

磁场下超晶格的子带结构及光跃迁

项 金 真

(清华大学物理系)

夏 建 白

(中国科学院半导体研究所)

1987 年 8 月 3 日收到

用有效质量方法计算了磁场下超晶格的子带结构和光跃迁。详细地介绍了计算方法, 计算了磁能级的能量随磁场和阱宽的变化。发现随磁场和阱宽的增加, 轻空穴态的混入就越显著, 只有最低的三个重空穴态还基本保持原来的特性。计算中还发现第三轻空穴带对得到收敛的解是必不可少的。最后讨论了磁光跃迁几率和迴旋共振的有效质量。

一、引 言

超晶格是近十几年来发展起来的一种新型材料, 发展速度很快, 人们正加紧对它进行研究。光吸收是研究带结构的一种好办法, Rogers 等做了磁光吸收实验, 对超晶格的带结构作了初步的探讨^[1]。Eric Yang 等人用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰法计算了在磁场下异质结的空穴能级^[2], 研究了磁能级随磁场强度的变化规律。汤惠等人计算了在没有外场作用时的超晶格空穴子带结构^[3], 在没有外场时轻重空穴带是二重简并的, $E-k$ 关系偏离抛物线关系。至今, 磁场下超晶格的子带结构还没人计算过。本文利用 Luttinger-Kohn 有效质量理论计算了磁场下超晶格的子带能级, 对能级随势阱宽度及磁场强度的变化作了研究。

二、计算方法

1. 超晶格中电子的能级与波函数

在有效质量近似下, 超晶格模型中电子的哈密顿量可以写成

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(z), \quad (1)$$

式中 $V(z)$ 为如图所示的 Kronig-Penney 势。阱宽和势垒宽度分别取为 d 和 l , 势垒高

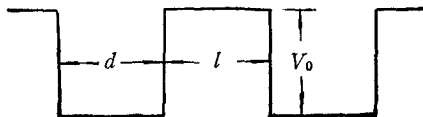


图 1 超晶格中的周期势

度用 V_0 表示, 则 $V(z)$ 的解析式为

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & n(l+d) \leq |z| \leq \frac{l}{2} + n(l+d), \\ 0 & \frac{l}{2} + n(l+d) < |z| < \frac{l}{2} + d + n(l+d). \end{cases} \quad (2)$$

我们知道, $H = \frac{p^2}{2m^*}$ 的本征态为

$$\phi_e = e^{ikz}. \quad (3)$$

我们以此本征态为基来表示超晶格中电子的波函数, 显然具有超晶格周期性的 $V(z)$ 只会把 k 相差超晶格倒格矢 $n\bar{K}$ (其中 n 为整数, $K = 2\pi/(l+d)$) 的基函数耦合起来. 因此超晶格中电子的本征态用基函数展开应具有下列形式:

$$\psi = e^{ikz} \sum_n c_n e^{inKz}. \quad (4)$$

哈密顿量 H 在组成波函数 ψ 的各基函数间的对角元为

$$\frac{\hbar^2(k+nK)^2}{2m^*} + \frac{l}{d+l} V_0, \quad (5)$$

非对角元

$$\begin{aligned} \langle n|V(z)|n' \rangle &= \frac{1}{d+l} \int_{-\frac{l+d}{2}}^{\frac{l+d}{2}} e^{i(n'-n)Kz} V(z) dz \\ &= V_0 \sin \left[\frac{l\pi(n'-n)}{d+l} \right] / [l\pi(n'-n)]. \end{aligned} \quad (6)$$

解此哈密顿矩阵就可得超晶格中电子的能量本征值和本征矢量.

2. 磁场下超晶格的子能级

在半导体 GaAs 价带顶, 若不考虑自旋, 它是三重简并的. 考虑自旋后变成为六重简并. 再考虑自旋轨道耦合后, 能级就分裂为二个能级: 一个能级为四重简并能级, 相对应的角动量为 $J = 3/2$; 另一个为二重简并能级, 相对应的角动量为 $J = 1/2$. 四重简并能级在上, 二重简并能级在下. 在回旋共振、磁光吸收实验中起主要作用的为四重简并能级, 因此我们在此只考虑此能级.

在 GaAs, Ge 等半导体中, 空穴的哈密顿量为^[4]

$$\begin{aligned} D = \frac{1}{m} & \left\{ \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \frac{1}{2} k^2 - \gamma_1 (k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2) \right. \\ & - 2\gamma_3 (\{k_x k_y\} \{J_x J_y\} + \{k_y k_z\} \{J_y J_z\} + \{k_z k_x\} \{J_z J_x\}) \\ & \left. + \frac{e}{c} \kappa \mathbf{J} \cdot \mathbf{H} + \frac{e}{c} q (J_x^3 H_x + J_y^3 H_y + J_z^3 H_z) \right\}, \end{aligned} \quad (7)$$

式中 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \kappa, q$ 为 Luttinger 有效质量参数, m 为电子质量. 式中已把空穴能量取正.

$$k_\alpha = p_\alpha + \frac{e}{c} A_\alpha, \quad \{k_\alpha k_\beta\} = \frac{1}{2} (k_\alpha k_\beta + k_\beta k_\alpha). \quad (8)$$

若在 GaAs [100] 方向外加一磁场, 且取此方向为 z 方向, 即 $H_x = H_y = 0, H_z = H$

则有

$$(k_x, k_y) = \frac{1}{i} \frac{e}{c} H \quad (\text{在以下的讨论中 } \hbar = 1). \quad (9)$$

在没有磁场时, \mathbf{k} 的各分量是相互对易的, 然而有外加磁场时, 各分量间不再对易.

引入两个变量 P, Q 按下式定义:

$$k_x = \left(\frac{eH}{c}\right)^{1/2} P, \quad k_y = \left(\frac{eH}{c}\right)^{1/2} Q. \quad (10)$$

根据(9)式, P, Q 之间的对易关系为

$$(P, Q) = \frac{1}{i}. \quad (11)$$

由此可以看出, P, Q 为一对正则变量. 因此可以引入湮没算符与产生算符 a, a^+

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (P - iQ), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (P + iQ). \quad (12)$$

记谐振子的本征波函数为 u_n , 则有以下关系:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (P^2 + Q^2) u_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right) u_n, \\ a u_n &= \sqrt{n} u_{n-1}, \quad a^+ u_n = \sqrt{n+1} u_{n+1}. \end{aligned} \quad (13)$$

取角动量矩阵为

$$\begin{aligned} J_x &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\sqrt{3}i/2 & 0 \\ 0 & 0 & i & -\sqrt{3}i/2 \\ \sqrt{3}i/2 & -i & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}i/2 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ J_z &= \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (14)$$

把以上的式子代入(7)式得

$$D = \begin{pmatrix} D_1 & -g_2 a^{+2} - g_1 a^2 & -g_3 a k'_x & 0 \\ -g_1 a^{+2} - g_2 a^2 & D_1 & 0 & g_3 a k'_x \\ -g_3 a^+ k'_x & 0 & D_3 & -g_2 a^{+2} - g_1 a^2 \\ 0 & g_3 a^+ k'_x & -g_1 a^{+2} - g_2 a^2 & D_4 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

式中

$$\begin{aligned} D_1 &= \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2\right) \left(\frac{1}{2} k_x'^2 + a^+ a + \frac{1}{2}\right) \\ &\quad - \gamma_2 \left[\frac{3}{2} \left(a^+ a + \frac{1}{2}\right) + \frac{9}{4} k_x'^2\right] + \frac{3}{2} \kappa + \frac{27}{8} q, \\ D_2 &= \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2\right) \left(\frac{1}{2} k_x'^2 + a^+ a + \frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -r_2 \left[\frac{7}{2} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{4} k_x'^2 \right] - \frac{1}{2} k - \frac{1}{8} q, \\
D_3 = & \left(r_1 + \frac{5}{2} r_2 \right) \left(\frac{1}{2} k_x'^2 + a^+ a + \frac{1}{2} \right) \\
& - r_2 \left[\frac{7}{2} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{4} k_x'^2 \right] + \frac{1}{2} k + \frac{1}{8} q, \\
D_4 = & \left(r_1 + \frac{5}{2} r_2 \right) \left(\frac{1}{2} k_x'^2 + a^+ a + \frac{1}{2} \right) \\
& - r_2 \left[\frac{3}{2} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) + \frac{9}{4} k_x'^2 \right] - \frac{3}{2} k - \frac{27}{8} q, \\
k_x' = & \left(\frac{eH}{c} \right)^{-1/2} k_x, \quad g_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} (r_1 + r_3), \\
g_2 = & \frac{\sqrt{3}}{2} (r_2 - r_3), \quad g_3 = \sqrt{6} r_3.
\end{aligned}$$

在 (15) 式中, 已把能量单位取成 eH/mc . (15) 式还可以写成

$$D = H_{\perp} + H_{\parallel}, \quad (16)$$

式中 H_{\perp} , H_{\parallel} 分别为

$$\begin{aligned}
H_{\perp} = & \left[\begin{array}{cccc}
(\gamma_1 + \gamma_2) \left(n + \frac{1}{2} \right) & -g_2 a^{+2} - g_1 a^2 & 0 & 0 \\
+ \frac{3}{2} K & & & \\
-g_1 a^{+2} - g_2 a^2 & (\gamma_1 - \gamma_2) \left(n + \frac{1}{2} \right) & 0 & 0 \\
& -\frac{1}{2} K & & \\
0 & 0 & (\gamma_1 - \gamma_2) \left(n + \frac{1}{2} \right) & -g_2 a^{+2} - g_1 a^2 \\
& & + \frac{1}{2} K & \\
0 & 0 & -g_1 a^{+2} - g_2 a^2 & (\gamma_1 + \gamma_2) \left(n + \frac{1}{2} \right) \\
& & & -\frac{3}{2} K
\end{array} \right], \\
H_{\parallel} = & \left[\begin{array}{cccc}
\left(\frac{\gamma_1}{2} - r_2 \right) k_x'^2 & 0 & -g_3 k_x' a & 0 \\
0 & \left(\frac{\gamma_1}{2} + r_2 \right) k_x'^2 & 0 & g_3 k_x' a \\
-g_3 k_x' a^+ & 0 & \left(\frac{\gamma_1}{2} + r_2 \right) k_x'^2 & 0 \\
0 & g_3 k_x' a^+ & 0 & \left(\frac{\gamma_1}{2} - r_2 \right) k_x'^2
\end{array} \right]. \quad (17)
\end{aligned}$$

在有效质量近似下,外加磁场沿超晶格 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ [100] 方向时,超晶格中的空穴哈密顿量为

$$H = H_{\perp} + H_{\parallel} + V(z), \quad (18)$$

式中 $V(z)$ 为如图 1 所示的超晶格周期势。

若不考虑非对角项的影响,在 xy 平面内空穴的运动就象谐振子一样,其能级为一系列分立的朗道能级,而 z 方向的运动就象 Kronig-Penney 势中的电子一样,其能量亦量子化为一些分立能级。

先考虑 z 方向的运动,忽略非对角项,其哈密顿量为

$$H(z) = \begin{pmatrix} \left(\frac{\gamma_1}{2} - \gamma_2\right) k_z^2 & & & 0 \\ & \left(\frac{\gamma_1}{2} + \gamma_2\right) k_z^2 & & \\ & & \left(\frac{\gamma_1}{2} + \gamma_2\right) k_z^2 & \\ 0 & & & \left(\frac{\gamma_1}{2} - \gamma_2\right) k_z^2 \end{pmatrix} + V(z). \quad (19)$$

四个分量是相互独立的,对每一个分量可以单独处理。

对重空穴,哈密顿量为

$$H_h = \left(\frac{\gamma_1}{2} - \gamma_2\right) k_z^2 + V(z). \quad (20)$$

这相对于超晶格中有效质量为 $m_h = m/(\gamma_1 - 2\gamma_2)$ 的电子的哈密顿量。它的本征值与本征波函数已经讨论过,其波函数为

$$\phi_h = e^{ikz} \sum_n c_n^m e^{inKz}. \quad (21)$$

同理,对轻空穴,有效质量为 $m_l = m/(\gamma_1 + 2\gamma_2)$, 波函数为

$$\phi_l = e^{ikz} \sum_n d_n^{m'} e^{inKz}. \quad (22)$$

空穴在 z 方向的运动可以用 ϕ_h, ϕ_l 来描述。

考虑非对角项后,轻、重空穴间不再相互独立,四个分量之间有耦合。且从哈密顿量中可以看出, xy 平面内的运动和 z 方向的运动也不是相互独立的, z 方向的运动将影响 xy 平面内的运动。因此空穴的波函数不象电子那样简单地谐振子波函数 u_n 与 z 方向的轻重空穴波函数 ϕ_l, ϕ_h 的乘积 $u_n\phi_l, u_n\phi_h$ 。但是,可以以此为基础,将超晶格中空穴波函数展开。其展开式应该有下列形式:

$$\psi = \begin{pmatrix} \sum_{nm} a_{nm} u_n \phi_{hm} \\ \sum_{nm'} b_{nm'} u_n \phi_{lm'} \\ \sum_{nm'} c_{nm'} u_n \phi_{lm'} \\ \sum_{nm} d_{nm} u_n \phi_{hm} \end{pmatrix}. \quad (23)$$

将此式代入到 $D\phi = E\phi$ 中去就得到久期方程, 解此久期方程就可以求得各子带的能量. 严格地说, (23) 式中 n, m, m' 都应取到无穷, 但计算结果表明, 只需取前几项就可以了. 若分别取 N, M, M' , 则就是解一个 $2(M + M') \times N$ 阶的久期方程问题.

三、超晶格的磁能级

在计算中, 超晶格 $\text{GaAs-Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ 的有效质量参数取为 $\gamma_1 = 6.85, \gamma_2 = 2.1,$

$\gamma_3 = 2.9, \kappa = 1.2, q = 0^{[5]}$, 禁带宽度差 $\Delta E_g = 250 \text{ meV}$, 导带部分所占的百分比为 $\Delta E_c / \Delta E_g = 60\%$, 即 $\Delta E_c = 150 \text{ meV}, \Delta E_v = 100 \text{ meV}$. 选取轻、重空穴前三个能级的波函数与前十个谐振子波函数的组合作为基函数. 计算结果见图 2, 图 3.

在阱宽和垒宽不变的情况下, 最低十个磁能级随磁场强度的变化曲线如图 2. 随着磁场的增加, 各磁能级的能量增加. 图 2 中用符号标记了每个态的特性. 我们规定由每个态波函数(23)式展开中系数最大的项代表了该态的主要特性. 因此 a_{nm} 和 d_{nm} 就代表重空穴的第 m 个子带所产生的第 n 个朗道能级. 同理 b_{nm} 和 c_{nm} 就代表了轻空穴带产生的朗道能级. 在磁场很小时, 最低的态都是由第一个重空穴子带产生的朗道能级 a_{n1} 和 d_{n1} , 这时简并解除. 图 2

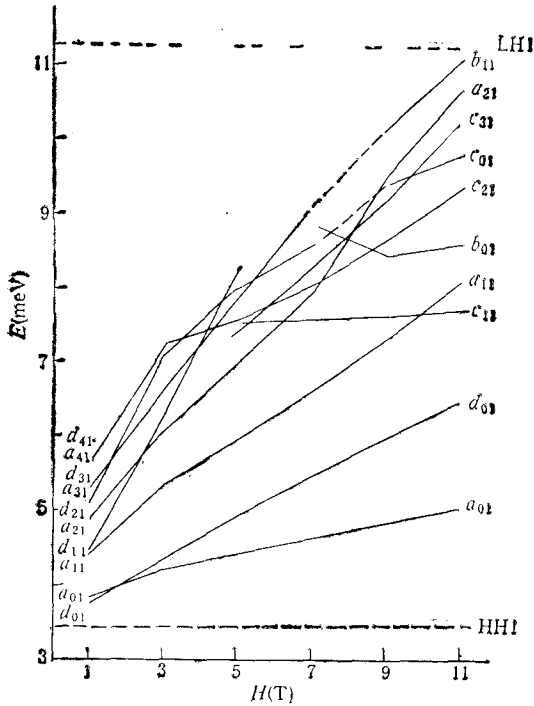


图 2 磁能级随磁场变化关系曲线 阱宽 150 \AA ; 垒宽 150 \AA

中上、下两条虚线分别代表没有磁场时 $k_{||} = 0$ 的最低轻、重空穴子能级位置 (LH1 和 HH1). 由图 2 可见, 当磁场大于 3 T 时, 虽然距离 LH1 还很远, 但有许多轻空穴能级 (c_{nm}) 与重空穴相混合, 以至使重空穴能级逐渐转化为轻空穴能级 (相对而言). 当磁场为 10 T 时, 只有 a_{01}, d_{01} 和 a_{11} 还保持了自己的特性. 这是因为 LH1 和 HH2 的能量很接近, 轻空穴第一子带与重空穴第二子带的朗道能级之间有很强的相互作用, 降低了轻空穴的能量.

在磁场强度和垒宽不变的情况下, 磁能级随势阱宽度 d 的变化关系曲线如图 3 所示. 由于在势阱中, 重、轻空穴的子能级随阱宽的变化很剧烈 (在无限势垒下, $1/d^2$), 为了表示清楚起见, 将纵坐标改为磁能级能量 E 与 d^2 的乘积. 由图 3 可见, 当阱宽小于 100 \AA 时, 最低十个能级还基本是第一重空穴子带产生的朗道能级. 当阱宽大于 100 \AA 时, 轻空穴能级开始混入. 当阱宽为 200 \AA 时, 只有 a_{01}, d_{01}, a_{11} 还保持原来特性.

我们还取了 3 个重空穴能级, 2 个轻空穴能级, 10 个谐振子能级进行计算, 发现其结

果与取 3 个重空穴能级, 3 个轻空穴能级, 10 个谐振子能级的结果相差较大. 我们又用取 5 个重空穴能级, 3 个轻空穴能级, 20 个谐振子能级的结果进行验算, 其结果表明取 3 个重空穴能级, 3 个轻空穴能级、10 个谐振子能级较合适. 这说明了第三个轻空穴子带在决定最低的朗道能级能量中也起着不可忽略的作用. 表面上看第三个轻空穴子带能量是很高的, 以势阱、势垒都为 150 \AA 的情形为例, 最低的重、轻空穴子能级 ($k_{\parallel} = 0$) 能量分别为

重空穴: $3.46, 13.78, 30.77$ meV;

轻空穴: $11.29, 43.96, 88.54$ meV.

当磁场为 5 T 时, 最低的十个朗道能级依次为

$$a_{01}, d_{01}, a_{11}, a_{21}, c_{31}, c_{11}, c_{21}, a_{31}, c_{41}, d_{11}, \quad (24)$$

式中 c_{31}, c_{11}, c_{21} 和 c_{41} 都分别明显地包含了 c_{33}, c_{13}, c_{23} 和 c_{43} 的分量. 由哈密顿量 (17) 式可见, c_{n1} 与

c_{n3} 的基函数之间没有直接相互作用, 但由 H_{\parallel} 中的非对角项 $-g_3 k_z a$, 它们又都与 $a_{n-1,2}$ 的基函数有相互作用 (设为 V_1 和 V_3). 这些相互作用产生的四级微扰能量为

$$\Delta E = \frac{V_1^2 V_3^2}{(E_1 - E_3)(E_1 - E_2)^2}, \quad (25)$$

式中 E_1, E_3 和 E_2 分别为 c_{n1}, c_{n3} 和 $a_{n-1,2}$ 对应的零级能量. 由于 E_1 和 E_2 很接近, 虽然 $(E_1 - E_3)$ 很大, 但 ΔE 还是不可忽视的.

四、磁光吸收和迴旋共振

已知超晶格朗道能级的波函数 (23) 式, 就可计算磁光吸收的跃迁几率. 根据有效质量理论^[4], 真正的价带朗道能级波函数应该是 (23) 式中的四分量分别乘以四重简并价带的带边波函数,

$$u_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY)\uparrow,$$

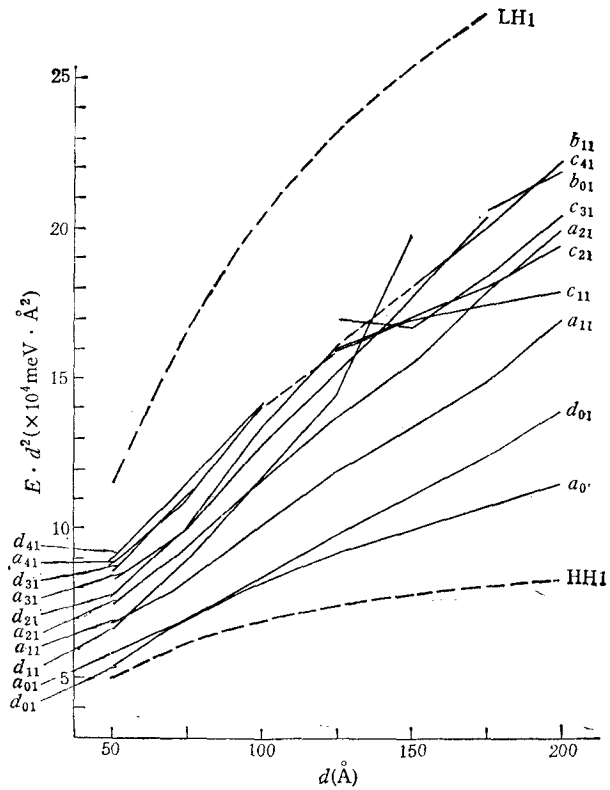


图 3 磁能级随阱宽的变化关系曲线 垒宽 150 \AA ; 磁场强度 5 T

$$u_{20} = -\frac{1}{\sqrt{6}} [(X - iY)\uparrow + 2Z\downarrow], \quad (26)$$

$$u_{30} = -\frac{1}{\sqrt{6}} [(X + iY)\downarrow - 2Z\uparrow],$$

$$u_{40} = \frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY)\downarrow,$$

式中 X, Y, Z 为价带顶轨道波函数, 箭头代表自旋分量. 导带的朗道能级波函数为

$$\phi_e = u_n \Phi_{em} |S\uparrow\rangle \text{ (或 } |S\downarrow\rangle), \quad (27)$$

式中 Φ_{em} 为在 z 方向上的电子有效质量波函数, S 为导带边轨道波函数. 由 (23), (26) 和 (27) 式可求得磁光跃迁的矩阵元

$$\begin{aligned} \langle \phi_{enm\uparrow} | p_x | \phi_h \rangle &= p \sum_{m'} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} a_{nm'} S_{mm'}^{sh} - \frac{1}{\sqrt{6}} b_{nm'} S_{mm'}^{el} \right], \\ \langle \phi_{enm\downarrow} | p_x | \phi_h \rangle &= p \sum_{m'} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} d_{nm'} S_{mm'}^{sh} - \frac{1}{\sqrt{6}} c_{nm'} S_{mm'}^{el} \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

类似地可求得 p_y 和 p_z 的矩阵元, 式中

$$p = \langle S | P_x | X \rangle = \langle S | P_y | Y \rangle = \langle S | P_z | Z \rangle, \quad (29)$$

$S_{mm'}$ 为电子和空穴波函数 Φ_e 和 Φ_h, Φ_l 的重叠积分,

$$\begin{aligned} S_{mm'}^{sh} &= \langle \Phi_{em} | \Phi_{hm'} \rangle, \\ S_{mm'}^{el} &= \langle \Phi_{em} | \Phi_{lm'} \rangle. \end{aligned} \quad (30)$$

磁光吸收通常用圆偏振光, 这时用 $\frac{1}{\sqrt{2}}(p_x - ip_y)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(p_x + ip_y)$ 代替 p_x, p_y .

相应的磁光跃迁矩阵元的平方为

$$\begin{aligned} Q_{nn'}(p_-) &= \frac{p^2}{2m} \left\{ \left[\sum_{m'} a_{nm'} S_{mm'}^{sh} \right]^2 + \frac{1}{3} \left[\sum_{m'} c_{nm'} S_{mm'}^{el} \right]^2 \right\}; \\ Q_{nn'}(p_+) &= \frac{p^2}{2m} \left\{ \left[\sum_{m'} d_{nm'} S_{mm'}^{sh} \right]^2 + \frac{1}{3} \left[\sum_{m'} b_{nm'} S_{mm'}^{el} \right]^2 \right\}; \\ Q_{nn'}(p_z) &= \frac{p^2}{2m} \cdot \frac{2}{3} \left\{ \left[\sum_{m'} b_{nm'} S_{mm'}^{el} \right]^2 + \left[\sum_{m'} c_{nm'} S_{mm'}^{el} \right]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (31)$$

计算中对电子的正、负自旋态进行求和, 参数 (29) 式取为

$$\frac{p^2}{2m} = 18.71 \text{ eV}. \quad (32)$$

由 (31) 式可见, 重空穴态 a_n 和 d_n 分别对两个圆偏振光起作用, 而轻空穴态 c_n 和 b_n 主要对 z 方向偏振光起作用. 表 1, 2, 3 分别列出了阱宽、垒宽为 150 \AA , $H = 5 \text{ T}$ 的情况下, 最低的十个空穴朗道能级至最低五个电子朗道能级之间的磁光跃迁矩阵元的平方. 由表可见, 其中主要的跃迁与态的特性 (24) 式都是一一对应的.

图 4 为根据表中的跃迁矩阵元平方和相应的跃迁能量画出的理论磁光光谱图. 实线和虚线分别代表两种偏振. 由图清楚可见几个主要的跃迁主峰, 此外由于轻空穴的混入, 在主峰周围还有一些伴峰. 随着 n 的增大, 左、右偏振峰相距越来越远.

表 1 磁光跃迁矩阵元平方, $p_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_x - ip_y)$ (单位: eV)

空穴态 n' \ 电子态 n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	15.38	0	0	0	0	0	0	0	0.75	0
1	0	0	11.85	0	0	2.74	0	0	0	0
2	0	0.09	0	9.42	0	0	2.94	0	0	0
3	0	0	0	0	2.23	0	0	7.94	0	0.88
4	0.04	0	0	0	0	0	0	0	2.13	0

表 2 磁光跃迁矩阵元平方, $p_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_x + ip_y)$ (单位: eV)

空穴态 n' \ 电子态 n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	0	18.00	0	0.11	0	0	0.43	0	0	0
1	0	0	0	0	5.58	0	0	0.32	0	11.57
2	0.71	0	0	0	0	0	0	0	4.56	0
3	0	0	1.57	0	0	4.32	0	0	0	0
4	0	0.07	0	2.08	0	0	3.70	0	0	0

表 3 磁光跃迁矩阵元平方, P_x (单位: eV)

空穴态 n' \ 电子态 n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	0	0	0	0.22	0	0	0	0	1.51	0
1	0	0	0	0	0	5.48	0	0.65	0	0
2	1.41	0.18	0	0	0	0	5.89	0	0	0
3	0	0	3.15	0	4.46	0	0	0	0	1.77
4	0	0	0	4.15	0	0	0	0	4.26	0

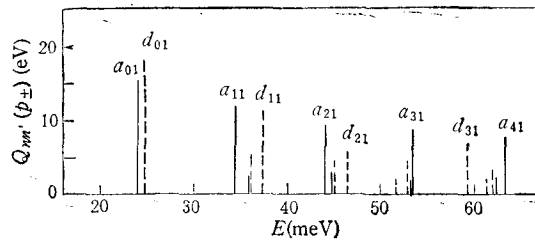


图 4 超晶格磁光跃迁的理论光谱图 $d = 150 \text{ \AA}$, $H = 5T$; 能带原点是禁带宽度; 实线和虚线分别代表两种圆偏振, 线段长度代表光学矩阵元平方的大小

如果能进行超晶格的量子回旋共振实验, 则由 a_{01} 至 a_{11} 的跃迁, 可定出回旋共振的重空穴有效质量,

$$m^* = \frac{1}{(E_{11} - E_{01})} \cdot \frac{\hbar e H}{c} \quad (33)$$

图 5 为在不同磁场和不同阱宽下的重空穴有效质量值, 虚线表示的为 $(\gamma_1 - 2\gamma_2)^{-1}$. 由图可见, 在小磁场和小阱宽下, 实验值与理论值偏离较大.

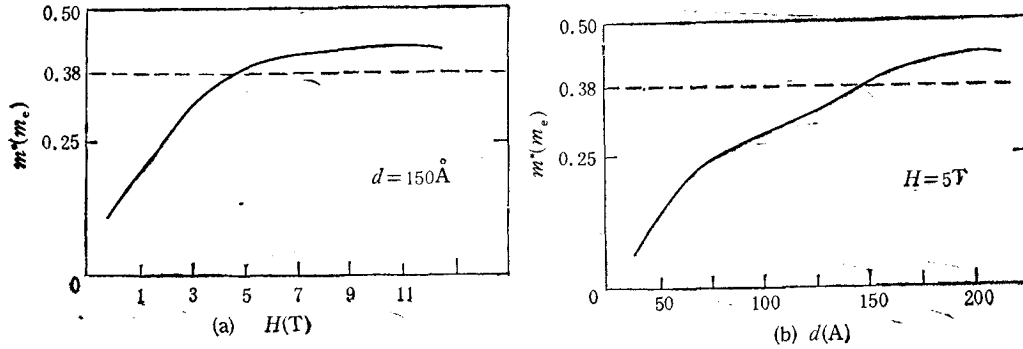


图5 超晶格重空穴量子回旋共振有效质量与磁场 (a)、阱宽 (b) 关系图 虚线值是 $(\gamma_1 - 2\gamma_2)^{-1}$

作者感谢朱邦芬同志的帮助和讨论。

- [1] D. C. Rogers, J. Singleton, and R. J. Nicholas, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 4002.
- [2] S. R. Eric Yang, D. A. Broido and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **B32** (1985), 6630.
- [3] 汤惠、黄昆, *半导体学报*, **8**(1987), 1.
- [4] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.*, **102** (1956), 1030.
- [5] K. Hess, D. Bimberg, N. O. Lipari, J. U. Fischbach and M. Altarelli, in *Proceeding of the VIII International Conference on the Physics of Semiconductors*, (1976), p. 142.

HOLE SUBBANDS AND OPTICAL TRANSITIONS OF SUPERLATTICES IN MAGNETIC FIELD

XIAN JIN-ZHEN

(Department of Physics, Qinghua University)

XIA JIAN-BAI

(Institute of Semiconductors, Academia Sinica)

ABSTRACT

Hole subbands and optical transitions of superlattices in magnetic field are calculated on the basis of the Luttinger-Kohn effective mass theory. The method of calculation is described in detail, and the dependences of Landau energy levels on magnetic fields and well widths are presented. It is found that when magnetic field or well width increases the intermixing of heavy and light holes becomes obvious, only the three lowest states still keep their original characters of heavy holes. It is also found that the third light hole subband is necessary for the convergence of solutions. The magnetic-optical transition probabilities and the effective masses of cyclotron resonance are discussed.