

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАТУХАНИЯ МЕЖЗОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ ПРИ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ

А. А. Афоненко, В. С. Белявский

Белорусский государственный университет, Минск

E-mail: afonenko@bsu.by

Временная зависимость межзонной поляризации в процессе ее затухания и форм-фактор уширения спектров излучения связаны Фурье преобразованием [1, 2]. В настоящей работе поведено моделирование процесса затухания межзонной поляризации на основе численного решения уравнения Гейзенберга без применения теории возмущений:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} = \hat{F} \hat{H} - \hat{H} \hat{F}, \quad (1)$$

где \hat{F} – набор базисных операторов, \hat{H} – гамильтониан системы. При учете процессов электрон-фононного взаимодействия только в зоне проводимости гамильтониан представляется как

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\text{ck}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\text{LO}} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \right). \quad (2)$$

Здесь $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ и $\hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ ($\hat{b}_{\mathbf{q}}$ и $\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$) – операторы уничтожения и рождения электронов (фононов), E_{ck} – энергия электронов с волновым вектором \mathbf{k} , ω_{LO} – частота продольных оптических фононов. Матричный элемент электрон-фононного взаимодействия Фрёлеха для интерфейсных фононных мод использовался в виде [3]

$$V_{\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{4 \epsilon_0 S} \left(\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right)} \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{q}|}}. \quad (3)$$

Здесь $\epsilon(0)$ и $\epsilon(\infty)$ – низкочастотная и высокочастотная диэлектрическая проницаемость, S – площадь анализируемого участка квантоворазмерного слоя, \mathbf{q} – волновой вектор фонона.

Анализировалась динамика оператора $\hat{c}_{\mathbf{k}}(t)$ при его единичном значении в начальный момент времени и нулевых значениях всех других базисных операторов (без взаимодействия фононов и дырок динамика оператора межзонной поляризации $\hat{v}_{-\mathbf{k}}(t) \hat{c}_{\mathbf{k}}(t)$ совпадает с динамикой оператора $\hat{c}_{\mathbf{k}}(t)$). Уравнение (1) в общем случае приводит к бесконечной системе уравнений. Для численных расчетов базис ограничивался двухчастичными ($\hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{q}}$, $\hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$) или трехчастичными ($\hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{g}} \hat{b}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{g}}$, $\hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{g}} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{g}}$,

$\hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{g}}\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}\hat{b}_{\mathbf{g}}^{\dagger}, \hat{c}_{\mathbf{g}}^{\dagger}\hat{c}_{\mathbf{p}}\hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{p}+\mathbf{g}}$) операторами. Средние числа заполнения электронных и фоновых состояний находились с использованием функции Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна соответственно. Математически задача сводилась к нахождению собственных значений энергии состояний и собственных векторов правой части уравнения (1). Далее на основе решения системы линейных уравнений находились коэффициенты разложения исходного чистого состояния $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ по собственным векторам. Квадраты модулей этих коэффициентов для соответствующих собственных энергий представляют собой спектральные компоненты Фурье-разложения временной зависимости межзонной поляризации в процессе ее дефазировки. Мнимая часть собственных энергий игнорировалась как погрешность, возникающая из-за ограничения базиса.

Наибольшее влияние на динамику оператора $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ оказывают состояния базиса $\hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$, у которых энергия $E_{\mathbf{c}+\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\text{LO}}$ близка к энергии $E_{\mathbf{c}k}$. Поэтому размер анализируемой области L подбирался, чтобы заполнить электронными состояниями промежуток энергий, превышающий $\hbar\omega_{\text{LO}}$.

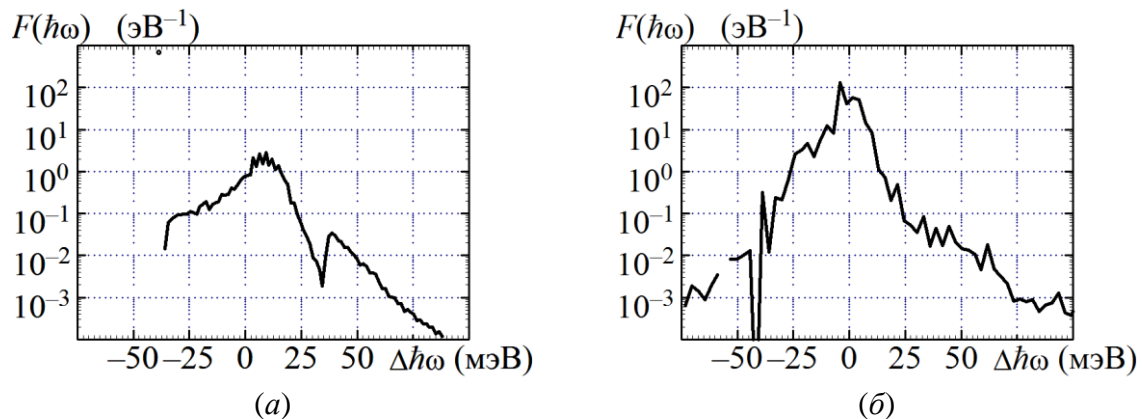


Рис. 1. Форм-фактор затухания межзонной поляризации в GaAs квантовой яме при температуре 296 К и концентрации носителей 10^{12} см^{-2} в двухчастичном (а) и трехчастичном (б) приближении. Размерность базиса ~ 60000 . $L = 1.5 \text{ мкм}$ (а) и 125 нм (б)

Как видно на рис. 1, “фонные повторения” видны в спектре, рассчитанном в двухчастичном приближении, и практически неразличимы в длинноволновой части спектра, полученного в трехчастичном приближении. При этом в длинноволновом крае спектра прослеживается экспоненциальное затухание.

1. Yamanishi M., Lee Y. IEEE J. Quantum Electron. 1987. Vol. 23, № 4. P. 367–370.
2. Елисеев П. Г., Акимов И. В. ФТП. 1998. Т. 32, № 4. С. 472–483.
3. Афоненко А. А., Белявский В. С. Сб. статей 8-го Белорусско-российского семинара “Полупроводниковые лазеры и системы на их основе” (Минск, 17–20 мая 2011). Минск, 2011. С. 60–63.