

Самосогласованный расчет уровней Ландау квазидвумерного дырочного газа в GaAs/AlGaAs-гетеропереходе p -типа

© О.В. Волков

Институт физики твердого тела Российской академии наук,
142432 Черногловка, Московская обл., Россия

(Поступила в Редакцию 21 июля 1997 г.

В окончательной редакции 29 октября 1997 г.)

Предложен эффективный метод самосогласованного расчета уровней Ландау квазидвумерного дырочного газа в GaAs/AlGaAs-гетероструктурах в перпендикулярном магнитном поле. Метод основан на преобразовании уравнений Шредингера и Пуассона в систему нелинейных дифференциальных уравнений, пространственной дискретизации с последующим решением методом релаксации. Предложенная методика использована для моделирования оптических спектров рекомбинации квазидвумерного дырочного газа с электронами, локализованными на δ -слое доноров в одиночном гетеропереходе p -типа. Особое внимание уделено эффектам, связанным с зависимостью волновых функций и формы потенциальной ямы от магнитного поля, не обсуждавшимся ранее.

В течение последних десятилетий фундаментальные физические явления, обнаруженные в системах пониженной размерности, вызвали интенсивные исследования в этой области. В то время как свойства квазидвумерных ($2D$) электронных систем были широко изучены различными экспериментальными методами, гораздо меньше информации было получено о свойствах $2D$ -дырочных систем. В основном это объясняется тем, что эффективная масса дырок существенно больше электронной, а непараболичность и анизотропность вырожденной валентной зоны приводят к сложной структуре энергетического спектра в условиях размерного квантования. Несмотря на то что теоретическая модель для валентной зоны была построена более 40 лет назад [1,2], основные следствия из нее для случая систем пониженной размерности были получены и осознаны сравнительно недавно [3–7]. Так, было показано, что уровни Ландау $2D$ -дырочного газа не эквидистантны и существенно нелинейны [5]. Тем не менее это сложное поведение до недавнего времени напрямую никогда не наблюдалось экспериментально в силу малости энергетических расщеплений между такими уровнями. В случае $2D$ -электронов чрезвычайно полезным инструментом оказалось исследование рекомбинации электронного газа с дырками, локализованными на δ -слое акцепторов, расположенном на некотором расстоянии от гетерограницы [8]. При этом спектр люминесценции определяется произведением плотности состояний $2D$ -электронного газа на амплитуду волновой функции на δ -слое, определяющую матричный элемент перехода. Недавно была получена аналогичная структура и для гетероперехода p -типа с δ -слоем доноров. Изучение рекомбинации $2D$ -дырок с электронами, локализованными на δ -слое доноров, впервые позволило непосредственно наблюдать уровни Ландау дырочного газа [9]. Приведенный далее анализ посвящен в основном именно такой ситуации.

Задача расчета энергетического спектра $2D$ -дырочного газа в перпендикулярном магнитном поле рассматривалась многими авторами [4–7]. При этом все численные расчеты производились в рамках матричного

метода, основанного на диагонализации гамильтониана, записанного в базисе из некоторого набора функций, обычно имеющих простую аналитическую форму. Точность такого метода зависит от количества базисных функций и от степени полноты выбранного набора. Задача особенно усложняется в случае одиночного гетероперехода p -типа, поскольку здесь квантующий потенциал сам определяется искомыми волновыми функциями дырок. Это приводит к необходимости многократного итерационного повторения процедуры диагонализации, с весьма медленной сходимостью. Поэтому авторы обычно не демонстрируют каких-либо эффектов, связанных с самосогласованным расчетом и зависимостью формы потенциала от магнитного поля. Перечисленных выше недостатков практически лишен вычислительный метод, основанный на пространственной дискретизации задачи и сведении ее сначала к системе нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка, а затем к системе разностных уравнений. Он позволяет решить уравнения Шредингера и Пуассона совместно, получив самосогласованное решение без дополнительных итераций. Далее мы рассмотрим метод решения, получение исходной системы уравнений, а также задачу выбора граничных условий. Затем мы обсудим основные результаты расчета в нашей модели и их связь с наблюдаемым спектром рекомбинации в гетеропереходе с δ -легированием.

1. Вычислительная модель

Допустим, что мы уже получили систему дифференциальных уравнений первого порядка, соответствующую нашей физической системе. Запишем ее в наиболее общем виде

$$\mathbf{Y}' - \mathbf{F}(\mathbf{Y}) = \mathbf{0}, \quad (1)$$

где \mathbf{Y} — N -компонентный вектор решения. Выделим в интересующем нас пространственном интервале M равноотстоящих точек z_k на расстоянии h друг от друга

(z — независимая переменная). Тогда мы можем аппроксимировать нашу систему дифференциальных уравнений эквивалентной системой разностных уравнений для \mathbf{Y}_k -значений искомой функции в точках z_k

$$\mathbf{E}_k = \mathbf{Y}_k - \mathbf{Y}_{k-1} - \frac{h}{2} (\mathbf{F}(\mathbf{Y}_k) + \mathbf{F}(\mathbf{Y}_{k-1})) = \mathbf{0}. \quad (2)$$

Определим теперь новый $N \times M$ -компонентный вектор решения \mathbf{Y} , содержащий все компоненты векторов \mathbf{Y}_k ; тогда мы сможем записать нашу систему в следующем простом виде: $\mathbf{E}(\mathbf{Y}) = \mathbf{0}$. Общий метод решения такой системы (метод релаксации) заключается в применении итераций Ньютона. Определим вектор ошибки $\Delta_s = \mathbf{E}(\mathbf{Y}_s)$ после s -й итерации. Тогда следующий вектор решения можем получить по формуле

$$\mathbf{Y}_{s+1} = \mathbf{Y}_s - \left[\frac{\delta \mathbf{E}}{\delta \mathbf{Y}} \right]^{-1} \Delta_s. \quad (3)$$

Матрица Якоби $\hat{\mathbf{S}} = \delta \mathbf{E} / \delta \mathbf{Y}$ в нашем случае имеет блочно-диагональный вид. Мы использовали эффективный алгоритм обращения такой матрицы описанный в [10]. Преимущества описанного подхода становятся наиболее ощутимыми, если задача не ограничивается решением одного лишь уравнения Шредингера. В исходную систему уравнений (1) могут быть включены любые другие уравнения, решаемые совместно. Кроме того, задача на собственные значения также решается простым включением в исходную систему дополнительного уравнения $\lambda' = 0$, где собственное значение (энергия в нашем случае) λ рассматривается как функция независимой переменной z . Процедура итерационного решения системы (2) по формулам (3) требует задания определенного начального приближения. В нашем случае необходимо получить целый ряд решений с различными физическими свойствами. Для этого мы должны исходить из различных начальных приближений для каждого такого решения. Задача их получения становится тривиальной в предельном случае нулевого магнитного поля и плоского квантующего потенциала с бесконечными барьерами. Затем мы шаг за шагом будем изменять параметры по направлению к требуемым, используя решение, полученное на предыдущем шаге, в качестве начального приближения для следующего. Такая процедура обеспечит нам непрерывность решений и наследование их свойств.

Следуя [5], будем исходить из гамильтониана Латтинжера [2] 4×4 для случая внешнего магнитного поля B , параллельного оси z , пренебрегая линейными по квазиимпульсу членами [4],

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} X^+ - 3Z & S^+ & R^+ & 0 \\ S & X^- - Z & 0 & R^+ \\ R & 0 & X^- + Z & -S^+ \\ 0 & R & -S & X^+ + 3Z \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где

$$X^+ = P + Q, \quad X^- = P - Q, \quad Z = \frac{e}{2c} KB,$$

$$P = \frac{\gamma_1}{2} (k_z^2 + k^2), \quad k_{\pm} = k_x \pm ik_y,$$

$$Q = \frac{\gamma_2}{2} (-2k_z^2 + k^2), \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2,$$

$$R = -\frac{\sqrt{3}}{2} \bar{\gamma} k_-^2 + \frac{\sqrt{3}}{2} \mu k_+^2, \quad \bar{\gamma} = \frac{1}{2} (\gamma_3 + \gamma_2),$$

$$S = \sqrt{3} \gamma_3 k_z k_-, \quad \mu = \frac{1}{2} (\gamma_3 - \gamma_2).$$

При этом вектор волновой функции имеет вид (индекс обозначает проекцию спина на ось z)

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_{-3/2} \\ \phi_{-1/2} \\ \phi_{+1/2} \\ \phi_{+3/2} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Приложение внешнего магнитного поля B вдоль z -направления приводит к некоммутативности компонент квазиимпульса в плоскости: $[k_x, k_y] = -ieB / (\hbar c) = -il^{-2}$, где $l = (\hbar c / eB)^{1/2}$ — магнитная длина. Введем лестничные операторы по формулам

$$a^+ = \frac{l}{\sqrt{2}} k_+, \quad a = \frac{l}{\sqrt{2}} k_-, \quad N = a^+ a.$$

Как нетрудно убедиться, они удовлетворяют соотношению $[a, a^+] = il^2 [k_x, k_y] = 1$. Отсюда следует, что оператор N имеет собственные значения $0, 1, 2, \dots$. Обозначим соответствующие им собственные функции как $\zeta_0, \zeta_1, \zeta_2, \dots$; тогда для них будут справедливы следующие соотношения:

$$a^+ \zeta_{n-1} = \sqrt{n} \zeta_n, \quad a \zeta_n = \sqrt{n} \zeta_{n-1}. \quad (6)$$

Перепишем теперь гамильтониан (4) в терминах лестничных операторов, пренебрегая при этом анизотропным членом в R (содержащим μ), что позволит нам в дальнейшем записать вектор решения в конечном базисе. Как было показано в [5], учет анизотропии приводит к появлению антикроссингов уровней Ландау с номерами, отличающимися на четыре. Используя соотношение $N = (1/2)(l^2 k^2 - 1)$, мы можем записать гамильтониан (4) в следующем виде:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \Phi_h - 3q & b^+ & -d^+ & 0 \\ b & \Phi_l - q & 0 & -d^+ \\ -d & 0 & \Phi_l + q & -b^+ \\ 0 & -d & -b & \Phi_h + 3q \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где введены обозначения

$$\Phi_h = \frac{k_z^2}{m_h} + \frac{A}{l^2} \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad \Phi_l = \frac{k_z^2}{m_l} + \frac{B}{l^2} \left(N + \frac{1}{2} \right),$$

$$q = \frac{K}{2l^2}, \quad b = \frac{2s}{l} k_z a, \quad b^+ = \frac{2s}{l} k_z a^+,$$

$$d = \frac{r}{l^2} a^2, \quad d^+ = \frac{r}{l^2} a^{+2},$$

$$m_h = \left(\frac{\gamma_1}{2} - \gamma_2\right)^{-1}, \quad m_l = \left(\frac{\gamma_1}{2} + \gamma_2\right)^{-1},$$

$$A = \gamma_1 + \gamma_2, \quad B = \gamma_1 - \gamma_2,$$

$$r = \sqrt{3}\bar{\gamma}, \quad s = \sqrt{\frac{3}{2}}\gamma_3.$$

Здесь m_h и m_l — удвоенные эффективные массы тяжелых и легких дырок. Будем искать решение в виде

$$\Phi = \begin{pmatrix} \zeta_n(x, y)\psi_1(z) \\ -i\zeta_{n-1}(x, y)\psi_2(z) \\ -\zeta_{n-2}(x, y)\psi_3(z) \\ i\zeta_{n-3}(x, y)\psi_4(z) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где ζ_n — функции координат в плоскости (x, y) , соответствующие уровню Ландау с номером n (собственные функции оператора N), ψ_i — зависящие от z функции, соответствующие различным проекциям спина. Такая запись соответствует сохранению суммы спинового и орбитального момента импульса (ср. (5)), имеющему место при спин-орбитальном взаимодействии. Используя соотношения (6), можем переписать гамильтониан (7) в виде матрицы, действующей только на столбец функций $\psi_i(z)$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & -\frac{2Q}{l} \frac{\partial}{\partial z} & N/l^2 & 0 \\ \frac{2Q}{l} \frac{\partial}{\partial z} & \varepsilon_1 & 0 & \frac{M}{l^2} \\ \frac{N}{l^2} & 0 & \varepsilon_2 & \frac{2P}{l} \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & \frac{M}{l^2} & -\frac{2P}{l} \frac{\partial}{\partial z} & \varepsilon_3 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где мы сделали подстановку $k_z \rightarrow -i(\partial/\partial z)$ и обозначили

$$M = r\sqrt{(n-1)(n-2)}, \quad N = r\sqrt{n(n-1)},$$

$$P = s\sqrt{n-2}, \quad Q = s\sqrt{n},$$

$$E_0 = \frac{A}{l^2} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{3}{2} \frac{K}{l^2}, \quad E_1 = \frac{B}{l^2} \left(n - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2} \frac{K}{l^2},$$

$$E_2 = \frac{B}{l^2} \left(n - \frac{3}{2}\right) + \frac{1}{2} \frac{K}{l^2}, \quad E_3 = \frac{A}{l^2} \left(n - \frac{5}{2}\right) + \frac{3}{2} \frac{K}{l^2},$$

$$\varepsilon_0 = -\frac{1}{m_h} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E_0, \quad \varepsilon_1 = -\frac{1}{m_l} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E_1,$$

$$\varepsilon_2 = -\frac{1}{m_l} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E_2, \quad \varepsilon_3 = -\frac{1}{m_h} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E_3.$$

Теперь наша задача — получить из этого дифференциального оператора второго порядка систему дифференциальных уравнений первого порядка. Простейший метод — рассматривать первые производные ψ'_i как неизвестные функции — несколько неудобно, поскольку они не будут непрерывными на границе раздела GaAs и AlGaAs. Чтобы удовлетворить требованию непрерывности, построим новые неизвестные функции, подействовав на вектор ψ оператором скорости $v_z = (i/\hbar)(\mathbf{H}z - z\mathbf{H})$.

Непрерывность полученных функций будет являться следствием закона сохранения числа частиц. Подставляя гамильтониан в виде

$$\mathbf{H} = A \frac{\partial^2}{\partial z^2} + B \frac{\partial}{\partial z} + C,$$

аналогично [11] получаем

$$v_z = \frac{i}{\hbar} \left(2A \frac{\partial}{\partial z} + B\right). \quad (10)$$

Теперь мы можем записать полную систему дифференциальных уравнений первого порядка для функций ψ и $\tilde{\psi} = v_z \psi$. Первые четыре уравнения получаются непосредственно из (10), следующие четыре — путем дифференцирования первых и подстановки получившихся вторых производных ψ'' в исходный оператор (9)

$$\begin{cases} \psi'_1 - m_h(\tilde{\psi}_1 - \frac{Q}{l}\psi_2) = 0, \\ \psi'_2 - m_l(\tilde{\psi}_2 + \frac{Q}{l}\psi_1) = 0, \\ \psi'_3 - m_l(\tilde{\psi}_3 + \frac{P}{l}\psi_4) = 0, \\ \psi'_4 - m_h(\tilde{\psi}_4 - \frac{P}{l}\psi_3) = 0, \\ \tilde{\psi}'_1 - \left[\left(A(n + \frac{1}{2}) - m_l Q^2 - \frac{3}{2}K\right) \frac{1}{l^2} + u - \epsilon \right] \\ \quad \times \psi_1 + m_l \frac{Q}{l} \tilde{\psi}_2 - \frac{N}{l^2} \psi_3 = 0, \\ \tilde{\psi}'_2 - \left[\left(B(n - \frac{1}{2}) - m_h Q^2 - \frac{1}{2}K\right) \frac{1}{l^2} + u - \epsilon \right] \\ \quad \times \psi_2 - m_h \frac{Q}{l} \tilde{\psi}_1 - \frac{M}{l^2} \psi_4 = 0, \\ \tilde{\psi}'_3 - \left[\left(B(n - \frac{3}{2}) - m_h P^2 + \frac{1}{2}K\right) \frac{1}{l^2} + u - \epsilon \right] \\ \quad \times \psi_3 - m_h \frac{P}{l} \tilde{\psi}_4 - \frac{N}{l^2} \psi_1 = 0, \\ \tilde{\psi}'_4 - \left[\left(A(n - \frac{5}{2}) - m_l P^2 + \frac{3}{2}K\right) \frac{1}{l^2} + u - \epsilon \right] \\ \quad \times \psi_4 + m_l \frac{P}{l} \tilde{\psi}_3 - \frac{M}{l^2} \psi_2 = 0, \end{cases} \quad (11)$$

где u — электростатический потенциал, ϵ — собственное значение энергии. В случае $n = 0$ все компоненты волновой функции (8), кроме имеющей спин $-3/2$, равны нулю. При этом в системе (11) остаются только первое и пятое уравнения; это состояние чистое по спину. В случае $n = 1$ имеются две, а в случае $n = 2$ — три ненулевые спиновые компоненты, причем в системе (11) остаются четыре или шесть уравнений соответственно. Они имеют два или три решения, соответствующих различным спиновым подуровням. Все остальные состояния имеют все четыре ненулевые спиновые компоненты, а система (11) допускает четыре различных решения. Тем не менее в предельном случае $B = 0$ все решения становятся чистыми по спину. Проекцию спина, соответствующую оставшейся в этом пределе, ненулевой компоненте волновой функции, и будем приписывать уровню Ландау. При этом решения со спином $\pm 3/2$ будут соответствовать тяжелым дыркам, а со спином $\pm 1/2$ — легким. Следуя [12], будем считать номером уровня Ландау N индекс i доминирующей в пределе $B \rightarrow 0$ компоненты $\zeta_i(x, y)$ в векторе решения (8), т.е. $n, n-1, n-2, n-3$ для состояний со спином $-3/2$,

$-1/2, +1/2, +3/2$ соответственно. В этой системе обозначений все уровни Ландау имеют по четыре спиновых подуровня, два соответствуют тяжелым и два легким дыркам.

Для того чтобы получить полную систему уравнений, описывающую рассматриваемую задачу, мы должны включить в систему уравнение Пуассона для потенциала u , которое является уравнением второго порядка. Мы можем преобразовать его в уравнение первого порядка, проинтегрировав по координате z . Интеграл от квадрата волновой функции, который войдет в это уравнение, мы можем получить в качестве еще одной неизвестной функции χ , удовлетворяющей уравнению $\chi' = |\psi|^2$. И наконец, последнее уравнение — на собственное значение ϵ . Таким образом, получаем

$$\begin{cases} u' + 4\pi \frac{e^2}{\epsilon} [n_s(p_l \chi + \rho_l - 1) + N_i z - N_s] = 0, \\ \chi' - \psi_1^2 - \psi_2^2 - \psi_3^2 - \psi_4^2 = 0, \\ \epsilon' = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Здесь мы ввели следующие обозначения: n_s — плотность дырочного газа на единицу площади поверхности, ϵ — диэлектрическая проницаемость, l — индекс, нумерующий данный уровень энергии, p_l — доля общего числа дырок, принадлежащая к l -му уровню энергии ($\sum p_l = 1$), χ — интеграл от плотности волновой функции ($\chi(z \rightarrow -\infty) = 0, \chi(z \rightarrow +\infty) = 1$), ρ_l — интеграл от плотности волновой функции, усредненный по всем остальным уровням: $\rho_l = \sum_{i \neq l} p_i \chi_i$, N_i — объемная плотность заряженных примесей в слое обеднения, N_s — полное число заряженных примесей в слое обеднения на единицу площади гетероперехода. При этом $N_s = W_d N_i$, где W_d — ширина слоя обеднения.

Как известно, в условиях стационарного фотовозбуждения потенциал за гетерограницей очень быстро становится плоским за счет нейтрализации заряда слоя обеднения [13]. Квазиуровень Ферми дырок при этом проходит не на уровне доноров, формирующих слой обеднения, как считается в [5,6], а примерно посередине между верхом валентной зоны и уровнями акцепторной примеси. Величина энергии Ферми, отсчитанная от верха валентной зоны, при этом будет равна половине энергии связи акцептора: $U_d \approx 15 \text{ meV}$ (рис. 1, а). Ширина слоя обеднения может быть оценена из первого уравнения (12), если не учитывать заряд дырок и приравнять $u(W_d) = U_d$. Таким образом, получаем $W_d = (U_d \epsilon / 2\pi e^2 N_i)^{1/2}$. Для $N_i \approx 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ получаем $W_d \approx 1500 \text{ \AA}$.

Решение уравнений (11), (12) с помощью описанного выше метода релаксации возможно лишь на конечном отрезке по координате z . В качестве такого отрезка удобно взять область шириной W_d между гетерограницей и областью постоянного потенциала. Как будет показано далее, для случая постоянного потенциала существует простой алгоритм построения граничных условий для волновой функции, учитывающих ее проникновение в

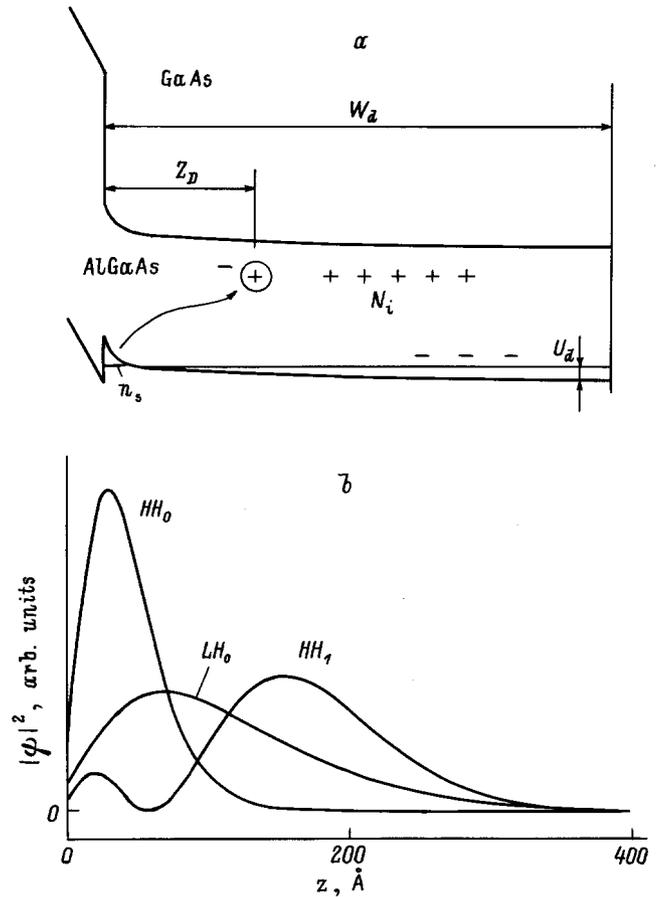


Рис. 1. а) Структура зон вблизи гетерограницы и основные параметры модели. б) Квадрат волновой функции в нулевом магнитном поле в зависимости от расстояния до гетерограницы для размерно-квантованных подзон HH_0, LH_0 и HH_1 .

барьер. При этом за левой границей, т.е. в AlGaAs, мы также будем считать потенциал постоянным, поскольку интервал его изменения значительно превышает глубину проникновения волновой функции. В таком приближении волновая функция $y = \{\psi, \tilde{\psi}\}$ является решением дифференциального уравнения $y' + Ay = 0$ с не зависящей от z матрицей A . Граничные условия, необходимые для решения уравнений (11), (12) на интервале $[0, W_d]$, состоят из двух частей. Во-первых, мы должны гарантировать, что волновая функция затухает в барьере. Для этого мы должны получить матрицы-проекторы на подпространства собственных векторов матрицы A с положительной и отрицательной вещественной частью. Легко получить матрицу \tilde{A} (как решение уравнения $\tilde{A}^2 = A^2$), которая отличается от A только знаком некоторых собственных значений. Выберем эти знаки так, чтобы вещественные части всех собственных значений были положительными. Тогда мы сможем получить матрицы-проекторы по формулам $A^\pm = A \pm \tilde{A}$. Второе граничное условие включает интеграл от плотности волновой функции χ . На правом краю промежутка его можно положить равным единице, поскольку амплитуда волновой функции

здесь пренебрежимо мала. Однако для левой границы требуется точное вычисление. В наиболее общем случае $\chi = \int y^T D y dz$, где D — квадратичная форма. Проблема сводится к вычислению интеграла

$$\int_0^{\infty} y^T D y dz = y_0^T I_0^{\infty}(A, D) y_0,$$

где I_0^{∞} — матрица квадратичной формы, которую необходимо найти. В случае не зависящей от z матрицы A мы можем записать вектор решения y с помощью матричной экспоненты, которая понимается как сумма соответствующего ряда $y(z) = e^{-Az} y_0$; следовательно, $I = \int e^{-A^T z} D e^{-Az} dz$. Интегрируя по частям и учитывая, что при интегрировании с бесконечным пределом $e^{-Az} \rightarrow 0$, получаем следующее рекуррентное соотношение, позволяющее вычислить I_0^{∞} с любой заданной степенью точности:

$$I_0^{\infty}(A, D) = \frac{1}{2} D A^{-1} + \frac{1}{2} I_0^{\infty}(A, D - A^T D A^{-1}). \quad (13)$$

Теперь мы можем записать необходимые нам граничные условия на левой и правой границах в следующем виде:

$$\begin{cases} A_0^+ y_0 = 0, \\ \chi_0 - y_0^T I_0 y_0 = 0, \\ u_0 = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} A_1^- y_1 = 0, \\ \chi_1 = 1, \end{cases} \quad (14)$$

где индексы 0, 1 обозначают параметры, вычисленные на левой и правой границах соответственно. Процедура самосогласованного расчета формы потенциала требует вычисления интегральной функции плотности $\rho_l(z)$ и чисел заполнения p_l на каждом шаге по магнитному полю. Числа заполнения должны вычисляться в соответствии с зависящей от магнитного поля емкостью уровней Ландау. При этом подразумевается, что фактор заполнения ν меньше, чем общее число уровней M , участвующих в расчете. В области магнитных полей, где это условие не выполняется, мы в качестве первого приближения можем положить все p_l равными M^{-1} . Однако этот подход приводит нас к совершенно неправильному результату в пределе нулевого магнитного поля, поскольку в этом случае все дырки будут иметь $\mathbf{k} = 0$. Для решения этой проблемы мы воспользовались следующим приемом. В некотором магнитном поле B_x , где $\nu < M$, зафиксировав в гамильтониане множитель $(2N+1)/(2l^2)$ и будем уменьшать магнитное поле, сохраняя постоянными также все числа заполнения p_l . В пределе $B \rightarrow 0$ это соответствует $N \rightarrow \infty$, при этом уровень N переходит в состояние с $(k^2/2) = (2N+1)(eB_x)/(2\hbar c)$. Два спиновых подуровня переходят в две спиновые ветви дисперсии [4,6]. Равные числа заполнения уровней Ландау будут соответствовать равным долям состояний, эквидистантных по k^2 . При этом мы не обязательно получим точное значение энергии Ферми в нулевом поле, но аппроксимация формы потенциальной ямы будет вполне удовлетворительной.

Форму потенциальной ямы в области $0 < B < B_x$ можно сохранить в памяти и использовать для последующего расчета энергетических уровней.

Для сравнения результатов расчета с данными оптических экспериментов необходимо получить выражения для наблюдаемых в таких экспериментах величин: интенсивности и степени поляризации рекомбинационного излучения. Отвлекаясь от конкретной формы волновой функции связанного на доноре электрона, которая подобна основному состоянию атома водорода, мы будем аппроксимировать ее обратно экспоненциальной зависимостью в z -направлении: $|e_D\rangle = \exp(-|z - z_D|/a_D)$, где z_D — координата δ -слоя, a_D — борковский радиус. С точностью до численного множителя интенсивность люминесценции в $\sigma+$ и $\sigma-$ поляризации для уровня с индексом l может быть записана в виде

$$\begin{cases} I_l^+ = p_l \left[\frac{3}{4} \langle \psi_1 | e_D^- \rangle + \frac{1}{4} \langle \psi_2 | e_D^+ \rangle \right], \\ I_l^- = p_l \left[\frac{3}{4} \langle \psi_4 | e_D^+ \rangle + \frac{1}{4} \langle \psi_3 | e_D^- \rangle \right], \end{cases} \quad (15)$$

где $|e_D^{\pm}\rangle$ — волновые функции электрона в z -направлении с двумя направлениями спина, а матричные элементы $\langle \psi_i | e_D^{\pm}\rangle$ понимаются как интегралы по переменной z . Здесь мы учли, что связанный со спином матричный элемент оптического перехода для тяжелых дырок втрое больше, чем для легких [14]. При этом правило отбора для спинов следующее: разность спинов электрона и дырки должна быть равна ± 1 (ср. (8) и (5)). Пренебрегая спиновым расщеплением электрона и его поляризацией, можем положить $|e_D^{\pm}\rangle = |e_D\rangle$, и тогда суммарная интенсивность циркулярно поляризованного излучения будет равна

$$I_l^{\sigma} = \frac{p_l}{4} \left[3 \langle \psi_1 | e_D \rangle + \langle \psi_2 | e_D \rangle + \langle \psi_3 | e_D \rangle + 3 \langle \psi_4 | e_D \rangle \right], \quad (16)$$

а степень поляризации

$$\begin{aligned} \rho_l &= \frac{I_l^+ - I_l^-}{I_l^+ + I_l^-} \\ &= \frac{3 \langle \psi_1 | e_D \rangle + \langle \psi_2 | e_D \rangle - \langle \psi_3 | e_D \rangle - 3 \langle \psi_4 | e_D \rangle}{3 \langle \psi_1 | e_D \rangle + \langle \psi_2 | e_D \rangle + \langle \psi_3 | e_D \rangle + 3 \langle \psi_4 | e_D \rangle} \end{aligned} \quad (17)$$

В случае линейно поляризованного света разность спинов должна быть нулевой, а спиновый матричный элемент будет равен $1/2$ [14]. Соответственно для интенсивности получим $I_l^{\pi} = (p_l/2) [\langle \psi_2 | e_D \rangle + \langle \psi_3 | e_D \rangle]$. В расчетах мы исходили из следующего набора параметров [6]: $\gamma_1 = 6.85$, $\gamma_2 = 2.1$, $\gamma_3 = 2.9$, $K = 1.2$, $\varepsilon = 12.5$.

2. Результаты и их обсуждение

Как показывают расчеты, при выбранных значениях $U_d = 15 \text{ meV}$ и $N_i = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (рис. 1, *a*) в потенциальной яме помещаются три уровня размерного квантования: нижний уровень тяжелых дырок HN_0 , нижний уровень легких дырок LH_0 и первый размерно-квантованный уровень тяжелых дырок HN_1 . На рис. 1, *b*

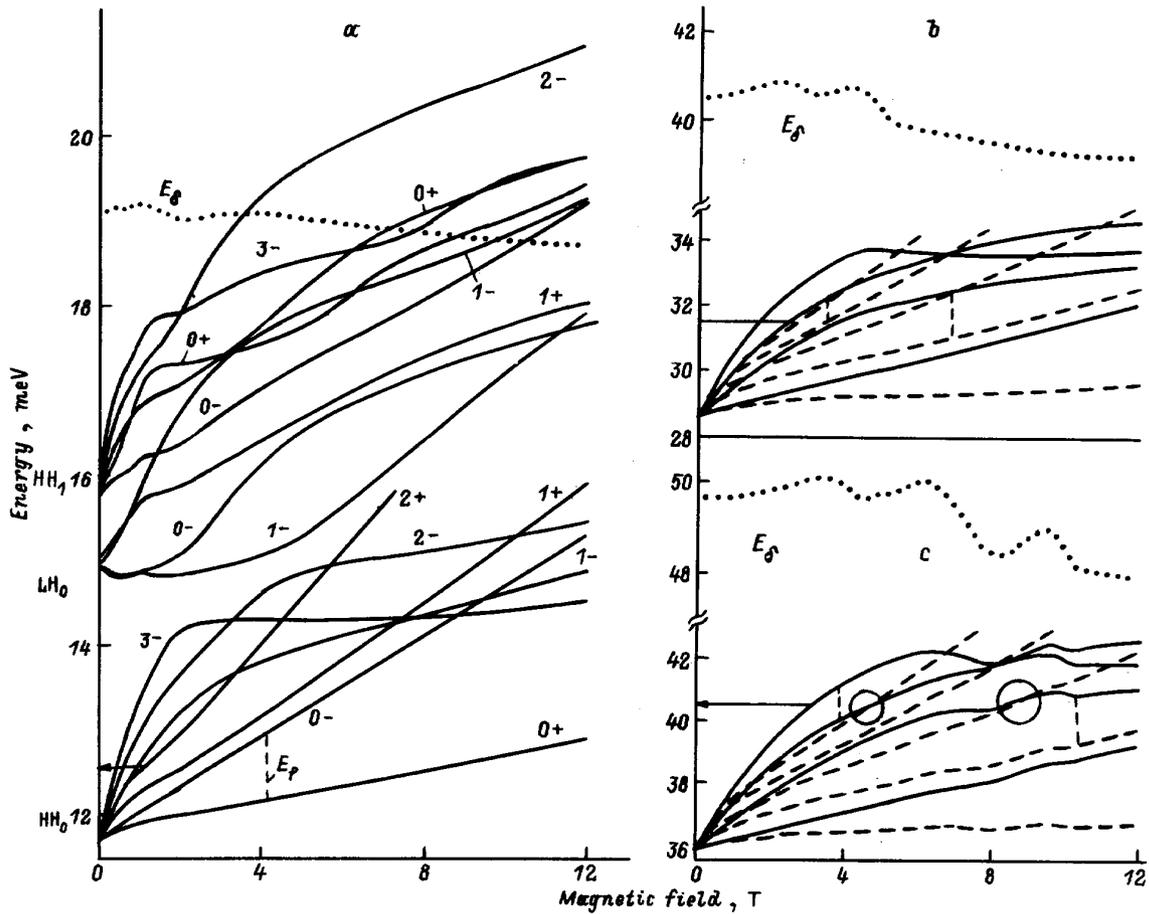


Рис. 2. *a* — энергетические уровни 2D-дырочного газа в зависимости от величины магнитного поля для трех размерно-квантованных подзон при концентрации $1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Показаны также положение уровня Ферми E_f и величина электростатического потенциала на δ -слое U_δ . Положение уровня Ферми в нулевом магнитном поле отмечено стрелками. *b, c* — энергетические уровни основной тяжелодырочной подзоны для концентраций $5 \cdot 10^{11}$ и $7.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ соответственно. Показана также зависимость U_δ от магнитного поля, отражающая заполнение и опустошение уровней с различным спином, показанных сплошной (—) и пунктирной (+) линией. Кружками обозначены области пиннинга энергетических уровней.

представлена зависимость квадрата волновой функции $|\psi|^2 = \psi_1^2 + \psi_2^2 + \psi_3^2 + \psi_4^2$ от координаты z в нулевом магнитном поле. Уровни Ландау для этих трех размерно-квантованных подзон в интервале магнитных полей от 0 до 12 Т для концентраций $n_s = 1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ представлены на рис. 2, *a*. На этом же рисунке показано положение уровня Ферми E_f . Как видно из рисунка, чистый по спину уровень Ландау $0-$ в подзоне HH_0 не является самым низким по энергии, уровень $0+$ расположен существенно ниже его. Из всего набора уровней только $0-$ остается более или менее линейным во всем диапазоне магнитных полей: его отклонения от линейности вызваны только изменением формы потенциальной ямы. Наибольшую нелинейность в подзоне HH_0 имеют уровни $N-$ (при $N > 0$), причем она увеличивается с ростом N . На рис. 3 представлена зависимость квадрата волновой функции $|\psi|^2$ от координаты z для уровней Ландау H_03- , L_00+ и H_13- трех рассматриваемых подзон в полях 1, 5 и 12 Т. Как видно из этого рисунка, нелинейность уровней $N-$ в подзоне HH_0 однозначно связана с сильной зависимо-

стью волновой функции от магнитного поля. Напротив, уровни $N+$ ведут себя практически линейно по полю. Их волновые функции мало отличаются от волновой функции $0-$ во всем диапазоне магнитных полей.

Уровни Ландау легких дырок подзоны LH_0 отличаются еще большей нелинейностью даже в диапазоне малых полей. Качественно это объясняется наличием в гамильтониане (9) членов, пропорциональных $l^{-1} = \sqrt{B}$, действующих на компоненты волновой функции со спином $\pm 1/2$ и доминирующих в диапазоне малых полей. При этом даже знак g -фактора легких дырок оказывается противоположным знаку g -фактора тяжелых дырок: уровни с отрицательной проекцией спина лежат ниже по энергии. Кроме того, уровни $0-$ и $0+$ имеют большую энергию, чем $1-$ и $1+$ (хотя для больших номеров это уже не так). Эта аномалия объясняется, по-видимому, тем, что эти уровни имеют неполный набор спиновых компонент. Как видно из рис. 3, волновая функция уровня $0+$ существенно меняется с ростом магнитного поля, ее максимум смещается вправо, что и вызывает увеличение энергии.

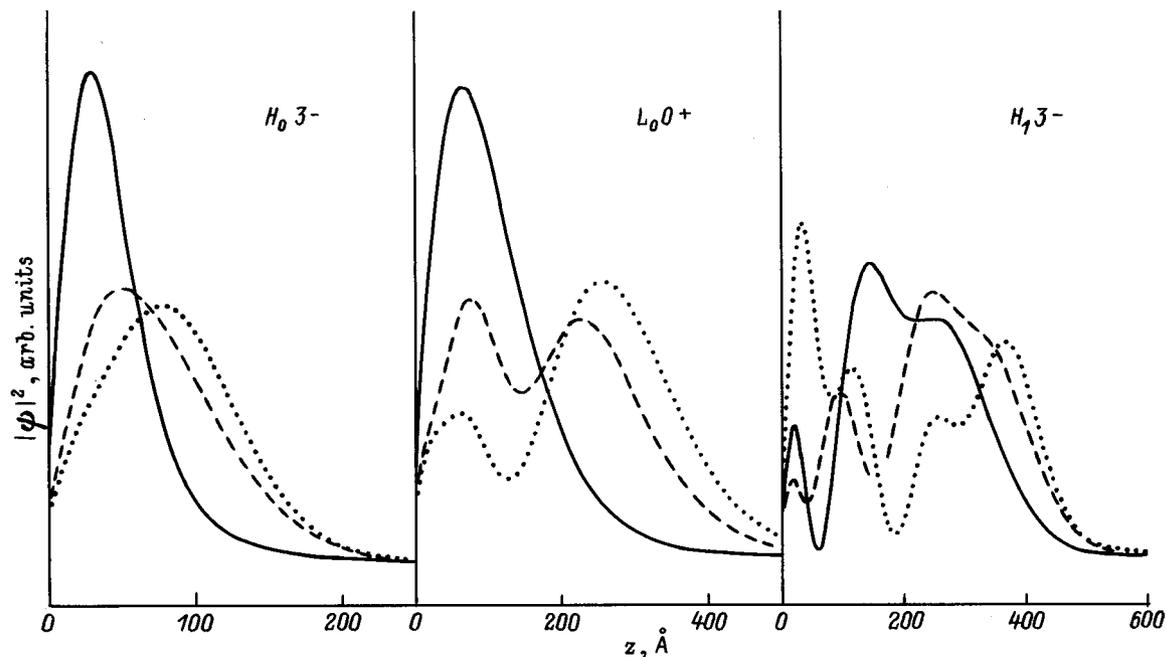


Рис. 3. Квадрат волновой функции в зависимости от расстояния до гетерограницы для уровней Ландау трех размерно-квантованных подзон в магнитных полях 1 (сплошная линия), 5 (штриховая) и 12 Т (пунктирная) при концентрации $5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Аналогичным образом ведут себя и другие уровни. На рисунке виден также немонотонный характер изменения формы волновой функции, связанный с возникновением новых нулей с ростом магнитного поля. Эта особенность характерна для всех дырочных уровней, кроме нескольких с неполным набором спиновых компонент. Она заключается в том, что количество нулей волновой функции непрерывно увеличивается с ростом магнитного поля примерно как \sqrt{B} ; коэффициент зависит от номера уровня. Качественно это объясняется наличием в гамильтониане (4) члена с $S \sim k_z k_-$, смешивающего движение в плоскости потенциальной ямы с движением по нормали к ней. Если же мы обратимся к закону дисперсии в случае нулевого магнитного поля [3], то появление новых нулей будет связано с возникновением антикроссингов различных размерно-квантованных подзон. Уровни Ландау строятся из состояний с $k^2 \sim B$, энергия размерно-квантованных подзон пропорциональна n^2 , соответственно антикроссинги возникают при $k^2 \sim n^2$, отсюда ясно, что число нулей должно расти как k или \sqrt{B} . Уровни Ландау подзоны HH_1 имеют еще более сложную структуру. Здесь g -фактор также имеет обратный знак, однако он не так сильно зависит от магнитного поля, как в случае легких дырок. Это явление объясняется, видимо, взаимодействием с нижележащей подзоной легких дырок. Хотя собственно уровни Ландау разных подзон не имеют ярко выраженных антикроссингов и могут пересекаться между собой, но общий характер их полевой зависимости отражает антикроссинги, существовавшие в дисперсии. Волновые функции уровней Ландау этой подзоны начинают существенно зависеть от

магнитного поля уже в полях 1 Т (рис. 3). Это, по-видимому, отражает возросшую с увеличением k_z роль перекрестного члена $S \sim k_z k_-$ в гамильтониане (4).

С увеличением концентрации дырочного газа изменение формы волновых функций в магнитном поле начинает все сильнее сказываться на форме потенциальной ямы, поскольку в одном и том же поле оказываются заполненными уровни со все большими номерами. Для того чтобы оценить масштаб изменений формы потенциала, на рис. 2 пунктирной линией приведены зависимости потенциала на δ -слое $U_\delta = u(z_D)$ от магнитного поля. При концентрации $5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (рис. 2, b) на форму потенциальной ямы оказывает существенное влияние заполнение уровней N - подзоны HH_0 в диапазоне полей, где их волновые функции начинают смещаться вправо благодаря появлению новых нулей. Если такой уровень оказывается заполненным, это приводит к расширению потенциальной ямы и к увеличению U_δ и энергии вышележащих размерно-квантованных подзон благодаря общему увеличению разности потенциалов между левым и правым краем потенциальной ямы. Когда впоследствии уровень Ферми проходит по этому уровню, его опустошение сопровождается резким изменением формы ямы и соответствующим уменьшением энергии вышележащих уровней. Как видно из рис. 2, b, осцилляции в полях 2.5 и 4.5 Т однозначно связаны с опустошением уровней Ландау 2- и 1- соответственно. Последующее плавное падение U_δ в диапазоне больших полей, по-видимому, связано с тем, что волновая функция уровня 0+ имеет тенденцию сжиматься с ростом магнитного поля. Еще одно интересное явление, связанное с изменением фор-

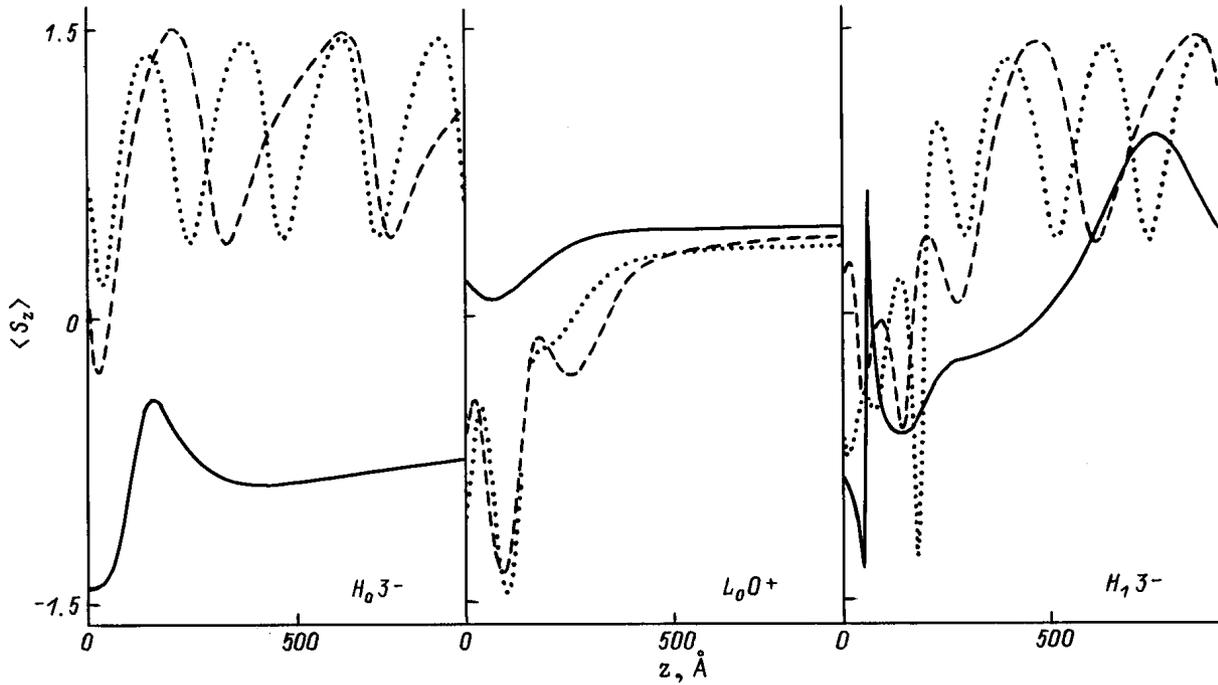


Рис. 4. Зависимость среднего спина от расстояния до гетерограницы для уровней, показанных на рис. 3.

мы потенциальной ямы, имеет место при пересечении уровней $N-$ и $M+$, если при этом по одному из них проходит уровень Ферми. При концентрации $7.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (рис. 2, с) такая ситуация возникает дважды: в поле 4.7 Т, где пересекаются уровни $2-$ и $4+$, и в поле 9 Т, где пересекаются уровни $1-$ и $2+$. При пересечении уровней дырки начинают перераспределяться между ними. В результате заполнение уровня $N-$ увеличивается, а $M+$ уменьшается. Но поскольку волновая функция уровня $N-$ существенно шире, чем $M+$, это приводит к изменению формы потенциальной ямы, что видно по увеличению U_δ . Однако из-за того, что волновая функция уровня $N-$ существенно шире, она сильнее реагирует на это изменение, и ее энергия увеличивается. Возникшая обратная связь уменьшает заполнение этого уровня, в результате возникает пиннинг этих двух уровней: на некотором интервале по магнитному полю они идут очень близко друг от друга, и меняется только заполнение уровней. Все это сопровождается появлением особенности в U_δ и в энергии вышележащих уровней. Понятно, что корректный расчет такой ситуации требует задания конкретной дырочной температуры. Описанная выше схема расчета чисел заполнения p_i подразумевает нулевую температуру и будет приводить к вычислительной неустойчивости в случае пиннинга. Мы использовали простейший метод ликвидации этой неустойчивости, который заключался в введении линейного размытия уровня Ферми в фиксированном интервале по энергии.

На рис. 4 приведены зависимости среднего спина $\langle S_z \rangle$ от координаты z для представленных на рис. 3 уровней

Ландау, вычисленные по формуле

$$\langle S_z \rangle = \frac{-\frac{3}{2}\psi_1^2 - \frac{1}{2}\psi_2^2 + \frac{1}{2}\psi_3^2 + \frac{3}{2}\psi_4^2}{\psi_1^2 + \psi_2^2 + \psi_3^2 + \psi_4^2}.$$

Как видно из этого рисунка, средний спин всех уровней (кроме чистого по спину уровня $0-$ тяжелых дырок) проявляет сильную зависимость, как от величины магнитного поля, так и от координаты. Спин уровней $3-$ в обеих подзонах испытывает незатухающие осцилляции, причем они распространяются с неизменным периодом даже на область потенциального барьера, где волновая функция сильно затухает. Здесь проявляется еще одно интересное свойство дырочных волновых функций, заключающееся в том, что они могут затухать в барьере осциллирующим образом, причем период таких осцилляций слабо зависит от потенциальной энергии. Качественно это объясняется наличием перекрестного члена $S \sim k_z k_-$ в гамильтониане (4), благодаря которому в подбарьерной области к мнимой части k_z добавляется не зависящая от потенциала действительная часть.

Рассмотренные выше явления должны непосредственно проявляться в оптических свойствах рассматриваемой системы: интенсивности и поляризации линий люминесценции. Зависимость интенсивности рекомбинационного излучения от магнитного поля для двух основных тяжелодырочных уровней $0-$ и $0+$ показана на рис. 5, а. Для расчета использовалась формула (16) и следующие параметры волновой функции электрона на доноре: $z_D = 500 \text{ \AA}$, $a_D = 80 \text{ \AA}$. Как видно из рисунка, интенсивность люминесценции чистого по спину

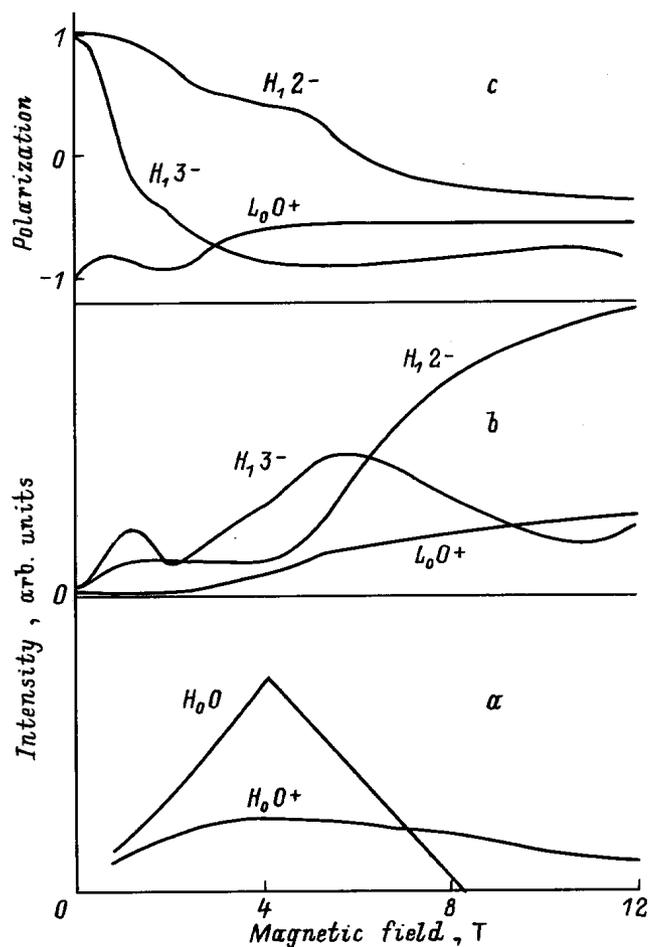


Рис. 5. *a* — зависимость интенсивности люминесценции уровней основной подзоны HH_0 от величины магнитного поля для концентрации $2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. *b, c* — зависимость интенсивности и степени поляризации люминесценции наиболее активных в рекомбинации уровней Ландау верхних размерно-квантованных подзон от величины магнитного поля для концентрации $5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

уровня 0 — ведет себя наиболее тривиальным образом: сначала она линейно по полю растет пропорционально увеличению емкости уровня, затем также линейно падает пропорционально его опустошению. Интенсивность люминесценции уровня 0+ зависит от поля более сложным образом. Здесь рост за счет увеличения емкости уровня конкурирует с падением благодаря слабому поджатию уровня с ростом магнитного поля. Но наиболее драматическим образом рассмотренные выше эффекты проявляются в интенсивности и поляризации люминесценции неравновесно заполненных уровней из вышележащих подзон. На рис. 5, *b, c* приведены полевые зависимости интенсивности и степени поляризации рекомбинационного излучения наиболее активных в люминесценции уровней Ландау возбужденных подзон при концентрации $5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Полученные осцилляции интенсивности и степени поляризации связаны с изменениями формы волновых функций и потенциальной ямы, а также с рас-

смотренными выше осцилляциями среднего спина. Более подробное сравнение расчетов с экспериментальными результатами можно найти в [9].

Таким образом, рассмотренный метод является весьма эффективным инструментом для расчета дырочных волновых функций, особенно когда это требует самосогласованного расчета формы потенциала, создаваемого самими дырками. Рассчитаны энергетические уровни и волновые функции 2D-дырок в одиночном гетеропереходе *p*-типа в перпендикулярном магнитном поле при различных концентрациях 2D-дырок. Показано, что волновые функции, соответствующие различным дырочным квантовым состояниям, проявляют сильную зависимость от магнитного поля, которая усиливается с ростом энергии уровня и существенно зависит от их спина. Продемонстрировано, что при большой концентрации дырочного газа эффекты заполнения и опустошения уровней основной тяжелодырочной подзоны с различным спином приводят к изменениям формы потенциальной ямы и пиннингу энергетических уровней. Рассмотрены процессы рекомбинации 2D-дырок с электронами связанными на δ -слое доноров вблизи гетерограницы. Показано, что изменение формы волновой функции дырок в магнитном поле сопровождается увеличением числа нулей волновой функции и осцилляциями среднего спина, что приводит к осцилляциям интенсивности и поляризации рекомбинационного излучения.

Автор благодарен В.Е. Бисти, а также И.В. Кукушкину и В.Е. Житомирскому за плодотворные дискуссии по поводу теоретической модели и полученных с ее помощью результатов.

Работа была выполнена при поддержке РФФИ (грант 96-02-16177) и ИНТАС (грант 95-IN/RU-675).

Список литературы

- [1] J.M. Luttinger, W. Kohn. Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [2] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [3] М.И. Дьяконов, А.В. Хаецкий. ЖЭТФ **82**, 1584 (1982).
- [4] D.A. Broido, L.J. Sham. Phys. Rev. **B31**, 888 (1985).
- [5] S.-R. Eric Yang, D.A. Broido, L.J. Sham. Phys. Rev. **B32**, 6630 (1985).
- [6] U. Ekenberg, M. Altarelli. Phys. Rev. **B32**, 3712 (1985).
- [7] E. Bangert, G. Landwehr. Surf. Sci. **170**, 593 (1986).
- [8] I.V. Kukushkin, V.B. Timofeev. Adv. Phys. **45**, 147 (1996).
- [9] O.V. Volkov, V.E. Zhitomirskii, I.V. Kukushkin. W. Dietsche, K.V. Klitzing, A. Fischer, K. Eberl. Phys. Rev. **B56**, 7541 (1997).
- [10] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery. Numerical Recipes in C. Cambridge Univ. Press (1992).
- [11] R. Eppenga, M.F.H. Schuurmans, S. Golak. Phys. Rev. **B36**, 1554 (1987).
- [12] B.B. Goldberg, D. Heiman, M.J. Graf, D.A. Broido, A. Pinczuk, C.W. Tu, J.H. English, A.C. Gossard. Phys. Rev. **B38**, 10 131 (1988).
- [13] И.В. Кукушкин, В.Б. Тимофеев. ЖЭТФ **92**, 258 (1987).
- [14] C.R. Pidgeon, R.N. Brown. Phys. Rev. **146**, 575 (1966).