

УДК 538.91

## ПОЛЯРОНЫ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

*А. И. Бибик*

Институт молекулярной и атомной физики, Минск, Белоруссия

*Б. Герлах*

Институт физики, Университет Дортмунда, Германия

*М. О. Дзеро*

Национальная лаборатория высоких магнитных полей,  
Университет Флориды, Таллахасси, США

*М. А. Смондырев*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна  
Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова

ВВЕДЕНИЕ	162
ФОРМУЛИРОВКА МОДЕЛИ	164
ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ	165
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	168

УДК 538.91

## ПОЛЯРОНЫ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

*А. И. Бибик*

Институт молекулярной и атомной физики, Минск, Белоруссия

*Б. Герлах*

Институт физики, Университет Дортмунда, Германия

*М. О. Дзеро*

Национальная лаборатория высоких магнитных полей,  
Университет Флориды, Таллахасси, США

*М. А. Смондырев*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна  
Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова

Развита модель, описывающая многослойную планарную гетероструктуру вида  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  как эффективную среду, чьи средние характеристики определяются усреднением соответствующих параметров слоев по волновой функции основного состояния.

A model is developed which describes a multilayered planar heterostructure  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  as an effective medium. The mean characteristics of the medium are defined by averaging the subsequent parameters of the layers over the ground state wave function.

### ВВЕДЕНИЕ

Маломерные системы — квазидвумерные квантовые ямы, квазиодномерные квантовые проволоки и квазинульмерные квантовые точки — привлекают в последнее десятилетие огромное внимание исследователей благодаря появившейся возможности их практического использования. Вместо изучения объемных образцов стало доминировать исследование многослойных полупроводниковых гетероструктур. Возможность управлять по желанию электронными свойствами полупроводниковых приборов стимулировала как фундаментальные исследования, так и развитие технических приложений. Первые многослойные образцы появились в начале 70-х гг., и в [1] мы приводим ряд работ на эту тему. Одной из наиболее распространенных гетероструктур является квантовая яма, где слой полупроводникового материала размещен между

слоями другого материала. Если толщина внутреннего слоя такого «сэндвича» (типичные значения — в интервале  $10 \div 1000 \text{ \AA}$ ) много меньше толщины внешних слоев, последние могут рассматриваться как полупространственные объемные образцы. Разница в величине энергетической щели материалов ямы и барьера порождает удерживающий потенциал, зависящий от координаты в направлении роста слоев. Типичные значения высоты энергетических барьеров составляют несколько сотен мэВ. Фантастический прогресс в изготовлении гетероструктур позволяет сейчас создавать квантовые ямы и проволоки самых разных форм и размеров. Примеры изображений таких маломерных структур можно найти на сайтах [2].

Цель настоящей статьи — изложение результатов, полученных при анализе зависимости энергии элементарного возбуждения от ширины квантовой ямы в планарных гетероструктурах. Мы сосредоточимся на системах с электрон-фононным взаимодействием, где простейшее возбуждение — электрон, взаимодействующий с колебаниями решетки. Если гетероструктура сделана из поляризуемых материалов, то электрон-фононное взаимодействие изменяет свойства электрона. Электрон, окруженный облаком виртуальных фононов, превращается в квазичастицу — полярон. При этом изменяется его энергия и эффективная зонная масса. Естественно, эти изменения зависят от удерживающего потенциала. Представляет интерес изучение зависимости характеристик полярона от параметров, значениями которых мы можем управлять (ширина квантовой ямы, высота потенциальных барьеров, форма потенциала). Чтобы понять на качественном уровне поведение энергии связи как функции ширины  $L$  потенциальной ямы, представим себе локализованный в ней кулоновский центр. При большой ширине потенциальной ямы энергия связи стремится к обычному значению  $1 Ry$ . Если потенциальный барьер бесконечно высок, то при малой ширине ямы энергия связи стремится к своему двумерному точному решению  $4 Ry$ . Если же высота потенциального барьера конечна, то с уменьшением  $L$  первоначальный рост энергии связи прекратится, так как станет проявляться туннелирование частицы под барьером. В результате частице снова станет доступным все пространство и энергия связи вернется к своему трехмерному значению  $1 Ry$ . Значит, функция  $E(L)$  будет иметь пик при некотором конечном значении ширины ямы. Это, безусловно, так, если материалы квантовой ямы и барьера имеют одинаковые характеристики. В реальных структурах они отличаются, и при больших ширинах ямы энергия связи стремится к значению  $1 Ry_{in}$ , а при малых — к значению  $1 Ry_{out}$ , где  $Ry_{in}$ ,  $Ry_{out}$  — величина энергии Ридберга для материалов ямы и барьера соответственно. Поскольку обычно  $Ry_{out} > Ry_{in}$ , вопрос о выживании пика энергии связи на качественном уровне не решается. Наши исследования экситонов в планарной гетероструктуре [3] показали, что пик энергии связи существует, что подтверждается экспериментальными данными [4, 5]. Результаты

«охоты» за пиком энергии связи и эффективной массы полярона изложены ниже.

## 1. ФОРМУЛИРОВКА МОДЕЛИ

Точное решение задачи должно учитывать наличие квантованных фононных мод в каждом слое, поверхностных фононных мод на границе слоев и полупространственных объемных мод за пределами квантовой ямы. Следует учесть также, что каждый слой имеет свои значения диэлектрических постоянных и зонных масс электрона, так что существует еще и проблема сшивания решений, найденных для отдельных слоев.

При большом числе слоев численное решение задачи становится невозможным даже для современных компьютеров. Поэтому мы предложили приближенную модель эффективной среды [6]. Мы рассматриваем квантовую яму в направлении  $z$  роста слоев GaAs/Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As. Характеристики среды зависят от молярной концентрации  $x$  алюминия (экспериментальные данные берутся из [7]), а последняя зависит от конструкции квантовой ямы, т. е. от координаты  $z$ . Это приводит к зависимости от  $z$  зонной массы  $m(z)$  электрона, частоты  $\omega(z)$  оптических фононов и константы  $\alpha(z)$  электрон-фононного взаимодействия. Удерживающий потенциал  $V(z)$ , возникающий из-за различия энергетических щелей при контакте разных материалов, учитывается нами точно. Модель предполагает, что этот потенциал действует в однородной эффективной среде со средними значениями параметров. Естественно, в такой среде имеется лишь объемная фононная мода, так что полный гамильтониан в нашей модели — это гамильтониан полярона Пекара–Фрелиха. Его электронная часть имеет вид

$$H_{\text{el}} = H_{\text{el},\parallel} + H_{\text{el},\perp} = \frac{\mathbf{p}_{\parallel}^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + V(z). \quad (1)$$

Входящая сюда *средняя зонная масса*  $m$  электрона определяется уравнениями

$$H_{\text{el},\perp}\psi_1 = E_1\psi_1, \quad \frac{1}{m} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{|\psi_1(z)|^2}{m(z)}, \quad (2)$$

где  $\psi_1(z)$ ,  $E_1$  — волновая функция и энергия основного состояния движения электрона вдоль оси  $z$ . Поскольку  $\psi_1$  и  $E_1$  зависят от  $m$ , мы имеем, на самом деле, систему двух уравнений (2) для вычисления средней массы  $m$  электрона. Принятый способ усреднения обратной массы по различным слоям может быть мотивирован как усреднение той части энергии частицы ( $\mathbf{p}_{\parallel}^2/2m$ ), которая связана со свободным движением электрона в плоскости  $xy$ . Аналогичным образом находятся другие характеристики эффективной среды. За дальнейшими деталями мы отсылаем к статье [6].

## 2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Мы применили нашу модель для систем с нижеследующими удерживающими потенциалами.

1. Прямоугольный потенциал (слой GaAs в обкладках  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ) с одинаковыми молярными концентрациями по обе стороны ямы):

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq L/2 \\ V_0, & |z| > L/2. \end{cases} \quad (3)$$

Этот потенциал изучался в работах [8,9], авторы которых использовали разную параметризацию экспериментальных данных и разные значения молярной концентрации: глубина ямы  $V_0 = 227,9$  мэВ при  $x = 0,3$  в работе [8] и  $V_0 = 199,6$  мэВ при  $x = 0,25$  в [9]. Поэтому прямое сопоставление расчетов этих групп затруднительно, но их можно сравнить с результатами нашей модели (рис. 1).

Как видно, согласие с [8] можно считать вполне удовлетворительным (тем более что под влиянием наших результатов и критических замечаний авторы [8] исправили ошибку и провели новые расчеты, которые и представлены на рис. 1). Наша модель не воспроизводит структуру с пиком и провалом кривых, возникающую из-за присутствия нескольких фононных мод. Но разница между пиком и провалом, найденная в [8], составляет  $\sim 0,1$  мэВ (3%), что находится в пределах точности нашей модели. Едва ли столь малая разница может наблюдаться в эксперименте. Различие с результатами [9] более драматично (возможно, из-за ошибок в программе численных расчетов этих авторов).

2. Асимметричный прямоугольный потенциал (слой GaAs в обкладках  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  с разными молярными концентрациями по обе стороны ямы):

$$V(z) = \begin{cases} V_r, & z \geq L/2 \\ 0, & |z| < L/2 \\ V_l, & z \leq -L/2. \end{cases} \quad (4)$$

В качестве примера мы используем здесь следующие значения молярных концентраций алюминия:  $x_l = 0,42$  ( $V_l = 346,6$  мэВ) в левом барьере и  $x_r = 0,18$  ( $V_r = 141,8$  мэВ) — в правом. На рис. 2 показаны результаты наших расчетов, причем выделены также вклады дискретного (нижний индекс «dis») и непрерывного (нижние индексы «con,V» и «con,∞») спектров. Главное отличие от случая симметричного потенциала — выскакивание частицы из ямы при некотором малом (порядка  $16 \text{ \AA}$  в нашем примере) значении ширины ямы. Снова мы находим существенные различия с результатами работы [9].

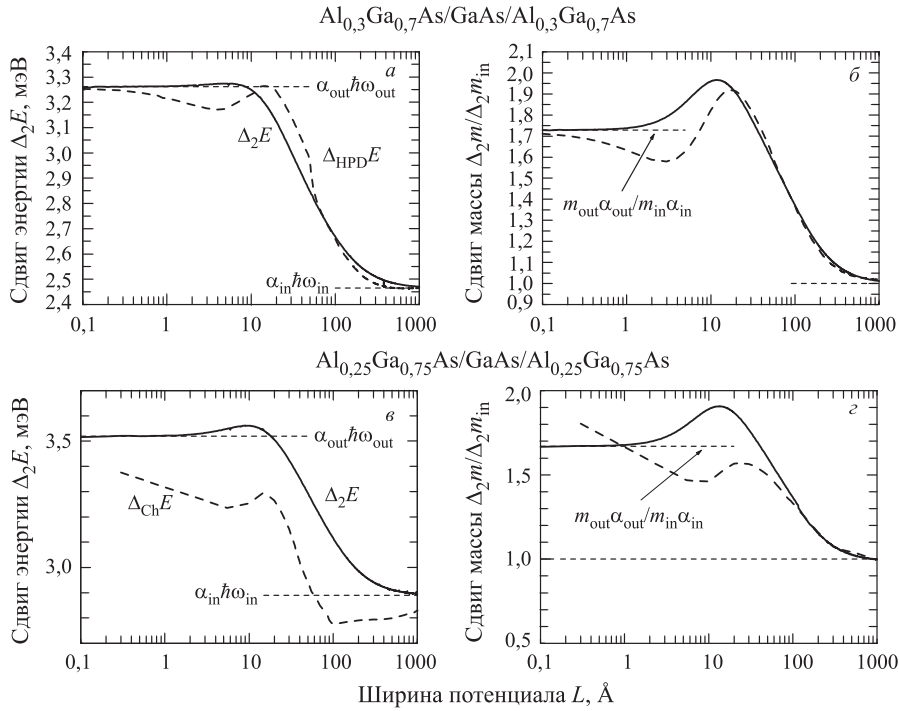


Рис. 1. Сравнение наших расчетов [6] (сплошные линии) для симметричного прямоугольного потенциала с результатами (штриховые линии) работ [8] (*a*, *б*) и [9] (*в*, *г*). Показаны сдвиг энергии полярона (*a*, *в*) и отношение сдвига эффективной массы к ее сдвигу в GaAs (*б*, *г*)

3. Потенциал Розена–Морса (многослойная структура с непрерывно меняющейся молярной концентрацией алюминия) имеет вид

$$V(z) = V_0 \tanh^2 \left( \frac{z}{L_{\text{RM}}} \right). \quad (5)$$

В обоих предыдущих случаях использовалась теория возмущений по степеням константы связи  $\alpha$  электрон-фононного взаимодействия. Для потенциала Розена–Морса известно аналитическое выражение для функции Грина [11, 12], где уже выполнено суммирование по всем виртуальным состояниям. Данный потенциал служит примером многослойной гетероструктуры, а сравнение с результатами для симметричного прямоугольного потенциала с той же глубиной и с тем же значением энергии основного состояния служит для дополнительной проверки технической части расчетов. Рисунок 3 демонстрирует блестящее совпадение.

$\text{Al}_{0,42}\text{Ga}_{0,58}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0,18}\text{Ga}_{0,82}\text{As}$

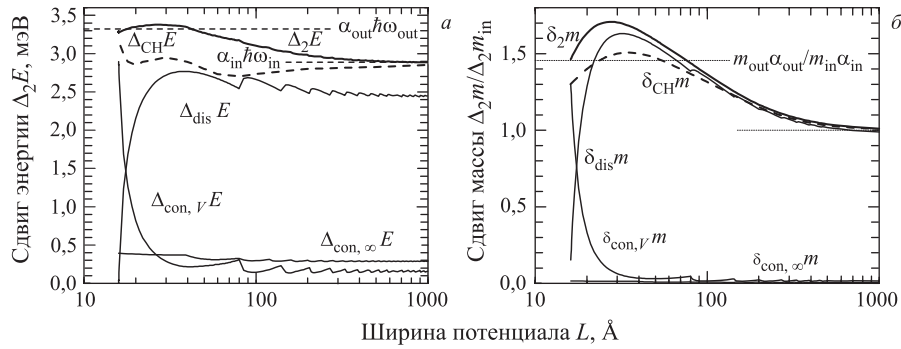


Рис. 2. Сравнение наших результатов [10] (сплошные линии) с расчетами работы [9] (штриховые линии) для сдвига энергии полярона (а) и отношения сдвигов эффективной массы (б). Индексом «dis» обозначена кривая вклада дискретного спектра, индекс «con,V» соответствует вкладу полуограниченного непрерывного спектра (для энергий  $V_r \leq E \leq V_l$ ), индекс «con,∞» обозначает вклад непрерывного спектра для энергий  $E \geq V_l$

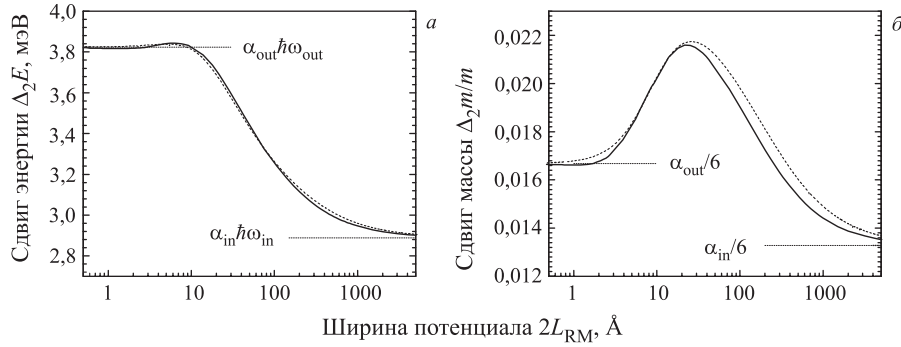


Рис. 3. Сравнение результатов для потенциала Розена–Морса (сплошные линии) и эквивалентного симметричного прямоугольного потенциала (штриховые линии) с тем же значением энергии основного состояния и той же глубины

В заключение отметим, что наша модель позволяет продолжить «охоту за пиками» в других квазидвумерных системах: связанных поляронах, биполяронах,  $D^-$ -центрах и т. п. Развитый подход применим также к изучению поведения подобных квазичастиц в квантовых проволоках и квантовых точках. Исследование поддержано грантами программы Гейзенберг–Ландау и «Deutsche Forschungsgemeinschaft, Graduiertenkolleg 50».

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Esaki L., Tsui T.* // IBM J. of Research Development. 1970. V. 14. P. 61;  
*Bauer G., Kucher F., Heinrich H.* Two-Dimensional Systems, Heterostructures and Superlattices / Eds. L. L. Chang, K. Ploog. Springer, 1984;  
MBE and Heterostructures / Eds. L. L. Chang, K. Ploog. Nijhoff, 1985;  
*Casey H. C., Panish M. B.* Heterostructure Lasers. Ac. Press, 1978;  
*Woggon U., Gaponenko S. V.* // Phys. Stat. Sol. B. 1995. V. 189. P. 285;  
Optics of Excitons in Confined Systems / Eds. A. D'Andrea et al. Institute of Phys. Conference Series. 1991. No. 123.
2. Forschungszentrum Julich, Germany (<http://www.nanonet.de>);  
Laboratory for Micro- and Nanotechnology, PSI, Villigen, Switzerland  
([http://www1.psi.ch/www\\_lm\\_n\\_hn/](http://www1.psi.ch/www_lm_n_hn/)).
3. *Gerlach B. et al.* // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 10568.
4. *Gurioli M. et al.* // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 15755.
5. *Voliotis V. et al.* // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 10725.
6. *Smondyrev M. A., Gerlach B., Dzero M. O.* // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 16692.
7. *Adachi S.* // J. Appl. Phys. 1985. V. 58. P. R1.
8. *Hai G. Q., Peeters F. M., Devreese J. T.* // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 4666; Erratum. Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 10572.
9. *Shi J. J. et al.* // Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. 4670.
10. *Bibik A. I. et al.* // Physics, Chemistry and Application of Nanostructures / Eds. V. E. Borisenko, S. V. Gaponenko, V. S. Gurin. Singapore, 2001. P. 48.
11. *Kleinert H., Mustapić I.* // J. Math. Phys. 1992. V. 33. P. 643.
12. *Fischer W., Leschke H., Müller P.* // Path Integrals from meV to MeV: Tutzing'92 / Ed. H. Grabert et al. Singapore, 1993. P. 259; Ann. Phys. 1993. V. 227. P. 206.