

ФИЗИКА

УДК 621.315

Л. А. Варданян

Поляронный сдвиг энергии связи возбужденных примесных состояний в
квантовой точке при наличии электрического поля

(Представлено академиком Э.М.Казаряном 9/X 2007)

Ключевые слова: *квантовая точка, полярон, электрическое поле*

Нульмерные квантовые системы стали объектом интенсивных исследований вследствие уникальности их физических свойств и перспективности их применения в электронных и оптоэлектронных устройствах [1]. Системы квантовых точек (КТ) демонстрируют необычное электронное поведение из-за "атомоподобной" плотности состояний носителей заряда.

Вследствие сильного влияния поляронных эффектов на оптические и кинетические свойства квантовых точек изучению электрон-фононного взаимодействия на связанные примесные состояния посвящено много работ [2-11]. Как известно, поляронные эффекты в КТ становятся более яркими в присутствии внешних электрических и магнитных полей [12-18]. В рамках теории возмущений в [12] изучена зависимость энергии связи полярона с кулоновским центром от толщины параболической КТ в присутствии магнитного поля. Резонансный, мелкодонорный магнитополяронный эффект был исследован вариационным методом в квантовой точке GaAs/AlGaAs [13]. С использованием точной численной схемы диагонализации в [14] изучен низколежащий спектр связанного с кулоновским центром магнитополярона в КТ. В [15] вычислены поляронные эффекты для электрона, ограниченного в анизотропной КТ в присутствии магнитного поля, а в [16] развита схема унитарных преобразований для диагонализации фреиховского гамильтониана, связанного с примесным центром магнитополярона в трехмерной параболической КТ. Поляронные поправки к энергии основного состояния

электрона, ограниченного в цилиндрической КТ, вдоль оси которой приложены электрическое и магнитное поля, исследованы в [17]. В нашей предыдущей работе [18] на основе вариационного метода было изучено влияние однородного электрического поля на энергию связи основного состояния кулоновского центра в КТ с бесконечным ограничивающим потенциалом с учетом взаимодействия электрона с полярными оптическими фононами (ЭПОФ).

Целью настоящей работы является исследование влияния поляронного эффекта на низколежащие примесные состояния электрона в цилиндрической квантовой точке (ЦКТ) с полярным диэлектрическим окружением, при наличии электрического поля.

В рамках приближения эффективной массы гамильтониан электрон-фононной системы при наличии кулоновской примеси и внешнего однородного электрического поля можно представить в виде

$$H = H_{el} + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{LO} a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} (V_{\vec{q}} (\exp(i\vec{q}\vec{r}) - \exp(i\vec{q}\vec{r}_i)) a_{\vec{q}} + V_{\vec{q}}^* (\exp(-i\vec{q}\vec{r}) - \exp(-i\vec{q}\vec{r}_i)) a_{\vec{q}}^*), \quad (1)$$

где H_{el} гамильтониан электронной подсистемы. Второе и третье слагаемые описывают, соответственно, невзаимодействующую фононную подсистему и электрон-фононное, а также примесь-фононное взаимодействия, $a_{\vec{q}}^+ (a_{\vec{q}})$ - оператор рождения (уничтожения) фонона с волновым вектором $\vec{q}$ и частотой ω_{LO} , амплитуда взаимодействия $V_{\vec{q}}$ дается выражением

$$V_{\vec{q}} = -\frac{i\hbar\omega_{LO}}{q} \left(\frac{4\pi\alpha}{\Omega} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}} \right)^{1/4}, \quad (2)$$

где

$$\alpha = \left(\frac{e^2}{2\hbar\omega_{LO}} \right) \left(\frac{2m\omega_{LO}}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right), \quad (3)$$

m - эффективная масса электрона, $\epsilon_0 (\epsilon_{\infty})$ - статическая (оптическая) диэлектрическая постоянная, Ω - объем ЦКТ. В (1) использована 3D-фононная аппроксимация, т.е. взаимодействие электрона с ограниченными и интерфейсными фононами заменяется взаимодействием с объемными фононами. Этот подход оправдан, так как конечный результат суммирования по всем фононным модам проявляет слабую зависимость от фононного спектра при вычислении поляронных и биполяронных эффектов. Электронная часть гамильтониана, описывающего связанные состояния электрона с кулоновским центром в ЦКТ с радиусом R и длиной d , дается выражением

$$H_{el} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + eFz - \frac{e^2}{\epsilon_{\infty} \sqrt{(\vec{\rho} - \vec{\rho}_i)^2 + (z - z_i)^2}} + V_0(\vec{\rho}, z), \quad (4)$$

где F - модуль вектора напряженности электрического поля, направленного вдоль оси ЦКТ, $V_0(\vec{\rho}, z)$ - ограничивающий потенциал, ($V_0(\vec{\rho}, z) = 0$ при $\rho < R$ и ∞ при $\rho > R$), $(\vec{\rho}_i, z_i)$ - радиус-вектор примеси.

Применяя преобразование Плацмана к гамильтониану (1), с помощью унитарного оператора

$$S = \exp \left[- \sum_{\vec{q}} \left(\frac{V_{\vec{q}}}{\hbar \omega_{LO}} \exp(i\vec{q}\vec{r}_i) a_{\vec{q}}^+ - h.c. \right) \right], \quad (5)$$

с точностью до постоянной величины $(\epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon_0^{-1})e^2/r_i$, для гамильтониана системы получим

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + eFz - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{(\vec{\rho} - \vec{\rho}_i)^2 + (z - z_i)^2}} + V_0(\vec{\rho}, z) + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{LO} a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} (V_{\vec{q}} \exp(i\vec{q}\vec{r}) a_{\vec{q}} + V_{\vec{q}}^* \exp(-i\vec{q}\vec{r}) a_{\vec{q}}^+). \quad (6)$$

В рамках модели Ландау - Пекара волновая функция электрон-фононной системы представляется в виде

$$|\Psi\rangle = N_{nl} \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z, \{\lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl}, \alpha_{nl}\}) \exp \left(\sum_{\vec{q}} (f_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^+ - f_{\vec{q}}^* a_{\vec{q}}) \right) |0\rangle, \quad (7)$$

где N_{nl} - константы нормирования, $\Phi_0(\vec{\rho}, z)$ - точная собственная функция гамильтониана (4) в отсутствии кулоновского центра, $\Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z, \{\lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl}, \alpha_{nl}\})$ - водородоподобные волновые функции, соответствующие (n, l) состояниям, $|0\rangle$ - вакуумное состояние фононной подсистемы $\lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl}, f_{\vec{q}}$ и $f_{\vec{q}}^*$ - вариационные параметры, которые определяются из условия минимизации энергии системы, $\Phi_0(\vec{\rho}, z)$ дается выражением

$$\Phi_0(\vec{\rho}, z) = \begin{cases} J_0(\eta) Z(\zeta), & \rho < R, \text{ при } |z| < d/2, \\ 0, & \rho \geq R, \text{ при } |z| \geq d/2, \end{cases} \quad (8)$$

где $J_0(\eta)$ - функция Бесселя нулевого порядка, а $Z(\zeta)$ - линейная комбинация функций Эйри:

$$Z(\zeta) = Bi(\zeta_+) Ai(\zeta) - Ai(\zeta_+) Bi(\zeta). \quad (9)$$

Аргументы функций Бесселя и Эйри даются выражениями

$$\eta = \kappa_{10} \rho / R \quad \text{и} \quad \zeta = a_c \frac{z}{d} - \frac{E_0 - (\kappa_{10} a^* / R)^2}{\omega_c}, \quad (10)$$

где $\zeta_{\pm} = \zeta(z = \pm d/2)$, κ_{10} - первый нуль функции Бесселя, $\omega_c = (|e|Fa^*/R^*)^{2/3}$, $a_c = (\omega_c)^{1/2}d/a^*$, E_0 - собственное значение гамильтониана (6) без водородоподобной примеси и без учета ЭПОФ-взаимодействия и является первым корнем трансцендентного уравнения

$$Bi(\zeta_+)Ai(\zeta_-) - Ai(\zeta_+)Bi(\zeta_-) = 0. \quad (11)$$

В качестве пробной волновой функции выбраны:

$$\begin{aligned} \Gamma_{1s}(\vec{\rho}, z) &= \exp(-\lambda_{1s}|\vec{r} - \vec{r}_i| - \kappa_{1s}|\vec{\rho} - \vec{\rho}_i|), \\ \Gamma_{2s}(\vec{\rho}, z) &= (1 - \beta_{2s}|\vec{r} - \vec{r}_i|) \exp(-\lambda_{2s}|\vec{r} - \vec{r}_i| - \kappa_{2s}|\vec{\rho} - \vec{\rho}_i|), \\ \Gamma_{2p_x}(\vec{\rho}, z) &= (\rho \cos \varphi - \rho_i) \exp(-\lambda_{2p_x}|\vec{r} - \vec{r}_i| - \kappa_{2p_x}|\vec{\rho} - \vec{\rho}_i|), \\ \Gamma_{2p_z}(\vec{\rho}, z) &= (z - z_i) \exp(-\lambda_{2p_z}|\vec{r} - \vec{r}_i| - \kappa_{2p_z}|\vec{\rho} - \vec{\rho}_i|). \end{aligned} \quad (12)$$

Ожидаемое значение энергии дается выражением

$$\begin{aligned} E_{nl}^{el-ph}(f_{\vec{q}}, \lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl}) &= E_{nl}(\lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl}) + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{LO} |f_{\vec{q}}|^2 + \\ &+ \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} \frac{\langle \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) | \exp(i\vec{q}\vec{r}) | \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) \rangle}{\langle \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) | \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) \rangle} f_{\vec{q}} + \\ &+ \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}}^* \frac{\langle \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) | \exp(-i\vec{q}\vec{r}) | \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) \rangle}{\langle \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) | \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) \rangle} f_{\vec{q}}^*, \end{aligned} \quad (13)$$

где $E_{nl}(\lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl})$ - ожидаемое значение электронной части гамильтониана (6) без учета ЭПОФ-взаимодействия. Из вариационного условия

$$\frac{\delta E_{nl}^{el-ph}(f_{\vec{q}}, \lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl})}{\delta f_{\vec{q}}} = 0 \quad (14)$$

находим:

$$f_{\vec{q}} = - \frac{V_{\vec{q}}^*}{\hbar\omega_{LO}} \frac{\langle \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) | \exp(-i\vec{q}\vec{r}) | \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) \rangle}{\langle \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) | \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) \rangle}. \quad (15)$$

Подставляя (15) в (13), находим энергию для основного и первых возбужденных состояний электрона с учетом ЭПОФ-взаимодействия:

$$\begin{aligned} E_{nl}^{el-ph}(f_{\vec{q}}, \lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl}) &= E_{nl}(\lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl}) - \\ &- \sum_{\vec{q}} \frac{|V_{\vec{q}}|^2}{\hbar\omega_{LO}} \left| \frac{\langle \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) | \exp(-i\vec{q}\vec{r}) | \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) \rangle}{\langle \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) | \Phi_0(\vec{\rho}, z) \Gamma_{nl}(\vec{\rho}, z) \rangle} \right|^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Энергия связи определяется как

$$E_{nl,B}^{el-ph}(f_{\vec{q}}, \lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl}) = E_0 - E_{nl}^{el-ph}(f_{\vec{q}}, \lambda_{nl}^0, \kappa_{nl}^0, \beta_{nl}^0), \quad (17)$$

где λ_{nl}^0 , κ_{nl}^0 и β_{nl}^0 - значения вариационных параметров, минимизирующие энергию $E_{nl}(\lambda_{nl}, \kappa_{nl}, \beta_{nl})$. Поляронный сдвиг энергии связи определяется как разность между энергиями связи с учетом и без учета ЭПОФ-взаимодействия.

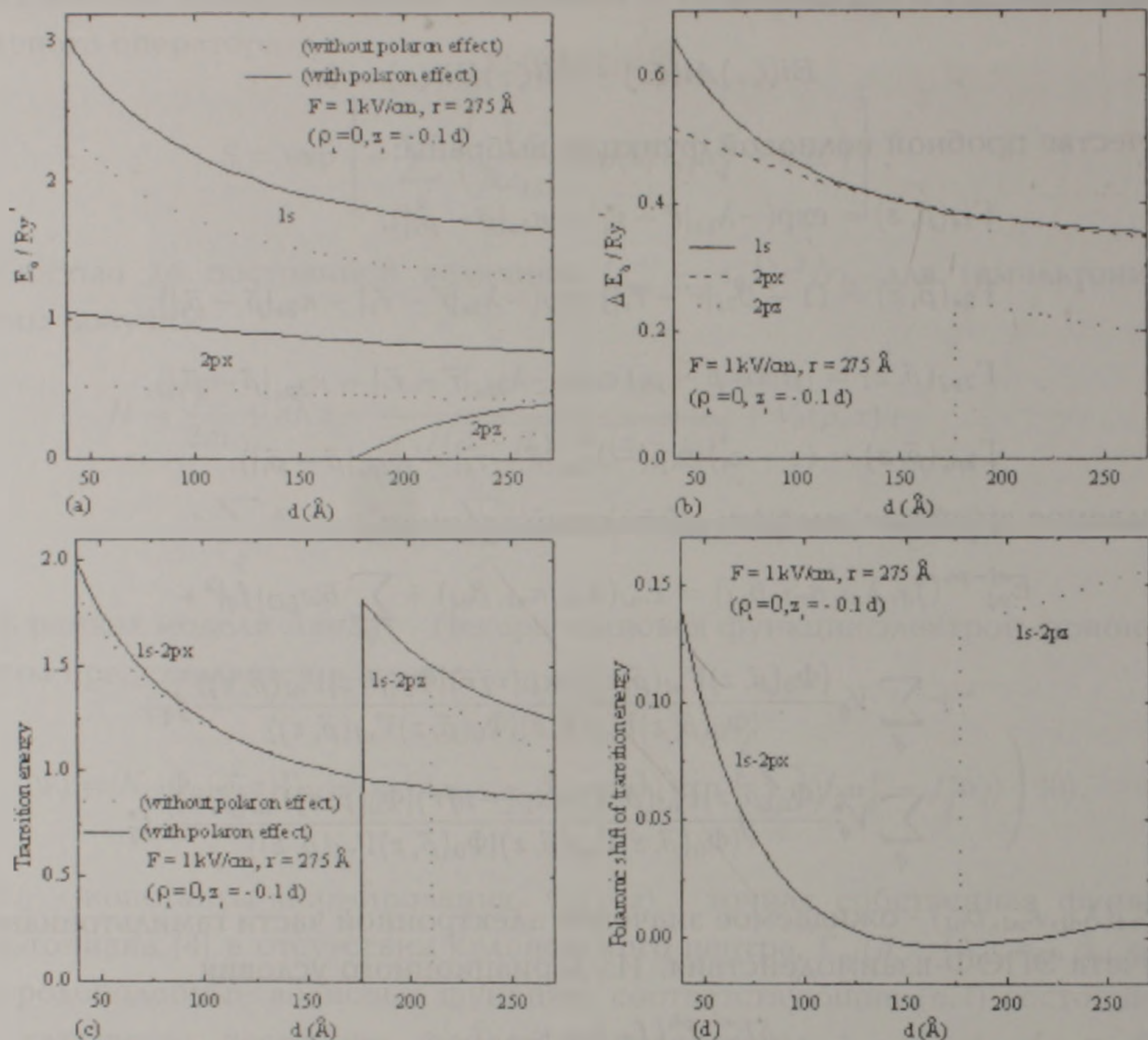


Рис. 1. Зависимость энергии связи примесных состояний $1s$, $2p_x$, $2p_z$ (a), поляронные сдвиги этих состояний (b), энергии переходов $1s - 2p_x$ и $1s - 2p_z$ (c), а также поляронные сдвиги энергии переходов (d) от длины ЦКТ.

Численные расчеты проведены для ЦКТ ZnSe/CdSe/ZnSe с радиусом 275 Å , вдоль оси которой приложено электрическое поле 1 кВ/см . Предполагается, что примесь находится в точке $(0, -0.1d)$. На рис. 1 изображены энергии связи примесных состояний $1s$, $2p_x$, $2p_z$ (рис. 1, a) с учетом и без учета ЭПОФ-взаимодействия, поляронные сдвиги этих состояний (рис. 1, b), энергии переходов $1s - 2p_x$ и $1s - 2p_z$ с учетом и без учета ЭПОФ-взаимодействия (рис. 1, c), а также поляронные сдвиги энергии этих переходов (рис. 1, d) в зависимости от длины ЦКТ. Как видно из рис. 1, a, энергии связи примесных состояний $1s$ и $2p_x$ растут с уменьшением длины ЦКТ, как с учетом, так и без учета ЭПОФ-взаимодействия. Это объясняется тем, что

сжатие волновой функции вдоль оси ЦКТ приводит к перераспределению электронной плотности в плоскости, перпендикулярной этой оси и, соответственно, к некоторому росту энергии связи $1s$ - и $2p_x$ -состояний. Иная ситуация имеет место для состояния $2p_z$ с плотностью заряда, распределенного вдоль оси ЦКТ, поскольку в этом случае сжатие ЦКТ вдоль оси приводит к резкому росту кинетической энергии и уменьшению энергии связи $2p_z$ -состояния вплоть до исчезновения. Связанное состояние $2p_z$ без учета ЭПОФ-взаимодействия при фиксированных выше значениях параметров возникает лишь при длинах ЦКТ, превышающих $214\text{\AA}$. При учете ЭПОФ-взаимодействия этот порог смещается в сторону коротких длин ЦКТ и составляет примерно $176\text{\AA}$. Следует отметить, что, в отличие от состояний $1s$ и $2p_x$, энергия связи состояния $2p_z$ с увеличением длины ЦКТ увеличивается. Поляронные сдвиги энергии связи для состояний $1s$ и $2p_x$ при длинах ЦКТ, превышающих $125\text{\AA}$, практически совпадают (рис. 1, b). Поэтому при таких длинах ЭПОФ-взаимодействие из-за компенсации в энергии перехода $1s - 2p_x$ (рис. 1, c) не проявляется. Вклад этого взаимодействия возрастает при уменьшении длины ЦКТ и при $d = 50\text{\AA}$ составляет 6%. Поляронные сдвиги энергии связи для состояния $2p_z$ меньше энергии полярного сдвига $1s$, и, несмотря на частичную компенсацию, вклад ЭПОФ-взаимодействия в энергии перехода $1s - 2p_z$ значителен во всей области существования связанного состояния $2p_z$ и с увеличением длины ЦКТ увеличивается.

Гусско-Армянский (Славянский) университет

Л. А. Варданян

Поляронный сдвиг энергии связи возбужденных примесных состояний в квантовой точке при наличии электрического поля

В рамках модели Ландау — Пекара исследовано влияние взаимодействия электрона с полярными оптическими фононами на энергию связи низколежащих примесных состояний в цилиндрической полупроводниковой квантовой точке при наличии электрического поля. Вычислены также энергии переходов и их поляронные сдвиги в зависимости от длины квантовой точки. Численные расчеты проведены для квантовой точки ZnSe/CdSe/ZnSe .

**Գրգռված իառնուկային վիճակների կապի էներգիայի պոլարոնային շեղումը
քվանտային կետում էլեկտրական դաշտի առկայության դեպքում**

Լանդաու — Պեկարի մոդելի շրջանակներում ուսումնասիրված է բնեռային օպտիկական ֆոնոնների հետ էլեկտրոնի փոխազդեցության ազդեցությունը ցածրէներգիական իառնուկային վիճակների կապի էներգիայի վրա գլանային կիսահաղորդչային քվանտային կետում երկայնական էլեկտրական դաշտում: Նաշվարկված են նաև $1s - 2p_x$ և $1s - 2p_z$ անցումների էներգիաները և դրանց պոլարոնային շեղումները՝ կախված գլանային քվանտային կետի երկարությունից: Թվային հաշվարկները կատարված են ZnSe/CdSe/ZnSe քվանտային կետի համար:

L. A. Vardanyan

**Polaronic Shift of Binding Energy of Excited Impurity States in the Electric Field in a
Quantum Dot**

The effect of the electron-polar-optical-phonon interaction on the binding energy of the low-lying impurity states in a cylindrical quantum dot in a longitudinal electric field is investigated in the frame of Landau — Pekar model. The dependence of $1s - 2p_x$ and $1s - 2p_z$ transition energies and their polaronic shifts on the length of the cylindrical quantum dot is also calculated. The numerical calculations are carried out for ZnSe/CdSe/ZnSe quantum dot.

Литература

1. *Alivisatos A.P.* Science. 1996. V. 271. P. 933.
2. *Klein M.C., Hache F., Ricard D., Flytzanis C.* - Phys.Rev. 1990. B42. P. 11123.
3. *Zhu K.D., Gu S.W.* - Solid State Commun. 1992. V. 81. P. 211.
4. *Zhu K.D., Gu S.W.* - Solid State Commun. 1992. V. 85. P. 651.
5. *De la Cruz R.M.* - Superlatt. Microstruct.. 1994. V. 16. P. 427.
6. *Bhattacharjee A.K.* - Phys. Rev. 1995. B51. P. 9912.
7. *Wan Y., Ortiz G., Phillips P.* - Phys. Rev. 1997. B55. P. 5313.
8. *Knipp P.A., Reinecke T.L., Lorke A., Fricke M., Petroff P.M.* - Phys. Rev. 1989. B56. P. 1516.
9. *Mukhopadhyay S., Chatterjee A.* - Phys. Rev. 1997. B55. P. 9279.
10. *Inoshita T., Sakaki H.* - Phys. Rev. 1997. B56. P. R4355.
11. *Lepine Y., Bruneau G.* - J. Phys.: Condens. Matter. 1998. V. 10. P. 1495.
12. *Chen C-Y., Jin P-W., Li W-S., Lin D.L.* - Phys. Rev. 1997. B56. P. 14913.

13. *Zhu K-D., Kobayashi T.* - Solid State Commun. 1994. V. 92. P. 353.
14. *Lee C.M., Lam C.C., Gu S.W.* - Solid State Commun. 1999. V. 112. P. 555.
15. *Kandemir B.S., Altanhan T.* - Phys. Rev. 1999. B60. P. 4834.
16. *Kandemir B.S., Cetin A.* - J. Phys.: Condens. Matter. 2005. V. 17. P. 667.
17. *Wang R-Q., Xie H-J., Yu Y-B.* - Int. J. Mod. Phys. 2004. B18. P. 2887.
18. *Vartanian A.L., Vardanyan L.A., Kazaryan E.M.* - Phys. Lett. 2007. A360. P. 649.