плотность кристалла закиси меди, рассчитанная в области экситонных состояний $n = 3 \dots 6$. $\mathbf{F} \parallel [110]$, $\mathbf{e}_1 \parallel [1\bar{1}0]$.

лишь для водородоподобной модели, а численный расчет функций непрерывного спектра крайне трудоемкий (ср. с [399, 400, 401]) был развит приближенный подход, основанный на том факте, что ионизация происходит в полях $F \sim F_i(n)$, где наблюдается развитый эффект Штарка и роль тонкой структуры экситонных состояний, обусловленная сложной структурой зон, спин-орбитальным и обменным взаимодействием уже несущественна. Напротив, эффекты тонкой структуры важны в малых полях, где подбарьерным туннелированием можно пренебречь. Это позволяет ввести затухания экситонных состояний (5.29b) в модель эффективного гамильтониана, использованную выше для описания эффекта Штарка (разд. 5.4). Для этого с помощью разложения водородоподобных функций по функциям в параболической системе координат [10, 391, 402] (общий фазовый множитель опущен):

$$\int d\mathbf{r} \Phi_{n_1 n_2 m}^*(\mathbf{r}) \Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \sqrt{2l+1} \begin{pmatrix} \frac{n-1}{2} & \frac{n-1}{2} & l \\ \frac{n_1 - n_2 + m}{2} & \frac{-n_1 + n_2 + m}{2} & -m \end{pmatrix}, \quad (5.31)$$

можно получить матрицу эффективного гамильтониана, где (в базисе функций $\Phi_{n_1 n_2 m}$) диагональные элементы содержат мнимые добавки (5.29b), а остальные матричные элементы определяются так, как описано в разд. 5.4. Диагонализация

матрицы полученного эффективного гамильтониана \mathcal{H} дает собственные функции Ψ_k и комплексные энергии $\mathcal{E}_k = E_k - i\Gamma_k$ (индекс k нумерует состояния), на их основе рассчитывается спектр поглощения и пропускания в рамках подхода, изложенного в разд. 5.4, выражение (5.25). Эволюция спектра поглощения кристалла Cu_2O в электрическом поле в области экситонных состояний с главным квантовым числом $n = 3 \dots 6$, рассчитанная в рамках изложенного метода, представлена на рис. 5.11. Из рисунка хорошо видна специфика эффекта ионизации: с ростом n для ионизации экситонов требуется все меньшее поле, но внутри мультиплета состояния с меньшей энергией ионизируются в меньших полях.

Сопоставим теорию и эксперимент более подробно. Результаты расчета спектра экситона с учетом эффекта диссоциации для состояний $n = 5$ и $n = 6$ показан на рис. 5.8 (b). Из рисунка видно хорошее согласие между результатами эксперимента и расчета. Состояния мультиплета с большим главным квантовым числом ($n = 6$) диссоциируют в меньших полях по сравнению с состояниями мультиплета с меньшим главным квантовым числом ($n = 5$). Однако, как и в эксперименте, внутри данного мультиплета выскоэнергетические состояния оказываются более стабильными, чем низкоэнергетические.

Приведенный расчет достаточно точно воспроизводит сдвиги линий в диапазоне малых электрических полей. Есть небольшие различия между наблюдаемыми и рассчитанными позициями линий и интенсивностями. Мы подчеркиваем, что мы не стремились к полному согласию теории и эксперимента, а использовали тот же набор установленных материальных параметров для описания полевых дисперсий всех мультиплетов. Отметим, что исследованные диапазоны энергий довольно малы, например, при $n = 5$ ширина мультиплета составляет всего 2 мэВ. Кроме того, наблюдаемые линии имеют значительно большую спектральную ширину, чем в теории, что мы приписываем дополнительным механизмам релаксации, включая энергетическую релаксацию экситонов на фононах. Отметим, что в экспериментальных данных имеются дополнительные спектральные линии, которые

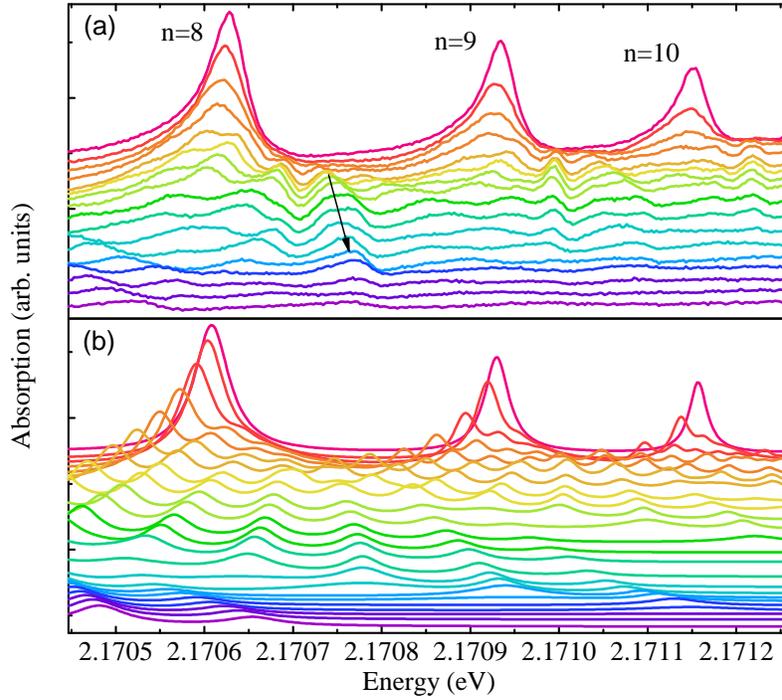


Рис. 5.12: (а) Спектр поглощения в энергетическом диапазоне мультиплетов с $n=8$, 9, и 10 для различных напряжений $U = 0$ (верхняя кривая) до 2 В с шагом 0.2 В, а затем до 9 В с шагом 1 В. Поле $\mathbf{F} \parallel [110]$, $\mathbf{e}_1 \parallel [\bar{1}10]$. Стрелка показывает сложную особенность в спектре поглощения, сформированную состояниями с разными n . (б) Рассчитанные спектры поглощения.

отсутствуют в теории. Из анализа их сдвигов с увеличением электрического поля можно заключить, что в экспериментальном спектре линии P - и D -экситоны, по видимому, расщеплены каждая на две, тогда как в теории оба экситона представлены одной линией. Эти различия могут объясняться отклонениями от идеальной ситуации, возможно, из-за небольшого отклонения ориентации поля от кристаллографической оси $[110]$, образования доменов в кристалле с несколько иными ориентациями, наличия нескомпенсированных зарядов на поверхности и т. д. [A24]. Здесь необходимы дальнейшие исследования, в том числе в отношении возможности получения еще более чистых кристаллов. В остальном экспериментальные особенности хорошо воспроизводятся, в частности, в отношении зависимости поля диссоциации от энергии состояния.

Хорошее согласие между теорией и экспериментом наблюдается и для мультиплетов с $n = 8, 9, 10$ на рис. 5.12. Отметим, что расчеты для состояний с главным

квантовым числом $n = 8 \dots 10$ были выполнены в рамках упрощенной модели, где пренебрегалось спиновыми степенями свободы электрона и дырки и, соответственно, спин-орбитальным и обменным взаимодействиями. Таким образом, спектры могут быть рассчитаны с разумными затратами вычислительных ресурсов. Несмотря на простоту модели, общее поведение спектров все еще близко к такому в эксперименте. Повышенная стабильность состояний на стороне высоких энергий мультиплета с заданным главным квантовым числом хорошо согласуется с экспериментом.

Рисунок 5.12 ярко демонстрирует особенности диссоциации экситонов в поле: с увеличением напряжения мультиплеты исчезают, начиная со стороны высоких энергий (больших n), в то время как внутри мультиплета тенденция меняется на противоположную. Однако четкое разграничение и точное распределение состояний становятся все более затруднительным, в том числе из-за взаимного проникновения состояний из разных n . Кроме того, плотность состояний увеличивается с ростом главного квантового числа n из-за большего допустимого $l \leq n - 1$, а сами уровни оказываются очень близкими по энергии.

5.6 Краткие итоги

В главе 5 получены следующие основные результаты:

- Развита теория тонкой структуры энергетического спектра экситонов в объемных кристаллах закиси меди. На основе симметричного анализа показано, что в однофотонных электро-дипольных процессах наряду с P -состояниями экситона (угловой момент $L = 1$) участвуют экситонные состояния с нечетными огибающими и большими угловыми моментами. В частности, триплет, наблюдающийся в спектре поглощения закиси меди с высокоэнергетической стороны от P -экситонов “желтой” серии начиная с главного квантового числа $n = 4$, обусловлен F -состояниями экситона (орбитальный момент $L = 3$).

Сопоставление теории и эксперимента позволило оценить параметры Латтинжера, описывающие валентную зону в Cu_2O .

- Предложен эффективный гамильтониан, описывающий экситонные состояния с большими квантовыми числами, в котором отклонения от водородоподобной модели, в частности, непараболичность валентной зоны, спин-орбитальное и короткодействующее обменное взаимодействия, а также кубическая симметрия кристалла учитываются по теории возмущений.
- Получены скейлинговые зависимости от главного квантового числа для следующих основных параметров экситонных состояний: (а) энергетической ширины мультиплета в нулевом поле, (б) магнитного и электрического полей первого резонанса между мультиплетами с соседними главными квантовыми числами, (в) величины магнитного поля перехода к магнитоэкситонам, (г) поляризуемостей S - и P -состояний экситонов. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментом. Проанализированы отличия скейлинговых закономерностей для ридберговских экситонов от соответствующих зависимостей для атомов. Также сопоставление теории и эксперимента по скейлингу магнитного поля перехода к магнитоэкситону позволило уточнить размер экситонов: для $n = 20$ эффективный радиус составляет $0.7 \mu\text{m}$.
- Количественно описан эффект Штарка на ридберговских экситонах в кристаллах закиси меди. Развита теория диссоциации экситонов в сильном электрическом поле. В согласии с экспериментом, величина поля диссоциации убывает с ростом главного числа n как n^{-4} , однако в рамках одного мультиплета с фиксированным n более стабильными оказываются состояния экситона, расположенные выше по энергии. Это связано с конкуренцией эффекта перераспределения волновых функций экситона в электрическом поле и туннелирования под барьером, обусловленным кулоновским взаимодействием и внешним полем.

Заключение

В диссертации получены следующие основные результаты:

1. Развита вариационный подход для расчета энергий связи синглетного и триплетного состояний трионов в цилиндрически-симметричной квантовой проволоке во всем диапазоне отношения эффективных масс электрона и дырки m_e/m_h с хорошей точностью. Показано, что для описания X^+ -триона, локализованного в идеальной квантовой проволоке, адиабатическое приближение применимо при $m_e/m_h < 0.2$.
2. Предложен универсальный метод построения пробных функций с небольшим числом подгоночных параметров, позволяющих найти энергию связи основного состояния электрон-дырочных комплексов, локализованных на неоднородностях интерфейсов квантовых ям и квантовых проволок, с хорошей точностью. Наблюдающееся в экспериментах увеличение энергии связи трионов в узких квантовых ямах, а также в квантовых проволоках малого радиуса, по сравнению с расчетным для идеальных структур, может быть объяснено их локализацией на неоднородностях интерфейсов.
3. Развита вариационный метод для построения волновых функций и вычисления энергий связи простейших кулоновских комплексов с учетом сложной структуры зон. Показано, что конкуренция усиления кулоновского взаимодействия и уменьшения эффективной массы может приводить к немонотонной зависимости энергии связи акцептора от ширины ямы или радиуса проволоки.

4. Построена теория эффекта Зеемана в валентной зоне полупроводниковых наноструктур. Предложен метод расчета энергий и g -факторов дырки в квантовой точке эллипсоидальной формы с параболическим или гауссовым гетеропотенциалом и произвольным соотношением между полуосями. Продемонстрирована применимость теории возмущений для описания одноосной анизотропии формы квантовой точки.
5. Показано, что продольный g -фактор дырки в эпитаксиальных квантовых точках III-V на основе четверных твердых растворов определяется, в основном, геометрией точки. Энергия оптического перехода, напротив, определяется, главным образом, составом квантовой точки.
6. Продемонстрирована существенная роль формы и вида гетеропотенциала, а также кристаллической структуры (кубическая или вюрцитная) ядра CdSe на величину g -фактора дырки, локализованной в планарных коллоидных нанокристаллах (наноплателетах) CdSe/CdS с толстой оболочкой.
7. Предложены пробные функции для расчета энергии связи биэкситона в сферически симметричных квантовых точках в предельном случае сильного размерного квантования, позволяющие учесть корреляцию между идентичными носителями заряда. Показано, что значительный вклад в энергию связи биэкситона, локализованного в квантовой точке, вносит корреляция между носителями заряда одного знака.
8. Выполнен расчет энергий электронов и дырок, локализованных в квантовых точках CdSe/ZnSe, выращенных по методу молекулярно-пучковой эпитаксии. Показано, что смещение пика селективно возбуждаемой фотолюминесценции в коротковолновую сторону до $15 \div 20$ meV при энергии 2.6 eV, наблюдающееся экспериментально, может являться следствием существования ферстеровского переноса энергии, осуществляемого с участием возбужденных энергетических уровней.

9. Построена теория экситонов в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах с монослоями дихалькогенидов переходных металлов. Рассчитана экситонная серия в однослойных и двухслойных структурах с учетом диэлектрического контраста. Показано, что в структурах с монослоем экспериментально измеренная экситонная серия может быть описана потенциалом Рытовой-Келдыша с единым набором параметров.
10. Разработана теория строения и энергетического спектра трионов в монослоях дихалькогенидов переходных металлов. Вариационным методом рассчитана энергия связи трионов с учетом диэлектрического контраста. Развита теория тонкой структуры трионных состояний. Разработан вариационный подход для расчета энергий связи трионов в двухслойной ван-дер-ваальсовой гетероструктуре с пространственным разделением заряда.
11. Развита теория эффекта Парселла на экситонах в ван-дер-ваальсовых гетероструктурах с монослоями дихалькогенидов переходных металлов. Показано, что изменение толщин слоев, входящих в гетероструктуру, существенно влияет на формы линий и относительные силы осциллятора основного и возбужденных экситонных состояний в спектрах отражения, при этом возможно изменение радиационного времени жизни экситона почти на порядок.
12. Построена теория тонкой структуры энергетического спектра экситонов в кристаллах Cu_2O . Показано, что триплет, наблюдающийся в спектре поглощения закиси меди с высокоэнергетической стороны от P -экситонов “желтой” серии начиная с главного квантового числа $n = 4$ является проявлением F -состояний экситона (орбитальный момент $L = 3$). Предложен метод, позволяющий рассчитать положения P - и F - состояний (центра триплета) экситонов без использования подгоночных параметров и в хорошем согласии с экспериментом.
13. Получены скейлинговые зависимости для параметров экситонных состояний

от главного квантового числа. Результаты хорошо согласуются с экспериментом и для ряда параметров могут отличаться от соответствующих результатов для ридберговских атомов. Изучение скейлинга в магнитном поле позволило уточнить оценку размера экситона: около $0.7 \mu\text{m}$ для $n = 20$.

14. Построена модель эффекта Штарка на ридберговских экситонах в кристаллах закиси меди с учетом отличия экситонной серии от водородоподобной. Развита теория диссоциации экситонов в сильном электрическом поле. Показано, что в согласии с экспериментом, величина поля диссоциации убывает с ростом главного числа n как n^{-4} , однако в рамках одного мильтиплета с фиксированным n более стабильными оказываются состояния экситона, расположенные выше по энергии.

Основные результаты диссертационной работы изложены в публикациях:

- [A1] М.А. Семина, Р.А. Сергеев, Р.А. Сурис, Энергия связи экситона и X^+ , X^- -трионов в одномерных системах // ФТП **42**, 1459 (2008).
- [A2] М.А. Семина, Р.А. Сурис, Кулоновские состояния в наноструктурах, случайное вырождение и оператор Лапласа-Рунге-Ленца // Письма в ЖЭТФ **94**, 614 (2011).
- [A3] М.А. Семина, Р.А. Сергеев, Р.А. Сурис, Локализация электронно-дырочных комплексов на флуктуациях интерфейсов квантовых ям // ФТП **40**, 1373 (2006).
- [A4] M.A. Semina, R.A. Sergeev, and R.A. Suris, Electron-hole complexes localized on the quantum well interface roughnesses // Physica Status Solidi (c) **4**, 363 (2007).
- [A5] M.A. Semina, R.A. Sergeev, and R.A. Suris, Binding energies of 2D laterally-confined trions // Physica E **40**, 1357 (2008).

- [A6] М.А. Семина, Р.А. Сергеев, Р.А. Сурис, Простейшие электронно-дырочные комплексы, локализованные на продольных флуктуациях квантовых проволок // ФТП **43**, 1222 (2009).
- [A7] М.А. Семина, Р.А. Сурис, Влияние локализации в квантовых ямах и квантовых проволоках на смешивание тяжелых и легких дырок и на энергию связи акцептора // ФТП **45**, 947 (2011).
- [A8] М.А. Семина, Р.А. Сурис, Локализованные в наноструктурах дырки во внешнем магнитом поле: g-фактор и смешивание состояний // ФТП **49**, 817 (2015).
- [A9] M.A. Semina, A.A. Golovatenko, and A.V. Rodina, Ground state of the holes localized in II-VI quantum dots with Gaussian potential profiles // Phys. Rev. B **93**, 045409 (2016).
- [A10] T.V. Shubina, A.V. Rodina, M.A. Semina, A.A. Golovatenko, A.A. Toropov, M.V. Rakhlin, I.V. Sedova, S.V. Sorokin, S.V. Gronin, A.A. Sitnikova, D.I. Kuritsyn, S.M. Sergeev, Z.F. Krasil'nik, S.V. Ivanov, Spectral selection of excitonic transitions in a dense array of CdSe/Zn/Se quantum dots // Phys. Status Solidi B **253**, 1485 (2016).
- [A11] Т.В. Шубина, К.Г. Беляев, М.А. Семина, А.В. Родина, А.А. Головатенко, А.А. Торопов, С.В. Сорокин, И.В. Седова, В.Ю. Давыдов, А.Н. Смирнов, П.С. Копьев, С.В. Иванов, Резонансный перенос энергии в плотном массиве II-VI квантовых точек // ФТТ **58**, 2175 (2016).
- [A12] T.V. Shubina, M.A. Semina, K.G. Belyaev, A.V. Rodina, A.A. Toropov, S.V. Ivanov, Förster Resonance Energy Transfer and Harvesting in II-VI Fractional Monolayer Structures // J. Electron. Mater. **46**, 3922 (2017).
- [A13] А.А. Головатенко, М.А. Семина, А.В. Родина, Т.В. Шубина, Биэкситон в квантовых точках A_2B_6 с различными локализуемыми потенциалами // ФТТ **59**, 1192 (2017).

- [A14] М.А. Семина, А.А. Головатенко, Т.В. Шубина, А.В. Родина, Локализация носителей в квантовых точках с одноосной анизотропией формы и состава // ФТТ **61**, 636 (2019).
- [A15] V.V. Belykh, D.R. Yakovlev, J.J. Schindler, E.A. Zhukov, M.A. Semina, M. Yacob, J.P. Reithmaier, M. Benyoucef, and M. Bayer, Large anisotropy of electron and hole g factors in infrared-emitting InAs/InAlGaAs self-assembled quantum dots // Phys. Rev. B **93**, 125302 (2016).
- [A16] E.V. Shornikova, L. Biadala, D.R. Yakovlev, D. Feng, V.F. Sapega, N. Flipo, A.A. Golovatenko, M.A. Semina, A.V. Rodina, A.A. Mitioglu, M.V. Ballottin, P.C.M. Christianen, Y.G. Kusrayev, M. Nasilowski, B. Dubertret, and M. Bayer, Electron and Hole g Factors and Spin Dynamics of Negatively Charged Excitons in CdSe/CdS Colloidal Nanoplatelets with Thick Shells // Nano Lett. **18**, 373 (2018).
- [A17] C. Robert, M.A. Semina, F. Cadiz, M. Manca, E. Courtade, T. Taniguchi, K. Watanabe, H. Cai, S. Tongay, B. Lassagne, P. Renucci, T. Amand, X. Marie, M.M. Glazov, and B. Urbaszek, Optical spectroscopy of excited exciton states in MoS₂ monolayers in van der Waals heterostructures // Phys. Rev. Materials **2**, 011001(R) (2018).
- [A18] М.А. Семина, Экситоны и трионы в двухслойных ван-дер-ваальсовых гетероструктурах// ФТТ **61**, 2234 (2019).
- [A19] E. Courtade, M. Semina, M. Manca, M.M. Glazov, C. Robert, F. Cadiz, G. Wang, T. Taniguchi, K. Watanabe, M. Pierre, W. Escoffier, E.L. Ivchenko, P. Renucci, X. Marie, T. Amand, and B. Urbaszek, Charged excitons in monolayer WSe₂: Experiment and theory // Phys. Rev. B **96**, 085302 (2017).
- [A20] H.H. Fang, B. Han, C. Robert, M.A. Semina, D. Lagarde, E. Courtade, T. Taniguchi, K. Watanabe, T. Amand, B. Urbaszek, M.M. Glazov, X. Marie,

- Control of the Exciton Radiative Lifetime in van der Waals Heterostructures // Phys. Rev. Lett. **123**, 067401 (2019).
- [A21] S. Shree, M. Semina, C. Robert, B. Han, T. Amand, A. Balocchi, M. Manca, E. Courtade, X. Marie, T. Taniguchi, K. Watanabe, M. M. Glazov, and B. Urbaszek, Observation of exciton-phonon coupling in MoS₂ monolayers // Phys. Rev. B **98**, 035302 (2018).
- [A22] J. Thewes, J. Heckötter, T. Kazimierczuk, M. Aßmann, D. Fröhlich, M. Bayer, M.A. Semina, and M.M. Glazov, Observation of High Angular Momentum Excitons in Cuprous Oxide // Phys. Rev. Lett. **115**, 027402 (2015).
- [A23] J. Heckötter, M. Freitag, D. Fröhlich, M. Aßmann, M. Bayer, M.A. Semina, and M.M. Glazov, Scaling laws of Rydberg excitons // Phys. Rev. B **96**, 125142 (2017).
- [A24] J. Heckötter, M. Freitag, D. Fröhlich, M. Aßmann, M. Bayer, M.A. Semina, and M.M. Glazov, High-resolution study of the yellow excitons in Cu₂O subject to an electric field // Phys. Rev. B **95**, 035210 (2017).
- [A25] J. Heckötter, M. Freitag, D. Fröhlich, M. Aßmann, M. Bayer, M.A. Semina, and M.M. Glazov, Dissociation of excitons in Cu₂O by an electric field // Phys. Rev. B **98**, 035150 (2018).
- [A26] J. Heckötter, M. Freitag, D. Fröhlich, M. Aßmann, M. Bayer, M.A. Семина, М.М. Глазов, Влияние распределения волновой функции на диссоциацию экситонов в электрическом поле // ФТТ **60**, 1495 (2018).
- [A27] М.А. Семина, Тонкая структура ридберговских экситонов в закиси меди // ФТТ **60**, 1515 (2018).

Я благодарна своим друзьям и коллегам, чьи внимание, поддержка и советы помогали мне в работе над диссертацией. Очень многое мне дала работа под руководством моего Учителя: Р.А. Суриса. Необычайно полезным оказалось сотрудничество с Р.А. Сергеевым, А.В. Родиной, М.М. Глазовым, Е.Л. Ивченко, Т.В. Шубиной, А.А. Головатенко, П.С. Алексеевым, Д.Р. Яковлевым, М. Байером, Т. Аманом, Кс. Мари, Б. Урбажеком, Е.Я. Шерману.

Я благодарна сотрудникам сектора Г.Г. Зегри и сектора Л.Е. Голуба за возможность обсуждения широкого круга вопросов и поддержку. Я признательна участникам Низкоразмерного и Чайного семинаров, семинара Сектора Теоретических основ микроэлектроники ФТИ. Обсуждение на этих семинарах работ, вошедших в диссертацию, принесло мне большую пользу.

Я благодарна своей семье: М.В. Семиной и А.М. Семину, В.А. Толщиной, М.М. Глазову, Н.М. Глазовой за неоценимую помощь и поддержку.

Литература

- [1] *Ivchenko E. L.* Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures. — Alpha Science, Harrow UK, 2005.
- [2] *Frenkel J.* On the transformation of light into heat in solids. I // *Phys. Rev.* — 1931. — Vol. 37. — Pp. 17–44.
- [3] *Frenkel J.* On the transformation of light into heat in solids. II // *Phys. Rev.* — 1931. — Vol. 37. — Pp. 1276–1294.
- [4] *Wannier G. H.* The structure of electronic excitation levels in insulating crystals // *Phys. Rev.* — 1937. — Vol. 52. — Pp. 191–197.
- [5] *Mott N. F.* On the absorption of light by crystals // *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences.* — 1938. — Vol. 167, no. 930. — Pp. 384–391.
- [6] Excitons / Ed. by E. I. Rashba, M. D. Sturge. — North-Holland Publishing Company, 1982.
- [7] *Klingshirn C. F.* Semiconductor Optics. — Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [8] *Гросс Е. Ф., Каррыев Н. А.* Поглощение света кристаллом закиси меди в инфракрасной и видимой части спектра // *ДАН СССР.* — 1952. — Т. 84. — С. 261.
- [9] Giant Rydberg excitons in the copper oxide Cu₂O / T. Kazimierczuk, D. Frohlich, S. Scheel et al. // *Nature.* — 2014. — Vol. 514, no. 7522. — Pp. 343–347.

- [10] *Gallagher T.* Rydberg Atoms. Cambridge Monographs on Atomic Physics. — Cambridge University Press, 2005.
- [11] *Saffman M., Walker T. G., Mølmer K.* Quantum information with Rydberg atoms // *Rev. Mod. Phys.* — 2010. — Vol. 82. — Pp. 2313–2363.
- [12] *Bayer M., Assmann M.* Rydberg states in semiconductors // Encyclopedia of Modern Optics (Second Edition) / Ed. by B. D. Guenther, D. G. Steel. — Oxford: Elsevier, 2018. — Pp. 40 – 51.
- [13] *Davies J.* The physics of low-dimensional semiconductors. — Cambridge University Press, 1998.
- [14] Оптические свойства наноструктур / Л. Е. Воробьев, Е. Л. Ивченко, Д. А. Фирсов, В. А. Шалыгин. — Санкт-Петербург. Наука, 2001.
- [15] *Ivchenko E. L., Pikus G. E.* Superlattices and other heterostructures. — Springer, 1997.
- [16] *Lampert M. A.* Mobile and immobile effective-mass-particle complexes in nonmetallic solids // *Phys. Rev. Lett.* — 1958. — Vol. 1. — Pp. 450–453.
- [17] Observation of negatively charged excitons x^- in semiconductor quantum wells / K. Kheng, R. T. Cox, M. Y. d' Aubigné et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — Vol. 71. — Pp. 1752–1755.
- [18] *Geim A. K., Grigorieva I. V.* Van der Waals heterostructures // *Nature.* — 2013. — Vol. 499, no. 7459. — Pp. 419–425.
- [19] Colloquium: Excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides / G. Wang, A. Chernikov, M. M. Glazov et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2018. — Vol. 90. — P. 021001.
- [20] *Dresselhaus G.* Effective mass approximation for excitons // *Phys. Chem. Solids.* — 1956. — Vol. 1. — Pp. 14–22.

- [21] *Knox R.* Theory of excitons. Solid state physics: Supplement. — Academic Press, 1963.
- [22] *Mahan G. D.* Excitons in degenerate semiconductors // *Phys. Rev.* — 1967. — Vol. 153, no. 3. — Pp. 882–889.
- [23] *Пайнс Д.* Элементарные возбуждения в твердых телах / Под ред. В. Бонч-Бруевич. — М.; Мир, 1965.
- [24] *Пикус Ф. Г.* Экситоны в квантовых ямах с двумерным электронным газом // *ФТП.* — 1992. — Т. 26. — С. 45.
- [25] Electron-hole plasma effect on excitons in GaN/Al_xGa_{1-x}N quantum wells / P. Bigenwald, A. Kavokin, B. Gil, P. Lefebvre // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 61. — P. 15621.
- [26] Exclusion principle and screening of excitons in GaN/Al_xGa_{1-x}N quantum wells / P. Bigenwald, A. Kavokin, B. Gil, P. Lefebvre // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 63, no. 3. — P. 035315.
- [27] Trions, excitons, and scattering states in multiple quantum wells with a variable-concentration electron gas / R. T. Cox, R. B. Miller, K. Saminadayar, T. Baron // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69, no. 23. — P. 235303.
- [28] *Urey H. C.* The structure of the hydrogen molecule ion // *Phys. Rev.* — 1926. — Vol. 27, no. 2. — Pp. 216–237.
- [29] *Bethe H.* Calculation of electronic affinity of hydrogen. // *Zeits. Phys.* — 1929. — Vol. 57. — Pp. 815–821.
- [30] *Elkomoss S. G., Amer A. S.* Binding energy for some atomic and exciton complex systems // *Phys. Rev. B.* — 1975. — Vol. 11, no. 8. — Pp. 2925–2932.
- [31] *Stébé, Munsch G.* Binding energies of the excitonic molecule ion and of the excitonic ion. // *Solid State Commun.* — 1975. — Vol. 17. — Pp. 1051–1054.

- [32] *Stébé B., Comte C.* Charged excitons in direct-gap semiconductors // *Phys. Rev. B.* — 1977. — Vol. 15, no. 8. — Pp. 3967–3979.
- [33] *Combescot R.* Trion ground-state energy: Simple results // *Phys. Rev. B.* — 2019. — Vol. 100. — P. 245201.
- [34] *T. Kawabata K. Muro S. N.* Observation of cyclotron resonance absorptions due to excitonic ion and excitonic molecule ion in silicon // *Solid State Communications.* — 1977. — Vol. 23. — Pp. 267–270.
- [35] *G. A. Thomas T. M. R.* Trions, molecules and excitons above the Mott density in Ge // *Solid State Communications.* — 1977. — Vol. 23. — Pp. 359–363.
- [36] Existence of charged excitons in CuCl / B. Stébé, T. Sauder, M. Certier, C. Comte // *Solid State Communications.* — 1978. — Vol. 26, no. 10. — Pp. 637–640.
- [37] Exciton binding energy in quantum wells / G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang, L. Esaki // *Phys. Rev. B.* — 1982. — Vol. 26, no. 4. — Pp. 1974–1979.
- [38] *Schilling R., Mattis D. C.* Bound exciton and hole: An exactly solvable three-body model in any number of dimensions // *Phys. Rev. Lett.* — 1982. — Vol. 49, no. 11. — Pp. 808–811.
- [39] *Bobrysheva A., Grodetskii M., Zyukov V.* Binding energy for the surface biexcitonic positive ion // *J. Phys. C.* — 1983. — Vol. 16. — P. 5723.
- [40] *Stébé B., Ainane A.* Ground state energy and optical absorption of excitonic trions in two dimensional semiconductors // *Superlattices and Microstructures.* — 1989. — Vol. 5, no. 4. — Pp. 545–548.
- [41] *Finkelstein G., Shtrikman H., Bar-Joseph I.* Negatively and positively charged excitons in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 53, no. 4. — Pp. R1709–R1712.

- [42] *Brown J. W., Spector H. N.* Exciton binding energy in a quantum-well wire // *Phys. Rev. B.* — 1987. — Vol. 35, no. 6. — Pp. 3009–3012.
- [43] *Degani M. H., Hipólito O.* Exciton binding energy in quantum-well wires // *Phys. Rev. B.* — 1987. — Vol. 35, no. 17. — Pp. 9345–9348.
- [44] *Esser A., Zimmermann R., Runge E.* Theory of trion spectra in semiconductor nanostructures // *Physica Status Solidi (b).* — 2001. — Vol. 227, no. 2. — Pp. 317–330.
- [45] *Tsuchiya T.* A quantum Monte-Carlo study on excitonic complexes in-plane GaAs/AlGaAs quantum wires // *Int. J. Mod. Phys. B.* — 2001. — Vol. 15. — P. 3985.
- [46] Enhancement of the binding energy of charged excitons in disordered quantum wires / T. Otterburg, D. Y. Oberli, M.-A. Dupertuis et al. // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71, no. 3. — P. 033301.
- [47] Observation of large many-body Coulomb interaction effects in a doped quantum wire / H. Akiyama, L. N. Pfeiffer, A. Pinczuk et al. // *Solid State Commun.* — 2002. — Vol. 122. — Pp. 169–173.
- [48] Coulomb effects on the fundamental optical transition in semiconducting single-walled carbon nanotubes: Divergent behavior in the small-diameter limit / M. Ichida, S. Mizuno, Y. Saito et al. // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 65, no. 24. — P. 241407.
- [49] Determination of the exciton binding energy in single-walled carbon nanotubes / Z. Wang, H. Pedrosa, T. Krauss, L. Rothberg // *Physical Review Letters.* — 2006. — Vol. 96, no. 4. — P. 047403.

- [50] *Bulashevich K. A., Rotkin S. V., Suris R. A.* Excitons in single wall carbon nanotubes // *International Journal of Nanoscience*. — 2003. — Vol. 2. — Pp. 521–526.
- [51] Nature of optical transitions in self-organized InAs/GaAs quantum dots / M. Grundmann, N. N. Ledentsov, O. Stier et al. // *Phys. Rev. B*. — 1996. — Vol. 53, no. 16. — Pp. R10509–R10511.
- [52] *Wojs A., Hawrylak P.* Negatively charged magnetoexcitons in quantum dots // *Phys. Rev. B*. — 1995. — Vol. 51, no. 16. — Pp. 10880–10885.
- [53] Few-particle effects in semiconductor quantum dots: Observation of multicharged excitons / A. Hartmann, Y. Ducommun, E. Kapon et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 84, no. 24. — Pp. 5648–5651.
- [54] *Riva C., Peeters F. M., Varga K.* Excitons and charged excitons in semiconductor quantum wells // *Phys. Rev. B*. — 2000. — Vol. 61, no. 20. — Pp. 13873–13881.
- [55] *Peeters F. M., Riva C., Varga K.* Trions in quantum wells // *Physica B*. — 2001. — Vol. 300. — Pp. 139–155.
- [56] *T. Wojtowicz M. Kutrowski G. K., Kossut. J.* Graded quantum well structures made of diluted magnetic semiconductors // *Acta Physica Polonica A*. — 1998. — Vol. 94. — Pp. 199–217.
- [57] Bound states in optical absorption of semiconductor quantum wells containing a two-dimensional electron gas / V. Huard, R. T. Cox, K. Saminadayar et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 84, no. 1. — Pp. 187–190.
- [58] Excitons and trions in II-VI quantum wells with modulation doping / V. Kochereshko, G. Astakhov, D. Yakovlev et al. // *Physica Status Solidi (b)*. — 2000. — Vol. 220. — P. 345.

- [59] Photoluminescence of the electron-dressed confined X^- exciton in an n-type AlAs/GaAs resonant tunneling device / Z. C. Yan, E. Goovaerts, C. Van Hoof et al. // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 52, no. 8. — Pp. 5907–5912.
- [60] Quenching of excitonic optical transitions by excess electrons in GaAs quantum wells / A. Shields, M. Pepper, D. Ritchie et al. // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 51, no. 24. — Pp. 18049–18052.
- [61] Electron density dependence of the excitonic absorption thresholds of GaAs quantum wells / R. Kaur, A. Shields, J. Osborne et al. // *Physica Status Solidi (a)*. — 2000. — Vol. 178. — P. 465.
- [62] Photoluminescence and radiative lifetime of trions in GaAs quantum wells / A. Esser, E. Runge, R. Zimmermann, W. Langbein // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62, no. 12. — Pp. 8232–8239.
- [63] *K. Kheng K. S., Magnea N.* Effect of confined electrons on the centre-of-mass quantization states of the exciton in wide modulation-doped CdTe/CdZnTe quantum wells // *J. Crystal Growth.* — 1998. — Vol. 184/185. — P. 849.
- [64] Negatively charged trion in ZnSe single quantum wells with very low electron densities / O. Homburg, K. Sebald, P. Michler et al. // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62, no. 11. — Pp. 7413–7419.
- [65] Binding energy of charged excitons in ZnSe-based quantum wells / G. V. Astakhov, D. R. Yakovlev, V. P. Kochereshko et al. // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 65, no. 16. — P. 165335.
- [66] Enhancement of the binding energy of charged excitons in disordered quantum wires / T. Otterburg, D. Y. Oberli, M.-A. Dupertuis et al. // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71, no. 3. — P. 033301.

- [67] *Petroff P. M.* Transmission electron microscopy of interfaces in III–V compound semiconductors // *J. Vac. Sci. Technol.* — 1977. — Vol. 14. — P. 973.
- [68] Optical characterization of interface disorder in multiquantum well GaAs–Al_xGa_{1–x}As superlattice structures / C. Weisbuch, R. Dingle, A. C. Gossard, W. Weigmann // *J. Vac. Sci. Technol.* — 1980. — Vol. 17. — Pp. 1128–1129.
- [69] Low-temperature exciton trapping on interface defects in semiconductor quantum wells / G. Bastard, C. Delalande, M. H. Meynadier et al. // *Phys. Rev. B.* — 1984. — Vol. 29, no. 12. — Pp. 7042–7044.
- [70] *Delalande C., Meynadier M. H., Voos M.* Effect of temperature on exciton trapping on interface defects in GaAs quantum wells // *Phys. Rev. B.* — 1985. — Vol. 31, no. 4. — Pp. 2497–2498.
- [71] Binding energies of positive and negative trions: From quantum wells to quantum dots / A. S. Bracker, E. A. Stinaff, D. Gammon et al. // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72, no. 3. — P. 035332.
- [72] Boundary scattering in quantum wires / T. J. Thornton, M. L. Roukes, A. Scherer, B. P. Van de Gaag // *Phys. Rev. Lett.* — 1989. — Vol. 63, no. 19. — Pp. 2128–2131.
- [73] *Notomi M., Okamoto M., Tamamura T.* Study of the factors affecting the broadening of the photoluminescence spectra of InGaAs/InP quantum wires // *J. Appl. Phys.* — 1994. — Vol. 75. — P. 4161.
- [74] *Quang D. N., Tung N. H.* Effects of surface roughness and alloy disorder on the density of states in semiconductor quantum wires // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62, no. 23. — Pp. 15337–15340.
- [75] *Барановский С. Д., Эфрос А. Л.* Размытие краев зон в твердых растворах // *ФТП.* — 1978. — Т. 12. — С. 2233–2237.

- [76] Exciton line broadening by compositional disorder in alloy quantum wells / S. D. Baranovskii, U. Doerr, P. Thomas et al. // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 48, no. 23. — Pp. 17149–17154.
- [77] *Litvinov V. I., Razeghi M.* Exciton localization in group-III nitride quantum wells // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 59, no. 15. — Pp. 9783–9786.
- [78] *Bryant G. W.* Hydrogenic impurity states in quantum-well wires // *Phys. Rev. B.* — 1984. — Vol. 29, no. 12. — Pp. 6632–6639.
- [79] *Brown J. W., Spector H.* Hydrogen impurities in quantum well wires // *J. Appl. Phys.* — 1986. — Vol. 59. — P. 1179.
- [80] *Bastard G.* Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model // *Phys. Rev. B.* — 1981. — Vol. 24, no. 8. — Pp. 4714–4722.
- [81] Influence of interface localization on the binding energy of acceptor bound excitons in narrow GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells / C. I. Harris, B. Monemar, H. Kalt et al. // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 51, no. 19. — Pp. 13221–13225.
- [82] Interface roughness localization in quantum wells and quantum wires / I. Rasnik, L. G. C. Rego, M. V. Marquezini et al. // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Vol. 58, no. 15. — Pp. 9876–9880.
- [83] Charged excitons trapped on monomolecular CdTe islands in wide ZnTe-(Zn,Mg)Te quantum wells / T. Taliercio, P. Lefebvre, V. Calvo et al. // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Vol. 58, no. 23. — Pp. 15408–15411.
- [84] *Кулаковский В. Д., Бутов Л. В.* Магнитооптика квантовых проволок и квантовых точек в полупроводниковых гетероструктурах // *Успехи физических наук.* — 1995. — Т. 165, № 2. — С. 229–232.
- [85] *Hawrylak P., Wojs A.* Electronic structure and optical properties of self-assembled quantum dots // *Semicond. Sci. Technol.* — 1996. — Vol. 11. — P. 1516.

- [86] *Hawrylak P.* Excitonic artificial atoms: Engineering optical properties of quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 60. — P. 5597.
- [87] Biexciton versus exciton lifetime in a single semiconductor quantum dot / G. Bacher, R. Weigand, J. Seufert et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 83, no. 21. — Pp. 4417–4420.
- [88] *Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N. N.* Quantum dot heterostructures. — Wiley-VCH Verlag, 1999.
- [89] Fine structure of neutral and charged excitons in self-assembled InGaAs-AlGaAs quantum dots / M. Bayer, G. Ortner, O. Stern et al. // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 65. — P. 195315.
- [90] Fine structure of highly charged excitons in semiconductor quantum dots / B. Urbaszek, R. J. Warburton, K. Karrai et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 90. — P. 247403.
- [91] Hybridization of electronic states in quantum dots through photon emission / K. Karrai, R. J. Warburton, C. Schulhauser et al. // *Nature.* — 2004. — Vol. 427, no. 6970. — Pp. 135–138.
- [92] Magnetic field induced valence band mixing in [111] grown semiconductor quantum dots / M. V. Durnev, M. M. Glazov, E. L. Ivchenko et al. // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 87. — P. 085315.
- [93] Magnetospectroscopy of excited states in charge-tunable GaAs/AlGaAs [111] quantum dots / M. V. Durnev, M. Vidal, L. Bouet et al. // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Vol. 93. — P. 245412.
- [94] *Gourdon C., Lavallard P.* Fine structure of heavy excitons in GaAs/AlAs superlattices // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Vol. 46. — P. 4644.

- [95] Fine structure splitting in the optical spectra of single GaAs quantum dots / D. Gammon, E. Snow, B. Shanabrook et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 76. — P. 3005.
- [96] Fine structure of biexciton emission in symmetric and asymmetric CdSe/ZnSe single quantum dots / V. D. Kulakovskii, G. Bacher, R. Weigand et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 82. — P. 1780.
- [97] Fine structure of exciton complexes in high-symmetry quantum dots: Effects of symmetry breaking and symmetry elevation / K. F. Karlsson, M. A. Dupertuis, D. Y. Oberli et al. // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 81, no. 16. — P. 161307.
- [98] Гупалов С. В., Ивченко Е. Л., Кавокин А. В. Тонкая структура уровней локализованных экситонов в квантовых ямах // *ЖЭТФ.* — 1998. — Т. 113. — С. 703.
- [99] Maialle M. Z. Spin dynamics of localized excitons in semiconductor quantum wells in an applied magnetic field // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 61. — P. 10877.
- [100] Дурнев М. В. Тонкая структура электрон-дырочных комплексов в тригональных квантовых точках // *ФТТ.* — 57. — С. 1201.
- [101] Федоров А. В., Баранов А. В. Оптика квантовых точек / Под ред. А. В. Федоров. — СПб.; Недра, 2005. — С. 181.
- [102] Low-temperature exciton trapping on interface defects in semiconductor quantum wells / G. Bastard, C. Delalande, M. H. Meynadier et al. // *Phys. Rev. B.* — 1984. — Vol. 29, no. 12. — Pp. 7042–7044.
- [103] Эфрос Ал. Л., Эфрос А. Л. Межзонное поглощение света в полупроводниковом шаре // *ФТП.* — 1982. — Т. 16. — С. 1209.

- [104] *Efros Al. L., Rodina A. V.* Confined excitons, trions and biexcitons in semiconductor microcrystals // *Solid State Communications*. — 1989. — Vol. 72, no. 7. — Pp. 645–649.
- [105] Binding energy of charged excitons bound to interface defects of semiconductor quantum wells / L. C. O. Dacal, R. Ferreira, G. Bastard, J. A. Brum // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Vol. 65, no. 11. — P. 115325.
- [106] Influence of well-width fluctuations on the binding energy of excitons, charged excitons, and biexcitons in GaAs-based quantum wells / A. V. Filinov, C. Riva, F. M. Peeters et al. // *Phys. Rev. B*. — 2004. — Vol. 70, no. 3. — P. 035323.
- [107] *Голуб Л. Е.* Локализация экситонов на островках в структурах с квантовыми ямами // *ФТТ*. — 1997. — Vol. 39. — Pp. 1871–1874.
- [108] Universal estimation of X^- trion binding energy in semiconductor quantum wells / R. Sergeev, R. Suris, G. Astakhov et al. // *Eur. Phys. J. B*. — 2005. — Vol. 47. — P. 541.
- [109] Exciton binding energy in quantum wells / G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang, L. Esaki // *Phys. Rev. B*. — 1982. — Vol. 26, no. 4. — Pp. 1974–1979.
- [110] *Loudon R.* One-dimensional hydrogen atom // *Am. J. Phys.* — 1959. — Vol. 27. — Pp. 649–655.
- [111] *Chaplik A. V.* Trions in quantum well wires and in quantum rings // *Phys. Low-Dim. Struct.* — 1999. — Vol. 9/10. — Pp. 131–136.
- [112] Relative stability of negative and positive trions in model symmetric quantum wires / B. Szafran, T. Chwiej, F. M. Peeters et al. // *Phys. Rev. B*. — 2005. — Vol. 71, no. 23. — P. 235305.

- [113] *Sidor Y., Partoens B., Peeters F. M.* Influence of the shape and size of a quantum wire on the trion binding energy // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77, no. 20. — P. 205413.
- [114] *Javanainen J., Eberly J. H., Su Q.* Numerical simulations of multiphoton ionization and above-threshold electron spectra // *Phys. Rev. A.* — 1988. — Vol. 38, no. 7. — Pp. 3430–3446.
- [115] *Su Q., Eberly J. H., Javanainen J.* Dynamics of atomic ionization suppression and electron localization in an intense high-frequency radiation field // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — Vol. 64, no. 8. — Pp. 862–865.
- [116] *Zhang F. C., Das Sarma S.* Excitation gap in the fractional quantum Hall effect: Finite layer thickness corrections // *Phys. Rev. B.* — 1986. — Vol. 33, no. 4. — Pp. 2903–2905.
- [117] *Jauregui K., Hausler W., Kramer B.* Wigner molecules in nanostructures // *Europhys. Lett.* — 1993. — Vol. 24. — Pp. 581–587.
- [118] *Schulz H. J.* Wigner crystal in one dimension // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — Vol. 71, no. 12. — Pp. 1864–1867.
- [119] *Fabrizio M., Gogolin A. O., Scheidl S.* Coulomb effects in transport properties of quantum wires // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — Vol. 72, no. 14. — Pp. 2235–2238.
- [120] *Egger R., Grabert H.* Charging effects in quantum wires // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 55, no. 15. — Pp. 9929–9934.
- [121] Effective interaction for charge carriers confined in quasi-one-dimensional nanostructures / S. Bednarek, B. Szafran, T. Chwiej, J. Adamowski // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68, no. 4. — P. 045328.

- [122] *Сергеев Р. А., Суриц Р. А.* Энергия основного состояния X^- и X^+ -трионов в двумерной квантовой яме при произвольном отношении масс // *ФТТ.* — 2001. — Т. 43. — С. 714–718.
- [123] *Thilagam A.* Two-dimensional charged-exciton complexes // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 55, no. 12. — Pp. 7804–7808.
- [124] *Sergeev R., Suris R.* The triplet state of X^+ trion in 2D quantum wells // *Physica Status Solidi (b).* — 2001. — Vol. 227, no. 2. — Pp. 387–396.
- [125] *Fock V.* Zur theorie des wasserstoffatoms // *Zeitschrift für Physik.* — 1935. — Vol. 98, no. 3. — Pp. 145–154.
- [126] *Pauli W.* Über das wasserstoffspektrum vom standpunkt der neuen quantenmechanik // *Zeitschrift für Physik.* — 1926. — Vol. 36, no. 5. — Pp. 336–363.
- [127] *Jauch J. M., Hill E. L.* On the problem of degeneracy in quantum mechanics // *Phys. Rev.* — 1940. — Vol. 57. — Pp. 641–645.
- [128] *Greene R. L., Lane P.* Far-infrared absorption by shallow donors in multiple-well GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs heterostructures // *Phys. Rev. B.* — 1986. — Vol. 34. — Pp. 8639–8643.
- [129] Resonant states induced by impurities in heterostructures / A. Blom, M. A. Odnoblyudov, I. N. Yassievich, K. A. Chao // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 65. — P. 155302.
- [130] *Дремин А., Ларионов А., Тимофеев В.* Бозе-Эйнштейновская конденсация мажъямных экситонов в латеральных ловушках: фазовая диаграмма // *ФТТ.* — 2004. — Т. 46. — С. 168–170.

- [131] Binding energy of indirect excitons in asymmetric double quantum wells / I. V. Kukushkin, A. V. Rossokhaty, S. Schmult, K. von Klitzing // *Semiconductor Science and Technology*. — 2010. — Vol. 26, no. 1. — P. 014023.
- [132] Condensation of indirect excitons in coupled alas/gaas quantum wells / L. V. Butov, A. Zrenner, G. Abstreiter et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — Vol. 73. — Pp. 304–307.
- [133] Кулаковский Д., Лозовик Ю. Заряженные многочастичные комплексы: свойства непрямого триона // *Письма ЖЭТФ*. — 2002. — Т. 76. — С. 598–603.
- [134] Сергеев Р. А., Сурис Р. А. X^+ -трион в системе с пространственным разделением носителей заряда // *ФТП*. — 2003. — Т. 37. — С. 1235.
- [135] Parfitt D. G. W., Portnoi M. E. The two-dimensional hydrogen atom revisited // *Journal of Mathematical Physics*. — 2002. — Vol. 43, no. 10. — Pp. 4681–4691.
- [136] Constants of motion, ladder operators and supersymmetry of the two-dimensional isotropic harmonic oscillator / R. D. Mota, V. D. Granados, A. Queijeiro, J. Garc'ia // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. — 2002. — Vol. 35, no. 12. — Pp. 2979–2984.
- [137] Chao C. Y.-P., Chuang S. L. Analytical and numerical solutions for a two-dimensional exciton in momentum space // *Phys. Rev. B*. — 1991. — Vol. 43. — Pp. 6530–6543.
- [138] Рытова Н. С. Экранированный потенциал точечного заряда в тонкой пленке // *Вест. МГУ (сер. физ.)*. — 1967. — Т. 3. — С. 30.
- [139] Келдыш Л. В. Кулоновское взаимодействие в тонких пленках полупроводников и полуметаллов // *Письма ЖЭТФ*. — 1979. — Т. 29. — С. 716.
- [140] Andreani L. C., Pasquarello A. Accurate theory of excitons in GaAs–Ga_{1-x}Al_xAs quantum wells // *Phys. Rev. B*. — 1990. — Vol. 42, no. 14. — Pp. 8928–8938.

- [141] *Геворкян Г. С., Лозовик Ю. Е.* Локализация и спектр экситонов в неупорядоченных системах // *ФТТ.* — 1985. — Т. 27. — С. 1800–1805.
- [142] *Que W.* Excitons in quantum dots with parabolic confinement // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Vol. 45. — P. 11036.
- [143] *Bander M., Itzykson C.* Group theory and the hydrogen atom (I) // *Rev. Mod. Phys.* — 1966. — Vol. 38, no. 2. — Pp. 330–345.
- [144] *Chao C. Y.-P., Chuang S. L.* Analytical and numerical solutions for a two-dimensional exciton in momentum space // *Phys. Rev. B.* — 1991. — Vol. 43, no. 8. — Pp. 6530–6543.
- [145] *Dresselhaus G.* Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures // *Phys. Rev.* — 1955. — Vol. 100. — P. 580.
- [146] Spin physics in semiconductors / Ed. by M. I. Dyakonov. Springer Series in Solid-State Sciences 157. — 2nd ed. edition. — Springer International Publishing, 2017.
- [147] *Luttinger J. M., Kohn W.* Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields // *Phys. Rev.* — 1955. — Vol. 97. — Pp. 869–883.
- [148] *Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C.* Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals // *Phys. Rev.* — 1955. — Vol. 98, no. 2. — Pp. 368–384.
- [149] Properties of the thirty-two point groups / G. F. Koster, R. G. Wheeler, J. O. Dimmock, H. Statz. — MIT Press, 1963.
- [150] *Пижус Г. Е., Марущак В. А., Тутков А. Н.* Спиновое расщепление зон и спиновая релаксация носителей в кубических кристаллах A_3B_5 // *ФТТ.* — 1988. — Т. 22. — С. 185.
- [151] *Luttinger J. M.* Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory // *Phys. Rev.* — 1956. — Vol. 102, no. 4. — Pp. 1030–1041.

- [152] *Недорезов С.* Пространственное квантование в полупроводниковых пленках // *ФТТ*. — 1970. — Т. 12. — С. 2269–2276.
- [153] *Broido D. A., Sham L. J.* Effective masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions // *Phys. Rev. B*. — 1985. — Vol. 31. — Pp. 888–892.
- [154] Band-edge exciton in quantum dots of semiconductors with a degenerate valence band: dark and bright exciton states / E. Al. L., M. Rosen, M. Kuno et al. // *Phys. Rev. B*. — 1996. — Vol. 54. — P. 4843.
- [155] *Гупалов С. В., Ивченко Е. Л.* Тонкая структура экситонных уровней в нанокристаллах CdSe // *ФТТ*. — 2000. — Т. 42. — С. 1976.
- [156] *Baldereschi A., Lipari N.* Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors // *Phys. Rev. B*. — 1973. — Vol. 8. — P. 2697.
- [157] *Baldereschi A., Lipari N. O.* Cubic contributions to the spherical model of shallow acceptor states // *Phys. Rev. B*. — 1974. — Vol. 9. — Pp. 1525–1539.
- [158] *Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И.* Акцепторные уровни в полупроводнике со структурой алмаза // *ФТП*. — 1971. — Т. 5. — С. 2191.
- [159] *Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И.* g-фактор акцепторов в полупроводниках со структурой алмаза // *ФТП*. — 1973. — Т. 7, № 10. — С. 2013.
- [160] *Kane E. O.* Exciton dispersion in degenerate bands // *Phys. Rev. B*. — 1975. — Vol. 11. — Pp. 3850–3859.
- [161] *Kohn W., Schechter D.* Theory of acceptor levels in germanium // *Phys. Rev.* — 1955. — Vol. 99. — Pp. 1903–1904.
- [162] *Коган Ш. М., Полупанов А.* Спектр оптического поглощения и фотоэффекта мелких акцепторных примесей в полупроводниках // *ЖЭТФ*. — 1981. — Т. 80. — С. 394.

- [163] *Н.С.Аверкиев, Родина А.* Многочастичные примесные комплексы в алмазоподобных полупроводниках // *ФТТ.* — 1993. — Т. 35. — С. 1051.
- [164] *Меркулов И., Родина А.* Волновые функции и энергия связи дырки в основном состоянии акцептора в алмазоподобных полупроводниках // *ФТП.* — 1994. — Т. 28. — С. 321.
- [165] Extrinsic photoluminescence from GaAs quantum wells / R. C. Miller, A. C. Gossard, W. T. Tsang, O. Munteanu // *Phys. Rev. B.* — 1982. — Vol. 25. — Pp. 3871–3877.
- [166] Electronic structure of beryllium acceptors confined in GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum wells / Q. X. Zhao, S. Wongmanerod, M. Willander et al. // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 63. — P. 195317.
- [167] *Алейнер И. Л., Ивченко Е. Л.* Природа анизотропного обменного расщепления в сверхрешетках GaAs/AlAs типа II // *Письма ЖЭТФ.* — 1992. — Т. 55. — С. 662.
- [168] *Ivchenko E., Kaminski A., Roessler U.* Heavy-light hole mixing at zinc-blende (001) interfaces under normal incidence // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 54. — P. 5852.
- [169] *Efanov A. V.* Wave functions and energy levels of acceptors and excitons in GaAs-type semiconductors // *Semiconductor Science and Technology.* — 2009. — Vol. 24, no. 3. — P. 035017.
- [170] *Меркулов И. А., Перель В. И., Портной М. Е.* Выстраивание импульсов и ориентация спинов фотовозбужденных электронов в квантовых ямах // *ЖЭТФ.* — 1990. — Т. 99. — С. 1202.

- [171] *Sweeny M., Xu J., Shur M.* Hole subbands in one-dimensional quantum well wires // *Superlattices and Microstructures*. — 1988. — Vol. 4, no. 4. — Pp. 623 – 626.
- [172] *Sercel P. C., Vahala K. J.* Analytical formalism for determining quantum-wire and quantum-dot band structure in the multiband envelope-function approximation // *Phys. Rev. B*. — 1990. — Vol. 42. — Pp. 3690–3710.
- [173] Spin- $\frac{3}{2}$ physics of semiconductor hole nanowires: Valence-band mixing and tunable interplay between bulk-material and orbital bound-state spin splittings / D. Csontos, P. Brusheim, U. Zülicke, H. Q. Xu // *Phys. Rev. B*. — 2009. — Vol. 79. — P. 155323.
- [174] *Roth L. M., Lax B., Zwerdling S.* Theory of optical magneto-absorption effects in semiconductors // *Phys. Rev.* — 1959. — Vol. 114, no. 1. — P. 90.
- [175] *Ивченко Е. Л., Киселев А. А.* Электронный g -фактор в квантовых ямах и сверхрешетках // *ФТП*. — 1992. — Т. 26. — С. 1471.
- [176] *Kiselev A. A., Ivchenko E. L., Rössler U.* Electron g factor in one- and zero-dimensional semiconductor nanostructures // *Phys. Rev. B*. — 1998. — Vol. 58. — Pp. 16353–16359.
- [177] *Калевич В. К., Корнев В.* Анизотропия электронного g -фактора в асимметричной квантовой яме GaAs/AlGaAs // *Письма в ЖЭТФ*. — 1993. — Т. 57. — С. 557.
- [178] Exciton fine structure in InGaAs/GaAs quantum dots revisited by pump-probe Faraday rotation / I. A. Yugova, A. Greilich, E. A. Zhukov et al. // *Phys. Rev. B*. — 2007. — Vol. 75, no. 19. — P. 195325.

- [179] Zeeman splitting of the excitonic recombination in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ single quantum wells / T. Wimbauer, K. Oettinger, Al. L. Efros et al. // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Vol. 50. — Pp. 8889–8892.
- [180] *Kiselev A., Roessler U.* Towards optimization of t-shaped quantum structures // *Semicond. Sci. Technol.* — 1996. — Vol. 11. — P. 203.
- [181] *Kiselev A. A., Kim K. W., Yablonovitch E.* In-plane light-hole g factor in strained cubic heterostructures // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 64. — P. 125303.
- [182] *Rodina A. V., Efros Al. L.* Band-edge biexciton in nanocrystals of semiconductors with a degenerate valence band // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 82. — P. 125324.
- [183] Electron and hole g factors and exchange interaction from studies of the exciton fine structure in $\text{In}_{0.60}\text{Ga}_{0.40}\text{As}$ quantum dots / M. Bayer, A. Kuther, A. Forchel et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 82. — Pp. 1748–1751.
- [184] *Durnev M. V., Glazov M. M., Ivchenko E. L.* Giant Zeeman splitting of light holes in $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$ quantum wells // *Physica E.* — 2012. — Vol. 44, no. 4. — Pp. 797–802.
- [185] *Дурнев М. В.* Зеемановское расщепление состояний легкой дырки в квантовых ямах: сопоставление теории и эксперимента // *ФТТ.* — 2014. — Т. 56, № 7. — С. 1364.
- [186] *Que W.* Excitons in quantum dots with parabolic confinement // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Vol. 45. — Pp. 11036–11041.
- [187] *Halonen V., Chakraborty T., Pietiläinen P.* Excitons in a parabolic quantum dot in magnetic fields // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Vol. 45. — Pp. 5980–5985.
- [188] Hole spin quantum beats in quantum-well structures / X. Marie, T. Amand, P. Le Jeune et al. // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 60. — P. 5811.

- [189] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика: нерелятивистская теория. — М. Наука, 1974.
- [190] Vurgaftman I., Meyer J. R., Ram-Mohan L. R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys // *J. Appl. Phys.* — 2001. — Vol. 89, no. 11. — Pp. 5815–5875.
- [191] Optical determination of the valence-band parameters in CdTe / G. Milchberg, K. Saminadayar, E. Molva, H. R. Zelsmann // *Physica Status Solidi (b)*. — 1984. — Vol. 125, no. 2. — Pp. 795–803.
- [192] Magneto-optical kerr effect spectroscopy based study of landé g-factor for holes in GaAs/AlGaAs single quantum wells under low magnetic fields / A. Arora, A. Mandal, S. Chakrabarti, S. Ghosh // *Journal of Applied Physics*. — 2013. — Vol. 113, no. 21. — P. 213505.
- [193] Ivanov S. V., Sorokin S. V., Sedova I. V. Molecular Beam Epitaxy. — Oxford: Elsevier, 2013. — Pp. 611–630.
- [194] Молекулярно-пучковая эпитаксия гетероструктур широкозонных соединений АІІВVI для низкопороговых лазеров с оптической и электронной накачкой / С. Сорокин, С. Гронин, И. Седова и др. // *ФТП*. — 2015. — Т. 49, № 3. — С. 342–348.
- [195] Single-photon and photon-pair emission from CdSe/Zn(S,Se) quantum dots / S. Strauf, S. M. Ulrich, K. Sebald et al. // *Physica Status Solidi (b)*. — 2003. — Vol. 238, no. 2. — Pp. 321–324.
- [196] A high-temperature single-photon source from nanowire quantum dots / A. Tribu, G. Sallen, T. Aichele et al. // *Nano Letters*. — 2008. — Vol. 8, no. 12. — Pp. 4326–4329.

- [197] Room temperature single photon emission from an epitaxially grown quantum dot / O. Fedorych, C. Kruse, A. Ruban et al. // *Applied Physics Letters*. — 2012. — Vol. 100, no. 6. — P. 061114.
- [198] CdSe/ZnSe quantum dot structures: Structural and optical investigations / D. Hommel, K. Leonardi, H. Heinke et al. // *Physica Status Solidi (b)*. — 1997. — Vol. 202, no. 2. — Pp. 835–843.
- [199] Excitons, biexcitons, and phonons in ultrathin CdSe/ZnSe quantum structures / F. Gindele, U. Woggon, W. Langbein et al. // *Phys. Rev. B*. — 1999. — Vol. 60. — Pp. 8773–8782.
- [200] Temperature dependence of photoluminescence bands in $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}/\text{ZnSe}$ quantum wells with planar CdSe islands / A. Klochikhin, A. Reznitsky, B. D. Don et al. // *Phys. Rev. B*. — 2004. — Vol. 69. — P. 085308.
- [201] Excitonic states and energy relaxation in low-dimension CdSe/ZnSe structures with isolated ZnCdSe islands / A. Reznitsky, M. Eremenko, I. V. Sedova et al. // *Physica Status Solidi (b)*. — 2015. — Vol. 252, no. 8. — Pp. 1717–1724.
- [202] Density of states and photoluminescence spectra in the dense arrays of epitaxial CdSe/ZnSe quantum dots with gaussian potential profile / A. Golovatenko, M. Semina, A. Rodina, S. T. // *Acta Phys. Pol. A*. — 2016. — Vol. 129. — Pp. 107–1110.
- [203] Gradient CdSe/CdS quantum dots with room temperature biexciton unity quantum yield / M. Nasilowski, P. Spinicelli, G. Patriarche, B. Dubertret // *Nano Letters*. — 2015. — Vol. 15, no. 6. — Pp. 3953–3958.
- [204] *Cragg G. E., Efros Al. L.* Suppression of Auger processes in confined structures // *Nano Letters*. — 2010. — Vol. 10, no. 1. — Pp. 313–317.

- [205] Breakdown of volume scaling in Auger recombination in CdSe/CdS heteronanocrystals: The role of the core-shell interface / F. Garc'ia-Santamar'ia, S. Brovelli, R. Viswanatha et al. // *Nano Letters*. — 2011. — Vol. 11, no. 2. — Pp. 687–693.
- [206] Controlled alloying of the core-shell interface in CdSe/CdS quantum dots for suppression of Auger recombination / W. K. Bae, L. A. Padilha, Y.-S. Park et al. // *ACS Nano*. — 2013. — Vol. 7, no. 4. — Pp. 3411–3419.
- [207] *Climente J. I., Movilla J. L., Planelles J.* Auger recombination suppression in nanocrystals with asymmetric electron-hole confinement // *Small*. — 2012. — Vol. 8, no. 5. — Pp. 754–759.
- [208] *Korkusinski M., Voznyy O., Hawrylak P.* Fine structure and size dependence of exciton and biexciton optical spectra in CdSe nanocrystals // *Phys. Rev. B*. — 2010. — Vol. 82. — P. 245304.
- [209] *Zieliński M., Don Y., Gershoni D.* Atomistic theory of dark excitons in self-assembled quantum dots of reduced symmetry // *Phys. Rev. B*. — 2015. — Vol. 91. — P. 085403.
- [210] *Singh R., Bester G.* Lower bound for the excitonic fine structure splitting in self-assembled quantum dots // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Vol. 104. — P. 196803.
- [211] *Brus L. E.* Electron-electron and electron-hole interactions in small semiconductor crystallites: The size dependence of the lowest excited electronic state // *The Journal of Chemical Physics*. — 1984. — Vol. 80, no. 9. — Pp. 4403–4409.
- [212] *Marín J. L., Riera R., Cruz S. A.* Confinement of excitons in spherical quantum dots. — 1998. — Vol. 10, no. 6. — Pp. 1349–1361.

- [213] *Pellegrini G., Mattei G., Mazzoldi P.* Finite depth square well model: Applicability and limitations // *Journal of Applied Physics*. — 2005. — Vol. 97, no. 7. — P. 073706.
- [214] Quantum-dot quantum well CdS/HgS/CdS: Theory and experiment / D. Schooss, A. Mews, A. Eychmüller, H. Weller // *Phys. Rev. B*. — 1994. — Vol. 49. — Pp. 17072–17078.
- [215] Interacting valence holes in p-type SiGe quantum disks in a magnetic field / L. G. C. Rego, P. Hawrylak, J. A. Brum, A. Wojs // *Phys. Rev. B*. — 1997. — Vol. 55. — Pp. 15694–15700.
- [216] *Xie W.* Exciton states trapped by a parabolic quantum dot // *Physica B: Condensed Matter*. — 2005. — Vol. 358, no. 1. — Pp. 109–113.
- [217] Electron pair in a gaussian confining potential / J. Adamowski, M. Sobkowicz, B. Szafran, S. Bednarek // *Phys. Rev. B*. — 2000. — Vol. 62. — Pp. 4234–4237.
- [218] Modelling of confinement potentials in quantum dots / M. Ciurla, J. Adamowski, B. Szafran, S. Bednarek // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. — 2002. — Vol. 15, no. 4. — Pp. 261–268.
- [219] *Xie W.* A study of an exciton in a quantum dot with woods-saxon potential // *Superlattices and Microstructures*. — 2009. — Vol. 46, no. 4. — Pp. 693–699.
- [220] *Szafran B., Bednarek S., Adamowski J.* Parity symmetry and energy spectrum of excitons in coupled self-assembled quantum dots // *Phys. Rev. B*. — 2001. — Vol. 64. — P. 125301.
- [221] Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots / A. Wojs, P. Hawrylak, S. Fafard, L. Jacak // *Phys. Rev. B*. — 1996. — Vol. 54. — P. 5604.

- [222] Xia J.-B. Electronic structures of zero-dimensional quantum wells // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 40. — Pp. 8500–8507.
- [223] Absorption and intensity-dependent photoluminescence measurements on cdse quantum dots: assignment of the first electronic transitions / A. I. Ekimov, F. Hache, M. C. Schanne-Klein et al. // *J. Opt. Soc. Am. B.* — 1993. — Vol. 10, no. 1. — Pp. 100–107.
- [224] L. E. Al., Rosen M. Quantum size level structure of narrow-gap semiconductor nanocrystals: Effect of band coupling // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Vol. 58, no. 11. — Pp. 7120–7135.
- [225] Jaskólski W., Bryant G. W. Multiband theory of quantum-dot quantum wells: Dim excitons, bright excitons, and charge separation in heteronanostructures // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Vol. 57. — Pp. R4237–R4240.
- [226] Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots / C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang et al. // *Journ. Appl. Phys.* — 1998. — Vol. 83. — P. 2548.
- [227] Stier O., Grundmann M., Bimberg D. Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 59. — P. 5688.
- [228] Tadić M., Peeters F. M., Janssens K. L. Effect of isotropic versus anisotropic elasticity on the electronic structure of cylindrical InP/ $\text{In}_{0.49}\text{Ga}_{0.51}\text{P}$ self-assembled quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 65. — P. 165333.
- [229] Zeeman effect in parabolic quantum dots / R. Rinaldi, P. V. Giugno, R. Cingolani et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 77. — P. 342.

- [230] Structural and chemical analysis of CdSe/ZnSe nanostructures by transmission electron microscopy / N. Peranio, A. Rosenauer, D. Gerthsen et al. // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 61. — Pp. 16015–16024.
- [231] Determination of critical thickness for defect formation of CdSe/ZnSe heterostructures by transmission electron microscopy and photoluminescence spectroscopy / D. Litvinov, M. Schowalter, A. Rosenauer et al. // *Physica Status Solidi (a)*. — 2008. — Vol. 205, no. 12. — Pp. 2892–2897.
- [232] *Edmonds A. R.* Angular Momentum in Quantum Mechanics. — Princeton, New Jersey: Princeton University Press, 1974.
- [233] *Abramowitz M., Stegun I. A.* Handbook of mathematical functions: with formulas, graphs, and mathematical tables. — New York: Dover Publications, 1970.
- [234] *Efros Al. L., Rodina A. V.* Band-edge absorption and luminescence of nonspherical nanometer-size crystals // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 47. — Pp. 10005–10007.
- [235] *Goupalov S.* Anisotropy-induced exchange splitting of exciton radiative doublet in cdse nanocrystals // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 74. — P. 113305.
- [236] *Бур Г., Пукис Г.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. — М. Наука, 1972.
- [237] *Бур Г., Ивченко Е.* Оптическая ориентация свободных носителей в гексагональных кристаллах // *ФТП.* — 1975. — Т. 9. — С. 1300.
- [238] *Efros Al. L.* Luminescence polarization of CdSe microcrystals // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Vol. 46. — Pp. 7448–7458.

- [239] Character of the Cd distribution in ultrathin CdSe layers in a ZnSe matrix / D. Litvinov, A. Rosenauer, D. Gerthsen, N. N. Ledentsov // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 61. — Pp. 16819–16826.
- [240] Comparative studies of CdSe/ZnSe quantum dot structures epitaxially grown with or without a sub-monolayer CdTe stressor / M. V. Rakhlin, K. G. Belyaev, I. V. Sedova et al. // *Physica Status Solidi (c)*. — 2016. — Vol. 13, no. 7-9. — Pp. 514–517.
- [241] Electron and hole g factors in InAs/InAlGaAs self-assembled quantum dots emitting at telecom wavelengths / V. V. Belykh, A. Greulich, D. R. Yakovlev et al. // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Vol. 92. — P. 165307.
- [242] *Glazov M.* Electron & Nuclear Spin Dynamics in Semiconductor Nanostructures. Series on Semiconductor Science and Technology. — OUP Oxford, 2018.
- [243] *Yakovlev D. R., Bayer M.* Coherent spin dynamics of carriers // Spin physics in semiconductors / Ed. by M. I. Dyakonov. — Springer International Publishing, 2017. — Springer Series in Solid-State Sciences 157. — P. 155.
- [244] Quantum size effect in organometal halide perovskite nanoplatelets / J. A. Sichert, Y. Tong, N. Mutz et al. // *Nano Letters*. — 2015. — Vol. 15, no. 10. — Pp. 6521–6527.
- [245] Ultrathin PbS sheets by two-dimensional oriented attachment / C. Schliehe, B. H. Juarez, M. Pelletier et al. // *Science*. — 2010. — Vol. 329, no. 5991. — Pp. 550–553.
- [246] Thickness-controlled quasi-two-dimensional colloidal PbSe nanoplatelets / W.-k. Koh, N. K. Dandu, A. F. Fidler et al. // *Journal of the American Chemical Society*. — 2017. — Vol. 139, no. 6. — Pp. 2152–2155.

- [247] Solventless synthesis of monodisperse Cu_2S nanorods, nanodisks, and nanoplatelets / M. B. Sigman, A. Ghezelbash, T. Hanrath et al. // *Journal of the American Chemical Society*. — 2003. — Vol. 125, no. 51. — Pp. 16050–16057.
- [248] Single-crystal colloidal nanosheets of GeS and GeSe / D. D. Vaughn, R. J. Patel, M. A. Hickner, R. E. Schaak // *Journal of the American Chemical Society*. — 2010. — Vol. 132, no. 43. — Pp. 15170–15172.
- [249] Colloidal nanoplatelets with two-dimensional electronic structure / S. Ithurria, M. D. Tessier, B. Mahler et al. // *Nature Materials*. — 2011. — Vol. 10. — P. 936.
- [250] Synthesis of zinc and lead chalcogenide core and core/shell nanoplatelets using sequential cation exchange reactions / C. Bouet, D. Laufer, B. Mahler et al. // *Chemistry of Materials*. — 2014. — Vol. 26, no. 9. — Pp. 3002–3008.
- [251] Strongly confined HgTe 2D nanoplatelets as narrow near-infrared emitters / E. Izquierdo, A. Robin, S. Keuleyan et al. // *Journal of the American Chemical Society*. — 2016. — Vol. 138, no. 33. — Pp. 10496–10501.
- [252] Two-dimensional colloidal nanocrystals / M. Nasilowski, B. Mahler, E. Lhuillier et al. // *Chemical Reviews*. — 2016. — Vol. 116, no. 18. — Pp. 10934–10982.
- [253] Spin dynamics of negatively charged excitons in CdSe/CdS colloidal nanocrystals / F. Liu, L. Biadala, A. V. Rodina et al. // *Phys. Rev. B*. — 2013. — Vol. 88. — P. 035302.
- [254] Spin dynamics in semiconductor nanocrystals / J. A. Gupta, D. D. Awschalom, Al. L. Efros, A. V. Rodina // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Vol. 66. — P. 125307.
- [255] Surface spin magnetism controls the polarized exciton emission from CdSe nanoplatelets / E. V. Shornikova, A. A. Golovatenko, D. R. Yakovlev et al. // *arXiv:1909.13700*. — 2019.

- [256] *Adachi S.* Handbook on physical properties of semiconductors. — Kluwer Academic, Boston, 2004.
- [257] *Karazhanov S. Z., Lew Yan Voon L. C.* Ab initio studies of the band parameters of III–V and II–VI zinc-blende semiconductors // *Semiconductors*. — 2005. — Vol. 39, no. 2. — Pp. 161–173.
- [258] *Fu H., Wang L.-W., Zunger A.* Applicability of the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method to the electronic structure of quantum dots // *Phys. Rev. B*. — 1998. — Vol. 57. — Pp. 9971–9987.
- [259] Weak-and strong-field magneto- optics of wurtzite CdSe: parameters of quasi-cubic approximation / A. B. Kapustina, B. V. Petrov, A. V. Rodina, R. P. Seisyan // *J. Cryst. Growth*. — 2000. — Vol. 214. — Pp. 899–903.
- [260] *Norris D. J., Bawendi M. G.* Measurement and assignment of the size-dependent optical spectrum in cdse quantum dots // *Phys. Rev. B*. — 1996. — Vol. 53. — Pp. 16338–16346.
- [261] Spin dynamics and level structure of quantum-dot quantum wells / J. Berezovsky, M. Ouyang, F. Meier et al. // *Phys. Rev. B*. — 2005. — Vol. 71. — P. 081309.
- [262] *Lawaetz P.* Valence-band parameters in cubic semiconductors // *Phys. Rev. B*. — 1971. — Vol. 4. — Pp. 3460–3467.
- [263] *Stradling R.* Cyclotron resonance from thermally excited holes in ZnTe // *Solid State Communications*. — 1968. — Vol. 6, no. 9. — Pp. 665–669.
- [264] *Said M., Kanehisa M. A.* Excited acceptor states in II–VI and III–V semiconductors // *Physica Status Solidi (b)*. — 1990. — Vol. 157, no. 1. — Pp. 311–321.
- [265] *Oka Y., Cardona M.* Resonant spin-flip raman scattering on donor and acceptor states in znite // *Phys. Rev. B*. — 1981. — Vol. 23. — Pp. 4129–4139.

- [266] Cyclotron resonance from thermally excited holes in ZnTe / H. P. Wagner, S. Lankes, K. Wolf et al. // *J. Cryst. Growth.* — 1992. — Vol. 117. — P. 303.
- [267] Zeeman levels of the shallow lithium acceptor and band parameters in cadmium telluride / T. Friedrich, J. Kraus, G. Schaack, W. O. G. Schmitt // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 1994. — Vol. 23, no. 6. — P. 4307.
- [268] *Neumann C., Nöthe A., Lipari N. O.* Two-photon magnetoabsorption of ZnTe, CdTe, and GaAs // *Phys. Rev. B.* — 1988. — Vol. 37. — Pp. 922–932.
- [269] *Takagahara T.* Biexciton states in semiconductor quantum dots and their non-linear optical properties // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 39. — P. 10206.
- [270] *Patton B., Langbein W., Woggon U.* Trion, biexciton, and exciton dynamics in single self-assembled cdse quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68. — P. 125316.
- [271] Exciton dephasing and biexciton binding in CdSe/ZnSe islands / H. P. Wagner, H.-P. Tranitz, H. Preis et al. // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 60. — Pp. 10640–10643.
- [272] II-VI and I-VII Compounds; Semimagnetic Compounds / Ed. by O. Madelung, U. Rössler, M. Schulz. Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter, Volume 41B. — Springer-Verlag, 1999.
- [273] Single-photon emission from exciton complexes in individual quantum dots / R. M. Thompson, R. M. Stevenson, A. J. Shields et al. // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 64. — P. 201302.
- [274] Single Semiconductor Quantum Dots. Ser. Nanoscience and Nanotechnology / Ed. by P. Michler. — Springer-Verlag, Berlin, 2009.
- [275] *Bányai L.* Asymptotic biexciton “binding energy” in quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 39. — Pp. 8022–8024.

- [276] *Bryant G. W.* Biexciton binding in quantum boxes // *Phys. Rev. B.* — 1990. — Vol. 41. — Pp. 1243–1246.
- [277] *Григорян Г., Родина А., Эфрос Ал. Л.* Экситоны и биэкситоны в квантово-размерных микрокристаллах полупроводников, диспергированных в диэлектрической стеклянной матрице // *ФТТ.* — 1990. — Т. 32. — С. 3512–3521.
- [278] *Xie W.* Binding energy of biexcitons in quantum dots. — 2001. — Vol. 13, no. 13. — Pp. 3149–3156.
- [279] *Califano M., Franceschetti A., Zunger A.* Lifetime and polarization of the radiative decay of excitons, biexcitons, and trions in CdSe nanocrystal quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 75. — P. 115401.
- [280] Biexcitons in semiconductor quantum dots / Y. Z. Hu, S. W. Koch, M. Lindberg et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — Vol. 64. — Pp. 1805–1807.
- [281] Growth and excitonic properties of single fractional monolayer CdSe/ZnSe structures / S. V. Ivanov, A. A. Toropov, T. V. Shubina et al. // *Journal of Applied Physics.* — 1998. — Vol. 83, no. 6. — Pp. 3168–3171.
- [282] *Асрян Л., Сурис Р.* Теория пороговых характеристик полупроводниковых лазеров на квантовых точках // *ФТП.* — 2004. — Т. 38, № 1. — С. 3–25.
- [283] *Förster T.* Zwischenmolekulare energiewanderung und fluoreszenz // *Annalen der Physik.* — 1948. — Vol. 437, no. 12. — Pp. 55–75.
- [284] Spectrally resolved dynamics of energy transfer in quantum-dot assemblies: Towards engineered energy flows in artificial materials / S. A. Crooker, J. A. Hollingsworth, S. Tretiak, V. I. Klimov // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 89. — P. 186802.

- [285] Förster energy transfer of dark excitons enhanced by a magnetic field in an ensemble of CdTe colloidal nanocrystals / F. Liu, A. V. Rodina, D. R. Yakovlev et al. // *Phys. Rev. B*. — 2015. — Vol. 92. — P. 125403.
- [286] Nonradiative energy transfer between vertically coupled indirect and direct bandgap InAs quantum dots / T. S. Shamirzaev, D. S. Abramkin, D. V. Dmitriev, A. K. Gutakovskii // *Applied Physics Letters*. — 2010. — Vol. 97, no. 26. — P. 263102.
- [287] Dependence of resonance energy transfer on exciton dimensionality / J. J. Rindermann, G. Pozina, B. Monemar et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Vol. 107. — P. 236805.
- [288] *Poddubny A. N., Rodina A. V.* Nonradiative and radiative forster energy transfer between quantum dots // *ЖЭТФ*. — 2016. — Т. 149, № 3. — С. 614–622.
- [289] Influence of quantum dot density on excitonic transport and recombination in CdZnTe/ZnTe QD structures / K. P. Korona, P. Wojnar, J. A. Gaj et al. // *Solid State Communications*. — 2005. — Vol. 133. — Pp. 369–373.
- [290] Superradiance of quantum dots / M. Scheibner, T. Schmidt, L. Worschech et al. // *Nature Physics*. — 2007. — Vol. 3. — Pp. 106–110.
- [291] $k \cdot p$ theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors / A. Kormányos, G. Burkard, M. Gmitra et al. // *2D Materials*. — 2015. — Vol. 2, no. 2. — P. 022001.
- [292] Coupled spin and valley physics in monolayers of mos_2 and other group-vi dichalcogenides / D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Vol. 108. — P. 196802.

- [293] Valley-selective circular dichroism of monolayer molybdenum disulphide / T. Cao, G. Wang, W. Han et al. // *Nature Communications*. — 2012. — Vol. 3. — P. 887.
- [294] 2D materials and van der waals heterostructures / K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, A. H. Castro Neto // *Science*. — 2016. — Vol. 353, no. 6298.
- [295] Atomically thin MoS₂: A new direct-gap semiconductor / K. F. Mak, C. Lee, J. Hone et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Vol. 105. — P. 136805.
- [296] Emerging photoluminescence in monolayer MoS₂ / A. Splendiani, L. Sun, Y. Zhang et al. // *Nano Letters*. — 2010. — Vol. 10. — P. 1271.
- [297] Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides / Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis et al. // *Nat Nano*. — 2012. — Vol. 7, no. 11. — Pp. 699–712.
- [298] Mak K. F., Shan J. Photonics and optoelectronics of 2D semiconductor transition metal dichalcogenides // *Nature Photonics*. — 2016. — Vol. 10. — P. 216.
- [299] Excitonic linewidth approaching the homogeneous limit in MoS₂-based van der waals heterostructures / F. Cadiz, E. Courtade, C. Robert et al. // *Phys. Rev. X*. — 2017. — Vol. 7. — P. 021026.
- [300] Дурнев М. В., Глазов М. М. Экситоны и трионы в двумерных полупроводниках на основе дихалькогенидов переходных металлов // *Усп. физ. наук*. — 2018. — Т. 188, № 9. — С. 913–934.
- [301] Exciton binding energy and nonhydrogenic Rydberg series in monolayer WS₂ / A. Chernikov, T. C. Berkelbach, H. M. Hill et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 113. — P. 076802.

- [302] *Keldysh L. V.* Excitons in semiconductor–dielectric nanostructures // *Physica Status Solidi (a)*. — 1997. — Vol. 164, no. 1. — Pp. 3–12.
- [303] *Berkelbach T. C., Hybertsen M. S., Reichman D. R.* Theory of neutral and charged excitons in monolayer transition metal dichalcogenides // *Phys. Rev. B*. — 2013. — Vol. 88. — P. 045318.
- [304] *Kezerashvili R. Y., Tsiklauri S. M.* Trion and biexciton in monolayer transition metal dichalcogenides // *Few-Body Systems*. — 2016. — Vol. 58, no. 1. — P. 18.
- [305] *Purcell E. M.* Spontaneous emission probabilities at radio frequencies // *Phys. Rev.* — 1946. — Vol. 69. — Pp. 674–674.
- [306] Фактор Парселла в малых металлических полостях / М. М. Глазов, Е. Л. Ивченко, А. Н. Поддубный, Г. Хитрова // *ФТТ*. — 2011. — Т. 53. — С. 1653.
- [307] *Muljarov E. A., Langbein W.* Exact mode volume and purcell factor of open optical systems // *Phys. Rev. B*. — 2016. — Vol. 94. — P. 235438.
- [308] *Krasnok A., Lepeshov S., Alú A.* Nanophotonics with 2d transition metal dichalcogenides // *Opt. Express*. — 2018. — Vol. 26, no. 12. — Pp. 15972–15994.
- [309] *Glazov M. M., Chernikov A.* Breakdown of the static approximation for free carrier screening of excitons in monolayer semiconductors // *physica status solidi (b)*. — 2018. — Vol. 255, no. 12. — P. 1800216.
- [310] Optical probing in a bilayer dark-bright condensate system / N. A. Asriyan, I. L. Kurbakov, A. K. Fedorov, Y. E. Lozovik // *Phys. Rev. B*. — 2019. — Vol. 99. — P. 085108.
- [311] *Cudazzo P., Tokatly I. V., Rubio A.* Dielectric screening in two-dimensional insulators: Implications for excitonic and impurity states in graphane // *Phys. Rev. B*. — 2011. — Vol. 84. — P. 085406.

- [312] Wu F., Qu F., MacDonald A. H. Exciton band structure of monolayer MoS₂ // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Vol. 91. — P. 075310.
- [313] Excitons in self-organized semiconductor/insulator superlattices: PbI-based perovskite compounds / E. A. Muljarov, S. G. Tikhodeev, N. A. Gippius, T. Ishihara // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 51. — Pp. 14370–14378.
- [314] Magneto-optics of exciton rydberg states in a monolayer semiconductor / A. V. Stier, N. P. Wilson, K. A. Velizhanin et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2018. — Vol. 120. — P. 057405.
- [315] Shinada M., Sugano S. Interband optical transitions in extremely anisotropic semiconductors. I. bound and unbound exciton absorption // *Journal of the Physical Society of Japan.* — 1966. — Vol. 21, no. 10. — Pp. 1936–1946.
- [316] Qiu D. Y., da Jornada F. H., Louie S. G. Optical spectrum of MoS₂: Many-body effects and diversity of exciton states // *Phys. Rev. Lett.* — 2013. — Vol. 111. — P. 216805.
- [317] Berman O. L., Kezerashvili R. Y. Superfluidity of dipolar excitons in a transition metal dichalcogenide double layer // *Phys. Rev. B.* — 2017. — Vol. 96. — P. 094502.
- [318] Brunetti M. N., Berman O. L., Kezerashvili R. Y. Optical absorption by indirect excitons in a transition metal dichalcogenide/hexagonal boron nitride heterostructure // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 2018. — Vol. 30, no. 22. — P. 225001.
- [319] Tightly bound trions in monolayer mos₂ / K. F. Mak, K. He, C. Lee et al. // *Nat Mater.* — 2013. — Vol. 12, no. 3. — Pp. 207–211.

- [320] Electrical control of neutral and charged excitons in a monolayer semiconductor / J. S. Ross, S. Wu, H. Yu et al. // *Nature communications*. — 2013. — Vol. 4. — P. 1474.
- [321] Valley dynamics probed through charged and neutral exciton emission in monolayer WSe₂ / G. Wang, L. Bouet, D. Lagarde et al. // *Phys. Rev. B*. — 2014. — Vol. 90. — P. 075413.
- [322] The effect of preparation conditions on raman and photoluminescence of monolayer WS₂ / K. M. McCreary, A. T. Hanbicki, S. Singh et al. // *Scientific reports*. — 2016. — Vol. 6. — P. 35154.
- [323] Observation of excitonic fine structure in a 2D transition-metal dichalcogenide semiconductor / J. Shang, X. Shen, C. Cong et al. // *ACS Nano*. — 2015. — Vol. 9, no. 1. — Pp. 647–655.
- [324] Bright excitons in monolayer transition metal dichalcogenides: from Dirac cones to Dirac saddle points / H. Yu, G. Liu, P. Gong et al. // *Nature Comms*. — 2014. — Vol. 5. — P. 3876.
- [325] *Cheiwchanchamnangij T., Lambrecht W. R. L.* Quasiparticle band structure calculation of monolayer, bilayer, and bulk MoS₂ // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Vol. 85. — P. 205302.
- [326] Binding energies of trions and biexcitons in two-dimensional semiconductors from diffusion quantum Monte Carlo calculations / M. Szyniszewski, E. Mostaani, N. D. Drummond, V. I. Fal'ko // *Phys. Rev. B*. — 2017. — Vol. 95. — P. 081301.
- [327] Tightly bound excitons in monolayer WSe₂ / K. He, N. Kumar, L. Zhao et al. // *Phys. Rev. Lett*. — 2014. — Vol. 113. — P. 026803.

- [328] Giant enhancement of the optical second-harmonic emission of WSe₂ monolayers by laser excitation at exciton resonances / G. Wang, X. Marie, I. Gerber et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — Vol. 114. — P. 097403.
- [329] Large effective mass and interaction-enhanced zeeman splitting of *K*-valley electrons in MoSe₂ / S. Larentis, H. C. P. Movva, B. Fallahazad et al. // *Phys. Rev. B.* — 2018. — Vol. 97. — P. 201407.
- [330] Interactions and magnetotransport through spin-valley coupled landau levels in monolayer MoS₂ / R. Pisoni, A. Kormányos, M. Brooks et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2018. — Vol. 121. — P. 247701.
- [331] Intervalley polaron in atomically thin transition metal dichalcogenides / M. M. Glazov, M. A. Semina, C. Robert et al. // *Phys. Rev. B.* — 2019. — Vol. 100. — P. 041301.
- [332] *Kosmider K., González J. W., Fernández-Rossier J.* Large spin splitting in the conduction band of transition metal dichalcogenide monolayers // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 88. — P. 245436.
- [333] *Аверкиев Н. С., Пукис Г. Е.* Электрон-электронный обмен в многодолинных полупроводниках и тонкая структура многоэкситонных комплексов в кремнии // *Письма в ЖЭТФ.* — 1981. — Т. 34. — С. 28–31.
- [334] *Resta R.* Thomas-fermi dielectric screening in semiconductors // *Phys. Rev. B.* — 1977. — Vol. 16. — Pp. 2717–2722.
- [335] *Fu H., Wang L.-W., Zunger A.* Excitonic exchange splitting in bulk semiconductors // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 59, no. 8. — Pp. 5568–5574.
- [336] Microscopic electronic wave function and interactions between quasiparticles in empirical tight-binding theory / R. Benchamekh, F. Raouafi, J. Even et al. // *Physical Review B.* — 2015. — Vol. 91. — P. 045118.

- [337] *Microcavities* / A. Kavokin, J. Baumberg, G. Malpuech, F. Laussy. — Oxford University Press, UK, 2011.
- [338] *Kleppner D.* Inhibited spontaneous emission // *Rhys. Rev. Lett.* — 1981. — Vol. 47, no. 4. — P. 233.
- [339] Suppression of spontaneous decay at optical frequencies: Test of vacuum-field anisotropy in confined space / W. Jhe, A. Anderson, E. Hinds et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 58, no. 7. — P. 666.
- [340] *Benisty H., De Neve H., Weisbuch C.* Impact of planar microcavity effects on light extraction-part I: Basic concepts and analytical trends // *IEEE Journal of quantum electronics.* — 1998. — Vol. 34, no. 9. — Pp. 1612–1631.
- [341] Enhanced spontaneous emission by quantum boxes in a monolithic optical microcavity / J. Gérard, B. Sermage, B. Gayral et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 81, no. 5. — P. 1110.
- [342] Inhibition and enhancement of the spontaneous emission of quantum dots in structured microresonators / M. Bayer, T. Reinecke, F. Weidner et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Vol. 86, no. 14. — P. 3168.
- [343] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Статистическая физика. Часть 1. — Москва. Наука, 1976.
- [344] Phonon sidebands in monolayer transition metal dichalcogenides / D. Christiansen, M. Selig, G. Berghäuser et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2017. — Vol. 119. — P. 187402.
- [345] Spontaneous emission in the optical microscopic cavity / F. De Martini, M. Marrocco, P. Mataloni et al. // *Phys. Rev. A.* — 1991. — Vol. 43. — Pp. 2480–2497.

- [346] *Gross E.* Optical spectrum of excitons in the crystal lattice // *Il Nuovo Cimento Series 10.* — 1956. — Vol. 3, no. 4. — Pp. 672–701.
- [347] Эффективное возбуждение ридберговских состояний ультрахолодных атомов литий-7 / Б. Зеленер, С. Саакян, В. Саутенков и др. // *Письма ЖЭТФ.* — 2014. — Т. 100. — С. 408–412.
- [348] *Zielińska-Raczyńska S., Ziemkiewicz D., Czajkowski G.* Electro-optical properties of Rydberg excitons // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Vol. 94. — P. 045205.
- [349] Impact of the valence band structure of Cu_2O on excitonic spectra / F. Schweiner, J. Main, M. Feldmaier et al. // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Vol. 93. — P. 195203.
- [350] Magnetoexcitons in cuprous oxide / F. Schweiner, J. Main, G. Wunner et al. // *Phys. Rev. B.* — 2017. — Vol. 95. — P. 035202.
- [351] Deviations of the exciton level spectrum in Cu_2O from the hydrogen series / F. Schöne, S.-O. Krüger, P. Grünwald et al. // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Vol. 93. — P. 075203.
- [352] *Uihlein C., Fröhlich D., Kenklies R.* Investigation of exciton fine structure in Cu_2O // *Phys. Rev. B.* — 1981. — Vol. 23. — Pp. 2731–2740.
- [353] *Altarelli M., Lipari N. O.* Perturbation-theory investigation of the exciton ground state of cubic semiconductors in a magnetic field // *Phys. Rev. B.* — 1973. — Vol. 7. — Pp. 3798–3802.
- [354] *Roslyak O., Birman J. L.* Hybridized quadrupole-dipole exciton effects in a Cu_2O -organic heterostructure // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 75. — P. 245309.
- [355] *Roslyak O., Birman J. L.* Evanescent quadrupole polariton // *Solid State Communications.* — 2008. — Vol. 145, no. 1. — Pp. 29–32.
- [356] *Zielińska-Raczyńska S., Czajkowski G., Ziemkiewicz D.* Optical properties of Rydberg excitons and polaritons // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Vol. 93. — P. 075206.

- [357] Exciton-polaritons in cuprous oxide: Theory and comparison with experiment / F. Schweiner, J. Ertl, J. Main et al. // *Phys. Rev. B.* — 2017. — Vol. 96. — P. 245202.
- [358] Electronic structure and properties of Cu₂O / E. Ruiz, S. Alvarez, P. Alemany, R. A. Evarestov // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 56. — Pp. 7189–7196.
- [359] Electronic band structure of Cu₂O by spin density functional theory / M. French, R. Schwartz, H. Stolz, R. Redmer // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 2009. — Vol. 21, no. 1. — P. 015502.
- [360] Гастев С. В., Соколов Н. С. Непараболичность валентной зоны Γ_7^+ кристаллов закиси меди // *ФТТ.* — 1980. — Т. 22, № 4. — С. 976.
- [361] Яковлев Н. Л., Соколов Н. С. Диамагнитные экситоны и гофрировка валентной зоны Γ_7^+ в кристаллах закиси меди // *ФТТ.* — 1986. — Т. 28, № 7. — С. 1998.
- [362] Берестетский В. Б., Путаевский Л. П., Лифшиц Е. М. Квантовая электродинамика. — Москва. Наука, 1989.
- [363] Tayagaki T., Mysyrowicz A., Kuwata-Gonokami M. The yellow excitonic series of cu₂o revisited by lyman spectroscopy // *Journal of the Physical Society of Japan.* — 2005. — Vol. 74, no. 5. — Pp. 1423–1426.
- [364] Гастев С. В., Соколов Н. С. Дисперсия валентных зон Γ_7^+ — Γ_8^+ и циклотронный резонанс дырок в кристаллах закиси меди // *ФТТ.* — 1985. — Т. 27, № 2. — С. 416.
- [365] Agekyan V. T., Monozon B. S., Shiryapov I. P. The fine structure of wanniermott excitons in a cubic crystal and its behaviour in an electric field // *Physica Status Solidi (b).* — 1974. — Vol. 66, no. 1. — Pp. 359–370.

- [366] *Agekyan V. T.* Spectroscopic properties of semiconductor crystals with direct forbidden energy gap // *Physica Status Solidi (a)*. — 1977. — Vol. 43, no. 1. — Pp. 11–42.
- [367] *Жилич А. Г., Монозон Б. С.* Квазиклассическое рассмотрение спектра водородоподобной системы в сильном магнитном поле // *ФТП*. — 1966. — Т. 8, № 12. — С. 3559.
- [368] *Захарченя Б. П., Сейсян Р. П.* Диамагнитные экситоны в полупроводниках // *Усп. физ. наук*. — 1969. — Т. 97, № 2. — С. 193–210.
- [369] *Сейсян Р. П.* Спектроскопия диамагнитных экситонов. — М., Наука, 1984.
- [370] *Yafet Y., Keyes R., Adams E.* Hydrogen atom in a strong magnetic field // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. — 1956. — Vol. 1, no. 3. — Pp. 137 – 142.
- [371] *Zhilich A. G., Halpern J., Zakharchenya B. P.* Magnetoabsorption oscillations and the zeeman effect of excitons for forbidden interband transitions in Cu_2O crystals // *Phys. Rev.* — 1969. — Vol. 188. — Pp. 1294–1302.
- [372] Quantum chaos and breaking of all anti-unitary symmetries in Rydberg excitons / M. Assmann, J. Thewes, D. Frohlich, M. Bayer // *Nat. Mater.* — 2016. — Vol. 15. — P. 741.
- [373] *Schweiner F., Main J., Wunner G.* Magnetoexcitons break antiunitary symmetries // *Phys. Rev. Lett.* — 2017. — Vol. 118. — P. 046401.
- [374] *Schweiner F., Main J., Wunner G.* Goe-gue-poisson transitions in the nearest-neighbor spacing distribution of magnetoexcitons // *Phys. Rev. E*. — 2017. — Vol. 95. — P. 062205.
- [375] Magneto-stark effect of yellow excitons in cuprous oxide / P. Rommel, F. Schweiner, J. Main et al. // *Phys. Rev. B*. — 2018. — Vol. 98. — P. 085206.

- [376] Гросс Е., Захарченя Б., Рейнов Н. Эффект Штарка в неоднородном электрическом поле у экситонов в закиси меди // *ДАН СССР*. — 1954. — № 97. — С. 221.
- [377] Гросс Е., Захарченя Б., Павинский П. Диамагнитные уровни экситона и циклотронный резонанс // *zhtf*. — 1957. — Т. 27. — С. 2177–2182.
- [378] Гросс Е. Ф., Каплянский А. А. Эффект ориентации напряжений на край фундаментального поглощения в кристаллах закиси меди // *ftt*. — 1960. — Т. 2. — С. 2968–2981.
- [379] Гросс Е. Ф. Спектр возбуждения экситонов в кристаллической решетке // *Усп. физ. наук*. — 1957. — Т. 63, № 11. — С. 575–611.
- [380] Гросс Е. Ф. Экситон и его движение в кристаллической решетке // *Успехи физических наук*. — 1962. — Т. 76, № 3. — С. 433–466.
- [381] Гросс Е. Ф., Каплянский А. А. Квадрупольное оптическое возбуждение основного состояния экситона в кристаллах закиси меди // *ФТТ*. — 1960. — Т. 2. — С. 379–380.
- [382] Ultranarrow optical absorption and two-phonon excitation spectroscopy of Cu_2O paraexcitons in a high magnetic field / J. Brandt, D. Fröhlich, C. Sandfort et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99. — P. 217403.
- [383] Stark structure of the rydberg states of alkali-metal atoms / M. L. Zimmerman, M. G. Littman, M. M. Kash, D. Kleppner // *Phys. Rev. A*. — 1979. — Vol. 20. — Pp. 2251–2275.
- [384] Пижус Г. Е., Бир Г. Л. Обменное взаимодействие в экситонах в полупроводниках // *ЖЭТФ*. — 1971. — Т. 60. — С. 195–207.
- [385] Wave-vector-dependent exciton exchange interaction / G. Dasbach, D. Fröhlich, H. Stolz et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91. — P. 107401.

- [386] *K*-dependent exchange interaction of the 1s orthoexciton in Cu₂O / F. Schweiner, J. Main, G. Wunner, C. Uihlein // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Vol. 94. — P. 115201.
- [387] Меркулов И. А. Влияние экситонного эффекта на электропоглощение в полупроводниках // *ЖЭТФ.* — 1974. — Т. 66. — С. 2314–2324.
- [388] Аронов А. Г., Иоселевич А. С. Влияние электрического поля на экситонное поглощение // *ЖЭТФ.* — 1978. — Т. 74. — С. 1043–1052.
- [389] Арешев И. П. Двухфотонное экситонное поглощение света в полупроводниках в постоянном электрическом поле // *ФТТ.* — 1979. — Т. 21, № 3. — С. 765.
- [390] Славянов С. Проблемы математической физики (издательство ЛГУ), №4 // Применение метода эталонных задач к возмущениям кулоновского поля. — 1970.
- [391] Мур В. Д., Попов В. С. Эффект Штарка на ридберговских атомах и пограничные резонансы сечения фотоионизации // *ЖЭТФ.* — 1988. — Т. 94. — С. 125–134.
- [392] von Trautenberg H. R., Gebauer R. Über den Starkeffekt II. Ordnung bei der Balmerreihe des Wasserstoffs // *Zeitschrift für Physik.* — 1929. — Vol. 54, no. 5. — Pp. 307–320.
- [393] Yu. S. S. Asymptotic solutions of the one-dimensional Schrödinger equation. Translations of mathematical monographs 151. — American Mathematical Society, 1996.
- [394] Damburg R. J., Kolosov V. V. A hydrogen atom in a uniform electric field // *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics.* — 1976. — Vol. 9, no. 18. — P. 3149.
- [395] Атом водорода в сильном электрическом поле / В. Вайнберг, В. Д. Мур, В. С. Попов, А. В. Сергеев // *ЖЭТФ.* — 1987. — Т. 93. — С. 450–462.

- [396] Штарковские резонансы и скейлинг ридберговских атомов / В. Д. Мур, В. С. Попов, А. В. Сергеев, А. В. Щеблыкин // *ЖЭТФ*. — 1989. — Т. 96. — С. 91–106.
- [397] Мур В. Д., Попов В. С., Сергеев А. В. К теории эффекта Штарка в сильном поле: критические поля, надбарьерные резонансы, зависимость от размерности // *ЖЭТФ*. — 1994. — Т. 106. — С. 1001–1030.
- [398] Cooke W. E., Gallagher T. F. Dependence of Rydberg-state field-ionization thresholds on $|m_l|$ // *Phys. Rev. A*. — 1978. — Vol. 17. — Pp. 1226–1228.
- [399] Глинский Г. Ф., Бенавидес Л. Влияние электрического поля на экситонные состояния в кристаллах с вырожденными зонами // *ФТТ*. — 1979. — Т. 21. — С. 2267.
- [400] Глинский Г. Ф., Бенавидес Л. Штарковский сдвиг и расщепление основного состояния непрямых экситонов в кубических кристаллах // *ФТТ*. — 1981. — Т. 23. — С. 136.
- [401] Глинский Г. Ф., Бенавидес Л. Влияние сильного электрического поля на спектр экситонного поглощения в кристаллах GaP // *ФТП*. — 1982. — Т. 16. — С. 485.
- [402] Park D. Relation between the parabolic and spherical eigenfunctions of hydrogen // *Zeitschrift für Physik*. — 1960. — Vol. 159, no. 2. — Pp. 155–157.