

УДК 621.315.592

©1995

ПОЛЯРОН В МОДЕЛИ СВЕРХРЕШЕТКИ С БЕСКОНЕЧНО ГЛУБОКИМИ КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ

Н.М.Гусейнов

Институт физики АН Азербайджана, Баку
Поступило в Редакцию 6 января 1994 г.
В окончательной редакции 1 июля 1994 г.

Рассчитаны поляронный сдвиг энергии и перенормировка поперечной и продольной массы электрона в сверхрешетке с узкими, бесконечно глубокими квантовыми ямами при произвольной толщине потенциальных барьеров. Близость полученных выражений к известным значениям сдвига энергии и массы полярона в чисто двумерном случае (электроны находятся только на низшем энергетическом уровне, а туннелирование между слоями сверхрешетки отсутствует) определяется малостью параметра $\Delta/\hbar\omega_0$ (Δ — ширина нижней мини-зоны, $\hbar\omega_0$ — предельное значение энергии продольного оптического фонона в проводящих слоях).

Теоретически широко исследованы сдвиг энергии и перенормировка поперечной массы полярона слабой связи, обусловленные движением частицы в плоскости проводящего слоя ^[1,2] в пленках и гетероструктурах.

В случае сверхрешеток появляется возможность туннелирования электронов в направлении перпендикулярном к слоям. В эксперименте ^[3] методом циклотронного резонанса изучалась продольная масса, связанная с движением электрона вдоль оси сверхрешетки GaAs—Al_xGa_{1-x}As.

Кроме исследования продольной массы интересно выяснить влияние возможности туннелирования электронов на перенормировку поперечной массы и поляронный сдвиг энергии.

В работе ^[4] исследовались поляронные эффекты в пленке произвольной толщины. Был проанализирован переход сдвига энергии и перенормировки массы при увеличении толщины пленки от чисто двумерного значения $|\Delta E_1|/\alpha\hbar\omega_0 = \pi/2$ и $\Delta m_p/\alpha m = \pi/8$, где ΔE_1 — поляронный сдвиг энергии первого уровня размерного квантования, α — константа связи Фрелиха, до значений, соответствующих объемному случаю $|\Delta E|/\alpha\hbar\omega_0 = 1$ и $\Delta m_p/\alpha m = 1/6$. Параметр, определяющий степень двумерности такой системы, есть отношение энергии оптического фонона к разнице энергий первого и второго уровней размерного квантования $\eta = \hbar\omega_0 2m d_1^2 / (3\pi^2 \hbar^2)$, где d_1 — ширина квантовой ямы. При $\eta \ll 1$ реализуется чисто двумерный случай.

Мы будем рассматривать сверхрешетку с узкими квантовыми ямами, когда $\eta \ll 1$ и можно ограничиться одноминизонной моделью. Од-

нако и в этом случае за счет туннелирования электронов возможен переход от двумерного к трехмерному состоянию полярона. Двумерные значения сдвига энергии и перенормировки поперечной массы будут иметь место в сверхрешетке с достаточно широкими потенциальными барьерами, когда квантовые ямы можно считать изолированными друг от друга. Трехмерные значения должны получаться, когда толщина барьеров d стремится к величине порядка постоянной решетки.

Для решения нашей задачи мы будем рассматривать сверхрешетку как набор прямоугольных бесконечно глубоких потенциальных ям, разделенных барьерами шириной d .

В реальных сверхрешетках высота барьеров конечна, что безусловно отразится на ширине мини-зон в спектре электрона, определяемой интегралами перекрытия волновых функций электрона в соседних ямах. Конечность высоты барьеров можно учесть, используя в спектре электрона для бесконечно глубоких ям значения ширины мини-зон, известные из эксперимента либо корректно вычисленные с учетом конечности высоты барьера.

Энергетический спектр электрона зададим в виде

$$E_{n\mathbf{k}} = E_n + \frac{(\hbar k_{\perp})^2}{2m} + \Delta_n(1 - \cos k_z d), \quad (1)$$

где

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md_1^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

— номера уровней, связанных с размерным квантованием, Δ_n — ширина мини-зоны, связанной с n -м уровнем, k_{\perp} — компонента волнового вектора электрона, лежащая в плоскости проводящего слоя, k_z — составляющая волнового вектора вдоль оси сверхрешетки. Волновую функцию электрона выберем в виде

$$\Psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \xi_{n,k_z}(z). \quad (2)$$

Функция $\xi_{n,k_z}(z)$ строится, как и в методе сильной связи, в виде линейной комбинации волновых функций электрона, находящегося на n -м уровне изолированной квантовой ямы.

$$\xi_{n,k_z}(z) = (2d_0/Vd_1)^{1/2} \times \sum_{m=-N/2}^{N-1} e^{ik_z d_0 m} \theta(z - md_0) \theta(md_0 + d_1 - z) \sin \frac{\pi(z - md_0)}{d_1}, \quad (3)$$

где V — объем сверхрешетки, d_0 — период сверхрешетки, $2N$ — число слоев в сверхрешетке, θ — ступенчатая функция ($\theta(x) = 0$ при $x < 0$, $\theta(x) = 1$ при $x > 0$).

Предполагается, что число оптических фононов в системе экспоненциально мало, т. е. температура низка.

В приближении полярона слабой связи поляронную добавку к энергии мы будем искать во втором порядке теории возмущения

$$\Delta E_{n,\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k}',n'} \frac{|M_{\mathbf{k},n \rightarrow \mathbf{k}',n'}^+|^2}{E_{n,\mathbf{k}} - E_{n',\mathbf{k}'} - \hbar\omega_0}, \quad (4)$$

где \mathbf{q} — волновой вектор фонона, M^+ — матричный элемент, связанный с испусканием оптического продольного фонона.

Несмотря на то, что в сверхрешетках с узкими квантовыми ямами взаимодействие электронов с интерфейсными фононами играет существенную роль [5], для простоты мы исключим их из рассмотрения, так как в большей степени нас интересует влияние возможности туннелирования электрона вдоль оси сверхрешетки на перенормировку спектра, которое можно исследовать рассматривая обычные объемные фононы.

Предполагается, что спектр фононов проводящего слоя не совпадает по своим значениям со спектром фононов соседнего слоя. Таким образом, фононы оказываются запертыми в проводящем слое объемом V_1 , а z -компонента волнового вектора фонона изменяется так же, как и перпендикулярные компоненты в интервале $-\pi/a \leq q_z \leq \pi/a$, где a — постоянная решетки проводящего слоя. В этом случае матричный элемент M^+ имеет вид

$$M_{\mathbf{k},n \Rightarrow \mathbf{k}',n'}^+ = \int \psi_{\mathbf{k},n} e \rho_{\mathbf{q}}^* \psi_{\mathbf{k}',n'}^* dV, \quad (5)$$

где

$$\varphi_{\mathbf{q}} = \left(\frac{\hbar}{2V_1 \rho \omega_0} \right)^{1/2} \frac{4\pi \bar{\gamma}}{iq} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}.$$

ρ — плотность проводящего слоя, $\bar{\gamma} = (\rho \omega_0^2 / 4\pi \bar{\epsilon})$, $\bar{\epsilon}$ — эффективная диэлектрическая постоянная, используемая в поляронной теории.

Подставляя (2) и (3) в (5), получим

$$M_{\mathbf{k},n \Rightarrow \mathbf{k}',n'}^+ = \left(\frac{\hbar}{2V_1 \rho \omega_0} \right)^{1/2} \frac{i4\pi \bar{\gamma}}{q} \delta_{\mathbf{k}'_{\perp}; \mathbf{k}_{\perp} - \mathbf{q}_{\perp}} \delta_{k'_z; k_z - q_z + G} I_{n,n'},$$

$$I_{n,n'} = \frac{2}{d_1} \int_0^{d_1} \sin \frac{\pi n z}{d_1} \sin \frac{\pi n' z}{d_1} e^{-iq_z z} dz,$$

$$G = \frac{2\pi m}{d}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, d_1 = d_0 + d_1. \quad (6)$$

Из (1), (4) и (6) имеем

$$\Delta E_n = -\frac{\alpha \hbar \omega_0 q_0}{2\pi^2} \sum_{n'} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} q_{\perp} dq_{\perp} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|I_{n,n'}|^2 dq_z}{(q_{\perp}^2 + q_z^2) \left[-\left(\frac{\pi}{d}\right)^2 (n^2 - n'^2) + q_{\perp}^2 - 2\mathbf{k}_{\perp} \mathbf{q}_{\perp} + \right.}$$

$$\left. + \frac{2m\Delta_n}{n^2} \cos k_z d - \frac{2m\Delta_{n'}}{n'^2} \cos (k_z - q_z) d + d_0^2 \right]}, \quad (7)$$

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

В (7) суммирование по G с интегрированием по q_z мы заменили интегрированием по q_z в бесконечных пределах, поскольку подынтегральная функция от G не зависит. Действительно, так как $M^+ \alpha \delta_{k'_z; k_z - q_z + G}$, $-\pi/d \leq k_z$, $k'_z \leq \pi/d$, то интегрирование по q_z должно происходить в пределах $-\pi/d + k_z + 2\pi m/d \leq q_z \leq \pi/d + k_z + 2\pi m/d$. При $m = 0$ $-\pi/d + k_z \leq q_z \leq \pi/d + k_z$, при $m = -1$ $-3\pi/d + k_z \leq q_z \leq \pi/d + k_z$, при $m = 1$ $\pi/d + k_z \leq q_z \leq 3\pi/d + k_z$ и т. д.

Поскольку мы рассматриваем узкие потенциальные ямы с $\eta \ll 1$, то $|I_{n,n'}|^2 = \delta_{n,n'}$ [6]. Тогда выражение (7) при $n = 1$ имеет следующий вид

$$\Delta E_1 = -\frac{\alpha \hbar \omega_0 q_0}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty q_\perp dq_\perp \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(q_\perp^2 + q_z^2) [q_\perp^2 + \frac{2m\Delta}{\hbar^2} (1 - \cos q_z d) + q_0^2]} \times$$

$$\times \frac{dq_z}{\left\{ 1 - \frac{2k_\perp q_\perp \cos \varphi + \frac{2m\Delta}{\hbar^2} \left[\frac{(k_z d)^2}{2} (1 - \cos q_z d) + k_z d \sin q_z d \right]}{q_\perp^2 + \frac{2m\Delta}{\hbar^2} (1 - \cos q_z d) + q_0^2} \right\}}. \quad (8)$$

Рассматривая электрон, находящийся на дне низшей мини-зоны, мы разложили $\cos k_z d - \cos(k_z - q_z)d$ по малому параметру $k_z d$ до второго порядка. Далее, выражение (8) мы разложим по параметру

$$2k_\perp q_\perp \cos \varphi / R,$$

где

$$R = q_\perp^2 + \frac{2m\Delta}{\hbar^2} (1 - \cos q_z d) + q_0^2,$$

до второго порядка (интеграл, содержащий член первого порядка разложения, обращается в нуль в результате интегрирования по φ), по параметру

$$\frac{2m\Delta}{\hbar^2} (1 - \cos q_z d) (k_z d)^2 / 2R$$

до первого порядка и по параметру

$$\frac{2m\Delta}{\hbar^2} \sin(q_z d) k_z d / R$$

до второго порядка (первый обращается в нуль после интегрирования по q_z). После интегрирования по φ и q_\perp получим

$$\Delta E_1 = \Delta E^0 + \Delta E' + \Delta E'' + \Delta E''',$$

$$\Delta E^0 = -\alpha \hbar \omega_0 F^0, \quad F^0 = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty (1 + L - x^2)^{-1} \ln[(1 + L)/x^2] dx, \quad (9)$$

$$\Delta E' = -\alpha \frac{\hbar k_\perp^2}{2m} F', \quad F' = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left\{ \frac{1}{(1 + L)^2} - \frac{2x^2}{(1 + L - x^2)^3} \times \right.$$

$$\left. \times \left[\ln \frac{1 + L}{x^2} + \frac{2x^2}{1 + L} - \frac{x^4}{2(1 + L)^2} - \frac{3}{2} \right] \right\} dx, \quad (10)$$

$$\Delta E'' = -\alpha \frac{(\hbar k_z)^2}{2m_{\parallel}} F'', \quad F'' = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} (1 - \cos x q_0 d) \times$$

$$\times \left[\frac{1}{(x^2 - L - 1)(1 + L)} + \frac{1}{(1 + L - x^2)^2} \ln \frac{1 + L}{x^2} \right] dx, \quad (11)$$

$$\Delta E''' = -\alpha \frac{(\hbar k_z)^2}{2m_{\parallel}} \frac{\Delta}{\hbar \omega_0} F''', \quad F''' = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \sin^2 x q_0 d \times$$

$$\times \left[\frac{1}{(1 + L)(x^2 - L - 1)} - \frac{2}{(1 + L)(x^2 - L - 1)^2} - \frac{2}{(x^2 - L - 1)^3} \ln \frac{1 + L}{x^2} \right] dx, \quad (12)$$

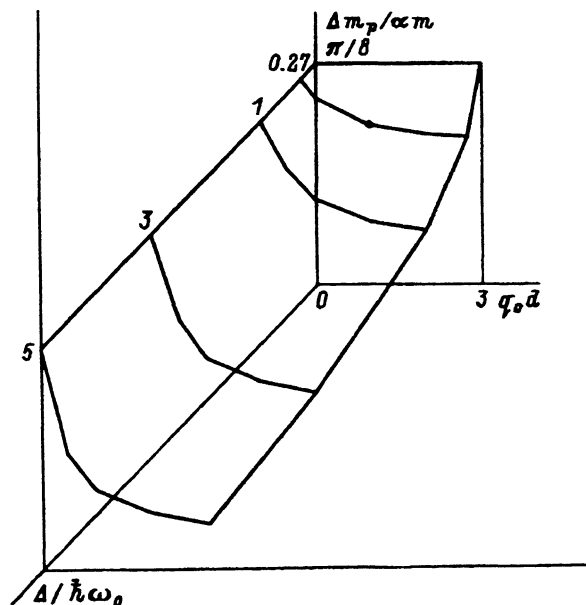
где $L = \frac{\Delta}{\hbar \omega_0} (1 - \cos x q_0 d)$, $x = q_z / q_0$, $m_{\parallel} = \hbar^2 / \Delta d$.

Рассмотрим полученные результаты (9)–(12) в предельном случае $\Delta / \hbar \omega_0 \Rightarrow 0$. Получается

$$F^0 = \pi/2, \quad F' = \pi/8,$$

$$F'' = \pi/4 - (\sin \beta \operatorname{ci} \beta - \cos \beta \operatorname{si} \beta) / 2 + \beta (\cos \beta \operatorname{ci} \beta + \sin \beta \operatorname{si} \beta) / 2, \quad \beta = q_0 d.$$

Сдвиг энергии $\Delta E^0 = -\alpha \hbar \omega_0 \pi / 2$. Учитывая, что $\alpha \ll 1$, получаем, что перенормировка поперечной массы полярона $\Delta m_p / m = \alpha \pi / 8$. Продольная масса будет определяться величиной $\Delta E''$, поскольку вклад в перенормировку продольной массы, связанный с величиной $\Delta E'''$, мал



Зависимости перенормировки поперечной массы полярона от параметра $q_0 d$ при значениях параметра $\Delta / \hbar \omega_0 = 0, 0.27, 1, 3, 5$.

Точкой обозначено состояние полярона в сверхрешетке GaAs—Al_xGa_{1-x}As с толщиной барьера $d = 50 \text{ \AA}$ и шириной минизоны $\Delta = 10 \text{ meV}$, что соответствует значениям $q_0 d = 1.3$, $\Delta / \hbar \omega_0 = 0.27$ и $\Delta m_p / \alpha m = 0.317$. Прямые, расположенные параллельно осям ординат в плоскостях $\Delta m_p / \alpha m, 0, q_0 d$ и $\Delta m_p / \alpha m, 0, \Delta / \hbar \omega_0$ на уровне $\pi/8$, соответствуют чисто двумерному состоянию полярона.

по параметру $\Delta/\hbar\omega_0$,

$$\Delta m_{\parallel p}/m_{\parallel} = \alpha \left[\pi/4 - (\sin \beta \operatorname{ci} \beta - \cos \beta \operatorname{si} \beta)/2 + \beta(\cos \beta \operatorname{ci} \beta + \sin \beta \operatorname{si} \beta)/2 \right].$$

При $d \Rightarrow \infty$ $\Delta m_{\parallel p} \Rightarrow \alpha \pi m_{\parallel}/4$.

Таким образом, учитывая, что продольная масса полярона в этом случае стремится к бесконечности, спектр полярона совпадает со спектром для чисто двумерного случая.

Рассмотрим другой предел. Несмотря на то что особых оснований в законности использования формул, полученных в приближении сильной связи, в данном случае нет, тем не менее мы будем приближать ширину барьера к величине порядка постоянной решетки $d \Rightarrow a$. Предположим, что в этом случае $m_{\parallel} = \hbar^2/a^2 \Delta(a) = m$, тогда $L \Rightarrow x^2$ и функции $F^0 = 1$, $F' = 1/6$, $F'' = \omega_0 m a^2/6\hbar \ll 1$, $\frac{\Delta}{\hbar\omega_0} F''' = 1/6$. Сдвиг энергии $\Delta E_0' = -\alpha \hbar\omega_0$ и перенормировка массы полярона $\Delta m_p/m = \alpha/6$. Таким образом, мы получили спектр полярона, соответствующий объемному случаю.

Используя выражения (9)–(12), можно численно рассчитать перенормировку масс и сдвиг энергии для конкретной сверхрешетки. В качестве примера мы используем параметры сверхрешетки GaAs—Al_xGa_{1-x}As [7], где при ширине барьера $d = 50$ Å, ширине ямы $d_1 = 100$ Å и $x = 0.3$ ширина мини-зоны равна $\Delta = 10$ meV. Для GaAs $\hbar\omega_0 = 36.5$ meV, $m = 0.07m_e$. В этом случае значения параметров $\Delta/\hbar\omega_0 = 0.27$ и $q_0 d = 1.3$. Численный расчет дает следующие значения: $F^0 = 1.486$, $F' = 0.317$, $F'' = 0.243$, $F''' = 0.285$. Соответственно $\Delta E_0'/\alpha \hbar\omega_0 = -1.486$, перенормировка поперечной массы $\Delta m_p/\alpha m = 0.317$, продольной массы $\Delta m_{\parallel}/\alpha m_{\parallel} = 0.32$.

На рисунке изображены зависимости величины $\Delta m_p/\alpha m$ от параметра $q_0 d$. Расчитанная выше перенормировка поперечной массы $\Delta m_p/\alpha m = 0.317$ отмечена точкой на кривой, соответствующей $\Delta/\hbar\omega_0 = 0.27$. Из рисунка видно, что данное поляронное состояние ближе к чисто двумерному $\Delta m_p/\alpha m = \pi/8 = 0.393$, чем к объемному $\Delta m_p/\alpha m = 1/6$, соответствующему значениям параметров $\Delta(a)/\hbar\omega_0 = 100$ и $q_0 a = 0.147$.

Автор благодарен Ф.М. Гапшим-заде за многочисленные обсуждения полученных результатов.

Список литературы

- [1] Das Sarma S. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 4. P. 2590–2593.
- [2] Hai G., Peeters F.M., Devreese J.T. // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. N 17. P. 11063–11072.
- [3] Duffield T., Bhat R., Koza M., Tamargo M.C., Harbison J.R., DeRoza F., Hwang D.M., Grabl P., Rush K.M., Allen S.J. // In: Proc. 18th. Int. Conf. on the Physics of Semiconductors. Stockholm, Sweden, 1986. V. 1. P. 239–242.
- [4] Гусейнов Н.М., Сеид-Рзаева С.М. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 9. С. 32–36.
- [5] Mori N., Ando T. // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. N 9. P. 6175–6188.
- [6] Price P.J. // Ann. of Phys. 1981. V. 133. N 2. P. 217–239.
- [7] Силин А.П. // УФН. 1985. Т. 143. № 3. С. 485–521.