

ДВИЖЕНИЕ ТРЕХМЕРНОГО ЭКСИТОНА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ: «ФАЗОВЫЙ» ПЕРЕХОД ЭКСИТОН–МАГНИТОЭКСИТОН

Ю. Е. Лозовик*, С. Ю. Волков

Институт спектроскопии Российской академии наук
142190, Троицк, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 9 октября 2002 г.

Рассмотрена перестройка основного состояния экситона Ванье–Мотта при росте его импульса. Исследована фазовая диаграмма кулоновски взаимодействующих электрона и дырки на плоскости магнитный импульс – внешнее магнитное поле. Обнаружен скачкообразный «фазовый» переход экситон–магнитоэкситон при увеличении импульса в полях B , меньших определенного значения $B < B_{tr1}$. При увеличении импульса P выше некоторого критического значения $P_{tr}(B)$ основным состоянием системы вместо водородоподобного состояния, поляризованного силой Лоренца, становится магнитоэкситонное состояние, в котором скачком увеличивается среднее расстояние $\langle r \rangle$ между электроном и дыркой поперек поля. При увеличении импульса экситона его волновая функция вытягивается вдоль магнитного поля, приобретая форму сильно вытянутого эллипсоида. Интересно, что даже при $B \rightarrow 0$ импульс перехода стремится к конечному значению $P_0 > 0$. В точке перехода дисперсия экситона скачкообразно изменяет свое поведение от квадратичного до практически не зависящего от импульса. При $B > B_{tr1}$ переход экситон–магнитоэкситон становится размытым.

PACS: 71.35.Ji, 71.35.Lk, 63.20.Ls

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, основное состояние экситона Ванье–Мотта существенно изменяется в сильных магнитных полях, в которых характерное взаимодействие с полем (расстояние $\hbar\omega$ между уровнями Ландау) становится значительно больше энергии связи экситона Ry^* [1–6].

Поскольку уравнение Шредингера инвариантно относительно одновременной трансляции электрона и дырки и соответствующего калибровочного преобразования (см. [6]), имеется сохраняющийся трехмерный вектор — «магнитный импульс» \mathbf{P} , в отсутствие магнитного поля переходящий в обычный импульс [3]. Закон дисперсии экситона, $E(\mathbf{P})$, в очень сильных магнитных полях существенно меняется, в частности, существенно растет «магнитная масса» $m_{\perp}(\mathbf{V}) = (\partial^2 E / \partial \mathbf{P}_{\perp}^2)^{-1}$, определяющая при малых \mathbf{P}_{\perp} дисперсию экситона в направлениях, перпендикулярных полю [4–6]. Кроме того, на зависимости энергии экситона от \mathbf{P}_{\perp} в сильном магнитном поле

имеется точка перегиба, и закон дисперсии вместо квадратичного приобретает вид $E(\mathbf{P}_{\perp}) \propto 1/P_{\perp}$. Все это определяет характеристики магнитоэкситона — экситона в сильных магнитных полях.

Происходит ли перестройка экситона в магнитоэкситон просто как размытый переход (кроссовер)? В настоящей работе мы исследуем закон дисперсии экситона в произвольных магнитных полях и покажем, что в слабых магнитных полях происходит скачкообразный переход, а в магнитных полях, больших некоторого критического, — кроссовер.

Мы исследуем поведение трехмерного экситона с ненулевым импульсом во всем диапазоне магнитных полей, в том числе в относительно слабых магнитных полях. Для расчетов мы используем метод численного решения уравнения Шредингера во мнимом времени. При этом в полях, меньших некоторого критического, были обнаружены два различных режима для основного состояния экситона в зависимости от импульса экситона. В первом режиме (слабое магнитное поле и малый импульс) основному состоянию экситона соответствует слабополяризованная водородоподобная волновая функция, так как в эф-

*E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru

фактивном потенциале, описывающем внутреннюю структуру экситона, основную роль играет кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой. Во втором случае (импульсы больше критических) основной вклад в эффективный потенциал дают члены взаимодействия электрона и дырки с внешним магнитным полем (режим магнитоэкситона). В слабых магнитных полях при увеличении импульса экситона, как оказалось, происходит скачкообразный переход между этими двумя режимами и волновая функция экситона «перепрыгивает» из кулоновского в магнитный минимум эффективного потенциала. При этом переходе ширина волновой функции резко увеличивается от характерного размера водородоподобного состояния — эффективного боровского радиуса $a^* = \hbar^2 \epsilon / 2\mu e^2$ — до характерного размера магнитоэкситона — магнитной длины $l = \sqrt{\hbar / \mu \omega_c}$ (напоминаем, что речь идет о слабых магнитных полях, в которых $l \gg a^*$); здесь $\omega_c = eB / 2\mu c$ — циклотронная частота, $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ — приведенная масса (m_e и m_h — массы электрона и дырки), ϵ — диэлектрическая проницаемость материала. При этом в направлении магнитного поля волновая функция экситона сильно вытягивается. Это связано с тем, что в направлении магнитного поля эффективный потенциал задачи имеет только один минимум (кулоновский), но при этом волновая функция локализована далеко от характерной области, где велико кулоновское взаимодействие (далеко от области нулевого расстояния между электроном и дыркой), и поэтому состояние в направлении поля является слабосвязанным.

Зависимость среднего расстояния между электроном и дыркой от его импульса, связанная с поляризацией движущегося экситона, также отражает это структурное преобразование волновой функции с ростом его импульса. Как показывают расчеты, при импульсе экситона, меньшем некоторого критического значения P_{tr} , его поляризация линейно зависит от импульса, а коэффициент в этой зависимости связан с поляризуемостью экситона. При импульсе большем P_{tr} поляризация также является линейной функцией, но с другим коэффициентом. Этот факт объясняется тем, что при $P > P_{tr}$ расстояние между минимумами эффективного потенциала также линейно зависит от импульса, но с существенно большим коэффициентом: $\langle r \rangle = cP / eB_{\perp}$ (растущим с убыванием магнитного поля), как в случае экситона в очень сильных магнитных полях. В малой области значений импульса вблизи перехода (вблизи P_{tr}) эта зависимость нелинейна. Связано это с тем, что вблизи области перехода волновые функции, сосре-

доточенные в одном из минимумов, сильно вытягиваются в сторону другого минимума. При малых импульсах в произвольных магнитных полях дисперсия экситона квадратична по магнитному импульсу с зависящим от поля коэффициентом. Из рассчитанной дисперсии мы определили зависимость эффективной массы экситона от магнитного поля.

2. МОДЕЛЬ

Рассмотрим электрон и дырку в магнитном поле. Исходный гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{1}{2m_e} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_e} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_e) \right]^2 + \frac{1}{2m_h} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_h} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_h) \right]^2 - \frac{1}{\epsilon \sqrt{(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h)^2}}.$$

Как уже указывалось, уравнение Шредингера инвариантно относительно одновременной трансляции электрона и дырки и соответствующего калибровочного преобразования [6]. Инфинитизимальный оператор этого преобразования коммутирует с гамильтонианом, и этому соответствует закон сохранения магнитного импульса. Пусть магнитное поле направлено вдоль оси z . Магнитный импульс в цилиндрической калибровке $\mathbf{A} = [\mathbf{B} \times \mathbf{r}] / 2$ имеет вид [3, 4]

$$\mathbf{P}_{2D} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_{2D}} + \frac{e}{2c} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}], \quad P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

Здесь мы сделали замену

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e, \quad \mathbf{R} = m_e \mathbf{r}_e + m_h \mathbf{r}_h.$$

Индекс «2D» у векторов означает, что берутся только x - и y -компоненты вектора, перпендикулярные магнитному полю.

Ищем стационарные решения, являющиеся собственными функциями магнитного импульса:

$$\psi'(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \exp\left(-i \frac{e}{2c} [\mathbf{B} \times \mathbf{R}] \cdot \mathbf{r}\right) \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}).$$

В итоге гамильтониан системы для функции ψ примет вид

$$H = \frac{1}{2M} \left(\frac{\mu}{\eta} \right)^2 \mathbf{P}_{2D}^2 - \frac{\hbar}{2\mu} \Delta + i \frac{eB\hbar}{2c\eta} L_z + \frac{1}{2\mu} \left(\frac{eB}{2c} \mathbf{r}_{2D} - \frac{2\mu}{M} \mathbf{P}_{2D} \right)^2 - \frac{1}{\epsilon |\mathbf{r}|},$$

где

$$\eta^{-1} = m_e^{-1} - m_h^{-1}, \quad L_z = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}, \quad M = m_e + m_h.$$

Выберем безразмерные единицы для координаты, энергии и импульса:

$$r_0 = \frac{\epsilon \hbar^2}{2\mu e^2}, \quad E_0 = \frac{e^2}{\epsilon r_0}, \quad P_0 = \frac{M e^2}{\epsilon \hbar}$$

(все приведенные ниже результаты, в частности на рисунках, выражены в этих единицах). В качестве безразмерного управляющего параметра возьмем отношение характерных кулоновской и магнитной энергий: $b = \hbar \omega_c / E_0$. Другим управляющим параметром уравнения будет безразмерный импульс.

Гамильтониан в безразмерных переменных имеет вид

$$H = \frac{1}{4} \left(\frac{\mu}{\eta} \right)^2 \frac{M}{\mu} \mathbf{P}_{2D}^2 - \Delta + i b \frac{\mu}{\eta} L_z + \left(\frac{b}{2} \mathbf{r}_{2D} - \mathbf{P}_{2D} \right)^2 - \frac{1}{|\mathbf{r}|}. \quad (1)$$

3. МЕТОД РАСЧЕТА

Нам необходимо найти волновую функцию основного состояния и ее собственное значение. В нестационарном уравнении Шредингера

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi$$

перейдем формально к мнимому времени $t' = it$. Тогда уравнение примет вид

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -H \psi. \quad (2)$$

Ясно, что при $t \rightarrow \infty$ при любом начальном условии решение этого уравнения,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n C_n \psi_n(\mathbf{r}) \exp(-E_n t),$$

будет стремиться к волновой функции $\psi_0(\mathbf{r})$ основного состояния. Здесь $\psi_n(\mathbf{r})$ и E_n — собственные функции и собственные значения оператора H . Поэтому уравнение (2) можно решать следующим методом установления (мы ищем стационарное решение). Будем использовать явную схему:

$$\psi^{n+1} = \psi^n - dt H \psi^n.$$

Далее действуем следующим образом. Сначала задаем в качестве начального состояния некоторое разумное приближение волновой функции, ψ^0 . Например, типа $\exp(-x^2)$, так как решение нашего уравнения для основного состояния имеет похожий вид. Это делается для ускорения счета. Затем делаем одну итерацию по времени и полученное следующее приближение волновой функции, ψ^1 , нормируем:

$$\int \psi^{1*} \psi^1 d\mathbf{r} = 1,$$

и повторяем процедуру, пока волновая функция не перестанет сильно меняться.

Энергия находится по полученной волновой функции как среднее значение гамильтониана по этой функции:

$$E_0 = \int \psi_0^* H \psi_0 d\mathbf{r}.$$

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Мы проделали детальное моделирование трехмерного экситона при различных значениях магнитного поля и импульса для изучения его «фазовой диаграммы». Для конкретности параметры задачи при этом были взяты для GaAs:

$$\epsilon = 12.3, \quad m_e^* = 0.07 m_e, \quad m_h^* = 0.15 m_e.$$

Что касается приводимого ниже качественного анализа, он носит более общий характер.

Эффективный потенциал экситона — последние два члена в безразмерном гамильтониане (1) — определяется двумя конкурирующими взаимодействиями: кулоновским электрон-дырочным потенциалом и взаимодействием электрона и дырки с внешним магнитным полем. Качественный анализ поведения этого эффективного потенциала экситона при увеличении импульса (рис. 1) способствует пониманию поведения волновой функции, объясняя, таким образом, структурные преобразования, происходящие с экситоном при росте импульса P . Эти изменения во внутренней структуре экситона при изменении магнитного поля и импульса удобно схематически изобразить в виде «фазовой» диаграммы экситона в магнитном поле на плоскости B - P (рис. 2), которую мы детально обсудим ниже.

Рассмотрим сначала случай малых магнитных полей ($B_{tr1} > B > 0$) на рис. 2. В эффективном потенциале при достаточно больших импульсах появляются два минимума (ср. рис. 1а, б и 1в, г): первый связан с кулоновским взаимодействием электрона и дырки, второй — с параболическим магнитным

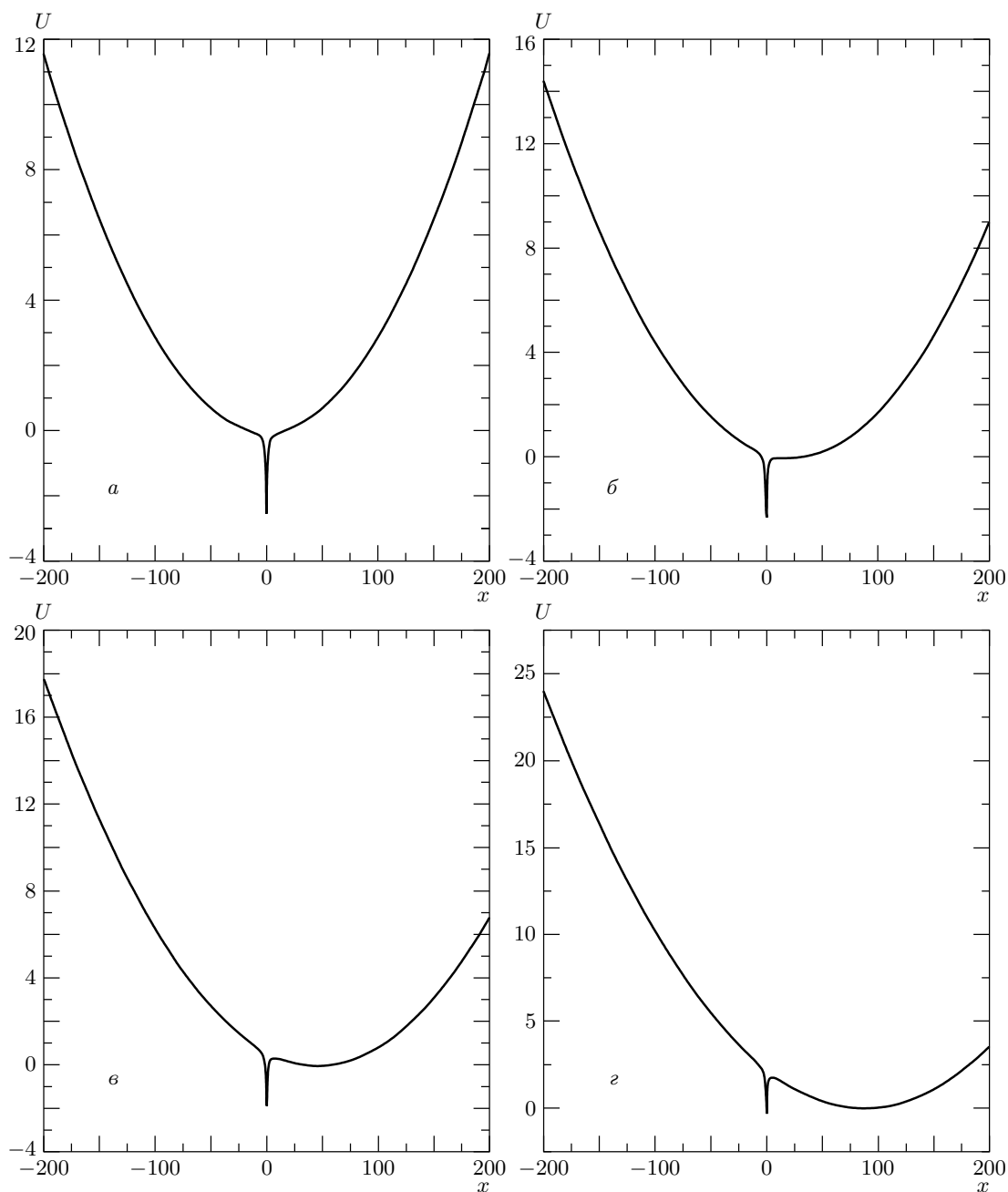


Рис. 1. Трансформация эффективного потенциала при увеличении импульса в поле $B = 0.5$ Тл при $P = 0.1$ (а), 0.4 (б), 0.8 (в), 1.5 (г). Для наглядности приведен график $U(x, y, z)$ при $y = 0, z = 0$. При малых P эффективный потенциал имеет лишь «кулоновский» минимум в точке $x = 0$. С ростом импульса появляется новый, «магнитный» минимум

потенциалом. С каждым из этих минимумов связан некоторый набор стационарных состояний. При большом расстоянии между минимумами (т. е. в слабых магнитных полях) перекрытие волновых функций нижних состояний пренебрежимо мало. При импульсах $P < P_{tr}$, где

$$P_{tr} \approx \sqrt{2M \left(E_b + \frac{\hbar\omega_c}{2} \right)},$$

кулоновский уровень E_C лежит ниже магнитного уровня E_m (рис. 3). Таким образом, при малых значениях импульса водородоподобное состояние явля-

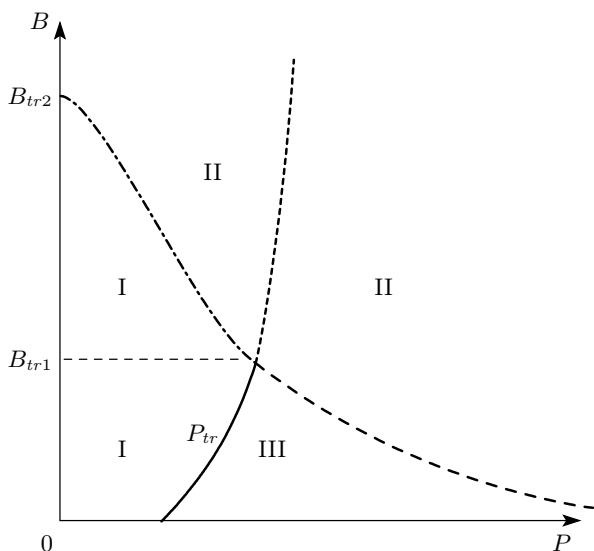


Рис. 2. «Фазовая» диаграмма экситона. Римскими цифрами отмечены области существования «кулоновского» экситона (I), магнитоэкситона (II), магнитоэкситона (основное состояние) при метастабильном «кулоновском» экситоне (III)

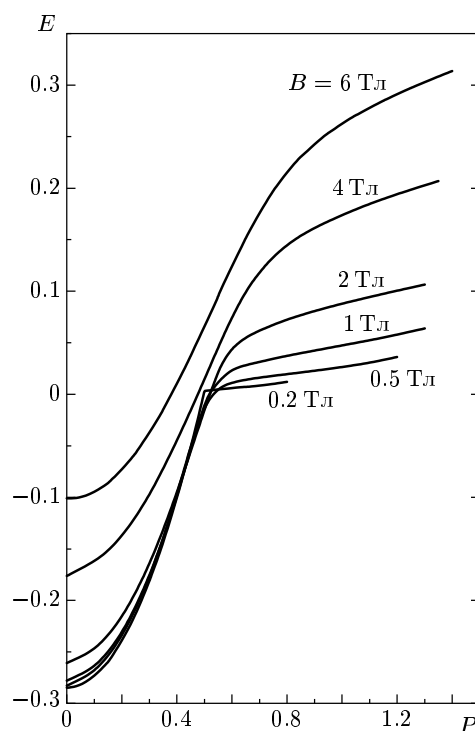


Рис. 4. Энергия экситона в зависимости от импульса при различных значениях магнитного поля

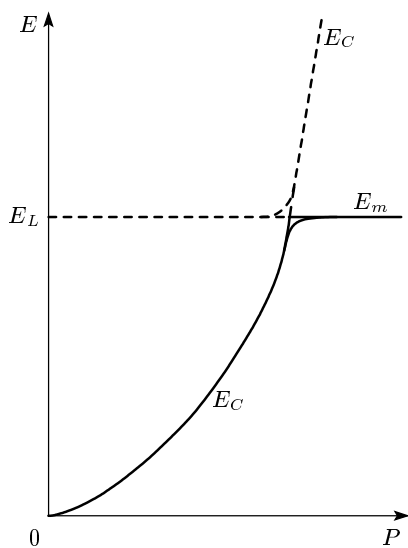


Рис. 3. Зависимость энергии в локальных минимумах эффективного потенциала от импульса: переход из кулоновского режима в магнитоэкситон. Аналогичные квазипересечения имеют место и для возбужденных уровней (E_L — уровень Ландау)

ется основным состоянием экситона, а состояние в магнитном минимуме является возбужденным. При увеличении импульса расположение уровней в минимумах изменяется, и при $P > P_{tr}$ основным состоя-

нием становится нижний уровень в магнитном минимуме, что соответствует магнитоэкситону. В силу слабого перекрытия волновых функций расталкивание соответствующих уровней мало даже в резонансном случае, т.е. в точке квазипересечения квадратичной зависимости $E(P)$, отвечающей кулоновскому минимуму, с энергией магнитоэкситона $E \approx \hbar\omega_c$, отвечающей связанному состоянию в магнитном минимуме (на нулевом уровне Ландау). Точка P_{tr} соответствует пересечению зависимостей энергий основных состояний в локальных минимумах эффективного потенциала — кулоновском и магнитном (см. рис. 3). Состояние в кулоновском минимуме после перехода становится возбужденным. Отметим следующий интересный факт: импульс экситона в точке перехода остается ненулевым даже при стремлении магнитного поля к нулю (см. выражение для P_{tr}). Резкий переход по импульсу присутствует вплоть до критического значения магнитного поля B_{tr1} , при котором с каждым из локальных минимумов связан отдельный набор связанных состояний. В полях, больших B_{tr1} , в отдельных минимумах эффективного потенциала нет связанных уровней, а волновая функция основного состояния экситона перекрывает оба минимума. В этом случае переход размыва-

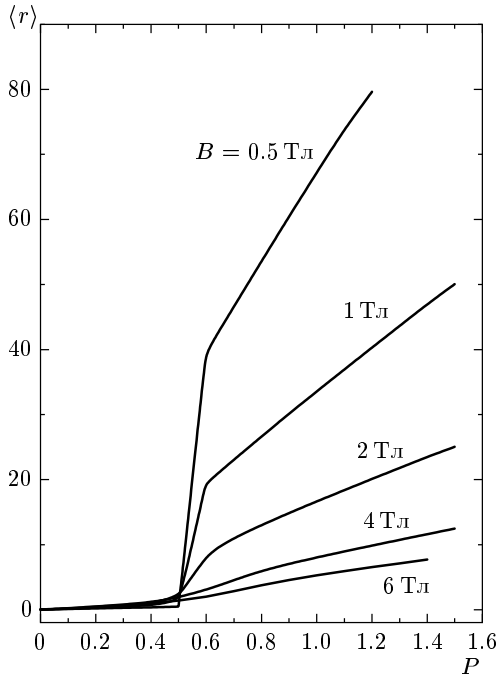


Рис. 5. Среднее расстояние $\langle r \rangle$ между электроном и дыркой в зависимости от импульса и магнитного поля

ется в кроссовер из области кулоновского режима в режим магнитоэкситона. При этом ширина области кроссовера увеличивается с ростом поля. Наконец, при $B = B_{tr2}$ даже при малых значениях импульса магнитоэкситон является основным состоянием¹⁾.

Результаты расчета энергии основного состояния экситона как функции импульса при различных значениях магнитного поля представлены на рис. 4. При небольших значениях импульса энергия в произвольных полях растет по квадратичному закону. При дальнейшем увеличении импульса в зависимости энергии от импульса появляется, как и для сильных магнитных полей [4, 6], точка перегиба, далее энергия практически не меняется. Это изменение происходит резко при $B < B_{tr1}$. При больших значениях поля этот резкий переход размывается в кроссовер и происходит плавное изменение зависимости $E(P)$ от квадратичного закона к постоянному значению, соответствующему уровню Ландау. Такое поведение энергии экситона, как уже говорилось, связано с изменением структуры эффективного потенциала.

¹⁾ Отметим, что, в отличие от рассмотренного в [5] случая двумерного непрямого экситона, для трехмерного экситона эффективный потенциал даже в сильных полях имеет при больших импульсах два минимума, а не один.

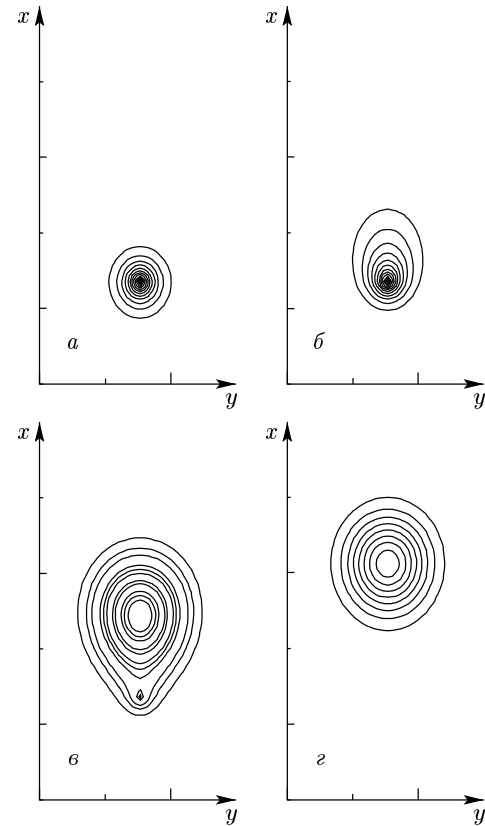


Рис. 6. Преобразование волновой функции основного состояния экситона в плоскости xy при увеличении импульса в зависимости от магнитного поля при $P = 0$ (а), 0.5 (б), 0.8 (в), 1.0 (г); $B = 1$ Тл

Интересно проанализировать поведение волновой функции экситона. При значениях импульса экситона, лежащих в малой окрестности значения P_{tr} , волновая функция, находясь в одном из минимумов, с ростом P начинает деформироваться, вытягиваясь в направлении другого минимума эффективного потенциала. При этом переходе расстояние между электроном и дыркой резко возрастает до значения $\langle r \rangle = cP/eB$, характеризующего режим сильного магнитного поля (см. рис. 5, 6) [4, 6], и волновая функция перемещается из кулоновского минимума в магнитный минимум. В результате перехода волновая функция экситона сильно вытягивается в направлении магнитного поля. Дело в том, что в направлении магнитного поля эффективный потенциал имеет только один минимум (кулоновский); при этом волновая функция локализована далеко от характерной области, где потенциал кулоновского взаимодействия велик. Поэтому состояние в направлении поля является слабосвязанным (см.

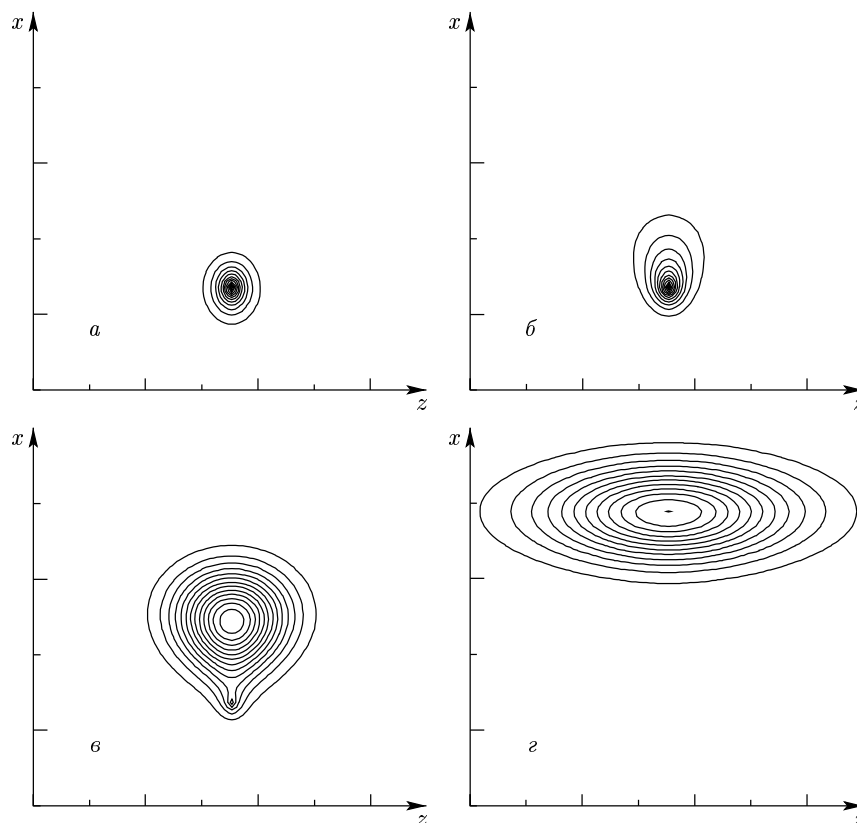


Рис. 7. Преобразование волновой функции основного состояния экситона в плоскости xz при увеличении импульса в зависимости от магнитного поля при $P = 0$ (а), 0.5 (б), 0.8 (в), 1.4 (г); $B = 2$ Тл

рис. 7). При увеличении импульса экситона волновая функция напоминает сильно вытянутый эллипсоид. Можно оценить отношение ширин волновой функции после перехода (характерные области локализации экситона) в плоскостях xz (вдоль поля) и xy (поперек поля). Вдоль оси z (вдоль магнитного поля) присутствует только один минимум — кулоновский; при этом характерный размер локализации волновой функции экситона вдоль направления поля будет определяться потенциалом

$$U(z) = -\frac{e^2}{\sqrt{z^2 + \rho_0^2}} \approx -\frac{e^2}{\rho_0} \left(1 - \frac{z^2}{2\rho_0^2}\right),$$

где $\rho_0 = 2P/B$. Характерной областью локализации вдоль поля в этом потенциале будет, очевидно,

$$R_z \approx \rho_0 \sim P/B.$$

Характерный размер R_{xy} волновой функции в плоскости xy определяется магнитным минимумом, так

как после перехода волновая функция сосредоточена именно в нем:

$$R_{xy} \approx \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}} \propto \sqrt{\frac{1}{B}}.$$

Их отношение есть

$$\frac{R_z}{R_{xy}} \propto \frac{P}{\sqrt{B}}.$$

Перестройка внутренней структуры экситона при изменении магнитного поля и импульса экситона (резкий переход в слабых полях и кроссовер в сильных полях) отражается и на поведении поляризации экситона. В связи с рис. 5, описывающим изменение положения максимума волновой функции экситона с ростом импульса P , отметим следующее. При $P \neq 0$ происходит поляризация экситона. В самом деле, при движении экситона в системе отсчета, связанной с центром масс, возникает электрическое поле

$$\mathbf{E} = \frac{1}{mc}[\mathbf{P} \times \mathbf{B}].$$

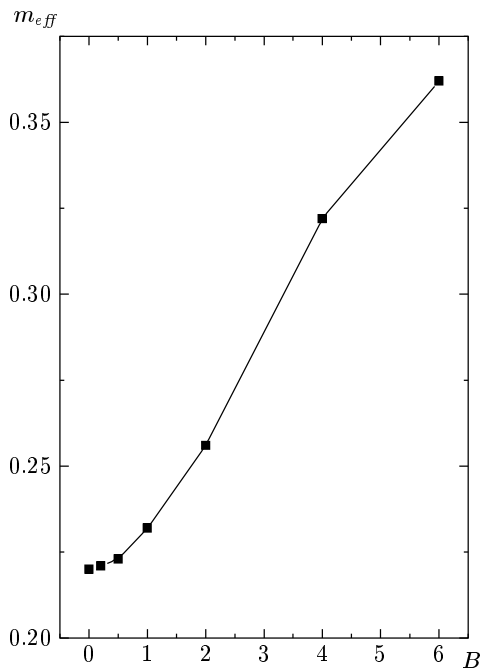


Рис. 8. Эффективная масса m_{eff} экситона как функция магнитного поля B

При малых P поле E мало, и в этой области отклик на электрическое поле является линейным:

$$\mathbf{d} = e\langle \mathbf{r} \rangle = \alpha \mathbf{E} = \frac{\alpha}{mc} [\mathbf{P} \times \mathbf{B}],$$

где α — поляризуемость водородоподобного состояния. Линейной зависимости наведенного дипольного момента от P соответствует линейная зависимость положения максимума волновой функции экситона (в относительных координатах) от P . Область указанной линейной зависимости простирается до таких значений P , при которых ослабленное из-за перемещения минимума эффективного потенциала кулоновское взаимодействие сравнивается по порядку величины с взаимодействием с магнитным полем. В этой области эффективный потенциал для экситона начинает существенно искажаться по сравнению с исходной кулоновской ямой. При значениях импульса, больших, чем $P = P_{tr}$, поляризация остается линейной, но при этом изменяется коэффициент этой зависимости, т. е. происходит резкое увеличение среднего расстояния $\langle r \rangle$. В области кроссовера, т. е. в магнитных полях $B > B_{tr1}$ вблизи значения импульса P_{tr} , закон поляризации сильно отличается

от линейного. Это связано с тем, что в этой области фазовой диаграммы волновые функции экситона, сосредоточенные в одном из минимумов, сильно деформируются, вытягиваясь в сторону другого минимума.

В области малых импульсов, как уже упоминалось, дисперсию экситонов можно описывать параболой, параметром которой является эффективная масса экситона в магнитном поле, $m_{eff} = 1/2\beta$, где β — крутизна указанной параболы. Зависимость эффективной массы экситона от магнитного поля представлена на рис. 8. В нулевом магнитном поле эффективная масса, как и следовало ожидать, равна затравочной массе $M = m_e^* + m_h^*$. При увеличении магнитного поля эффективная масса экситона монотонно возрастает (см. рис. 8).

Отметим, что аналогичная резкая перестройка структуры в магнитных полях, слабых по сравнению с атомными полями $B_0 = m^2 c e^3 / \hbar^3 \approx 2 \cdot 10^5$ Тл, возможна и для атома, движущегося с очень высокой скоростью.

Авторы признательны РФФИ и INTAS за поддержку работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. J. Elliott and R. Loudon, J. Phys. Chem. Sol. **8**, 382 (1959); **15**, 196 (1960).
2. H. Hasegawa and R. E. Howard, J. Phys. Chem. Sol. **21**, 179 (1961).
3. Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **53**, 717 (1967).
4. И. В. Лернер, Ю. Е. Лозовик, ЖЭТФ **78**, 1167 (1980).
5. L. V. Butov, C. W. Lai, D. S. Chemla, Yu. E. Lozovik, K. L. Campman, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **87**, 216804 (2001); L. V. Butov, A. V. Mintsev, Yu. E. Lozovik, K. L. Campman, and A. C. Gossard, Phys. Rev. B **62**, 1548 (2000); Yu. E. Lozovik, I. V. Ovchinnikov, S. Yu. Volkov, L. V. Butov, and D. S. Chemla, Phys. Rev. B **65**, 2353 (2002).
6. Ю. Е. Лозовик А. М. Рувинский, ЖЭТФ **112**, 1791 (1997); Yu. E. Lozovik and A. M. Ruvinsky, Phys. Lett. A **227**, 271 (1997).