
ПРОЯВЛЕНИЕ ИНТЕРФЕЙСНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ В ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ КВАНТОВЫХ ЯМ, ПРОВОЛОК И ТОЧЕК

Маслов Александр Юрьевич – ведущий научный сотрудник, доктор физ.-мат. наук;
maslov.ton@mail.ioffe.ru

Прошина Ольга Владимировна – старший научный сотрудник, кандидат физ.-мат. наук;
proshina.ton@mail.ioffe.ru
ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

В работе теоретически исследовано влияние интерфейсных фононов на формирование поляронов большого радиуса в квантовых наноструктурах. Определены энергии связи полярона для квантовых ям, квантовых проволок и квантовых точек. Для случая квантовой точки вклады объемных и интерфейсных фононов имеют соизмеримые величины. Таким образом, учет влияния интерфейсных фононов сводится к некоторым изменениям величины энергии связи полярона. Роль интерфейсных фононов оказывается гораздо важнее в квантовых ямах и проволоках. Для них взаимодействие с интерфейсными фононами дает основной вклад в энергию связи полярона. Этот вклад оказывается параметрически больше, чем вклад локализованных в структуре фононов. В результате этого существенное усиление или ослабление поляронного взаимодействия возможно при различном сочетании диэлектрических свойств материалов наноструктуры и барьеров. Это должно проявляться в изменении интенсивности фононных повторений в оптических спектрах рассмотренных структур.

Ключевые слова: квантовая яма; квантовая проволока; квантовая точка; электрон-фононное взаимодействие; интерфейсные оптические фононы

THE MANIFESTATION OF INTERFACE OPTICAL PHONONS IN THE OPTICAL SPECTRA OF QUANTUM WELLS, QUANTUM WIRES AND QUANTUM DOTS

Aleksandr Yu. Maslov, and Olga V. Proshina

Ioffe Institute, Politekhnikeskaya 26, Saint-Petersburg, 194021, Russia

ABSTRACT

In this paper, the influence of interface phonons on the formation of large-radius polarons in quantum nanostructures is theoretically investigated. The polaron binding energies are obtained for quantum wells, quantum wires and quantum dots. For the quantum dot, the contributions of bulk and interface phonons have commensurable quantities. Thus the inclusion of the interface phonons reduces to some changes of polaron binding energy value. The interface phonon role is much more important in the quantum wells and quantum wires. This means that the interaction with interface phonons gives the main contribution to the polaron binding energy. This contribution turns out to be parametrically larger than one of phonons localized in the structure. The essential strengthening as well as the attenuation of polaron interaction is possible with the different interrelations of the structure and barrier dielectric properties. This should manifest itself in nanostructure optical spectra as a change in the phonon replicas intensity.

Keywords: quantum well, quantum wire, quantum dot; electron-phonon interaction; polaron; interface optical phonons

Введение

В квантовых наноструктурах, изготовленных из материалов с высокой степенью ионности, сильное взаимодействие заряженных частиц с полярными оптическими фононами может приводить к возникновению самосогласованного связанного состояния электрона и фононов, то есть полярона большого радиуса [1]. Принято считать, что изменения электронного спектра, обусловленные эффектом пространственного квантования, приводят к заметному усилению электрон-фононного взаимодействия при уменьшении эффективной размерности структуры. Это действительно так, если учитывать взаимодействие заряженной частицы только с одним видом оптических фононов [2]. Однако в наноструктурах возникают новые ветви оптического спектра, а именно интерфейсные оптические фононы, которые различны для каждого вида наноструктур. Их роль в формировании поляронного состояния также неодинакова. В настоящей работе мы сопоставим влияние интерфейсных фононов на формирование поляронов большого радиуса в различных типах наноструктур. Экспериментально одним из наиболее ярких проявлений полярона большого радиуса является возникновение интенсивных линий фононных повторений в оптических спектрах наноструктур. Это наблюдалось, к примеру, для квантовых точек $CdSe$ [3,4] и квантовых ям $CdS/CdSe/CdS$ [5]. Сильное электрон-фононное взаимодействие наблюдалось в квантовых точках на основе материала кубической симметрии $ZnMgS/ZnS/ZnMgS$ [6] и квантовых ямах $CdMnTe/CdTe/CdMnTe$ [7]. Магнитный поляронный экситон в квантовых ямах $CdMgSe/CdMnSe/CdMgSe$ был рассмотрен в [8] с использованием фотолуминесценции с временным разрешением. Знание параметров поляронного состояния необходимо для адекватного описания интенсивности линий оптических спектров.

В настоящей работе проведено построение теории поляронных состояний в квантовых ямах, квантовых проволоках и квантовых точках с учетом взаимодействия заряженных частиц как с объемными, так и с интерфейсными оптическими фононами.

Аналитические выражения для энергий связи полярона получены при условии, что характерный размер наноструктуры r_0 оказывается меньше радиуса полярона a_0 :

$$\frac{r_0}{a_0} < 1. \quad (1)$$

С одной стороны, параметр (1) означает, что энергия размерного квантования заряженной частицы превышает энергию электрон-фононного взаимодействия. Под этим подразумевается, что мы можем ввести квантовое число, чтобы классифицировать поляронные состояния. Это число уровней размерного квантования электронов, полученное без учета электрон-фононного взаимодействия. С другой стороны, параметр (1) обеспечивает существенную роль взаимодействия заряженных частиц с интерфейсными фононами. В «широких» наноструктурах, где $r_0 > a_0$ это взаимодействие оказывается слабее, чем взаимодействие с локализованными фононами наноструктуры. Одновременно оказывается, что в «широких» наноструктурах отсутствует усиление взаимодействия, вообще характерное для структур пониженной размерности. Неравенство (1) выполняется для разнообразных наноструктур на основе соединений A^2B^6 , в которых имеется достаточно сильное электрон-фононное взаимодействие. Ниже мы приведем значения величины r_0 для структур разной эффективной размерности. Для определения интенсивности электрон-фононного взаимодействия исследуется энергия связи полярона.

1. Поляронные состояния в квантовых наноструктурах

Полный гамильтониан системы заряженных частиц в наноструктуре определяется следующим образом:

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph}. \quad (2)$$

Электронный гамильтониан H_e описывает взаимодействие заряженной частицы с потенциалом наноструктуры, H_{ph} содержит энергии всех оптических фононных ветвей, H_{e-ph} – это гамильтониан электрон-фононного взаимодействия. Параметр (1) позволяет использовать адиабатическое приближение для описания поляронных состояний. Начнем с симметричной прямоугольной квантовой ямы ширины r_0 . Параметры фононного спектра и электрон-фононного взаимодействия для такой системы были получены в [9]. Для нас важны частоты симметричных интерфейсных мод, определяемые из решения уравнения:

$$\varepsilon^{(b)}(\omega) + th \frac{qr_0}{2} \varepsilon^{(w)}(\omega) = 0. \quad (3)$$

В оптическом фононном диапазоне частот диэлектрическая проницаемость $\varepsilon^{(i)}(\omega)$ имеет вид:

$$\varepsilon^{(i)}(\omega) = \varepsilon_\infty^{(i)} \frac{\omega^2 - \omega_{LO}^2}{\omega^2 - \omega_{TO}^2}. \quad (4)$$

Индекс $i=(b),(w)$ относится к материалу барьеров и наноструктуры, соответственно. Мы усредним полный гамильтониан системы из уравнения (2) по быстрому движению электронов. Посредством унитарного преобразования усредненного гамильтониана энергетический спектр можно найти точно. Подробные расчеты представлены в [10]. Полная энергия системы записывается как функционал волновой функции движения электронов в плоскости квантовой ямы. Процедура минимизации дает волновую функцию

и энергию связи полярона. Основной вклад в энергию связи полярона для основного состояния электрона можно записать в виде:

$$E_{pol}^{(2d)} = -0.4 \frac{me^4}{\hbar^2 \left(\varepsilon_{opt}^{(b)} \right)^2}. \quad (5)$$

Здесь $\varepsilon_{opt}^{(b)}$ – оптическая диэлектрическая функция материала барьеров, m масса электрона в квантовой яме. Из уравнения (5) видно, что барьерные диэлектрические свойства играют решающую роль в определении энергии связи полярона. Это обусловлено взаимодействием заряженных частиц с симметричной модой интерфейсных фононов. Для симметричной квантовой ямы этот вклад оказывается по параметру (1) больше, чем вклад взаимодействия с локализованными фононами квантовой ямы. Значительный поляронный эффект может быть получен даже для случая, когда квантовая яма изготовлена из неполярного или слабоионного материала, а барьеры сделаны из материала с высокой степенью ионности. И наоборот, использование материала с низкой степенью ионности для изготовления барьеров дает возможность подавить электрон-фононное взаимодействие, даже если квантовая яма выполнена из материала с высокой ионностью. Обе эти ситуации могут быть реализованы в квантовых ямах на основе гибридных структур A^2B^6/A^3B^5 [11]. В следующем порядке малости по параметру (1) можно найти поправки к уравнению (5). Эти поправки связаны с взаимодействием электрона как с локализованными в квантовой яме фононами, так и со всеми ветвями интерфейсных оптических фононов. Радиус полярона в квантовой яме оказывается равным:

$$a_0^{(2d)} = \frac{\hbar^2 \varepsilon_{opt}^{(b)}}{me^2}. \quad (6)$$

Подстановка параметров материалов [12] в уравнение (6) для квантовой ямы $CdSe/ZnSe/CdSe$ дает нам значение радиуса полярона $a_0^{(2d)} = 110 \text{ \AA}$. Наибольшая ширина квантовой ямы, в которой возможно возникновение поляронов, определяется этой величиной. Как уже упоминалось выше, этот радиус определяет границу между квантовыми ямами с двумя механизмами формирования поляронного состояния, которые качественно отличаются друг от друга. Квазидвумерные поляронные состояния возникают в квантовых ямах, где выполняется условие (1). Из уравнения (5) видно, что величина поляронного эффекта в значительной степени определяется взаимодействием электрона с оптическими интерфейсными фононами. В этом случае интерфейсные фононы играют решающую роль.

Аналогично, интерфейсные фононы имеют большое значение в квантовых проволоках. Поляронные состояния могут быть описаны подобным образом с учетом геометрии структуры. Для цилиндрической квантовой проволоки с радиусом r_0 спектр интерфейсных оптических фононов определяется решением уравнения:

$$\frac{I'_\mu(qr_0)}{I_\mu(qr_0)} \varepsilon^{(w)}(\omega) - \frac{K'_\mu(qr_0)}{K_\mu(qr_0)} \varepsilon^{(b)}(\omega) = 0, \quad (7)$$

где I_μ – модифицированная функция Бесселя μ -того порядка первого рода, K_μ является модифицированной функцией Бесселя второго рода, q является волновым вектором, квантовое число μ определяет разные ветви спектра интерфейсных фононов. Наши расчеты показывают, что основной вклад в энергию связи полярона дает взаимодействие с интерфейсными оптическими фононами при $\mu = 0$. На Рис. 1 показана зависимость энергии интерфейсных оптических фононов от волнового вектора.

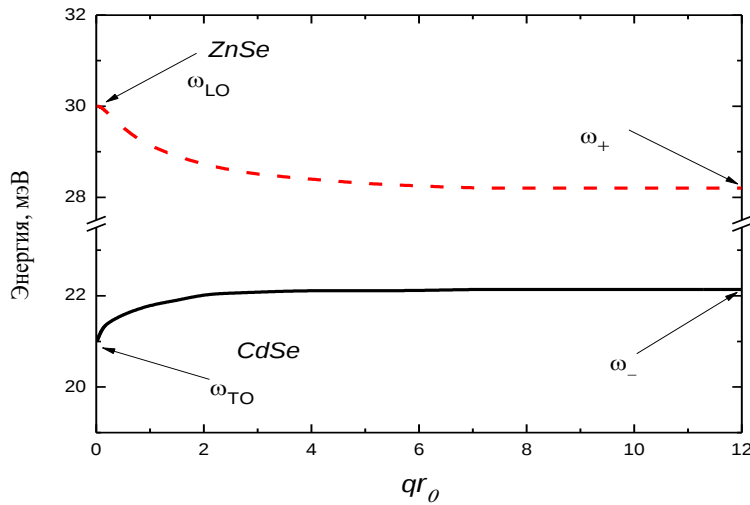


Рис. 1. Зависимость энергии интерфейсных оптических фононов от безразмерного волнового вектора для квантовой проволоки $ZnSe/CdSe/ZnSe$ для $\mu = 0$.

Эта зависимость рассчитана для квантовой проволоки на основе $CdSe$, окруженной барьерами из $ZnSe$ при $\mu = 0$ в уравнении (7). Частоты ω_+ и ω_- являются решениями уравнения $\varepsilon^{(w)}(\omega) + \varepsilon^{(b)}(\omega) = 0$. Это уравнение получается из (7) в области больших значений q , или $qr_0 \gg 1$. Параметры материала взяты из [12].

Энергия связи полярона для основного состояния электрона в квантовой проволоке имеет вид:

$$E_{pol}^{(1d)} = -\frac{me^4}{\hbar^2 \left(\varepsilon_{opt}^{(b)}\right)^2} \ln^2 \left(\frac{a_0^{(1d)}}{r_0} \right), \quad (8)$$

при этом радиус поляронного состояния $a_0^{(1d)}$ зависит от размера квантовой проволоки и определяется уравнением:

$$a_0^{(1d)} = \frac{\hbar^2 \varepsilon_{opt}^{(b)}}{me^2} \ln \left[\frac{\hbar^2 \varepsilon_{opt}^{(b)}}{me^2 r_0} \right]. \quad (9)$$

Из сравнения уравнений (6) и (9) видно, что радиус полярона для квантовой проволоки $a_0^{(1d)}$ оказывается меньше, чем радиус полярона $a_0^{(2d)}$ для квантовой ямы. Напротив, энергия связи полярона больше для случая квантовых проволок. Также, как и в квантовой яме, в квантовой проволоке основной вклад в энергию связи полярона дает взаимодействие с интерфейсными фононами. Локализованные фононы в проволоке дают поправки, малые по параметру (1). Для той же системы $ZnSe/CdSe$ условие (1) выполняется для квантовых проволок с радиусами $r_0 < 40 \text{ \AA}$.

Для случая квантовой точки, в соответствии с параметром (1), электронная волновая функция определяется потенциалом квантовой точки. Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия для такой системы был получен в [13]. Электрон-фононное взаимодействие приводит к некоторому «поляронному сдвигу» полной энергии электронного состояния. Детальный анализ такого поляронного сдвига выполнен в [14]. Для сферической квантовой точки сдвиг энергии полярона оказывается равным:

$$\Delta E_{pol}^{(0d)} = -\frac{e^2}{2r_0} \left(\frac{0.39}{\varepsilon_{opt}^{(w)}} + \frac{0.5}{\varepsilon_{opt}^{(b)}} \right). \quad (10)$$

Мы можем записать радиус полярона $a_0^{(0d)}$ в виде, аналогичном уравнениям (6) и (9):

$$a_0^{(0d)} = \frac{\hbar^2}{me^2} \left(\frac{0.39}{\varepsilon_{opt}^{(w)}} + \frac{0.5}{\varepsilon_{opt}^{(b)}} \right)^{-1}. \quad (11)$$

Из (11) видно, что поляронный эффект в квантовой точке определяется аддитивной комбинацией поляризаций как квантовой точки, так и окружающего материала матрицы. Вклады объемных и интерфейсных оптических фононов оказываются одного порядка величины. Неравенство (1) выполняется для квантовой точки *CdSe* в матрице *ZnSe*, когда

радиус	точки	$r_0^{(0d)} < 30$	Å.
--------	-------	-------------------	----

Результаты и выводы

Таким образом, эффективное электрон-фононное взаимодействие может существенно зависеть от деталей фононного спектра для исследуемой структуры. В работе определены условия, при которых в квантовых ямах и квантовых проволоках наблюдается значительное усиление электрон-фононного взаимодействия. Важным моментом является то, что спектр интерфейсных оптических фононов оказывается существенно более сложным в квантовой проволоке по сравнению с квантовой ямой и квантовой точкой.

Наличие ветвей интерфейсных фононов в оптических спектрах приводит к расширению диапазона материалов, в которых следует ожидать сильного поляронного эффекта. К примеру, существенное электрон-фононное взаимодействие может быть результатом влияния интерфейсных фононов в гетероструктурах типа *Si/SiO₂*. Полученные результаты важны для правильного определения энергий оптических переходов в полупроводниковых структурах с сильным электрон-фононным взаимодействием.

Таким образом, взаимодействие заряженных частиц с интерфейсными оптическими фононами имеет большое значение при изучении поляронных состояний в квантовых наноструктурах. Именно это взаимодействие определяет условия применимости адиабатического приближения и, соответственно, усиления электрон-фононного взаимодействия в низкоразмерных структурах. Интерфейсные оптические фононы определяют главный вклад в энергию связи полярона в квантовых ямах и проволоках. В квантовых точках они дают аддитивную добавку к поляронному сдвигу, которая оказывается того же порядка величины, что и взаимодействие с локализованными фононами. Полученные результаты необходимо учитывать для адекватного описания оптических спектров квантовых наноструктур.

Список литературы

1. Alexandrov A.S., Devreese J.T.. Advances in polaron physics. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2010. 165 p.
2. Ipatova I.P., Maslov A.Yu., Proshina O.V. Polaron in quantum nanostructures // Surface Science. 2002. V. 507-510. P. 598-602.
3. Del Gobbo S. Cadmium sulfide quantum dots – growth and optical properties: Doctoral theses. University of Rome “Tor Vergata”, 2009. 115 p.
4. Jungnickel V., Henneberger F.. Luminescence related processes in semiconductor nanocrystals – the strong confinement regime // Journal of Luminescence. 1996. V. 70. N 1 – 6. P. 238-252.

5. Hai L.B., Nghia N.Y., Nga P.T., Chinh V.D., Linh P.T., Trang N.T.T. Synthesis and optical properties of colloidal CdS/CdSe/CdS quantum wells. *Physics and Engineering of New Materials, Springer Proceedings in Physics: Berlin, Heidelberg: Springer, 2009. V. 127. P. 79-86.*
6. Urbaszek B., Townsley C.M., Tang X., Morhain C., Balocchi A., Prior K.A., Nicholas R.J., Cavenett B.C.. Excitonic properties of ZnS quantum dots // *Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 155321.*
7. Dremine A.A., Yakovlev D.R., Sirenko A.A., Gubarev S.I., Shabelsky O.P., Waag A., Bayer M. Electron cyclotron mass in undoped CdTe/CdMnTe quantum wells // *Phys. Rev. B. 2005. V. 72, P. 195337.*
8. Godde T., Reshina I.I., Ivanov S.V., Akimov I.A., Yakovlev D.R., Bayer M. Exciton magnetic polaron in CdMnSe/CdMgSe quantum wells // *Phys. Stat. Sol. 2010. V. 247. N 6. P. 1508-1510.*
9. Mori M., Ando T. Electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures // *Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 6175.*
10. Маслов А.Ю., Прошина О.В. Роль интерфейсных фононов при формировании поляронных состояний в квантовых ямах // *ФТП. 2010. Т. 44. № 2, С. 200-204.*
11. Lassise MB, Wang P, Tracy BD, Chen G, Smith DJ, Zhang YH: Growth of II-VI/III-V heterovalent quantum structures // *Journal of Vacuum Science and Technology B: Nanotechnology and Microelectronics. 2018. V. 36. P. 02D110.*
12. Landolt-Bornstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1982. V. 17b.
13. D.V. Melnikov, W.B. Fowler. Electron-phonon interaction in a spherical quantum dot with finite potential barriers // *Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 245320.*
14. Маслов А.Ю., Прошина О.В., Русина А.Н. Роль поверхностных фононов в формировании спектра поляронных состояний в квантовых точках // *ФТП. 2007. Т. 41. № 7. P. 844-849.*

References

1. Alexandrov A.S., Devreese J.T.. *Advances in polaron physics.* Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2010. 165 p.
2. Ipatova I.P., Maslov A.Yu., Proshina O.V. Polaron in quantum nanostructures // *Surface Science. 2002. V. 507-510. P. 598-602.*
3. Del Gobbo S. Cadmium sulfide quantum dots – growth and optical properties: Doctoral theses. University of Rome “Tor Vergata”, 2009. 115 p.
4. Jungnickel V., Henneberger F.. Luminescence related processes in semiconductor nanocrystals – the strong confinement regime // *Journal of Luminescence. 1996. V. 70. N 1 – 6. P. 238-252.*
5. Hai L.B., Nghia N.Y., Nga P.T., Chinh V.D., Linh P.T., Trang N.T.T. Synthesis and optical properties of colloidal CdS/CdSe/CdS quantum wells. *Physics and Engineering of New Materials, Springer Proceedings in Physics: Berlin, Heidelberg: Springer, 2009. V. 127. P. 79-86.*
6. Urbaszek B., Townsley C.M., Tang X., Morhain C., Balocchi A., Prior K.A., Nicholas R.J., Cavenett B.C.. Excitonic properties of ZnS quantum dots // *Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 155321.*
7. Dremine A.A., Yakovlev D.R., Sirenko A.A., Gubarev S.I., Shabelsky O.P., Waag A., Bayer M. Electron cyclotron mass in undoped CdTe/CdMnTe quantum wells // *Phys. Rev. B. 2005. V. 72, P. 195337.*

8. Godde T., Reshina I.I., Ivanov S.V., Akimov I.A., Yakovlev D.R., Bayer M. Exciton magnetic polaron in CdMnSe/CdMgSe quantum wells // *Phys. Stat. Sol.* 2010. V. 247. N 6. P. 1508-1510.
9. Mori M., Ando T. Electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 40. P. 6175.
10. Maslov A.Yu., Proshina O.V. The role of interface phonons in the formation of polaron states in quantum wells. *Semiconductors.* 2010. V. 44. P. 189-193.
11. Lassise MB, Wang P, Tracy BD, Chen G, Smith DJ, Zhang YH: Growth of II-VI/III-V heterovalent quantum structures // *Journal of Vacuum Science and Technology B: Nanotechnology and Microelectronics.* 2018. V. 36. P. 02D110.
12. Landolt-Bornstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1982. V. 17b.
13. D.V. Melnikov, W.B. Fowler. Electron-phonon interaction in a spherical quantum dot with finite potential barriers // *Phys. Rev. B.* 2001. V. 64. P. 245320.
14. A.Yu. Maslov, O.V. Proshina, A.N. Rusina. The role of surface phonons in the formation of the spectrum of polaron states in quantum dots. *Semiconductors.* 2007. V. 41. P. 822-827.