

УДК 621.315.592;537.311.322

К ТЕОРИИ ПОГЛОЩЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ МЕЖПОДЗОННЫХ ПЕРЕХОДАХ ЭЛЕКТРОНОВ В СВЕРХРЕШЕТКАХ

В. А. Чуенков

Получено точное решение уравнения Шредингера для электронов в сверхрешетках с прямоугольными потенциальными барьерами и периодическим потенциалом. В первом порядке теории возмущений получено точное аналитическое выражение для коэффициента поглощения электромагнитного излучения при межподзонных переходах электронов в подобного рода сверхрешетках с произвольными параметрами. Рассмотрен ряд предельных случаев.

Ключевые слова: межподзонные переходы, сверхрешетка, поглощение излучения.

Принципиально важным свойством межподзонных переходов электронов в сверхрешетках, как известно, является большая величина матричных элементов оптических переходов. Коэффициент поглощения электромагнитного излучения при таких переходах в области частот $\omega \gtrsim 10^{13}$ сек⁻¹ достигает значений $10^3 - 10^4$ см⁻¹. Таким образом, даже небольшая степень инверсии в распределении носителей заряда в нижних состояниях должна приводить к резкому возрастанию интенсивности вынужденного излучения. Это обстоятельство, характерное для межподзонных оптических переходов, является весьма существенным с точки зрения лазерной проблематики и стимулирует поиск условий, приводящих к возникновению инвертированных распределений и лазерной генерации в полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами.

Теоретическому и экспериментальному исследованию этого вопроса посвящено большое число работ, подробный перечень и анализ которых приведен в [1–4]. Мы не будем на этом останавливаться.

Цель настоящей работы – найти точные аналитические выражения для одноэлектронных функций Блоха в сверхрешетках с прямоугольными потенциальными барьерами и произвольными значениями параметров (шириной квантовых ям, шириной и высотой потенциальных барьеров, значениями эффективных масс электронов

в ямах и барьерах), а также в первом порядке теории возмущений получить точное аналитическое выражение для коэффициента поглощения электромагнитного излучения при межподзонных переходах электронов в указанных выше типах сверхрешеток. В сверхрешетках с бесконечно широкими или бесконечно высокими потенциальными барьерами полученные нами выражения для функций Блоха и коэффициента поглощения электромагнитного излучения совпадают с выражениями, приведенными в [1, 2, 4]. В работе [3] явные выражения для функций Блоха в сверхрешетках отсутствуют.

1. Волновые функции Блоха и энергетический спектр электронов в сверхрешетках с произвольными значениями параметров.

В модели Кронига–Пенни волновая функция электронов в сверхрешетке

$$\Psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(k_x x + k_y y)} \cdot \Phi(z), \quad (1)$$

где S – площадь сверхрешетки в плоскости (x, y) , a – ширина квантовых ям, b – ширина барьеров, $d = a + b$ – период сверхрешетки, k_x, k_y – составляющие волнового вектора электронов вдоль осей x и y , а функция $\Phi(z)$ подчиняется уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m(z)} \frac{d^2 \Phi}{dz^2} + V(z) \Phi = E(k_z) \Phi, \quad (2)$$

в котором $m(z)$ – эффективная масса электронов, $V(z)$ – потенциал, $E(k_z)$ – энергия поперечного движения электронов, k_z – составляющая волнового вектора вдоль оси z . Предположим, что в квантовых ямах масса $m(z) = m_\alpha$, потенциал $V(z) = 0$; в барьерах – $m(z) = m_\beta$, $V(z) = V_0$ (см. рис. 1).

Введем обозначения: функция

$$\Phi(z) \equiv \Phi_1(z) \quad \text{при} \quad -b - \frac{a}{2} \leq z \leq -\frac{a}{2}, \quad (3)$$

$$\Phi(z) \equiv \Phi_2(z) \quad \text{при} \quad -\frac{a}{2} \leq z \leq \frac{a}{2}, \quad (4)$$

$$\Phi(z) \equiv \Phi_3(z) \quad \text{при} \quad \frac{a}{2} \leq z \leq \frac{a}{2} + b. \quad (5)$$

Решения уравнения (2) в указанных в (3)-(5) областях значений z при граничных условиях

$$\begin{aligned} \Phi_1\left(-\frac{a}{2}\right) &= \Phi_2\left(-\frac{a}{2}\right), \quad \frac{1}{m_\beta} \Phi_1'\left(-\frac{a}{2}\right) = \frac{1}{m_\alpha} \Phi_2'\left(-\frac{a}{2}\right), \\ \Phi_2\left(\frac{a}{2}\right) &= \Phi_3\left(\frac{a}{2}\right), \quad \frac{1}{m_\alpha} \Phi_2'\left(\frac{a}{2}\right) = \frac{1}{m_\beta} \Phi_3'\left(\frac{a}{2}\right) \end{aligned} \quad (6)$$

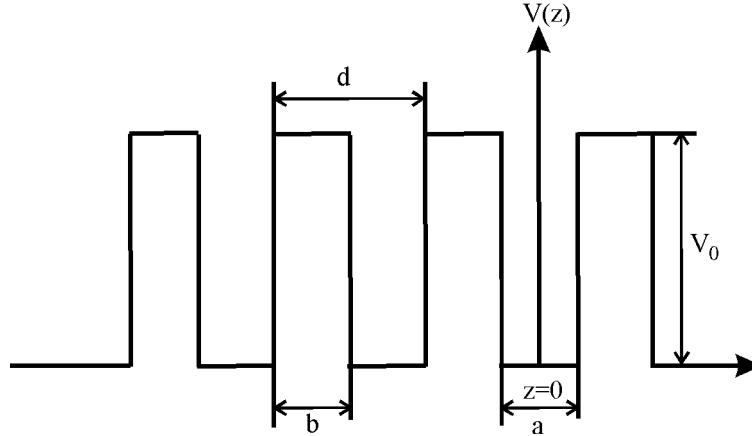


Рис. 1: Схема периодической структуры с квантовыми ямами и барьерами.

и условиях Блоха

$$\begin{aligned} \Phi_1\left(-b - \frac{a}{2}\right) &= e^{-ik_z d} \cdot \Phi_2\left(\frac{a}{2}\right), \\ \frac{1}{m_\beta} \Phi_1'\left(-b - \frac{a}{2}\right) &= \frac{1}{m_\alpha} e^{-ik_z d} \cdot \Phi_2'\left(\frac{a}{2}\right), \\ \Phi_2\left(-\frac{a}{2}\right) &= e^{-ik_z d} \cdot \Phi_3\left(b + \frac{a}{2}\right), \\ \frac{1}{m_\alpha} \Phi_2'\left(-\frac{a}{2}\right) &= \frac{1}{m_\beta} e^{-ik_z d} \cdot \Phi_3'\left(b + \frac{a}{2}\right), \end{aligned} \quad (7)$$

выражающих равенство функций $\Phi_s(z)$ ($s = 1, 2, 3$) и потоков электронов на границах барьеров, для четных состояний (отметим их индексом $l = 1, 3, 5, \dots$) принимают вид:

$$\Phi_{1l}(z) = C_l \exp\left\{\beta_l \left(z + \frac{a}{2}\right)\right\} + D_l \exp\left\{-\beta_l \left(z + \frac{a}{2}\right)\right\}, \quad (8)$$

$$\Phi_{2l}(z) = B_l \{(1 + f_l) \cos \alpha_l z - i(1 - f_l) \sin \alpha_l z\}, \quad (9)$$

$$\Phi_{3l}(z) = C_l^* \exp\left\{-\beta_l \left(z - \frac{a}{2}\right)\right\} + D_l^* \exp\left\{\beta_l \left(z - \frac{a}{2}\right)\right\}, \quad (10)$$

где

$$C_l = \text{Re}C_l + i\text{Im}C_l, \quad C_l^* = \text{Re}C_l - i\text{Im}C_l, \quad (11)$$

$$\text{Re}C_l = \frac{B_l}{2} (1 + f_l) \left(\cos \frac{\alpha_l a}{2} + \frac{1}{\xi_l} \sin \frac{\alpha_l a}{2} \right), \quad (12)$$

$$\text{Im}C_l = \frac{B_l}{2} (1 - f_l) \left(\sin \frac{\alpha_l a}{2} - \frac{1}{\xi_l} \cos \frac{\alpha_l a}{2} \right), \quad (13)$$

$$D_l = \text{Re}D_l + i\text{Im}D_l, \quad D_l^* = \text{Re}D_l - i\text{Im}D_l, \quad (14)$$

$$ReD_l = \frac{B_l}{2}(1 + f_l) \left(\cos \frac{\alpha_l a}{2} - \frac{1}{\xi_l} \sin \frac{\alpha_l a}{2} \right), \quad (15)$$

$$ImD_l = \frac{B_l}{2}(1 - f_l) \left(\sin \frac{\alpha_l a}{2} + \frac{1}{\xi_l} \cos \frac{\alpha_l a}{2} \right), \quad (16)$$

$$\beta_l = \frac{1}{\hbar} \{2m_\beta [V_0 - E_l(k_z)]\}^{1/2}, \quad \alpha_l = \frac{1}{\hbar} [2m_\alpha E_l(k_z)]^{1/2},$$

$$\xi_l = \left[\frac{m_\alpha V_0 - E_l(k_z)}{m_\beta E_l(k_z)} \right]^{1/2}, \quad (17)$$

$$f_l = \left\{ 1 - \frac{\cos(\alpha_l a + k_z d)}{\text{ch} \beta_l b} \right\}^{1/2} \cdot \left\{ 1 - \frac{\cos(\alpha_l a - k_z d)}{\text{ch} \beta_l b} \right\}^{-1/2}. \quad (18)$$

Нормировочная постоянная, определяемая из условия

$$\int_{-\frac{a+b}{2}}^{-\frac{a}{2}} dz |\Phi_{1l}(z)|^2 + \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dz |\Phi_{2l}(z)|^2 + \int_{\frac{a}{2}}^{\frac{a+b}{2}} dz |\Phi_{3l}(z)|^2 = 1, \quad (19)$$

равна

$$\begin{aligned} B_l = & \left\{ \frac{a}{2} \left[(1 + f_l)^2 \left(1 + \frac{\sin \alpha_l a}{\alpha_l a} \right) + (1 - f_l)^2 \times \right. \right. \\ & \times \left. \left(1 - \frac{\sin \alpha_l a}{\alpha_l a} \right) \right] + \frac{1}{4\beta_l} (1 - e^{-\beta_l b}) \times \\ & \times \left[(1 + f_l)^2 \left(\cos \frac{\alpha_l a}{2} + \frac{1}{\xi_l} \sin \frac{\alpha_l a}{2} \right)^2 + \right. \\ & \left. + (1 - f_l)^2 \left(\frac{1}{\xi_l} \cos \frac{\alpha_l a}{2} - \sin \frac{\alpha_l a}{2} \right)^2 \right] + \frac{1}{4\beta_l} (e^{\beta_l b} - 1) \times \\ & \times \left[(1 + f_l)^2 \left(\cos \frac{\alpha_l a}{2} - \frac{1}{\xi_l} \sin \frac{\alpha_l a}{2} \right)^2 + \right. \\ & \left. + (1 - f_l)^2 \left(\frac{1}{\xi_l} \cos \frac{\alpha_l a}{2} + \sin \frac{\alpha_l a}{2} \right)^2 \right] + \\ & + \frac{b}{2} \left[(1 + f_l)^2 \left(\cos^2 \frac{\alpha_l a}{2} - \frac{1}{\xi_l^2} \sin^2 \frac{\alpha_l a}{2} \right) - \right. \\ & \left. - (1 - f_l)^2 \left(\frac{1}{\xi_l^2} \cos^2 \frac{\alpha_l a}{2} - \sin^2 \frac{\alpha_l a}{2} \right) \right] \left. \right\}^{-1/2}. \quad (20) \end{aligned}$$

Зависимость энергии $E_l(k_z)$ от волнового вектора k_z , соответствующего распространению электронной волны вдоль оси сверхрешетки z , определяется дисперсионным соотношением (см. (17))

$$\cos k_z d = \operatorname{ch} \beta_l b \cos \alpha_l a + \frac{\xi_l^2 - 1}{2\xi_l} \operatorname{sh} \beta_l b \sin \alpha_l a \quad (21)$$

(нижней границе четной минизоны соответствует $k_z = 0$, верхней – $k_z = \pi/d$).

Для нечетных состояний (отметим их индексом $n = 2, 4, 6, \dots$):

$$\Phi_{1n}(z) = C_n \exp \left\{ \beta_n \left(z + \frac{a}{2} \right) \right\} + D_n \exp \left\{ -\beta_n \left(z + \frac{a}{2} \right) \right\}, \quad (22)$$

$$\Phi_{2n}(z) = B_n \{ (1 + f_n) \sin \alpha_n z + i(1 - f_n) \cos \alpha_n z \}, \quad (23)$$

$$\Phi_{3n}(z) = -C_n^* \exp \left\{ -\beta_n \left(z - \frac{a}{2} \right) \right\} - D_n^* \exp \left\{ \beta_n \left(z - \frac{a}{2} \right) \right\}, \quad (24)$$

$$C_n = \operatorname{Re} C_n + i \operatorname{Im} C_n, \quad -C_n^* = -\operatorname{Re} C_n + i \operatorname{Im} C_n, \quad (25)$$

$$\operatorname{Re} C_n = \frac{B_n}{2} (1 + f_n) \left(\frac{1}{\xi_n} \cos \frac{\alpha_n a}{2} - \sin \frac{\alpha_n a}{2} \right), \quad (26)$$

$$\operatorname{Im} C_n = \frac{B_n}{2} (1 - f_n) \left(\cos \frac{\alpha_n a}{2} + \frac{1}{\xi_n} \sin \frac{\alpha_n a}{2} \right), \quad (27)$$

$$D_n = \operatorname{Re} D_n + i \operatorname{Im} D_n, \quad -D_n^* = -\operatorname{Re} D_n + i \operatorname{Im} D_n, \quad (28)$$

$$\operatorname{Re} D_n = -\frac{B_n}{2} (1 + f_n) \left(\sin \frac{\alpha_n a}{2} + \frac{1}{\xi_n} \cos \frac{\alpha_n a}{2} \right), \quad (29)$$

$$\operatorname{Im} D_n = \frac{B_n}{2} (1 - f_n) \left(\cos \frac{\alpha_n a}{2} - \frac{1}{\xi_n} \sin \frac{\alpha_n a}{2} \right), \quad (30)$$

$$\beta_n = \frac{1}{\hbar} \{ 2m_\beta [V_0 - E_n(k_z)] \}^{1/2}, \quad \alpha_n = \frac{1}{\hbar} [2m_\alpha E_n(k_z)]^{1/2},$$

$$\xi_n = \left[\frac{m_\alpha}{m_\beta} \frac{V_0 - E_n(k_z)}{E_n(k_z)} \right]^{1/2}, \quad (31)$$

$$f_n = \left\{ 1 - \frac{\cos(\alpha_n a + k_z d)}{\operatorname{ch} \beta_n b} \right\}^{1/2} \cdot \left\{ 1 - \frac{\cos(\alpha_n a - k_z d)}{\operatorname{ch} \beta_n b} \right\}^{-1/2}. \quad (32)$$

Нормировочная постоянная B_n и энергия $E_n(k_z)$ определяются соотношениями (19)-(21), в которых функции $\Phi_{sl}(z)$ ($s = 1, 2, 3$) заменяются функциями $\Phi_{sn}(z)$, а величины α_l, β_l, ξ_l – соответственно величинами α_n, β_n, ξ_n (нижней границе минизоны соответствует $k_z = \pi/d$, верхней – $k_z = 0$).

2. Коэффициент поглощения электромагнитного излучения при межподзонных переходах электронов в сверхрешетках.

Оператор взаимодействия электронов с электромагнитным излучением определяется выражением [5]

$$\hat{H}' = \frac{e}{m(z)c} \vec{A} \hat{p} = -\frac{ie\hbar}{m(z)c} \vec{A} \nabla, \quad (33)$$

где e – заряд электрона, c – скорость света, \hat{p} – оператор импульса,

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{r}, t) &= A_0 \vec{s} \cos(\vec{k}_\omega \vec{r} - \omega t) = \\ &= \frac{A_0 \vec{s}}{2} \left\{ e^{i(\vec{k}_\omega \vec{r} - \omega t)} + e^{-i(\vec{k}_\omega \vec{r} - \omega t)} \right\} \end{aligned} \quad (34)$$

– векторный потенциал, \vec{k}_ω и ω – соответственно волновой вектор и частота электромагнитной волны, \vec{s} – единичный вектор в направлении \vec{A} .

Суммарное число переходов электронов из подзоны l в подзону n (число переходов из подзоны l в подзону n минус число обратных переходов) в единицу времени в единице объема под действием плоской монохроматической электромагнитной волны частоты ω равно

$$\begin{aligned} W_{ln} &= \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k} \cdot \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_n^* | \hat{H}' | \Psi_l \rangle|^2 \times \\ &\times \{ F(E_l(\vec{k})) - F(E_n(\vec{k})) \} \delta\{ E_n(\vec{k}) - E_l(\vec{k}) - \hbar\omega \}, \end{aligned} \quad (35)$$

где

$$F(E_{l,n}(\vec{k})) = \left\{ 1 + \exp \left[\frac{E_{l,n}(\vec{k}) - E_F}{k_0 T} \right] \right\}^{-1} \quad (36)$$

– функция распределения Ферми, E_F – энергия Ферми, k_0 – постоянная Больцмана, T – температура, $\delta\{ E_n(\vec{k}) - E_l(\vec{k}) - \hbar\omega \}$ – δ -функция. Матричный элемент перехода из подзоны с энергией $E_l(\vec{k})$ в подзону с энергией $E_n(\vec{k})$ с поглощением фотона с энергией $\hbar\omega$ равен (см. (1), (8)-(10), (22)-(24), (33))

$$\begin{aligned} \langle \Psi_n^*(\vec{r}) | \hat{H}' | \Psi_l(\vec{r}) \rangle &= -\frac{ie\hbar A_0 s_z}{2c} \times \\ &\times \sum_{j=1}^3 \frac{1}{m_j} \int dz \Phi_{jn}^*(z) \frac{\partial}{\partial z} \Phi_{jl}(z). \end{aligned} \quad (37)$$

Здесь s_z – проекция вектора \vec{s} на ось z , а функции $\Phi_{jl}(z)$ и $\Phi_{jn}^*(z)$ определяются выражениями (8)-(32).

При вычислении матричного элемента (37) учитывалось лишь первое слагаемое в правой части формулы (34), обеспечивающее закон сохранения энергии; вклад второго слагаемого пренебрежимо мал.

Выразим квадрат амплитуды векторного потенциала через плотность фотонов N . Векторный потенциал \vec{A} и напряженность электрического поля \vec{E} в электромагнитной волне связаны соотношением

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\frac{\omega}{c} A_0 \vec{s} \sin(\vec{k}_\omega \vec{r} - \omega t). \quad (38)$$

В выражениях, квадратичных относительно полей (например, плотности энергии), следует использовать вещественные значения полей [6]. Следовательно, средняя по времени плотность энергии в электромагнитной волне равна

$$\frac{1}{8\pi} (n^2 \overline{E^2} + \overline{H^2}) = \frac{1}{4\pi} n^2 \overline{E^2} = \frac{n^2 \omega^2}{8\pi c^2} A_0^2 = N \hbar \omega, \quad (39)$$

где n – показатель преломления. Из (39) получим

$$A_0^2 = \frac{8\pi \hbar c^2}{\omega n^2} N. \quad (40)$$

Подставив в (35) выражения (37), (40) и поделив на плотность потока фотонов в веществе Nc/n , получим коэффициент поглощения

$$\begin{aligned} \kappa_{ln} = & \frac{e^2 \hbar^2 s_z^2}{\pi n c \omega} \int d^3 \vec{k} \left| \sum_{j=1}^3 \frac{1}{m_j} \int dz \Phi_{jn}^*(z) \frac{\partial}{\partial z} \Phi_{jl}(z) \right|^2 \times \\ & \times \{F(E_l(\vec{k})) - F(E_n(\vec{k}))\} \delta\{E_n(\vec{k}) - E_l(\vec{k}) - \hbar \omega\}. \end{aligned} \quad (41)$$

В модели сильно связанных электронов зависимость энергии от волнового вектора в подзонах может быть представлена в виде:

$$E_{l,n}(\vec{k}) = E_{l,n}(k_z) + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_\alpha}, \quad (42)$$

$$\begin{aligned} E_l(k_z) &= E_{lc} - \frac{\Delta_l}{2} \cos k_z d, & E_{lc} &= E_{l0} + \frac{\Delta_l}{2}, \\ E_n(k_z) &= E_{nc} + \frac{\Delta_n}{2} \cos k_z d, & E_{nc} &= E_{n0} + \frac{\Delta_n}{2}, \end{aligned} \quad (43)$$

где E_{l0} , E_{n0} – энергии дна подзон; $E_{lc} = \overline{E_l(k_z)}$, $E_{nc} = \overline{E_n(k_z)}$ – энергии средних (центральных) уровней в подзонах; Δ_l, Δ_n – ширина подзон. Выражения (42), (43) легко

получить путем разложения дисперсионного соотношения (21) в ряд в окрестности дна подзон; эффективная масса электронов для поперечного движения принята равной эффективной массе электронов в долинах, так как в долинах электроны имеют большую амплитуду вероятности, чем в барьерах. После подстановки в (41) выражений (42), (43), интегрирования по k_x , k_y и замены δ -функции Лоренцианом $L(k_z)$, который феноменологически учитывает уширение линии поглощения, получим

$$\kappa_{ln} = 4 \frac{e^2 k_0 T s_z^2}{nc\omega m_\alpha} \int_0^{\pi/d} dk_z R(k_z) L(k_z), \quad (44)$$

$$R(k_z) = \left| \sum_{j=1}^3 \frac{m_\alpha}{m_j} \int dz \Phi_{jn}^*(z) \frac{\partial}{\partial z} \Phi_{jl}(z) \right|^2 \times \\ \times \ln \frac{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_l(k_z)}{k_0 T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_n(k_z)}{k_0 T}\right)}, \quad (45)$$

$$L(k_z) = \frac{\Gamma/\pi}{[E_{nc} - E_{lc} - \hbar\omega + \frac{\Delta_1 + \Delta_2}{2} \cos k_z d]^2 + \Gamma^2}, \quad (46)$$

где Γ – полуширина линии поглощения. Из (45) следует, что межподзonné переходы электронов возможны лишь в том случае, если электрическое поле электромагнитной волны имеет z -составляющую, перпендикулярную слоям сверхрешетки. Интегрирование по z в (45) проводится в пределах элементарной ячейки, т.е. в интервалах (начало координат находится в центре квантовой ямы; см. (8)-(10), (22)-(24)):

$$-\frac{a+b}{2} \leq z \leq -\frac{a}{2}, \quad -\frac{a}{2} \leq z \leq \frac{a}{2}, \quad \frac{a}{2} \leq z \leq \frac{a+b}{2}. \quad (47)$$

Результат интегрирования по z выражается через элементарные функции. Интегрирование по k_z в общем случае может быть выполнено лишь численным методом. В связи с этим представляет интерес рассмотреть ряд предельных случаев, в которых коэффициент поглощения может быть выражен через элементарные функции. Эти случаи представляют практический интерес, поскольку могут быть реализованы в эксперименте.

3. Коэффициент поглощения электромагнитного излучения в сверхрешетках с сильными барьерами.

Под сильными барьерами подразумеваются барьеры, вероятность туннелирования через которые достаточно мала, т.е. для которых выполняются неравенства (см. (17),

(31), (42), (43))

$$\exp(-\beta_{lc} \cdot b) \ll 1, \quad \exp(-\beta_{nc} \cdot b) \ll 1,$$

$$\beta_{lc} = \beta_l(\overline{E_l(k_z)}), \quad \beta_{nc} = \beta_n(\overline{E_n(k_z)}), \quad (48)$$

а ширина подзон при этом удовлетворяет неравенствам

$$\frac{\Delta_l}{E_{lc}}, \frac{\Delta_l}{V_0 - E_{lc}} \ll 1, \quad \frac{\Delta_n}{E_{nc}}, \frac{\Delta_n}{V_0 - E_{nc}} \ll 1. \quad (49)$$

Все величины в (8)-(32), (44)-(46) разложим в ряд по малым параметрам, указанным в (48), (49), с учетом членов нулевого и первого порядков малости. Запишем в форме упомянутых выше рядов лишь некоторые выражения, входящие в (8)-(32), (44)-(46), а именно (см. (17), (31), (42), (43)):

$$\sin \frac{\alpha_l a}{2} = \frac{\pm \xi_{lc}}{\sqrt{1 + \xi_{lc}^2}} \left\{ 1 - \frac{2}{1 + \xi_{lc}^2} e^{-\beta_{lc} b} \cos k_z d + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{4(1 + \xi_{lc}^2)} \left(\frac{\Delta_l}{E_{lc}} + \frac{\Delta_l}{V_0 - E_{lc}} \right) \cos k_z d \right\}, \quad (50)$$

$$\cos \frac{\alpha_l a}{2} = \frac{\pm 1}{\sqrt{1 + \xi_{lc}^2}} \left\{ 1 + \frac{2\xi_{lc}^2}{1 + \xi_{lc}^2} e^{-\beta_{lc} b} \cos k_z d - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{4} \frac{\xi_{lc}^2}{1 + \xi_{lc}^2} \left(\frac{\Delta_l}{E_{lc}} + \frac{\Delta_l}{V_0 - E_{lc}} \right) \cos k_z d \right\}, \quad (51)$$

$$\sin \frac{\alpha_n a}{2} = \frac{\pm 1}{\sqrt{1 + \xi_{nc}^2}} \left\{ 1 - \frac{2\xi_{nc}^2}{1 + \xi_{nc}^2} e^{-\beta_{nc} b} \cos k_z d + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{4} \frac{\xi_{nc}^2}{1 + \xi_{nc}^2} \left(\frac{\Delta_n}{E_{nc}} + \frac{\Delta_n}{V_0 - E_{nc}} \right) \cos k_z d \right\}, \quad (52)$$

$$\cos \frac{\alpha_n a}{2} = \frac{\pm \xi_{nc}}{1 + \xi_{nc}^2} \left\{ 1 + \frac{2}{1 + \xi_{nc}^2} e^{-\beta_{nc} b} \cos k_z d - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{4(1 + \xi_{nc}^2)} \left(\frac{\Delta_n}{E_{nc}} + \frac{\Delta_n}{V_0 - E_{nc}} \right) \cos k_z d \right\}, \quad (53)$$

$$\xi_{lc} = \left(\frac{m_\alpha}{m_\beta} \frac{V_0 - E_{lc}}{E_{lc}} \right)^{1/2}, \quad \xi_{nc} = \left(\frac{m_\alpha}{m_\beta} \frac{V_0 - E_{nc}}{E_{nc}} \right)^{1/2}. \quad (54)$$

Знак правых частей равенств (50)-(53) определяется знаком их левых частей. Ряды (50)-(53) получены с помощью дисперсионного уравнения (21), в котором все величины (см. (17), (31), (42), (43)) разложены, в свою очередь, в ряд по параметрам (48), (49).

Будем предполагать далее, что

$$|E_F - E_{lc}| \gg \frac{\Delta_l}{2}, \quad |E_F - E_{nc}| \gg \frac{\Delta_n}{2}. \quad (55)$$

При условии (55) логарифмические члены в (45) могут быть представлены в виде (см. (42), (43))

$$\ln\{1 + \exp[(E_F - E_n(k_z))/k_0T]\} \approx \frac{\pi\hbar^2 N_{sn}}{m_\alpha k_0 T}, \quad (56)$$

$$\ln\{1 + \exp[(E_F - E_l(k_z))/k_0T]\} \approx \frac{\pi\hbar^2 N_{sl}}{m_\alpha k_0 T}, \quad (57)$$

где N_{sl} и N_{sn} – поверхностная концентрация электронов соответственно в “ l ” и “ n ” подзоне.

Подставив в (44)-(46) выражения (56), (57) и волновые функции электронов (8)-(10), (22)-(24), представленные в форме рядов по параметрам (48), (49), выполнив интегрирование по z в интервалах (47) и интегрирование по k_z , получим коэффициент поглощения (см. (17), (18), (31), (32), (42), (43), (48), (54)) в виде

$$\kappa_{ln} = \frac{16\pi e^2 \hbar^2 \cdot (N_{sl} - N_{sn}) s_z^2}{nc\omega m_\alpha^2 a^2 d\Gamma} G_0 B_{lc}^2 B_{nc}^2 P_{ln}^2, \quad (58)$$

где

$$B_{lc}^2 = \left\{ 1 + \frac{\sin\alpha_{lc}a}{\alpha_{lc}a} + \frac{2 - \exp(-\beta_{lc}b)}{\beta_{lc}a(1 + \xi_{lc}^2)} \right\}^{-1}, \quad (59)$$

$$B_{nc}^2 = \left\{ 1 - \frac{\sin\alpha_{nc}a}{\alpha_{nc}a} + \frac{2 - \exp(-\beta_{nc}b)}{\beta_{nc}a(1 + \xi_{nc}^2)} \right\}^{-1}, \quad (60)$$

$$P_{ln} = \alpha_{lc} \left[\frac{\sin(\alpha_{lc} + \alpha_{nc})\frac{a}{2}}{\alpha_{lc} + \alpha_{nc}} - \frac{\sin(\alpha_{nc} - \alpha_{lc})\frac{a}{2}}{\alpha_{nc} - \alpha_{lc}} \right] \pm \pm \frac{m_\alpha \beta_{lc}}{m_\beta (\beta_{lc} + \beta_{nc})} [(1 + \xi_{lc}^2)(1 + \xi_{nc}^2)]^{-1/2} \left[2 - \exp\left(-(\beta_{lc} + \beta_{nc})\frac{b}{2}\right) \right], \quad (61)$$

$$\alpha_{lc} = \alpha_l(\overline{E_l(k_z)}), \quad \alpha_{nc} = \alpha_n(\overline{E_n(k_z)}), \quad (62)$$

$$G_0 = \Gamma d \int_0^{\pi/d} dk_z L(k_z) = \frac{\eta^2}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{1 + \gamma}{\eta} \times \times \left[\frac{1 + g^{1/2} - \gamma^2 - \eta^2}{g[(1 + \gamma)^2 + \eta^2]} \right]^{1/2} + \frac{(g^{1/2} + \gamma^2 + \eta^2 - 1)^{1/2}}{g^{1/4}[(1 + \gamma)^2 + \eta^2]} \right\}, \quad (63)$$

$$g = (1 + \gamma^2 + \eta^2)^2 - 4\gamma^2, \quad \eta = \frac{2\Gamma}{\Delta_l + \Delta_n}, \quad (64)$$

$$\gamma = 2 \frac{E_{nc} - E_{lc} - \hbar\omega}{\Delta_l + \Delta_n}. \quad (65)$$

Три замечания к формулам (58)-(65). Заметим, во-первых, что члены первого порядка малости, входящие в выражение (45) в результате разложения его в ряд по малым

параметрам (48), (49), пропорциональны $\cos k_z d$; после интегрирования по k_z эти члены, наряду с малыми параметрами (48), (49), будут содержать в качестве множителя еще один малый параметр

$$G_1 = \Gamma d \int_0^{\pi/d} dk_z L(k_z) \cos k_z d = \frac{\eta^2}{\sqrt{2}} \times$$

$$\times \left\{ \frac{(g^{1/2} + \gamma^2 + \eta^2 - 1)^{1/2}}{g^{1/4}[(1 + \gamma)^2 + \eta^2]} - \frac{\gamma(1 + \gamma) + \eta^2}{\eta} \left[\frac{1 + g^{1/2} - \gamma^2 - \eta^2}{g[(1 + \gamma)^2 + \eta^2]} \right]^{1/2} \right\} \ll G_0. \quad (66)$$

Эти члены, как и другие члены второго порядка малости, а также, естественно, члены более высоких порядков малости, не учитывались. Заметим также, что в (63) и (66) представлены точные значения интегралов G_0 и G_1 , поскольку Лоренциан (46) не содержит малых параметров (48), (49). Заметим, наконец, что знак перед вторым слагаемым в (61) определяется знаком произведения

$$\left(\cos \frac{\alpha_l a}{2} + \frac{1}{\xi_l} \sin \frac{\alpha_l a}{2} \right) \left(\frac{1}{\xi_n} \cos \frac{\alpha_n a}{2} - \sin \frac{\alpha_n a}{2} \right). \quad (67)$$

4. *Сверхрешетки с предельно высокими (широкими) потенциальными барьерами.*

В этом случае будем считать выполненными условия (см. (17), (31))

$$\beta_{lc} b, \beta_{nc} b, \xi_{lc}, \xi_{nc} \rightarrow \infty, \Delta_l, \Delta_n \rightarrow 0. \quad (68)$$

При условиях (68) (см. (8)-(20), (22)-(32), (43), (59)-(62))

$$\alpha_{lc} = l \frac{\pi}{a}, \quad \alpha_{nc} = n \frac{\pi}{a}, \quad B_{lc}^2 = B_{nc}^2 = 1,$$

$$P_{ln} = \frac{l}{n+l} \sin(n+l) \frac{\pi}{2} - \frac{l}{n-l} \sin(n-l) \frac{\pi}{2}, \quad (69)$$

$$G_0 = \frac{\Gamma^2}{(E_{n0} - E_{l0} - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2}, \quad G_1 = 0, \quad (70)$$

а коэффициент поглощения равен

$$\kappa_{ln} = \frac{16\pi e^2 \hbar^2 (N_{sl} - N_{sn}) \cdot s_z^2}{nc\omega m_\alpha^2 a^2 d \Gamma} \cdot \frac{\Gamma^2}{(E_{n0} - E_{l0} - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2} \times$$

$$\times \left\{ \frac{l}{n+l} \sin(n+l) \frac{\pi}{2} - \frac{l}{n-l} \sin(n-l) \frac{\pi}{2} \right\}^2. \quad (71)$$

При $l = 1, n = 2$ формула (71) совпадает с формулой (3.26), приведенной в [4], с. 46.

Т а б л и ц а 1

Структура	I	II	III
$a, \text{Å}$	70	71	250
$b, \text{Å}$	150	81	40
V_0, meV	202	240	240
N	100	50	100
$N_{s1} - N_{s2}, \text{cm}^{-2}$	$7 \cdot 10^{11}$	$7.1 \cdot 10^{11}$	$4 \cdot 10^{11}$
E_{1c}, meV	55	57.09	7.34
E_{2c}, meV	179.4	196.25	29.18
Δ_1, meV	≈ 0	0.5	0.27
Δ_2, meV	3.2	11.5	1.25
$\kappa_{21}^m(th), \text{cm}^{-1}$	$2.68 \cdot 10^3$	$2.85 \cdot 10^3$	$1.29 \cdot 10^3$
$\hbar\omega_{21}^m(th), \text{meV}$	124.4	139.16	21.84
Γ, meV	7.5	9.3	7.5
$\kappa_{21}^m(\text{exp}), \text{cm}^{-1}$	$2.25 \cdot 10^3$	$2.86 \cdot 10^3$	–
$\hbar\omega_{21}^m(\text{exp}), \text{meV}$	128.4	151.84	–
b_{21}	0.86	0.9	0.95

5. Сравнение теории с экспериментом при $T = 300 \text{ K}$.

Рассмотрим три типа (I, II, III) GaAs/Al_xGa_{1-x}As MQW (multiple quantum wells) структур, для которых $x = 0.25 - 0.3$, объемная концентрация электронов $N_v \approx 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, показатель преломления $n = 3.54$, эффективные массы электронов в квантовых ямах и барьерах равны, соответственно, $m_\alpha = 0.067m_0$, $m_\beta = 0.092m_0$. В таблице 1 приведены другие параметры структур (первые 9 строк), характеризующие различие между ними: ширина квантовых ям a ; ширина b и высота V_0 барьеров; число периодов сверхрешетки N ; разность поверхностных концентраций электронов в первой и второй подзонах $N_{s1} - N_{s2}$; вычисленные по формуле (21) значения энергии центральных уровней в подзонах E_{1c}, E_{2c} ; ширина подзон Δ_1, Δ_2 . Легко убедиться в том, что при указанных выше значениях параметров структур выполняются неравенства (48), (49), (55) и, следовательно, условия применимости формул (58)-(66). Вычисленные по формулам (58)-(66) максимальные значения коэффициентов поглощения $\kappa_{21}^m(th)$ и соответствующие энергии фотонов $\hbar\omega_{21}^m(th) = E_{2c} - E_{1c}$ при переходах электронов из первой подзоны во вторую приведены в 10-й и 11-й строках таблицы 1.

В 12-й–14-й строках таблицы 1 приведены полученные в [1] (для структуры I) и в [2] (для структуры II) экспериментальные значения Γ , $\kappa_{21}^m(\text{exp})$, $\hbar\omega_{21}^m(\text{exp})$. В 15-й строке таблицы 1 приведены вычисленные по формуле [4] (см. (59)-(62))

$$b_{ln} = \frac{8\hbar^2}{m_\alpha a^2 (E_{nc} - E_{lc})} B_{lc}^2 B_{nc}^2 P_{ln}^2 \quad (72)$$

значения сил осцилляторов b_{21} при переходах электронов из первой подзоны во вторую. Для структуры III вычислены также: пиковое значение коэффициента поглощения при переходе электронов из первой подзоны в четвертую $\kappa_{41}^m(th) = 80 \text{ см}^{-1}$ $\{\kappa_{21}^m(th)/\kappa_{41}^m(th) = 16\}$, соответствующая этому переходу энергия фотонов $\hbar\omega_{41}^m(th) = 106.72 \text{ meV}$, сила осциллятора $b_{41} = 0.03$, сумма $b_{21} + b_{41} = 0.98$ ($b_{41}/b_{21} \approx 32$).

Выводы.

1. Теория поглощения электромагнитного излучения сверхрешетками с прямоугольными барьерами, основанная на модели Кронига–Пенни и граничных условиях Бастарда (Bastard), удовлетворительно согласуется, как следует из текста статьи и таблицы 1, с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

2. Приближенные аналитические формулы (58)-(61) могут быть использованы для вычисления с достаточной степенью точности коэффициента поглощения электромагнитного излучения в сверхрешетках, представляющих по своим свойствам (параметрам) практический интерес. В формулах (58)-(61) наглядно отражено влияние барьеров на поглощение излучения сверхрешетками, которое, как показали численные оценки, является существенным.

3. Частотная зависимость коэффициента поглощения определяется множителем

$$G_0(\hbar\omega)/\hbar\omega. \quad (73)$$

Из (46), (63)-(65), (73) следует, что кривая поглощения практически симметрична, если расстояние $E_{nc} - E_{lc}$ между центрами подзон много больше полуширины кривой Γ .

4. Кривая поглощения имеет единственный пик, а не два, как утверждалось ранее в ряде работ, например, в [7].

5. Пиковое значение коэффициента поглощения достигается при энергии фотона, равной $\hbar\omega_{nl}^m = E_{nc} - E_{nl}$ (см. (43)), т.е. разности энергий центральных уровней подзон, между которыми происходят переходы электронов.

6. Численные значения коэффициента поглощения для рассмотренных в статье сверхрешеток с различающимися в довольно широких пределах параметрами лежат в интервале $(1 \div 3) \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$.

7. Теоретические значения сил осцилляторов для всех рассмотренных сверхрешеток находятся в хорошем согласии с теоремой сумм.

Автор благодарен В.Н. Мурзину за плодотворное обсуждение работы и ценные замечания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (N 08-02-00513), ПФИ Президиума РАН “Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов”, НП ОФН РАН “Современные проблемы радиофизики”.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] *Semiconductor interfaces, microstructures and devices. Properties and applications* Ed. by Z.C. Feng (Bristol and Philadelphia, Institute of Physics, 1993).
- [2] G. Pikus, E. Ivchenko, *Superlattices and other Heterostructures: Symmetry and Optical Phenomena*. Springer Series in Solid-State Sciences. Vol. 110 (Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 1995); Second Edition, 1997, 372 p.
- [3] M. Helm, *Semicond. Sci. Technol.* **10**, 557 (1995).
- [4] Л.Е. Воробьев, Е.Л. Ивченко, Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин, *Оптические свойства наноструктур* (Санкт-Петербург, Наука, 2001).
- [5] А.И. Ансельм, *Введение в теорию полупроводников* (Москва, Наука, 1978), с. 406.
- [6] И.Е. Тамм, *Основы теории электричества* (Москва, Ленинград, 1946), с. 386, 501.
- [7] M. Helm et al., *Phys. Rev. B* **43**, 13983 (1991).

Поступила в редакцию 21 июня 2010 г.