

## Роль поверхностных фононов в формировании спектра поляронных состояний в квантовых точках

© А.Ю. Маслов<sup>¶</sup>, О.В. Прошина, А.Н. Русина

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 30 октября 2006 г. Принята к печати 28 ноября 2006 г.)

Построена теория полярона большого радиуса в квантовых точках с учетом различия диэлектрических свойств материалов точки и окружающей ее матрицы. Показано, что величина поляронного эффекта существенно зависит от спектра поверхностных оптических фононов. Найден поляронный сдвиг уровней энергии размерного квантования для электронов и дырок с учетом их взаимодействия как с объемными, так и с поверхностными фононами. Определены условия, при которых взаимодействие с поверхностными фононами оказывается преобладающим. Показано, что в соединениях  $A^{II}B^{VI}$  оно может превышать 10 мЭВ и его необходимо учитывать при расчете энергетического спектра. Развита метод приближенного расчета поляронных состояний. Этот метод позволяет находить величины поляронного эффекта в гетероструктурах различной конфигурации. Обнаружено хорошее согласие результатов, полученных при помощи приближенного метода и точного расчета влияния поверхностных фононов на поляронные состояния.

PACS: 63.22.+m, 71.38.-k, 71.45.Gm, 73.21.-b

В последние годы электронные свойства квантовых наноструктур являются предметом активного исследования. Одним из существенных следствий локализации носителей в наноструктурах является квантование энергетического спектра носителей заряда. Фононные свойства в системах с пониженной размерностью исследованы менее детально. В то же время известно, что различие диэлектрических свойств материалов, на основе которых эти системы созданы, приводит к модификации спектров объемных фононов, а также к появлению дополнительных колебательных возбуждений — поверхностных, или интерфейсных, фононов. Меняется также и интенсивность электрон-фононного взаимодействия. Это может приводить к значительным изменениям энергий уровней размерного квантования носителей заряда. При этом наибольший интерес представляет взаимодействие заряженных частиц с полярными оптическими фононами в квантовых точках, изготовленных из материалов с высокой степенью ионности. Это связано с тем, что такое взаимодействие может быть сильным уже в объемных материалах [1] и значительно возрастает при уменьшении эффективной размерности наноструктуры [2]. Поскольку в квантовой точке состояния носителей локализованы, взаимодействие с полярными оптическими фононами (поляронный эффект) проявляется в изменении энергетического положения уровней размерного квантования. В данной работе выполнено теоретическое исследование поляронного эффекта в квантовых точках с учетом влияния как объемных, так и поверхностных фононов.

Рассмотрена система, в которой квантовая точка и окружающая ее матрица изготовлены из материалов с различной степенью ионности. При этом важным моментом оказывается тот факт, что даже в случае полной локализации заряженной частицы в квантовой точке величина поляронного эффекта существенно зависит от

поляризационных свойств окружающей матрицы. Для исследованного нами случая полной локализации заряженной частицы в квантовой точке выполняется условие

$$\frac{R}{a_{0i}} \ll 1, \quad (1)$$

где  $R$  — радиус квантовой точки,  $a_{0i}$  — радиус объемного полярона в квантовой точке ( $i = 1$ ) и в окружающей матрице ( $i = 2$ ). Условие (1) означает, что волновые функции электрона и дырки определяются главным образом потенциалом квантовой точки. В приближении потенциальной ямы с бесконечно высоким барьером для сферической квантовой точки эти волновые функции известны. Для основного состояния электрона имеем, согласно [3]:

$$\Psi_{s_z}^{(e)}(\mathbf{r}_e) = \frac{2\pi}{R} j_0\left(\frac{\pi r}{R}\right) |s_z\rangle, \quad (2)$$

где  $j_l(x)$  — сферическая функция Бесселя порядка  $l$ ,  $|s_z\rangle$  — спиновая волновая функция. Спектр состояний свободной дырки с учетом вырождения валентной зоны можно описывать в модели сферического гамильтониана Латтинжера [4]. Волновая функция дырки при этом известна [5]:

$$\Psi_{F_z}^{(h)}(\mathbf{r}_h) = 2 \sum_l (-1)^{l-3/2+F_z} R_{F_z,l}(r) \times \sum_{m,\mu} \begin{pmatrix} l & 3/2 & 3/2 \\ m & \mu & -F_z \end{pmatrix} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \chi_\mu. \quad (3)$$

Здесь  $F_z$  — проекция момента  $\hat{\mathbf{F}}$  на ось квантования,  $\chi_\mu$  — собственный вектор матрицы  $J_z$ ,  $\mu$  — собственное значение, соответствующее этому вектору ( $J_z \chi_\mu = \mu \chi_\mu$ ),

$$\begin{pmatrix} l & 3/2 & 3/2 \\ m & \mu & -F_z \end{pmatrix}$$

—  $3j$ -символ Вигнера,  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  — сферические волновые функции. Основному состоянию дырки соответству-

<sup>¶</sup> E-mail: maslov.ton@mail.ioffe.ru

ет значение полного момента  $\hat{\mathbf{F}} = 3/2$ . Суммирование в уравнении (3) идет по значениям квантового числа  $l = 0, 2$  и по значениям  $m, \mu$ , удовлетворяющим условию  $m + \mu = F_z$ . Радиальные волновые функции имеют вид [6]

$$R_{3/2,0} \equiv R_0 \left( \frac{r}{R} \right) = A(\beta) \left[ j_0 \left( k \frac{r}{R} \sqrt{\beta} \right) + \frac{j_2(k\sqrt{\beta})}{j_2(k)} j_0 \left( k \frac{r}{R} \right) \right],$$

$$R_{3/2,2} \equiv R_2 \left( \frac{r}{R} \right) = A(\beta) \left[ j_2 \left( k \frac{r}{R} \sqrt{\beta} \right) - \frac{j_2(k\sqrt{\beta})}{j_2(k)} j_2 \left( k \frac{r}{R} \right) \right], \quad (4)$$

где параметр

$$\beta = (\gamma - 2\gamma_1)(\gamma + 2\gamma_1)$$

имеет смысл отношения масс легкой и тяжелой дырок,  $A(\beta)$  — нормировочный коэффициент, равный

$$A(\beta) = \left\{ \int_0^R \left[ R_0^2 \left( \frac{r}{R} \right) + R_2^2 \left( \frac{r}{R} \right) \right] r^2 dr \right\}^{-1/2}, \quad (5)$$

а безразмерная величина

$$k = \frac{R\sqrt{2m_h E_n}}{\hbar}$$

определяется энергией размерного квантования  $E_n$  и массой тяжелой дырки  $m_h$ .

Спектр поверхностных фононов и электрон-фононное взаимодействие в рассматриваемой нами системе исследовались теоретически с использованием приближения диэлектрического континуума в работе [7]. Было показано, что спектр поверхностных фононов можно определить из решения уравнения

$$l\varepsilon_1(\omega_s) + (l+1)\varepsilon_2(\omega_s) = 0, \quad (6)$$

в котором  $\varepsilon_1(\omega_s)$  и  $\varepsilon_2(\omega_s)$  — диэлектрические проницаемости материалов квантовой точки и окружающей матрицы соответственно,  $\omega_s$  — частота поверхностных фононов,  $l$  — орбитальное квантовое число. В дальнейшем будут использованы стандартные выражения для диэлектрических проницаемостей

$$\varepsilon_{1,2}(\omega) = \varepsilon_{\infty 1,2} \frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO}1,2}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{TO}1,2}^2}, \quad (7)$$

в которых  $\omega_{\text{LO}}$ ,  $\omega_{\text{TO}}$  — частоты объемных продольных и поперечных фононных ветвей. Оператор Гамильтона, соответствующий полю продольных оптических фононов и включающий в себя вклады как от объемных, так и от

поверхностных фононов, удобно записать в виде

$$\hat{H}_{\text{ph}} = \sum_{n,l,m} \hbar\omega_{\text{LO}} \hat{a}_{nlm}^+ \hat{a}_{nlm} + \sum_{l,m} \hbar\omega_s(l) \hat{a}_{lm}^+ \hat{a}_{lm}, \quad (8)$$

где  $\hat{a}^+$ ,  $\hat{a}$  — операторы рождения и уничтожения фононов соответственно;  $n, l, m$  — стандартные квантовые числа для систем со сферической симметрией. Частота  $\omega_{\text{LO}}$  определяется только фононным спектром материала квантовой точки. Частоты поверхностных фононов  $\omega_s(l)$  соответствуют корням биквадратного уравнения (6), причем каждому значению  $l$ , кроме  $l = 0$ , при заданной дисперсии диэлектрической проницаемости (7) соответствуют 2 частоты. Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия может быть записан в виде

$$\hat{H}_{\text{e-ph}} = \sum_{n,l,m} \hbar\omega_{\text{LO}} \alpha_v(n, l) [\rho_b(n, l, m) \hat{a}_{nlm}^+ + \text{h.c.}] + \sum_{l,m} \hbar\omega_s(l) \alpha_s(l) [\rho_s(l, m) \hat{a}_{lm}^+ + \text{h.c.}], \quad (9)$$

где

$$\rho_b(n, l, m) = j_l \left( \mu_{nl} \frac{r}{R} \right) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (10a)$$

$$\rho_s(l, m) = \left( \frac{r}{R} \right)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (10b)$$

— плотности распределения объемных и поверхностных фононов соответственно; величины  $\mu_{nl}$  являются нулями сферических функций Бесселя  $j_l(r)$  [ $j_l(\mu_{nl}) = 0$ ]. Константы электрон-фононного взаимодействия  $\alpha_b(n, l)$  и  $\alpha_s(l)$  в рассматриваемой геометрии определены в работе [7]. Они имеют вид

$$\alpha_b(n, l) = - \left( \frac{4\pi e^2}{r_0 \mu_{nl}^2 j_{l+1}^2(\mu_{nl})} \frac{1}{\varepsilon_{\text{opt}}} \right)^{1/2}, \quad (11)$$

где  $\varepsilon_{\text{opt}}$  — оптическая диэлектрическая проницаемость, определяемая выражением

$$\frac{1}{\varepsilon_{\text{opt}}} = \frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_0};$$

$$\alpha_s(l) = - \left( \frac{2\pi e^2}{\omega^2 R} \right)^{1/2} \times \left[ \varepsilon_{\infty 1} \frac{\omega_{\text{LO}1}^2 - \omega_{\text{TO}1}^2}{(\omega^2 - \omega_{\text{TO}1}^2)^2} l + \varepsilon_{\infty 2} \frac{\omega_{\text{LO}2}^2 - \omega_{\text{TO}2}^2}{(\omega^2 - \omega_{\text{TO}2}^2)^2} (l+1) \right]^{-1/2}. \quad (12)$$

Условие (1) позволяет применить для решения задачи адиабатическое приближение. Усредним гамильтониан (9) по волновым функциям электрона (2) или дырки (3). Подобное усреднение приводит к тому, что в гамильтониане (9) точные плотности распределения фононов  $\rho_b(n, l, m)$  и  $\rho_s(l, m)$  следует заменить на их

усредненные плотности  $\tilde{\rho}_v$  и  $\tilde{\rho}_s$ , которые определяются следующим образом:

$$\tilde{\rho}_b = \int d^3r |\Psi(\mathbf{r})|^2 \rho_v(n, l, m), \quad (13a)$$

$$\tilde{\rho}_s = \int d^3r |\Psi(\mathbf{r})|^2 \rho_s(l, m), \quad (13b)$$

причем для расчета энергии электронного и дырочного полярона в качестве  $\Psi(\mathbf{r})$  следует подставлять волновую функцию электрона (2) или дырки (3) соответственно. Усредненный гамильтониан

$$\langle \hat{H}_{\text{ph}} \rangle + \langle \hat{H}_{\text{e-ph}} \rangle = \hat{H}_{\text{pol}}$$

при помощи унитарного преобразования

$$U = \sum_{n,l,m} \left( \tilde{\rho}_b \alpha_b(n, l) \hat{a}_{nlm} - \tilde{\rho}_b^* \alpha_b(n, l) \hat{a}_{nlm}^+ \right) + \sum_{l,m} \left( \tilde{\rho}_s \alpha_s(l) \hat{a}_{lm} - \tilde{\rho}_s^* \alpha_s(l) \hat{a}_{lm}^+ \right) \quad (14)$$

приводится к диагональному по фоновым операторам виду:

$$e^{-U} \hat{H}_{\text{pol}} e^U = \sum_{n,l,m} \hbar \omega_{\text{LO}} \hat{a}_{nlm}^+ \hat{a}_{nlm} + \sum_{l,m} \hbar \omega_s(l) \hat{a}_{lm}^+ \hat{a}_{lm} + \Delta E_{\text{pol}}, \quad (15)$$

где

$$\Delta E_{\text{pol}} = - \sum_{n,l,m} \hbar \omega_{\text{LO}} |\alpha_v(n, l)|^2 |\tilde{\rho}_b|^2 - \sum_{l,m} \hbar \omega_s(l) |\alpha_s(l)|^2 |\tilde{\rho}_s|^2 \quad (16)$$

представляет собой поляронный сдвиг уровней размерного квантования для электрона (дырки) в сферической квантовой точке. Из формулы (16) следует, что вклады в энергию полярона от объемных и поверхностных фононов суммируются. Как будет видно из дальнейшего рассмотрения, при определенных условиях вклад от поверхностных фононов может превосходить вклад от объемных фононов. Полученные формулы позволяют рассчитать поляронные сдвиги для любого уровня размерного квантования.

Рассмотрим наиболее простую ситуацию частицы со сферически симметричной волновой функцией, чему соответствует, например, электрон в основном состоянии. В этом случае вклад в поляронный сдвиг (16) дают только фононы, соответствующие значению орбитального квантования числа  $l = 0$ . При этом вклад от объемных фононов, описываемый первой суммой в уравнении (16), можно привести к виду

$$\Delta E_v^{(e)} = - \frac{e^2 2\pi^2}{\varepsilon_{\text{opt1}} R} \int_0^1 x^2 dx |\Psi(x)|^2 \times \int_0^1 y^2 dy |\Psi(y)|^2 \sum_n \frac{j_0(\mu_{n0}x) j_0(\mu_{n0}y)}{\mu_{n0} j_1^2(\mu_{n0})}. \quad (17)$$

Сумма по  $n$  здесь соответствует преобразованию Фурье–Бесселя от некоторой функции. При помощи стандартной процедуры можно определить эту функцию, которая оказывается равной:

$$\sum_n \frac{j_0(\mu_{n0}x) j_0(\mu_{n0}y)}{\mu_{n0} j_1^2(\mu_{n0})} = \frac{1}{4xy} (|x+y| - |x-y| - 2xy). \quad (18)$$

Подставляя выражение (18) в формулу (17), окончательно получим вклад от объемных фононов в поляронный сдвиг в виде

$$\Delta E_v^{(e)} = - \frac{e^2}{\varepsilon_{\text{opt1}} R} \left[ \frac{1}{2} - \frac{\text{Si}(2\pi)}{2\pi} + \frac{\text{Si}(4\pi)}{4\pi} \right] \approx -0.39 \frac{e^2}{\varepsilon_{\text{opt1}} R}, \quad (19)$$

где  $\text{Si}(x)$  — интегральный синус.

Вклад от поверхностных фононов в поляронный сдвиг при  $l = 0$  содержит только одно слагаемое, которое с учетом условия нормировки волновой функции электрона (2) приводится к виду

$$\Delta E_s^{(e)} = - \frac{e^2}{2\varepsilon_{\text{opt2}} R}. \quad (20)$$

При этом полный поляронный сдвиг  $\Delta E = \Delta E_v + \Delta E_s$  оказывается равным:

$$\Delta E^{(e)} = - \frac{e^2}{R} \left( \frac{0.39}{\varepsilon_{\text{opt1}}} + \frac{0.5}{\varepsilon_{\text{opt2}}} \right). \quad (21)$$

Из формулы (21) следует, что для квантовой точки из полярного материала, находящейся в матрице из неполярного материала ( $1/\varepsilon_{\text{opt2}} = 0$ ), получается величина поляронного сдвига, найденная в работе [8]. Этому случаю соответствует минимальный поляронный эффект, что может затруднить его экспериментальное наблюдение. Учет поляризации матрицы приводит к возрастанию поляронного эффекта. В случае, когда  $\varepsilon_{\text{opt1}} = \varepsilon_{\text{opt2}}$ , мы имеем наш прежний результат [9], который был получен с учетом только объемных фононов, характерных для материала данной конкретной квантовой точки. Следует отметить, что даже в квантовых точках из неполярного материала ( $1/\varepsilon_{\text{opt1}} = 0$ ) имеется заметный поляронный сдвиг, обусловленный наличием поверхностных фононов, создающих поляризацию в окружающей матрице.

Аналогичным образом рассчитывается поляронный сдвиг для основного состояния дырки. Основное отличие заключается в том, что волновая функция дырки (3) представляет собой суперпозицию двух вкладов, которые соответствуют  $s$ - и  $d$ -симметрии [6]. При этом в соответствии с общей формулой для поляронного сдвига (16) существенным оказывается взаимодействие с фононами, обладающими угловыми моментами  $l = 0$  и  $l = 2$ . Следует отметить, что уравнение (6) для спектра поверхностных фононов при  $l = 2$  имеет два различных

решения  $\omega_{1,2}(l)$ . Вклад от взаимодействия дырки с объемными фононами приводится к следующему виду:

$$\begin{aligned} \Delta E_V^{(e)} = & -\frac{e^2}{2\varepsilon_{\text{opt}1}R} \left( \int_0^1 xP(x)dx \left[ (1-x) \int_0^x y^2P(y)dy \right. \right. \\ & \left. \left. + x \int_x^1 y(1-y)P(y)dy \right] + \frac{4}{25} \int_0^1 x^4Q(x)dx \left[ \left( \frac{1}{x^5} - 1 \right) \right. \right. \\ & \left. \left. \times \int_0^x y^4Q(y)dy + \int_x^1 y^4 \left( \frac{1}{y^5} - 1 \right) Q(y)dy \right] \right), \end{aligned} \quad (22)$$

где  $P(x) = R_0^2(x) + R_2^2(x)$  — сферически симметричная часть плотности распределения дырки, а  $Q(x) = R_0(x)R_2(x)$  представляет собой радиальную часть вклада в дырочную плотность, имеющего  $d$ -симметрию. Объемная часть энергии дырочного полярона (22) зависит от параметра  $\beta = m_l/m_h$  (здесь  $m_l$  — масса легкой дырки). Эта зависимость отличается от результата, полученного нами ранее в работе [9], только на постоянное слагаемое, обусловленное обращением в нуль плотности объемных фононов на границе квантовой точки. Такое различие связано с тем, что в работе [9] не учитывалось квантование объемных фононов, локализованных внутри квантовой точки.

Вклад поверхностных фононов в поляронный сдвиг описывается выражением

$$\begin{aligned} \Delta E_S^{(h)} = & -\frac{e^2}{2\varepsilon_{\text{opt}2}R} \\ & -\frac{e^2}{10R} \left\{ \frac{1}{\omega_1^2 \left[ 2\varepsilon_{\infty 1} \frac{\omega_{\text{LO}1}^2 - \omega_{\text{TO}1}^2}{(\omega_1^2 - \omega_{\text{TO}1}^2)^2} + 3\varepsilon_{\infty 2} \frac{\omega_{\text{LO}2}^2 - \omega_{\text{TO}2}^2}{(\omega_1^2 - \omega_{\text{TO}2}^2)^2} \right]} \right. \\ & \left. + \frac{1}{\omega_2^2 \left[ 2\varepsilon_{\infty 1} \frac{\omega_{\text{LO}1}^2 - \omega_{\text{TO}1}^2}{(\omega_2^2 - \omega_{\text{TO}1}^2)^2} + 3\varepsilon_{\infty 2} \frac{\omega_{\text{LO}2}^2 - \omega_{\text{TO}2}^2}{(\omega_2^2 - \omega_{\text{TO}2}^2)^2} \right]} \right\} I_1(\beta). \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь

$$I_1(\beta) = \left| \int_0^1 x^4 dx Q(x) \right|^2.$$

Первое слагаемое в (23) связано со сферической частью распределения дырочной плотности  $P(x)$  и имеет тот же смысл, что и аналогичный вклад для электрона (формула (20)). Второе и третье слагаемые обусловлены взаимодействием дырки с поверхностными фононами, соответствующими  $l = 2$ . Входящий в выражение (23) интеграл  $I_1(\beta)$  содержит зависимость от отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta = m_l/m_h$ . Эта зависимость приведена на рис. 1.

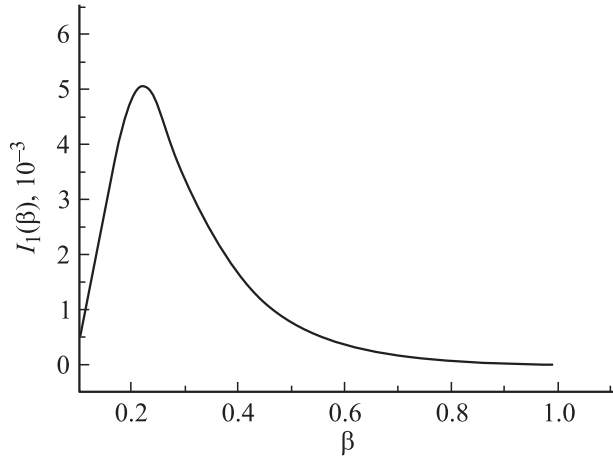


Рис. 1. Зависимость параметра  $I_1(\beta)$ , определяющего взаимодействие дырки с поверхностными фононами в квантовой точке, от отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$ .

Полученное выше выражение для поляронного сдвига (16) становится весьма громоздким при рассмотрении состояний, описываемых волновой функцией произвольной симметрии, примером чего являются формулы (22) и (23). Поэтому имеет смысл привести метод получения приближенных выражений для поляронного сдвига. Этот метод основан на представлении о фононном потенциальном поле в неоднородных системах и представляет собой обобщение подхода к задаче о поляроне, предложенного Пекаром [1].

Для описания поляронных состояний в сферической квантовой точке запишем уравнение Шредингера с учетом фононного поля в следующем виде:

$$\left\{ \hat{T} + V(\mathbf{r}) + eU(\mathbf{r}) + \frac{\varepsilon_{\text{opt}1}}{8\pi} \int_{r < R} d^3r [\nabla U(\mathbf{r})]^2 + \frac{\varepsilon_{\text{opt}2}}{8\pi} \int_{r > R} d^3r [\nabla U(\mathbf{r})]^2 \right\} \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (24)$$

Здесь  $\hat{T}$  — оператор кинетической энергии,  $V(\mathbf{r})$  — потенциал квантовой точки, а  $U(\mathbf{r})$  — потенциал поля оптических фононов. В соответствии с параметром (1) волновая функция нулевого приближения  $\Psi(\mathbf{r})$  получается из этого уравнения (24) при отсутствии фононного поля, т.е. при  $U(\mathbf{r}) = 0$ . Для электрона и дырки эти волновые функции описываются выражениями (2) и (3) соответственно. Усредним гамильтониан из уравнения (24) по волновой функции нулевого приближения  $\Psi(\mathbf{r})$  и найдем потенциал фононного поля, соответствующий максимальному поляронному сдвигу. Получим следующее уравнение:

$$\Delta U(\mathbf{r}) = \frac{4\pi e}{\varepsilon_{\text{opt}1}} |\Psi(\mathbf{r})|^2. \quad (25)$$

В уравнении (25) отсутствует вклад, содержащий оптическую диэлектрическую проницаемость материала

матрицы  $\varepsilon_{\text{opt}2}$ , поскольку мы предполагаем, что вся плотность заряда сосредоточена внутри квантовой точки. Тем не менее зависимость от  $\varepsilon_{\text{opt}2}$  возникнет в результате учета условий на границе раздела квантовой точки и окружающей матрицы. Мы считаем, что фоновое поле удовлетворяет стандартным условиям для потенциального поля, которые имеют вид

$$U(R - \delta) = U(R + \delta), \quad (26a)$$

$$\varepsilon_{\text{opt}1} \left. \frac{dU}{dr} \right|_{R-\delta} = \varepsilon_{\text{opt}2} \left. \frac{dU}{dr} \right|_{R+\delta}, \quad (26b)$$

где величина  $\delta \rightarrow 0$ .

Решения уравнения (25) в области внутри квантовой точки и вне ее имеют вид соответственно:

$$U = U_0 + A_{lm} r^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad r < R, \quad (27a)$$

$$U = U_0 + B_{lm} r^{-(l+1)} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad r > R, \quad (27b)$$

где

$$U_0(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\varepsilon_{\text{opt}1}} \int \frac{|\Psi(\mathbf{r}')|^2 d^3 r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (28)$$

Коэффициенты  $A_{lm}$ ,  $B_{lm}$  определяются граничными условиями (26). Подставляя выражения (27) в (26), получим

$$A_{lm} = \frac{e^2 \left(1 - \frac{\varepsilon_{\text{opt}2}}{\varepsilon_{\text{opt}1}}\right)}{l \varepsilon_{\text{opt}1} + (l+1) \varepsilon_{\text{opt}2}} (l+1) \frac{4\pi}{2l+1} \frac{F_{lm}}{R^{2l+1}}, \quad (29a)$$

$$B_{lm} = A_{lm} R^{2l+1}, \quad (29b)$$

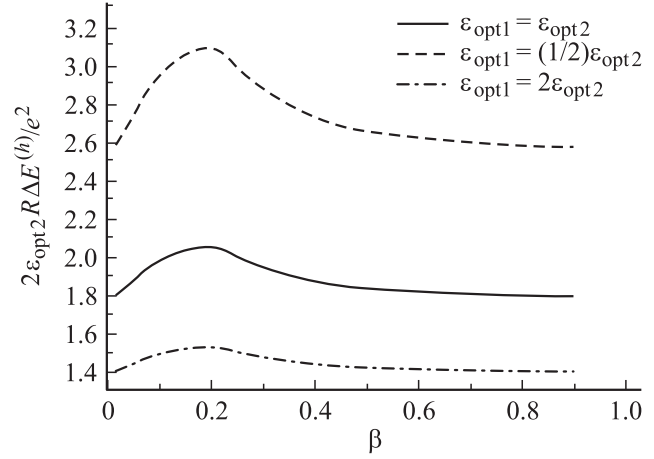
где

$$F_{lm} = \int d^3 r |\Psi(\mathbf{r})|^2 Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) r^l. \quad (30)$$

Полученное нами решение уравнения (25) позволяет получить поляронный сдвиг в виде

$$\Delta E_{\text{pol}} = -\frac{e^2}{2\varepsilon_{\text{opt}1}} \int \frac{|\Psi(\mathbf{r})|^2 |\Psi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r d^3 r' - \sum_{l,m} \frac{e^2 \left(1 - \frac{\varepsilon_{\text{opt}2}}{\varepsilon_{\text{opt}1}}\right)}{l \varepsilon_{\text{opt}1} + (l+1) \varepsilon_{\text{opt}2}} (l+1) \frac{4\pi}{(2l+1)} \frac{|F_{lm}|^2}{R^{2l+1}}. \quad (31)$$

Первое слагаемое в выражении (31) детально исследовано ранее в работе [9]. Оно соответствует полярному сдвигу в модельной системе, для которой диэлектрические характеристики материалов квантовой точки и матрицы одинаковы ( $\varepsilon_{\text{opt}1} = \varepsilon_{\text{opt}2}$ ). Сумма по квантовым числам  $l, m$  соответствует вкладу в энергию полярона, обусловленному различием в диэлектрических свойствах материалов квантовой точки и матрицы. Выше в формулах (16) и (23) было показано, что данный вклад обусловлен поверхностными оптическими фононами. В выражении (31) частоты оптических фононов не входят. Однако, как будет показано далее, в применении к конкретным волновым функциям, приближенное выражение (31) с хорошей степенью точности аппроксимирует точное выражение (16). Рассмотрим те же конкретные



**Рис. 2.** Зависимости величины поляронного сдвига от отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$  при изменении диэлектрических свойств матрицы.

выражения для волновых функций основного состояния электрона и дырки, которые мы использовали выше. Для сферически симметричной волновой функции электрона в выражении (31) остаются только слагаемые с  $l, m = 0$ . Энергия поляронного сдвига при этом оказывается равной:

$$\Delta E^{(e)} = -\frac{e^2}{2R} \left( \frac{0.78}{\varepsilon_{\text{opt}1}} + \frac{1}{\varepsilon_{\text{opt}2}} \right), \quad (32)$$

что в точности совпадает с выражением (21), полученным выше с учетом спектра оптических фононов.

Подставляя в выражение (31) волновую функцию дырки (3), получаем поляронный сдвиг в виде

$$\Delta E^{(h)} = -\frac{e^2}{2\varepsilon_{\text{opt}1}R} B(\beta) - \frac{e^2}{2R} \left( \frac{1}{\varepsilon_{\text{opt}2}} - \frac{1}{\varepsilon_{\text{opt}1}} \right) - \frac{3e^2}{5R} \frac{1 - \frac{\varepsilon_{\text{opt}2}}{\varepsilon_{\text{opt}1}}}{2\varepsilon_{\text{opt}1} + 3\varepsilon_{\text{opt}2}} |F_{20}|^2, \quad (33)$$

график функции  $B(\beta)$  приведен к работе [9]. Учитывая явный вид выражения для  $|F_{20}|$  (формула (30)), получаем

$$F_{20} = \frac{2}{\sqrt{5}} \int_0^1 Q(x) x^4 dx. \quad (34)$$

Из сравнения выражений (33) и (23) видно, что первые 2 слагаемых в них абсолютно одинаковые. Последние слагаемые имеют одинаковые зависимости от отношения масс легкой и тяжелой дырок, определяемые интегралом  $I_1(\beta)$ . Коэффициенты при этом интеграле в точном выражении (23) и в приближенном выражении (33), вообще говоря, различны, но при реальных соотношениях диэлектрических свойств квантовой точки и матрицы их различие численно невелико. Таким образом, можно сделать вывод, что развитый приближенный метод хорошо

коррелирует с более точным способом расчета поляронных эффектов. Это открывает возможности применения данного метода при исследовании гетероструктур более сложной симметрии.

На рис. 2 представлены зависимости от  $\beta$  для величины поляронного сдвига (33) при нескольких значениях соотношений  $\epsilon_{\text{opt}1}$  и  $\epsilon_{\text{opt}2}$ . Из рис. 2 видно, что изменение диэлектрических свойств матрицы влечет за собой значительное изменение энергии поляронного сдвига для дырочных состояний. Вклад в поляронный эффект, связанный с наличием поверхностных оптических фононов, оказывается достаточно большим и в соединениях  $A^{II}B^{VI}$  может составлять величину порядка 10 мэВ. Насколько нам известно, это наиболее сильное проявление влияния поверхностных фононов на энергетические состояния носителей в квантовой точке. Поэтому рассмотренные эффекты необходимо учитывать при описании энергетического спектра и оптических переходов в квантовых точках, изготовленных из полярных материалов.

Работа поддержана РФФИ (грант № 06-02-16991), программой президиума РАН „Квантовые наноструктуры“, программой поддержки ведущих научных школ НШ-5730.2006.2.

## Список литературы

- [1] С.И. Пекар. *Исследования по электронной теории кристаллов* (М.–Л., Гостехиздат, 1951).
- [2] I.P. Ipatova, A.Yu. Maslov, O.V. Proshina. *Surf. Sci.*, **507–510**, 598 (2002).
- [3] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. *ФТП*, **16**, 1209 (1982).
- [4] J.M. Luttinger. *Phys. Rev.*, **102**, 1030 (1956).
- [5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика: Квантовая механика* (М., Физматлит, 2004) т. 3.
- [6] A.L. Efros. *Phys. Rev. B*, **46**, 7448 (1992).
- [7] D.V. Melnikov, W.B. Fowler. *Phys. Rev. B*, **64**, 245 320 (2001).
- [8] A.L. Vartanian, A.I. Asatryan, A.A. Kirakosyan. *J. Phys.: Condens. Mater.*, **14**, 13 357 (2002).
- [9] И.П. Ипатова, А.Ю. Маслов, О.В. Прошина. *ФТП*, **33**, 832 (1999).

Редактор Т.А. Полянская

## Effect of surface phonons on the polaron states in quantum dots

A.Yu. Maslov, O.V. Proshina, A.N. Rusina

Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The theory of large radius polaron in quantum dots is developed. Considering the distinctions of dielectric properties of the quantum dot and surrounding matrix the electron and hole polaron states are described. The magnitude of the polaron effect is demonstrated to have essential dependence of surface optical phonon spectra. Taking into account the electron and hole interaction with both bulk and surface phonons the polaron shift of size quantization levels for electrons and holes is found. The conditions for prevailing interaction with surface phonons are determined. In  $A^{II}B^{VI}$  compounds the energy of this interaction may exceed 10 meV and must be taken into account for energy spectra calculations. The crude method of polaron states determinations is devised. As is shown this method can find applications for different configurations of the heterostructures. The results are in good agreement for the crude method and for the precise determination of surface phonons effect of the polaron states.