

## ФУНКЦИЯ ГРИНА КАСКАДА КВАНТОВЫХ ЯМ

А. В. Долгих\*, П. А. Мелешенко\*\*, А. В. Колупанова\*, А. Ф. Клиньских\*

\*Воронежский государственный университет

\*\*Воронежский государственный аграрный университет им. К. Д. Глинки

Поступила в редакцию 16.02.2009 г.

**Аннотация.** Для электрона в квантовой яме в рамках метода трансфер-матрицы найдены функция Грина и обобщенная восприимчивость, определяющие энергетический спектр, плотность электронных состояний и отклик системы на внешние воздействия. С использованием решений Йоста задачи рассеяния проведено построение функции Грина, полюсы и вычеты которой определяют энергетические уровни и волновые функции состояний дискретного спектра, в то время как след ее мнимой части характеризует плотность электронных состояний. Проведен расчет частотной зависимости обобщенной восприимчивости для основного состояния в квантовой яме.

**Ключевые слова:** Метод трансфер-матрицы, функция Грина, обобщенная восприимчивость, каскад квантовых ям.

**Abstract.** The Green's function and general susceptibility calculated by the modified transfer-matrix method for electron in quantum cascade. These objects define energy spectrum, density of electron states and reaction system on external influence. Poles and residues of the Green's function determine energy levels and wave functions states of the discrete spectrum. The trace of the imaginary part of the Green's function describes density of electron states. Green's function is built using Jost's solutions of scattering problem. General susceptibility of the bounded state of electron in quantum cascade is calculated.

**Keywords:** Transfer-matrix method, Green's function, general susceptibility, quantum cascade.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что источники когерентного излучения в далекой инфракрасной области с длинами волн от 4 до 24 мкм представляют большой интерес в технике оптической связи, системах контроля, биологических и медицинских приложениях. Поэтому современные непрерывно нарастающие экспериментальные исследования в области создания лазеров терагерцового диапазона на наноструктурах обеспечивают как повышение уровня, так и расширение круга задач теоретических исследований. Активной средой для этих лазеров являются полупроводниковые гетероструктуры, в которых методами молекулярно-лучевой эпитаксии формируются наборы (каскады) квантовых ям, динамика электронов в которых и обеспечивает эффект генерации при комнатной температуре [1, 2]. Если идея о возможности лазерной генерации на переходах между подзонами в полупроводниковых структурах была высказана еще в 1971 году [3], то детальные расчеты и

особенности экспериментальной реализации стали обсуждаться, начиная с 1994 года [4, 5]. Применение в этом случае модели каскада квантовых ям обусловлено, с одной стороны, адекватностью описания структуры в сравнении с результатами экспериментов, а, с другой стороны, вследствие ясности и относительной простоты математической постановки задач моделирования.

Целью данной работы является построение функции Грина для электрона в квантовой яме с использованием решений Йоста задачи рассеяния и ее применение для анализа энергетического спектра и восприимчивости системы. Решения Йоста строятся в рамках метода трансфер-матрицы.

### 2. ФУНКЦИЯ ГРИНА ОДНОМЕРНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ

Модель каскада из  $N$  квантовых ям отвечает одномерному движению электрона в потенциале, имеющем разрывы конечной величины на границах слоев полупроводниковых материалов. Точки из набора  $(x_j, j = 1, 2, \dots, 2N)$  делят действительную ось на  $2N + 1$  интервал, зада-

© Долгих А. В., Мелешенко П. А., Колупанова А. В., Клиньских А. Ф., 2009

ваемых индексом  $s = 0, 1, 2, \dots, 2N$ . Асимптотические области  $(-\infty, x_1)$  и  $(x_{2N}, +\infty)$  есть интервалы с индексами  $s = 0$  и  $s = 2N$  соответственно. В системе квантовых ям потенциальная энергия  $U(x)$  имеет вид:

$$U(x) = U(-\infty) + \int_{-\infty}^x \sum_j \{\Delta U_j \delta(x - x_j)\} dx, \quad (1)$$

где  $\delta(x)$  есть дельта-функция Дирака. Функция  $U(x)$  постоянна на каждом интервале  $s$ , в точках  $x_j$  величины скачков  $\Delta U_j$  определяются как разности

$$\Delta U_j = U(x_j + 0) - U(x_j - 0) \quad (2)$$

пределов справа и слева функции  $U(x)$ . Гамильтониан электрона  $\hat{H}$  в модели каскада квантовых ям на интервале  $s, s = 1, 2, \dots, 2N - 1$ , т.е. при  $x_s < x < x_{s+1}$ , имеет вид:

$$\hat{H}_s = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m_s} \frac{d}{dx} + U_s, \quad (3)$$

где эффективные массы  $m_s$  отвечают соответствующему слою полупроводниковой гетероструктуры. Соответственно набор решений уравнений Шредингера на каждом интервале

$$\hat{H}_s \psi_s(x) = E \psi_s(x) \quad (4)$$

с условиями сшивания в точках  $x_s$ , обеспечивающими самосопряженность набора операторов  $\hat{H}_s$ ,

$$\psi_{s-1}(x) |_{x_s-0} = \psi_s(x) |_{x_s+0} \quad (5)$$

$$\frac{1}{m_{s-1}} \frac{d\psi_{s-1}}{dx} \Big|_{x_s-0} = \frac{1}{m_s} \frac{d\psi_s}{dx} \Big|_{x_s+0} \quad (6)$$

определяют волновые функции и энергетический спектр каскада квантовых ям.

Рассмотрим наиболее простой случай одномерного рассеяния на прямоугольном барьере. Массу электрона будем считать постоянной и равной  $m$ . При этом индекс  $s$  принимает всего два значения  $s = 1, 2$ . Уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + [E - U(x)]\Psi(x) = 0. \quad (7)$$

Потребуем, чтобы решения (7) удовлетворяли следующим асимптотическим условиям:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow +\infty} [\exp(-ikx) f_1(x, k)] &= 1, \\ \lim_{x \rightarrow -\infty} [\exp(ikx) f_2(x, k)] &= 1. \end{aligned} \quad (8)$$

Решения задачи рассеяния (7), обладающие таким свойством, называются решениями Йоста, и могут быть представлены в виде [6,7]

$$f_1(x, k) =$$

$$= \exp(ikx) - \frac{1}{k} \int_x^{\infty} dx' \sin k(x - x') U(x') f_1(x', k), \quad (9)$$

$$f_2(x, k) =$$

$$= \exp(-ikx) + \frac{1}{k} \int_{-\infty}^x dx' \sin k(x - x') U(x') f_1(x', k). \quad (10)$$

Будем искать функцию Грина уравнения (7) в виде:

$$G^+ \left( x, x', \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \right) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{f_1(x_>, k) f_2(x_<, k)}{W(f_1, f_2)}, \quad (11)$$

где  $W(f_1, f_2)$  — вронскиан функций  $f_1(x, k), f_2(x, k)$ . Можно показать, что представленная таким образом функция Грина имеет асимптотику расходящейся волны (на что указывает символ «+» в выражении  $G^+$ ) при  $x \rightarrow \pm\infty$ , как и должно быть в одномерной задаче рассеяния.

Функция Грина, записанная в виде (11), похожа на функцию Грина задачи Штурма—Лиувилля. В случае задачи Штурма—Лиувилля функции  $f_1(x, k)$  и  $f_2(x, k)$  были бы собственными функциями. Следует, однако, отметить, что такое сходство является лишь внешним, так как решения Йоста  $f_1(x, k), f_2(x, k)$  являются ненормируемыми (нормировка возможна только в смысле обобщенных функций). Тогда как для решений задачи Штурма—Лиувилля принципиальным свойством является конечное значение нормы. Интересно вместе с тем отметить, что с помощью представления (11) оказывается возможным построить и решения задачи Штурма—Лиувилля.

### 3. ФУНКЦИЯ ГРИНА В МЕТОДЕ ТРАНСФЕР-МАТРИЦЫ

Рассмотрим построение решений Йоста и функции Грина одномерной задачи рассеяния методом трансфер-матрицы. С точки зрения теории дифференциальных уравнений основная идея этого метода заключается в том, что между асимптотическими решениями линейного дифференциального уравнения имеется линейная связь, устанавливаемая матрицей, которая в теории рассеяния называется трансфер-матрицей. В матричном виде соотношение между решениями в асимптотических областях можно записать следующим образом. Пусть имеется произвольное решение  $\psi(x)$  уравнения Шредингера (7). Асимптотическое поведение  $\psi(x)$  имеет вид

$$\psi(x) = \begin{cases} a_1 \exp(ikx) + b_1 \exp(-ikx), & x \leq x_1 \\ a_2 \exp(ikx) + b_2 \exp(-ikx), & x \geq x_2 \end{cases}$$

или

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где  $M$  — трансфер-матрица, соответствующая рассеивающему потенциалу  $U(x)$  в (7). Значения  $x$  меньшие  $x_1$  соответствуют области слева от каскада, а значения  $x$  большие  $x_2$  — области справа от каскада. Явный вид трансфер-матрицы может быть получен из решения системы уравнений, получающихся из условия непрерывности функций и их производных на границе барьера (5).

Можно показать, что функцию Грина, построенную с помощью решений Йоста (8—10), в асимптотических областях можно представить в виде:

$$G^+(x, x', k) = -\frac{im}{k\hbar^2} (\exp(ik|x-x'|) - r(k) \exp[ik(|x| + |x'|)]). \quad (13)$$

Представление (13) для функции Грина носит универсальный характер, то есть является справедливым для любого выбора рассеивающего потенциала конечного радиуса. Свойства потенциала учитываются в амплитуде отражения  $r(k)$ . Если рассеяние происходит не на одном потенциале, а на каскаде, то амплитуда  $r(k)$  будет соответствовать отражению от всего каскада, а вид (13) останется прежним.

#### 4. АНАЛИЗ ФУНКЦИИ ГРИНА

Построенная в предыдущем разделе функция Грина позволяет провести полный анализ рассматриваемой системы и, в частности, проанализировать энергетический спектр и восприимчивость системы, состоящей из одной или нескольких квантовых ям. В последнем случае система называется каскадом квантовых ям.

##### 4.1. ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Рассмотрим изменение плотности состояний электрона при движении его в квантовом каскаде. Плотность состояний  $\rho(k)$  выражается через функцию Грина следующим образом [8]:

$$\begin{aligned} \rho(k) &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} [Tr G^+(k)] = \\ &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int G^+(x, x, k) dx. \end{aligned} \quad (14)$$

Для того чтобы выделить в плотности состояний часть, обусловленную только присутствием каскада, из функции Грина (13) следует вычесть функцию Грина свободного электрона  $G^0(x, x', k)$ . Выражение для добавки  $\Delta\rho(k)$  в плотности состояний (14) имеет следующий вид:

$$\Delta\rho(k) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int [G^+(x, x, k) - G^0(x, x, k)] dx. \quad (15)$$

Интеграл в (15) регуляризован и окончательное выражение для плотности состояний, обусловленной квантовым каскадом, принимает вид:

$$\Delta\rho(k) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[ \frac{m r(k)}{\hbar^2 k^2} \right]. \quad (16)$$

Как и в выражении для функции Грина (13), вся информация о рассеивающей системе содержится в амплитуде отражения  $r(k)$ . Например, можно показать, что плотность состояний имеет простые полюсы в точках дискретного спектра. Для этого достаточно записать  $r(k)$  через элементы трансфер-матрицы [9,10]

$$r(k) = \frac{M_{21}(k)}{M_{11}(k)}$$

и учесть, что элемент  $1/M_{11}(k)$  имеет простые полюсы в точках дискретного спектра в силу того, что выражается через амплитуду прохождения [9,10] как

$$\frac{1}{M_{11}(k)} = t(k).$$

##### 4.2. ДИСКРЕТНЫЙ СПЕКТР

Для нахождения структуры дискретного спектра достаточно выполнить аналитическое продолжение по  $k$  в (13), то есть, осуществить переход с действительной оси  $k$  на мнимую  $ik$ ,  $\kappa > 0$ . Уравнение для уровней энергии можно получить, вычислив вронскиан двух решений Йоста

$$\begin{aligned} W[f_1(k, x), f_2(k, x)] &= \\ &= f_1'(x, k) f_2(x, k) - f_2'(x, k) f_1(x, k) = 2ikM_{11} \end{aligned} \quad (17)$$

и подставив его в выражение (11)

$$\begin{aligned} G^+ \left( x, x', \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \right) &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{f_1(x_>, k) f_2(x_<, k)}{W(f_1, f_2)} = \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{f_1(x_>, k) f_2(x_<, k)}{2ikM_{11}(k)}. \end{aligned} \quad (18)$$

В (18) полюсами в дискретном спектре ( $k = ik$ ) обладает только множитель  $1/M_{11}(k)$ ,

следовательно, равенство нулю элемента  $M_{11}(i\kappa)$  и определяет уровни энергии в дискретном спектре. Для прямоугольной потенциальной ямы это уравнение имеет вид:

$$M_{11}(i\kappa) = 0, \quad \left[ \cos qa - i \frac{\sin qa}{2} \left( \frac{q}{\kappa} + \frac{\kappa}{q} \right) \right] = 0, \quad (19)$$

$$a = x_2 - x_1, q = \sqrt{U_0 - \kappa^2},$$

где  $x_1, x_2$  — координаты начала и конца ямы соответственно.

Используя функцию Грина (13), можно также рассчитать поглощение и излучение энергии системой. В соответствии с теорией обобщенной восприимчивости [11], величина энергии, поглощенная системой, пропорциональна мнимой части восприимчивости. Восприимчивость системы выражается через функцию Грина соотношением [12]:

$$\alpha_n(\omega) = \langle n | xG^+ \left( x, x', \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_0 + \hbar\omega + i0 \right) x' | n \rangle + \langle n | xG^- \left( x, x', \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_0 - \hbar\omega - i0 \right) x' | n \rangle. \quad (20)$$

На рис. представлены действительная и мнимая части восприимчивости  $\alpha(\omega)$  электрона, находящегося в основного состояния в квантовой яме с двумя уровнями. Следует отметить наличие минимума за порогом ионизации у мнимой части восприимчивости. Этот минимум аналогичен куперовскому минимуму в атомах [13].

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе развит подход построения функции Грина одномерной задачи рассеяния с использованием метода трансфер-матрицы. С этой целью были получены решения Йоста одномерной задачи рассеяния в методе трансфер-матрицы. Построенная таким образом функция Грина может быть использована для анализа непрерывного и дискретного спектра электрона в каскаде квантовых ям. Так, полюсы функции Грина соответствуют дискретным уровням энергии электрона и являются корнями уравнения (19). Получено аналитическое выражение для плотности состояний электрона в непрерывном спектре (16) справедливое для произвольного каскада квантовых ям.

Рассмотрено поглощение энергии каскадом. Для этого рассчитана обобщенная восприимчивость квантовой ямы, содержащей два дискретных уровня. Поведение восприимчивости как функции частоты поглощаемого фотона находится в соответствии с общей теорией. Интересно отметить, что мнимая часть восприимчивости имеет минимум вблизи порога ионизации. В атомной физике такой минимум называется куперовским минимумом.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что метод трансфер-матрицы является эффективным и надежным методом для решения задачи о нахождении функции Грина электрона в каскаде квантовых ям.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Page H. 300 K operation of a GaAs-based quantum-cascade laser at  $\lambda \approx 9 \mu\text{m}$  / H. Page [et al.] //

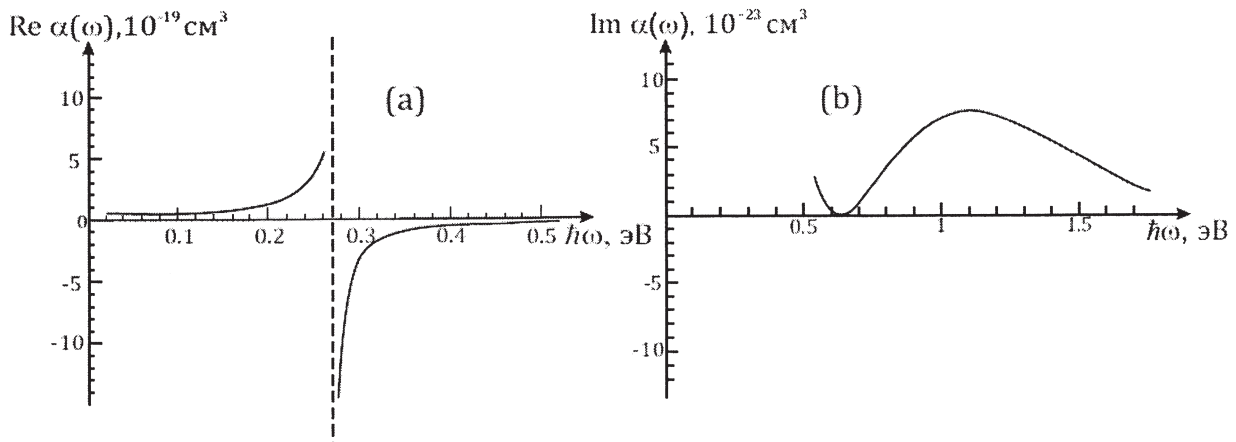


Рис. Действительная (а) и мнимая (б) части восприимчивости основного состояния электрона в квантовой яме с двумя уровнями энергии. Пунктирной линией показано положение резонанса, соответствующего переходу на первый возбужденный уровень

Applied Physics Letters. — 2001. — Vol. 78. — № 22. — P. 3529—3531.

2. *Olson M.R.* Linear photon upconversion of 400 meV in an AlGaInP/GaInP quantum well heterostructure to visible light at room temperature / M. R. Olson [et al.] // Applied Physics Letters. — 2006. — Vol. 88. — № 16. — P. 161108-3.

3. *Казаринов Р.Ф.* О электромагнитных свойствах полупроводников со сверхрешеткой / Р. Ф. Казаринов, Р. Сурис // Физика и техника полупроводников. — 1971. — Т. 5. — С. 797—800.

4. *Sirtori C.* Nonparabolicity and a sum rule associated with bound-to-bound and bound-to-continuum intersubband transitions in quantum wells / C. Sirtori [et al.] // Physical Review B. — 1994. — Vol. 50. — № 12. — P. 8663—8674.

5. *Faist J.* Quantum Cascade Laser / J. Faist [et al.] // Science. — 1994. — Vol. 264. — P. 553—556.

6. *Фаддеев Л.Д.* Обратная задача квантовой теории рассеяния / Л. Д. Фаддеев // УМН. — 1959. — Т. 14. — № 4. — С. 57—119.

7. *Левитан Б.М.* Обратная задача Штурма—Лиувилля / Б. М. Левитан. — М.: Наука, 1984. — 240 с.

8. *Economou E.N.* Green's functions in quantum physics / E. N. Economou. — Third edition. — Berlin: Springer, 2006. — 477 p.

9. *Merzbacher E.* Quantum Mechanics / E. Merzbacher. — Second edition. — New York and London: John Wiley & Sons, Inc., 1970. — 621 p.

10. *Klinskikh A.F.* Modified transfer matrix method for quantum cascade lasers / A. F. Klinskikh, D. A. Chechin, A. V. Dolgikh // Journal of physics B. — 2008. — Vol. 41. — P. 161001-3.

11. *Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: учебное пособие в 10 т. Т. V. Статистическая физика ч. 1 / Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. — 3-е изд., доп. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1978. — 584 с.

12. *Ландау Л.Д.* Теоретическая физика: учебное пособие в 10 т. Т. III. Квантовая механика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — 4-е изд., испр. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. — 768 с.

13. *Фано У.* Спектральные распределения сил осцилляторов в атомах / У. Фано, Д. Купер. — М.: Наука, 1972. — 200 с.

---

**Долгих Антон Владимирович** — к. ф.-м. н. ВГУ, e-mail: [dolgikh@niif.vsu.ru](mailto:dolgikh@niif.vsu.ru)

**Мелешенко Петр Александрович** — аспирант кафедры физики ВГАУ, e-mail: [melechnp@yandex.ru](mailto:melechnp@yandex.ru)

**Колупанова Алла Витальевна** — магистрант кафедры теоретической физики ВГУ, e-mail: [akolupanova@yandex.ru](mailto:akolupanova@yandex.ru)

**Клинских Александр Федотович** — д. ф.-м. н., профессор кафедры теоретической физики ВГУ, e-mail: [klinskikh@vsau.ru](mailto:klinskikh@vsau.ru)

**Dolgikh Anton** — Voronezh State University, Theoretical Physics Department, Candidate of Physics and Mathematics, e-mail: [dolgikh@niif.vsu.ru](mailto:dolgikh@niif.vsu.ru)

**Meleshenko Peter** — Voronezh State Agrarian University, Physics Department, Post-graduate student, e-mail: [melechnp@yandex.ru](mailto:melechnp@yandex.ru)

**Kolupanova Alla** — Voronezh State University, Theoretical Physics Department, Bachelor of Physics, e-mail: [akolupanova@yandex.ru](mailto:akolupanova@yandex.ru)

**Klinskikh Alexander** — Voronezh State University, Theoretical Physics Department, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, e-mail: [klinskikh@vsau.ru](mailto:klinskikh@vsau.ru)