

## Полярон в сверхрешетке с $\delta$ -образными потенциалами

© Н.М. Гусейнов, Н.Ф. Гашимзаде, А.Т. Гаджиев

Институт физики Академии наук Азербайджана,  
370143 Баку, Азербайджан

(Поступила в Редакцию 19 февраля 1996 г.  
В окончательной редакции 20 мая 1996 г.)

Рассмотрена задача о поляронном спектре в сверхрешетке с узкими квантовыми ямами и относительно широкими потенциальными барьерами. Для решения проблемы выбран  $\delta$ -образный потенциал сверхрешетки. Такая модель адекватна нашей задаче, если глубина проникновения волновой функции электрона в область барьера значительно превосходит ширину квантовой ямы. Рассматривается полярон слабой связи при низкой температуре. Учитываются только объемные фононы. При этих предположениях получены выражения для сдвига поляронной энергии и массы полярона. Для апробирования модели сделаны численные расчеты для сверхрешетки InAs–GaSb, где квантовые ямы достаточно глубоки (энергетический разрыв зон проводимости InAs и GaSb равен 830 meV), узки (ширина квантовой ямы соответствует ширине монослоя InAs 6 Å), толщина барьеров, соответствующая ширине слоев GaSb, равна 150 Å. Сделанное предположение о том, что глубина проникновения волновой функции значительно превышает ширину барьера, хорошо выполняется.

Современная технология позволяет изготавливать сверхрешетки с толщиной компонент в несколько и даже в одну молекулу. Мы будем рассматривать сверхрешетки с узкими квантовыми ямами и относительно широкими потенциальными барьерами. Чтобы решить проблему полярона, необходимо знать спектр электрона и его волновые функции. Если ширина квантовой ямы равна нескольким постоянным решеткам, то возникает проблема выбора потенциала сверхрешетки. Иногда потенциал сверхрешетки описывают моделью Кронига–Пенни. Некоторые авторы предпочитают выбирать потенциал в виде последовательности треугольных ям [1]. В этой работе мы будем решать проблему полярона, используя модель  $\delta$ -образного потенциала сверхрешетки. Такая модель адекватна нашей проблеме, если глубина проникновения электронной волновой функции в область барьера существенно превышает ширину квантовой ямы.

### 1. Энергия полярона

Уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \Psi = E\Psi, \quad (1)$$

где

$$V(z) = -\frac{\hbar^2 \Omega}{m} \sum_j \delta \left[ z - \frac{a}{2}(j+1) \right],$$

$z$  — координата вдоль оси сверхрешетки,  $a$  — период сверхрешетки,  $m$  — эффективная масса электрона в компоненте сверхрешетки, связанной с потенциальным барьером,  $\Omega$  — коэффициент, связанный с мощностью  $\delta$ -потенциала,  $\nabla_{\perp}^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ , где  $x, y$  — координаты электрона в плоскости слоя.

Используя стандартное преобразование,  $\Psi = \exp(i\mathbf{k}_{\perp} \mathbf{r}_{\perp}) \varphi(z)$ , где  $\mathbf{k}_{\perp}$  — компонента волнового вектора в плоскости слоя, уравнение (1) можно привести к такому виду

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \varphi(z) = \varepsilon \varphi(z), \quad (2)$$

где  $\varepsilon = E - \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m$ .

Будем рассматривать отрицательные значения энергии  $\varepsilon < 0$ . Обозначая  $\varkappa^2 = -2m\varepsilon/\hbar^2$ , получим для интервала  $-a/2 < z < a/2$  следующее выражение:

$$\frac{\partial \varphi_0^2(z)}{\partial z^2} = \varkappa^2 \varphi_0(z). \quad (3)$$

Индекс 0 означает только принадлежность волновой функции интервалу  $-a/2 < z < a/2$ . Решением уравнения (3) является

$$\varphi_0(z) = Ae^{\varkappa z} + Be^{-\varkappa z}. \quad (4)$$

Используя теорему Блоха, можно записать волновую функцию  $\varphi_1(z)$ , относящуюся к интервалу  $a/2 < z < 3a/2$ , в следующем виде:

$$\varphi_1(z) = e^{ik_z a} \left[ Ae^{\varkappa(z-a)} + Be^{-\varkappa(z-a)} \right], \quad (5)$$

$\delta$ -образный характер потенциала сверхрешетки приводит к следующим граничным условиям:

$$\begin{aligned} \varphi_1(a/2+0) &= \varphi_0(a/2-0), \\ \varphi_1'(a/2+0) &= \varphi_0'(a/2+) - 2\Omega \varphi_0(a/2). \end{aligned} \quad (6)$$

Подставляя (4) и (5) в (6), из условия разрешимости системы (6) мы получим выражение, описывающее электронный спектр

$$\cos k_z a = \operatorname{ch} \varkappa a - \frac{\Omega}{\varkappa} \operatorname{sh} \varkappa a. \quad (7)$$

Выражение (7) в точке  $k_z = 0$  равно

$$\text{th} \frac{\varkappa_0 a}{2} = \frac{\Omega}{\varkappa_0}. \quad (8)$$

При  $k_z a \ll 1$  из уравнения (7) можно получить такое выражение электронного спектра

$$\Delta E_k = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \varkappa_0^2}{2m} + \Delta(1 - \cos k_z a), \quad (9)$$

где

$$\Delta = \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{2\varkappa_0 a}{\text{sh} \varkappa_0 a [1 - (\Omega/\varkappa_0)^2 (1 - 2/\Omega a)]},$$

$2\Delta$  — ширина мини-зоны. В области  $\varepsilon < 0$  существует единственная мини-зона. Соотношение между коэффициентами  $A$  и  $B$  получается из первого граничного условия (6). Далее коэффициенты  $A$  и  $B$  могут быть определены из условия нормировки волновой функции электрона на единицу. Волновая функция электрона имеет следующий вид:

$$\Phi_n = \frac{A_{k_z}}{(2V)^{1/2}} e^{i\mathbf{k}_{\perp} \mathbf{r}_{\perp}} e^{ik_z n a} \left[ e^{\varkappa(z-na)} - \frac{e^{ik_z a - \varkappa a/2} - e^{\varkappa a/2}}{e^{ik_z a + \varkappa a/2} - e^{-\varkappa a/2}} e^{-\varkappa(z-na)} \right], \quad (10)$$

где  $n$  — номер барьера,

$$A_{k_z} = \left( \frac{\text{sh} \varkappa a}{\varkappa a} - \frac{1 - \cos k_z a \text{ ch} \varkappa a}{\text{ch} \varkappa a - \cos k_z a} \right)^{-1/2},$$

$V$  — объем сверхрешетки.

Считается, что температура достаточно низкая, т.е. число оптических фононов в нашей системе экспоненциально мало. Таким образом, во втором порядке теории возмущения полярная поправка к энергии определяется следующим образом:

$$\Delta E_k = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \frac{|M_{k \rightarrow k'}^+|^2}{E_k - E_{k'} - \hbar\omega_0}, \quad (11)$$

где  $\mathbf{q}$  — волновой вектор фонона,  $\hbar\omega_0$  — энергия продольного фонона при  $q = 0$ ,  $M^+$  — матричный элемент, соответствующий испусканию ЛО-фонона

$$M_{k \rightarrow k'}^+ = \int \Psi_k e \varphi_q \Phi_{k'}^* dV, \quad (12)$$

$e$  — заряд электрона,  $\varphi_q$  — потенциал, создаваемый одним оптическим фононом. При рассмотрении сверхрешеток с узкими квантовыми ямами роль интерфейсных фононов может быть существенна [2]. Но поскольку цель работы — показать правомерность использования модели сверхрешетки с  $\delta$ -образными потенциалами, для простоты достаточно рассмотреть только объемные фононы. Такое рассмотрение может

изменить лишь количественные результаты не затрагивая качественных выводов. Для  $\varphi_q$  имеем

$$\varphi_q = \left( \frac{\hbar}{2V\rho\omega_0} \right)^{1/2} \frac{4\pi\bar{\gamma}}{iq} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (13)$$

где  $\rho$  — плотность полупроводника,  $\bar{\gamma} = (\rho\omega_0^2/4\pi\bar{\varepsilon})^{1/2}$ ,  $\bar{\varepsilon}$  — приведенная диэлектрическая постоянная, используемая в полярной теории.

Подставляя (10) и (13) в выражение (12), получим

$$M_{k \rightarrow k'}^+ = \left( \frac{\hbar}{2V\rho\omega_0} \right)^{1/2} \frac{4\pi\bar{\gamma}\bar{\varepsilon}i}{q} \times \delta_{\mathbf{k}'_{\perp}; \mathbf{k}_{\perp} - \mathbf{q}_{\perp}} \delta_{k'_z; k_z - q_z - G_z} I_{k_z \rightarrow k'_z}, \quad (14)$$

где

$$G_z = \frac{2\pi m}{a}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

$$I_{k_z \rightarrow k'_z} = \frac{A_{k_z} A_{k'_z}}{B_{k_z} B_{k'_z}} \text{Re}[(D^+ B_{k'_z}^* - D^- B_{k_z}^*) B_{k_z}],$$

$$B_{k_z} = \sin(k_z - i\varkappa)a/2,$$

$$D^{+-} = \frac{\sin[q_z + i(\varkappa \pm \varkappa')a/2]}{[q_z + i(\varkappa \pm \varkappa')a/2]}. \quad (15)$$

Выражения  $A_{k'}$  и  $B_{k'}$  зависят от  $k'_z$  и  $\varkappa'$ , где  $\varkappa'$  определяется из (7) после замены  $k_z \rightarrow k'_z$ .

Мы ввели следующие обозначения:

$$x_0 = \varkappa_0 a/2, \quad x = q_z a/2, \quad A = \Omega a/2,$$

$$z(x) = [x_0^2 - p(1 - \cos 2x)]^{1/2},$$

$$p = 2x_0 \text{sh}^{-1} 2x_0 \left[ 1 - \left( \frac{A}{x_0} \right)^2 \left( 1 - \frac{1}{A} \right) \right]^{-1}.$$

При  $k_z = 0$  квадрат модуля матричного элемента равен

$$|I_{q_z}|^2 = \frac{1}{4} \left( 1 + \frac{\text{sh} 2x_0}{2x_0} \right)^{-1} \left( \frac{\text{sh} 2z}{2z} - \frac{1 - \cos(2x) \text{ ch}(2z)}{\text{ch} 2z - \cos 2x} \right)^{-1} \times (\sin^2(x) \text{ch}^2(z) + \cos^2(x) \text{sh}^2(z))^{-1} \left\{ \frac{1}{x^2 + (x_0 + z)^2} \times [(x_0 + z) + \text{ch}(x_0 + 2z) - (x_0 + z) \text{ch} x_0 \cos 2x - x \sin 2x \text{ sh} x_0] - \frac{1}{x^2 + (x_0 - z)^2} [(x_0 - z) \text{ch}(x_0 - z) - (x_0 + z) \text{ch} x_0 \cos 2x - x \sin 2x \text{ sh} x_0] \right\}. \quad (16)$$

Принимая во внимание (9) и (14), из (11) получим выражение для поляронной поправки к энергии электрона

$$\Delta E_k = -\alpha \hbar \omega_0 \frac{q_0}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty q_\perp dq_\perp \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|I_{k_z \rightarrow k_z - q_z}|^2 dq_z}{(q_z^2 + q_\perp^2) [q_z^2 + q_\perp^2 + \frac{2m\Delta}{\hbar^2}(1 - \cos q_z a)]} \times \left( 1 - \frac{2k_\perp q_\perp \cos \varphi - \frac{2m\Delta}{\hbar^2} [\cos k_z - \cos(k_z - q_z)a]}{q_0^2 + q_\perp^2 + \frac{2m\Delta}{\hbar^2}(1 - \cos q_z a)} \right)^{-1}, \quad (17)$$

где  $q_0 = (2m\omega_0/\hbar)^{1/2}$ ,  $\alpha = (e^4 m / 2\hbar^3 \omega_0 \bar{\epsilon}^2)^{1/2}$  — константа связи Фрелиха,  $\varphi$  — угол между векторами  $\mathbf{q}_\perp$  и  $\mathbf{k}_\perp$ .

Считается, что электроны находятся на дне мини-зоны. Полученное выражение разложим по малому параметру  $2k_\perp q_\perp \cos \varphi / L$  (где  $L = q_0^2 + q_\perp^2 + (2m\Delta/\hbar^2)(1 - \cos q_z a)$ ) до второго члена (первый член разложения равен нулю в результате интегрирования по  $\varphi$ ). Матричный элемент берется при значении  $k_z = 0$ . После интегрирования по  $\varphi$  и  $q_\perp$  получим

$$\Delta E_\perp = \Delta E_0 + \Delta E_1, \quad \Delta E_0 = -\alpha \hbar \omega_0 F_0, \\ \Delta E_1 = -\alpha \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m} F_1, \\ F_n = \int_0^\infty \Phi_n(y) |I(\lambda y)|^2 dy, \quad n = 0, 1. \\ y = q_z / q_0, \quad \lambda = a q_0 / 2. \quad (18)$$

Квадрат матричного элемента  $|I(\lambda y)|^2$  определяется из выражения (16) после замены  $x \rightarrow \lambda y$ ,

$$\Phi_0(y) = \frac{1}{\pi} \frac{\ln \left( \frac{R}{y^2} \right)}{R - y^2}, \\ \Phi_1(y) = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{1}{R^2} - \frac{2y^2}{(R - y^2)^3} \left[ \ln \left( \frac{R}{y^2} \right) + \frac{2y^2}{R} - \frac{y^4}{2R^2} - \frac{3}{2} \right] \right\}, \quad (19)$$

где

$$R = 1 + (2p/\lambda^2) \sin^2 \lambda y.$$

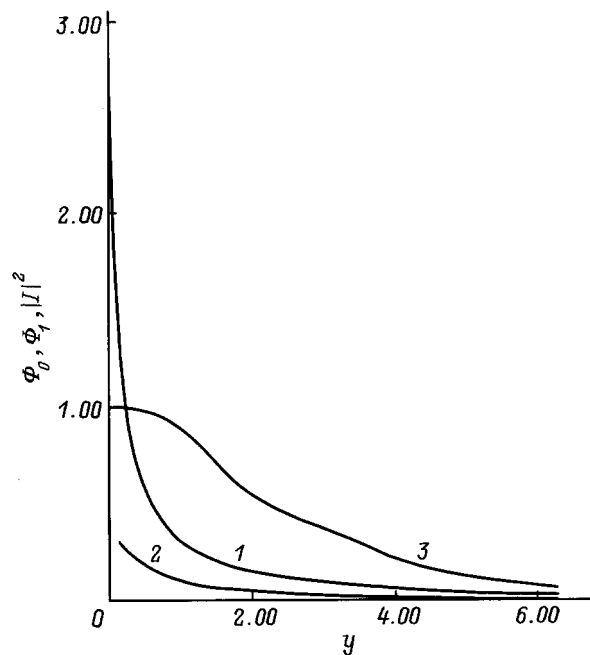
Из полученных выражений (18), (19) можно получить значения  $F_n$ , соответствующие чисто двумерному и трехмерному случаям. Предельный переход к двумерному случаю соответствует  $\Omega a \rightarrow \infty$ . В этом случае из (16), (9) следует, что  $|I_{q_z}|^2 \rightarrow 1$ ,  $\Delta \rightarrow 0$  и входящее в формулы (19) значение параметра  $R \rightarrow 1$ . Из (18) и (19) следует  $F_0 = \pi/2$ ,  $F_1 = \pi/8$ , что соответствует чисто двумерным значениям сдвига энергии и поляронной массе  $m_p = m(1 + \alpha\pi/8)$ . Предел  $\Omega a \rightarrow 0$  соответствует предельному переходу к трехмерному случаю. При этом  $|I_{q_z}|^2 \rightarrow 1$ ,  $\Delta \rightarrow \hbar^2/ma^2$ ,  $R \rightarrow 1 + y^2$ . В этом случае  $F_0 = 1$ ,  $F_1 = 1/6$ , что соответствует  $m_p = m(1 + \alpha/6)$ .

## 2. Численные расчеты

Для апробирования нашей модели проведем некоторые численные расчеты. Наиболее подходящим объектом для нашей модели является сверхрешетка с монослоями, образующими квантовые ямы достаточной глубины. С этой целью необходимо рассмотреть сверхрешетку, образованную компонентами с большим разрывом их зон проводимости  $\Delta E_c$ . Эти условия реализуются в сверхрешетке InAs–GaSb с монослоями InAs. Как будет показано позднее, дно мини-зоны  $-\hbar^2 \chi_0^2 / 2m$  располагается достаточно глубоко, так, что выполняется неравенство  $\hbar^2 \chi_0^2 / 2m > \hbar \omega_0$ . Таким образом, можно действительно учесть лишь только отрицательные состояния электрона  $\epsilon < 0$ . С другой стороны, уровень  $-\hbar^2 \chi_0^2 / 2m$  расположен достаточно далеко от максимума валентной зоны GaAs. Таким образом, мы пренебрежем и влиянием валентной зоны. Следовательно, использование модели с единственной мини-зоной вполне корректно.

Рассмотрим сверхрешетку со следующими параметрами:  $a = 150 \text{ \AA}$  — ширина потенциального барьера (толщина слоев GaSb), ширина квантовой ямы равна постоянной решетки InAs  $a_0 \simeq 6 \text{ \AA}$ , разрыв зон проводимости InAs и GaSb  $\Delta E_c = 830 \text{ meV}$  [3] соответствует глубине квантовой ямы.

Произведение глубины и ширины квантовой ямы дает нам оценочное значение параметра  $V_0 = \hbar^2 \Omega / m \simeq \Delta E_c a_0 \simeq 5.10^{-8} \text{ eV} \cdot \text{cm}$ . Значение  $q_0$  для GaSb определим, используя значение эффективной массы  $m = 0.047 m_e$  и  $\hbar \omega_0 = 24 \text{ meV}$ ,  $q_0 = 1.8 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ . Тогда  $A = \Omega a / 2 = 2.55$ ;



Функции  $\Phi_0(y)$  (1),  $\Phi_1(y)$  (2) и  $|I(\lambda y)|^2$  (3) при  $A = 2.55$ ,  $\lambda = 1.35$ .

$\lambda = q_0 a / 2 = 1.35$ . Решение уравнения (8) дает  $x_0 = \kappa_0 a / 2 = 2.58$ . Используя значение  $x_0$ , определим положение дна мини-зоны  $-\hbar^2 \kappa_0^2 / 2m = -89 \text{ meV}$ . Из (9) мы можем рассчитать ширину мини-зоны  $2\Delta = 13 \text{ meV}$ . Относительно большое значение ширины мини-зоны связано с малым значением эффективной массы электрона в GaSb. Численные расчеты выполнены при  $A = 2.55$ ;  $\lambda = 1.35$  в соответствии с формулами (16) и (19). Как показано на рисунке, значения переменной  $y$ , при которых квадрат матричного элемента отличается от единицы, вносят заметный вклад в интеграл (18). Численное значение интеграла (18) равно  $F_1 = 0.25$ . Перенормировка поляронной массы  $F_1 = (m_p - m) / m\alpha = 0.25$  имеет промежуточное значение между двумерным  $F_1 = \pi/8 = 0.375$  и трехмерным  $F_1 = 1/6 = 0.167$  значениями.

Глубина проникновения волновой функции электрона в область потенциального барьера по порядку величины равна  $1/x_0 = a/2\kappa_0$ . В нашем случае  $1/\kappa_0 = 30 \text{ \AA}$  значительно больше ширины квантовой ямы. Следовательно, в этом случае использование модели  $\delta$ -образного потенциала вполне корректно.

## Список литературы

- [1] А.Я. Шик. ФТП **26**, 7, 1161 (1992).
- [2] N. Mori, T. Ando. Phys. Rev. **B 40**, 9, 6175 (1989).
- [3] М. Херман. Полупроводниковые сверхрешетки. Мир, М. (1989). 238 с.