

Физика низкоразмерных систем — 2015

Е.Л. Ивченко

Глава 1

Сложная валентная зона

Прежде чем приступить к физике низкоразмерных систем, мы познакомимся со сложной структурой валентной зоны полупроводников с решеткой алмаза (Ge, Si) или цинковой обманки (GaAs, InSb, AlAs, InAs, CdTe, ZnSe и т.д.).

1.1 Спин-орбитальное взаимодействие

Электрон - это частица, обладающая внутренним моментом количества движения, или спином. В первом порядке по спин-орбитальному взаимодействию роль скалярной волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ и уравнения Шредингера играют двухкомпонентная (спинорная) волновая функция

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} \psi_{1/2}(\mathbf{r}) \\ \psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

и уравнение Шредингера–Паули для этой функции

$$\mathcal{H}\hat{\psi}(\mathbf{r}) = E\hat{\psi}(\mathbf{r}) . \quad (1.2)$$

Гамильтониан Шредингера–Паули имеет вид

$$\mathcal{H} = \bar{\mathcal{H}}\hat{I} + \hat{V}_{so} , \quad \hat{V}_{so} = \sum_{\lambda=x,y,z} \sigma_{\lambda}U_{\lambda} , \quad (1.3)$$

$\bar{\mathcal{H}}$ - скалярный (спин-независимый) гамильтониан

$$\bar{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m_0^3c^2} + \frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2}\Delta V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(\mathbf{r}) + \dots ,$$

$V(\mathbf{r})$ – потенциальная энергия электрона (без учета спина и спин-орбитального взаимодействия), \hat{I} – единичная матрица 2×2 , σ_λ – матрицы Паули:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{U} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}).$$

Для уравнения Шредингера–Паули в периодическом потенциале справедлива теорема Блоха

$$\hat{\psi}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \hat{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \hat{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.4)$$

1.2 Спин-орбитальное расщепление валентной зоны

Рассмотрим электронный энергетический спектр в зоне Γ_{15} в окрестности точки $\mathbf{k} = 0$ (Γ -точка). Вначале изучим спин-орбитальное взаимодействие при $\mathbf{k} = 0$. Для этого воспользуемся теорией возмущений в первом порядке по спин-орбитальному взаимодействию и получим правильные комбинации произведений $\alpha_s R_\lambda$ для вырожденной валентной зоны Γ_{15} в Γ -точке. Здесь α_s – спиновые столбцы

$$\alpha = \uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{при } s = \frac{1}{2} \quad \text{и} \quad \beta = \downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{при } s = -\frac{1}{2},$$

$R_\lambda = X(\mathbf{r}), Y(\mathbf{r}), Z(\mathbf{r})$ – базисные функции представления Γ_{15} . Мы исходим из гамильтониана Шредингера–Паули (1.3), в котором $V(\mathbf{r})$ – периодический потенциал электрона в кристалле.

Разложим волновую функцию электрона в Γ -точке по состояниям $|i\rangle$ из набора $\alpha_s R_\lambda$:

$$\Psi = \sum_{i=1}^6 D_i |i\rangle. \quad (1.5)$$

Энергия E и коэффициенты D_i находятся из системы линейных уравнений

$$\sum_{i'} V_{ii'}^{(\text{so})} D_{i'} = E D_i, \quad (1.6)$$

где

$$\hat{V}^{(\text{so})} \equiv \|V_{ii'}^{(\text{so})}\| = \begin{bmatrix} 0 & -i\bar{\Delta} & 0 & 0 & 0 & \bar{\Delta} \\ i\bar{\Delta} & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\bar{\Delta} \\ 0 & 0 & 0 & -\bar{\Delta} & i\bar{\Delta} & 0 \\ 0 & 0 & -\bar{\Delta} & 0 & i\bar{\Delta} & 0 \\ 0 & 0 & -i\bar{\Delta} & -i\bar{\Delta} & 0 & 0 \\ \bar{\Delta} & i\bar{\Delta} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.7)$$

введен энергетический параметр $\bar{\Delta} = -i \int d\mathbf{r} X(\mathbf{r})U_y Z(\mathbf{r})$ (вещественный, так как функции X, Y, Z вещественны, а оператор U_α чисто мнимый) и базис $|i\rangle$ выбран в последовательности $\alpha X(\mathbf{r}), \alpha Y(\mathbf{r}), \alpha Z(\mathbf{r}), \beta X(\mathbf{r}), \beta Y(\mathbf{r}), \beta Z(\mathbf{r})$. При расчете матрицы $\hat{V}^{(\text{so})}$ учтено, что

$$\langle \alpha_s R_\lambda | \sigma_\mu U_\mu | \alpha_{s'} R_\nu \rangle = (\alpha_s^+ \sigma_\mu \alpha_{s'}) \int d\mathbf{r} R_\lambda U_\mu R_\nu$$

и

$$\alpha_s^+ \sigma_\mu \alpha_{s'} = (\sigma_\mu)_{ss'}, \quad \int d\mathbf{r} R_\lambda U_\mu R_\nu = i e_{\lambda\mu\nu} \bar{\Delta}.$$

Матрица (1.7) совпадает с матрицей спин-орбитального взаимодействия электрона на $2p$ -оболочке атома водорода. При этом роль блоховских периодических амплитуд X, Y, Z играют $2p_x$ -, $2p_y$ - и $2p_z$ -орбитали. Пользуясь указанным совпадением (оно не случайно, а связано с симметрией состояний), мы можем найти собственные значения и собственные столбцы матрицы (1.7). Для этого воспользуемся коэффициентами Клебша–Гордона

$$\Psi_{jm} = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm} \Psi_{j_1 m_1}^{(1)} \Psi_{j_2 m_2}^{(2)},$$

$$C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm} = (-1)^{j_1 - j_2 + m} \sqrt{2j + 1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}.$$

Согласно книге “Квантовая механика. Нерелятивистская теория” (Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, М., ФИЗМАТЛИТ, 2001) имеем (задача в конце параграфа 106)

$$\begin{aligned} \psi_{l+1/2, m} &= \sqrt{\frac{j+m}{2j}} \alpha Y_{l, m-1/2} + \sqrt{\frac{j-m}{2j}} \beta Y_{l, m+1/2}, \\ \psi_{l-1/2, m} &= -\sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}} \alpha Y_{l, m-1/2} + \sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}} \beta Y_{l, m+1/2}, \end{aligned}$$

а шаровые функции $Y_{1,m}$ при орбитальном моменте $l = 1$ определены в параграфе 57. Пользуясь аналогией, получаем, что собственные значения матрицы (1.7) равны $\bar{\Delta}$ (зона Γ_8 , кратность 4, аналог состояний атома водорода с полным моментом $3/2$) и $-2\bar{\Delta}$ (зона Γ_7 , кратность 2, аналог состояний атома водорода с полным моментом $1/2$). Таким образом, экспериментально измеряемое спин-орбитальное расщепление валентной зоны $\Delta = 3\bar{\Delta}$. Собственные функции зоны Γ_8 и зоны Γ_7 в каноническом базисе имеют вид

$$\begin{aligned}
|\Gamma_8, +3/2\rangle &= -\alpha \frac{X + iY}{\sqrt{2}}, \\
|\Gamma_8, +1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \alpha Z - \beta \frac{X + iY}{\sqrt{6}}, \\
|\Gamma_8, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \beta Z + \alpha \frac{X - iY}{\sqrt{6}}, \\
|\Gamma_8, -3/2\rangle &= \beta \frac{X - iY}{\sqrt{2}}, \\
|\Gamma_7, +1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [\alpha Z + \beta (X + iY)], \\
|\Gamma_7, -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [\beta Z - \alpha (X - iY)].
\end{aligned} \tag{1.8}$$

От аналогичных спинорных шаровых функций $Y_{3/2,m}$ и $Y_{1/2,m}$ функции Γ_8 и Γ_7 отличаются общими множителями $i\sqrt{3/4\pi}$ и $-i\sqrt{3/4\pi}$, соответственно. В обозначениях функций $|\Gamma_8, m\rangle$ ($m = \pm 3/2, \pm 1/2$) и $|\Gamma_7, m\rangle$ ($m = \pm 1/2$) использована аналогия со спин-орбитальным расщеплением p -состояний атома водорода. По этой причине полуцелую величину m обычно называют проекцией полного углового момента на ось z .

Легко проверить, что коэффициенты в разложении функций (1.8) по базису $|i\rangle$ действительно образуют собственные столбцы матрицы $\hat{V}^{(so)}$. Рассмотрим в качестве примера состояние $|\Gamma_8, 1/2\rangle$. Представим коэффициенты D_i в (1.6) в виде шестикомпонентного столбца \hat{D} . Согласно

(1.8) этот столбец для состояния $|\Gamma_8, 1/2\rangle$ имеет вид

$$\hat{D}_{\Gamma_8, 1/2} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \\ -1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Путем прямого перемножения матрицы на столбец убеждаемся, что $\hat{V}^{(so)} \hat{D}_{\Gamma_8, 1/2} = \bar{\Delta} \hat{D}_{\Gamma_8, 1/2}$.

1.3 кр Теория возмущений для вырожденной зоны

Как было показано в курсе физики твердого тела, эффективный гамильтониан $\mathcal{H}^{(l)}(\mathbf{K})$ для электрона в невырожденной зоне l в окрестности точки \mathbf{k}_0 с точностью до членов 2-ого порядка включительно представляется в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(l)}(\mathbf{K}) = E(\mathbf{K}) = E_{l\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_0} + \\ + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{K} \mathbf{p}_{ll} + \left(\frac{\hbar}{m_0} \right)^2 \sum'_{n_1=l_1 j_1} \frac{(\mathbf{K} \mathbf{p}_{ln_1})(\mathbf{K} \mathbf{p}_{n_1 l})}{E_{l\mathbf{k}_0} - E_{l_1 \mathbf{k}_0}}, \end{aligned} \quad (1.9)$$

где $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, \mathbf{k} - волновой вектор электрона, индекс n_1 включает зонный индекс $l_1 \neq l$ и индекс j_1 , нумерующий вырожденные состояния в зоне l_1 , $\mathbf{p}_{n_1 l}$ - междузонный матричный элемент $\langle n_1, \mathbf{k}_0 | \hat{\mathbf{p}} | l \mathbf{k}_0 \rangle$, m_0 - масса свободного электрона. Отсюда для тензора обратной эффективной массы получаем

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}} = \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{m_0} + \frac{1}{m_0^2} \sum'_{n_1} \frac{p_{ln_1}^\alpha p_{n_1 l}^\beta + p_{ln_1}^\beta p_{n_1 l}^\alpha}{E_{l\mathbf{k}_0} - E_{l_1 \mathbf{k}_0}}. \quad (1.10)$$

При наличии N -кратного вырождения в точке \mathbf{k}_0 эффективный гамильтониан имеет вид матрицы $\mathcal{H}_{jj'}^{(l)}$ размерности $N \times N$ ($j, j' = 1, \dots, N$ -

индекс, нумерующий вырожденные состояния), компоненты которой находятся с использованием теории статических возмущений для вырожденного спектра

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{jj'}^{(l)}(\mathbf{K}) = & \left(E_{l\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_0} \right) \delta_{jj'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{Kp}_{lj,lj'} + \\ & + \left(\frac{\hbar}{m_0} \right)^2 \sum_{n_1=l_1j_1} \frac{(\mathbf{Kp}_{lj,n_1})(\mathbf{Kp}_{n_1,lj'})}{E_{l\mathbf{k}_0} - E_{l_1\mathbf{k}_0}}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Энергия электрона в зоне Γ_8 находится из секулярного уравнения

$$\text{Det} \|\mathcal{H}_{jj'}^{(l)}(\mathbf{K}) - E\delta_{jj'}\| = 0. \quad (1.12)$$

Волновая функция приближенно записывается в виде линейной комбинации произведений плавных огибающих $C_j(\mathbf{r})$ на блоховские функции в точке \mathbf{k}_0

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N C_j(\mathbf{r}) |l, j, \mathbf{k}_0\rangle. \quad (1.13)$$

Удобно коэффициенты $C_j(\mathbf{r})$ представить в виде N -компонентного столбца. Для состояния электрона с заданным волновым вектором имеем

$$\begin{aligned} \hat{C}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}) \hat{C}_{\mathbf{K}}, \quad (1.14) \\ \hat{C}_{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} C_{\mathbf{K},1} \\ C_{\mathbf{K},2} \\ \cdot \\ \cdot \\ C_{\mathbf{K},N} \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathcal{H}}^{(l)}(\mathbf{K})\hat{C}_{\mathbf{K}} = E\hat{C}_{\mathbf{K}}, \end{aligned}$$

где E – одно из решений уравнения (1.12).

Междузонные матричные элементы оператора импульса

В базисе $\alpha S, \beta S$ для зоны проводимости Γ_6 и базисе (1.8) для валентной зоны Γ_8 междузонные матричные элементы оператора импульса имеют вид

$$\|\mathbf{kp}_{c,s;v,\Gamma_8,m}\| = p_{cv} \begin{bmatrix} -\frac{k_+}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{2}{3}} k_z & \frac{k_-}{\sqrt{6}} & 0 \\ 0 & -\frac{k_+}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}} k_z & \frac{k_-}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \quad (1.15)$$

$$\|\mathbf{kp}_{v,\Gamma_8,m;c,s}\| = p_{cv}^* \begin{bmatrix} -\frac{k_-}{\sqrt{2}} & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}} k_z & -\frac{k_-}{\sqrt{6}} \\ \frac{k_+}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}} k_z \\ 0 & \frac{k_+}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \quad (1.16)$$

где $p_{cv} = \langle S|p_z|Z \rangle$, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$.

Для полноты приведем также междузонные матричные элементы для состояний v, Γ_7 и c, Γ_6 :

$$\|\mathbf{kp}_{c,s;v,\Gamma_7,m}\| = \frac{p_{cv}}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} k_z & -k_- \\ k_+ & k_z \end{bmatrix}. \quad (1.17)$$

1.4 Гамильтониан Латтинжера

Если учесть подмешивание к состояниям Γ_6 валентных состояний Γ_8 и Γ_7 , для эффективной массы на дне зоны проводимости получаем

$$\frac{1}{m_c} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{3} \frac{|p_{cv}|^2}{m_0^2} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right).$$

Учтем подмешивание к состояниям Γ_8 состояний Γ_6 в нижней зоне проводимости (двухзонное приближение) и используем выражения (1.15), (1.16). В результате получим вместо (1.11)

$$\mathcal{H}^{(\Gamma_8)} = E_{\Gamma_8}^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \quad (1.18)$$

$$-\frac{\hbar^2}{m_0^2} \frac{|p_{cv}|^2}{E_g} \begin{bmatrix} \frac{k_+^2}{2} & -\frac{k_z k_-}{\sqrt{3}} & -\frac{k_-^2}{\sqrt{12}} & 0 \\ -\frac{k_z k_+}{\sqrt{3}} & \frac{2}{3} k_z^2 + \frac{k_+^2}{6} & 0 & -\frac{k_-^2}{\sqrt{12}} \\ -\frac{k_+^2}{\sqrt{12}} & 0 & \frac{2}{3} k_z^2 + \frac{k_+^2}{6} & \frac{k_z k_-}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{k_+^2}{\sqrt{12}} & \frac{k_z k_+}{\sqrt{3}} & \frac{k_+^2}{2} \end{bmatrix},$$

где $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$. В многозонной модели эффективный гамильтониан

имеет вид

$$\mathcal{H}^{(\Gamma_8)} = \begin{bmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{bmatrix}, \quad (1.19)$$

$$F = (A - B)k_z^2 + (A + \frac{B}{2})k_{\perp}^2, \quad (1.20)$$

$$G = (A + B)k_z^2 + (A - \frac{B}{2})k_{\perp}^2,$$

$$I = -\frac{\sqrt{3}}{2} \left[B(k_x^2 - k_y^2) - 2i \frac{D}{\sqrt{3}} k_x k_y \right],$$

$$H = -Dk_z k_{\perp},$$

и характеризуется тремя параметрами A, B и D . Матрица (1.18) называется гамильтонианом Латтинжера. В двухзонном приближении имеем

$$A = \frac{\hbar^2}{2m_0} + B, \quad B = \frac{D}{\sqrt{3}} = -\frac{1}{3} \left(\frac{\hbar}{m_0} \right)^2 \frac{|p_{cv}|^2}{E_g}.$$

Иногда вводят безразмерные параметры Латтинжера

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 = -A, \quad \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_2 = -B, \quad \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_3 = -\frac{D}{\sqrt{3}}. \quad (1.21)$$

Линейными по \mathbf{k} членами в гамильтониане (1.19) пренебрегается: в кристаллах с центром инверсии они отсутствуют, в кристаллах с решеткой цинковой обманки симметрия допускает их наличие (если учесть спин-орбитальное смешивание валентной зоны Γ_{15} с далекими зонами), но, как правило, роль таких членов невелика. Дисперсионное уравнение приводится к виду

$$\text{Det} || \mathcal{H}_{jj'}^{(\Gamma_8)} - E \delta_{jj'} || = [(E - F)(E - G) - |H|^2 - |I|^2]^2 = 0.$$

Его корни

$$\begin{aligned} E_{hh, lh} &= \frac{F + G}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{F - G}{2} \right)^2 + |H|^2 + |I|^2} = \\ &= Ak^2 \pm \sqrt{B^2 k^4 + (D^2 - 3B^2) (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)} \end{aligned} \quad (1.22)$$

кратны, так как при отсутствии нечетных по \mathbf{k} членов все состояния двукратно вырождены (при $k = 0$ четырехкратно). Уравнение (1.22) можно переписать в виде параболической дисперсии

$$E_{hh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}}, \quad E_{lh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}}, \quad (1.23)$$

вводя зависящие от направления \mathbf{k} массы тяжелых и легких дырок

$$m_{hh} = \frac{\hbar^2}{2(-A - \sqrt{B^2 + C^2 f})}, \quad m_{lh} = \frac{\hbar^2}{2(-A + \sqrt{B^2 + C^2 f})}, \quad (1.24)$$

где $C^2 = D^2 - 3B^2$, $f = (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)/k^4$. Заметим, что $f = 0$ при $\mathbf{k} \parallel [001]$, $f = 1/3$ при $\mathbf{k} \parallel [111]$ и $f = 1/4$ при $\mathbf{k} \parallel [110]$. Приведем значения эффективных масс для GaAs: $m_e = 0.067m_0$, $m_{hh} = 0.45m_0$, $m_{lh} = 0.082m_0$, $m_{so} = 0.154m_0$. Анизотропия эффективных масс определяется из их значений в направлениях $[001]$ и $[111]$: $m_{hh,[001]} = 0.34m_0$, $m_{hh,[111]} = 0.75m_0$, $m_{lh,[001]} = 0.094m_0$, $m_{lh,[111]} = 0.082m_0$. Для безразмерных параметров имеем: $\gamma_1 = 6.8$, $\gamma_2 = 1.9$, $\gamma_3 = 2.73$ (Phys. Rev. B **39**, 3411, 1989).

Для полноты приведем коэффициенты разложения (1.13) волновой функции электрона в базисе (1.8):

$$\hat{C}_{\mathbf{k}j1} = \frac{1}{\sqrt{(E_j - F)(E_j - E_{\bar{j}})}} \begin{bmatrix} H \\ E_j - F \\ 0 \\ I^* \end{bmatrix}, \quad (1.25)$$

$$\hat{C}_{\mathbf{k}j2} = \frac{1}{\sqrt{(E_j - F)(E_j - E_{\bar{j}})}} \begin{bmatrix} I \\ 0 \\ E_j - F \\ -H^* \end{bmatrix},$$

где $\bar{j} = lh$, если $j = hh$, и $\bar{j} = hh$, если $j = lh$.

1.4.1 Гамильтониан Латтинжера и расщепление $2p$ -уровня атома водорода

Используем общие соображения симметрии для построения эффективно-го гамильтониана электрона в валентной зоне Γ_8 . С этой целью проведем

аналогию между зоной Γ_8 в полупроводнике с решеткой цинковой обманки (точечная группа T_d) и уровнем $3/2$ на $2p$ -орбитали атома водорода. Для углового момента $J = 3/2$ матрицы проекций углового момента \hat{J}_α ($\alpha = x, y, z$) в каноническом базисе (1.8) имеют вид

$$\hat{J}_x = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ i\sqrt{3}/2 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & i\sqrt{3}/2 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\hat{J}_z = \begin{bmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{bmatrix}. \quad (1.26)$$

Рассмотрим эффект Штарка для терма $2p3/2$ в атоме водорода, представляющий собой квадратичное по внешнему электрическому полю \mathcal{E} расщепление атомного уровня. Согласно методу инвариантов квадратичный вклад описывается матричным гамильтонианом

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= E_0 \hat{I} + a \mathcal{E}^2 \hat{I} + b (\hat{\mathbf{J}} \mathcal{E})^2 = (E_0 + a \mathcal{E}^2) \hat{I} + b \sum_i J_i^2 \mathcal{E}_i^2 + b [(J_y J_z + J_z J_y) \mathcal{E}_y \mathcal{E}_z + \dots] \\ &= (E_0 + a \mathcal{E}^2) \hat{I} + b \sum_i J_i^2 \mathcal{E}_i^2 + b \sum_{i' \neq i} \{J_i J_{i'}\}_s \mathcal{E}_i \mathcal{E}_{i'}, \end{aligned} \quad (1.27)$$

где \mathcal{E} – внешнее электрическое поле, $\{J_i J_{i'}\}_s = (J_i J_{i'} + J_{i'} J_i)/2$. В методе инвариантов матрица возмущения строится из произведений степеней компонент поля и компонент оператора углового момента так, чтобы эта матрица была инвариантной относительно преобразований симметрии исходного (невозмущенного) гамильтониана.

По аналогии строится эффективный гамильтониан для зоны Γ_8 :

$$\mathcal{H} = E_0 \hat{I} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 k^2 + \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_2 \left(\sum_i J_i^2 k_i^2 - \overline{\sum_i J_i^2 k_i^2} \right) + \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_3 \sum_{i' \neq i} \{J_i J_{i'}\}_s k_i k_{i'}$$

или

$$\mathcal{H} = E_0 \hat{I} + \left(A + \frac{5}{4} B \right) k^2 - B \sum_i J_i^2 k_i^2 - \frac{D}{\sqrt{3}} \sum_{i' \neq i} \{J_i J_{i'}\}_s k_i k_{i'}. \quad (1.28)$$

В отличие от полносимметричной группы (симметрия кулоновского потенциала) в точечной группе T_d появляется дополнительная линейно независимая константа. Матрица (1.28) без первого слагаемого $E_0\hat{I}$ совпадает с матрицей (1.19).

1.5 Спинорные представления

Приведем очень краткие сведения о спинорных представлениях. Оператор преобразования (пространственных и спинорных) координат определяется как

$$D_g\hat{\psi}(\mathbf{r}) \equiv \hat{\mathcal{D}}_{1/2}(g)\hat{\psi}(g^{-1}\mathbf{r}). \quad (1.29)$$

Матрица преобразования спиноров α, β связана с углами Эйлера соотношением

$$\hat{\mathcal{D}}_{1/2}(g) = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \exp \left[\frac{i}{2}(-\varphi - \psi) \right] & -\sin \frac{\theta}{2} \exp \left[\frac{i}{2}(-\varphi + \psi) \right] \\ \sin \frac{\theta}{2} \exp \left[\frac{i}{2}(\varphi - \psi) \right] & \cos \frac{\theta}{2} \exp \left[\frac{i}{2}(\varphi + \psi) \right] \end{bmatrix}, \quad (1.30)$$

$$\hat{\mathcal{D}}_{1/2}(g_2)\hat{\mathcal{D}}_{1/2}(g_1) = \omega_s(g_2, g_1)\hat{\mathcal{D}}_{1/2}(g_2g_1), \quad \omega_s(g_2, g_1) = \pm 1. \quad (1.31)$$

Вводить оператор преобразования в форме (1.29) приходится, так как оператор спин-орбитального взаимодействия в общем случае неинвариантен к простому преобразованию координат, $\hat{V}_{so}(g^{-1}\mathbf{r}) \neq \hat{V}_{so}(\mathbf{r})$, тогда как $\hat{\mathcal{D}}_{1/2}(g)\hat{V}_{so}(g^{-1}\mathbf{r})\hat{\mathcal{D}}_{1/2}^+(\mathbf{r}) = \hat{V}_{so}(\mathbf{r})$. Чтобы доказать это утверждение, достаточно показать, что матрицы $\hat{\mathcal{D}}_{1/2}(g)\sigma_\lambda\hat{\mathcal{D}}_{1/2}^+(g)$ связаны с σ_μ так же, как компоненты вектора $g^{-1}\mathbf{r}$ с компонентами вектора \mathbf{r} , т.е. $(g^{-1}\mathbf{r})_\lambda = D(g^{-1})_{\lambda\mu}r_\mu$, где матрицы ортогональных преобразований

$$D(g^{-1})_{\lambda\mu} = \cos(r_{0,\lambda}, r_{\Pi,\mu}),$$

$r_{0,\lambda}$ и $r_{\Pi,\mu}$ - координаты вектора \mathbf{r} в неподвижной и подвижной системах координат, связанных между собой преобразованием g^{-1} . Если при преобразовании g положение подвижной системы задается углами Эйлера θ, φ , то

$$\hat{D}(g) = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \varphi & -\sin \varphi & \sin \theta \cos \varphi \\ \cos \theta \sin \varphi & \cos \varphi & \sin \theta \sin \varphi \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix},$$

и, следовательно,

$$\hat{D}(g^{-1}) = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \varphi & \cos \theta \sin \varphi & -\sin \theta \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ \sin \theta \cos \varphi & \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \end{bmatrix}.$$

Представим матрицу $\hat{D}_{1/2}(g)$ в сокращенном виде

$$\begin{bmatrix} ce^- & -se^- \\ se^+ & ce^+ \end{bmatrix}.$$

Тогда $\hat{D}_{1/2}(g)\sigma_x\hat{D}_{1/2}^+(g)$ равно

$$\begin{bmatrix} -2cs & (c^2 - s^2)(e^-)^2 \\ (c^2 - s^2)(e^+)^2 & 2cs \end{bmatrix},$$

откуда и следует доказательство. Поэтому, если $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ есть решение уравнения Шредингера-Паули с энергией E и g - элемент симметрии гамильтониана, то решением является и функция $\hat{D}_{1/2}(g)\hat{\psi}(g^{-1}\mathbf{r})$.

Согласно (1.29,1.31) последовательное действие на спинор $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ двух операторов преобразования дает

$$D_{g_2}D_{g_1}\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \hat{D}_{1/2}(g_2)\hat{D}_{1/2}(g_1)\hat{\psi}((g_2g_1)^{-1}\mathbf{r}) = \omega_s(g_2, g_1)D_{g_2g_1}\hat{\psi}(\mathbf{r}).$$

Набор унитарных матриц, удовлетворяющих соотношениям

$$\hat{D}(g_2)\hat{D}(g_1) = \omega_s(g_2, g_1)\hat{D}(g_2g_1),$$

называется спинорным представлением. Для нахождения неприводимых спинорных представлений удобно ввести вспомогательную группу (двойная группа): $\bar{\mathcal{G}} = Q \times \mathcal{G}$, где \mathcal{G} - группа преобразований симметрии, а Q - дополнительный элемент. Двойная группа состоит из элементов g группы \mathcal{G} и элементов gQ . Умножение на двойной группе (обозначаемое далее точкой \cdot) задается следующими правилами: $Q \cdot g = gQ$ (элемент Q коммутирует со всеми элементами группы \mathcal{G}); $g_2 \cdot g_1 = g_2g_1$, если $\omega_s(g_2, g_1) = 1$, и $(g_2g_1)Q$, если $\omega_s(g_2, g_1) = -1$; $g_2 \cdot g_1Q = g_2g_1$, если $\omega_s(g_2, g_1) = -1$, и $(g_2g_1)Q$, если $\omega_s(g_2, g_1) = 1$; $g_2Q \cdot g_1 = g_2g_1$, если $\omega_s(g_2, g_1) = -1$, и $(g_2g_1)Q$, если $\omega_s(g_2, g_1) = 1$; $g_2Q \cdot g_1Q = g_2g_1$, если $\omega_s(g_2, g_1) = 1$, и $(g_2g_1)Q$, если $\omega_s(g_2, g_1) = -1$. Обычное (или векторное) представление двойной группы

эквивалентно спинорному представлению исходной группы.

Ниже приведена таблица характеров неприводимых представлений двойной группы \bar{T}_d

	e	Q	$4C_3$	$4C_3^2$	$3S_4^2$	$3S_4$	$3S_4^3$	6σ
			$4C_3^2Q$	$4C_3Q$	$3S_4^2Q$	$3S_4^3Q$	$3S_4Q$	$6\sigma Q$
Γ_6	2	-2	1	-1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
Γ_7	2	-2	1	-1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
Γ_8	4	-4	-1	1	0	0	0	0
Γ_{15}	3	3	0	0	-1	-1	-1	1

1.6 Метод инвариантов

Элементы симметрии кристалла g накладывают на вид эффективного гамильтониана ограничения

$$\hat{D}(g)\mathcal{H}(g^{-1}\mathbf{k})\hat{D}^{-1}(g) = \mathcal{H}(\mathbf{k}), \quad (1.32)$$

где $\hat{D}(g)$ - матрицы векторного (в пренебрежении спином) или спинорного (при учете спиновых состояний) представления, порождаемого базисными функциями в точке экстремума. Приведем краткое доказательство формулы (1.32) для квадратичного по \mathbf{k} слагаемого: согласно (1.11)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{jj'}^{(l,2)}(g^{-1}\mathbf{k}) &= \left(\frac{\hbar}{m_0}\right)^2 \sum_{n_1=l_1j_1} ' \frac{(g^{-1}\mathbf{k})\mathbf{p}_{lj,n_1} (g^{-1}\mathbf{k})\mathbf{p}_{n_1,lj'}}{E_l^{(0)} - E_{l_1}^{(0)}} \quad (1.33) \\ &= \left(\frac{\hbar}{m_0}\right)^2 \sum_{n_1=l_1j_1} ' \frac{\mathbf{k}(g\mathbf{p})_{lj,n_1} \mathbf{k}(g\mathbf{p})_{n_1,lj'}}{E_l^{(0)} - E_{l_1}^{(0)}}. \end{aligned}$$

Далее нужно учесть тождество $(g\mathbf{p})_{n_1,n_2} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}_{n_1}^+ g\mathbf{p} \hat{\psi}_{n_2} = \int d\mathbf{r} (D_g \hat{\psi}_{n_1})^+ \mathbf{p} D_g \hat{\psi}_{n_2}$ и использовать правила преобразования функций при операции симметрии.

Запишем матрицу $\mathcal{H}^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k})$ в виде

$$\mathcal{H}^{(\Gamma_8)}(\mathbf{k}) = \sum_{ijp} a_{ij,p} \hat{X}^{(ij)} F_p(\mathbf{k}), \quad (1.34)$$

где $\hat{X}^{(ij)}$ - шестнадцать линейно независимых матриц 4×4 с компонентами $X_{i_1 j_1}^{(ij)} = \delta_{i i_1} \delta_{j j_1}$, $F_p(\mathbf{k})$ - различные функции, зависящие от \mathbf{k} и пронумерованные индексом p . По отношению к преобразованию $D_g \hat{X} \equiv \hat{\mathcal{D}}(g) \hat{X} \hat{\mathcal{D}}^{-1}(g)$ матрицы $\hat{X}^{(ij)}$ образуют базис шестнадцатимерного (векторного) представления

$$D_g \hat{X}^{(ij)} \equiv \hat{\mathcal{D}}(g) \hat{X}^{(ij)} \hat{\mathcal{D}}^{-1}(g) = \sum_{i', j'} \mathcal{D}_{i' j', ij}^X \hat{X}^{(i' j')}, \quad (1.35)$$

где $\mathcal{D}_{i' j', ij}^X = \mathcal{D}_{i' i}(g) \mathcal{D}_{j' j}^*(g)$, т.е. представление \mathcal{D}^X есть прямое произведение $\Gamma_8 \times \Gamma_8^*$, которое разлагается на неприводимые представления $A_1 + A_2 + E + 2F_1 + 2F_2$. Приведем матрицы проекций углового момента в базисе Γ_8 :

$$\hat{J}_z = \begin{bmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{bmatrix} \quad (1.36)$$

$$\hat{J}_x = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_y = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}i & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}i & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2}i \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}i & 0 \end{bmatrix}.$$

Тогда наборы матриц, преобразующихся по неприводимым представлениям группы T_d , можно представить в виде

$$A_1 : J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{15}{4} \hat{I}$$

$$A_2 : \{J_x \{J_y J_z\}\}$$

$$E : \sqrt{3}(J_x^2 - J_y^2), 2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2$$

$$F_1 : J_x, J_y, J_z; J_x^3, J_y^3, J_z^3$$

$$F_2 : \{J_y J_z\}, \{J_z J_x\}, \{J_x J_y\}; V_x = \{J_x, J_y^2 - J_z^2\}, V_y, V_z.$$

Наборы функций $k_\alpha k_\beta$ или компонент тензора деформаций $\varepsilon_{\alpha\beta}$, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы T_d

$$A_1 : k^2, \text{Sp}\{\hat{\varepsilon}\} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha\alpha};$$

$$E : \sqrt{3}(k_x^2 - k_y^2), 2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2; \sqrt{3}(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}), 2\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy};$$

$$F_2 : k_y k_z, k_z k_x, k_x k_y; \varepsilon_{yz}, \varepsilon_{zx}, \varepsilon_{xy}.$$

Метод инвариантов состоит в построении эффективного матричного гамильтониана путем нахождения инвариантных комбинаций, составленных из произведений матриц размерности $N \times N$ и функций, зависящих от \mathbf{k} (и других величин типа тензора деформации, магнитного поля и т.д.), образующих базис представления точечной группы. Вначале продемонстрируем метод инвариантов для простой зоны проводимости в квадратичном по \mathbf{k} и линейном по тензору деформаций $\varepsilon_{\alpha\beta}$ приближении

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}, \hat{\varepsilon}) = & \Xi \text{Sp}\{\hat{\varepsilon}\} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \\ & + \Lambda_1 k^2 \text{Sp}\{\hat{\varepsilon}\} + \Lambda_2 \left[\sqrt{3}(k_x^2 - k_y^2) \sqrt{3}(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) + (2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2)(2\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) \right] \\ & + \Lambda_3 (k_y k_z \varepsilon_{yz} + k_z k_x \varepsilon_{zx} + k_x k_y \varepsilon_{xy}). \end{aligned}$$

Симметрия к инверсии времени

Оператор инверсии времени:

$$K = (-i\sigma_y) \mathcal{K}_0, \quad \mathcal{K}_0 \psi \equiv \psi^*$$

$$K \hat{\psi}_{lj} = \sum_{j'} T_{j'j} \hat{\psi}_{lj'}$$

$$\hat{T}(\Gamma_8) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.37)$$

Симметрия к инверсии времени накладывает на матрицу $\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k})$ условие

$$\hat{T} \hat{\mathcal{H}}^*(-\mathbf{k}) \hat{T}^{-1} = \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k}). \quad (1.38)$$

Теперь можно построить гамильтониан Латтинжера, исходя исключительно из соображений симметрии:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}^{(\Gamma_8)} &= -\gamma_1 \frac{\hbar^2}{2m_0} k^2 \hat{I} + \\
&+ \frac{\gamma_2}{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\sqrt{3}(J_x^2 - J_y^2) \sqrt{3}(k_x^2 - k_y^2) + (2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2)(2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2) \right] + \\
&+ 4\gamma_3 \frac{\hbar^2}{2m_0} (\{J_x J_y\} k_x k_y + \{J_y J_z\} k_y k_z + \{J_z J_x\} k_z k_x) = \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) k^2 - 2\gamma_2 \sum_{\alpha} J_{\alpha}^2 k_{\alpha}^2 - 2\gamma_3 \sum_{\alpha \neq \beta} \{J_{\alpha} J_{\beta}\} k_{\alpha} k_{\beta} \right] = \\
&= \left(A + \frac{5}{4} B \right) k^2 - B \sum_{\alpha} J_{\alpha}^2 k_{\alpha}^2 - \frac{D}{\sqrt{3}} \sum_{\alpha \neq \beta} \{J_{\alpha} J_{\beta}\} k_{\alpha} k_{\beta}.
\end{aligned}$$

Деформационный вклад

$$\Delta \mathcal{H} = \left(a + \frac{5}{4} b \right) \text{Sp}\{\hat{\varepsilon}\} - b \sum_{\alpha} J_{\alpha}^2 \varepsilon_{\alpha\alpha} - \frac{d}{\sqrt{3}} \sum_{\alpha \neq \beta} \{J_{\alpha} J_{\beta}\} \varepsilon_{\alpha\beta}. \quad (1.39)$$

При одноосной деформации вдоль оси z , когда $\varepsilon_{zz} \neq \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$, и $\varepsilon_{\alpha\beta} = 0$ при $\alpha \neq \beta$, валентная зона в точке $\mathbf{k} = 0$ расщепляется на состояния $\pm 3/2$ и $\pm 1/2$ с энергиями

$$E_m^{(0)} = \left(a + \frac{5}{4} b \right) \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha\alpha} - \frac{b}{4} \tilde{\varepsilon} \begin{cases} 9 & \text{при } m = \pm 3/2 \\ 1 & \text{при } m = \pm 1/2 \end{cases}, \quad (1.40)$$

где $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_{zz} - (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/2$. Расщепление составляет $E_{\pm 3/2}^{(0)} - E_{\pm 1/2}^{(0)} = -2b\tilde{\varepsilon}$.

Изотропное приближение

$$\mathcal{H}^{(\Gamma_8)} = \left(A + \frac{5}{4} B \right) k^2 - B (\mathbf{J}\mathbf{k})^2. \quad (1.41)$$

Глава 2

Низкоразмерные структуры

2.1 Гетероструктуры, иерархия понятий

а) Гетеропереход (одиночный)

Систематику удобно начать с одиночного гетероперехода между двумя композиционными материалами — полупроводниками А и В (single heterojunction). Один или оба композиционных материала могут быть твердыми растворами, например, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ или $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. Приведем примеры гетеропар А/В: $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$, InAs/AlSb , $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}/\text{InP}$, $\text{CdTe}/\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}/\text{ZnS}_y\text{Se}_{1-y}$, ZnSe/BeTe , ZnSe/GaAs , $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ и т.д. Здесь индексы $x, 1 - x$ или $y, 1 - y$ означают долю атомов определенного сорта в узлах кристаллической решетки или какой-либо из подрешеток. По определению, в гетеропереходах типа I запрещенная зона E_g одного из композиционных материалов лежит внутри запрещенной зоны другого материала. В этом случае потенциальные ямы для электронов или дырок расположены в одном и том же слое, например, внутри слоя GaAs в гетероструктуре $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ (с $x < 0.4$). Пусть материал А характеризуется меньшей запрещенной зоной, т.е. $E_g^A < E_g^B$. Тогда высота потенциального барьера на интерфейсе А/В составляет $V_c = E_c^B - E_c^A$ для электронов и $V_h = E_v^A - E_v^B$ для дырок, где E_c^j, E_v^j — энергетическое положение дна зоны проводимости c и потолка валентной зоны v в материале $j = A, B$. Сумма $V_c + V_h$ равна разности $E_g^B - E_g^A$. В широко применяемой гетеросистеме $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ отношение потенциальных барьеров V_c/V_h составляет 1.5.

В структурах типа II дно зоны проводимости E_c ниже в одном, а потолок валентной зоны E_v выше в другом материале, как в случае GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs с $x > 0.4$, InAs/AlSb или ZnSe/BeTe. Для указанных гетеропар запрещенные зоны E_g^A и E_g^B перекрываются. Имеются также гетеропереходы типа II (например, InAs/GaSb), у которых запрещенные зоны не перекрываются и дно зоны проводимости в одном материале лежит ниже потолка валентной зоны в другом материале. К типу III относят гетеропереходы, в которых один из слоев является бесщелевым, как в случае пары HgTe/CdTe.

Двойные гетеропереходы:

- б) **квантовая яма** (одиночная) (single quantum well или SQW) и
- в) одиночный барьер

Двойной гетеропереход В/А/В (double heterojunction) типа I представляет собой структуру с одиночной квантовой ямой, если $E_g^A < E_g^B$ (single quantum well (SQW), или структуру с одиночным барьером, если $E_g^A > E_g^B$. В широком смысле квантовой ямой называют систему, в которой движение свободного носителя, электрона или дырки, ограничено в одном из направлений. В результате возникает пространственное квантование и энергетический спектр по одному из квантовых чисел из непрерывного становится дискретным. Ясно, что двойная гетероструктура типа II является структурой с одиночной квантовой ямой для одного сорта частиц, скажем, для электронов, и структурой с одиночным барьером для носителя заряда противоположного знака. Наряду с прямоугольными квантовыми ямами можно выращивать ямы другого профиля, в частности параболического или треугольного.

- г) **Двухбарьерная структура**
- д) **Трехбарьерная структура**
- е) **Структура с квантовыми ямами** (толстобарьерная структура)
- ж) Короткопериодичная **сверхрешетка** (или просто сверхрешетка)

з) Ультратонкая сверхрешетка, например, $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ с $m, n = 2 \div 4$

и) Предельный случай $m = n = 1$, т.е. материал GaAlAs_2

Естественным развитием однобарьерной структуры являются двух- (double-) и трехбарьерные (triple-barrier) структуры. Аналогично от одиночной квантовой ямы естественно перейти к структуре с двумя (double QWs) или тремя (triple QWs) квантовыми ямами и структурам с целым набором изолированных квантовых ям (multiple quantum wells или MQWs). Даже если в такой структуре барьеры практически непроницаемы, двухчастичные электронные возбуждения, экситоны, в различных ямах могут быть связаны через электромагнитное поле, и присутствие многих ям существенно влияет на оптические свойства структуры. По мере того как барьеры становятся тоньше, туннелирование носителей из одной ямы в другую становится заметнее. Таким образом, с уменьшением толщины b квази- $2D$ -состояния, или состояния в подзонах (subband) размерного квантования изолированных ям, трансформируются в трехмерные минизонные (miniband) состояния. В результате периодическая структура изолированных квантовых ям, или толстобарьерная сверхрешетка, превращается в тонкобарьерную сверхрешетку, или просто сверхрешетку (superlattice или SL). Формирование минизон становится актуальным, когда период сверхрешетки $d = a + b$ становится меньше длины свободного пробега носителя заряда в направлении оси роста структуры (в дальнейшем ось z). Эта длина может зависеть от сорта носителя, в частности, из-за различия эффективных масс электрона и дырки. Поэтому одна и та же периодическая структура с квантовыми ямами может быть одновременно как сверхрешеткой для более легких носителей, обычно это электроны, так и структурой с набором изолированных ям для другого сорта носителей, например, тяжелых дырок. Последние также могут перемещаться вдоль оси роста, однако это движение носит не когерентный характер, а представляет собой цепочку некогерентных туннельных прыжков между соседними ямами.

Строго говоря, по определению сверхрешетки толщины слоев a и b должны существенно превышать постоянную кристаллической решетки a_0 , чтобы для описания электронных состояний можно было использовать метод эффективной массы или, в более широком смысле, метод плавных огибающих. Тем не менее, полезно в поле зрения физики низко-

размерных систем в качестве предельного случая включить “ультратонкую” сверхрешетку A_mB_n (ultra-short superlattice), например, $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$ с $m, n = 2-4$ и даже полупроводниковое соединение типа $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$, т.е. GaAlAs_2 .

Классификация сверхрешеток:

I. **Композиционные** сверхрешетки, ненапряженные при $\Delta a_0/a_0 \ll 0.01$ и **напряженные** при $\Delta a_0/a_0 \geq 0.01$ (тип I или тип II; нелегированные, однородно или селективно легированные композиционные сверхрешетки)

II. **Легированные сверхрешетки**, например, $n\text{-GaAs}/p\text{-GaAs}$ или $nipi$ -структуры

III. **Спиновые сверхрешетки**, в которых часть слоев содержит магнитные примеси или ионы, например, $\text{CdTe}/\text{CdMnTe}$.

Аналогично приведенной выше классификации гетероструктур по взаимному выстраиванию запрещенных зон E_g^A и E_g^B каждая сверхрешетка принадлежит к одному из трех типов, соответственно типу I, II и III. Сверхрешетки, состоящие из чередующихся слоев различных материалов, называются композиционными. Первоначально для создания квантовых ям и сверхрешеток подбирались гетеропары с практически одинаковыми постоянными решетки, например пара $\text{GaAs}/\text{GaAlAs}$. Структуры с рассогласованием постоянной решетки $\Delta a_0/a_0$, не превышающим 0.01, называются согласованными, или ненапряженными. Совершенствование технологии роста позволило получить бездислокационные сверхрешетки и при заметном рассогласовании постоянных решетки. В таких многослойных структурах, по крайней мере, один из слоев, А или В, должен быть достаточно тонким, чтобы согласование кристаллических решеток происходило за счет внутреннего напряжения, сжатия одного из слоев и, возможно, растяжения другого. Структуры с квантовыми ямами и сверхрешетки с $\Delta a_0/a_0 \geq 0.01$ называются напряженными. В композиционных спиновых сверхрешетках один или оба слоя А и В содержат магнитные примеси или ионы. Примером служит гетероструктура $\text{CdTe}/\text{CdMnTe}$.

Наряду с композиционными сверхрешетками, образованными пери-

одическим изменением состава, сверхрешетки могут создаваться модулированным легированием донорной и/или акцепторной примесью. Такие сверхрешетки, в частности сверхрешетка n -GaAs/ p -GaAs или *nipi*-структура, называются легированными.

Двумерные наноструктуры. Кроме структур с квантовыми ямами, изучаются и другие двумерные системы, в частности, графен (graphene) и трехслойные материалы (халькогениды MoS₂ и MoSe₂).

Одномерные наноструктуры. Квантовые проволоки, полученные выращиванием квантовой ямы на сколе, содержащем перпендикулярную ему квантовую яму (cleaved edge overgrowth). Углеродные нанотрубки, полученные свертыванием графеновых полосок и закреплением противоположных сторон (single-walled and multi-walled carbon nanotubes). Нитевидные нанокристаллы (нановискеры, ННК) выращиваются на поверхностях, активированных каплями катализатора роста (напр., золото). Развитие ростовых технологий и методов диагностики привели к созданию ННК с характерным радиусом ~ 10 нм и длиной до нескольких десятков мкм.

Нульмерные наноструктуры. Квантовые точки GaAs/InAs, выращенные по механизму Странски-Крастанова. Капельная эпитаксия квантовых точек GaAs/GaAlAs. Нанокристаллы CdSe, выращенные в стекле (рост полупроводниковых нанокристаллов происходит при распаде пересыщенного раствора ионов в стекле, получается неорганическое стекло, окрашенное нанокристаллами). Фуллерен C₆₀.

2.2 Размерное квантование электронных состояний в квантовых ямах, квантовых проволоках и квантовых точках

В настоящее время разработаны изощренные методы компьютерного расчета квантовых состояний в наноструктурах, основанные на микроскопических моделях псевдопотенциала или сильной связи. Тем не менее, во-первых, пока эти методы не всеильны и не всемогущи, а во-вторых, как подтверждает и история развития физики объемных полупроводников, при конкретной работе приближенные методы эффективной массы (в случае простых энергетических зон), эффективного гамильтониана (для вырожденных зон) и плавных огибающих (в многозонной модели, напри-

мер, модели Кейна) оказываются более удобными и результативными. В данном курсе мы будем исходить из приближенного метода эффективной массы, более наглядного и позволяющего получать аналитические результаты. В таком подходе решение внутри каждого слоя многослойной структуры (или композиционной области меньшей размерности в квантовых проводах или точках) записывается в виде линейной комбинации независимых объемных решений, а для сшивки на гетерограницах вводятся граничные условия для огибающих волновой функции электрона и их производных по нормальной координате.

Расчеты электронных состояний в полупроводниковых наноструктурах, выполняемые в методе эффективной массы, выглядят часто как практические занятия по квантовой механике. Мы начнем с простейшей модели структуры с квантовой ямой, в которой барьеры считаются бесконечно высокими. В приближении бесконечно высоких барьеров огибающая волновой функции электрона записывается в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(q_x x + q_y y)} \varphi(z), \quad (2.1)$$

где $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ - двумерный волновой вектор, характеризующий движение электрона в плоскости интерфейса. В структуре $B/A/B$ функция $\varphi(z)$ удовлетворяет одномерному уравнению Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A} \frac{d^2}{dz^2} \varphi(z) = E_z \varphi(z),$$

где m_A - эффективная масса электрона в материале A . Вне слоя A функция $\varphi(z)$ равна тождественно нулю. Полная энергия электрона E складывается из энергии размерного квантования E_z и кинетической энергии $E_{xy} = \hbar^2 q^2 / 2m_A$ (значения E отсчитываются от дна зоны проводимости материала A). Начало отсчета на оси z выбирается в середине слоя A . Тогда граничные условия для φ в приближении бесконечно высоких барьеров записываются в виде

$$\varphi\left(\pm \frac{a}{2}\right) = 0,$$

где a - ширина слоя A и, следовательно, $\pm a/2$ - координаты интерфейсов. Система обладает симметрией к отражению $z \rightarrow -z$. Поэтому совокупность собственных решений уравнения Шредингера разбивается на

подгруппы четных и нечетных решений, имеющих соответственно вид $C \cos kz$ и $C \sin kz$, где $k = \sqrt{2m_A E_z / \hbar^2}$, C - нормировочный коэффициент. С учетом граничных условий получаем

$$k = \frac{\nu\pi}{a}, \quad E_z = \frac{\hbar^2}{2m_A} \left(\frac{\nu\pi}{a} \right)^2, \quad (2.2)$$

где $\nu = 1, 3, \dots$ для четных и $\nu = 2, 4, \dots$ для нечетных решений. Соответствующие размерно-квантованные электронные или дырочные состояния будем обозначать в виде $e\nu$ или $h\nu$ соответственно. Энергетический спектр состоит из ветвей

$$E_{e\nu\mathbf{q}} = \frac{\hbar^2}{2m_A} \left[\left(\frac{\nu\pi}{a} \right)^2 + q^2 \right],$$

называемых подзонами размерного квантования, или просто подзонами.

Барьеры конечной высоты, $q = 0$. При конечной высоте барьеров огибающая φ отлична от нуля в слоях B и удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_B} \frac{d^2}{dz^2} + V \right) \varphi(z) = E_z \varphi(z),$$

где потенциальный барьер V равен разрыву ΔE_c зоны проводимости на интерфейсе. Для простой зонной структуры чаще других используются граничные условия Бастарда (Bastard)

$$\varphi|_A = \varphi|_B, \quad \frac{1}{m_A} \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)_A = \frac{1}{m_B} \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)_B, \quad (2.3)$$

где $\varphi_{A,B}$ - значение огибающей на интерфейсе со стороны слоя A или B .

Четное решение записывается в виде

$$\varphi(z) = \begin{cases} C \cos kz & \text{при } |z| \leq \frac{a}{2}, \\ D \exp[-\varkappa(|z| - \frac{a}{2})] & \text{при } |z| \geq \frac{a}{2}, \end{cases} \quad (2.4)$$

где $\varkappa = [2m_B(V - E_z)/\hbar^2]^{1/2}$, V - высота барьера и учтено, что для размерно-квантованных состояний энергия E_z меньше V и волновой вектор в слоях B мнимый: $k_B = i\varkappa$. Из системы уравнений (2.3), которую можно записать с учетом (2.4) как

$$C \cos \frac{ka}{2} = D, \quad -\frac{k}{m_A} C \sin \frac{ka}{2} = -\frac{\varkappa}{m_B} D, \quad (2.5)$$

получаем трансцендентное уравнение для энергии четных состояний

$$\tan \frac{ka}{2} = \eta \equiv \frac{m_A \varkappa}{m_B k}. \quad (2.6)$$

Аналогичное уравнение для нечетных решений имеет вид

$$\operatorname{ctg} \frac{ka}{2} = -\eta. \quad (2.7)$$

Приведенные выше формулы применимы и при отличном от нуля волновом векторе \mathbf{q} , если под k и \varkappa понимать величины

$$k = \left(\frac{2m_A E}{\hbar^2} - q^2 \right)^{1/2}, \quad \varkappa = \left[\frac{2m_B (V - E)}{\hbar^2} + q^2 \right]^{1/2}. \quad (2.8)$$

Известно, что в симметричной одномерной потенциальной яме всегда имеется хотя бы одно размерно-квантованное состояние. Поэтому при конечной высоте барьеров энергетический спектр электрона состоит из конечного числа подзон размерного квантования $e\nu$ и континуума [состояния с $E - (\hbar^2 q^2 / 2m_B) > V$]. При совпадающих эффективных массах m_A и m_B зависимость $E_{e\nu\mathbf{q}}$ от \mathbf{q} параболическая, как в однородных композиционных материалах. При относительно небольшом различии между m_A и m_B дисперсия подзон $e\nu$ близка к параболической.

Проанализируем предельный переход от конечных к бесконечно высоким барьерам. С этой целью будем считать величину V достаточно большой, так что выполнено неравенство

$$V \gg \frac{\hbar^2}{2m_A} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2.$$

Тогда для основного состояния $e1$ величину \varkappa можно приближенно заменить на $\varkappa_0 = (2m_A V / \hbar^2)^{1/2}$ и рассматривать отношение k/\varkappa_0 в качестве малого параметра. Перепишем уравнение (2.6) в эквивалентной форме $\operatorname{ctg}(ka/2) = m_B k / m_A \varkappa$. В нулевом приближении по параметру k/\varkappa_0 для состояния $e1$ получим $ka/2 = \pi/2$ или $k = \pi/a$, что отвечает предельному переходу $V \rightarrow \infty$ и совпадает с (2.2) при $\nu = 1$. Представив k в виде $\pi/a - \delta k$, находим в первом приближении

$$\delta k \frac{a}{2} \approx \frac{m_B \pi}{m_A \varkappa_0 a} \quad \text{или} \quad k \approx \frac{\pi}{a} \left(1 - \frac{m_B}{m_A} \frac{2}{\varkappa_0 a} \right)$$

и

$$E_{e1} \approx \frac{\hbar^2}{2m_A} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 \left(1 - \frac{m_B}{m_A} \frac{4}{\varepsilon_0 a} \right). \quad (2.9)$$

Так как обычно массы m_A и m_B сопоставимы, критерием применимости формулы (2.9) является неравенство $\varepsilon_0 a \gg 4$. Таким образом, понятия “высокий барьер”, “низкий барьер” относительны и при достаточно широкой яме формула (2.9) применима даже для гетероструктур с явно небольшим разрывом зон.

В гетероструктурах GaAs/Al_xGa_{1-x}As, выращенных в направлении [001], состояния тяжелых (hh) и легких (lh) дырок при $q = 0$ квантуются независимо, поэтому в квантовых ямах формируются две серии дырочных состояний: $hh\nu$ и $lh\nu$, характеризующиеся проекциями углового момента $J_z = \pm 3/2$ и $J_z = \pm 1/2$ соответственно. Для ненулевого латерального волнового вектора \mathbf{q} состояния тяжелых и легких дырок перемешиваются и валентные подзоны оказываются сильно непараболическими.

Квантовые проволоки и квантовые точки. В квантовой яме носитель может свободно перемещаться в двух измерениях. Поэтому о структуре с квантовой ямой говорят как о двумерной системе или о квазидвумерной системе, в последнем случае имея в виду, что размерно-квантованные состояния имеют конечную протяженность и в третьем направлении, т.е. в направлении оси роста. Рассмотрим теперь кратко квантование электронных состояний в квантовых проволоках (система размерности $d = 1$) и квантовых точках ($d = 0$), в которых свободное движение возможно только в одном направлении или вообще отсутствует.

Проволоки с прямоугольным сечением $a_x \times a_y$, бесконечно высокие барьеры. Огибающая волновой функции электрона имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = (1/\sqrt{L})e^{iqz}\varphi(x, y), \quad \varphi(x, y) = \varphi_{\nu_x}(x, a_x) \varphi_{\nu_y}(y, a_y),$$

где L - длина проволоки, $1/\sqrt{L}$ - нормировочный коэффициент, q - волновой вектор, характеризующий свободное движение вдоль главной оси проволоки,

$$\varphi_{\nu}(x, a) = \sqrt{\frac{2}{a}} \begin{cases} \cos \frac{\nu x}{a} & \text{при нечетном } \nu, \\ \sin \frac{\nu x}{a} & \text{при четном } \nu. \end{cases} \quad (2.10)$$

Для энергии электрона в подзоне $e\nu_x\nu_y$ в состоянии с волновым вектором

q имеем

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_A} \left[q^2 + \left(\frac{\nu_x \pi}{a_x} \right)^2 + \left(\frac{\nu_y \pi}{a_y} \right)^2 \right]. \quad (2.11)$$

Квантовые точки в форме прямоугольного параллелепипеда $a_x \times a_y \times a_z$, бесконечно высокие барьеры. Приведем выражения для огибающей волновой функции и энергии электрона

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi_{\nu_x}(x, a_x) \varphi_{\nu_y}(y, a_y) \varphi_{\nu_z}(z, a_z), \quad E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_A} \sum_{j=x,y,z} \left(\frac{\nu_j}{a_j} \right)^2. \quad (2.12)$$

Сферические квантовые точки радиуса R , барьеры конечной высоты, основное состояние. Основное состояние обладает сферической симметрией:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{C}{r} \begin{cases} \sin kr & \text{при } r \leq R, \\ \sin kR e^{-\alpha(r-R)} & \text{при } r \geq R, \end{cases} \quad (2.13)$$

где C - нормировочный коэффициент,

$$k = (2m_A E / \hbar^2)^{1/2}, \quad \alpha = [2m_B(V - E) / \hbar^2]^{1/2}. \quad (2.14)$$

Энергия размерного квантования E удовлетворяет уравнению

$$1 - kR \operatorname{ctg} kR = \frac{m_A}{m_B} (1 + \alpha R).$$

Цилиндрические квантовые проволоки, барьеры конечной высоты, основное состояние с $q = 0$. В этом случае огибающая выражается через функции Бесселя $J_0(x)$ и $K_0(x)$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} CJ_0(k\rho) & \text{при } r \leq R, \\ DK_0(\alpha\rho) & \text{при } r \geq R, \end{cases} \quad (2.15)$$

где $D = CJ_0(kR) / K_0(\alpha R)$.

Энергетическая плотность состояний. Рассмотрим энергетический спектр $E_{n\mathbf{k}}$ квазичастицы в пространстве размерности $d = 3, 2, 1$ и 0 , где n - дискретное квантовое число или набор таких чисел, \mathbf{k} - d -компонентный волновой вектор; при $d = 0$ волновой вектор как величина, характеризующая квантовые состояния, отсутствует. Энергетической плотностью состояний назовем число квантово-механических состояний, приходящихся

на единичный интервал энергии и на единичный объем d -мерного пространства. С помощью аппарата δ -функций плотность состояний можно представить в виде

$$g_d(E) = \frac{2}{V_d} \sum_{n\mathbf{k}} \delta(E - E_{n\mathbf{k}}), \quad (2.16)$$

где множитель 2 учитывает двукратное вырождение электронных состояний по спину, V_d - обобщенный объем, который при $d = 3$ есть объем образца, понимаемый в обычном смысле, а для полупроводниковых низкоразмерных систем он равен площади образца в плоскости интерфейсов в случае квантовых ям ($d = 2$), длине квантовой проволоки ($d = 1$) и просто единице для квантовой точки ($d = 0$). Разложим $E_{n\mathbf{k}}$ в ряд по степеням \mathbf{k} и ограничимся квадратичным приближением

$$E_{n\mathbf{k}} = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2M_n},$$

где имеющий размерность массы параметр M_n принимает значения между m_A и m_B . Подставляя это разложение в (2.16), получаем выражение для вклада ветви n в плотность состояний:

$$g_3(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2M_n}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_n^0} \theta(E - E_n^0),$$

$$g_2(E) = \frac{M_n}{\pi \hbar^2} \theta(E - E_n^0),$$

$$g_1(E) = \frac{1}{\pi} \left[\frac{2M_n}{\hbar^2 (E - E_n^0)} \right]^{1/2} \theta(E - E_n^0),$$

$$g_0(E) = 2 \delta(E - E_n^0),$$

где $\theta(x)$ - ступенчатая функция, принимающая значения 1 при положительных x и 0 при отрицательных x . Отметим, что в квантовой яме плотность состояний имеет характер горизонтальной ступеньки, в квантовой проволоке зависимость $g(E)$ аналогична плотности электронных состояний в объемном полупроводнике, помещенном в квантующее магнитное поле, а в квантовой точке функция $g(E)$ представляет собой набор изолированных пиков, уширенных с учетом конечности времени жизни

электрона на уровнях размерного квантования. Формулы для $d = 1, 2, 3$ можно записать в виде одной общей формулы

$$g_d(E) = \frac{2}{(2\pi)^d} \frac{B_d M_n}{\hbar^2} \left(\frac{2M_n(E - E_n^0)}{\hbar^2} \right)^{\frac{d}{2}-1} = \frac{B_d}{\pi^d} \left(\frac{M_n}{2\hbar^2} \right)^{\frac{d}{2}} (E - E_n^0)^{\frac{d}{2}-1},$$

где $B_3 = 4\pi$, $B_2 = 2\pi$, $B_1 = 2$.

Межзонные оптические переходы

Рассмотрим, как размерное квантование влияет на собственное поглощение света, связанное с переходами двумерных электронов из валентной зоны в зону проводимости. Во-первых, край межзонного поглощения $\hbar\omega_{th}$ сдвинется по сравнению с краем поглощения в объемном материале в коротковолновую сторону на энергию размерного квантования электронов и дырок

$$\hbar\omega_{th} = E_g + E_{e1} + E_{h1}. \quad (2.17)$$

Во-вторых, расщепление зоны проводимости и валентной зоны на ряд подзон размерного квантования означает, что в спектре поглощения будут присутствовать особенности, связанные с переходами электронов между различными подзонами.

Матричный элемент M_{fi} оптического межзонного перехода пропорционален произведению матричного элемента оператора импульса на блоховских (быстрых) функциях u_n на интеграл перекрытия плавных огибающих

$$M_{fi} \propto \langle u_{n_f} | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | u_{n_i} \rangle \delta_{\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i} \int \varphi_{e\nu_f}^*(z) \varphi_{h\nu_i}(z) dz. \quad (2.18)$$

Здесь $n_{f,i}$ - индекс зоны проводимости или валентной зоны, $\nu_{f,i}$ - индекс подзоны размерного квантования, $\mathbf{k}_{f,i}$ - волновой вектор электрона в плоскости интерфейса. Как при любых оптических переходах в структурах с трансляционной симметрией, при межзонном поглощении сохраняется двумерный волновой вектор \mathbf{k} (мы считаем волновой вектор света малым и пренебрегаем им). Таким образом, оптические переходы графически следует изображать вертикальными стрелками.

Вклад переходов между подзонами ν_i и ν_f в поглощение пропорционален квадрату интеграла перекрытия, который определяет правила отбора по номеру подзоны. Рассмотрим квантовую яму с бесконечно высокими стенками. В такой структуре собственные функции не зависят от

эффективной массы. Следовательно, наборы собственных функций для электронов и дырок совпадают. В силу ортонормированности каждого из наборов интеграл перекрытия

$$\int \varphi_{e\nu'}^*(z)\varphi_{h\nu}(z)dz = \delta_{\nu,\nu'}. \quad (2.19)$$

Итак, оптические переходы могут происходить только между подзонами валентной зоны и зоны проводимости с одинаковыми номерами. В квантовых ямах конечной глубины волновые функции зависят от эффективных масс и других параметров структуры. Таким образом, наборы волновых функций для электронов и дырок не совпадают, и ортогональность волновых функций отсутствует. Однако продолжают выполняться следующие условия

$$\begin{aligned} \int \varphi_{e\nu'}^*(z)\varphi_{h\nu}(z)dz &\approx 1, \nu = \nu' \\ \left| \int \varphi_{e\nu'}^*(z)\varphi_{h\nu}(z)dz \right| &\ll 1, \nu \neq \nu', \end{aligned} \quad (2.20)$$

означающие, что вероятность переходов также будет мала при $\nu \neq \nu'$.

Зависимость коэффициента поглощения от поляризации света определяется фактором $\left| \langle u_{n_f} | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | u_{n_i} \rangle \right|^2$ в формуле (2.18). При изучении поглощения в гетероструктурах, основанных на соединениях A_3B_5 , необходимо учитывать сложную структуру валентной зоны.

Учет сложной структуры валентной зоны приводит к поляризационной зависимости межзонного поглощения в квантовых ямах. Рассмотрим междузонные переходы в гетероструктурах, выращенных на основе полупроводников с решеткой цинковой обманки в направлении [001]. Для переходов между состояниями $\pm 3/2, \pm 1/2$ валентной зоны и состояниями $\pm 1/2$ зоны проводимости матричные элементы оператора импульса $\langle u_{n_f} | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | u_{n_i} \rangle$ находятся из формулы (1.15) заменой компонент вектора \mathbf{k} на компоненты вектора поляризации \mathbf{e} :

$$\|\mathbf{e}_{p_{c,s;\nu,\Gamma_8,m}}\| = p_{cv} \begin{bmatrix} -\frac{e_{\pm}}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{2}{3}} e_z & \frac{e_{-}}{\sqrt{6}} & 0 \\ 0 & -\frac{e_{\pm}}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}} e_z & \frac{e_{-}}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}. \quad (2.21)$$

Скорость генерации электрон-дырочных пар (вероятность рождения в единицу времени) для оптических переходов при $k_x=k_y=0$ определяет-

ся соотношениями

$$\begin{aligned}
|M(e\nu, \pm 1/2; hh\nu, \mp 3/2)|^2 &\propto |e_x \pm ie_y|^2, \\
|M(e\nu, \pm 1/2; hh\nu, \pm 3/2)|^2 &= 0, \\
|M(e\nu, \pm 1/2; lh\nu, \pm 1/2)|^2 &\propto \frac{1}{3}|e_x \mp ie_y|^2, \\
|M(e\nu, \pm 1/2; lh\nu, \mp 1/2)|^2 &\propto \frac{4}{3}|e_z|^2.
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Для вывода можно воспользоваться структурой блоховских функций Γ_8 и учесть, что при $\mathbf{k} = 0$ тяжелая дырка имеет проекцию момента $\pm 3/2$, а легкая дырка - проекцию момента $\pm 1/2$ на направление роста. Можно также использовать рассчитанные ранее междузонные матричные элементы (1.15) оператора \mathbf{kp} взаимодействия и заменить в соответствующих выражениях компоненты k_α на компоненты e_α . В (2.22) состояния в валентной зоне указаны в дырочном представлении. В связи с этим заметим, что проекции углового момента в электронном и дырочном представлениях различаются знаком. Для света, циркулярно поляризованного по правому кругу (σ_+ -поляризация) и распространяющегося вдоль оси z , справедливы формулы

$$\mathbf{e} = \frac{\mathbf{o}_x + i\mathbf{o}_y}{\sqrt{2}}, e_z = 0 \quad \text{и} \quad |e_x + ie_y|^2 = 0, |e_x - ie_y|^2 = 2,$$

тогда как для света σ_- -поляризации имеем

$$\mathbf{e} = \frac{\mathbf{o}_x - i\mathbf{o}_y}{\sqrt{2}}, |e_x + ie_y|^2 = 2, |e_x - ie_y|^2 = 0,$$

где \mathbf{o}_x и \mathbf{o}_y - единичные векторы в направлении осей x и y .

Для ненулевого латерального волнового вектора дырки \mathbf{k} , сопоставимого с обратной шириной ямы, состояния тяжелых и легких дырок сильно перемешиваются, валентные подзоны оказываются сильно непараболическими и правила отбора нарушаются.

2.3 Метод матриц переноса. Электроны, фононы и фотоны в СР

Пусть функция $\varphi(z)$ задана внутри слоев A в виде

$$\varphi(z) = F_+ e^{ik_A z} + F_- e^{-ik_A z},$$

а внутри слоев B

$$\varphi(z) = G_+ e^{ik_B z} + G_- e^{-ik_B z} .$$

На гетерограницах эта функция удовлетворяет условиям

$$\varphi|_A = \varphi|_B, C_A \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)_A = C_B \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)_B .$$

Представим функцию $\varphi(z)$ и ее производную в виде двухкомпонентного столбца

$$\hat{\varphi}(z) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \dot{\varphi} \end{pmatrix}, \dot{\varphi}_j \equiv \frac{C_j}{C_A} \frac{1}{k_A} \frac{d\varphi}{dz} . \quad (2.23)$$

Матрица переноса через однородный слой толщины l :

$$\hat{\varphi}(z) = \hat{t}(z, z_0) \hat{\varphi}(z_0) ,$$

$$\hat{t}(z, z_0) = \begin{bmatrix} \cos kl & \frac{1}{\bar{N}} \sin kl \\ -\bar{N} \sin kl & \cos kl \end{bmatrix}, \quad (2.24)$$

где $l = z - z_0$, $\bar{N} = 1$ в слое А и $\bar{N} = (C_B k_B)/(C_A k_A) \equiv N$ в слое В. При выводе (2.24) учтено, что производная $d\varphi/dz$ равна

$$ik_A (F_+ e^{ik_A z} - F_- e^{-ik_A z}) \quad \text{или} \quad ik_B (G_+ e^{ik_B z} - G_- e^{-ik_B z}) .$$

Заметим, что $\text{Det } \hat{t} = 1$ (унимодулярные матрицы). При $k_B = i\alpha$ имеем

$$\hat{t}(z, z_0) = \begin{bmatrix} \cosh \alpha l & \frac{1}{\eta} \sinh \alpha l \\ \eta \sinh \alpha l & \cosh \alpha l \end{bmatrix},$$

где $\eta = (C_B \alpha)/(C_A k_A)$.

Теорема Блоха

$$\hat{\varphi}(d) = \hat{t}_A \hat{t}_B \hat{\varphi}(0) \equiv \hat{T} \hat{\varphi}(0) = e^{iKd} \hat{\varphi}(0) ,$$

где K - волновой вектор при распространении волны вдоль оси z сверхрешетки.

Дисперсионное уравнение

$$\text{Det} \begin{bmatrix} T_{11} - e^{iKd} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} - e^{iKd} \end{bmatrix} = 0 ,$$

$$\cos Kd = \frac{T_{11} + T_{22}}{2}, \quad (2.25)$$

$$\cos Kd = \cos k_A a \cos k_B b - \frac{1}{2} \left(N + \frac{1}{N} \right) \sin k_A a \sin k_B b. \quad (2.26)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \hat{T} = \hat{t}_A \hat{t}_B &= \begin{bmatrix} \cos k_A a & \sin k_A a \\ -\sin k_A a & \cos k_A a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos k_B b & \frac{1}{N} \sin k_B b \\ -N \sin k_B b & \cos k_B b \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \cos k_A a \cos k_B b - N \sin k_A a \sin k_B b & \dots\dots\dots \\ \dots\dots\dots & \cos k_A a \cos k_B b - \frac{1}{N} \sin k_A a \sin k_B b \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

откуда и следует уравнение (2.26).

Электроны

φ - огибающая волновой функции электрона (или дырки),

$$k_A = \sqrt{\frac{2m_A E}{\hbar^2} - q_{\parallel}^2}, \quad k_B = \sqrt{\frac{2m_A(E - V)}{\hbar^2} - q_{\parallel}^2}.$$

В граничных условиях

$$C_A = \frac{1}{m_A}, \quad C_B = \frac{1}{m_B}, \quad N = \frac{m_A k_B}{m_B k_A}.$$

Для состояний с энергией E ниже барьера V дисперсионное уравнение удобнее переписать в виде

$$\cos Kd = \cos ka \cosh \alpha b + \frac{1}{2} \left(\eta - \frac{1}{\eta} \right) \sin ka \sinh \alpha b, \quad (2.27)$$

где k и α определены согласно (2.8). Для анализа дисперсии при малых Kd воспользуемся представлением

$$1 - \cos Kd = \frac{1}{2} \sin ka \sinh \alpha b f_1 f_2 \equiv F \quad (2.28)$$

$$f_1 = \tan k \frac{a}{2} - \eta \tanh \kappa \frac{b}{2}, \quad f_2 = \frac{1}{\eta} \cot k \frac{a}{2} + \coth \kappa \frac{b}{2}.$$

Уравнения $f_1 = 0, f_2 = 0$ при $b \rightarrow \infty$ совпадают с уравнениями (2.6), (2.7) для энергии электрона в одиночной квантовой яме.

При $Kd \ll 1$ имеем: $E \approx E_{ev} + \frac{d^2}{2F'} K^2$ или $\frac{1}{M_{\parallel}} = \frac{d^2}{F' \hbar^2}$.

Узкие зоны: $E \approx E_{ev} + \frac{1}{F'} (1 - \cos Kd)$

Нормальные световые волны в оптических сверхрешетках

Уравнения Максвелла

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \mathbf{D} &= 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \end{aligned}$$

и материальные уравнения

$$\mathbf{D} = \begin{cases} \varepsilon_A \mathbf{E} & \text{в слое A,} \\ \varepsilon_B \mathbf{E} & \text{в слое B.} \end{cases}$$

Для монохроматической волны оператор $\partial/\partial t$ можно заменить на $-i\omega$. Кроме того, движение в плоскости интерфейса описывается экспонентой $\exp(i\mathbf{q}\rho)$. Выбираем систему осей, в которой $q_y = 0$ и $q_x \equiv q$ положительно.

s -поляризация: $\mathbf{E} \parallel y$, $\mathbf{B} \perp y$, роль φ играет \mathcal{E}_y , граничные условия: $\mathcal{E}_y|_A = \mathcal{E}_y|_B$ и из непрерывности B_x следует, что $(\partial \mathcal{E}_y / \partial z)|_A = (\partial \mathcal{E}_y / \partial z)|_B$,

$$\mathcal{E}_y \propto \exp(\pm i k_j z + i q x), \quad k_j = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon_j - q^2}, \quad N = \frac{k_B}{k_A}.$$

p -поляризация: $\mathbf{E} \perp y$, $\mathbf{B} \parallel y$, роль φ играет B_y , граничные условия: $B_y|_A = B_y|_B$ и из непрерывности \mathcal{E}_x следует, что

$$\varepsilon_A^{-1} (\partial B_y / \partial z)|_A = \varepsilon_B^{-1} (\partial B_y / \partial z)|_B, \quad N = (k_B \varepsilon_A) / (k_A \varepsilon_B).$$

При распространении света перпендикулярно плоскости слоев, т.е. при $q_x = q_y = 0$, дисперсионное уравнение принимает вид

$$\cos Kd = \cos k_A a \cos k_B b - \frac{1}{2} \left(\frac{n_B}{n_A} + \frac{n_A}{n_B} \right) \sin k_A a \sin k_B b, \quad (2.29)$$

где $n_{A,B} = \sqrt{\varepsilon_{A,B}}$, $k_{A,B} = (\omega/c)n_{A,B}$.

В так называемом распределенном брэгговском отражателе толщины слоев выбираются из условия

$$n_A \frac{\bar{\omega}}{c} a = n_B \frac{\bar{\omega}}{c} b = \frac{\pi}{2}, \quad (2.30)$$

где $\bar{\omega}$ — частота, задаваемая в качестве центра запрещенной зоны в спектре фотонов. На границе зоны Бриллюэна ($K = \pm\pi/d$) электрическое поле в соседних слоях можно выбирать в виде

$$E(z) = \begin{cases} C \cos k_A(z - z_A) & \text{в слое А,} \\ D \sin k_B(z - z_B) & \text{в слое В,} \end{cases}$$

или

$$E(z) = \begin{cases} C \sin k_A(z - z_A) & \text{в слое А,} \\ D \cos k_B(z - z_B) & \text{в слое В,} \end{cases}$$

где z_A, z_B — положение центра соответствующего слоя. Частоты в точке $K = \pi/d$ удовлетворяют трансцендентным уравнениям

$$\operatorname{tg}\left(\frac{k_A a}{2}\right) \operatorname{tg}\left(\frac{k_B b}{2}\right) = \frac{n_B}{n_A}, \quad \operatorname{tg}\left(\frac{k_A a}{2}\right) \operatorname{tg}\left(\frac{k_B b}{2}\right) = \frac{n_A}{n_B}.$$

В этом можно убедиться, переписав дисперсионное уравнение при $\cos Kd = -1$ в виде

$$1 + \cos 2\varphi_A \cos 2\varphi_B - \frac{1}{2} \left(\frac{n_B}{n_A} + \frac{n_A}{n_B} \right) \sin 2\varphi_A \sin 2\varphi_B = 0,$$

или

$$1 + (\cos^2 \varphi_A - \sin^2 \varphi_A)(\cos^2 \varphi_B - \sin^2 \varphi_B) - 2 \left(\frac{n_B}{n_A} + \frac{n_A}{n_B} \right) \sin \varphi_A \cos \varphi_A \sin \varphi_B \cos \varphi_B = 0,$$

или

$$2 \left(\sin^2 \varphi_A \sin^2 \varphi_B + \cos^2 \varphi_A \cos^2 \varphi_B \right) - 2 \left(\frac{n_B}{n_A} + \frac{n_A}{n_B} \right) \sin \varphi_A \cos \varphi_A \sin \varphi_B \cos \varphi_B = 0, \quad (2.31)$$

где $\varphi_A = k_A a/2$, $\varphi_B = k_B b/2$, и т.д.

При выборе толщин слоев в виде (2.30) эти уравнения упрощаются до

$$\operatorname{tg}^2\left(\frac{\pi \omega}{4 \bar{\omega}}\right) = \frac{n_B}{n_A}, \quad \operatorname{tg}^2\left(\frac{\pi \omega}{4 \bar{\omega}}\right) = \frac{n_A}{n_B}.$$

При малом диэлектрическом контрасте, когда $|n_A - n_B| \ll n_A$, получаем запрещенную зону, лежащую между частотами $\bar{\omega}[1 \pm (|n_A - n_B|/\pi \bar{n})]$, где $\bar{n} = (n_A + n_B)/2$.

В длинноволновом приближении сверхрешетку можно рассматривать как однородную среду с эффективной диэлектрической проницаемостью

$$\varepsilon_{\perp}^{(\text{eff})} = \frac{\varepsilon_A a + \varepsilon_B b}{a + b}, \quad \varepsilon_{\parallel}^{(\text{eff})} = \left(\frac{a}{\varepsilon_A} + \frac{b}{\varepsilon_B}\right)^{-1} (a + b). \quad (2.32)$$

Эти формулы можно вывести и более прямым способом, учитывая, что в тонких слоях можно пренебречь изменением поля \mathbf{E} и смещения \mathbf{D} внутри отдельного слоя:

y -компонента (\mathcal{E}_y непрерывна). $D_{A,y} = \varepsilon_A \mathcal{E}_y$, $D_{B,y} = \varepsilon_B \mathcal{E}_y$,

$$\bar{D}_y = \frac{a D_{A,y} + b D_{B,y}}{a + b} = \frac{a \varepsilon_A + b \varepsilon_B}{a + b} \mathcal{E}_y.$$

z -компонента (D_z непрерывна). $\mathcal{E}_{A,z} = D_z/\varepsilon_A$, $\mathcal{E}_{B,z} = D_z/\varepsilon_B$,

$$\bar{\mathcal{E}}_z = \frac{a \mathcal{E}_{A,z} + b \mathcal{E}_{B,z}}{a + b} = \frac{a \varepsilon_A^{-1} + b \varepsilon_B^{-1}}{a + b} D_z.$$

Интерфейсные фононы. Случай p -поляризации с $q \gg (\omega/c)|\sqrt{\varepsilon_{A,B}}|$, $k_A \approx k_B \approx iq$ можно рассмотреть отдельно, пренебрегая запаздыванием, т.е. вихревой составляющей поля (формально устремив скорость света c к бесконечности):

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi, \quad \operatorname{div} \mathbf{D} = 0, \quad \varepsilon \Delta\varphi = 0,$$

$$\mathcal{E}_z = -\frac{\partial\varphi}{\partial z}, \quad \mathcal{E}_x = -iq_x\varphi, \quad k_z = \pm iq_x, \quad D_z|_A = D_z|_B, \quad N = \frac{\varepsilon_B}{\varepsilon_A}.$$

Дисперсионное уравнение в этом предельном случае сводится к

$$\cos Kd = \cosh q_x a \cosh q_x b + \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_B}{\varepsilon_A} + \frac{\varepsilon_A}{\varepsilon_B} \right) \sinh q_x a \sinh q_x b. \quad (2.33)$$

В предельном случае $|q_x|a, |q_x|b \rightarrow \infty$ оно переходит в

$$0 = 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_B}{\varepsilon_A} + \frac{\varepsilon_A}{\varepsilon_B} \right) = \frac{(\varepsilon_A + \varepsilon_B)^2}{\varepsilon_A \varepsilon_B}$$

или $\varepsilon_A + \varepsilon_B = 0$.

Поверхностная волна на границе двух полубесконечных сред. На границе сред А/В поля определяются выражениями:

при $z < 0$ потенциал $\varphi = \varphi_0 \exp(iq_x x + q_x z)$, $\mathcal{E}_x = -iq_x \varphi$, $D_z = -\varepsilon_A q_x \varphi$ (выбираем $q_x > 0$),

при $z > 0$ потенциал $\varphi = \varphi_0 \exp(iq_x x - q_x z)$, $\mathcal{E}_x = -iq_x \varphi$, $D_z = \varepsilon_B q_x \varphi$. Из непрерывности D_z получаем $\varepsilon_A q_x \varphi = -\varepsilon_B q_x \varphi$, т.е. $\varepsilon_A + \varepsilon_B = 0$ в согласии с полученным выше результатом. Учтем вклад оптических фононов в диэлектрическую проницаемость материала А:

$$\varepsilon_A = \varepsilon_\infty \frac{\Omega_L^2 - \omega^2}{\Omega_T^2 - \omega^2}, \quad \varepsilon_B = \varepsilon_\infty.$$

Тогда частота поверхностной волны $\omega_s = \sqrt{(\Omega_L^2 + \Omega_T^2)/2}$.

При $q_x b \rightarrow \infty$, но конечном $q_x a$ получаем уравнение для частоты двух смешанных поверхностных волн:

$$0 = \cosh q_x a + \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_B}{\varepsilon_A} + \frac{\varepsilon_A}{\varepsilon_B} \right) \sinh q_x a,$$

или $e^{q_x a} (\varepsilon_A + \varepsilon_B)^2 = e^{-q_x a} (\varepsilon_A - \varepsilon_B)^2$ и, окончательно,

$$\omega^2 = \omega_s^2 \pm (1/2)(\Omega_L^2 - \Omega_T^2)e^{-q_x a}.$$

Для незатухающих блоховских решений волновой вектор K удовлетворяет условиям

$$K \in (-\pi/d, \pi/d] \quad \text{и} \quad |\cos Kd| \leq 1.$$

Поэтому при

$$\frac{\varepsilon_A}{\varepsilon_B} = \frac{\Omega_L^2 - \omega^2}{\Omega_T^2 - \omega^2}$$

незатухающие решения имеются только внутри области частот $\Omega_T < \omega < \Omega_L$, где отношение $\varepsilon_A/\varepsilon_B$ отрицательно; в противном случае правая часть

(2.33) при $q_x \neq 0$ превышает единицу.

“Сложенные” акустические фононы (продольные фононы, распространяющиеся вдоль оси z)

$$\begin{aligned} \varphi &\longrightarrow u_z, \sigma_{zz} = \lambda_{zzzz} u_{zz} \\ u_z|_A &= u_z|_B, \sigma_{zz}|_A = \sigma_{zz}|_B, C_A = \lambda_A, C_B = \lambda_B, N = \frac{\lambda_B k_B}{\lambda_A k_A} \quad (2.34) \\ \omega &= s k, s = \sqrt{\lambda/\rho}, \lambda = \rho s^2, N = \frac{\rho_B s_B}{\rho_A s_A} \end{aligned}$$

Дисперсионное уравнение удобно представить в виде

$$\cos Kd = \cos(k_A a + k_B b) - \frac{1}{2} \sin k_A a \sin k_B b \varepsilon^2, \quad (2.35)$$

где

$$\varepsilon = \frac{\rho_B s_B - \rho_A s_A}{\sqrt{\rho_A \rho_B s_A s_B}}.$$

В пренебрежении слагаемым, пропорциональным ε^2 , получаем

$$Kd = k_A a + k_B b = \frac{\omega}{s_{SL}} d, s_{SL} = d (a s_A^{-1} + b s_B^{-1})^{-1}.$$

В схеме приведенных зон частоты $\omega_l = s_{SL}(2\pi l/d)$ с $l = 1, 2, \dots$ приводятся в центр зоны Бриллюэна $K = 0$.

При учете этого слагаемого в спектре акустических фононов появляются разрешенные и запрещенные минизоны. При малых ε ширина первой запрещенной минизоны $\Delta\omega$ находится из условия

$$0 = -\frac{1}{2} \left(\frac{\omega}{s_{SL}} d - 2\pi \right)^2 - \frac{1}{2} \sin k_A a \sin k_B b \varepsilon^2$$

или $\Delta\omega = 2(s_{SL}/d)|\varepsilon \sin k_A a|$. Здесь учтено, что $\sin k_B b \approx \sin(2\pi - k_A a) = -\sin k_A a$.

2.4 Примесные центры и экситоны в гетероструктурах

Примесные центры в квантовых ямах

Толстые ямы ($a \gg a_B$), бесконечно высокие барьеры. Примесный центр в середине слоя ямы:

$$E_n = -\frac{E_B}{n^2}, \quad E_B = \frac{e^2}{2\varepsilon a_B} = \frac{e^4 m^*}{2\varepsilon^2 \hbar^2}, \quad a_B = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{e^2 m^*}; \quad \psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-|r-r_{\text{им}}|/a_B},$$

примесный центр на гетерогранице: $E = -E_B/4$, так как $2p_z$ -орбиталь удовлетворяет и уравнению Шредингера в яме, и граничным условиям.

Тонкие ямы ($a \ll a_B$), бесконечно высокие барьеры, примесь внутри ямы ($\rho_{\text{им}} = 0$):

$$\psi(\mathbf{r}) = F(\rho) \varphi_{e1}(z), \quad F(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi a_{2D}^2}} \exp\left(-\frac{\rho}{a_{2D}}\right), \quad a_{2D} = \frac{a_B}{2}, \quad E = -4 E_B$$

Тонкие ямы, барьеры конечной высоты.

$$E = E_0^B - E_B - \delta E,$$

где E_0^B - положение дна зоны проводимости в материале B , a_B и E_B - борковский радиус и энергия связи экситона в материале B , δE - добавка к энергии связи из-за наличия ямы: $\delta E \approx -V(a/2a_B)$.

Действительно, получаем последовательно

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{e^2}{\varepsilon \rho} \right] e^{-\rho/a_{2D}} &= E e^{-\rho/a_{2D}}, \\ \left[\frac{\hbar^2}{2m^* a_{2D}} \frac{1}{\rho} \left(1 - \frac{\rho}{a_{2D}} \right) - \frac{e^2}{\varepsilon \rho} \right] e^{-\rho/a_{2D}} &= E e^{-\rho/a_{2D}}, \\ \frac{\hbar^2}{2m^* a_{2D}} &= \frac{e^2}{\varepsilon}, \quad a_{2D} = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{2e^2 m^*} = \frac{a_B}{2}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m^* a_{2D}^2} &= E, \quad -4 \frac{\hbar^2}{2m^* a_B^2} = E. \end{aligned}$$

Экситоны в квантовых ямах

Водородоподобные состояния экситона Ваннье-Мотта описываются двухчастичной огибающей функцией $\Psi_{exc}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$. В объемном полупроводнике с простыми зонами для экситона $1s$ имеем

$$\Psi_{exc}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \frac{e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}}}{\sqrt{V}} \varphi(\mathbf{r}), \quad \varphi(\mathbf{r}) = \frac{\exp(-r/a_B)}{\sqrt{\pi a_B^3}}.$$

Толстые ямы. В этом случае экситон квантуется как единое целое:

$$\Psi_{exc} = F(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r}), \quad F(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{K}_{\parallel}\mathbf{R}_{\parallel}} \Phi(Z), \quad (2.36)$$

$$E = E_g - E_B^{3D} + \frac{\hbar^2}{2M} \left[K_{\parallel}^2 + \left(\frac{\pi\nu}{a} \right)^2 \right], \quad (2.37)$$

где $M = m_e + m_h$ - трансляционная эффективная масса экситона, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$, $\mathbf{R} = (m_e \mathbf{r}_e + m_h \mathbf{r}_h) / (m_e + m_h)$ - центр масс экситона, \mathbf{R}_{\parallel} - положение центра масс в плоскости интерфейсов, размерное квантование экситона вдоль оси z описывается функцией $\Phi(Z)$, a - ширина ямы. Для нижнего уровня размерного квантования экситона $\Phi(Z) = \sqrt{2/a} \cos(\pi Z/a)$.

Тонкие ямы. В простейшем вариационном подходе волновая функция для основного ($1s$) состояния экситона записывается в виде

$$\Psi_{exc} = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{K}_{\parallel}\mathbf{R}_{\parallel}} \varphi(\rho, z_e, z_h), \quad \varphi(\rho, z_e, z_h) = f(\rho) \varphi_{e1}(z_e) \varphi_{h1}(z_h) \quad (2.38)$$

с пробной функцией

$$f(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi \tilde{a}_B^2}} e^{-\rho/\tilde{a}_B},$$

характеризуемой единственным вариационным параметром \tilde{a} .

В $2D$ -пределе:

$$E = E_g + E_{e1} + E_{h1} - E_B^{2D} + \frac{\hbar^2 K_{\parallel}^2}{2M}, \quad \tilde{a}_B = \frac{a_B}{2}, \quad E_B^{2D} = 4E_B^{3D}.$$

2.5 Резонансное туннелирование электрона через двухбарьерную структуру

Для симметричной структуры задача о расчете амплитудных коэффициентов отражения и пропускания (r и t) может быть сведена к двум более простым задачам нахождения коэффициентов отражения, соответствующим четным и нечетным решениям:

$$r = \frac{1}{2}(r_+ + r_-), \quad t = \frac{1}{2}(r_+ - r_-). \quad (2.39)$$

Здесь учтено, что при одновременном падении на симметричную структуру волн с одинаковыми амплитудами или амплитудами, отличающимися знаками, амплитуды отраженных вправо и влево волн также совпадают (с коэффициентом отражения $+r_+$) или отличаются знаками (с коэффициентом отражения $\pm r_-$).

Рассмотрим симметричную двухбарьерную структуру, в которой границы квантовой ямы задаются координатами $z = \pm a/2$, а внешние границы правого и левого барьеров — координатами $a/2 + b$, $-a/2 - b$ соответственно. Решение в яме ищется в виде $C \cos kz$ (четное решение) или $C \sin kz$ (нечетное решение), решение в правом барьере записывается в виде $D_1 e^{-\alpha(z-a/2)} + D_2 e^{\alpha(z-a/2)}$, решение в правой полуплоскости — в виде $e^{-ik(z-a/2-b)} + r_{\pm} e^{ik(z-a/2-b)}$. Из граничных условий на интерфейсах $z = a/2$, $a/2 + b$ получаем систему линейных уравнений для нахождения коэффициентов C, D_1, D_2 и r_{\pm} . В частности, для четных решений имеем

$$\begin{aligned} C \cos \frac{ka}{2} &= D_1 + D_2, \quad C \sin \frac{ka}{2} = \eta(D_1 - D_2), \\ D_1 e^{-\alpha b} + D_2 e^{\alpha b} &= 1 + r_+, \quad i\eta(-D_1 e^{-\alpha b} + D_2 e^{\alpha b}) = 1 - r_+, \\ \frac{1 - r_+}{1 + r_+} &= i\eta \frac{\Sigma_+ - e^{-2\alpha b}}{\Sigma_+ + e^{-2\alpha b}}, \quad \Sigma_+ = \frac{D_2}{D_1} = \frac{\eta - \operatorname{tg} \phi}{\eta + \operatorname{tg} \phi}. \end{aligned}$$

Решая эту систему уравнений и аналогичную для нечетных решений, получаем

$$r_{\pm} = \frac{e^{-2\alpha b}(1 + i\eta) + \Sigma_{\pm}(1 - i\eta)}{e^{-2\alpha b}(1 - i\eta) + \Sigma_{\pm}(1 + i\eta)}, \quad (2.40)$$

где

$$\Sigma_{\pm} = \frac{\eta + \operatorname{ctg} \phi}{\eta - \operatorname{ctg} \phi}, \quad \phi = \frac{ka}{2}. \quad (2.41)$$

Проанализируем теперь предельный случай толстых (но конечных по толщине) барьеров ($e^{-2\alpha b} \ll 1$) при $E \approx E_{e1}$ (E_{e1} — уровень размерного квантования электрона в квантовой яме с бесконечно толстыми барьерами).

При $E = E_{e1}$ разность $\eta - \operatorname{tg} \phi$ равна нулю, см. (2.6). Поэтому в области $E \approx E_{e1}$ эта разность мала и в формуле (2.40) для r_+ нужно оставлять оба слагаемых как в числителе, так и в знаменателе. При этом разность $\eta - \operatorname{tg} \phi$ можно разложить в ряд Тейлора по разности $E - E_{e1}$, учесть, что член нулевого порядка равен нулю, и пренебречь слагаемыми второго и

более высокого порядков: $\eta - \operatorname{tg} \phi \propto E - E_{e1}$. В результате получаем

$$\Sigma_+ \approx \frac{\eta - \operatorname{tg} \phi}{2\eta} \approx P(E - E_{e1}),$$

$$P = \frac{1}{2\eta} \left[\frac{d(\eta - \operatorname{tg} \phi)}{dE} \right]_{E=E_{e1}}.$$

Можно показать, что для нижнего уровня $e1$ коэффициент P отрицателен.

В отличие от числителя в выражении для Σ_+ числитель в Σ_- не обращается в нуль при $E = E_{e1}$ и можно при $E \approx E_{e1}$ использовать приближение

$$\Sigma_- \approx \frac{\eta^2 + 1}{\eta^2 - 1}.$$

Это отношение не имеет малости и поэтому в числителе и знаменателе выражения для r_- можно пренебречь слагаемыми, пропорциональными экспоненте $e^{-2\alpha b}$. В результате получаем

$$r_- \approx \frac{1 - i\eta}{1 + i\eta},$$

откуда следует, что

$$\begin{aligned} t &\approx \frac{1}{2}(r_+ - r_-) = \frac{1}{2} \left(\frac{e^{-2\alpha b}(1 + i\eta) + \Sigma_+(1 - i\eta)}{e^{-2\alpha b}(1 - i\eta) + \Sigma_+(1 + i\eta)} - \frac{1 - i\eta}{1 + i\eta} \right) \\ &= \frac{e^{-2\alpha b}}{2(1 + i\eta)^2} \frac{(1 + i\eta)^2 - (1 - i\eta)^2}{\Sigma_+ + e^{-2\alpha b}(1 - i\eta)/(1 + i\eta)} \\ &\approx \frac{2i\eta e^{-2\alpha b} e^{-2i\theta}}{P(1 + \eta^2)} \left(E - E_{e1} + \frac{e^{-2\alpha b}}{P} \frac{1 - \eta^2 - 2i\eta}{1 + \eta^2} \right)^{-1}, \end{aligned}$$

что можно привести к виду

$$t \approx -i e^{-2i\theta} \frac{\hbar\Gamma_{e1}}{E - \tilde{E}_{e1} + i\hbar\Gamma_{e1}}, \quad \theta = \operatorname{arctg} \eta, \quad (2.42)$$

где

$$\hbar\Gamma_{e1} = \frac{2\eta}{1 + \eta^2} \frac{e^{-2\alpha b}}{-P}, \quad \tilde{E}_{e1} = E_{e1} + \frac{1 - \eta^2}{2\eta} \hbar\Gamma_{e1}, \quad (2.43)$$

$$T = |t|^2 = \frac{(\hbar\Gamma_{e1})^2}{(E - \tilde{E}_{e1})^2 + (\hbar\Gamma_{e1})^2}. \quad (2.44)$$

При наклонном падении получаем (при $m_A = m_B = m^*$)

$$T(\mathbf{k}) = \frac{(\hbar\Gamma_{e1})^2}{\left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} - \tilde{E}_{e1}\right)^2 + (\hbar\Gamma_{e1})^2} \approx \hbar\Gamma_{e1}\pi \delta\left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} - \tilde{E}_{e1}\right) \quad (2.45)$$

2.6 Резонансный туннельный ток в электрическом поле

Рассмотрим симметричную двухбарьерную гетероструктуру, вдоль главной оси которой приложено электрическое поле. Плотность электрического тока через туннельную структуру описывается формулой

$$j_z = e 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar k_z}{m^*} [T_{rl} F_l \theta(k_z) + T_{lr} F_r \theta(-k_z)], \quad (2.46)$$

где $F_{l,r}$ - функция распределения электронов в левом и правом контактах соответственно, $\theta(k_z) = 1$ при $k_z > 0$ и $\theta(k_z) = 0$ при $k_z < 0$. Далее имеем

$$\begin{aligned} j_z &= e 2 \frac{\hbar}{m^*} \int_0^\infty \frac{2\pi k_{\parallel} dk_{\parallel}}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{dk_z}{2\pi} k_z T(\mathbf{k}) F_l \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{e\Gamma m^*}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \int_0^\infty dE_{\parallel} dE_z \delta(E_z - E_{e1} + \xi U) \theta(E_F - E_{\parallel} - E_z) \\ &= \frac{e\Gamma m^*}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dE_{\parallel} \theta(E_{e1} - \xi U) \theta(E_F - E_{\parallel} - E_{e1} + \xi U) \\ &= \frac{e\Gamma m^*}{2\pi\hbar^2} \int_0^{E_F - (E_{e1} - \xi U)} dE_{\parallel} \theta(E_{e1} - \xi U) \theta[E_F - (E_{e1} - \xi U)] \\ &= \begin{cases} \frac{e\Gamma m^*}{2\pi\hbar^2} (E_F - E_{e1} + \xi U), & \text{если } 0 < E_{e1} - \xi U < E_F, \\ 0 & \text{вне этой области.} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Максимальное значение плотности тока равно $e\Gamma m^* E_F / (2\pi\hbar^2)$. В (2.47) использованы обозначения

$$E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}, \quad E_{\parallel} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}, \quad k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2,$$

и учтено, что в электрическом поле энергия нижнего уровня размерного квантования опускается (относительно дна зоны проводимости в левом контакте) как $E_{e1} - \xi U$, где U – перепад энергии электрона между левым и правым контактными берегами за счет приложенного электрического поля, ξ – доля этого перепада, приходящаяся на область между левым берегом и центром квантовой ямы ($\xi \sim 1/2$).

2.7 Резонансное отражение света от квантовой ямы

Волновое уравнение

$$-\Delta \mathbf{E} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{D}. \quad (2.48)$$

Для поперечной световой волны, распространяющейся вдоль направления роста, это векторное уравнение сводится к одномерному уравнению

$$\frac{d^2 E}{dz^2} = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 D = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 [\varepsilon_b E + 4\pi P_{exc}(z)]$$

или

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + k^2 E = -k_0^2 4\pi P_{exc}(z), \quad (2.49)$$

где $k_0 = \omega/c$, $k^2 = \varepsilon_b k_0^2$, P_{exc} – вклад экситона, возбуждаемого в квантовой яме, в диэлектрическую поляризацию (различием фоновых диэлектрических постоянных ε_b в материалах ямы и барьера пренебрегается):

$$4\pi P_{exc}(z) = G \Phi(z) \int \Phi^*(z'') E(z'') dz'', \quad (2.50)$$

$$\Phi(z) = \varphi(0, z, z), \quad \Phi^*(z) = \Phi(z), \quad G = \frac{\pi a_B^3 \varepsilon_b \omega_{LT}}{\omega_0 - \omega - i\Gamma},$$

для основного состояния экситона в симметричной яме функция $\Phi(z)$ является четной функцией z при выборе центра $z = 0$ в середине ямы.

Одномерная функция Грина:

Общее решение уравнения $\frac{d^2 y}{dz^2} + k^2 y = -F(z)$ имеет вид

$$y(z) = E_1 e^{ikz} + E_2 e^{-ikz} + \frac{i}{2k} \int dz' e^{ik|z-z'|} F(z'). \quad (2.51)$$

Поэтому волновое интегро-дифференциальное уравнение для $E(z)$ можно преобразовать к интегральному уравнению

$$E(z) = E_0 e^{ikz} + i \frac{k_0^2}{2k} G \int dz' \Phi(z') e^{ik|z-z'|} \int \Phi(z'') E(z'') dz'' .$$

Это интегральное уравнение сводится к алгебраическому уравнению

$$\Lambda = \Lambda_0 + i \frac{k_0^2}{2k} G(\omega) \Lambda \int \int dz dz' e^{ik|z-z'|} \Phi(z) \Phi(z')$$

для величины

$$\Lambda = \int \Phi(z) E(z) dz .$$

Здесь $\Lambda_0 = E_0 \int dz e^{ikz} \Phi(z) = E_0 \int dz \cos kz \Phi(z)$ (учтена четность функции $\Phi(z)$). Амплитудные коэффициенты отражения и пропускания связаны с Λ соотношениями

$$r = \frac{\Lambda}{E_0} + i \frac{k_0^2}{2k} G(\omega) \int dz' \cos kz' \Phi(z') , \quad t = 1 + r . \quad (2.52)$$

Учитывая, что

$$e^{ik|z-z'|} = \cos k(z-z') + i \sin k(z-z') = \cos kz \cos kz' + \sin kz \sin kz' + i \sin k|z-z'| ,$$

получаем после ряда преобразований

$$r = \frac{i\Gamma_0}{\tilde{\omega}_0 - \omega - i(\Gamma + \Gamma_0)} , \quad t = \frac{\tilde{\omega}_0 - \omega - i\Gamma}{\tilde{\omega}_0 - \omega - i(\Gamma + \Gamma_0)} , \quad (2.53)$$

где

$$\Gamma_0 = \frac{1}{2} k \omega_{LT} \pi a_B^3 \left[\int \Phi(z) \cos kz dz \right]^2 , \quad (2.54)$$

$$\tilde{\omega}_0 = \omega_0 + \frac{1}{2} k \omega_{LT} \pi a_B^3 \int \int dz dz' \sin k|z-z'| \Phi(z) \Phi(z') .$$

Здесь $\tilde{\omega}_0$ - перенормированная резонансная частота экситона, $\tau = (2\Gamma_0)^{-1}$ - его радиационное время жизни.

2.8 Влияние электрического поля на электронные состояния в квантовых ямах и сверхрешетках

Квантово-размерный эффект Штарка

Влияние продольного ($\mathbf{F} \parallel z$) и поперечного ($\mathbf{F} \perp z$) электрического поля на носители тока в гетероструктурах носит принципиально различный характер по очевидной причине - в структуре с одиночной квантовой ямой электронный транспорт возможен лишь в плоскости слоев, а в периодической структуре с квантовыми ямами, разделенными не очень тонкими барьерами, транспорт по нормали к слоям носит прыжковый характер и затруднен. Проанализируем, как влияет электрическое поле на состояние экситона в квантовой яме. В поле $\mathbf{F} \parallel x \perp z$, как и в объемном полупроводнике, состояние экситона становится квазистационарным из-за возможности любой из частиц (в первую очередь частицы с меньшей массой) туннелировать под потенциальный барьер. Для $1s$ -экситона в малых полях высота барьера $\sim E_B$, его ширина $\Delta x \sim (E_B/eF)$. Поэтому для полуширины экситонного уровня Γ справедливо соотношение

$$\ln \Gamma \propto -\frac{\Delta x}{a_B} \sim -\frac{E_B}{eFa_B}.$$

Размытие пика экситонного поглощения (определяемое величиной Γ) происходит в умеренных полях $F \sim E_B/e a_B$ ($10^3 - 10^4$ В/см). При этом заметно сдвинуться пик поглощения не успевает.

Совсем иначе экситон ведет себя в поле, направленном поперек гетерослоям. Высота барьера для туннельного распада экситона в этом случае равна высоте барьера V в гетероструктуре и экситонный уровень хорошо определен даже в полях $\sim 10^5$ В/см, в которых уровни размерного квантования свободных носителей сдвигаются на величину, превышающую экситонный ридберг. В области малых полей, таких что $eFa \ll (\hbar\pi/a)^2/2m^*$, для квантовой ямы с бесконечно высокими барьерами сдвиг нижней подзоны определяется выражением

$$\delta E_1 = -\left(\frac{15}{\pi^2} - 1\right) \frac{1}{48} \frac{(eFa)^2}{E_1}. \quad (2.55)$$

Этот ответ с высокой точностью можно получить по теории возмущений, учитывая индуцированное электрическим полем смешивание нижнего уровня со вторым уровнем размерного квантования

$$\delta E_1 = -\frac{(eFz_{21})^2}{E_2 - E_1} = -\left(\frac{16}{9\pi^2}\right)^2 \frac{(eFa)^2}{E_2 - E_1} = -\left(\frac{16}{9\pi^2}\right)^2 \frac{1}{3} \frac{(eFa)^2}{E_1}, \quad (2.56)$$

где матричный элемент z_{21} рассчитан для барьеров бесконечной высоты:

$$z_{21} = \int_{-a/2}^{a/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi z}{a} z \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi z}{a} dz, \quad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m}, \quad E_2 - E_1 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2a^2 m},$$

$$z_{21} = -\frac{\hbar^2}{m(E_2 - E_1)} \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \sin \frac{2\pi z}{a} \frac{d}{dz} \cos \frac{\pi z}{a} dz = \frac{16a}{9\pi^2}.$$

Для структуры GaAs/Ga_{0.65}Al_{0.35}As с квантовой ямой ширины $a = 100$ Å (и барьерами конечной высоты) в электрическом поле $F = 10^5$ В/см оценки приводят к значениям 6 и 15 мэВ соответственно для электронов и тяжелых дырок.

В общем случае произвольного поля нужно решать уравнение Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + eFz - E\right) \varphi(z) = 0, \quad (2.57)$$

где заряд электрона выбран в виде $-e$, поэтому $e > 0$. Общее решение этого уравнения

$$\varphi(z) = C_1 \text{Ai}(X) + C_2 \text{Bi}(X), \quad X = \left(\frac{2m^* eF}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(z - \frac{E}{eF}\right), \quad (2.58)$$

где, например,

$$\text{Ai}(X) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(uX + \frac{u^3}{3}\right) du.$$

В книге КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА (Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц) введена функция $\Phi(X)$, которая в $\sqrt{\pi}$ раз больше функции $\text{Ai}(X)$. Приведем асимптотику этой функции при $X \rightarrow +\infty$:

$$\text{Ai}(X) = \frac{\Phi(X)}{\sqrt{\pi}} \approx \frac{1}{2\sqrt{\pi} X^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} X^{3/2}\right).$$

В большом поле нижние уровни размерного квантования в яме с бесконечно высокими барьерами определяются из уравнения

$$\text{Ai} \left[- \left(\frac{2m^*eF}{\hbar^2} \right)^{1/3} \frac{E}{eF} \right] = 0, \quad (2.59)$$

или

$$E_n = \mu_n \frac{(eF\hbar)^{2/3}}{(2m^*)^{1/3}}, \quad \mu_n \approx 2.34; 4.09; 5.52\dots$$

Двухъямная структура в приближении сильной связи

$$\varphi = C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2, \quad \varphi_i = \varphi(z - \bar{z}_i). \quad (2.60)$$

Уравнение для энергии E и коэффициентов C_i

$$\begin{bmatrix} E_0 - E & I \\ I & E_0 - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = 0, \quad (2.61)$$

где I - интеграл переноса, который для нижнего уровня отрицателен. Для простоты пренебрежем различием эффективной массы m^* в материалах ямы и барьера. Тогда имеем

$$I = -V \int_{QW_1} dz \varphi(z - \bar{z}_1) \varphi(z - \bar{z}_2) = -V \int_{QW_2} dz \varphi(z - \bar{z}_1) \varphi(z - \bar{z}_2). \quad (2.62)$$

Для вывода уравнения (2.61) учтем, что оператор Гамильтона можно представить в виде $H = T + V_1 + V_2$, где $T = -(\hbar^2/2m^*)d^2/dz^2$ - оператор кинетической энергии, а $V_j = -V\theta_j$, $\theta_j = 1$ в слое j -ой ямы и 0 вне этого слоя. Заметим, что

$$(T + V_1) \varphi_1 = E_0\varphi_1, \quad (T + V_2) \varphi_2 = E_0\varphi_2.$$

Следовательно,

$$H\varphi = C_1(E_0\varphi_1 + V_2\varphi_1) + C_2(V_1\varphi_2 + E_0\varphi_2)$$

и

$$\begin{aligned} \langle \varphi_1 | H - E | \varphi \rangle &= C_1(E_0 - E - \tilde{V}) + C_2[I + (E_0 - E)S], \\ \langle \varphi_2 | H - E | \varphi \rangle &= C_1[I + (E_0 - E)S] + C_2(E_0 - E - \tilde{V}). \end{aligned} \quad (2.63)$$

Здесь I – интеграл переноса (2.62), S – интеграл перекрытия:

$$S = \int dz \varphi(z - \bar{z}_1)\varphi(z - \bar{z}_2),$$

и

$$\tilde{V} = \int dz V_2 \varphi_1^2 = \int dz V_1 \varphi_2^2.$$

Приравнивая эти два матричных элемента нулю, получаем систему уравнений

$$\begin{bmatrix} E_0 - E - \tilde{V} & I + (E_0 - E)S \\ I + (E_0 - E)S & E_0 - E - \tilde{V} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = 0. \quad (2.64)$$

Из секулярного уравнения $(E_0 - E - \tilde{V})^2 - [I + (E_0 - E)S]^2 = 0$ находим два решения $E - E_0 + \tilde{V} = \pm[(E - E_0)S - I]$ или

$$E = E_0 + \frac{I - \tilde{V}}{1 + S}, \quad E = E_0 - \frac{I + \tilde{V}}{1 - S}. \quad (2.65)$$

При достаточно толстом барьере, когда $e^{-\alpha b} \ll 1$, имеем $\tilde{V} \propto e^{-2\alpha b}$, $I, S \propto e^{-\alpha b}$ и, следовательно, $|\tilde{V}|/V \ll |I|/V \ll 1$ и $|S| \ll 1$. Поэтому в (2.65), а значит и в (2.64), можно положить $\tilde{V} = 0, S = 0$ и оставить только I .

Заметим, что интегралы перекрытия можно исключить на начальной стадии, если провести ортогонализацию исходных состояний φ_1 и φ_2 , переходя от них к ортогонализированным состояниям

$$\tilde{\varphi}_1 = \frac{\varphi_1 - (S/2)\varphi_2}{1 - (3/4)S^2}, \quad \tilde{\varphi}_2 = \frac{\varphi_2 - (S/2)\varphi_1}{1 - (3/4)S^2}.$$

В линейном приближении по малому параметру $e^{-\alpha b}$ квадрат S^2 в знаменателях можно отбросить. Заменяя в (2.60) функции φ_1, φ_2 на тильдованные и повторяя предыдущую процедуру, получаем сразу уравнения (2.61), не содержащие интеграла перекрытия S .

В электрическом поле к диагональным элементам гамильтониана сильной связи добавляются слагаемые $eFd/2$ и $-eFd/2$, вследствие чего для положения двух нижних уровней в двухъямной структуре получаем

$$E_{\pm} = E_0 \pm \sqrt{(eFd/2)^2 + I^2}. \quad (2.66)$$

Состояния электрона в сверхрешетке в приближении сильной связи

$$\begin{aligned} IC_{n-1} + E_0C_n + IC_{n+1} &= EC_n, \\ C_n &= Ce^{iKdn}, \quad E = E_0 + 2I \cos Kd. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Следовательно, в приближении сильной связи ширина минизоны Δ равна $4|I|$.

Штарковская лестница в сверхрешетке

$$\begin{aligned} I(C_{n-1} + C_{n+1}) + (E_0 - E - eFdn)C_n &= 0, \\ \frac{-2I}{eFd} (C_{n-1} + C_{n+1}) &= -2 \left(n - \frac{E_0 - E}{eFd} \right) C_n, \\ x(C_{n-1} + C_{n+1}) &= -2(n - \nu)C_n, \end{aligned} \quad (2.68)$$

где $x = -2I/(eFd)$, $\nu = (E_0 - E)/eFd$. Функции Бесселя удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$x[y_{\mu-1}(x) + y_{\mu+1}(x)] = 2\mu y_{\mu}(x). \quad (2.69)$$

Поэтому решение для C_n можно представить в виде

$$C_n = (-1)^n [D_1 J_{n-\nu}(x) + D_2 N_{n-\nu}(x)]. \quad (2.70)$$

Так как функция Неймана $N_{\mu}(x) \rightarrow \infty$ при $\mu \rightarrow \infty$, то $D_2 = 0$. Функция Бесселя $J_{n-\nu}(x)$ конечна при $n \rightarrow -\infty$, если ν есть целое число, которое обозначим в виде n_0 . Таким образом, $C_n \propto (-1)^n J_{n-n_0}(2|I|/eFd)$ и $E_{n_0} = E_0 - eFdn_0$.

Расчет зонной структуры графена методом сильной связи.

Атомы углерода в плоскости графена образуют гексагональную решетку с двумя атомами в элементарной ячейке, тем самым состоящую из двух гексагональных подрешеток А и В. В качестве двумерных базисных векторов, совмещающих графен с самим собой можно взять векторы

$$\mathbf{a}_1 = a_0(1, 0), \quad \mathbf{a}_2 = a_0 \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (2.71)$$

где a_0 — постоянная решетки, равная $\sqrt{3}d$, d — межатомное расстояние (1.44 Å), а координатная система x, y выбрана так, чтобы $x \parallel \mathbf{a}_1$, $y \perp \mathbf{a}_1$

и $a_{2,y} > 0$. Обратной решеткой является также гексагональная решетка с базисными векторами

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{c} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a_0} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{c} \times \mathbf{a}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a_0} (0, 1),$$

где \mathbf{c} – единичный вектор в направлении оси z , Ω – площадь элементарной ячейки, равная $\sqrt{3}a_0^2/2$. Зона Бриллюэна имеет вид правильного шестиугольника, две вершины которого (из шести) равны

$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3a_0} (-1, 0), \quad \mathbf{K}' = \frac{4\pi}{3a_0} (1, 0). \quad (2.72)$$

Значение модуля вектора \mathbf{K} получается делением половины $|\mathbf{b}_2|/2$ на $\cos 30^\circ = \sqrt{3}/2$.

Выберем один из узлов подрешетки В в качестве начала $(0,0)$ системы координат. Его три ближайших соседа из подрешетки А локализованы в точках

$$\mathbf{r}_1 = \frac{a_0}{\sqrt{3}}(0, -1), \quad \mathbf{r}_2 = \frac{a_0}{\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{r}_3 = \frac{a_0}{\sqrt{3}} \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right). \quad (2.73)$$

В модели сильной связи волновая функция электрона в состоянии с волновым вектором \mathbf{k} записывается в виде

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{a}_j} C_{\mathbf{a}_j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\tau}_j), \quad C_{\mathbf{a}_j} = C_j(\mathbf{k}) \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_j)] \quad (2.74)$$

или

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} C_{\mathbf{R}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad C_{\mathbf{R}} = C_j(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}).$$

Здесь \mathbf{a} – вектора двумерных тривиальных трансляций, нумерующие элементарные ячейки, индекс j нумерует два атома углерода в элементарной ячейке, принадлежащие подрешеткам А и В, $\boldsymbol{\tau}_j$ – положение атома j внутри элементарной ячейки: $\boldsymbol{\tau}_B = 0$, $\boldsymbol{\tau}_A = a_0(0, -1)$; $\mathbf{R} = \mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_j$ и $\phi(\mathbf{r})$ – атомная π орбиталь. Аналогично (2.67) уравнение Шредингера сводится к системе уравнений

$$E_0 C_{\mathbf{a}_j} + \sum'_{\mathbf{a}'_{j'}} \gamma(\mathbf{a}_j; \mathbf{a}'_{j'}) C_{\mathbf{a}'_{j'}} = E C_{\mathbf{a}_j},$$

или

$$E_0 C_j + \sum_{\mathbf{R}'} \gamma(\mathbf{R}; \mathbf{R}') \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R})] C_{j'} = E C_j,$$

где E_0 – диагональная энергия, которая далее полагается равной нулю, $\gamma(\mathbf{R}; \mathbf{R}') \equiv \gamma(\mathbf{a}j; \mathbf{a}'j')$ – интегралы переноса. В частности, выбирая $j = B$ и ограничиваясь переносом между ближайшими соседями, имеем

$$E_0 C_B + \left[\sum_n \gamma_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n) \right] C_A = E C_B,$$

где γ_0 – интеграл переноса между ближайшими соседями. В результате получим, что коэффициенты $C_A(\mathbf{k})$ и $C_B(\mathbf{k})$, записанные в виде двухкомпонентного столбца

$$\hat{C}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} C_A(\mathbf{k}) \\ C_B(\mathbf{k}) \end{bmatrix},$$

удовлетворяют матричному уравнению $\mathcal{H}\hat{C} = E\hat{C}$, где эффективный гамильтониан, имеющий вид матрицы 2×2 , в приближении взаимодействия ближайших соседей имеет вид

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} 0 & h^* \\ h & 0 \end{bmatrix}, \quad h(\mathbf{k}) = \gamma_0 \sum_{n=1}^3 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n), \quad (2.75)$$

Отсюда следует, что кривая энергетической дисперсии электронов состоит из двух ветвей:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm |h(\mathbf{k})|. \quad (2.76)$$

Подставляя \mathbf{r}_n из (2.73) в показатели экспонент, получаем

$$h = \gamma_0 \left(e^{-ik_y a_0 / \sqrt{3}} + 2e^{ik_y a_0 / 2\sqrt{3}} \cos \frac{k_x a_0}{2} \right). \quad (2.77)$$

В нелегированном совершенном графене при нулевой температуре нижняя ветвь заполнена электронами, это валентная зона, а верхняя ветвь не заполнена, это зона проводимости. Путем прямого расчета можно убедиться, что в вершинах зоны Бриллюэна \mathbf{K} и \mathbf{K}' энергия (2.76) обращается в нуль:

$$h(\mathbf{K}) = \gamma_0 \left[1 + 2 \cos \left(-\frac{4\pi}{3a_0} \frac{a_0}{2} \right) \right] = 0.$$

Это означает, что в этих точках зона проводимости и валентная зоны смыкаются, т.е. графен – бесщелевой двумерный материал.

Вместо обозначения волнового вектора \mathbf{k} , отсчитанного от Γ -точки введем обозначения \mathbf{k}, \mathbf{k}' для волнового вектора, отсчитанного от точки \mathbf{K} и \mathbf{K}' , соответственно. Это означает замену k_x и k_y в (2.77) на $K_x + k_x, k_y$ или $K'_x + k'_x, k'_y$ в окрестности точек \mathbf{K} и \mathbf{K}' .

Во втором порядке по $ka_0 \ll 1$ или $k'a_0 \ll 1$ недиагональный матричный элемент (2.77) в гамильтониане \mathcal{H} принимает вид

$$h(\mathbf{k}, \mathbf{K}) = \gamma \left[k_x - ik_y + \frac{a_0}{4\sqrt{3}} (k_x + ik_y)^2 \right] \quad (2.78)$$

вблизи \mathbf{K} -точки и

$$h(\mathbf{k}', \mathbf{K}') = \gamma \left[-k'_x - ik'_y + \frac{a_0}{4\sqrt{3}} (k'_x - ik'_y)^2 \right] \quad (2.79)$$

вблизи \mathbf{K}' -точки. Здесь $\gamma = (\sqrt{3}/2)\gamma_0 a_0$. Вблизи точек \mathbf{K} и \mathbf{K}' квадратичными слагаемыми можно пренебречь и дисперсия линейна, как для дираковских электронов и позитронов с бесщелевым спектром:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{K}) = \pm\gamma k, \quad E_{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{K}') = \pm\gamma k'. \quad (2.80)$$

Покажем справедливость разложения (2.78) на примере вывода слагаемых первого порядка:

$$\begin{aligned} e^{-ik_y a_0 / \sqrt{3}} &\approx 1 - i \frac{k_y a_0}{\sqrt{3}}, \quad e^{ik_y a_0 / 2\sqrt{3}} \approx 1 + i \frac{k_y a_0}{2\sqrt{3}}, \\ \cos \frac{(K_x + k_x) a_0}{2} &= \cos \left(-\frac{2\pi}{3} + \frac{k_x a_0}{2} \right) \approx -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{k_x a_0}{2}, \\ h(\mathbf{K} + \mathbf{k}) &\approx \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_0 a_0 (k_x - ik_y). \end{aligned} \quad (2.81)$$

Электропроводность вырожденного электронного газа в графене.

$$\begin{aligned} eF_x \frac{df_{\mathbf{p}}}{dp_x} + \frac{f_{\mathbf{p}} - \langle f_{\mathbf{p}} \rangle}{\tau_p} &= 0 \\ f_{\mathbf{p}} = f_{\mathbf{p}}^0 + \delta f_{\mathbf{p}}, \quad f_{\mathbf{p}}^0 &= \left(\exp \frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_F}{k_B T} + 1 \right)^{-1}, \quad \delta f_{\mathbf{p}} = -eF_x \tau_p \frac{df_{\mathbf{p}}^0}{dp_x} \\ j_x &= \frac{2e}{S} \sum_{\mathbf{p}} v_x f_{\mathbf{p}}. \end{aligned}$$

Двумерный электронный газ с параболическим спектром. Рассмотрим вначале электронный газ с параболическим энергетическим спектром $\varepsilon_{\mathbf{p}} = p^2/m^*$.

$$j_x = -\frac{2e}{S} \sum_{\mathbf{p}} \frac{p_x}{m^*} eF_x \tau_p \frac{df_{\mathbf{p}}^0}{dp_x}.$$

Если τ_p не зависит от энергии, то перебрасывание производной с функции распределения на скорость немедленно дает

$$j_x = \frac{e^2 \tau_p F_x}{m^*} \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{p}} f_{\mathbf{p}}^0 = \frac{e^2 N \tau_p}{m^*} F_x, \quad (2.82)$$

где N – концентрация:

$$N = \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{p}} f_{\mathbf{p}}^0.$$

Если τ_p зависит от энергии и электронный газ вырожден, так что

$$\frac{df_{\mathbf{p}}^0}{dp_x} \approx -v_x \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\mathbf{p}}),$$

то

$$j_x = \frac{2e^2 F_x}{S} \sum_{\mathbf{p}} \frac{p_x v_x}{m^*} \tau_p \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\mathbf{p}}) = \frac{e^2 N \tau_p(\varepsilon_F)}{m^*} F_x.$$

При этом

$$N = 2 \int_0^{\varepsilon_F} \frac{2\pi m^*}{(2\pi\hbar)^2} d\varepsilon = \frac{m^* \varepsilon_F}{\pi\hbar^2}.$$

Формулу (2.82) можно получить из простых классических соображений:

$$\dot{p}_x + \frac{p_x}{\tau_p} = eF_x \rightarrow \frac{\bar{p}_x}{\tau_p} = eF_x \rightarrow \bar{v}_x = \frac{\bar{p}_x}{m^*}, \quad j_x = e\bar{v}_x N = \frac{e^2 N \tau_p}{m^*} F_x.$$

Вырожденный двумерный электронный газ в графене. В графене параболу $\varepsilon_{\mathbf{p}} = p^2/(2m^*)$ нужно заменить на $\varepsilon_{\mathbf{p}} = v_0 p$, где $v_0 = \gamma/\hbar \approx 10^8$ см/с. Групповая скорость \mathbf{p}/m^* заменяется на

$$\mathbf{v} = \frac{\partial(v_0 p)}{\partial \mathbf{p}} = v_0 \frac{\mathbf{p}}{p}, \quad \frac{\partial v_x}{\partial p_x} = v_0 \frac{p_y^2}{p^3}.$$

Простые соображения дают

$$\frac{\bar{p}_x}{\tau_p} = eF_x \rightarrow \bar{v}_x = \frac{\partial v_x}{\partial p_x} \bar{p}_x = v_0 \frac{p_y^2}{p^3} eF_x \tau_p .$$

Для электрического тока получаем

$$j_x = e\bar{v}_x N = ev_0 \left\langle \frac{p_y^2}{p^3} \right\rangle eF_x \tau_p N = \frac{e^2 v_0 \tau_p N}{p_F} F_x = \frac{e^2 v_0^2 \tau_p N}{\varepsilon_F} F_x .$$

При выводе учтено, что среднее по углу от p_y^2 равно $p^2/2$, а среднее от $1/p$ для вырожденной статистики равно

$$\frac{\int_0^{p_F} dp}{\int_0^{p_F} p dp} = \frac{2}{p_F} .$$

Получим эту же формулу из кинетической теории:

$$j_x = \frac{2g_v e}{S} \sum_{\mathbf{p}} v_0 \frac{p_x}{p} \left(-eF_x \tau_p \frac{df_{\mathbf{p}}^0}{dp_x} \right) = \frac{2g_v e^2 F_x}{S} \sum_{\mathbf{p}} \tau_p v_0^2 \left(\frac{p_x}{p} \right)^2 \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\mathbf{p}}) ,$$

где множитель $g_v = 2$ учитывает наличие двух долин. Так как связь между дифференциалами в импульсном и энергетическом пространствах имеет $d\mathbf{p} = 2\pi p dp = (2\pi\varepsilon/v_0^2)d\varepsilon$, то

$$j_x = \frac{g_v e^2 \varepsilon_F \tau_p F_x}{2\pi \hbar^2} = \frac{e^2 \tau_p v_0^2 N}{\varepsilon_F} F_x = \sqrt{\frac{g_v}{2\pi}} N \frac{e^2 v_0 \tau_p}{2\hbar} F_x ,$$

где концентрация

$$N = 2g_v \frac{\pi p_F^2}{(2\pi \hbar)^2} = \frac{g_v \varepsilon_F^2}{2\pi (\hbar v_0)^2} .$$