1996 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 38, № 11
1996 SOLID STATE PHYSICS Vol. 38, N 11

ПОЛЯРИТОНЫ В СЛОИСТЫХ СРЕДАХ И РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ

© О.С.Горя

Молдавский государственный университет, 277009 Кишинев, Молдавия
(Поступила в Редакцию 4 марта 1996 г.
В окончательной редакции 6 июня 1996 г.)

Показано, что решения макроскопических уравнений Максвелла, определяющие спектр колебательных возбуждений поляритонного типа в многослойных структурах, идентичны решениям уравнения Шредингера для огибающих волновых функций, определяющим спектр электронных состояний в размерно-квантованных гетеросистемах.

Хорошо известно, что имеется непосредственная аналогия между распространением электромагнитных волн в классических сверхрешетках (толщины слоев в таких системах предполагаются большими по сравнению с любыми микроскопическими длинами) и поведением электронов в кристаллах. Она основана на сходстве дисперсионных уравнений для колебательных возбуждений (КВ) и уравнения для энергетических зон электрона, движущегося в периодическом потенциале [1]. Здесь мы покажем, что указанные уравнения, по существу, идентичны (по крайней мере в методе эффективной массы) в случае произвольных планарных гетеросистем, в которых допустимо феноменологическое описание КВ поляритонного типа посредством макроуравнений Максвелла, дополненных линейными материальными соотношениями [2].

Задача о спектре поляритонов в планарных системах, состоящих из произвольного числа изотропных однородных слоев $(0|1|2|3|\dots|N|0)$, каждый из которых описывается диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_n(q_{\|},\omega)$, рассмотрена в [3]. Ее решение (в части определения собственных частот КВ в случае p-поляризации) сводится к равенству нуля определителя блочной трехдиагональной матрицы[1]

$$\begin{vmatrix} 1 & 2^0 & & & & & \\ 1_0 & 2 & 3^0 & & & & \\ & 2_0 & 3 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & & & N-1 & N^0 \\ & & & & & (N-1)_0 & N \end{vmatrix} = 0, \qquad (1)$$

[1] Эквивалентная форма дисперсионного уравнения в виде рекуррентного соотношения приведена в [4].

где

$$n = \begin{bmatrix} \delta_n^- e^{-iq_n d_n} & \delta_n^+ \\ \delta_n^+ & \delta_n^- e^{-iq_n d_n} \end{bmatrix}, \quad n^0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -\delta_n^+ e^{-iq_n d_n} & -\delta_n^- \end{bmatrix},$$

$$n_0 = \begin{bmatrix} -\delta_n^- & -\delta_n^+ e^{-iq_n d_n} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad q_n = \left[\varepsilon_n \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - q_\parallel^2\right]^{1/2}, \quad \delta_n^\pm = i\,(\varepsilon_n q_0 \pm q_n), \tag{2}$$

d_n — толщина n-го слоя, $\mathbf{q}_\parallel$ — волновой вектор в плоскости слоев, $i = \sqrt{-1}$, $\varepsilon_0 = 1$. Матрицы второго порядка n описывают собственные КВ в отдельно взятой пластине, помещенной в вакуум, а матрицы n^0, n_0 определяют взаимное влияние этих колебаний при формировании спектра собственных частот многослойной структуры.

Кроме того, в [3] в результате решения интегральных уравнений Максвелла получены граничные условия для фурье-компонент напряженности поля ($\mathbf{E} = \{E_x,\, 0,\, E_z\}$)

$$E_x^{(n)}(q_\parallel, \omega, z_n) = E_x^{(n+1)}(q_\parallel, \omega, z_n),$$

$$\varepsilon_n(q_\parallel, \omega) E_z^{(n)}(q_\parallel, \omega, z_n) = \varepsilon_{n+1}(q_\parallel, \omega) E_z^{(n+1)}(q_\parallel, \omega, z_n), \tag{3}$$

а также полезное для дальнейшего анализа соотношение

$$\frac{dE_x^{(n)}(z)}{dz} = i\left[q_\parallel - \frac{\varepsilon_n}{q_\parallel}\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right] E_z^{(n)}(z). \tag{4}$$

Ось z предполагается направленной перпендикулярно слоям, а z_n есть координата границы между слоями n и $n+1$.

Соотношение (1) в зависимости от конкретного вида диэлектрических функций $\varepsilon_n(q_\parallel, \omega)$ определяет спектр собственных частот поляритонов, плазмонов, а также смешанных КВ в данной слоистой среде. Например, в случае симметричной гетероструктуры $(1|2|1)$ с полубесконечными крайними слоями (1) сводится к выражению

$$\frac{\varepsilon_1 q_2}{\varepsilon_2 q_1} = i \begin{cases} -\operatorname{tg}(q_2 d_2/2), \\ \ \ \operatorname{ctg}(q_2 d_2/2), \end{cases} \tag{5}$$

а в случае бесконечной сверхрешетки (СР), составленной из таких гетеросистем (после использования теоремы Флоке $E(z+d) = \exp(iK_B d)E(z)$), получим

$$\cos K_B d = \cos q_1 d_1 \cos q_2 d_2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon_1 q_2}{\varepsilon_2 q_1} + \frac{\varepsilon_2 q_1}{\varepsilon_1 q_2}\right) \sin q_1 d_1 \sin q_2 d_2, \tag{6}$$

где период $d = d_1 + d_2$, K_B — блоховский волновой вектор. Соотношения (5), (6) довольно часто встречаются в литературе, посвященной исследованию КВ.

Рассмотрим теперь процедуру решения уравнения Шредингера для электронных состояний в подобных системах. Обычно толщины слоев размерно-квантованных систем значительно превосходят постоянную решетки, что позволяет описывать электронные состояния в рамках метода огибающей волновой функции $F(z)$ [5,6]. В приближении эффективной массы уравнение Шредингера для огибающей симметричной гетероструктуры (рис. 1) дает для энергии электрона E в области финитного движения ($E < V$) следующее дисперсионное соотношение [6, P. 14]:

$$\frac{m_2}{m_1}\sqrt{\frac{m_2 E}{m_1(V-E)}} = \begin{cases} \operatorname{tg}(k_2 d_2/2), \\ -\operatorname{ctg}(k_2 d_2/2), \end{cases} \tag{7}$$

где $k_2 = \sqrt{2m_2 E}/\hbar$, m_1 и m_2 — эффективные массы соответственно в слоях 1 и 2. В частном случае $m_1 = m_2 = m$ и $V \to \infty$ выражение (7) переходит в знаменитое соотношение, описывающее эффект размерного квантования, $E_n = \pi^2\hbar^2 n^2/(2md^2)$.

Обратим внимание на то, что формулы (5) и (7) тождественны, если в (5) обозначить

$$q_2 = k_2 = \frac{\sqrt{2m_2 E}}{\hbar}, \quad q_1 = \frac{\sqrt{2m_1(E-V)}}{\hbar}, \quad \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} = \frac{m_2}{m_1}. \tag{8}$$

Подставляя теперь (8) в (6), получим дисперсионное соотношение, определяющее спектр электронных состояний в СР [6, P. 32]. При этом для области $E < V$ следует учесть, что q_1 — мнимая величина.

Очевидно, такого рода совпадения не могут носить частный характер. Действительно, в соответствии с принципом корпускулярно-волнового дуализма кванту КВ в n-м слое с поперечным волновым числом q_n и энергией $\hbar\omega$ соответствует электромагнитная волна с частотой ω, распространяющаяся с фазовой скоростью $v_n = c/\sqrt{\varepsilon_n}$ (ср. с (2)). Согласно этому же принципу, электрон, имеющий в приближении эффективной массы энергию $E = \hbar^2 k^2/2m$, может рассматриваться как волна де Бройля с частотой ω, распространяющаяся в n-м слое с фазовой скоростью $v_n = \sqrt{E/2m_n}$. Компонента z волнового вектора этой волны равна

$$k_n = \sqrt{k^2 - k_\parallel^2} = \frac{\sqrt{2m_n(E - E_\parallel)}}{\hbar}, \tag{9}$$

где $E_\parallel = \hbar^2 k_\parallel^2/2m_n$ — энергия движения в плоскости слоя. Если отсчитывать энергию электрона E в многослойной структуре от низшей точки на профиле дна зоны проводимости (рис. 1), а энергию продольного движения $E_\parallel$ в каждом слое считать равной нулю на дне зоны проводимости соответствующего слоя, выражение (9) переходит в (8). Последнее из равенств набора (8) получается из сравнения отношений квадратов фазовых скоростей электромагнитных волн и волн де Бройля.

Таким образом, дисперсионное уравнение (1) совпадает с уравнением, полученным из решения уравнения Шредингера для состояний электрона в одномерном потенциале произвольной ступенчатой формы, если $q_n \to k_n$ и $\varepsilon_n \to 1/m_n$.

Отметим, что еще до конца 80-х годов во многих работах, посвященных исследованию электронного спектра СР, использовалась модель Кронига–Пенни, совпадающая с (6), если положить $\varepsilon_1/\varepsilon_2 = 1$. Это связано с тем, что в данных работах в качестве граничных условий выбиралась непрерывность огибающих $F(z_n)$ и их производных $F'(z_n)$, а не (введенное Бастаром [7]) граничное условие $(1/m_n)F'_n(z_n) = (1/m_{n+1})F'_{n+1}(z_n)$, обеспечивающее непрерывность электронного потока через границу в методе эффективной массы. Модификация модели Кронига–Пенни с учетом граничных условий Бастара проведена в [8].

Соотношения (3) и (4) показывают, что и в этом вопросе имеется полное соответствие. Ясно, что $E_x^{(n)}(z)$ можно интерпретировать как огибающую волновой функции частицы в n-м слое с энергией $\hbar\omega$ и импульсом $q_{\|}$, а $E_z^{(n)}(z)$ играет роль ее производной. Соотношения (3) перейдут при этом в граничные условия Бастара ($\varepsilon_n \to 1/m_n$), справедливые, вообще говоря, вблизи дна зоны проводимости.

Приведенный анализ показывает, что все специфические особенности, типичные для электронных состояний в размерно-квантованных системах, также имеют силу и для колебательных состояний в многослойных структурах (разумеется, при толщинах слоев, сравнимых с соответствующими длинами волн). И наоборот, многие уже известные результаты, описывающие распространение волн в многослойных системах, могут быть сравнительно просто использованы при описании электронных состояний в весьма сложных структурах, например в политипных СР.

Покажем эффективность такого подхода на следующем примере. На рис. 2 (штриховые линии) показана типичная дисперсия поверхностных поляритонов (ПП)[2] для пластин двух кристаллов, причем область продольно-поперечного расщепления первого ($\varepsilon_1 < 0$) полностью перекрывается с соответствующей областью второго. Знаки $+$, $-$ символизируют четность или нечетность состояний относительно плоскости, проходящей через середину слоя. Отметим, что в пределе $q_{\|} \to 0$ имеем $\omega_+ \to \omega_T$ и $\omega_- \to \omega_L$; в пределе $q_{\|} \to \infty$ частоты обеих мод стремятся к частоте ПП на границе кристалл–вакуум $\omega_{1\,(2)}$, являющейся корнем уравнения $\varepsilon_{1\,(2)} = -1$. Используя только эти факты и общие свойства движения частицы в одномерном потенциале, определим характер дисперсии ПП в СР, образованных из этих двух кристаллов.

В системе $(0|1|2|0)$ вследствие невырожденности состояний кривые дисперсии пересекаться не могут. Учитывая, что корни уравнения $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$ (ω_3, ω_4) находятся вне интервала $\varepsilon_1 < 0$, получим характер дисперсионных кривых для данной системы, показанных на рис. 2 сплошными линиями. Очевидно, существование мод 2 и 4 обусловлено ПП, локализованными на внешних границах структуры, а мод 1 и 3 — ПП, локализованными на внутренней границе.

Усложнение структуры $(0|1|2|1|0)$ приведет к преобразованию моды 4 (нет границы $(2|0)$) в моду 7, появлению моды 6 нечетных (по отношению к плоскости, проходящей через середину всей структуры)

[2] Без учета запаздывания.

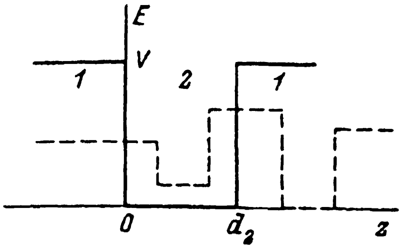

Рис. 1. Модель профиля дна зоны проводимости.

Сплошная линия — симметричная гетероструктура, штриховая — многослойная гетеросистема.

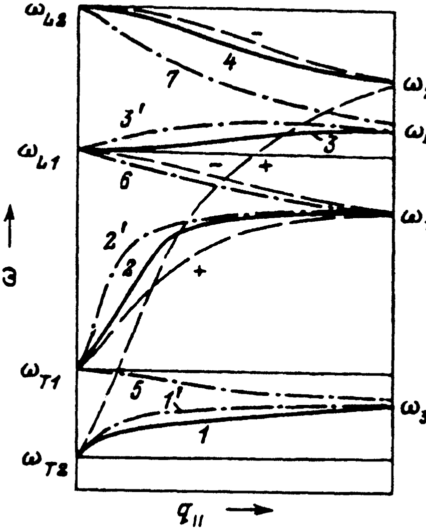

Рис. 2. Эволюция спектра ПП.

Штриховые линии — спектр систем (0|1|0) и (0|2|0), сплошные — спектр системы (0|1|2|0), штрихпунктирные — спектр системы (0|1|2|1|0).

состояний, обусловленных ПП, локализованными на внешних границах, и моды нечетных состояний 5 (в соответствии с правилом чередования четности). Отметим, что для моды 5 имеется лишь частотный интервал $\omega_3 < \omega < \omega_{T1}$. В других случаях было бы пересечение с объемными состояниями (ω_{T1}). Моды 1, 2, 3 претерпят лишь незначительные количественные изменения, сохраняя характер дисперсии, и преобразуются соответственно в $1'$, $2'$, $3'$. Характер дисперсионных кривых для системы (0|1|2|1|0) показан на рис. 2 штрихпунктирными линиями.

Рассматривая аналогичным способом систему (0|1|2|1|2|0), получим появление моды, близкой по характеру дисперсии к моде 4, выталкивание моды 6 в частотный интервал $\omega_{L1} < \omega < \omega_4$ с дисперсией, характерной для моды 3, появление еще одной моды, близкой к моде 1.

Нетрудно видеть, что, например, для конечной СР (0|2|1| ... |1|2|0) спектр ПП будет состоять из двух мод, близких по характеру дисперсии к моде 4, которые обусловлены ПП, локализованными на внешних границах СР, и четырех групп колебательных мод ПП, характер дисперсии которых близок соответственно к модам 1, 5, 3, 7. В интервале $\omega_{T1} < \omega < \omega_{L1}$ колебательных состояний не будет, и СР окажется абсолютно непрозрачной.[3] Учет запаздывания и (или) флуктуаций толщины слоев не приводит к появлению в этом частотном интервале состояний объемного или волноводного типа.

Подобная ситуация не наблюдается в СР GaAs–GaAlAs [9], но может быть реализована в СР GaAs/GaAsP,[4] в которых обнаружены интересные колебательные [10] и электронные [11] явления.

[3] В случае частичного перекрытия областей существования ПП кристаллов 1 и 2 вывод относится к области перекрытия. Для бесконечной СР он получается аналитически из (6).

[4] При низких концентрациях фосфора.

Список литературы

[1] Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, А.П. Тетервов. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. Наука. М. (1989).

[2] В.М. Агранович, В.Л. Гинзбург. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. Наука. М. (1979).

[3] О.С. Горя, Е.П. Покатилов. Коллективные возбуждения в многослойных структурах. Деп. в Молд. НИИ НТИ, рег. № 541М-Д85. Кишинев (1985). 21 с.

[4] О.С. Горя, В.В. Зеленин. В сб.: XIII Всесоюз. совещ. по теории полупроводников. Ереван (1987). С. 103.

[5] G. Bastard. Phys. Rev. **B25**, 7584 (1982).

[6] C. Weisbuch, B. Vinter. Quantum semiconductor structures. Acad. Press. Inc. London (1991).

[7] G. Bastard. Phys. Rev. **B24**, 5693 (1981).

[8] Hung-Sik Cho, P.R. Prucnal. Phys. Rev. **B36**, 3237 (1987).

[9] A.K. Sood, I. Menendez, M. Cardona, K. Ploog. Phys. Rev. Lett. **54**, 2115 (1985).

[10] Е.Ф. Венгер, О.С. Горя, Н.Л. Дмитрук, М.Ю. Пелюсова, Н.А. Фидря. ЖПС **60**, *1–2*, 165 (1994).

[11] О.С. Горя, А.С. Кеяну, И.В. Кравецкий, Л.Л. Кулюок, О.М. Татаринская. ЖПС **62**, *3*, 160 (1995).