

КВАЗИДВУМЕРНЫЙ ПОЛЯРОН

Н. М. Гусейнов, С. М. Сеид-Рзаева

Решена задача о поляроне слабой связи в квазидвумерной электронной системе. Найдены аналитические выражения для поляронного сдвига подзон и поляронной добавки к эффективной массе электрона при произвольной ширине квантовой ямы. Полученные выражения дают известные значения при предельном переходе к двумерному и трехмерному случаю. Проведено сравнение поляронной добавки к массе с имеющимися экспериментальными данными.

1. В последнее время все чаще встречаются как экспериментальные, так и теоретические работы, посвященные изучению поляронных эффектов в квазидвумерных электронных системах. В экспериментальных исследованиях по циклотронному и магнитофононному резонансу определялась поляронная масса в пленках [1], гетеропереходах [2-4] и сверхрешетках [5] на основе соединений A^3B^5 или A^2B^6 , являющихся слабыми полярными материалами.

Существует также ряд теоретических работ по вычислению собственной энергии оптического квазидвумерного полярона слабой связи при низких температурах, когда электроны находятся в нижней подзоне размерного квантования. В этих работах задача решалась двумя способами.

В первом случае рассматривались виртуальные переходы электрона, взаимодействующего с продольными оптическими фононами в пределах нижней подзоны [6]. Такой подход оправдывает себя при условии $\hbar\omega_0 \ll E_1$, где $\hbar\omega_0$ — предельная энергия продольного оптического фонона; E_1 — энергетический уровень размерного квантования, соответствующий нижней подзоне. При этом пренебрегалось межподзонными переходами. Однако неравенство $\hbar\omega_0 \ll E_1$ выполняется при очень малой ширине квантовой ямы, соответствующей рассматриваемому полупроводниковому слою.

Получающиеся при таких допущениях аналитические выражения для сдвига энергии полярона ΔE^0 и массы полярона m_p^* в пределе $d \rightarrow 0$ (d — ширина квантовой ямы) дают известные значения $\Delta E^0/\alpha\hbar\omega_0 = -\pi/2$ и $\Delta m^*/\alpha m^* = \pi/8$ для двумерного случая ($\Delta m^* = m_p^* - m^*$, m^* — эффективная масса электрона, α — константа связи Фрелиха). При переходе $d \rightarrow \infty$ к объемному случаю эти величины стремятся к нулю.

Во втором случае учитывались межподзонные переходы, однако в так называемом «приближении сохранения импульса» [7]. Считалось, что компонента волнового вектора фонона в направлении нормали к поверхности полупроводникового слоя принимает значения $q_z = \pi m/d$, $m=0, 1, 2, \dots$

Такой подход дает лишь правильные предельные значения при переходе к объемному случаю $\Delta E^0/\alpha\hbar\omega_0 = -1$ и $\Delta m^*/\alpha m^* = 1/8$. При переходе к двумерному случаю величины ΔE^0 , $\Delta m^* \rightarrow 0$.

В действительности, характерная ширина квантовых ям в сверхрешетках обычно соответствует значению параметра $\Gamma = (\hbar\omega_0/E_1)^{1/2} \sim 1$. Например, для слоя GaAs толщиной $d=100 \text{ \AA}$ $\Gamma \approx 1$. Для таких промежуточных значений ширины квантовых ям результаты работы [6, 7] неприменимы.

Чтобы получить для эффективной массы и сдвига энергии полярона общие выражения, пригодные при всех значениях d , следует учитывать межподзонные переходы, отказавшись от приближения сохранения импульса.

В частности, такой подход был использован для решения задачи о поглощении света свободными носителями при участии оптических фононов в квазидвумерных системах [8].

В настоящей работе вычислена собственная энергия квазидвумерного полярона слабой связи. С учетом межподзонных переходов получены общие выражения для эффективной массы и сдвига зоны полярона, справедливые для любых значений d , которые в предельном переходе как к объемному, так и двумерному случаю приводят к правильным выражениям.

Отметим, что здесь, как и в работах [6, 7], не учтены эффекты экранирования. Обычно такие эффекты существенны в инверсионных слоях.

2. Для решения задачи о поляроне в квазидвумерной системе будем рассматривать полупроводниковый слой, представляющий собой потенциальную яму с бесконечно высокими стенками. Энергия электрона в яме имеет следующий вид:

$$E_{n, k_{\perp}} = E_n + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*}, \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* d^2} n^2, \quad (1)$$

где $n=1, 2, 3, \dots$ — номер подзоны, k_{\perp} — волновой вектор электрона в плоскости слоя. Волновая функция такого электрона имеет вид

$$\psi_{n, k_{\perp}} = \left(\frac{2}{V}\right)^{1/2} e^{i k_{\perp} r_{\perp}} \sin \frac{\pi n z}{d}, \quad (2)$$

где r_{\perp} — радиус-вектор электрона в плоскости слоя, V — объем слоя. Предполагается, что электроны находятся у дна первой подзоны, а число оптических фононов в системе экспоненциально мало, т. е. рассматриваются низкие температуры.

Расчет проводится в рамках стандартной теории возмущений [8]. При этом поляронная поправка к энергии во втором порядке теории возмущения имеет вид

$$\Delta E = \sum_{\substack{k'_{\perp}, n'}} \frac{|M_{k_{\perp}, n \rightarrow k'_{\perp}, n'}|^2}{E_{k_{\perp}, n} - E_{k'_{\perp}, n'} - \hbar \omega_0}, \quad (3)$$

где q — волновой вектор фонона; M^+ — матричный элемент, соответствующий испусканию продольного оптического фонона

$$M^+_{k_{\perp}, n \rightarrow k'_{\perp}, n'} = \int \psi_{k_{\perp}, n} e^{i \varphi_q} \psi^*_{k'_{\perp}, n'} dV, \quad (4)$$

e — заряд электрона, φ_q — потенциал поля, созданного одним оптическим фононом. Выражение для φ_q имеет следующий вид [9]:

$$\varphi_q = \left(\frac{\hbar}{2V \rho \omega_0}\right)^{1/2} \frac{4\pi \tilde{\gamma}}{iq} e^{i q r}, \quad (5)$$

$\tilde{\gamma} = (\rho \omega_0^2 / 4\pi \tilde{\epsilon})^{1/2}$, ρ — плотность полупроводника; $\tilde{\epsilon} = (\epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon_0^{-1})^{-1}$ — приведенная диэлектрическая проницаемость, используемая в поляронной теории.

Несмотря на то что, согласно поставленной задаче, электроны находятся в первой подзоне, расчет будем проводить для подзоны с произвольным номером n .

Подставляя (2) и (5) в (4), получим следующее выражение для квадрата модуля матричного элемента:

$$|M^+|^2 = \alpha \hbar \omega_0 \frac{4\pi \gamma_0 \hbar^2}{2m^* V} \delta_{k'_{\perp}, k_{\perp} - q_{\perp}} |I_{n, n'}|^2,$$

$$I_{n, n'} = \frac{2}{d} \int_0^d \sin \frac{\pi n z}{d} \sin \frac{\pi n' z}{d} e^{-iq_z z} dz, \quad (5)$$

где $\gamma_0 = (2m^* \omega_0 / \hbar)^{1/2}$, δ — символ Кронекера.

Подставляя (4), (6) в выражение (3) и заменяя суммирование по q интегрированием в цилиндрической системе координат, получим следующее выражение:

$$\Delta E_n = -a \hbar \omega_0 \frac{\gamma_0}{2\pi^2} \sum_{n'} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty q_\perp dq_\perp \times \\ \times \int_{-\infty}^\infty \frac{|I_{n, n'}|^2 dq_z}{(q_\perp^2 + q_z^2) [-(\pi/d)^2 (n^2 - n'^2) - k_\perp^2 + (k_\perp - q_\perp)^2 + \gamma_0^2]}, \quad (7)$$

где φ — угол между векторами q_\perp и k_\perp . Интеграл

$$\int_{-\infty}^\infty dq_z |I_{n, n'}|^2 / (q_\perp^2 + q_z^2)$$

вычислен в работе [8]. Используя его значение, при $k_\perp = 0$ можно получить поляронный сдвиг уровней ΔE_n^0 . В сумме (7) вклад в энергетический сдвиг уровней, соответствующий слагаемому $n' = n$, равен

$$\Delta E_{n=n'}^0 = -a \hbar \omega_0 \left\{ \frac{2}{\pi \Gamma} \ln \pi \Gamma + \frac{\Gamma \ln (\Gamma/2n)}{\pi (\Gamma^2 - 4n^2)} + \right. \\ \left. + \frac{32n^4}{(\pi \Gamma)^2 (\Gamma^2 - 4n^2)^2} \left[\frac{\pi}{2} - F(\pi \Gamma) \right] + \frac{2}{\pi \Gamma} (\ln \gamma - 1) + \right. \\ \left. + \frac{\Gamma (3\Gamma^2 - 20n^2)}{2\pi^2 n (\Gamma^2 - 4n^2)} \text{Si} (2\pi n) + \frac{\Gamma}{\pi (\Gamma^2 - 4n^2)} \text{Ci} (2\pi n) \right\}, \quad (8)$$

где $\Gamma = \gamma_0 d / \pi = (\hbar \omega_0 / E_1)^{1/2}$; $\gamma = 1.78107 \dots$ — константа Эйлера. Si и Ci, являются функциями интегрального синуса и косинуса. Функция

$$F(x) = \text{ci}(x) \sin x - \text{si}(x) \cos x, \quad \text{si}(x) = \text{Si}(x) - \frac{\pi}{2}, \quad \text{ci}(x) = \text{Ci}(x).$$

Другая часть сдвига уровней, связанная с межподзонами переходами, имеет следующий вид:

$$\Delta E_{n \neq n'}^0 = -a \hbar \omega_0 \Gamma \sum_{n' (\neq n)} \left\{ \frac{\ln (a^2/b^2)}{2\pi (a^2 - b^2)} + \frac{\ln (a^2/c^2)}{2\pi (a^2 - c^2)} + \frac{32}{\pi} (nn')^2 \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left[\frac{a^2 \Phi(\pi a)}{(x - a^2)(y - a^2)} + \frac{x \Phi(\pi \sqrt{x})}{(y - x)(a^2 - x)} + \frac{y \Phi(\pi \sqrt{y})}{(a^2 - y)(x - y)} \right]_{x=b^2, y=c^2} \right\}, \quad (9)$$

где

$$a^2 = n'^2 - n^2 + \Gamma^2, \quad b^2 = (n' - n)^2, \quad c^2 = (n' + n)^2, \\ \Phi(x) = [\pi/2 - F(x) \cos \pi c] / x.$$

Полное поляронное опускание уровней определяется следующим образом:

$$\Delta E_n^0 = \Delta E_{n=n'}^0 + \Delta E_{n \neq n'}^0.$$

Чтобы получить поляронную добавку к эффективной массе электрона, как обычно в поляронной теории, учтем, что $k_\perp / \gamma_0 \ll 1$. Разлагая (7) по этому малому параметру, можно получить следующее выражение для величины $J = \Delta m^* / a m^*$:

$$J = \Gamma^3 \sum_{\pi'} \left\{ \frac{1 + \delta_{m'}}{2\pi} \left[\left(\frac{b^2}{a^2} + 1 \right) \frac{1}{(b^2 - a^2)^2} - \frac{2b^2}{(b^2 - a^2)^3} \ln \frac{b^2}{a^2} \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2\pi} \left[\left(\frac{c^2}{a^2} + 1 \right) \frac{1}{(c^2 - a^2)^2} - \frac{2c^2}{(c^2 - a^2)^3} \ln \frac{c^2}{a^2} \right] - \right. \\ \left. - \frac{64}{\pi} (nn')^2 \bar{A} \left[\frac{\Phi(\pi\sqrt{x})}{(z-x)(y-x)} + \frac{\Phi(\pi\sqrt{y})}{(x-y)(z-y)} + \frac{\Phi(\pi\sqrt{z})}{(x-z)(y-z)} \right]_{x=a^2, y=b^2, z=c^2} \right\}, \quad (10)$$

где оператор

$$\bar{A} = \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} + 2x \frac{\partial^3}{\partial x \partial y \partial z} + \frac{x^2}{2} \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y \partial z}.$$

Численный расчет по формулам (8)–(10) проведен для $n=1$. Результаты такого расчета приведены на рис. 1, 2. Кривые 1 на этих рисунках

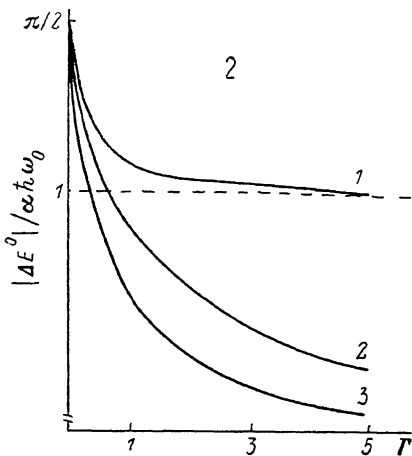


Рис. 1.

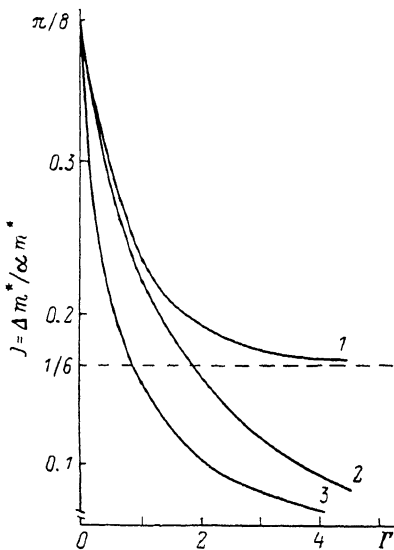


Рис. 2.

представляют зависимости величин $|\Delta E^0| / \alpha \hbar \omega_0$ и $\Delta m^* / \alpha m^*$ в первой подзоне от параметра Γ . Предельные значения величин $|\Delta E^0| / \alpha \hbar \omega_0$ и $\Delta m^* / \alpha m^*$ при $d \rightarrow 0$ и $d \rightarrow \infty$ ($\Gamma \rightarrow 0$ и $\Gamma \rightarrow \infty$) совпадают с известными их значениями для двумерного и трехмерного случаев [10]. Кривые 2 представляют зависимости величин $|\Delta E^0| / \alpha \hbar \omega_0$ и $\Delta m^* / \alpha m^*$ от Γ , найденные при учете лишь внутриподзонных переходов. Кривые 3 представляют те же зависимости, что и кривые 2, найденные в работе [6] на основе матричного элемента (4), рассчитанного с использованием функций Фэнга—Ховарда в качестве волновых функций.

В работе [4] методами магнитофононного резонанса было найдено значение массы полярона $m_p^* = 0.076m_0$ в квантовой яме GaAs шириной $d = 100 \text{ \AA}$. Значение массы полярона в объемном образце GaAs равно $m_p^*, \infty = 0.067m_0$. Такое различие в значениях масс квазидвумерного и объемного поляронов связано в основном с заметной непараболичностью зоны проводимости GaAs.

Легко можно показать, что эффективная масса квазидвумерного электрона в магнитном поле при учете слабой непараболичности увеличивается в соответствии с формулой

$$m^*(d) = m_\infty^* \sqrt{1 + 4(E_n + W_N) / \varepsilon_g}, \quad (11)$$

$$W_N = \hbar \omega_c (N + 1/2), \quad N = 0, 1, \dots$$

m_{∞}^* — эффективная масса электрона в массивном образце, ω_c — циклотронная частота, ε_p — ширина запрещенной зоны. Условия эксперимента [4] соответствуют значениям $n=N=1$.

Для магнитофононного резонанса циклотронная частота соответствует частоте оптического фонона. Используя значение $\hbar\omega_0=36.5$ мэВ и $\varepsilon_p=1.52$ эВ, а также полагая, что $m_{\infty}^* \approx m_p^*$, из (11) получим

$$m^*(100 \text{ \AA}) = 0.076 m_0. \quad (12)$$

Поляронная добавка к эффективной массе равна

$$\Delta m^*/m^*(100 \text{ \AA}) = \alpha J(100 \text{ \AA}),$$

$J(100 \text{ \AA}) \approx 0.24$ (рис. 2, I). Используя значение

$$\alpha = \alpha_0 \sqrt{m^*(100 \text{ \AA})/m_{\infty}^*} = 0.0746,$$

соответствующее массе (12), получим

$$\Delta m^*/m^*(100 \text{ \AA}) \approx 0.018.$$

Согласно работе [3], в квантовой яме GaAs шириной 250 \AA было найдено значение массы полярона, равное $m_p^* = (0.071 \pm 0.0015) m_0$. При $d=250 \text{ \AA}$ значение $J(250 \text{ \AA}) \approx 0.18$, что соответствует

$$\Delta m^*/m^*(250 \text{ \AA}) \approx 0.0126.$$

Такие значения поляронных добавок к массе не превышают точности существующих экспериментов. Для определения соответствующей поляронной добавки к массе следует повысить точность проводимых экспериментов.

В заключение авторы выражают благодарность Ф. М. Гашимзаде за неоднократные обсуждения работы на различных этапах ее выполнения.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Chamberlain J. M., Stradling R. A. // Sol. St. Comm. 1969. V. 7. N 17. P. 1275—1279.
- [2] Kido G., Miura N., Ohno H., Sakaki H. // J. Phys. Soc. Jap. 1982. V. 51. N 7. P. 2168—2173.
- [3] Englert Th., Tsui D. C., Portal J. C., Beerens J., Gossard A. C. // Sol. St. Comm. 1982. V. 44. N 8. P. 1301—1304.
- [4] Mori N., Taniguchi K., Hamaguchi C., Sasa S., Hiyamizu S. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1988. V. 21. N 9. P. 1791—1809.
- [5] Tsui D. C., Englert Th., Cho A. Y., Gossard A. C. // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 44. N 5. P. 341—344.
- [6] Das Sarma S. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 4. P. 2590—2593.
- [7] Liang Xi-Xia, Gu Shi-Wei, Lin D. L. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 4. P. 2807—2814.
- [8] Гуревич В. Л., Паршин Д. А., Штенгель К. Э. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 5. С. 1466—1475.
- [9] Гантмахер В. Ф., Левинсон И. Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М.: Наука, 1984. 352 с.
- [10] Paganjare V. V., Panat P. V. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 6. P. 2942—2945.

Институт физики АН АзССР
Баку

Поступило в Редакцию
9 января 1989 г.