

ПОЛЯРОН БОЛЬШОГО РАДИУСА В НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С НЕПАРАБОЛИЧЕСКИМ ЗАКОНОМ ДИСПЕРСИИ

© *И.П.Ипатова, А.Ю.Маслов, О.В.Прошина*

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

(Получена 15 января 1996 г. Принята к печати 22 января 1996 г.)

Теоретически исследованы поляронные эффекты в квантовых ямах на основе узкозонных полупроводников с высокой степенью ионности. Показано, что непараболичность зонного спектра приводит к различию в энергиях связи полярона на разных уровнях размерного квантования. Найдена величина стоксовых потерь при межуровневых электронных переходах, которая оказалась параметрически больше, чем для материалов с параболическим законом дисперсии. Полученные результаты позволяют исследовать непараболичность спектра носителей оптическими методами.

1. Введение

Среди кристаллов с высокой степенью ионности имеются материалы (типа CdHgTe), в которых энергия размерного квантования в яме, изготовленной из этих материалов, порядка ширины запрещенной зоны

$$E_g \approx \hbar/mL^2, \quad (1)$$

где L — ширина ямы. В этом случае непараболический характер электронного спектра должен сказываться на особенностях электрон-фононного взаимодействия и локализации электронных возбуждений в квантовой яме.

Спектр электронов в объемном материале, согласно работе Кейна [1], характеризуется изотропной непараболической зависимостью

$$E = \frac{E_g}{2} + \sqrt{\left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + \frac{2}{3}P^2p^2}. \quad (2)$$

В прямоугольной квантовой яме с бесконечными стенками, где размерное квантование происходит вдоль направления z , электронный спектр

принимает вид

$$E_n = \frac{E_g}{2} + \sqrt{\left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + \frac{2}{3}P^2 \left(p_{\parallel}^2 + \frac{\pi \hbar^2 n^2}{L^2}\right)}. \quad (3)$$

Здесь $\pi \hbar^2 n^2 / L^2 = p_z$, p_{\parallel} — двумерный импульс в плоскости ямы. Для малых значений p_{\parallel} , удовлетворяющих условию

$$\frac{2}{3}P^2 p_{\parallel}^2 < \left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + \frac{2}{3}\pi P^2 \frac{\hbar^2 n^2}{L^2}, \quad (4)$$

в выражении (3) можно выполнить разложение до членов порядка p_{\parallel}^4 , отражающих непараболичность спектра:

$$E_n = \frac{E_g}{2} + \sqrt{\left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + \frac{2}{3}P^2 \frac{\pi \hbar^2 n^2}{L^2}} + \frac{1}{3} \frac{P^2 p_{\parallel}^2}{\left[(E_g/2)^2 + \frac{2}{3}P^2 \pi \hbar^2 n^2 / L^2\right]^{1/2}} - \frac{1}{8} \frac{P^4 p_{\parallel}^4}{\left[(E_g/2)^2 + \frac{2}{3}P^2 \pi \hbar^2 n^2 / L^2\right]^{3/2}}. \quad (5)$$

Из разложения (5) видно, что коэффициент при p_{\parallel}^2 , имеющий смысл эффективной массы

$$\frac{1}{m_n} = \frac{2}{3} \frac{P^2}{\sqrt{\left(E_g/2\right)^2 + \frac{2}{3}P^2 \pi \hbar^2 n^2 / L^2}}, \quad (6)$$

зависит от номера уровня размерного квантования, причем масса растет по мере увеличения номера уровня. Для сравнения последовательных слагаемых в выражении (5) запишем его через эффективную массу (6):

$$E_n = E_n(0) + \frac{p_{\parallel}^2}{2m_n} - \frac{1}{2} \left(\frac{p_{\parallel}^2}{2m_n}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{\left(E_g/2\right)^2 + \frac{2}{3}P^2 \pi \hbar^2 n^2 / L^2}}. \quad (7)$$

Из уравнения (7) видно, что непараболичность спектра проявляется уже в членах 2-го порядка по p_{\parallel} , тогда как в объемном материале непараболичность становится существенной только при учете членов 4-й степени по квазиимпульсу.

В настоящей работе исследуется влияние непараболичности зонного спектра материалов с узкой запрещенной зоной на поляронную локализацию в квантовой яме.

2. Полярон большого радиуса

Уравнение Шредингера для электрона в квантовой яме с учетом поляризации среды можно записать в виде

$$\left\{ \hat{H}_0 + \frac{\varepsilon}{8\pi} \int [\nabla U(\mathbf{r})]^2 d^3r + e \int U(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r \right\} \Psi(\boldsymbol{\rho}, z) = E \Psi(\boldsymbol{\rho}, z), \quad (8)$$

где \hat{H}_0 — гамильтониан электрона в квантовой яме, которому соответствует уравнение нулевого приближения

$$\hat{H}_0 \Psi_n(\boldsymbol{\rho}, z) = E_n(p) \Psi_n(\boldsymbol{\rho}, z); \quad (9)$$

$U(\mathbf{r})$ — поле, создаваемое поляризационными оптическими фононами; $\boldsymbol{\rho}$ — двумерный вектор в плоскости ямы. Второе слагаемое в левой части (8) описывает энергию поляризационных оптических фононов; $1/\varepsilon = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0$ — оптическая диэлектрическая проницаемость; третье слагаемое, содержащее как волновую функцию $\Psi(\mathbf{r})$, так и колебательный вклад $U(\mathbf{r})$, соответствует электрон-фононному взаимодействию.

Согласно уравнению нулевого приближения (9), движение электрона в плоскости ямы является свободным, движение поперек ямы локализовано. Эти движения независимы, поэтому волновую функцию нулевого приближения для электрона возможно записать в виде произведения волновой функции свободного движения электрона в плоскости ямы $\chi(\boldsymbol{\rho})$ и волновой функции движения поперек ямы $\Psi_n(z)$

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}, z) = \chi(\boldsymbol{\rho}) \Psi_n(z) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \boldsymbol{\rho}\right) \Psi_n(z). \quad (10)$$

Предполагается, что волновые функции $\Psi_n(z)$ нормированы. Решение уравнения (8) будем искать в виде разложения волновых функций $\Psi(\boldsymbol{\rho}, z)$ по собственным функциям невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 из выражения (9)

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}, z) = \sum_{p, n} z_n(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \boldsymbol{\rho}\right) \Psi_n(z). \quad (11)$$

Подставляя (11) в (8), домножая полученное уравнение на сопряженную волновую функцию $\Psi_n(z)$ и интегрируя по всему пространству, получим систему уравнений для коэффициентов $a_n(p)$:

$$[E_n(p) - E] a_n(p) + \sum_{p', n'} a_{n'}(p') \int d^2\rho V_{nn'}(\boldsymbol{\rho}) \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \boldsymbol{\rho}\right] = 0, \quad (12)$$

где

$$V_{nn'}(\boldsymbol{\rho}) = \int dz \Psi_n(z) V(\boldsymbol{\rho}, z) \Psi_{n'}(z). \quad (13)$$

Следует подчеркнуть, что в уравнении (12) в качестве энергии нулевого приближения $E_n(p)$ стоит непараболический закон дисперсии электрона в квантовой яме (7).

Нами рассмотрен случай полярона большого радиуса, когда ширина ямы L меньше радиуса поляронного состояния a_0 :

$$L < a_0, \quad (14)$$

где $a_0 = \hbar^2 \varepsilon / m_0 e^2$, а m_0 — масса электрона в приближении параболического спектра, которая получается из выражения (6) при $n = 0$. Неравенство (14) можно записать в виде условия на энергию

$$E_n^{(0)} > \hbar^2 / m_n a_n^2, \quad (15)$$

означающего, что расстояние между уровнями размерного квантования в яме больше поляронной энергии. Так как в прямоугольной яме с бесконечными стенками расстояние между уровнями растет с ростом номера уровня n пропорционально n^2 , а поляронная энергия, стоящая в правой части неравенства (15), растет пропорционально n , условию (15) легче удовлетворить для более высоких уровней. Неравенство (15) позволяет пренебречь межуровневыми матричными элементами в уравнении (12). В результате получаем

$$[E_n(p) - E]a_n(p) + \sum_{p'} a_n(p') \int d^2 \rho V_n(\rho) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \rho \right] = 0, \quad (16)$$

где

$$V_n(\rho) = \int dz \Psi_n^2(z) U(\mathbf{r}). \quad (17)$$

3. Квадратичное приближение

Наличие неравенства (14) позволяет сравнить параметрически вклады членов 2-го и 4-го порядка по квазиимпульсу в непараболический закон дисперсии электрона в яме (7). Для характерных значений квазиимпульса $p_{\parallel} \approx \hbar / a_n$ отношение этих вкладов равно

$$\frac{p_{\parallel} P^2}{(E_g/2)^2 + \frac{2}{3} \pi P^2 \hbar^2 n^2 / L^2} \approx \frac{L^2}{a_0^2} < 1. \quad (18)$$

Так как нас интересует локализованное поляронное состояние в квантовой яме, в уравнении (16) удобно перейти от квазиимпульсного представления к координатному. Для этого запишем

$$\chi_n(\rho) = \sum_p a_n(p) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \rho \right). \quad (19)$$

Поскольку непараболический характер электронного спектра проявляется уже в квадратичных по p_{\parallel} членах, мы пренебрежем членами

4-го и высших порядков на основании неравенства (14) даже для самых низших электронных состояний. Подставляя (19) в (16) и отбрасывая в энергии $E_n(p_{\parallel})$ члены 4-го порядка по p_{\parallel} , получим двумерное уравнение Шредингера в координатном представлении:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_{\rho}^2 + eV_n(\rho) \right] \chi_n(\rho) = \left\{ E - E_n(0) - \frac{\varepsilon}{8\pi} \int d^3r [\nabla U(\mathbf{r})]^2 \right\} \chi_n(\rho). \quad (20)$$

В уравнении (20) второе слагаемое в левой части описывает электрон-фононное взаимодействие, которое в кристаллах с заметной долей ионности является сильным. Для случая сильного взаимодействия Пекаром [2] была предложена вариационная процедура, позволяющая определить эффективный потенциал и волновые функции электрона. Варьируя энергию E из (20) по отношению к потенциалу $U(\mathbf{r})$, получим уравнение Пуассона

$$\Delta U_n(\mathbf{r}) = \frac{4\pi e}{\varepsilon} \Psi_n^2(z) \chi_n^2(\rho). \quad (21)$$

Решение уравнения (21), соответствующее наиболее глубокой потенциальной яме для электрона на уровне n , имеет вид

$$U_n(\mathbf{r}) = -\frac{e}{\varepsilon} \int \frac{d^3r_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \chi_n^2(\rho_1) \Psi_n^2(z). \quad (22)$$

Потенциал $U_n(\mathbf{r})$ содержит пока неизвестную двумерную поляронную функцию $\chi_n(\rho)$. Подставляя (22) в уравнение Шредингера (20), получим

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_{\rho}^2 \chi_n(\rho) - \frac{e^2}{2\varepsilon} \left[\int \frac{dz dz_1 d^2\rho_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \Psi_n^2(z) \Psi_n^2(z_1) \chi_n^2(\rho_1) \right] \chi_n(\rho) = \\ = [E - E_n(0)] \chi_n(\rho). \end{aligned} \quad (23)$$

Интеграл в потенциальной энергии в уравнении (23) имеет характерный размер интегрирования по переменным z и z_1 , определяемый размером квантовой ямы L , а характерный размер интегрирования по ρ_1 определяется большим радиусом полярона a_0 . Разлагая подынтегральное выражение в ряд по параметру (14) и оставляя нулевой член разложения, получим уравнение для двумерного полярона:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_{\rho}^2 \chi_n(\rho) - \frac{e^2}{2\varepsilon} \int \frac{d^2\rho_1 \chi_n^2(\rho_1)}{|\rho - \rho_1|} \chi_n(\rho) = [E - E_n(0)] \chi_n(\rho). \quad (24)$$

Полученное уравнение отличается от известного уравнения для 2d-полярона [3-5] тем, что в него входит электронная масса, зависящая от номера уровня размерного квантования. В работах по двумерному полюрону вариационным методом найдены волновая функция и энергия основного состояния полярона. Обобщая результаты работ [3-5], получим энергию полярона на n -ом уровне:

$$E_n = E_n(0) + C_0 \alpha_n^2 \hbar \omega_0, \quad (25)$$

параметр электрон-фоонного взаимодействия α_n зависит от номера уровня размерного квантования n через эффективную массу m_n и имеет вид

$$\alpha_n = \frac{e^2}{2\hbar\omega_0} \left(\frac{2m_n\omega_0}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right). \quad (26)$$

Здесь ω_0 — частота продольного оптического фонона, а $C_0 = 0.4047$ имеет то же значение, что и в работах [3–5].

При вычислении вероятности оптических переходов требуется знать не только энергию, но и волновую функцию электронного состояния в поляронной яме $\chi_n(\rho)$. Чтобы упростить расчеты, мы воспользовались однопараметрическими пробными функциями вида

$$\chi_n(\rho) = \left(\frac{2\lambda_n}{\pi} \right)^{1/2} \exp(-\lambda_n\rho^2), \quad (27)$$

где λ_n — вариационные параметры. Вычисления поляризационного сдвига основного состояния приводят для такой волновой функции к выражению типа (25), в котором численный коэффициент C_1 отличается от указанного выше значения C_0 менее чем на 3 процента.

4. Оптические переходы

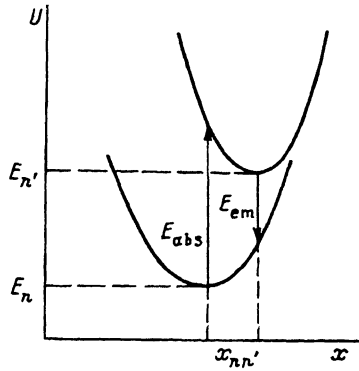
Оптические переходы между уровнями размерного квантования в яме при учете поляронного эффекта были рассмотрены в работе [6]. Расчет был выполнен для параболического зонного спектра, когда эффективная масса не зависит от номера уровня размерного квантования. В этом случае поляризационные сдвиги различных уровней размерного квантования, обусловленные сильным электрон-фоонным взаимодействием, отличаются друг от друга лишь в 1-м порядке малости по параметру (14). В оптических переходах проявляется разность поляризационных сдвигов уровней, между которыми происходит переход. Эта разность для параболического закона дисперсии оказывается малой величиной порядка L/a_0 .

Совсем иная ситуация возникает в случае непараболического закона дисперсии электронов. Поскольку в этом случае параметр электрон-фоонного взаимодействия α_n зависит от номера уровня размерного квантования n , разность поляризационных сдвигов дает вклад в оптические эффекты уже в нулевом порядке по L/a_0 . Полные адиабатические волновые функции системы электрон-(поляризация среды) имеют вид произведения электронной волновой функции на колебательную:

$$\Psi = \Psi_n(\mathbf{r})\Phi_n(x), \quad (28)$$

где колебательная волновая функция $\Phi_n(x)$ зависит от номера электронного уровня n , а переменная x является обобщенной колебательной координатой.

В приближении бездисперсионных оптических фононов зависимость энергии связанной системы электрона и фононов имеет вид сдвинутых в горизонтальном направлении парабол, соответствующих одинаковой частоте ω_0 (см. рисунок). Вероятность дипольного перехода



Оптические переходы в модели адиабатических потенциалов; $E_{nn'} = E_{\text{abs}} - E_{\text{em}}$.

между уровнями размерного квантования n и n' имеет вид

$$W_{n,n} = |\langle \psi_n | \hat{p} | \psi_{n'} \rangle|^2 \left| \int dx \Phi_n(x) \Phi_{n'}(x + x_{nn'}) \right|^2, \quad (29)$$

где первый множитель определяет вероятность разрешенного оптического перехода электрона между уровнями размерного квантования, а второй множитель является интегралом перекрытия колебательных волновых функций, отличающихся положением равновесия. Сдвиг положения равновесия $x_{nn'}$ определяется различием в поляризации среды для электронных состояний n и n' . Согласно [7,8], величину $x_{nn'}$ для гармонической зависимости энергии от координаты можно связать с разностью энергий $E_{nn'}$, необходимой для поглощения кванта света E_{abs} и расходуемой при испускании кванта E_{em} (эти величины показаны на рисунке):

$$x_{nn'} = \left(\frac{E_{nn'}}{2\hbar\omega_0} \right)^{1/2}. \quad (30)$$

Величина $E_{nn'}$, называемая стоксовыми потерями, определяется через электронные волновые функции и потенциалы поляронов, найденные в предыдущем параграфе, следующим образом:

$$E_{nn'} = (e/2) \left\{ \int d^3r U_n(\mathbf{r}) [\Psi_n^2(\mathbf{r}) - \Psi_{n'}^2(\mathbf{r})] + \int d^3r U_{n'}(\mathbf{r}) [\Psi_{n'}^2(\mathbf{r}) - \Psi_n^2(\mathbf{r})] \right\}. \quad (31)$$

Используя волновые функции (27), получим

$$E_{nn'} = \frac{\pi}{8} \hbar\omega_0 \left(\alpha_n^2 + \alpha_{n'}^2 - 2\sqrt{2} \frac{\alpha_n^2 \alpha_{n'}^2}{\sqrt{\alpha_n^4 + \alpha_{n'}^4}} \right). \quad (32)$$

Величина $E_{nn'}$ представляет собой меру непараболичности зонного спектра, которая проявляется в оптических свойствах квантовых ям. Для парраболоического зонного спектра с $m_n = m_{n'}$ и, следовательно, $\alpha_n = \alpha_{n'}$, стоксовы потери $E_{nn'}$ (32) обращаются в нуль.

Из-за неортогональности волновых функций $\Phi_n(x)$ и $\Phi_{n'}(x + x_{nn'})$ в выражении (29) межуровневый электронный переход может сопровождаться серией фононных повторений, возникающих в 1-м порядке теории возмущений. Когда безразмерный параметр $x_{nn'}$ (30) оказывается порядка единицы, фононные повторения имеют ту же интенсивность, что и линия бесфононного перехода [7]. В соединениях $A^{II}B^{VI}$ параметр α_n порядка единицы. При этом величина $x_{nn'}$ также может принимать значения порядка единицы в случае достаточно сильной непараболичности спектра, определяемой условием (1). В этом случае по интенсивности фононных повторений и по величине стоксовых потерь $E_{nn'}$ можно определить степень непараболичности зонного спектра оптическими методами.

Следует отметить, что влияние непараболичности спектра на многофононные оптические переходы в квантовой яме оказывается существенно бóльшим, чем в квантовых проволоке и точке. Это связано с тем, что в квантовых проволоке и точке, в отличие от квантовой ямы, энергия полярона существенно зависит от номера уровня размерного квантования даже для параболического спектра носителей. При этом учет непараболичности спектра не приводит к параметрическому возрастанию разницы поляронных энергий и поэтому слабо влияет на многофононные оптические эффекты.

Авторы благодарят Российский фонд фундаментальных исследований за финансовую поддержку (грант 94-02-05047).

Список литературы

- [1] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Sol., 1, 249 (1956).
- [2] С.И. Пекар. *Исследования по электронной теории кристаллов* (М.-Л., Гостехиздат, 1951).
- [3] Wu. Hiaguang, F.M. Peters, J.T. Devreese. Phys. Rev. B, 31, 3420 (1985).
- [4] A. Chatterjee. Phys. Rev. B, 41, 1668 (1990).
- [5] C.Y. Chen, D.L. Lin, P.W. Jin, S.Q. Zhang, R. Chen. Phys. Rev. B, 49, 13680 (1994).
- [6] И.П. Ипатова, А.Ю. Маслов, О.В. Прошина. ФТТ, 37, 1819 (1995).
- [7] К.К. Ребане. *Элементарная теория колебательной структуры примесных центров кристаллов* (М., Наука, 1968).
- [8] V.N. Abacumov, V.I. Perel, I.N. Yassievich. *Nonradiative recombinations in semiconductors* (North-Holland, 1991).

Редактор Т.А. Полянская

A large-radius polaron in semiconductor-based nanostructures with nonparabolic dispersion

I.P. Ipatova, A. Yu. Maslov, O.V. Proshina

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

The polaron effects in quantum wells have been investigated theoretically in narrow-gap semiconductors with high ionicity. It is shown that nonparabolicity leads to a difference in polaron energies for various levels of size quantization. The Stokes losses have been obtained for interlevel electronic transitions. These values is demonstrated to be higher than those in materials with parabolic dispersion. Results obtained may be used in optical analysis of the spectrum nonparabolicity.

E-mail: iip@ton.ioffe.rssi.ru (I.P. Ipatova)