

В.І. ГРУШКА, Р.М. ПЕЛЕЩАК

Дрогобицький державний педагогічний університет ім. І. Франка
(Вул. Стрийська, 3, Дрогобич 82100; e-mail: rpeleshchak@ukr.net)

ПОЛЯРОННИЙ СТАН В САМОУЗГОДЖЕНОМУ ЕЛЕКТРОН-ДЕФОРМАЦІЙНОМУ ПОЛІ КВАНТОВА ТОЧКА–МАТРИЦЯ

УДК 539

У межах самоузгодженої електрон-деформаційної моделі розраховано глибину потенціальної ями для електрона в наногетеросистемі з квантовими точками. Показано, що в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs із сферичними квантовими точками InAs існують деформаційні поля, які виникають на межі розподілу квантова точка-матриця, що призводять до підсилення поляронних ефектів порівняно з недеформованими матеріалами. Розраховано енергію електронного полярона із врахуванням внесків електростатичної енергії та енергії, зумовленої як механічною, так і електрон-деформаційною складовими деформацій матеріалів КТ та матриці.

Ключові слова: квантова точка, полярон, електрон-деформаційний потенціал, енергія зв'язку, електрон.

1. Вступ

У сучасній фізиці дуже велика увага приділяється дослідженню квантоворозмірних структур, зокрема квантових точок (КТ), які знаходять широке застосування у наноелектроніці як польові транзистори, фотоелементи, світлодіоди, лазери [1, 2]. У низькорозмірних системах електрон-фононна взаємодія може суттєво впливати на фізичні властивості електрона: на величину розсіяння електронів, поляронні ефекти і таке інше [3, 4]. Деформація, яка виникає на межі квантова точка–матриця, за рахунок неузгодження параметрів ґраток приводить до виникнення деформаційних та п'єзоелектричних полів, які впливають на оптичні властивості даних об'єктів. Зокрема, деформація стиску матеріалів квантових точок (InAs; CdTe) у матрицях (GaAs; ZnTe) відповідно приводить до збільшення ступеня локалізації заряджених квазічастинок і екситонів у цих квантових точках і до значного зростання взаємодії квазічастинок між собою та з поздовжніми оптичними фононами. Крім цього, матеріали цих квантових точок (КТ) володіють великим значенням деформаційного потенціалу, що приводить до збільшення поляронних ефектів порівняно з об'єктами матеріалами.

Для дослідження поляронних ефектів в наноструктурних матеріалах використовуються різні

наближення: фейманівський метод інтегрування за траєкторіями, метод канонічних перетворень [5, 6] та метод Буймистрового і Пекара [7]. Зокрема, у роботі [8] було розраховано енергію зв'язку електронного та діркового поляронів у сферичних КТ на основі матеріалів з високим ступенем іонності без врахування деформації ґратки матеріалу КТ з потенціальною ямою з нескінченно високими стінками. Вплив деформації, зумовленої тільки неузгодженням параметрів ґраток КТ і матриці, на поляронні ефекти було досліджено у роботі [9].

У даній роботі розраховано енергію зв'язку електронного полярона з врахуванням електрон-деформаційного та електростатичного потенціалів наногетеросистеми InAs/GaAs із напруженими квантовими точками InAs сферичної симетрії.

2. Геометрична модель напруженої наногетеросистеми з квантовими точками

Розглянемо наногетеросистему InAs/GaAs із напруженими квантовими точками InAs, які не мають чітко вираженої кристалографічної огранки, зокрема КТ, форма яких наближено відображає сферичну симетрію. Наприклад, в наногетеросистемі InAs/GaAs (001) такі КТ будуть формуватися при товщині нарощуваного шару InAs порядку 2 моношарів [10]. Тому в подальшому внеском ребер острівця в енергію пружної релаксації нехтуємо. Впорядковане розміщення напружених

квантових точок у кристалічній матриці зумовлене пружною взаємодією між острівцями, яка виникає за рахунок неузгодження параметрів ґраток InAs/GaAs. Щоб звести задачу з великою кількістю КТ до задачі з однією КТ, зроблено таке наближення: енергія попарної пружної взаємодії КТ замінена енергією взаємодії кожної КТ з усередненим полем пружної деформації $\sigma_{ef}(N-1)$ всіх інших КТ. У КТ InAs/GaAs, отримані в режимі Странського-Крастанова, існують значні деформаційні поля, що виникають на межі поділу квантова точка-матриця за рахунок неузгодження параметрів ґраток InAs/GaAs ($f = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(2)}} \approx 7\%$) [11].

У роботах [8, 9] було показано, що полярні ефекти зростають зі зменшенням розміру квантової точки. Параметром підсилення є відношення радіуса полярного стану a_0 до радіуса квантової точки, R_0 , тобто $p = a_0/R_0 \gg 1$. У випадку, коли матеріал квантової точки зазнає деформації стиску значення параметра підсилення p буде зростати, оскільки розмір квантової точки R_0 буде зменшуватись як за рахунок механічної деформації стиску матеріалу квантової точки, яка виникає за рахунок неузгодження параметрів контактуючих ґраток (КТ і матеріал матриці), так і електронної складової деформації

$$\text{Sp } \hat{\varepsilon} = \text{Sp } \hat{\varepsilon}_{\text{mech}}^{(1)}(r) + \text{Sp } \hat{\varepsilon}_{\text{el-def}}^{(1)}(r) < 0,$$

де $\text{Sp } \hat{\varepsilon}_{\text{mech}}^{(1)}$ – сума діагональних компонентів тензора механічної деформації матеріалу квантової точки, $\text{Sp } \hat{\varepsilon}_{\text{el-def}}^{(1)}$ – сума діагональних компонентів тензора електрон-деформаційної складової деформації [12]. Самоузгоджені електрон-деформаційні ефекти, які виникають за рахунок взаємозв'язку деформації ґратки і електронної підсистеми приведуть до додаткового підсилення полярних ефектів порівняно з полярними ефектами, зумовленими тільки дією механічної деформації:

$$p = \frac{a_0}{R_0(1 - |\text{Sp } \hat{\varepsilon}|)}. \quad (1)$$

Компоненти тензора деформації знаходиться з рівняння рівноваги, яке у випадку сферичної симетрії має вигляд:

$$\frac{d^2 u_r^{(i)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{du_r^{(i)}}{dr} - \frac{2}{r^2} u_r^{(i)} = D^{(i)} e \frac{d\phi^{(i)}(r)}{dr}, \quad (2)$$

де $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ – зміщення атомів у матеріалі КТ, з такими граничними умовами [13–15]:

$$\begin{cases} 4\pi R_0^2 (u_r^{(2)}|_{r=R_0} - u_r^{(1)}|_{r=R_0}) = \Delta V, \\ \sigma_{rr}^{(1)}|_{r=R_0} = \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_0} - P_L, \quad P_L = \frac{2\alpha}{R_0}, \\ \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_1} = -\sigma_{ef}(N-1), \end{cases} \quad (3)$$

де R_0 – радіус недеформованої квантової точки, R_1 – радіус матриці, P_L – лапласівський тиск,

$$\Delta V = f 4\pi R_0^3, \quad \alpha = \frac{2 \int_0^{R_1} \rho^{(i)}(c^{(i)})^2 (\varepsilon^{(i)})^2(r) r^2 dr}{R_0 u_r^{(1)}(R_0)}$$

– міжфазна вільна енергія між матеріалом КТ та матриці [16], $c^{(i)}$ – поздовжня швидкість звуку в i -му середовищі,

$$i = \begin{cases} 1 \equiv \text{InAs}, \\ 2 \equiv \text{GaAs}, \end{cases}$$

$\rho^{(i)}$ – густина i -го середовища,

$$D^{(i)} = \frac{(1 + \nu^{(i)})(1 - 2\nu^{(i)})}{(a^{(i)})^3 E^{(i)}(1 - \nu^{(i)})}.$$

Механічні напруження $\sigma_{rr}^{(1)}$ та $\sigma_{rr}^{(2)}$ в матеріалах квантової точки та матриці дорівнюють

$$\sigma_{rr}^{(i)} = \frac{E_i}{(1 + \nu_i)(1 - 2\nu_i)} \left[(1 - \nu_i) \varepsilon_{rr}^{(i)} + \nu_i (\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)}) \right], \quad (4)$$

де ν_i , E_i – коефіцієнт Пуассона і модуль Юнга матеріалу КТ та оточуючої матриці.

Загальний розв'язок неоднорідного рівняння (2) представляється у вигляді суми механічної та електрон-деформаційної складових зміщень:

$$u_r^{(i)}(r) = u_{r\text{mech}}^{(i)}(r) + u_{r\text{rel-def}}^{(i)}(r), \quad (5)$$

де

$$u_{r\text{mech}}^{(i)}(r) = C_1^{(i)} r + \frac{C_2^{(i)}}{r^2}, \quad (6)$$

$$u_{r\text{rel-def}}^{(i)}(r) = \frac{D^{(i)} e}{r^2} \int r'^2 \phi^{(i)}(r') dr'. \quad (7)$$

Оскільки в т. $r = 0$ зміщення повинно бути скінченим, то в розв'язку (6) покладаємо

$$C_2^{(1)} = 0. \quad (8)$$

Поле зміщень визначає такі компоненти тензора деформації матеріалів КТ і оточуючої матриці:

$$\varepsilon_{rr\text{mech}}^{(1)} = \varepsilon_{\varphi\varphi\text{mech}}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta\text{mech}}^{(1)} = C_1^{(1)}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{rr\text{mech}}^{(2)} &= C_1^{(2)} - \frac{2C_2^{(2)}}{r^3}, \\ \varepsilon_{\varphi\varphi\text{mech}}^{(2)} &= \varepsilon_{\theta\theta\text{mech}}^{(2)} = C_1^{(2)} + \frac{C_2^{(2)}}{r^3}. \end{aligned} \quad (10)$$

Коефіцієнти $C_1^{(1)}$, $C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$ знаходяться з розв'язку системи (3) з врахуванням виразів (4), (6), (8)–(10).

Механічна складова всебічної деформації:

$$\varepsilon_{\text{mech}}^{(i)} = \varepsilon_{rr\text{mech}}^{(i)} + \varepsilon_{\varphi\varphi\text{mech}}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta\text{mech}}^{(i)} = 3C_1^{(i)}. \quad (11)$$

Тоді $\text{Sp} \hat{\varepsilon}_{(\text{mech})}^{(1)} = 3C_1^{(1)}$.

Поле електрон-деформаційних зміщень описується такими компонентами тензора електронних деформацій:

$$\varepsilon_{r\text{rel-def}}^{(i)} = D^{(i)} e \left(\frac{2}{r^3} \int r'^2 \phi^{(i)}(r') dr' - \phi^{(i)}(r') \right), \quad (12)$$

$$\varepsilon_{\varphi\varphi\text{el-def}}^{(i)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)} = D^{(i)} e \left(\frac{1}{r^3} \int r'^2 \phi^{(i)}(r') dr' \right). \quad (13)$$

Електрон-деформаційна складова всебічної деформації:

$$\varepsilon_{\text{el-def}}^{(i)} = \varepsilon_{r\text{rel-def}}^{(i)} + \varepsilon_{\varphi\varphi\text{el-def}}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta\text{el-def}}^{(i)} = D^{(i)} e \varphi^{(i)}(r). \quad (14)$$

Отже,

$$\text{Sp} \varepsilon_{\text{el-def}}^{(1)}(\mathbf{r}) = D^{(1)} e \varphi^{(1)}(\mathbf{r}). \quad (15)$$

Потенціал $\varphi^{(i)}(\mathbf{r})$ знаходиться з рівняння Пуассона

$$\Delta \varphi^{(i)}(\mathbf{r}) = \frac{e}{\varepsilon_d^{(i)} \varepsilon_0} \Delta n^{(i)}(\mathbf{r}), \quad (16)$$

де $\varepsilon_d^{(i)}$ – відносна діелектрична проникність i -го матеріалу наногетеросистеми, $\Delta n^{(i)}(\mathbf{r}) = (n^{(i)}(\mathbf{r}) - n_0)$ – зміна електронної густини в околі гетеро-межі квантова точка – матриця, яка визначається через суперпозицію добутку хвильових функцій:

$$n^{(i)}(\mathbf{r}) = \sum_n \frac{\psi_n^{*(i)}(\mathbf{r}) \psi_n^{(i)}(\mathbf{r})}{\exp\left(\frac{E_n - \mu}{kT}\right) + 1}, \quad (17)$$

які знаходяться з рівняння Шредінгера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^{*(i)}} \Delta_{\mathbf{r}} + \Delta V_c(\mathbf{r}) \right] \psi_{n0}^{(i)}(\mathbf{r}) = E_n \psi_{n0}^{(i)}(\mathbf{r}) \quad (18)$$

з такими граничними умовами:

$$\begin{cases} R_{nl}^{(1)}(r)|_{r=R_0} = R_{nl}^{(2)}(r)|_{r=R_0}; \\ \frac{1}{m^{*(1)}} \frac{dR_{nl}^{(1)}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0} = \frac{1}{m^{*(2)}} \frac{dR_{nl}^{(2)}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0}, \end{cases} \quad (19)$$

де $m^{*(i)}$ – ефективна маса електрона в i -му матеріалі КТ, E_n – енергія електрона на n -рівні в квантовій ямі:

$$\begin{aligned} \Delta V_c(r) &= \left(\Delta E_c(0) + a_c^{(2)} \left(\varepsilon_{\text{mech}}^{(2)}(r) + \varepsilon_{\text{el-def}}^{(2)}(r) \right) - \right. \\ &\left. - a_c^{(1)} \left(\varepsilon_{\text{mech}}^{(1)}(r) + \varepsilon_{\text{el-def}}^{(1)}(r) \right) - e \left(\phi^{(2)}(r) - \phi^{(1)}(r) \right) \right) \end{aligned}$$

– потенціальна енергія електрона в КТ, $\Delta E_c(0)$ – глибина потенціальної ями для електрона в ненапруженій квантовій точці, $a_c^{(i)}$ – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності, n_0 , $n^{(i)}(\mathbf{r})$ – середня концентрація електронів провідності та концентрація носіїв заряду в i -му матеріалі напруженої наногетероструктури з КТ, μ – хімічний потенціал наногетероструктури, що визначається з рівняння:

$$\frac{1}{\Omega_0} \int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = n_0, \quad (20)$$

де Ω_0 – об'єм елементарної комірки.

Розв'язок рівняння Шредінгера (18) в сферичній системі координат шукаємо у вигляді $\psi_{nlm}^{(i)}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}^{(i)}(r) Y_{lm}^{(i)}(\theta, \varphi)$, де $Y_{lm}^{(i)}(\theta, \varphi)$ – сферичні функції.

Рівняння Пуассона (16) для сферичної симетрії з врахуванням $\Delta \varphi(r, \theta, \varphi) = \Delta_r \varphi(r)$ [22], запишеться у вигляді:

$$\frac{d^2 \varphi^{(i)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi^{(i)}}{dr} = \frac{e}{\varepsilon_d^{(i)} \varepsilon_0} n^{(i)}(r) - n_0, \quad (21)$$

де $\varphi(r)$ – усереднений розв'язок по сфері з радіусом r . Концентрація носіїв заряду в напруженій наногетероструктурі з КТ знаходилась у вигляді [12]:

$$n^{(i)}(r) \approx \left| \psi_{nlm}^{(i)} \right|^2 \frac{N_{\text{QD}}}{a_i} \left(\text{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E} E_1 \right) \right) +$$

$$\begin{aligned}
 & + \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E} \left(\mu - E_1 - \lambda_0^{(i)} - a_c^{(i)} \varepsilon_{rr}^{(i)} \right) \right) + \\
 & + \sqrt{\frac{8}{\pi}} \frac{e}{\Delta E} \exp \left(\frac{-2 \left(\mu - E_1 - \lambda_0^{(i)} - a_c^{(i)} \varepsilon_{rr}^{(i)} \right)^2}{\Delta E^2} \right) \times \\
 & \times \varphi^{(i)}(r), \tag{22}
 \end{aligned}$$

де N_{QD} – поверхнева густина квантових точок, ΔE – півширина гаусівської лінії, E_1 – енергія електрона на першому локалізованому рівні в квантовій ямі.

Розв’язок рівняння Пуассона (21) в квантові точці та матриці, з врахуванням виразу для концентрації електронів (22) знаходився з усередненою густиною імовірності $|\bar{\psi}^{(i)}|^2$ і має такий вигляд:

$$\varphi^{(1)}(r) = A_1 \frac{\sinh \left(\sqrt{\frac{1}{a_1}} r \right)}{r} - a_1 b_1, \quad 0 \leq r \leq R_0, \tag{23}$$

$$\begin{aligned}
 \varphi^{(2)}(r) = & B_1 \frac{\exp \left(-\sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right)}{r} + B_2 \frac{\exp \left(\sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right)}{r} - \\
 & - a_2 b_2 - \frac{d_2}{2r} \left[\exp \left(-\sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right) E_i \left(\sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right) + \right. \\
 & \left. + \exp \left(\sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right) E_i \left(-\sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right) \right], \quad R_0 \leq r \leq R_1, \tag{24}
 \end{aligned}$$

де

$$E_i(z) = \int_{-z}^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t} dt,$$

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{a_1} = & \frac{e^2}{\varepsilon_d^{(1)} \varepsilon_0 a^{(1)}} |\bar{\psi}^{(1)}|^2 N_{\text{QD}} \frac{\sqrt{\frac{8}{\pi}}}{\Delta E} \times \\
 & \times \exp \left(\frac{-2 \left(\mu - E_1 - \lambda_0^{(1)} - a_c^{(1)} C_1^{(1)} \right)^2}{\Delta E^2} \right),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{a_2} = & \frac{e^2}{\varepsilon_d^{(2)} \varepsilon_0 a^{(2)}} |\bar{\psi}^{(2)}|^2 N_{\text{QD}} \frac{\sqrt{\frac{8}{\pi}}}{\Delta E} \times \\
 & \times \exp \left(\frac{-2 \left(\mu - E_1 - \lambda_0^{(2)} - a_c^{(2)} C_1^{(2)} \right)^2}{\Delta E^2} \right),
 \end{aligned}$$

$$d_2 = \frac{2a_c^{(2)} C_2^{(2)} e}{\varepsilon_d^{(2)} \varepsilon_0 a^{(2)}} |\bar{\psi}^{(2)}|^2 N_{\text{QD}} \frac{\sqrt{\frac{8}{\pi}}}{\Delta E} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \exp \left(\frac{-2 \left(\mu - E_1 - \lambda_0^{(2)} - a_c^{(2)} C_1^{(2)} \right)^2}{\Delta E^2} \right), \\
 b_1 = & \frac{e}{\varepsilon_d^{(1)} \varepsilon_0 a^{(1)}} |\bar{\psi}^{(1)}|^2 N_{\text{QD}} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E} E_1 \right) + \right. \\
 & \left. + \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E} \left(\mu - E_1 - \lambda_0^{(1)} - a_c^{(1)} C_1^{(1)} \right) \right) - \right. \\
 & \left. - \frac{a^{(1)} n_0}{|\bar{\psi}^{(1)}|^2 N_{\text{QD}}} \right], \\
 b_2 = & \frac{e}{\varepsilon_d^{(2)} \varepsilon_0 a^{(2)}} |\bar{\psi}^{(2)}|^2 N_{\text{QD}} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E} E_1 \right) + \right. \\
 & \left. + \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E} \left(\mu - E_1 - \lambda_0^{(2)} - a_c^{(2)} C_1^{(2)} \right) \right) - \right. \\
 & \left. - \frac{a^{(2)} n_0}{|\bar{\psi}^{(2)}|^2 N_{\text{QD}}} \right].
 \end{aligned}$$

Коефіцієнти A_1, B_1, B_2 у виразах (23), (24) визначаються з умов неперервності потенціалів $\varphi^{(1)}(r)$ і $\varphi^{(2)}(r)$ на напруженій гетеромезі та нормальних складових векторів електричного зміщення і умови електронейтральності:

$$\begin{cases}
 \varphi^{(1)}(r)|_{r=R_0} = \varphi^{(2)}(r)|_{r=R_0}, \\
 \varepsilon^{(1)} \frac{\varphi^{(1)}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0} = \varepsilon^{(2)} \frac{\varphi^{(2)}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0}, \\
 \int_0^{R_0} r^2 \Delta n^{(1)}(r) dr + \int_{R_0}^{R_1} r^2 \Delta n^{(2)}(r) dr = 0.
 \end{cases} \tag{25}$$

3. Електронний полярон у квантовій точці, перенормований самоузгодженою електрон-деформаційною взаємодією

Енергію зв’язку електрон-деформаційного полярона у напруженій деформованій квантовій точці InAs/GaAs знаходимо з рівняння Шредінгера з електрон-деформаційним потенціалом зони провідності, енергією електрон-фононної взаємодії та власною енергією фононів:

$$\left[\hat{H}_e + \Delta V_c + \sum_q \hbar \omega_q a_q^+ a_q + e \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V \varepsilon_d^{(i)} \varepsilon_0}} \times \right.$$

$$\times \sum_q \frac{\sqrt{\omega_q}}{q} (a_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + a_q^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}) \Big] \psi_{n0}(\mathbf{r}) = \tilde{E}_n \psi_{n0}(\mathbf{r}), \quad (26)$$

де a_q, a_q^+ – оператори знищення і народження фонових.

Оскільки параметр підсилення $p \gg 1$, то для знаходження енергії полярона використаємо адіабатичне наближення, за якого швидким є рух електрона в КТ, а повільним – поляронний рух. Усереднимо рівняння (26) за хвильовими функціями нульового наближення $\psi_{n0}^{(i)}(\mathbf{r})$, які знаходимо з рівняння Шредінгера:

$$\hat{H}_{0e}^{(i)} \psi_{n0}^{(i)}(\mathbf{r}) = E_{n0} \psi_{n0}^{(i)}(\mathbf{r}) \quad (27)$$

з гамільтоніаном

$$\hat{H}_{0e}^{(i)} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m_e} \nabla + \Delta V_e. \quad (28)$$

Розв'язок рівняння (27) у сферичній системі координат представимо у вигляді

$$\psi_{n0}^{(i)}(r, \theta, \varphi) = R_{n0}^{(i)}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (29)$$

де $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферичні функції.

Радіальні функції $R_{n0}^{(i)}(r) = \frac{\chi_{n0}^{(i)}(r)}{r}$ виражаються через сферичні функції Бесселя [17]:

$$\chi_{n0}^{(1)}(r) = A j_l(k_{1e}r) + B n_l(k_{1e}r), \quad 0 \leq r \leq R_0, \quad (30)$$

$$\chi_{n0}^{(2)}(r) = C h_l^{(1)}(ik_{2e}r) + D h_l^{(2)}(ik_{2e}r), \quad R_0 \leq r \leq R_1, \quad (31)$$

де

$$k_{1e}^2(r) = \frac{2m_1}{\hbar^2} \left(-a_c^{(1)}(\varepsilon_{\text{mech}}^{(1)}(r) + \varepsilon_{\text{el-def}}^{(1)}(r)) + e\phi^{(1)}(r) - E_{n0} \right),$$

$$k_{2e}^2(r) = \frac{2m_2}{\hbar^2} (\Delta E_c(0) + a_c^{(2)}(\varepsilon_{\text{mech}}^{(2)}(r) + \varepsilon_{\text{el-def}}^{(2)}(r)) - e\phi^{(2)}(r) - E_{n0}).$$

Умови неперервності хвильових функцій і густини потоку ймовірності на межі КТ – матриця

$$\begin{cases} R_{1nl}(r) \Big|_{r=R_0} = R_{2nl}(r) \Big|_{r=R_0}, \\ \frac{1}{m_1} \frac{dR_{1nl}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0} = \frac{1}{m_2} \frac{dR_{2nl}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0}, \end{cases}$$

спільно з умовою регулярності функцій $R_{nl}^{(i)}(r)$ при $r \rightarrow 0$ і $r \rightarrow R_0$, а також з врахуванням нормування знаходимо енергію основного стану електрона E_{n0} в сферичній КТ з трансцендентного рівняння:

$$\frac{m_2^{(e)}}{m_1^{(e)}} [1 - k_{1e}R_0 \operatorname{ctg}(k_{1e}R_0)] = \frac{1 + k_{2e}R_0 + e^{2k_{2e}(R_0-R_1)}(k_{2e}R_0 - 1)}{1 - e^{2k_{2e}(R_0-R_1)}}. \quad (32)$$

Таким чином, усереднене рівняння (26) за хвильовими функціями (29) набуває вигляду:

$$\hat{H}^{(ln)} = E_{n0} + \sum \hbar\omega_q a_q^+ a_q + e \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\varepsilon\varepsilon_0}} \sum_q \frac{\sqrt{\omega_q}}{q} (\rho_{ln}(q) a_q + \rho_{ln}^*(q) a_q^+), \quad (33)$$

$$\text{де} \quad \rho_{ln}(q) = \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \psi_{n0}^2(\mathbf{r}) d^3r, \quad (34)$$

$\rho_{ln}(q)$ – фур'є-компонента густини електронних станів на рівні (ln) .

Застосувавши унітарне перетворення

$$U_{ln} = \exp \left[\sum_q \frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\varepsilon_d^{(i)}\varepsilon_0\hbar\omega_q}} (\rho_{ln}(q) a_q^+ - \rho_{ln}^*(q) a_q) \right] \quad (35)$$

до рівняння (33), отримаємо

$$\hat{H}^{(ln)} = E_{n0} - \frac{2\pi e^2}{V\varepsilon_d^{(i)}\varepsilon_0} \sum_q \frac{|\rho_{ln}(q)|^2}{q} + \sum_q \hbar\omega_q a_q^+ a_q. \quad (36)$$

Другий доданок в правій частині рівняння (36) є енергією зв'язку електрон-деформаційного полярона $\Delta E^{(ln)}$ на рівні (ln) у напруженій наногетеросистемі з квантовою точкою. Отже, підставивши у (36) величину $\rho_{ln}(q)$ із (34) і перейшовши від підсумовування по q до інтегрування, отримаємо:

$$\Delta E^{(ln)} = -\frac{e^2}{2\varepsilon_d^{(i)}\varepsilon_0} \int \frac{(\psi_{n0}^{(i)}(\mathbf{r}))^2 (\psi_{n0}^{(i)}(\mathbf{r}'))^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r d^3r', \quad (37)$$

де $\psi_{n0}^{(i)}(\mathbf{r}), \psi_{n0}^{(i)}(\mathbf{r}')$ – хвильові функції (29) електрона у напруженій наногетеросистемі з деформованою квантовою точкою.

4. Результати розрахунків та їх аналіз

Розрахунки проводились для наногетеросистеми InAs/GaAs при таких значеннях параметрів: $R_0 = 100 \text{ \AA}$, $R_1 = 500 \text{ \AA}$, $a_c^{(1)} = -5,08 \text{ eV}$, $a_c^{(2)} = -7,17 \text{ eV}$, $a^{(1)} = 6,08 \text{ \AA}$, $a^{(2)} = 5,65 \text{ \AA}$, $m^{(1)} = 0,057m_0$, $m^{(2)} = 0,065m_0$, $\alpha = 0,657 \text{ Н/м}$, $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $\Delta E_c(0) = 0,83 \text{ eV}$ [18–20]. Відлік енергії для потенціальної ями ведеться від вершини дна потенціальної ями електрон-деформаційного потенціалу.

На рис. 1 наведені результати числового розрахунку глибини потенціальної ями $\Delta V_c(r)$ для електрона в напруженій КТ від її розмірів із врахуванням внесків електростатичної енергії та енергії, зумовленої деформацією матеріалів КТ і матриці. Як бачимо, із збільшенням розміру R_0 КТ, глибина квантуючого потенціалу електрона як з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу, так і з врахуванням електрон-деформаційного та електростатичного потенціалів монотонно зростає. Зокрема, при концентрації електронів провідності в матриці наногетеросистеми $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ та поверхневій густині квантових точок $N_{\text{QD}} = 5,5 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$, глибина потенціальної ями з врахуванням електрон-деформаційного та електростатичного потенціалів для $R_0 = 45 \text{ \AA}$ та $R_0 = 100 \text{ \AA}$ становить $0,64 \text{ eV}$, $0,682 \text{ eV}$ відповідно, тоді як без врахування електростатичного потенціалу $0,671 \text{ eV}$, $0,689 \text{ eV}$. Зменшення глибини квантуючого потенціалу (рис. 1, штрихова лінія 2) зумовлене внеском електростатичної енергії та дією додаткового стиску матеріалу КТ, що виникає за рахунок самоузгодженої електрон-деформаційної складової $\varepsilon_{\text{el-def}}^{(i)}(r)$ потенціалу, який залежить від розміру квантової точки R_0 , ступеня заповнення зони провідності n_0 матриці та поверхневої густини N_{QD} КТ.

Деформація стиску матеріалу, зумовлена механічною та електрон-деформаційною складовими квантової точки InAs, приводить до збільшення ступеня локалізації заряджених квазічастинок у цій КТ і до значного зростання взаємодії квазічастинок між собою та з поздовжніми оптичними фононами, а це приводить до підсилення поляронних ефектів.

На рис. 2 наведена залежність енергії зв'язку електронного полярона основного стану від

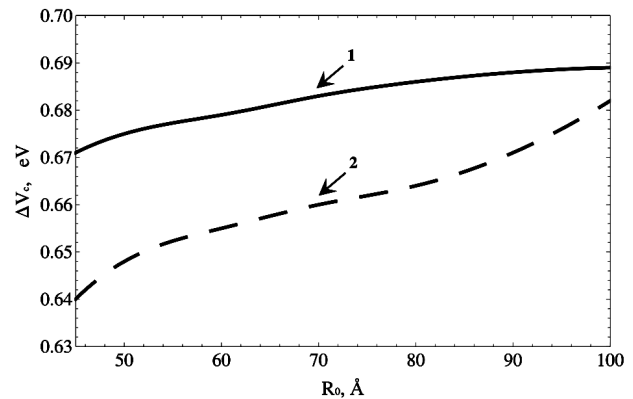


Рис. 1. Залежність глибини потенціальної ями електронів у напруженій сферичній КТ від її радіуса R_0 при: 1 (суцільна лінія) – з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу; 2 (штрихова лінія) – з врахуванням як електрон-деформаційного, так і електростатичного потенціалів

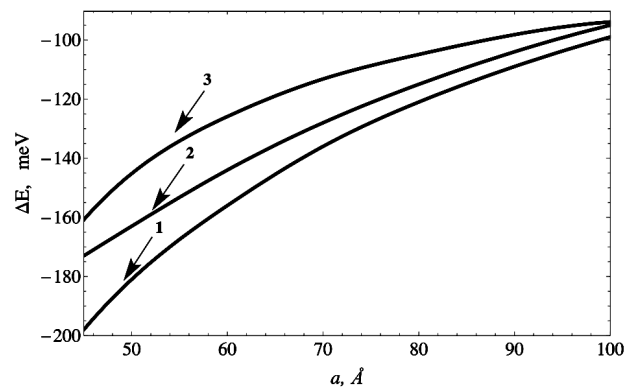


Рис. 2. Енергія зв'язку електронного полярона в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs: де 1 – енергія зв'язку полярона у недеформованій КТ, 2 – енергія зв'язку полярона у деформованій КТ з врахуванням тільки механічної складової деформаційного потенціалу, 3 – енергія зв'язку полярона у деформованій КТ з врахуванням як електрон-деформаційного, так і електростатичного потенціалів

радіуса недеформованої квантової точки (рис. 2, крива 1), механічно деформованої (рис. 2, крива 2) та деформованої як механічною складовою $\varepsilon_{\text{mech}}^{(i)}(r)$, так і електрон-деформаційною складовою $\varepsilon_{\text{el-def}}^{(i)}(r)$ (рис. 2, крива 3) наногетеросистеми. Із рис. 2 видно, що енергія зв'язку електронного полярона в усіх трьох випадках (з деформацією і без деформації КТ в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs) зі зменшенням радіуса

КТ збільшується. Зокрема, при $R_0 = 45 \text{ \AA}$, енергія зв'язку електронного полярона у недеформованій КТ становить -199 меВ , тоді як у деформованій КТ з врахуванням тільки механічної складової деформаційного потенціалу -174 меВ та у деформованій КТ з врахуванням як електрон-деформаційного, так і електростатичного потенціалів $-160,8 \text{ меВ}$. Таким чином, деформація матеріалів КТ і матриці призводить до збільшення енергії зв'язку електронного полярона, при цьому зі зменшенням радіуса КТ вплив як механічної, так і електрон-деформаційної складових є більшим. Із збільшенням розмірів R_0 КТ енергія зв'язку електрон-деформаційного полярона асимптотично наближається до енергії зв'язку електронного полярона в недеформованій квантовій точці, оскільки деформація матеріалу зменшується.

5. Висновки

1. Розвинуто теорію поляронних станів електрона в деформованій КТ з врахуванням як механічної, так і електрон-деформаційної складових електрон-деформаційного потенціалу.

2. Встановлено, що і механічна, і електрон-деформаційна складові електрон-деформаційного потенціалу призводять до збільшення енергії зв'язку електронного полярона, при цьому зі зменшенням розміру КТ вплив деформації матеріалу КТ стає суттєвішим.

3. Показано, що електронна складова електрон-деформаційного потенціалу та складова електростатичної енергії, зумовлені деформацією матеріалів КТ і матриці та перерозподілом носіїв заряду в околі напруженої межі КТ-матриця, приводять до збільшення енергії зв'язку електронного полярона. Зокрема, в КТ (InAs/GaAs) розміром 45 \AA електрон-деформаційна складова деформаційного потенціалу КТ приводить до збільшення енергії зв'язку електронного полярона на $12,4 \text{ меВ}$ порівняно з енергією зв'язку електронного полярона у деформованій КТ з врахуванням тільки механічної складової деформаційного потенціалу та на 37 меВ – у недеформованій КТ.

1. S. Nizamoglu, H.V. Demir. Resonant nonradiative energy transfer in CdSe/ZnS core/shell nanocrystal solids enhances hybrid white light emitting diodes. *Optics Express* **16**, 13961 (2008).

2. R.J. Martin-Palma, M. Manso, V. Torres-Costa. Optical biosensors based on semiconductor nanostructures. *Sensors* **9**, 5149 (2009).
3. N. Mori, T. Ando. Electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures. *Phys. Rev.B.* **40**, 6175 (1989).
4. M.H. Degani. Energy-momentum relation for polarons in quantum-well wires. *Phys. Rev. B.* **40**, 11937 (1989).
5. S. Mukhopadhyay, A. Chatterjee. The ground and the first excited states of an electron in a multidimensional polar semiconductor quantum dot: An all-coupling variational approach. *Phys.: Condens. Matter* **11**, 2071 (1999).
6. M. Krishna, S. Mukhopadhyay, A. Chatterjee. Bipolaronic phase in polar semiconductor quantum dots: An all-coupling approach. *Phys. Lett. A.* **360**, 655 (2007).
7. V.M. Buimistrov, S.I. Pekar. Quantum states of particles coupled to a harmonically oscillating continuum with arbitrarily strong interaction. I. Case of absence of translational symmetry. *JETP* **5** (5), 970 (1957).
8. И. Ипатова, А. Маслов, О. Прошина. Поляронное состояние в квантовой точке для частицы с вырожденным зонным спектром. *ФТП* **33**, 832 (1999).
9. В.І. Грушка, Р.М. Пелещак. Енергія зв'язку деформаційного електронного полярона в квантовій точці InAs/GaAs. *Журнал нано- та електронної фізики* **8**, 04068 (2016).
10. Z.M. Wang, K. Holmes, Yu.I. Mazur, G.J. Salamo. Fabrication of (In, Ga) As quantum-dot chains on GaAs (100). *Appl. Phys. Lett.* **84**, 1931 (2004).
11. Р.Д. Венгреневич, Ю.В. Гудыма, С.В. Ярема. Оствальдовское созревание наноструктур с квантовыми точками. *ФТП* **35**, 1440 (2001).
12. R.M. Peleshchak, I.Ya. Bachynsky. Electric properties of the interface quantum dot – matrix. *Condensed Matter Physics* **12**, 215 (2009).
13. В.П. Евтихийев, О.В. Константинов, А.В. Матвеевцев, А.Е. Романов. Излучение света полупроводниковой структурой с квантовой ямой и массивом квантовых точек. *ФТП* **36**, 79 (2002).
14. К. Теодосиу. *Упругие модели дефектов в кристаллах* (Мир, 1985).
15. Б.В. Новиков, Г.Г. Зегря, Р.М. Пелещак, О.О. Данькив, В.А. Гайсин, В.Г. Талалаев, И.В. Штрот, Г.Э. Цырлин. Барические свойства квантовых точек InAs. *ФТП* **42**, 1094 (2008).
16. R.M. Peleshchak, S.K. Guba, O.V. Kuzyk, I.V. Kurilo, O.O. Dan'kiv. Effect of Bi isovalent dopants on the formation of homogeneous coherently strained InAs quantum dots in GaAs matrices. *Semiconductors* **47**, 349 (2013).
17. З.З. Флюгге. *Задачи по квантовой механике* (Мир, 1974).
18. C.G. Van de Walle. Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory. *Phys. Rev. B* **39**, 1871 (1989).

19. A. Qteish, R.J. Needs. Improved model-solid-theory calculations for valence-band offsets at semiconductor-semiconductor interfaces. *Phys. Rev. B* **45**, 1317 (1992).
20. N. Moll, M. Scheffler, E. Pehlke. Influence of surface stress on the equilibrium shape of strained quantum dots. *Phys. Rev. B* **58**, 4566 (1998).
21. R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv. Temperature regimes of formation of nanometer periodic structure of adsorbed atoms in GaAs semiconductors under the action of laser irradiation. *Condens. Matter Phys.* **18**, 43801 (2015).
22. В. Арсенин. *Методы математической физики и специальные функции* (Наука, 1984).

V.I. Hrushka, R.M. Peleshchak

POLARON STATE IN THE SELF-CONSISTENT ELECTRON-DEFORMATION FIELD OF THE "QUANTUM DOT-MATRIX" SYSTEM

S u m m a r y

The potential well depth for an electron in a nanoheterosystem with quantum dots has been calculated in the framework of the self-consistent electron-deformation model. It is shown that the strained InAs/GaAs nanoheterosystem with InAs spherical quantum dots is characterized by deformation fields, which appear at the quantum dot-matrix interface and result in the enhancement of polaron effects in comparison with the unstrained material. The electron polaron energy is calculated, by considering the electrostatic energy and the energy associated with the mechanical and electron-deformation strain components in the quantum-dot and matrix materials.

Одержано 11.06.17