

МЕЖУРОВНЕВЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

А. Г. Петров, А. Я. Шик

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021, Санкт-Петербург, Россия

(Получена 28 января 1993 г. Принята к печати 3 февраля 1993 г.)

Получено общее выражение для оптических матричных элементов, описывающих межуровневое поглощение в квантово-размерных системах при наличии электрического и магнитного полей. Для квантовых ям прямоугольной и треугольной формы такой подход не требует знания полной волновой функции и существенно упрощает задачу. Это позволяет получить правила отбора и аналитические выражения для матричных элементов в ряде случаев, когда стандартный подход более сложен или вообще не допускает аналитического решения. Рассмотрен ряд конкретных квантовых ям. Результаты обобщены на случай гетероструктур с различающимися эффективными массами в слоях, а также квантовых нитей и точек. Изучено межуровневое поглощение в параллельном магнитном поле.

Введение. Межуровневые оптические переходы в квантовых ямах (КЯ) привлекают значительное внимание в последние годы и находят важное применение в инфракрасных фотоприемниках [1]. Для теоретического описания этих переходов мы должны вычислять матричные элементы оператора импульса между соответствующими электронными состояниями. Для КЯ сложных форм эта проблема довольно трудна, особенно в присутствии сильного электрического и (или) магнитного полей. В представленной работе приведена теория, позволяющая выразить эти матричные элементы через значения волновой функции на гетерогранице, что значительно упрощает задачу, так как позволяет избежать вычисления волновой функции во всем объеме КЯ и последующего интегрирования. Это дает возможность получить новые аналитические результаты, а также обобщить задачу на случай квантовых нитей и точек.

1. Общие формулы

Мы будем исходить из гамильтониана системы с некоторым потенциальным рельефом $U(\mathbf{r})$ в магнитном поле с вектор-потенциалом \mathbf{A} :

$$\mathcal{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \quad \mathcal{P} = -i\hbar\nabla + \frac{e\mathbf{A}}{c}. \quad (1)$$

Пусть ε_j — собственные значения гамильтониана. Для описания оптических свойств системы мы должны вычислить матричный элемент обобщенного импульса $(\mathcal{P}_\alpha)_{fi}$ между начальным (i) и конечным (f) состояниями ($\alpha = x, y, z$).

Для дальнейших вычислений удобно вывести общую формулу для $(\mathcal{P}_\alpha)_{fi}$. Чтобы сделать это, вычислим производную оператора \mathcal{P}_x . Если оператор \mathcal{P}_x не зависит от времени явно, а магнитное поле $\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}$ однородно, то

$$\frac{d\mathcal{P}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \mathcal{P}_x] = -\frac{i\hbar e}{2mc} [\nabla^2, A_x] - \frac{i\hbar e}{mc} \left[A\nabla, \frac{\partial}{\partial x} \right] + \frac{e^2}{2mc^2} \left[A^2, \frac{\partial}{\partial x} \right] -$$

$$- \frac{e^2}{mc^2} [A\nabla, A_x] - \left[U, \frac{\partial}{\partial x} \right] = -\frac{\partial U}{\partial x} - \frac{e}{mc} H_z \mathcal{P}_y + \frac{e}{mc} H_y \mathcal{P}_z, \quad (2)$$

где квадратные скобки означают коммутатор двух операторов. Вычисляя матричный элемент от обеих частей (2) и учитывая, что

$$(d\mathcal{P}/dt)_{fi} = i\omega_{fi} \mathcal{P}_{fi} \quad (\omega_{fi} = (\epsilon_f - \epsilon_i)/\hbar),$$

получим

$$i\omega_{fi} (\mathcal{P}_x)_{fi} = (F_x)_{fi} - \omega_z (\mathcal{P}_y)_{fi} + \omega_y (\mathcal{P}_z)_{fi}, \quad (3)$$

где $\omega_\alpha = eH_\alpha/mc$, а эффективная сила

$$F = -\nabla U. \quad (4)$$

Два других выражения могут быть получены из (3) циклической перестановкой x, y, z . Решение данной линейной системы дает искомую формулу для $(\mathcal{P}_\alpha)_{fi}$:

$$(\mathcal{P}_\alpha)_{fi} = \frac{(F_\alpha)_{fi} (\omega_{fi}^2 - \omega_\alpha^2) - \sum_{\beta, \gamma} (F_\beta)_{fi} [(1 - \delta_{\alpha\beta}) \omega_\alpha \omega_\beta + i e_{\alpha\beta} \omega_{fi} \omega_\gamma]}{i\omega_{fi} (\omega_{fi}^2 - \omega_c^2)}. \quad (5)$$

Здесь $\omega_c = (\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2)^{1/2}$ — циклотронная частота, $e_{\alpha\beta}$ — единичный антисимметричный тензор третьего ранга.

Строго говоря, при наличии электрического поля E электроны имеют конечную вероятность туннельного ухода из КЯ, что делает состояния нестационарными, а наши формулы — неприменимыми. Однако на самом деле их можно применять и для не слишком сильного E в барьерах, если характерное время туннельного распада начального состояния Ψ_i существенно превосходит классический период осцилляций \hbar/ϵ_i .

Мы смогли выразить оптический матричный элемент через энергетический спектр системы ω_{fi} и матричный элемент другой физической величины — эффективной силы F . Есть широкий класс физических объектов, для которых эта процедура сильно упрощает вычисления. К их числу относятся КЯ ступенчатой, треугольной и трапецидальной форм, что соответствует случаю, когда пространство может быть разбито на области с постоянными (но различными) значениями потенциальной энергии и (или) электрического поля.¹ Наибольшее внимание мы уделим одномерным КЯ с потенциалом

$$U(x) = \sum_j \Delta U_j \Theta(x - x_j) + \sum_k e \Delta E_k x \Theta(x - x_k), \quad (6)$$

где $\Delta U_j = U(x_j + 0) - U(x_j - 0)$ — разрыв зоны на гетерогранице $x = x_j$, который может быть как положительным, так и отрицательным, а $\Delta E_k = E(x_k + 0) - E(x_k - 0)$ — скачок электрического поля, вызванный поверхностными зарядами или изменением градиента состава на плоскости с $x = x_k$; Θ — единичная функция Хевисайда. В этом случае эффективная сила (1) есть сумма нескольких δ -функций и констант. Соответствующие матричные элементы не требуют интегрирования по объему, а содержат только значения волновой функции на границах. Для

¹ Речь может идти либо об истинном электрическом поле, испытывающем скачки на границах с поверхностными зарядами, либо о квазиэлектрическом поле варизонных структур.

членов ΔU_j это очевидно, а для членов ΔE_k может быть доказано с помощью тождества

$$i\omega_{fi}E = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{L}, E] = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial E}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \right\}. \quad (7)$$

В результате имеем

$$(F_a)_{fi} = - \sum_j \Delta U_j \Psi_i(x_j) \Psi_f^*(x_j) + \sum_k \{ e\Delta E_k x_k \Psi_i(x_k) \Psi_f^*(x_k) - \frac{e\Delta E_k \hbar}{2m\omega_{fi}} [\Psi_i'(x_k) \Psi_f^*(x_k) - \Psi_i(x_k) \Psi_f'^*(x_k)] \}. \quad (8)$$

Если скачки потенциала на некоторых границах очень велики ($\Delta U_j \rightarrow \infty$), тогда $\Psi(x_j) \rightarrow 0$ и уравнение (8) содержит неопределенность. Легко показать, что в этом пределе волновая функция заменяется своей производной:

$$\lim_{U_j \rightarrow \infty} \Delta U_j \Psi_i(x_j) \Psi_f^*(x_j) = \frac{\hbar^2}{2m} \Psi_i'(x_j) \Psi_f'^*(x_j). \quad (9)$$

В предельно сильном магнитном поле волновые функции локализируются в области с размером $\sim \lambda = (c\hbar/eH)^{1/2}$, много меньшим a — ширины КЯ. Энергия основного состояния зависит от импульса, параллельного плоскости КЯ (как показано в разделе 7) и минимизируется для состояния, когда электрон локализован вдали от границы. В результате волновая функция основного состояния на границе экспоненциально мала, и в соответствии с уравнением (8) $(F_a)_{fi} \rightarrow 0$. В этом случае $(\mathcal{P})_{fi}$ будет отлична от нуля только в том случае, если знаменатель в уравнении (5) стремится к нулю. Тем самым мы получаем хорошо известные правила отбора для свободного электрона в квантующем магнитном поле: $\omega_{fi} = \pm \omega_c$.

Формулы (5), (8), (9) дают окончательное решение задачи об оптическом матричном элементе для различных КЯ в однородных электрическом и магнитном полях. Мы не предполагали при этом, что и конечное (f), и начальное (i) состояния должны быть локализованы в КЯ, поэтому наша формула описывает как межуровневые переходы, так и оптическую фотоионизацию КЯ, т. е. индуцированный светом переход из связанного состояния в КЯ в делокализованное состояние над КЯ. Если энергия фотона $\hbar\omega$ много больше глубины КЯ, тогда конечное состояние соответствует почти свободному электрону с волновой функцией $|\Psi_f(x)| = L^{-1/2} = \text{const}(\omega)$ (L — нормировочная длина). В этом случае уравнение (5) дает для $\omega \rightarrow \infty$ $(\mathcal{P}_a)_{fi} \sim \omega^{-1}$. Полный электрон-фотонный матричный элемент $M = (2\pi\hbar e^2 N / \omega m^2)^{1/2} \times (\mathcal{P}_a)_{fi} \sim \omega^{-3/2}$ (N — число фотонов). Коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$ пропорционален произведению $|M|^2$ и одномерной плотности состояний, которая в отсутствие магнитного поля пропорциональна $\sim \omega^{-1/2}$. Таким образом, асимптотическое поведение спектра фотоионизации КЯ имеет вид $\alpha(\omega) \sim \omega^{-7/2}$. Для частного случая прямоугольной КЯ этот результат был известен прежде [2], но мы видим, что это общее свойство КЯ любой формы.

Применим теперь общие выражения (5) — (9) к некоторым конкретным низкоразмерным системам.

2. Треугольная яма с бесконечной стенкой

Рассмотрим сначала треугольную КЯ $U(x) = -Fx$ ($x < 0$) с бесконечной потенциальной стенкой при $x = 0$. Как известно, волновыми функциями этой

задачи функции Эйри $\Psi_i = C_i \text{Ai} [-(x + \varepsilon_i/F)/l_F]$, где $l_F = (\hbar^2/2mF)^{1/3}$, а нормировочный фактор $C_i = [\sqrt{l_F} \text{Ai}'(-\varepsilon_i/F l_F)]^{-1}$.

Интеграл $\int_{-\infty}^0 \text{Ai} [-(x + \varepsilon_i/F)/l_F] \text{Ai}' [-(x + \varepsilon_f/F)/l_F] dx$, представляющий собой матричный элемент, не выражается аналитически и вычисляется в литературе либо численно, либо в квазиклассическом приближении [3]. Наш метод позволяет получить точное и очень простое выражение для этого элемента:

$$(\mathcal{P}_x)_{fi} = i \frac{\hbar^2}{2m\omega_{fi}} \Psi_i'(0) \Psi_f'(0) = i \frac{\hbar^2}{2m\omega_{fi} l_F^3} = i \frac{(2e\hbar m F)^{1/3}}{\alpha_f - \alpha_i}, \quad (10)$$

где $-\alpha_i - (i+1)$ -й нуль функции Эйри ($\alpha_0 \approx 2.34$, $\alpha_1 \approx 4.09$).

3. Симметричная треугольная квантовая яма

Перейдем теперь к рассмотрению симметричной КЯ $U(x) = F|x|$, созданной плоским заряженным слоем. Поскольку наш подход допускает рассмотрение лишь кусочно-однородных электрических полей без учета экранировки, такая КЯ не адекватна одиночному δ -слою, но может хорошо описывать компенсированные *nipi*-сверхрешетки с малой концентрацией свободных носителей. Волновая функция электрона здесь $\Psi_i = D_i \text{Ai} [(|x| - \varepsilon_i/F)/l_F]$, где

$$D_i = \begin{cases} [\sqrt{2l_F} \text{Ai}'(-\varepsilon_i/F l_F)]^{-1}, & i - \text{нечетное,} \\ [\sqrt{2\varepsilon_i/F} \text{Ai}(-\varepsilon_i/F l_F)]^{-1}, & i - \text{четное.} \end{cases}$$

По аналогии с предыдущим разделом, используя (5), (8), получим

$$(\mathcal{P}_x)_{fi} = i (2e\hbar m F)^{1/3} \begin{cases} \alpha_{(1+i)/2}^{-1/2} (\beta_{(2+i)/2} - \alpha_{(1+i)/2})^{-2}, & i - \text{нечетное,} \\ -\alpha_{(1+i)/2}^{-1/2} (\alpha_{(1+i)/2} - \beta_{(2+i)/2})^{-2}, & f - \text{четное,} \\ 0, & i + f - \text{четное,} \\ 0, & f - \text{нечетное,} \end{cases} \quad (11)$$

где $-\beta_i - (i+1)$ -й нуль производной функции Эйри ($\beta_0 \approx 1.02$, $\beta_1 \approx 3.25$). Сравнивая формулы (10) и (11), мы видим, что во втором случае матричный элемент оператора импульса убывает гораздо быстрее с ростом номера уровня.

4. Асимметричная прямоугольная яма

Следующая рассматриваемая нами модель — КЯ с различной высотой стенок (рис. 1, а), используемая для фотовольтаических детекторов [4–6]. В соответствии с уравнением (3) диагональный элемент $(F_x)_{ii} = 0$. В нашем случае это означает, что $U_2 \Psi_i^2(0) = U_1 \Psi_i^2(a)$. Для определения знаков $\Psi_i(0)$ и $\Psi_i(a)$ учтем, что волновая функция i -го связанного состояния имеет i нулей в интервале $0 < x < a$, и окончательно получим

$$\Psi_i(0) = (-1)^i \sqrt{U_1/U_2} \Psi_i(a), \quad (12)$$

что после подстановки в уравнения (5), (8) дает

$$(\mathcal{P}_x)_{fi} = \begin{cases} 2i\omega_{fi}^{-1} U_2 \Psi_f(0) \Psi_f(0) & \text{для нечетных } i + f, \\ 0 & \text{для четных } i + f. \end{cases} \quad (13)$$

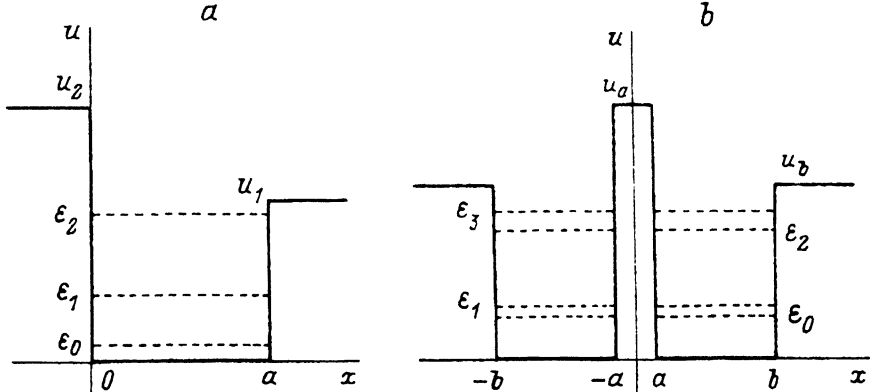


Рис. 1. Энергетическая зонная диаграмма одиночной асимметричной КЯ (а) и сдвоенной КЯ (б).

Таким образом, правила отбора, существующие в симметричных КЯ в силу четности их потенциала, сохраняются также и для асимметричной КЯ рассматриваемой формы.

Для вычисления точного значения ненулевого матричного элемента мы нуждаемся в значении $\Psi_i(0)$. Простейший путь его нахождения — использование вириальной теоремы [7]:

$$\frac{1}{2} \left\langle x \frac{dU}{dx} \right\rangle_i = \varepsilon_i - \langle U \rangle_i, \quad (14)$$

где $\langle \dots \rangle_i$ — усреднение по состоянию i ; $\langle U \rangle$ содержит интегрирование только в барьерной области, где $U \neq 0$. Так как для $x < 0$ $\Psi_i(x) = \Psi_i(0) \exp \times \sqrt{2m(U_1 - \varepsilon_i)} x / \hbar$ и аналогично для $x > a$, уравнение (14) дает соотношение между $\Psi_i(0)$ и $\Psi_i(a)$, которое вместе с уравнением (12) может использоваться для определения обоих этих значений и для окончательного вычисления матричных элементов:

$$(\mathcal{P}_x)_{fi} = 4i\omega_{fi}^{-1} (\varepsilon_f \varepsilon_i)^{1/2} (a + \kappa_{i1}^{-1} + \kappa_{i2}^{-1})^{-1/2} (a + \kappa_{f1}^{-1} + \kappa_{f2}^{-1})^{-1/2}, \quad (15)$$

$$\text{где } \kappa_{ik} = \hbar^{-1} \sqrt{2m(U_k - \varepsilon_i)}, \quad k = 1, 2.$$

5. Структура со сдвоенной квантовой ямой

Рассмотрим теперь систему из двух КЯ, разделенных туннельно прозрачным барьером. Энергетический спектр такой системы имеет вид дублетов (рис. 1, б), и существует принципиальная возможность получения инверсной заселенности в верхнем дублете при оптической накачке из нижнего дублетного состояния [8]. Поэтому вероятность как внутри-, так и междублетных оптических переходов представляет интерес. Рассмотрим ситуацию, когда туннельная прозрачность $T \approx \exp(-2\alpha a)$ центрального барьера невелика, так что дублетное расщепление много меньше энергетического расстояния между дублетами. Здесь $\alpha_a, \alpha_b = \sqrt{2m(U_{a,b} - \varepsilon_i)}/\hbar$. Тогда при рассмотрении междублетного перехода мы можем пренебречь T и использовать результаты § 5. Таким образом, отдельное рассмотрение требуется лишь для внутридублетных переходов. При его проведении уже указанная малость T позволяет пренебречь различием между ε_i и ε_j , а κ_a и κ_b считать одинаковыми в обоих интересующих нас состояниях.

Используя (5), (8), получим

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{P}_x)_{fi} &= \frac{2i}{\omega_{fi}} (U_0 |\Psi_i(b) \Psi_f(b)| - U_a |\Psi_i(a) \Psi_f(a)|) = \\
 &= \frac{2i}{\omega_{fi}} [(\beta_i \beta_f)^{1/2} - (\alpha_i \alpha_f)^{1/2}]; \\
 \alpha_{i,f} &= U_a |\Psi_{i,f}(a)|^2 = U_a |\Psi_{i,f}(-a)|^2; \\
 \beta_{i,f} &= U_b |\Psi_{i,f}(b)|^2 = U_b |\Psi_{i,f}(-b)|^2.
 \end{aligned} \tag{16}$$

Для $T \rightarrow 0$ $\alpha_{i,f} \rightarrow \beta_{i,f}$ [см. (12)] и в то же самое время $\omega_{fi} \rightarrow 0$. В первом порядке по T отсутствуют поправки к $\Psi_i(\pm b)$ и $\beta_i \approx (\beta_i^2/2)$, где индекс «0» означает характеристики, найденные в разделе 4 для одиночной асимметричной КЯ. Получая поправки к $\Psi_i(\pm a)$ и находя α_i , мы снова будем использовать вириальную теорему. Для $x > b$

$$\Psi_i = \Psi_i(b) \exp[-\kappa_b(x-b)],$$

для $|x| < a$

$$\Psi_i = \Psi_i(a) \frac{\exp(\kappa_a x) \pm \exp(-\kappa_a x)}{\exp(\kappa_a a) \pm \exp(-\kappa_a a)}$$

(знаки «+» и «-» соответствуют симметричному и антисимметричному состояниям), при этом (14) дает соотношение, определяющее α_i ,

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_i - \beta_i^0 [b + (\kappa_b)^{-1}]/2 &= \alpha_i \{-a [1 \mp 4 \exp(-2\alpha_a)] + \\
 &+ \kappa_a^{-1} [1 \mp 2 \exp(-2\alpha_a)]\}.
 \end{aligned} \tag{17}$$

В рассматриваемом случае

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{i,f} &= [(b-a) + (\kappa_a)^{-1} + (\kappa_b)^{-1}] \beta_i^0/2 \mp \hbar \omega_{fi}/2, \\
 \hbar \omega_{fi} &= 4a\beta_i^0 \exp(-2\alpha_a),
 \end{aligned} \tag{18}$$

что после подстановки в (16) дает

$$(\mathcal{P}_x)_{fi} = \frac{i\hbar \exp(-2\alpha_a)}{4(a - \kappa_a^{-1})} = \frac{i\hbar^2 \omega_{fi}}{32a\varepsilon_i} \frac{(b-a + \kappa_a^{-1} + \kappa_b^{-1})}{(a - \kappa_a^{-1})}. \tag{19}$$

6. Рассогласование эффективных масс

До сих пор мы считали, что эффективная масса электрона m одинакова во всей структуре. Однако обычно на гетерограницах при $x = x_j$ не только потенциальная энергия, но и эффективная масса носителей может претерпевать разрыв. В этом случае наши результаты (2) неверны, но они могут быть обобщены на случай рассогласования эффективных масс.

Система с одномерным потенциалом $U(x)$ и профилем эффективной массы $m(x)$ характеризуется гамильтонианом [9]

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} m^{-1}(x) \frac{\partial}{\partial x} + U(x) + \frac{p^2}{2m(x)}, \tag{20}$$

где p — импульс в плоскости yz . В отличие от предыдущих результатов переменные в уравнении Шредингера не разделяются здесь даже в отсутствие магнитного поля.

В том случае, когда эффективная масса зависит от координаты, оптические переходы вызываются оператором $\mathcal{P}/m(x)$, а не \mathcal{P} . Поэтому вместо $(\mathcal{P}_x)_{fi}$ мы будем вычислять матричные элементы оператора $\eta \equiv \mathcal{P}m_o/m(x)$, где m_o — некоторая постоянная, скажем, масса свободного электрона.

Используя уравнение (18), мы можем доказать тождества

$$\begin{aligned} i\omega_{fi}\eta_x &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \eta_x] = m_o \left[\left(\frac{dm^{-1}}{dx} \right) \left[\mathcal{H} - U(x) - \frac{p^2}{2m} \right] - m^{-1} \left(x \frac{dU}{dx} \right) \right], \\ i\omega_{fi}\eta_y &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \eta_y] = \frac{\hbar}{2} p_y m_o \left[m^{-1} \frac{d}{dx} \left(\frac{dm^{-1}}{dx} \right) + \left(\frac{dm^{-1}}{dx} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (21)$$

которые позволят получить выражения для матричных элементов

$$\begin{aligned} (\eta_x)_{fi} &= \frac{im_o}{\omega_{fi}} \left\{ \sum_j \Psi_i(x_j) \Psi_f^*(x_j) [\Delta U_j \tilde{m}_j^{-1} - \Delta m_j^{-1} (\tilde{U}_j - \varepsilon_i - p^2 \tilde{m}_j^{-1})] + \right. \\ &\quad + \sum_k \Psi_i(x_k) \Psi_f^*(x_k) e \Delta E_k x_j \tilde{m}_k^{-1} - \frac{\tilde{m}_k}{2\omega} e_{fi} \Delta E_k \hbar \times \\ &\quad \left. \times \left[\frac{\Psi'_i}{m}(x_k) \Psi_f^*(x_k) - \frac{\Psi'_f}{m}(x_k) \Psi_i(x_k) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (22)$$

$$(\eta_y)_{fi} = \sum_j \frac{\hbar p m_o}{\omega_{fi}} \Delta m_j^{-1} \left[\frac{\Psi'_i}{m}(x_j) \Psi_f^*(x_j) - \frac{\Psi'_f}{m}(x_j) \Psi_i(x_j) \right], \quad (23)$$

обобщающие (5), (8) на случай непостоянной эффективной массы. Здесь $\tilde{U}_j = [U(x_j+0) + U(x_j-0)]/2$; $m_j^{-1} = [m^{-1}(x_j+0) + m^{-1}(x_j-0)]/2$; $\Delta m_j^{-1} = m^{-1}(x_j+0) - m^{-1}(x_j-0)$. Заметим, что Ψ и (Ψ'/m) непрерывны на гетерограницах.

Мы видим, что рассогласование эффективных масс обуславливает дополнительный член в оптическом матричном элементе $(\eta_x)_{fi}$. Для света, поляризованного нормально к плоскости КЯ, это можно рассматривать как перенормировку разрыва зоны ΔU_j , не приводящую к появлению каких-либо качественно новых эффектов. В частности, асимптотическое поведение спектра фотоионизации КЯ $\alpha(\omega) \sim \omega^{-7/2}$ остается прежним.

Для параллельно поляризованного света переходы между различными квантово-размерными состояниями становятся возможными благодаря скачку эффективных масс на гетерогранице [10]. Эти переходы описываются матричным элементом $(\eta_y)_{fi}$, который пропорционален импульсу, параллельному границе. Заметим, что в симметричной КЯ оптические переходы возможны лишь между состояниями с одинаковой четностью в противоположность случаю x -поляризации.

Сравнивая (22) и (23), видим, что $(\eta_y)_{fi}$ содержит производные волновых функций, а не сами волновые функции. Для делокализованных состояний над КЯ эти производные пропорциональны волновому вектору, или квадратному корню из энергии состояний. В случае фотоионизации КЯ фотоном высокой энергии это означает, что $\Psi_f/\Psi_f \sim \omega^{1/2}$. В результате коэффициент поглощения будет иметь добавочный множитель ω по сравнению со случаем x -поляризации, что приводит к спектру фотоионизации КЯ с высокочастотной асимптотикой $\alpha(\omega) \sim \omega^{-5/2}$.

Следующая задача, которую мы будем решать, посвящена межуровневому поглощению света в магнитном поле, параллельном плоскости КЯ ($H \parallel z$). Для простоты рассмотрим КЯ с бесконечными стенками при $x = \pm a/2$ и ограничимся случаем не слишком сильных полей:

$$\epsilon_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} > \hbar\omega_c. \quad (24)$$

В этом случае энергетический спектр системы может быть определен из рассмотрения магнитного поля как возмущения [11]:

$$\epsilon(n, p_y, p_z) = n^2 \epsilon_0 + \frac{m\omega_c^2 a^2}{24} \left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2} \right) + \frac{p_y^2}{2m} \left[1 + \frac{m\omega_c^2 a^2}{n^2 \epsilon_0} \left(\frac{1}{3} - \frac{5}{\pi^2 n^2} \right) \right] + \frac{p_z^2}{2m}. \quad (25)$$

Магнитное поле оказывает двоякое влияние на энергетический спектр, осуществляя квадратичный сдвиг уровня и создавая анизотропию дисперсии в плоскости КЯ из-за изменения эффективной массы вдоль оси y (заметим, что эффективная масса возрастает для основной подзоны и уменьшается для возбужденных).

Для бесконечно глубокой КЯ, где справедливо условие (9), матричные элементы (5), (8) могут быть записаны в следующей форме:

$$(\mathcal{P}_x)_{fi} = -i \frac{\hbar^2 \omega_{fi}}{2m(\omega_{fi}^2 - \omega_c^2)} \Psi'_i(x_j) \Psi'_f(x_j), \quad (\mathcal{P}_y)_{fi} = i \frac{\omega_c}{\omega_{fi}} (\mathcal{P}_x)_{fi}. \quad (26)$$

Видно, что любой переход может вызываться как x -, так и y -поляризованным светом, а отношение интенсивностей поглощения $\alpha_x/\alpha_y = (\omega_{fi}/\omega_c)^2$.

Для вычисления матричных элементов мы должны определить производную волновой функции на границе. Как и в разделе 4, наиболее простой путь связан с применением вириальной теоремы. Эта теорема в своей стандартной форме в магнитном поле неприменима, но может быть переформулирована с его учетом. Для этого мы введем обозначения: $\tilde{U}(x) = U(x) + m\omega_c^2(x-x_0)^2/2$, $\tilde{\epsilon}_i = \epsilon_i - \langle p_y \rangle^2/2m$, $x_0 = -cp_y/(eH)$, позволяющие преобразовать уравнение Шредингера к стандартной форме с кинетической и потенциальной энергиями: $-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_i'' + \tilde{U}\Psi_i = \tilde{\epsilon}_i \Psi_i$ и применить вириальную теорему к этому преобразованному уравнению:

$$\frac{1}{2} \left\langle (x \pm a/2) \frac{d\tilde{U}}{dx} \right\rangle_i = \tilde{\epsilon}_i - \langle \tilde{U} \rangle_i. \quad (27)$$

С помощью (9) последняя формула может быть преобразована к следующему выражению:

$$\frac{\hbar^2 a}{4m} |\Psi'_i(\pm a/2)|^2 = \epsilon_i - \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m} + \frac{m\omega_c^2}{2} [x_0 (3 \langle x \rangle_i \pm 1) - 2 \langle x^2 \rangle_i \mp a \langle x \rangle_i/2]. \quad (28)$$

Сравнивая формулы (26) и (28), приходим к выводу, что интересующие нас матричные элементы могут быть выражены в терминах средних значений x и x^2 . В случае относительно слабых магнитных полей (24) $\langle x^2 \rangle_i$ можно вычислить,

полагая $H = 0$, что дает $\langle x^2 \rangle_i = \frac{a}{12} \left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2} \right)$. Что касается $\langle x \rangle$, то в этом пределе он равен нулю, а в следующем порядке по H $\langle x \rangle_i \sim a^4 p_y / \hbar \lambda^2$, где λ — магнитная длина. В наших дальнейших вычислениях будем полагать, что электронная концентрация n_s не слишком велика, так что заселена только одна квантовая подзона и $|p_y| a < \hbar$. В этом случае точное значение численного фактора в $\langle x \rangle_i$ не важно, так как при выполнении условия (24) члены $\sim \langle x \rangle_i$ пренебрежимо малы.

Подставляя выражения для $\langle x \rangle$ и $\langle x^2 \rangle$ в (26), (28), получим выражения для матричных элементов, описывающих переходы между нижними квантовыми уровнями с $n = 1, 2, 3$:

$$(\mathcal{P}_x)_{21} \approx i \frac{8\hbar}{3a}, \quad (29)$$

$$(\mathcal{P}_x)_{31} \approx i \frac{5 e H p_y a^2}{12 \pi^2 \hbar c}. \quad (30)$$

Видно, что последний матричный элемент имеет малый численный фактор. В результате все поправки, пропорциональные $m \omega_c^2 a^2 / \epsilon_0$, могут быть отброшены, даже если в условии (24) не выполняется сильное неравенство $\hbar \omega_c \ll \epsilon_c$.

С помощью (29), (30) вычислим спектр межуровневого поглощения:

$$\alpha(\omega) = \frac{\pi^2 e^2}{c n_\omega m^2 \omega a \hbar^2} \int dp_y \int dp_z |\mathcal{P}_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar \omega) f(\epsilon_i). \quad (31)$$

Здесь n_ω — коэффициент преломления, $f(\epsilon_i)$ — функция Ферми. Спектр будет иметь конечную ширину, из-за того что зависимость энергии от p_y различна в разных подзонах [см. (25)]. Рассмотрим зависимость $\alpha(\omega)$ для x -поляризованного света. Как мы уже отмечали, спектр для y -поляризации будет отличаться на постоянный множитель $(\omega_c / \omega_f)^2$.

Для перехода $1 \rightarrow n$ в случае вырожденного электронного газа полоса поглощения характеризуется низкочастотным краем

$$(\hbar \omega)_{\min} = \epsilon_0 (n^2 - 1) + \frac{m \omega_c^2 a^2 (n^2 - 1)}{4 \pi^2 n^2} \quad (32)$$

и шириной полосы

$$\Delta(\hbar \omega) \equiv \hbar(\omega_{\max} - \omega_{\min}) = \frac{\pi}{4} \eta n_s a^4 m \omega_c^2. \quad (33)$$

где $\eta = \frac{5}{\pi^2} (1 - n^{-4}) - \frac{1}{3} (1 - n^{-2})$ — численный фактор, равный 0.18 для переходов $1 \rightarrow 2$ и 0.16 для $1 \rightarrow 3$. В наших вычислениях мы использовали соотношение между электронной концентрацией n_s и энергией Ферми $E_F = \epsilon_0 + \pi \hbar^2 n_s / m$, верное для предельного случая $\hbar \omega_c \ll \epsilon_0$.

Зависимость $\alpha(\omega)$ внутри полосы поглощения рассмотрим отдельно для разрешенных (n — четное) и запрещенных (n — нечетное) переходов. В первом случае

$$\alpha(\omega) = \frac{1024 \pi^4 c \hbar^2}{9 \eta n_\omega H^2 a^7 \omega m} \left(\frac{\omega_{\max} - \omega}{\omega - \omega_{\min}} \right)^{1/2}. \quad (34)$$

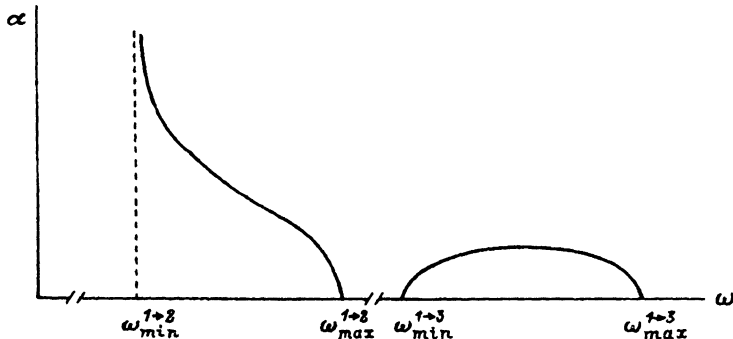


Рис. 2. Схематический вид спектра межуровневого поглощения в параллельном магнитном поле.

Интегральное поглощение в полосе $d\omega$ $\alpha(\omega)$ пропорционально n_s , что совершенно естественно для межподзонных переходов. Во втором случае

$$\alpha(\omega) = \frac{100\pi^2\hbar}{9\eta^2 n_w a^5 H^2 \omega} [(\omega_{\max} - \omega)(\omega - \omega_{\min})]^{1/2}. \quad (35)$$

Интегральное поглощение пропорционально n_s^2 вместо n_s . Это связано с тем фактом, что поглощение в параллельной поляризации возможно лишь для электронов с ненулевым p_y и поэтому содержит также пропорциональность E_F , т. е. электронной концентрации. Отношение полного поглощения для разрешенных и запрещенных переходов имеет порядок $\lambda^4/(n_s a^6)$ и сильно зависит от ширины КЯ, поскольку матричный элемент $(\mathcal{P}_x)_{21}$ убывает, в то время как $(\mathcal{P}_x)_{31}$ возрастает с ростом a [см. (29), (30)].

Зависимость $\alpha(\omega)$ схематически показана на рис. 2. Видно, что полоса разрешенных переходов сильно асимметрична и имеет расходящийся низкочастотный край. Полоса разрешенных переходов имеет почти симметричную эллипсоподобную форму.

8. Квантовые нити и точки

В заключение рассмотрим оптические переходы в электронных системах, ограниченных более чем в одном направлении. Общее выражение (5) пригодно для системы любой размерности, и единственная проблема — вычисление матричных элементов F . Пусть поверхность S_{ij} является границей между областями с различными, но постоянными потенциальными энергиями V_i и V_j . Тогда матричный элемент $(F)_{fi}$ определяется интегрированием только по S_{ij} :

$$(F)_{fi} = - \sum_{S_{ij}} \int dS (V_i - V_j) \Psi_i(\mathbf{r}) \Psi_f^*(\mathbf{r}). \quad (36)$$

Здесь dS — вектор элементарной площадки, ориентированный вдоль нормали к границе, а суммирование осуществляется по всем границам.

Если некоторые потенциальные ступеньки чрезвычайно высоки ($V_i \rightarrow \infty$), то по аналогии с (9)

$$\int dS (V_i - V_j) \Psi_i(\mathbf{r}) \Psi_f^*(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \int dS \frac{\partial \Psi_i(\mathbf{r})}{\partial n} \frac{\partial \Psi_f^*(\mathbf{r})}{\partial n}, \quad (37)$$

где производные берутся вдоль нормали к границам.

Для иллюстрации этого подхода вычислим оптические матричные элементы для цилиндрической нити с радиусом R и бесконечно высокими потенциальными стенками. Волновая функция электрона в плоскости поперечного сечения равна

$$\Psi_{nk}(\rho, \varphi) = \frac{J_k(\gamma_{kn}\rho/R) \exp(ik\varphi)}{\sqrt{\pi} R J_{k+1}(\gamma_{kn})}, \quad (38)$$

где J_k — функция Бесселя k -го порядка, γ_{kn} — ее n -й нуль. Соответствующие уровни энергии

$$\varepsilon_{nk} = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \gamma_{kn}^2. \quad (39)$$

Используя (9), (36)—(39), получим выражение для оптического матричного элемента между состояниями $i \equiv (k, n)$ и $f \equiv (k', n')$:

$$(\mathcal{P}_x)_{fi} = \frac{i\hbar\gamma_{kn}\gamma_{k'n'}}{R\gamma_{k'n'}^2 - \gamma_{kn}^2} \delta_{k', k \pm 1}. \quad (40)$$

Видно, что оптические переходы разрешены между состояниями с азимутальными числами k , различающимися на единицу.

Наша процедура много проще, чем прямое вычисление интегралов, определяющих матричные элементы.

Заключение. Мы представили общие выражения для матричных элементов, описывающих межуровневое поглощение в различных квантово-размерных системах в присутствии кусочно-однородного электрического и однородного магнитного полей. Для широкого класса прямоугольных и треугольных потенциалов этот подход значительно упрощает задачи. Метод не требует детального знания волновой функции, а значит, много проще стандартной процедуры с решением уравнения Шредингера и последующим вычислением матричных элементов. В результате правила отбора и аналитические выражения для матричных элементов получаются во многих случаях, где стандартная процедура много сложнее и (или) может быть выполнена лишь численно. Наш подход также очень удобен для численных расчетов, поскольку уравнение Шредингера необходимо решать только для нескольких точек.

В качестве примера была рассмотрены КЯ некоторых частных форм и задача о межуровневых переходах в магнитном поле.

Мы благодарим В. И. Переля и Р. А. Суриса за полезное обсуждение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Intersubband Transitions in Quantum Wells (ed. by E. Rosencher, B. Vinter, B. Levine). N. Y. (1992).
- [2] A. Ya. Shik. Intersubband Transitions in Quantum Wells (ed. by E. Rosencher, B. Vinter, B. Levine), 319. N. Y. (1992).
- [3] H. J. Fischbeck, J. Mertsching. Phys. St. Sol., 31, 107 (1969).
- [4] D. D. Coon, R. P. G. Karunasiri. Appl. Phys. Lett., 45, 649 (1984).
- [5] B. F. Levine, S. D. Gunapala, M. Hong. Appl. Phys. Lett., 59, 1969 (1991).
- [6] H. Schneider, K. Kheng, F. Fuchs, J. D. Rapston, B. Dischler, P. Koidl. Intersubband Transitions in Quantum Wells (ed. by E. Rosencher, B. Vinter, B. Levine), 73. N. Y. (1992).
- [7] А. С. Давыдов. Квантовая механика. М. (1963).
- [8] J. W. Bales, K. A. McIntosh, T. C. L. G. Sollner, W. D. Goodhue, E. R. Brown, B. Lax. NATO ARW «Intersubband Transitions in Quantum Wells» (Book of abstracts). Cargese, France (1991).
- [9] D. J. Ben Daniel, C. B. Duke. Phys. Rev., 152, 683 (1966).
- [10] А. Я. Шик. ФТП. 22, 1843 (1988).
- [11] А. И. Луканин, З. И. Урицкий. ФТП, 13, 2286 (1979).

Редактор Т. А. Полянская