

УДК 621.315

ГИБРИДИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В СТУПЕНЧАТОЙ КВАНТОВОЙ ЯМЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

М.Г. БАРСЕГЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 22 января 2005 г.)

Исследованы квантовые состояния и энергетические уровни электрона в прямоугольной ступенчатой квантовой яме в магнитном поле, параллельном плоскости двумерного электронного газа. Показано, что совместное действие магнитного поля и ограничивающего потенциала квантовой ямы приводит к радикальному изменению спектра энергии электрона. Рассчитаны зависимости уровней энергии от параметров квантовой ямы, индукции магнитного поля и проекции волнового вектора в направлении магнитного поля. Численные расчеты проведены для ступенчатой квантовой ямы $AlAs/GaAlAs/GaAs/AlAs$.

1. Введение

Исследования электронных состояний в низкоразмерных структурах представляют большой теоретический и прикладной интерес, поскольку позволяют выявить особенности физических характеристик таких систем и пути управления ими [1]. Так, например, в симметричных квантовых ямах (КЯ) межзонным оптическим переходам соответствуют дипольные матричные элементы, которые порядка ширины квантовой ямы и приводят к сильному поглощению электромагнитной волны [2]. Однако некоторые оптические переходы в таких КЯ запрещены в силу соображений симметрии. В [3] была предложена модель ступенчатой КЯ и показана возможность оптических переходов, запрещенных в симметричной КЯ. Следует заметить, что КЯ сложной формы перспективны для создания оптоэлектронных приборов, поскольку с их помощью можно конструировать структуры с необходимыми временами релаксации. Задавая последовательность, толщину и состав слоев КЯ сложной формы, можно управлять величинами скоростей излучательной и безызлучательной рекомбинаций, что, в свою очередь, создает возможность получения межподзонной инверсии населения в лазерах на КЯ [4-7]. Специфика ступенчатых КЯ проявляется также в том, что в них коэффициент генерации второй гармоники более чем на три порядка больше, чем в массивном образце $GaAs$ [8]. В [9-13] были наблюдаемы экстремально большие оптические нелинейности второго порядка.

Управлять параметрами КЯ можно также с помощью магнитных и электрических полей. Согласно [14-18], с помощью магнитного поля, параллельного поверхности плоскости двумерного электронного газа, можно управлять энергетическим спектром и распределением электронов в одиночной и двойной КЯ, что открывает широкие перспективы применений рассмотренных квантовых структур для создания multifunctional магнитооптических приборов.

В данной работе рассмотрена задача определения энергетического спектра и волновых функций электрона в прямоугольной ступенчатой квантовой яме в магнитном поле, параллельном плоскости двумерного электронного газа.

2. Определение волновых функций и спектра энергии

Рассмотрим прямоугольную ступенчатую квантовую яму (СКЯ) в однородном магнитном поле, вектор индукции которого находится в плоскости электронного газа. В калибровке Ландау с вектор-потенциалом $\mathbf{A}(0, Bz, 0)$, чему соответствует направление магнитного поля вдоль оси y , уравнение Шредингера для электрона имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + eBz \right)^2 + V(Z) \right] \psi(\mathbf{R}) = E\psi(\mathbf{R}), \quad (1)$$

где m – эффективная масса электрона, которую будем считать одинаковой в области ямы и барьеров, $V(Z)$ – одномерный ступенчатый потенциал. Решение (1) представим в виде

$$\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{R}) = (L_x L_y)^{-1/2} e^{i(K_x X + K_y Y)} \varphi(Z), \quad (2)$$

где $\mathbf{K}(K_x, K_y)$ – двумерный волновой вектор в плоскости электронного газа, L_x, L_y – поперечные размеры СКЯ. После подстановки (2) в (1) и перехода к безразмерным величинам получим следующее уравнение:

$$\frac{d^2 \varphi_{k_y}}{dz^2} + (\varepsilon_{k_y} - v_{eff}(z)) \varphi_{k_y} = 0 \quad (3)$$

с эффективным потенциалом

$$v_{eff}(z) = \gamma^2 (z - z_0)^2 - v. \quad (4)$$

В (3) и (4) использованы обозначения:

$$z = \frac{Z}{a_B}, \quad \varepsilon_{k_y} = \frac{1}{E_R} \left(E - \frac{\hbar^2 K_x^2}{2m} \right), \quad v_{a,b} = \frac{V_{a,b}}{E_R}, \quad \gamma = \left(\frac{a_B}{l_B} \right)^2, \quad z_0 = -\frac{k_y}{\gamma}, \quad k_y = a_B K_y,$$

$l_B = (\hbar/eB)^{1/2}$ – магнитная длина, a_B – эффективный боровский радиус, E_R – эффективная ридберговская энергия. Параметр v в областях I ($z < -a$), II

($-a \leq z \leq 0$), III ($0 \leq z \leq b$) и IV ($z > b$) принимает, соответственно, значения $v=0$, $v=v_a$, $v=v_b$ и $v=0$ ($a=a_0/a_B$, $b=b_0/b_B$ – безразмерные ширины СКЯ). На рис.1 представлена зависимость эффективного потенциала от z для различных значений k_y . Видно, что увеличение значения k_y в положительном (отрицательном) направлении равносильно смещению центра эффективного потенциала влево (вправо).

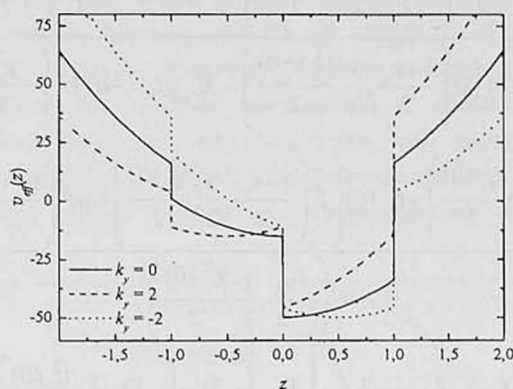


Рис.1. Зависимость эффективного потенциала от z при $\gamma = 4$, $v_a = 15$, $v_b = 50$, $a = b = 1$.

Решения уравнения (3) для областей I–IV даются формулами

$$\begin{aligned} \varphi_{k_y}^{(I)}(z) &= C\alpha \exp\left[-\frac{t_{k_y}^2(z)}{4}\right] t_{k_y}(z) U\left(\frac{1-v_0}{2}, \frac{3}{2}, \frac{t_{k_y}^2(z)}{2}\right), \\ \varphi_{k_y}^{(II)}(z) &= C \exp\left[-\frac{t_{k_y}^2(z)}{4}\right] \left[\beta F\left(-\frac{v_a}{2}, \frac{1}{2}, \frac{t_{k_y}^2(z)}{2}\right) + t_{k_y}(z) F\left(\frac{1-v_a}{2}, \frac{3}{2}, \frac{t_{k_y}^2(z)}{2}\right) \right], \\ \varphi_{k_y}^{(III)}(z) &= C \exp\left[-\frac{t_{k_y}^2(z)}{4}\right] \left[\delta F\left(-\frac{v_b}{2}, \frac{1}{2}, \frac{t_{k_y}^2(z)}{2}\right) + \zeta t_{k_y}(z) F\left(\frac{1-v_b}{2}, \frac{3}{2}, \frac{t_{k_y}^2(z)}{2}\right) \right], \\ \varphi_{k_y}^{(IV)}(z) &= C\eta \exp\left[-\frac{t_{k_y}^2(z)}{4}\right] t_{k_y}(z) U\left(\frac{1-v_0}{2}, \frac{3}{2}, \frac{t_{k_y}^2(z)}{2}\right), \end{aligned} \quad (5)$$

$$v_0 = \frac{\varepsilon_{k_y}}{2\gamma} - \frac{1}{2}, \quad v_{a,b} = \frac{\varepsilon_{k_y} + v_{a,b}}{2\gamma} - \frac{1}{2}, \quad t_{k_y}(z) = \sqrt{2\gamma}(z - z_0), \quad (6)$$

$U(p, q; z)$, $F(p, q; z)$ – вырожденные гипергеометрические функции [19], C – коэффициент нормировки. Входящие в (5) коэффициенты $\alpha, \beta, \delta, \zeta$ и η определяются из условий непрерывности логарифмической производной волновой функции в плоскостях $z = -a$, $z = 0$ и $z = b$ и даются выражениями

$$\alpha = \frac{\beta V_{\nu_a} [t_{k_y}(-a)] + D_{\nu_a} [t_{k_y}(-a)]}{K_{\nu_0} [t_{k_y}(-a)]}, \quad \eta = \frac{\delta F \left(-\frac{\nu_b}{2}, \frac{1}{2}; \frac{t_{k_y}^2(b)}{2} \right) + m t_{k_y}(b) F \left(\frac{1-\nu_b}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(b)}{2} \right)}{t_{k_y}(b) U \left(\frac{1-\nu_0}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(b)}{2} \right)},$$

$$\beta = \frac{t_{k_y}(-a) \left(K_{\nu_0} [t_{k_y}(-a)] F \left(\frac{1-\nu_a}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(-a)}{2} \right) - D_{\nu_a} [t_{k_y}(-a)] U \left(\frac{1-\nu_0}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(-a)}{2} \right) \right)}{t_{k_y}(-a) V_{\nu_a} [t_{k_y}(-a)] U \left(\frac{1-\nu_0}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(-a)}{2} \right) - K_{\nu_0} [t_{k_y}(-a)] F \left(-\frac{\nu_a}{2}, \frac{1}{2}; \frac{t_{k_y}^2(-a)}{2} \right)},$$

$$\delta = \frac{\beta F \left(-\frac{\nu_a}{2}, \frac{1}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right) + t_{k_y}(0) \left(F \left(\frac{1-\nu_a}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right) - n F \left(\frac{1-\nu_b}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right) \right)}{F \left(-\frac{\nu_b}{2}, \frac{1}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right)}, \quad (7)$$

$$\zeta = \frac{\left(\beta V_{\nu_a} [t_{k_y}(0)] + D_{\nu_a} [t_{k_y}(0)] \right) F \left(-\frac{\nu_b}{2}, \frac{1}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right)}{D_{\nu_b} [t_{k_y}(0)] F \left(-\frac{\nu_b}{2}, \frac{1}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right) - t_{k_y}(0) V_{\nu_b} [t_{k_y}(0)] F \left(\frac{1-\nu_b}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right)} -$$

$$\frac{V_{\nu_b} [t_{k_y}(0)] \left(\beta F \left(-\frac{\nu_a}{2}, \frac{1}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right) + t_{k_y}(0) F \left(\frac{1-\nu_a}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right) \right)}{D_{\nu_b} [t_{k_y}(0)] F \left(-\frac{\nu_b}{2}, \frac{1}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right) - t_{k_y}(0) V_{\nu_b} [t_{k_y}(0)] F \left(\frac{1-\nu_b}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(0)}{2} \right)}.$$

Собственные значения энергии определяются из трансцендентного уравнения

$$\delta V_{\nu_b} [t_{k_y}(b)] + \zeta D_{\nu_b} [t_{k_y}(b)] - \eta K_{\nu_b} [t_{k_y}(b)] = 0, \quad (8)$$

где

$$V_{\nu_{a,b}} [t_{k_y}(z)] = -\frac{t_{k_y}(z)}{2} F \left(-\frac{\nu_{a,b}}{2}, \frac{1}{2}; \frac{t_{k_y}^2(z)}{2} \right) - \nu_{a,b} t_{k_y}(z) F \left(\frac{2-\nu_{a,b}}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(z)}{2} \right),$$

$$D_{\nu_{a,b}} [t_{k_y}(z)] = \left(1 - \frac{t_{k_y}^2(z)}{2} \right) F \left(\frac{1-\nu_{a,b}}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(z)}{2} \right) + \frac{1-\nu_{a,b}}{3} t_{k_y}^2(z) F \left(\frac{3-\nu_{a,b}}{2}, \frac{5}{2}; \frac{t_{k_y}^2(z)}{2} \right), \quad (9)$$

$$K_{\nu_0} [t_{k_y}(z)] = U \left(\frac{1-\nu_0}{2}, \frac{3}{2}; \frac{t_{k_y}^2(z)}{2} \right) \left[1 - \frac{t_{k_y}^2(z)}{2} \right] - \frac{1-\nu_0}{3} t_{k_y}^2(z) U \left(\frac{3-\nu_{a,b}}{2}, \frac{5}{2}; \frac{t_{k_y}^2(z)}{2} \right).$$

3. Обсуждение результатов

Численные расчеты проведены для СКЯ $\text{AlAs}/\text{GaAlAs}/\text{GaAs}/\text{AlAs}$ с использованием значений $a_B = 104 \text{ \AA}$, $E_R = 5.2 \text{ мэВ}$ для GaAs [20].

На рис.2А представлена зависимость энергии электрона от параметра b СКЯ для различных значений v_a при $k_y = 0$, $a = 1$, $v_b = 50$ и $\gamma = 4$. В случае $v_a = 0$ (пунктирные линии) получаются уровни энергии для симметричной ямы [18]. Основной уровень в яме появляется при отличных от нуля значениях параметра b , которые, однако, вплоть до значений индукции магнитного поля $B \leq 72 \text{ Т}$ ($\gamma \approx 12$) меньше толщины одного монослоя GaAs . При увеличении v_a энергетические уровни смещаются в область низких энергий (рис.2А, штрих-пунктирные линии), при этом, чем выше уровень энергии, тем больше его смещение. Наоборот, при фиксированном значении v_a ($< v_b$) изменение v_b больше влияет именно на нижние уровни энергии.

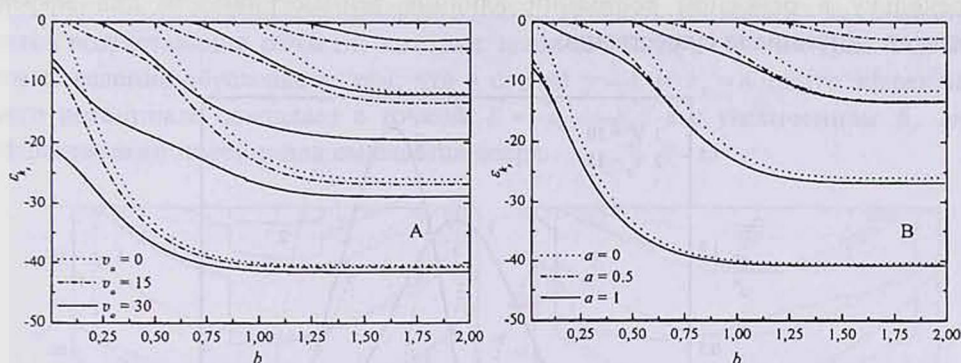


Рис.2. Зависимость энергетических уровней электрона от параметра b при $\gamma = 4$, $k_y = 0$, $v_b = 50$: А — $a = 1$, В — $v_a = 15$.

С увеличением b все больше проявляется роль магнитного квантования. Так, при значении $a = 5a_B$ частица практически не “чувствует” левую стенку ямы. Начиная со значений $b > a_B$ основной энергетический уровень в случае симметричной ямы практически не зависит от b и выходит на основной уровень Ландау. С уменьшением v_a энергетические уровни смещаются в область высоких энергий из-за асимметрии дна эффективного потенциала, которая слабо влияет на состояния с высокими энергиями. По этой причине в асимметричном случае ($v_a < v_b$) эквидистантность уровней проявляется при больших энергиях. Важно отметить, что, начиная с некоторого значения v_a , в СКЯ уровни Ландау отсутствуют.

На рис.2В представлена зависимость энергии электрона от параметра b для различных значений параметра a при $k_y = 0$, $v_a = 15$, $v_b = 50$, $\gamma = 4$. В случае $a = 0$ (пунктирные линии) уровни энергии совпадают с уровнями симметричной ямы. С ростом параметра a энергетические уровни смещаются в область низких энергий, причем это смещение, как и в предыдущем

случае, больше для высоких уровней, поскольку частица лучше “чувствует” потенциальный барьер.

С ростом индукции магнитного поля область локализации частицы уменьшается, что приводит к подъему энергетических уровней. При увеличении v_a уровни смещаются вниз, а величина смещения больше для высоких уровней. Численные расчеты показывают, что для значений $|\varepsilon_{k_y}| < v_a$ при изменении ширины a_0 левой части СКЯ энергетические уровни в зависимости от индукции магнитного поля почти не смещаются.

На рис.3 представлена зависимость безразмерной плотности вероятности для основного и первого возбужденного состояний в симметричном случае $v_a = v_b = 50$ и для $v_a = 15$, когда $k_y = 0$, $a = b = 1$, $v_b = 50$ и $\gamma = 4$. Видно, что уменьшение v_a приводит к росту и смещению максимумов плотности вероятности вправо. Расчеты показывают, что вероятность нахождения электрона в центре КЯ резко изменяется при изменении v_a с $v_a = 50$ до $v_a = 40$, поскольку в основном состоянии влияние асимметричности дна эффективного потенциала существенно.

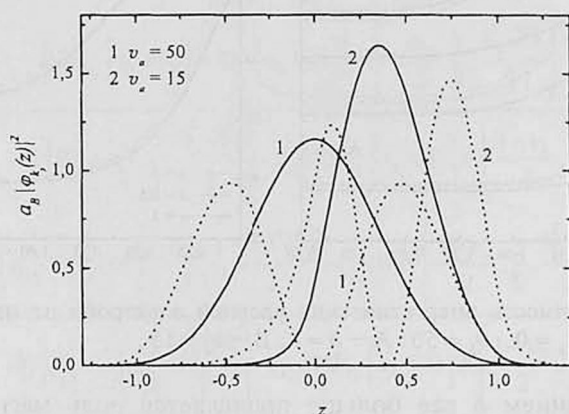


Рис.3. Зависимость плотности вероятности от координаты в СКЯ при $\gamma = 4$, $k_y = 0$, $a = b = 1$, $v_a = 15$, $v_b = 50$ (сплошные линии — основное состояние, пунктирные — первое возбужденное) состояние).

Рассмотрим теперь зависимость энергии от k_y . Как известно, в отсутствие ограничивающего потенциала уровни энергии электрона в магнитном поле вырождены по k_y , а в отсутствие магнитного поля зависят от k_y по квадратичному закону. В результате совместного действия магнитного поля и ограничивающего потенциала возникают гибридные электронные состояния. В слабых магнитных полях, когда магнитная длина больше, чем ширина СКЯ, в формировании квантовых состояний преобладает роль ограничивающего потенциала, и смещения энергетических уровней от уровней Ландау значительны. С ростом магнитного поля уменьшается влияние ограничивающего потенциала, и смещение энергетических уровней от уровней Ландау становится меньше.

На рис.4А представлена зависимость энергии электрона от k_y в СКЯ шириной $2a_B$ для двух значений γ . При $\gamma=1$ (сплошные линии) магнитная длина $l_B = a_B$, и электронные состояния соответствуют поверхностным состояниям, однако при $\gamma=4$ (пунктирные линии) в области $-4 \leq k_y \leq 4$ энергетические уровни близки к уровням Ландау.

На рис.4В представлена зависимость энергии электрона от k_y для различных значений v_a при $\gamma=4$. С уменьшением v_a область локализации электрона уменьшается, и энергетические уровни в положительном направлении k_y лежат выше соответствующих уровней для симметричной КЯ (штрих-пунктирные линии). Заметим также, что при $v_a=15$ (пунктирные линии) самый верхний уровень в области $k_y=0$ до $k_y=1.47$ опускается. Дело в том, что при смещении центра эффективного потенциала влево частица с большей энергией сначала не "чувствует" правую стенку ($k_y=0$ до $k_y=1.47$). Дно эффективного потенциала в левой области опускается, что приводит к смещению вниз энергетических уровней. На кривых ε_{k_y} имеются резко возрастающие области, которые начинаются при $k_y = \pm 4$ (рис.4А). Такое поведение обусловлено тем, что в случае $\gamma=4$ и $k_y=4$ центр эффективного потенциала совпадает с точкой $Z=-a_0=-a_B$, а с увеличением k_y дно эффективного потенциала смещается вверх.

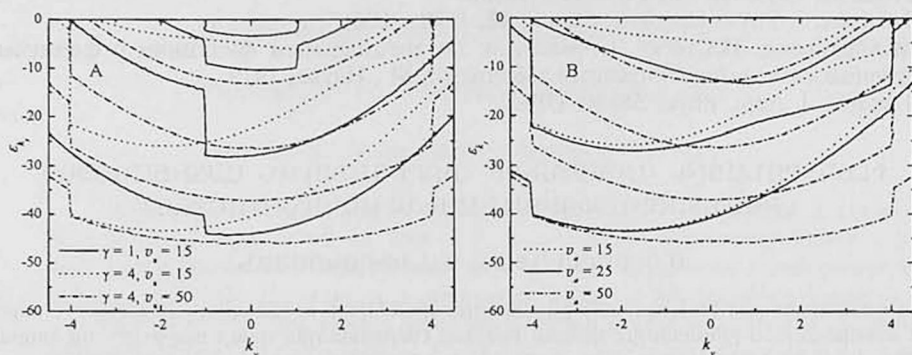


Рис.4. Зависимость энергетических уровней от k_y при $a=b=1$, $v_b=50$.

При $v_a=15$ энергия основного уровня меняется непрерывно (рис.4В), однако при $v_a=25$ (сплошные линии) для значения $k_y=4$ имеет место скачок. Дело в том, что при меньших значениях v_a изменение дна эффективного потенциала в области $(-a_0, 0)$ сильнее влияет на частицу с большей энергией, чем магнитное поле в области барьера. Отметим также, что чем больше v_a , тем больше этот скачок.

Таким образом, полученные результаты указывают на возможность эффективного управления положениями энергетических уровней и плотностями распределения носителей заряда в квантовой яме и, тем самым, контролируемого изменения параметров исследуемых квантовых структур путем изменения как параметров КЯ (ширин a_0 , b_0 , глубин V_a и V_b), так и внешнего магнитного поля.

Работа выполнена в рамках государственной целевой программы Республики Армения "Полупроводниковая наноэлектроника".

ЛИТЕРАТУРА

1. P.Harrison. Quantum wells, wires, and dots. Theoretical and computational physics. John Wiley & Sons ltd, NY, 1999.
2. L.C.West, S.J. Eglash. Appl. Phys. Lett., **46**, 1156 (1985).
3. P.F.Yuh, K.L.Wang. J. Appl. Phys., **65**, 4377 (1989).
4. А.Г.Алексанян, Р.Г.Аллахвердян, Ал.Г.Алексанян. Квантовая электроника, **2**, 1648 (1975).
5. А.Г. Алексанян. Квантовая электроника, **12**, 837 (1985).
6. W.T.Tsang. Semiconductors and Semimetals, Light-wave Communications Technology, ed. by W.T.Tsang, Academic Press, v.22, 1985.
7. В.Л.Зерова, Л.Е.Воробьев, Г.Г.Зегря. ФТП, **38**, 716 (2004).
8. E.Rosencher, P.Bois. Phys. Rev. B, **44**, 11315 (1991).
9. E.Rosencher, P.Bois. J. Nagle. SPIE Proc., **1273**, 138 (1990).
10. E.Rosencher, P.Bois, B.Vinter, J.Nagle, D.Kaplan. Appl. Phys. Lett., **56**, 1822 (1990).
11. E.Rosencher, P.Bois, J.Nagle, E.Costard, S.Delaotie. Appl. Phys. Lett., **55**, 1597 (1989).
12. P.Boucaud, F.H.Julien, D.D.Yang, J.M.Lourtioz, E.Rosencher, P.Bois, J.Nagle. Appl. Phys. Lett., **57**, 215 (1990).
13. R.P.Karunasiri, Y.J. Mii, K.L.Wang. IEEE Electron Dev. Lett., **11**, 227 (1990).
14. M.P.Stopa, D.Das Sarma. Phys. Rev. B, **40**, 3970 (1989).
15. W.Xu. Phys. Rev. B, **51**, 9770 (1995).
16. G.Marx, B.Hackenstein, R. Kummel. J. Phys.: Condens. Matter, **3**, 6425 (1991).
17. G.Gumbs. Phys. Rev. B, **54**, 11354 (1996).
18. G.Gumbs. J. Phys.: Condens. Matter, **12**, 1789 (2000).
19. М.Абрамовиц, И.Стиган. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М., Наука, 1979.
20. S Adachi. J. Appl. Phys., **58**, R1 (1985).

ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ՀԻՔԻԴԱՑՈՒՄՆ ԱՍՏԻՃԱՆԱԶԵՎ ԲՎԱՆՏԱՅԻՆ ՓՈՍՈՒՄ ՄԱԳՆԻՏԱԿԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ

Մ.Գ. ԲԱՐՍԵԳՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Ուսումնասիրված են էլեկտրոնի քվանտային վիճակներն ու էներգիական սպեկտրն ուղղանկյուն աստիճանաձև քվանտային փոստում երկչափ էլեկտրոնային գազի հարթությանը զուգահեռ մագնիսական դաշտում: Յույց է տրված, որ մագնիսական դաշտի և սահմանափակող պոտենցիալի համատեղ ազդեցությունը բերում է էլեկտրոնի էներգիայի սպեկտրի արմատական փոփոխության: Հաշվարկված են էլեկտրոնի էներգիական մակարդակների կախումները քվանտային փոսի պարամետրերից, մագնիսական դաշտի ինդուկցիայից և մագնիսական դաշտի ուղղությամբ ալիքային վեկտորի պրոյեկցիայից: Թվային հաշվարկները կատարված են $AlAs/GaAlAs/GaAs/AlAs$ աստիճանաձև քվանտային փոսի համար:

HYBRIDIZATION OF ELECTRON STATES IN A STEP QUANTUM WELL IN A MAGNETIC FIELD

M.G. BARSEGHYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The quantum states and energy levels of an electron in a rectangular step quantum well in a magnetic field, parallel to the plane of two-dimensional electron gas are investigated. It is shown that the joint effect of the magnetic field and confining potential of the quantum well results in radical change of the electron spectrum. The dependences of the electron energy levels on the quantum well parameters, magnetic field induction and projection of the wave-vector along the magnetic field induction are calculated. Numerical calculations are carried out for a $AlAs/GaAlAs/GaAs/AlAs$ step quantum well.