

# Полярное состояние в квантовой точке для частицы с вырожденным зонным спектром

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

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

(Получена 26 ноября 1998 г. Принята к печати 30 ноября 1998 г.)

Найдены энергии электронного и дырочного поляронов в сферических квантовых точках на основе материалов с высокой степенью ионности. Установлено, что учет вырождения валентной зоны приводит к тому, что энергия связи дырочного полярона оказывается больше энергии связи электронного полярона. Полярные эффекты возрастают с уменьшением радиуса квантовой точки. При межзонных оптических переходах происходит частичная компенсация полярных эффектов, так как возникающие электрон и дырка стремятся создать поляризационные ямы противоположных знаков. Показано, что при учете вырождения валентной зоны полной компенсации полярных эффектов не происходит. Поэтому межзонные оптические переходы сопровождаются поляризацией среды. Это может проявляться в появлении серий интенсивных фоновых повторений линий электронных переходов.

## 1. Электронные состояния в квантовых точках

Локализация заряженных частиц и экситонов в квантовых точках приводит к значительному возрастанию взаимодействия частиц между собой и с продольными оптическими фононами. В материалах с высокой степенью ионности усиление взаимодействия в квантовой точке приводит к увеличению полярных эффектов по сравнению с объемными материалами.

В работах [1,2] было показано, что полярные эффекты возрастают с уменьшением размера точки. Параметром усиления является отношение радиуса полярного состояния  $a_0$  к радиусу точки  $R$

$$\frac{a_0}{R} \gg 1. \quad (1)$$

В этом случае реализуется режим сильной локализации носителей в точке (strong confinement regime). Условие (1) означает, что энергия связи полярона меньше энергии размерного квантования частицы в точке. При этом электронная (дырочная) волновая функция нулевого приближения  $\psi_{e,h}$  определяется уравнением Шредингера для квантовой точки, не содержащим электрон-фононного взаимодействия:

$$\hat{H}_{e,h}\psi_{e,h} + V_{e,h}(\mathbf{r})\psi_{e,h} = E_{e,h}\psi_{e,h}, \quad (2)$$

где  $\hat{H}_{e,h}$  — оператор кинетической энергии,  $V_{e,h}(\mathbf{r})$  — потенциальная энергия частицы в квантовой точке. Оператор кинетической энергии электронов в прямозонных полупроводниках имеет вид

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m_e}, \quad (3)$$

где  $m_e$  — эффективная масса электрона.

Энергия и волновая функция, соответствующие решению уравнению Шредингера (2) с кинетической энергией (3) для произвольного сферического потенциала  $V_{e,h}(\mathbf{r})$ ,

зависят от орбитального квантового числа  $l$  и радиального квантового числа  $n$  [3]. Для сферической квантовой точки с бесконечными стенками они были найдены в работе [4]:

$$E_{ln} = \frac{\hbar^2}{2m_e R^2} C_n^2(l),$$

$$\psi_{ln} = \frac{J_l[C_n(l)r/R]Y_{lm}(\theta, \varphi)}{\sqrt{J_{l+1}[C_n(l)]}} \quad (4)$$

где  $C_n(l)$  —  $n$ -й корень  $l$ -й сферической функции Бесселя  $J_l(x)$ ,  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  — шаровые функции. Зависимость волновой функции  $\psi_{ln}$  от проекции момента на ось квантования (т.е. квантового числа  $m$ ) при вычислении энергии связи полярона оказывается несущественной. Поэтому в уравнении (4) и всюду в дальнейшем индекс  $m$  у волновой функции не ставится.

Без учета спин-орбитально отщепленной зоны дырочная зона в типичных полупроводниках четырехкратно вырождена в точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна. Это вырождение можно учесть, если в качестве оператора кинетической энергии дырки  $\hat{H}_h$  использовать сферический гамильтониан Латтинжера:

$$\hat{H}_h = \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma\right) \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \frac{\gamma}{m_0} (\hat{p}\hat{j})^2, \quad (5)$$

где  $\hat{j}$  — оператор момента с  $j = 3/2$ ,  $m_0$  — масса свободного электрона, а параметры  $\gamma_1$  и  $\gamma$  связаны с массами тяжелых и легких дырок  $m_h$  и  $m_l$  соотношениями

$$m_{l,h} = \frac{m_0}{\gamma_1 \pm 2\gamma}. \quad (6)$$

Уравнение (2) с оператором кинетической энергии (5) обладает следующими свойствами. Для сферически симметричного потенциала квантовой точки  $V_h(\mathbf{r})$  волновые функции дырки классифицируются по значению момента  $\hat{F} = \hat{l} + \hat{j}$ , где  $\hat{l}$  — орбитальный момент. При этом волновая функция дырки с суммарным моментом  $\hat{F}$

выражается через волновые функции для моментов  $\hat{l}$  и  $\hat{j}$  [3, §106]. При  $j = 3/2$  имеем

$$\psi_{FN} = \sqrt{2F+1} \sum_l (-1)^{l-3/2+M} R_{F,l}(r) \times \sum_{m,\mu} \begin{pmatrix} l & 3/2 & F \\ m & \mu & -M \end{pmatrix} Y_m(\theta, \varphi) \chi_{\mu}. \quad (7)$$

Здесь  $M$  — проекция момента  $\hat{F}$  на ось квантования,  $\chi_{\mu}$  — проекция собственного вектора матрицы  $|j_z|$ ,  $\mu$  — собственное значение, соответствующее этому вектору ( $|j_z|\chi_{\mu} = \mu\chi_{\mu}$ ), величина

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

—  $3j$ -символ Вигнера. Суммирование в (7) идет по всем значениям квантового числа  $l$  в интервале  $|F - 3/2| \leq l \leq F + 3/2$  и по значениям  $m, \mu$ , удовлетворяющим условию  $m + \mu = M$ . Основное состояние дырки в квантовой точке соответствует моменту  $F = 3/2$ . Для произвольного уровня размерного квантования энергия уровня  $E_{FN}$  и волновая функция  $\psi_{FN}$  зависят от полного момента  $\hat{F}$  и радиального квантового числа  $N$ . Зависимость волновой функции дырки от проекции момента  $M$ , как и зависимость волновой функции электрона от  $m$ , для расчета энергии связи полярона несущественна. Поэтому индекс  $M$  в функции (7) опущен.

В выражении для волновой функции дырки (7) угловая зависимость приведена в явном виде, а радиальные волновые функции  $R_{F,l}$  зависят от конкретного вида потенциала  $V(r)$ . В работах [5,6] были найдены уравнения для  $R_{F,l}$  в случае произвольного сферического потенциала. В случае  $F = 3/2$  для квантовой точки с бесконечными стенками радиальные функции найдены Эфросом [7]. Они имеют вид

$$R_{3/2,0} \equiv R_0 = A(\beta) \left[ J_0(kr) - \frac{J_0(kR)}{J_0(k\sqrt{\beta}R)} J_0(k\sqrt{\beta}r) \right],$$

$$R_{3/2,2} \equiv R_2 = A(\beta) \left[ J_2(kr) + \frac{J_0(kR)}{J_0(k\sqrt{\beta}R)} J_2(k\sqrt{\beta}r) \right], \quad (8)$$

где  $A(\beta)$  — нормировочный коэффициент,  $\beta = m_l/m_h$ ,  $k$  представляет собой решение трансцендентного уравнения, следующего из условия обращения в нуль волновых функций (8) на бесконечных стенках ямы:

$$J_0(kR)J_2(k\sqrt{\beta}R) + J_0(k\sqrt{\beta}R)J_2(kR) = 0. \quad (9)$$

Параметр  $k$  связан с энергией основного состояния дырки  $E_h$  следующим образом:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_h E_h}. \quad (10)$$

Зависимость  $k$  от отношения масс  $\beta = m_l/m_h$  приведена в работах [7,8]. При возрастании  $\beta$  в интервале

$0 \leq \beta \leq 1$  безразмерный параметр  $kR$  уменьшается в пределах

$$C_2(1) \geq kR \geq C_0(1), \quad (11)$$

где  $C_2(1) = 5.76$  — первый корень второй сферической функции Бесселя  $J_2$ ,  $C_0(1) = \pi$  — первый корень нулевой функции  $J_0$ .

Когда массы легкой и тяжелой дырки совпадают ( $\beta = 1$ ), зависящая от углов часть волновой функции  $\psi_{3/2,N}$  из (7) обращается в нуль, а  $R_0$  из (8) совпадает с радиальной частью волновой функции  $\psi_{01}$  из соотношений (4) для невырожденной зоны.

## 2. Электронный и дырочный поляроны

В квантовых точках на основе материалов с высокой степенью ионности сильное электрон-фононное взаимодействие приводит к возникновению поляронных состояний. Поляронные состояния проявляются в заметном изменении энергий размерного квантования электронов и дырок в квантовой точке.

Найдем энергию связи полярона в квантовой точке. Для этого в уравнение Шредингера (2) следует добавить энергию электрон-фононного взаимодействия и собственную энергию фононов. Получим

$$\left[ \hat{H}_{e,h} + V_{e,h} + \sum_q \hbar\omega_q a_q^\dagger a_q + e\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\varepsilon}} \sum_q \sqrt{\omega_q} \frac{1}{q} (a_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + a_q^\dagger e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}) \right] \psi = E\psi, \quad (12)$$

где  $a_q, a_q^\dagger$  — операторы уничтожения и рождения фононов,  $\varepsilon^{-1} = \varepsilon_0^{-1} - \varepsilon_\infty^{-1}$  — оптическая диэлектрическая проницаемость. Параметр (1) позволяет при вычислении энергии полярона использовать адиабатическое приближение, при котором быстрым является движение электрона (дырки) в квантовой точке, а медленным — поляронное движение. Выполняя усреднение уравнения (12) по волновым функциям быстрого движения (4) или (7), получим уравнение для частицы в поляризационной фононной яме, зависящее от медленных фононных переменных:

$$\hat{H}^{(ln)} = E_{ln} + \sum_q \hbar\omega_q a_q^\dagger a_q + e\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\varepsilon}} \sum_q \frac{\sqrt{\omega_q}}{q} [\rho_{ln}(q)a_q + \rho_{ln}^*(q)a_q^\dagger], \quad (13)$$

где

$$\rho_{ln}(q) = \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \psi_{ln}^2(\mathbf{r}) d^3r. \quad (14)$$

Здесь  $\rho_{ln}(q)$  — фурье-компонента плотности электронных состояний на уровне с квантовыми числами  $(l, n)$ .

Уравнение (13) приводится к диагональному по операторам  $a_q^+$  и  $a_q$  виду с помощью унитарного преобразования

$$U_{ln} = \exp \left[ \sum_q \frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi}{V\varepsilon\hbar\omega_q}} \left( \rho_{ln}(q)a_q^+ - \rho_{ln}^*(q)a_q \right) \right]. \quad (15)$$

Применяя унитарное преобразование (15) к уравнению (13), получим

$$\hat{H}^{(ln)} = E_{ln} - \frac{2\pi e^2}{V\varepsilon} \sum_q \frac{|\rho_{ln}(q)|^2}{q^2} + \sum_q \hbar\omega_q a_q^+ a_q. \quad (16)$$

Второе слагаемое в правой части уравнения (16) представляет собой энергию связи электрона  $\Delta E^{(ln)}$  на уровне  $(ln)$  в поляризонной яме. Такое состояние называется поляроном [9]. Подставив в (16) величину  $\rho_{ln}(q)$  из (14) и переходя от суммирования по  $q$  к интегрированию, получим

$$\begin{aligned} \Delta E^{(ln)} &= -\frac{2\pi e^2}{V\varepsilon} \sum_q \frac{|\rho_{ln}(q)|^2}{q^2} \\ &= -\frac{e^2}{2\varepsilon} \int \frac{\psi_{ln}^2(\mathbf{r})\psi_{ln}^2(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3r d^3r'. \end{aligned} \quad (17)$$

Аналогично получается выражение для энергии дырочного полярона. Оно отличается от (17) только тем, что в него входит интеграл от квадратов дырочных волновых функций  $\psi_{FN}^2(\mathbf{r})$  из (7). Для нахождения энергии связи полярона подставим в (17) волновые функции (4) и (7) и вычислим соответствующие интегралы.

В случае простой зоны с волновой функцией (4) получим для электронного полярона:

$$\Delta E_e^{(ln)} = -\frac{e^2}{2\varepsilon R} B_e^{(ln)}, \quad (18)$$

где  $B_e^{(ln)}$  — численные коэффициенты, отличающиеся для разных уровней размерного квантования  $(ln)$ . Для основного состояния электрона в квантовой точке соответствующий коэффициент  $B_e^{(01)}$  равен

$$B_e^{(01)} = 2 \left( 1 - \frac{\text{Si}(2\pi)}{2\pi} + \frac{\text{Si}(4\pi)}{4\pi} \right) \approx 1.79,$$

где  $\text{Si}(x)$  — интегральный синус. Отметим, что, когда потенциальная энергия квантовой точки описывается ямой с бесконечными стенками, волновые функции электрона (4) и энергия связи электронного полярона (18) не зависят от массы электрона. При учете конечной высоты барьера такая зависимость от массы появляется.

Для нахождения энергии связи дырочного полярона в случае вырожденной валентной зоны в уравнения (17) следует подставлять волновые функции (7). Получим

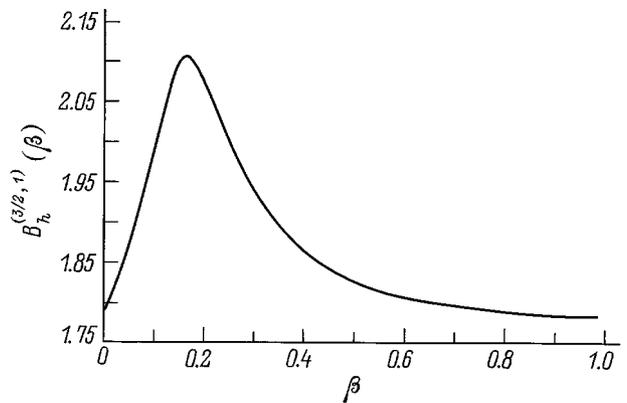
$$\Delta E_h^{(FN)} = -\frac{e^2}{2\varepsilon R} B_h^{(FN)}(\beta), \quad (19)$$

где безразмерный множитель  $B_h^{(FN)}(\beta)$  зависит от номера уровня размерного квантования  $(FN)$  и от отношения

масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$ . Поскольку угловые зависимости волновых функций (7) известны точно, при нахождении энергии дырочного полярона интегрирование по углам можно выполнить в аналитическом виде. В результате для основного состояния дырки получим

$$\begin{aligned} B_h^{(3/2,1)} = R \left\{ \int_0^R r^2 dr \left[ R_0^2(r) + R_2^2(r) \right] \left[ \frac{1}{r} \int_0^r r_1^2 dr_1 \left[ R_0^2(r_1) \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + R_2^2(r_1) \right] + \int_r^R r_1 dr_1 \left[ R_0^2(r_1) + R_2^2(r_1) \right] \right] \right. \\ \left. + \frac{4}{5} \int_0^R r^2 dr R_0(r) R_2(r) \left[ \int_0^r \frac{r_1^4}{r^3} dr_1 R_0(r_1) R_2(r_1) \right. \right. \\ \left. \left. + r^2 \int_r^R \frac{dr_1}{r_1} R_0(r_1) R_2(r_1) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (20)$$

В области  $\beta \approx 1$  вырождение энергетических зон слабо влияет на вид радиальной части волновой функции. Функция  $R_2(r)$  оказывается малой и параметр  $B_h^{(3/2,1)}$  близок к значению коэффициента  $B_e^{(0,1)}$  для невырожденной зоны. При произвольном отношении масс коэффициенты  $B_h^{FN}(\beta)$  могут быть найдены только численно. Зависимость  $B_h^{(3/2,1)}(\beta)$ , найденная численным интегрированием уравнения (20), представлена на рис. 1. Максимальное отличие энергии связи полярона в вырожденной зоне от энергии полярона в простой зоне реализуется при  $\beta \approx 0.2$ . Ранее именно при таких значениях параметра  $\beta$  получались некоторые особенности в поведении энергии связи дырки в сферической квантовой точке [7] и в расщеплении энергетических уровней дырки в квантовой точке при наличии несферического возмущения [8].



**Рис. 1.** Зависимость безразмерного коэффициента  $B_h^{(3/2,1)}$  из выражения для энергии связи дырочного полярона (20) от отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$ .

### 3. Полярный экситон

При межзонных оптических переходах в квантовой точке одновременно возникают или исчезают электрон и дырка. В ионных материалах каждая частица стремится создать свою поляризационную яму, причем потенциальные энергии этих ям имеют противоположные знаки. В результате происходит частичная компенсация полярных эффектов. Эта компенсация оказывается полной, если и электрон, и дырку описывать в модели невырожденных зон. Однако различие в распределениях плотности заряда электрона и дырки, возникающее вследствие вырождения валентной зоны, приводит к тому, что полной компенсации полярных эффектов не происходит.

При наличии в квантовой точке двух заряженных частиц — электрона и дырки — уравнение Шредингера с учетом взаимодействия частиц с полярными оптическими фононами и их кулоновского взаимодействия записывается аналогично (12):

$$\left\{ \hat{H}_e + \hat{H}_h + V_e + V_h - \frac{e^2}{\varepsilon_0 |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + \sum_q \hbar \omega_q a_q^+ a_q \right. \\ \left. + e \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\varepsilon}} \sum_q \sqrt{\omega_q} \frac{1}{q} \left[ (a_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_e} + a_q^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_e}) \right. \right. \\ \left. \left. - (a_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_h} + a_q^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_h}) \right] \right\} \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h). \quad (21)$$

При выполнении условия сильной локализации (1) и для электрона, и для дырки энергия кулоновского взаимодействия частиц между собой, а также энергия их взаимодействия с полярными оптическими фононами оказываются меньше интервала между уровнями размерного квантования в точке. При этом волновая функция электронно-дырочной пары сводится к произведению волновых функций электрона и дырки на определенных уровнях размерного квантования:

$$\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi_{ln}(\mathbf{r}_e) \psi_{FN}(\mathbf{r}_h), \quad (22)$$

а волновые функции  $\psi_{ln}(\mathbf{r}_e)$  и  $\psi_{FN}(\mathbf{r}_h)$  определяются уравнениями (4) и (7) соответственно.

Усредняя уравнение (21) по волновым функциям быстрого движения (22), получим зависимость энергии полярного экситона от медленных фононных переменных:

$$\hat{H}_{\text{ex}}^{(ln, FN)} = E_{ln, FN} + \sum_q \hbar \omega_q a_q^+ a_q + e \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\varepsilon}} \\ \times \sum_q \frac{\sqrt{\omega_q}}{q} (\rho_{ln, FN}(q) a_q + \rho_{ln, FN}^*(q) a_q^+), \quad (23)$$

где

$$\rho_{ln, FN}(q) = \rho_{ln}(q) - \rho_{FN}(q) \quad (24)$$

представляет собой фурье-компоненту разности плотностей распределения заряда для электрона и дырки. Ве-

личина  $E_{ln, FN}$  представляет собой энергию оптического перехода без учета электрон-фононного взаимодействия и содержит усредненную по волновой функции (22) энергию кулоновского взаимодействия электрона и дырки.

Уравнение (23) по своей структуре аналогично уравнению (13) для электронного полярона. Применяя к нему унитарное преобразование, аналогичное (15),

$$U_1 = \exp \left[ \sum_q \frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi}{V\varepsilon \hbar \omega_q}} (\rho_{ln, FN}(q) a_q^+ - \rho_{ln, FN}^*(q) a_q) \right], \quad (25)$$

где  $\rho_{ln, FN}(q)$  включает плотность как для электрона, так и для дырки, получим энергию связи полярного экситона  $\Delta E_{ln, FN}$  в виде

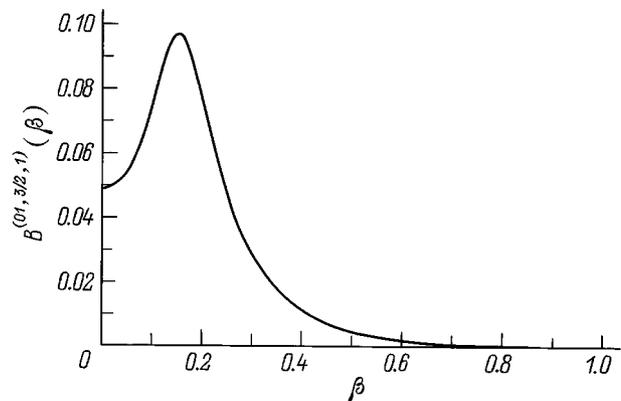
$$\Delta E_{ln, FN} = - \frac{e^2}{2\varepsilon} \int \frac{d^3 r d^3 r'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} [\psi_{ln}^2(\mathbf{r}) - \psi_{FN}^2(\mathbf{r})] \\ \times [\psi_{ln}^2(\mathbf{r}') - \psi_{FN}^2(\mathbf{r}')]. \quad (26)$$

Эта энергия может быть представлена в виде, аналогичном (19):

$$\Delta E_{ln, FN} = - \frac{e^2}{2\varepsilon R} B^{ln, FN}(\beta), \quad (27)$$

причем безразмерные коэффициенты  $B^{(ln, FN)}(\beta)$  зависят от отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$ . График зависимости  $B^{(01, 3/2, 1)}(\beta)$  для оптического перехода между основными состояниями электрона ( $l = 0, n = 1$ ) и дырки ( $F = 3/2, N = 1$ ) приведен на рис. 2. Величина полярного сдвига  $\Delta E_{ln, FN}$  при изменении размеров точки растет пропорционально  $R^{-1}$ .

Из рис. 2 видно, что взаимодействие с фононами для электронно-дырочной пары оказывается существенным только при достаточно малом отношении масс легкой и тяжелой дырок  $\beta < 0.6$ . При  $\beta \approx 1$  функция  $R_2$  из (8) оказывается малой, а  $R_0$  сводится к электронной волновой функции  $\psi_{01}$  из (4). При этом происходит практически полная компенсация полярных эффектов от электрона и дырки.



**Рис. 2.** Зависимость безразмерного коэффициента  $B^{(01, 3/2, 1)}$  из выражения для энергии связи основного состояния полярного экситона (27) от отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$ .

#### 4. Межзонные оптические переходы

Полярные состояния в квантовых точках проявляются при межзонных оптических переходах в двух эффектах. Во-первых, возникают интенсивные фоновые повторения линии межзонного электронного перехода вследствие поляризации среды заряженными частицами. Во-вторых, из-за различия поляризаций в начальном и конечном состояниях возникает большой стоксов сдвиг между линиями поглощения и испускания.

При поглощении света в начальном состоянии имеется только квант света и нет ни электрона в зоне проводимости, ни дырки в валентной зоне. Волновую функцию такого начального состояния можно приближенно записать в виде

$$\Psi_i = \delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h) \Phi_{\text{osc}}^i. \quad (28)$$

Здесь наличие множителя  $\delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h)$  означает, что электрон находится еще в валентной зоне, — в той точке, где после поглощения появится дырка.  $\Phi_{\text{osc}}^i$  — колебательная волновая функция начального состояния.

Волновая функция конечного состояния равна

$$\Psi_f = \psi_{ln}(\mathbf{r}_e) \psi_{FN}(\mathbf{r}_h) \Phi_{\text{osc}}^f. \quad (29)$$

Здесь первые два множителя соответствуют волновой функции электронно-дырочной пары из уравнения (22),  $\Phi_{\text{osc}}^f$  — колебательная волновая функция конечного состояния. Далее показано, что из-за различия поляризаций среды в начальном и конечном состоянии функция  $\Phi_{\text{osc}}^f$  имеет сдвинутое по сравнению с  $\Phi_{\text{osc}}^i$  положение равновесия.

Вероятность поглощения кванта света при дипольном переходе имеет вид

$$W_{ln, FN}^{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar} |P_{cv}|^2 |I_{ln, FN}|^2 \sum_f W_{if} \delta(E_{ln, FN} - E_f - \hbar\omega). \quad (30)$$

Здесь  $P_{cv}$  — матричный элемент межзонного перехода по блоховским модулирующим функциям,  $I_{ln, FN}$  — интеграл перекрытия огибающих волновых функций электрона (4) и дырки (7),  $W_{if}$  — квадрат интеграла перекрытия колебательных волновых функций со сдвинутыми положениями равновесия,  $E_f$  — колебательная энергия конечного состояния системы. Мы рассматриваем случай достаточно низких температур  $T \ll \hbar\omega_0$ , где  $\omega_0$  — частота предельного оптического фонона, и поэтому процессы с поглощением фонона в выражении (30) не учитываются. Соответствующий  $\delta$ -функции закон сохранения энергии отражает обстоятельство, что за счет сдвига положения равновесия колебательных состояний электронный переход сопровождается испусканием любого числа  $K$  оптических фононов, суммарная энергия которых равна  $E_f$  уже в 1-м порядке теории возмущений. В законе сохранения энергии в соотношении (30) учтено, что, так как до поглощения кванта света в системе не было заряженных частиц, процесс поглощения происходит в отсутствие поляризации среды.

Для разрешенного межзонного перехода матричный элемент  $P_{cv}$  отличен от нуля. При этом интеграл перекрытия огибающих волновых функций электрона и дырки

$$I_{ln, FN} = \int d^3r \psi_{ln}(\mathbf{r}) \psi_{FN}(\mathbf{r}) \quad (31)$$

определяет правила отбора для уровней размерного квантования электрона и дырки в квантовой точке. Из вида волновых функций (4) и (7) следует, что при учете вырождения валентной зоны разрешенным оказывается большее число переходов между возбужденными состояниями электрона и дырки, чем для невырожденных зон.

Для перехода между основными состояниями электрона ( $l = 0, n = 1$ ) и дырки ( $F = 3/2, N = 1$ ) получим

$$I_{01, 3/2, 1}(\beta) = A(\beta) \frac{\sqrt{2}\pi}{R^{3/2}} \int_0^R r^2 dr R_0 J_0(\pi r/R). \quad (32)$$

При  $\beta = 1$  имеем  $I_{01, 3/2, 1} = 1$ , а предел  $\beta \rightarrow 0$  соответствует

$$I_{01, 3/2, 1}(0) = \frac{A(0) \sqrt{2} C_1(2) \sin C_1(2)}{\pi[\pi^2 - C_1(2)^2]} \approx 0.335.$$

Видно, что величина  $I_{01, 3/2, 1}(\beta)$  достаточно слабо меняется при изменении отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$ .

Сдвиг положения равновесия колебательных волновых функций при вычислении вероятности перехода (30) возникает в наших расчетах как следствие унитарного преобразования (25), которое было применено к гамма-кванту (23). Действительно, вероятность многофононных переходов определяется входящим в (30) интегралом по колебательным координатам  $x_q$

$$W_{if} = \left| \int dx_q \Phi_{\text{osc}}^i \Phi_{\text{osc}}^f \right|^2 = \left| \int dx_q \Phi_i(\dots x_q \dots) e^{U_1} \Phi_f(\dots x_q \dots) \right|^2. \quad (33)$$

Функции  $e^{U_1} \Phi_f(\dots x_q \dots)$  и  $\Phi_i(\dots x_q \dots)$  оказываются неортогональными, что, как показали Хуанг и Рис [10], и приводит к многофононным переходам.

Найдем сдвиг положений равновесия осцилляторов при каноническом преобразовании (25). Подставим в (25) обычные выражения для операторов рождения и уничтожения для  $q$ -го гармонического осциллятора через операторы координаты  $\hat{x}_q$  и импульса  $\hat{p}_q$ :

$$a_q = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2M_0\omega_q}{\hbar}} \left( \hat{x}_q + i \frac{\hat{p}_q}{M_0\omega_q} \right), \\ a_q^+ = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2M_0\omega_q}{\hbar}} \left( \hat{x}_q - i \frac{\hat{p}_q}{M_0\omega_q} \right), \quad (34)$$

где  $M_0$  — масса осциллятора. Учитывая, что фурье-компонента электронной плотности  $\rho_{ln, FN}(q)$  — величина

на действительная, и подставляя (34) в (25), получим

$$\hat{U}_1 = \exp \left[ -i \sum_q \frac{e}{q\hbar\omega_q} \sqrt{\frac{2\pi}{M_0V\varepsilon}} \rho_{ln, FN}(q) \hat{p}_q \right]. \quad (35)$$

Из квантовой механики известно [3, §15], что для осциллятора с координатой  $x_q$  оператор  $\hat{U}_1$  из (35) представляет собой оператор параллельного переноса на конечное расстояние, равное

$$s_q = -\frac{e}{\omega_q q} \rho_{ln, FN}(q) \sqrt{\frac{2\pi}{M_0V\varepsilon}}.$$

В результате вероятность многофононных переходов  $W_{if}$  из (33) оказывается равной произведению вероятностей перехода  $\omega_q$  для каждого  $q$ -го осциллятора

$$W_{if} = \prod_q \omega_q = \prod_q \left| \int dx_q \Phi_i(x_q) \Phi_f(x_q - s_q) \right|^2. \quad (36)$$

Вероятность перехода  $w_q(K_q)$  для осциллятора с координатой  $x_q$  при испускании им  $K_q$  оптических фононов, вычисленная с использованием волновых функций гармонического осциллятора, имеет вид [3, §41]

$$\omega_q(K_q) = \frac{\left( |s_q|^2 \frac{M_0\omega_q}{\hbar} \right)^{K_q}}{2^{K_q} K_q!} \exp \left[ -\frac{1}{2} |s_q|^2 \frac{M_0\omega_q}{\hbar} \right]. \quad (37)$$

Вероятность испускания некоторого числа фононов  $K$  получается перемножением вероятностей  $w_q(K_q)$  испускания  $q$ -м осциллятором  $K_q$  фононов из (37), так что сумма по всем осцилляторам дает  $\sum_q K_q = K$ . Учитывая все возможные перестановки по реализациям  $K_q$ , получим

$$W(K) = \frac{\left( \sum_q |s_q|^2 \frac{M_0\omega_q}{\hbar} \right)^K}{2^K K!} \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_q |s_q|^2 \frac{M_0\omega_q}{\hbar} \right]. \quad (38)$$

Вычисления вероятности (38) при учете фононной дисперсии  $\omega_q$  достаточно громоздки. Однако для оптических фононов, обладающих слабой дисперсией,  $\omega_q \approx \omega_0$ , получим

$$W(K) = \frac{S_0^K}{2^K K!} \exp \left( -\frac{1}{2} S_0^2 \right), \quad (39)$$

где  $S_0$  выражается через энергию связи поляронного экситона (26):

$$S_0 = \sum_q |s_q|^2 \frac{M_0\omega_0}{\hbar} = \frac{\Delta E_{ln, FN}}{\hbar\omega_0}. \quad (40)$$

Отметим, что при  $K = 0$  получается вероятность для бесфононной линии, равная

$$W(0) = e^{-S_0^2/2}. \quad (41)$$

Когда дисперсия оптических фононов не учитывается, т.е.  $\omega_q = \omega_0$ , конечное состояние системы определяется только числом испущенных фононов  $K$ . Поэтому входящая в (30) сумма по конечным состояниям системы сводится к сумме по всем возможным значениям  $K$ , а энергия  $E_f$  оказывается равной  $E_f = K\hbar\omega_0$ . Вероятность поглощения кванта света (30) имеет вид

$$W_{ln, FN}^{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar} |P_{cv}|^2 |I_{ln, FN}|^2 \sum_K W(K) \delta(E_{ln, FN} - K\hbar\omega_0 - \hbar\omega). \quad (42)$$

Когда поляронная энергия больше энергии оптического фонона, то

$$S_0 > 1, \quad (43)$$

и вероятность многофононных переходов оказывается большой. При этом максимальную интенсивность имеет  $K$ -я линия фононного повторения с  $K \approx S_0$ . Для каждого  $K$  можно подобрать квантовую точку с таким значением  $\Delta E_{ln, FN}$  из (27), чтобы при межзонном электронном переходе наибольшую интенсивность имело  $K$ -е фононное повторение.

При испускании кванта света оптический электронный переход (рекомбинация электрона и дырки) происходит внутри полярнизационной потенциальной ямы, соответствующей сдвигу электронной энергии на величину  $\Delta E_{ln, FN}$ . После рекомбинации электрона и дырки в процессе излучения среда остается поляризованной. Поэтому энергия конечного состояния превышает энергию основного состояния. В рамках нашей модели бездисперсионных фононов эта разница энергий равна той же величине  $\Delta E_{ln, FN}$  из (27). Поэтому вероятность такого перехода оказывается равной

$$W_{(ln, FN)}^{\text{em}}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} P_{cv}^2 |I_{ln, FN}|^2 \sum_K W(K) \times \delta(E_{ln, FN} - 2\Delta E_{ln, FN} - K\hbar\omega_0 - \hbar\omega). \quad (44)$$

Из сравнения выражений (42) и (44) видно, что между линиями поглощения и испускания возникает стоков сдвиг  $\Delta E_s$ , равный

$$\Delta E_s = 2\Delta E_{ln, FN}. \quad (45)$$

Таким образом, поляронные эффекты при межзонных переходах в квантовых точках должны проявляться как в появлении интенсивных фононных повторений, так и в возникновении значительного стокова сдвига. Для идентификации поляронных эффектов оба явления должны наблюдаться одновременно. Каждое из них по отдельности может быть объяснено другими механизмами.

Экспериментально в квантовых точках на основе  $A^{II}B^{VI}$  наблюдались и большой стоков сдвиг линий оптических переходов [11], и интенсивные фононные повторения [12]. Однако нам неизвестны эксперименты, в которых оба этих явления и их зависимости от размеров квантовых точек исследовались бы одновременно.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 98-02-18295).

## Список литературы

- [1] И.П. Ипатова, А.Ю. Маслов, О.В. Прошина. ФТП, **37**, 1819 (1995).
- [2] I.P. Ipatova, A.Yu. Maslov, O.V. Proshina. Phys. Low-Dim. Structur., № 4–5, 1, (1996).
- [3] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1989).
- [4] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос. ФТП, **16**, 1209 (1982).
- [5] Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов. ФТП, **5**, 2191 (1971).
- [6] A. Baldareschi, N.O. Lipari. Phys. Rev. B, **8**, 2697 (1973).
- [7] A.L. Efros. Phys. Rev. B, **46**, 7448 (1992).
- [8] A.L. Efros, A.V. Rodina. Phys. Rev. B, **47**, 10 005 (1993).
- [9] С.И. Пекар. *Исследования по электронной теории кристаллов* (М.; Л., Гостехиздат, 1951).
- [10] Huang Kun, A. Rhys. Proc. Roy. Soc., **A204**, 406 (1950).
- [11] G. Scamarcio, V. Spagnolo, G. Ventruti, M. Lugara, G.C. Regnini. Phys. Rev. B, **53**, R 10 489 (1996).
- [12] V. Yungnickel, F. Henneberger, J. Puls. *Proc. 22 Int. Conf. Phys. Semicond.* (World Scientific, Singapore, 1994) v. 3, p. 2011; V. Yungnickel, F. Henneberger. J. Luminesc., **70**, 238 (1996).

Редактор Т.А. Полянская

## Polaron state of the particle with degenerate energy spectrum in quantum dot

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

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

**Abstract** the electron and hole polaron energies are found in a quantum dot based on the materials with high ionicity. It is established that the energy of hole polaron is larger than the energy of electron polaron due to the complex valence band structure. The polaron energies increase with decreasing of the quantum dot radius. Polaron effects are partly compensated for the interband optical transitions because the electron and hole created in the transition are trying to form polarization potential wells with opposite signs. It is shown that there is no total compensation when the complex valence band structure is taken into account. Therefore the interband transitions are accompanied by the polarization of the medium. The polarization leads to the appearance of intensive phonon replicas of the electron transitions.

Fax: (812)2471017 (Ipatova)  
E-mail: iip.ton@pop.ioffe.rssi.ru