

П.Ж. БАЙМАТОВ, Ш.Т. ИНОЯТОВ

Наманганский Государственный Университет

(Ул. Уйчинская, 316, Наманган 716019, Узбекистан; e-mail: pbaymatov@rambler.ru)

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ СРЕДЫ НА ЭЛЕКТРОННУЮ ЭНЕРГИЮ В КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

УДК 538.9

Метод Буймистрова–Пекара применен к расчету поляронного сдвига электронного уровня в квантовой точке. С использованием параболической аппроксимации конфайнмента, дифференциальное уравнение для амплитуды смещений фононов точно решено методом функций Грина. Сравнены результаты различных приближений.

Ключевые слова: полярон, квантовая точка, потенциал удержаний, энергия основного состояния, метод Буймистрова–Пекара, метод функция Грина, приближение произвольной силы связи.

1. Введение

В последние годы новые физические свойства полупроводниковых наноструктур являются предметом интенсивного исследования. Вследствие локализации носителей в наноразмерных объектах их энергия квантуется. В связи с этим, уделяется особое внимание на изучение влияния фононов на спектр электрона в низкоразмерных структурах (т.е. наноструктурах) полупроводника [1–3]. В полярных кристаллах взаимодействие носителей с полярно-оптическими фононами является сильным. Поэтому изучение поляронных эффектов, характерных для низкоразмерных систем, представляет значительный интерес. Для расчета поляронных эффектов в наноструктурных материалах, исследователи применяют различные приближения [4–9]. При этом наряду с фейнмановским методом интегрирования по траекториям, для расчета поляронных эффектов применяют также методы канонических преобразований (КП) [8–10].

В методе параметризованных КП [8, 9] последовательно применяются преобразования Ли–Лоу–Пайнса и преобразования сдвига амплитуды фононов, вводя некоторые вариационные параметры.

В методе Буймистрова и Пекара [10], дифференциальное уравнение для амплитуды смещения фононов получено с использованием метода КП, но из-за сложности решения этого уравнения, амплитуды смещения фононов выбираются в виде линейной комбинации предельных выражений, соответствующих случаям слабой и сильной связей.

В данной работе для расчета поляронного сдвига электронного уровня в квантовой точке применяется метод развитый в работах [10, 11] и дифференциальное уравнение для амплитуды смещений фононов решается точно методом функций Грина (ФГ). Для упрощения решения задачи, потенциал конфайнмента считается параболическим. Проведено сравнение результатов различных приближений.

2. Модель

Гамильтониан взаимодействующей электрон-фононной системы в наноструктурах можно записать в виде

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) + \sum_{\mathbf{q}} [v_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + v_{\mathbf{q}}^*b_{\mathbf{q}}^+e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}] + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}^+b_{\mathbf{q}}, \quad (1)$$

© П.Ж. БАЙМАТОВ, Ш.Т. ИНОЯТОВ, 2015

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2015. Т. 60, № 3

где m – зонная масса электрона, $b_{\mathbf{q}}^{\dagger}, b_{\mathbf{q}}$ – операторы рождения и уничтожения фононов с импульсом \mathbf{q} , ω_0 – частота оптических фононов, $v_{\mathbf{q}}$ – форм-фактор электрон-фононного взаимодействия, $V(r)$ – потенциал конфайнмента,

$$|v_{\mathbf{q}}|^2 = \frac{4\pi\alpha l_0(\hbar\omega_0)^2}{\Omega q^2}, \quad l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}, \quad (2)$$

$$\sum_{\mathbf{q}} \dots = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \dots, \quad V(r) = \frac{\chi r^2}{2}.$$

Усредняя гамильтониан (1) по базису

$$\Psi = \Phi_{\text{ph}}\phi(r) = U |0\rangle \phi(r),$$

$$U = \exp \left[\sum_{\mathbf{q}} (F_{\mathbf{q}}(r)b_{\mathbf{q}}^{\dagger} - F_{\mathbf{q}}^*(r)b_{\mathbf{q}}) \right], \quad (3)$$

$$U^{\dagger}U = 1, \langle 0 | 0 \rangle = 1,$$

получаем функционал

$$J[F_{\mathbf{q}}(r), \phi(r)] = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} \int d\mathbf{r} \phi^2 \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla F_{\mathbf{q}}|^2 + \right. \\ \left. + \hbar\omega_0 |F_{\mathbf{q}}|^2 + v_{\mathbf{q}}F_{\mathbf{q}}e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + v_{\mathbf{q}}^*F_{\mathbf{q}}^*e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \right], \quad (4)$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} (\nabla\phi)^2 + \int d\mathbf{r} V(r)\phi^2. \quad (5)$$

Варьируя функционал (4) по $F_{\mathbf{q}}$, получаем неоднородное дифференциальное уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 F_{\mathbf{q}}(r) - 2\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla\phi}{\phi} \nabla F_{\mathbf{q}}(r) + \\ + \hbar\omega_0 F_{\mathbf{q}}(r) + v_{\mathbf{q}}^*e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} = 0. \quad (6)$$

Экстремальное значение функционала (4) теперь будет иметь вид

$$J[\phi(r)] = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \int d\mathbf{r} \phi^2(r) F_{\mathbf{q}}(r) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (7)$$

Решение уравнения (6) представляет собой амплитуды смещений фононного поля в зависимости от координаты электрона. При слабой связи $\alpha \rightarrow 0$ (когда размер электронного облака является достаточно протяженным), пренебрегая градиентом электронной функции (второе слагаемое в (6)) и

полагая $\phi^2(r) \sim 1$ в (7) (при отсутствии конфайнмента), можно получить известный результат:

$$F_{\mathbf{q}}(r) = -\frac{v_{\mathbf{q}}^*e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{\hbar^2 q^2/2m + \hbar\omega_0}, \quad J = -\alpha\hbar\omega_0. \quad (8)$$

Буймистровым и Пекарем [10] была использована линейная комбинация $F_{\mathbf{q}}(r) = f_{\mathbf{q}} + g_{\mathbf{q}}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}$. Они, определяя параметры $f_{\mathbf{q}}$ и $g_{\mathbf{q}}$ из условий минимальности (4), получили результат, аппроксимирующий энергию полярона произвольной силы связи α .

Следуя Гроссу [11], вводя обозначение $F_{\mathbf{q}} = V_{\mathbf{q}}^*\Phi_{\mathbf{q}}/\phi$, перепишем (6) и (7) в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi_{\mathbf{q}}(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\phi}{\phi} \Phi_{\mathbf{q}}(r) + \\ + \hbar\omega_0 \Phi_{\mathbf{q}}(r) + \phi(r)e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} = 0, \quad (9)$$

$$J[\phi(r)] = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} |V_{\mathbf{q}}|^2 \int d\mathbf{r} \phi(r) \Phi_{\mathbf{q}}(r) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (10)$$

Вводя ФГ для уравнения (9)

$$\Phi_{\mathbf{q}}(r) = - \int d\mathbf{r}' G(r, r') \phi(r') e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} \quad (11)$$

и учитывая соотношения

$$\sum_{\mathbf{q}} |V_{\mathbf{q}}|^2 e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \frac{\alpha l_0(\hbar\omega_0)^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad (12)$$

из (9) и (10) имеем

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\phi}{\phi} + \hbar\omega_0 \right] G(r, r') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad (13)$$

$$J[\phi(r)] = E_0 - \alpha l_0(\hbar\omega_0)^2 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\phi(r)G(r, r')\phi(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (14)$$

Уравнения для амплитуды $\Phi_{\mathbf{q}}$ в (13) и функционал поляронного состояния (14) зависят только от пробной функции электрона. Найти аналитические решения неоднородного уравнения (13) для произвольно заданной пробной функции $\phi(r)$ представляется сложным.

Если в качестве пробной функции взять волновую функцию основного состояния трехмерного осциллятора

$$\begin{aligned} \phi(r) &= \frac{1}{\pi^{3/4}} \frac{1}{a_s^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2a_s^2}\right), \quad \omega_s^2 = \frac{k}{m}, \\ a_s &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_s}}, \quad E_{\mathbf{n}} = \hbar\omega_s (n_1 + n_2 + n_3 + 3/2) \end{aligned} \quad (15)$$

с вариационным параметром a_s , то уравнение (13) можно решить, разлагая ФГ по собственным функциям осциллятора

$$\begin{aligned} G(r, r') &= \sum_{\mathbf{n}} \frac{\Psi_{\mathbf{n}}(r)\Psi_{\mathbf{n}}(r')}{E_{\mathbf{n}} + W} = \\ &= \hbar\omega_s \sum_{\mathbf{n}} \frac{\Psi_{\mathbf{n}}(r)\Psi_{\mathbf{n}}(r')}{n_1 + n_2 + n_3 + W_0}, \\ W_0 &= \frac{3}{2} + \frac{W}{\hbar\omega_s}. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь $\Psi_{\mathbf{n}}(r)$ – базис трехмерного осциллятора:

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{n}}(r) &= \Psi_{n_1}(x)\Psi_{n_2}(y)\Psi_{n_3}(z), \\ \Psi_{n_1}(x) &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{a_s^{1/2}} \frac{1}{(n_1!)^{1/2}} \frac{1}{(2^{n_1})^{1/2}} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{x^2}{2a_s^2}\right) H_{n_1}\left(\frac{x}{a_s}\right). \end{aligned} \quad (17)$$

Далее, воспользовавшись соотношением

$$\frac{1}{c} = \int_0^{\infty} dt \exp(-tc) \quad (18)$$

и формулой Мелера [12] для суммирования полиномов Эрмита

$$\begin{aligned} \sum_{n_1=0}^{\infty} \left(\frac{e^{-t}}{2}\right)^{n_1} \frac{H_{n_1}(x/a_s) H_{n_1}(x'/a_s)}{n_1!} = \\ = \frac{1}{\sqrt{1-e^{-2t}}} \exp\left(\frac{2xx'e^{-t} - (x^2 + x'^2)e^{-2t}}{a_s^2(1-e^{-2t})}\right), \end{aligned} \quad (19)$$

можно получить

$$G(r, r') = \frac{1}{\hbar\omega_s \pi^{3/2} a_s^3} \exp\left(-\frac{r^2 + r'^2}{2a_s^2}\right) \times$$

$$\times \int_0^{\infty} dt \frac{e^{-tW_0}}{[1-e^{-2t}]^{3/2}} \exp\left(\frac{2\mathbf{r}\mathbf{r}'e^{-t} - (r^2 + r'^2)e^{-2t}}{a_s^2(1-e^{-2t})}\right). \quad (20)$$

Подставляя полученное выражение в функционал (14) и проводя интегрирование по r и r' для полярионной энергии (в единицах $\hbar\omega_0$), окончательно имеем:

$$\begin{aligned} \varepsilon_p &= \frac{3}{2}\mu^2 + \frac{3\gamma^2}{8\mu^2} - \alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} \mu \int_0^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1-\exp(-2\mu^2 t)}}, \\ \mu &= \frac{l_0}{a_s}, \quad \gamma = \frac{\Omega}{\omega_0}, \quad \Omega^2 = \frac{\chi}{m}. \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь коэффициент γ характеризует безразмерную силу конфайнмента. В адиабатическом пределе сильной связи, оставляя в (16) только одно слагаемое или разлагая подынтегральное выражение (21) в пределе $\mu \rightarrow \infty$, можно получить:

$$\varepsilon_p = \frac{3}{2}\mu^2 + \frac{3\gamma^2}{8\mu^2} - \alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} \mu. \quad (22)$$

3. Обсуждение результатов

Полученный функционал (21) отличается от ранее известных результатов [8–10] тем, что на этапе его вывода использовали точное решение уравнения (13). При отсутствии конфайнмента $\gamma = 0$ (свободный полярон), из функционала (21) можно получить критическую точку $\alpha_c \approx 5,8$, такую, что когда $\alpha < \alpha_c$, электрон делокализуется. Для сравнения результатов здесь приведём функционал, который получается методом параметризации КП [9], (формула (8) из [9]):

$$\begin{aligned} E_p &= \frac{3}{4}\mu^2 + \frac{3}{4}\frac{\omega^2}{\mu^2} - \frac{\alpha}{2\sqrt{2}\pi^2} \times \\ &\times \int \frac{d\mathbf{q}}{q^2(1+a^2q^2/2)} \exp\left[-\frac{(1-a)^2q^2}{2\mu^2}\right]. \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь μ – вариационный параметр пробной функции электрона, a – вариационный параметр, введенный в КП. Отметим, что в работе [9] знаменатель подынтегральной функции написан неправильно $1 + aq^2/2$. Функционал (23) можно получить также из (4) аппроксимацией $F_{\mathbf{q}}(r) = g_{\mathbf{q}} \exp(-ia \mathbf{q}\mathbf{r})$, где $g_{\mathbf{q}}$ определяется из условия минимальности полной энергии.

Заменяя $E_p \rightarrow \varepsilon_p, \mu \rightarrow \sqrt{2}\mu, \omega \rightarrow \Omega$ и выполняя интегрирование по углам, из (23) получаем

$$\varepsilon_p = \frac{3}{2}\mu^2 + \frac{3}{8}\frac{\gamma^2}{\mu^2} - \frac{\sqrt{2}}{\pi}\alpha \times \int_0^\infty \frac{dq}{1 + a^2q^2/2} \exp\left[-\frac{(1-a)^2q^2}{4\mu^2}\right]. \quad (24)$$

Для свободного полярона ($\gamma = 0$) из функционала (24) получается $\alpha_c \approx 8,5$.

Таким образом, начиная с $\alpha > 5,8$, энергия свободного полярона (21) всегда ниже чем (24). Поскольку внутри квантовой точки волновая функция электрона обычно локализована, то критическая точка α_c подавляется.

Ниже в таблице сравниваются результаты расчетов по формуле (21) с адиабатическим результатом (22) и с функционалом (24).

Видно, что наиболее точные оценки энергии получаются по формуле (21). Результаты, полученные по формуле (22), становятся более справедливыми при большом значении γ , так как именно при условии сильного конфайнмента электрон становится более “горячим” и адиабатическое приближение выполняется лучше.

Полученный функционал полярона (14) зависит только от пробной функции электрона, фононные координаты полностью исключены. Для пробной функции осциллятора появляется критическая точка $\alpha_c \approx 5,8$. Согласно Гроссу [11] это обусловлено сильной локализованностью этой функции. При другом выборе пробной функции электрона, например, в виде $(1 + \gamma r) \exp(-\delta r)$ – решение (13) затрудняется.

α	Поляронная энергия ε_p			
	γ	(21)	(22)	(24)
0,1	1	1,39	1,44	1,40
	26	38,70	38,71	38,71
	46	68,61	68,62	68,61
2	1	-0,78	0,24	-0,50
	26	32,85	33,14	33,03
	46	61,02	61,24	61,16
5,0	1	-4,39	-2,45	-3,49
	26	23,21	23,89	23,64
	46	48,63	49,16	48,97

Авторы благодарны В.Д. Лахно за полезное обсуждение данной работы.

1. A.S. Alexandrov, in *Nanotechnology for Electronic Materials and Devices*, edited by A. Korokin, E. Gusev, J.K. Labanowski, and S. Luryi (Springer, New York, 2006), p. 305.
2. J.T. Devreese, V.M. Fomin, and E.P. Pokatilov, in *Handbook of Semiconductor Nanostructures and Nanodevices, Vol. 4*, edited by A.A. Balandin and K.L. Wang (American Scientific Publishers, Los Angeles, 2006), p. 339.
3. M. Galperin, M.A. Ratner, and A. Nitzan, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 103201 (2007).
4. E.P. Pokatilov, S.N. Klimin, S.N. Balaban, and V.M. Fomin, *Phys. Status Solidi B* **189**, 433 (1995).
5. E.P. Pokatilov, V.M. Fomin, S.N. Balaban, S.N. Klimin, and J.T. Devreese, *Phys. Status Solidi B* **210**, 879 (1998).
6. S.N. Klimin, E.P. Pokatilov, and V.M. Fomin, *Phys. Status Solidi B* **184**, 373 (1994).
7. K. Oshiro, K. Akai, and M. Matsuura, *Phys. Rev. B* **58**, 7986 (1998).
8. S. Mukhopadhyay and A. Chatterjee, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 2071 (1999).
9. P.M. Krishna, S. Mukhopadhyay, and A. Chatterjee, *Phys. Lett. A* **360**, 655 (2007).
10. В.М. Буймистров, С.И. Пекар, *ЖЭТФ* **32**, 1193 (1957).
11. E.P. Gross, *Ann. Phys. (NY)* **8**, 78 (1959).
12. Г. Бейтман, *Высшие трансцендентные функции*, под ред. А. Эрдейи (Наука, Москва, 1973).

Получено 10.02.14

П.Ж. Байматов, Ш.Т. Инояттов

ВПЛИВ ПОЛЯРИЗАЦІЇ
СЕРЕДОВИЩА НА ЕЛЕКТРОННУ
ЕНЕРГІЮ В КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ

Резюме

Метод Буймістрова–Пекара застосовано до розрахунку поляронного зсуву електронного рівня в квантовій точці. З використанням параболічної апроксимації конфайнмента, диференціальне рівняння для амплітуди зміщень фононів точно вирішено методом функцій Гріна. Порівняно результати різних наближень.

P.J. Baymatov, Sh.T. Inoyatov

INFLUENCE OF THE MEDIUM
POLARIZATION ON THE ENERGY
OF AN ELECTRON IN A QUANTUM DOT

Summary

The Buimistrov–Pekar method has been applied to calculate the polaronic shift of the electron energy level in a quantum dot. In the framework of the parabolic confinement approximation, the differential equation for the phonon amplitude is exactly solved, by using the Green’s function method. The results of various approximations have been compared.