

УДК 538.958, 538.915

Електронний полярон у сферичній квантовій точці

Бойчук В. І., Білинський І. В., Шевчук І. С.

innashs@yahoo.com

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики,
вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100

У статті теоретично досліджено вплив поляризаційних фононів на електронні стани у сферичній квантовій точці, поміщеній у неполярну матрицю. За допомогою варіаційного методу обчислено енергію зв'язку полярона із врахуванням обмежених і межових фононів у наногетеросистемі. За допомогою комбінації адіабатичного методу та методу проміжного зв'язку отримано достовірні результати для широкого діапазону радіусів квантових точок та різних значень константи електрон-фононної взаємодії. Конкретні розрахунки проведено для квантових точок *GaAs*, *CdSe*, *CdTe*, *CuCl*, що знаходяться у неполярній матриці. Проведено порівняння з результатами, отриманими за допомогою другого порядку теорії збурень. Обчислено та проаналізовано загальні властивості полярона при різних значеннях фізичних параметрів, які характеризують систему. Показано, що при зменшенні радіуса квантової точки величина енергії зв'язку полярона швидко збільшується до великого значення. Також показано, що обмежені фонони відіграють основну роль у поляронних ефектах, а вплив межових фононів достатньо малий.

Вступ

Останні досягнення у технології виготовлення напівпровідникових квантових точок (КТ) збільшили можливість керувати їх розміром, формою, положенням. Унікальні характеристики КТ дають змогу певною мірою наперед визначати їх властивості з метою створення приладів з новими функціями та оптимізації роботи вже існуючих пристроїв у галузях наноелектроніки, фотоніки, біомедичних дослідженнях [1, 2].

Ефекти електрон-фононної взаємодії відіграють дуже важливу роль в електронних та оптичних властивостях полярних кристалічних матеріалів [3]. У роботах [4-7] розглянуто вплив електрон-фононної, дірково-фононної, екситон-фононної взаємодії на релаксацію носія заряду в системі з квантовою точкою. Електрон-фононна взаємодія та поляронні ефекти досліджено у сферичній квантовій точці [8-13], у кубічній квантовій точці [14], в еліпсоїдальній квантовій точці [15], у пірамідальній квантовій точці [16] і в циліндричній квантовій точці [17]. В обмежених системах, таких як квантова яма, квантовий дріт і квантова точка, повздовжні оптичні (ЛО) фонони мають свої характерні риси, будучи повністю відмінними від об'ємного кристалу: існують обмежені та межові (інтерфейсні) фонони [8, 13, 14, 18-20]. Для вивчення впливу повздовжніх фононів на електрон в обмежених системах потрібно врахувати ці їх особливості.

У сферичній квантовій точці, яку також називають штучним атомом, вплив поляронних ефектів на електрон досліджують у рамках моделі діелектричного континууму [10-12]. Автори цих робіт розглядають поляронні ефекти, зумовлені обмеженими та межовими поляризаційними фононами в адіабатичному наближенні. На основі проведених обчислень зроблено висновок, що межові фонони не чинять впливу на основний поляронний

стан. У роботі [12] за допомогою другого порядку теорії збурень розглядається енергія зв'язку полярона з врахуванням обмежених та межових фононів. Зроблено висновок, що обмежені фонони роблять основний внесок в енергію зв'язку полярона, величина якої швидко зростає при зменшенні радіуса.

Варіаційний метод та адіабатичний можна використовувати лише для тих електронних станів, віддалі від яких до наступних електронних станів набагато більша ніж енергія фонона. Така вимога задовольняється в цій задачі для двох випадків. По-перше, у випадку сильної електрон-фононної взаємодії, коли електрон сильно локалізований. Другий випадок стосується малих радіусів сферичної точки, для яких різниця енергій між електронними рівнями стає набагато більшою від енергії фонона, тому що енергія електрона обернено пропорційна квадрату радіуса квантової точки R .

Для точки великого радіуса із слабкою електрон-фононою взаємодією отримуємо зовсім іншу ситуацію: мала різниця енергій між електронними рівнями унеможливує застосування адіабатичного методу. Поляронний ефект, зумовлений взаємодією електрона з поляризаційними фононами, потрібно розглядати в неадіабатичному наближенні. Для великої квантової точки адіабатичний метод, використаний у роботах [10-11], не дає такого значення енергії зв'язку полярона як в об'ємному кристалі із слабким електрон-фононним зв'язком.

У цій роботі досліджено ефекти електрон-фононної взаємодії у полярній сферичній квантовій точці, поміщеній у неполярну матрицю. Враховуючи те, що розглянуті вище результати є ефективними лише для деякого обмеженого числа випадків, застосовано варіаційний метод, який дає добрі результати для широкого діапазону радіусів

квантової точки та константи електрон-фононного зв'язку. При обчисленнях та аналізі енергії зв'язку полярона проаналізовано природу поляронних ефектів із врахуванням ролі обмежених та межових фононів.

Модель. Гамільтоніан

Розглядається заряд (електрон, дірка) сферичної квантової точки радіуса R , що взаємодіє з ЛО-фононами. Гамільтоніан системи є сумою:

$$H = H_{e(h)} + H_{ph} + H_{int}. \quad (1)$$

У наближенні ефективної маси електронна частина гамільтоніана задається формулою:

$$H_e = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m_e} \nabla + V_e(r). \quad (2)$$

Якщо досліджувати квантові точки великого радіуса ($R \geq 5$ нм), то потенціал квантової точки можна вибрати у вигляді [13]:

$$V_e(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & r \leq R \\ \infty, & r > R \end{cases}. \quad (3)$$

Енергію та хвильову функцію електрона отримуємо з розв'язку рівняння Шредінгера $H\psi_e = E^e\psi_e$ для вибраної моделі сферичної квантової точки:

$$\psi_{NLM}^e = \sqrt{\frac{2}{R^3 j_{L+1}^2(k_{NL}R)}} j_L(k_{NL}r) Y_L^M(\theta, \varphi),$$

$$E_{NL}^{e(h)} = \frac{\hbar^2 k_{NL}^2}{2m_{e(h)}}. \quad (4)$$

Стани електрона визначаються набором квантових чисел (NLM) . Функції $j_L(r)$ та $Y_L^M(\theta, \varphi)$ – сферична функція Бесселя та сферичних гармонік відповідно. k_{NL} визначається зі співвідношення $k_{NL} = \mu_{NL}/R$, де μ_{NL} – N -ий нуль сферичної функції Бесселя порядку L : $j_L(\mu_{NL}) = 0$. Зокрема для основного стану $(1, 0, 0)$, μ_{01} дорівнює π , і тоді хвильова функція $\psi_g^e = \psi_{100}^e$ та енергія $E_g^e = E_{100}^e$ визначаються відповідно:

$$\psi_g^e = \sqrt{\frac{2\pi}{R^3}} j_0(\pi r/R) Y_0^0(\theta, \varphi), \quad (5)$$

$E_g^e = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e R^2}$. Гамільтоніан ЛО-фононів H_{ph} у представленні чисел заповнення запишеться так:

$$H_{ph} = \sum_{s,\sigma} \hbar\omega_{s\sigma} a_{s\sigma}^+ a_{s\sigma}. \quad (6)$$

Використаємо для гетеросистеми модель діелектричного континууму. Електрон знаходиться в середовищі квантової точки сферичної форми із статичною та високочастотною діелектричними константами ϵ_0 , ϵ_∞ . Квантова точка поміщена в матрицю з діелектричною сталою ϵ_d . Тоді гамільтоніан електрон-фононної взаємодії має вигляд:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{s,\sigma} \hbar\omega_{s\sigma} v_{s\sigma} [S_{s\sigma}(\mathbf{r}) a_{s\sigma} + e.c.], \quad (7)$$

де $a_{s\sigma}$ – оператор знищення фонона ($s\sigma$). У формулі (7) введено такі позначення:

$$S_{s1}(\mathbf{r}) = \begin{cases} j_l(k_{nl}r) Y_l^m(\theta, \varphi), & r \leq R \\ 0, & r > R \end{cases},$$

$$S_{s2}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \left(\frac{r}{R}\right)^l Y_l^m(\theta, \varphi), & r \leq R \\ \left(\frac{R}{r}\right)^{l+1} Y_l^m(\theta, \varphi), & r > R \end{cases}. \quad (8)$$

Індекси s, σ пробігають наступні значення:

$$s = \begin{cases} n = 1, 2, \dots; l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, \pm 1, \dots \pm l, \\ l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, \pm 1, \dots \pm l, \end{cases}$$

$$\sigma = \begin{cases} 1, & \text{confined phonons} \\ 2, & \text{interface phonons} \end{cases}.$$

Енергія для фононів різного типу визначається співвідношеннями:

$$\hbar\omega_{s1} = \hbar\omega_{LO}, \quad \hbar\omega_{s2} = \sqrt{\frac{\epsilon_d + (\epsilon_d + \epsilon_0)l}{\epsilon_d + (\epsilon_d + \epsilon_\infty)l}} \hbar\omega_{TO},$$

$$\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{\hbar\omega_{TO}}\right)^2 = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty}. \quad (9)$$

Вирази для v_{s1} та v_{s2} можна подати через поляронний радіус $R_p = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m\omega_{LO}}}$ та константу електрон-фононної взаємодії α_1 :

$$v_{s1} = \sqrt{\frac{8\pi\alpha_1 R_p}{\mu_{nl}^2 j_{l+1}^2(\mu_{nl}) R}}, \quad v_{s2} = \sqrt{\frac{4\pi\alpha_2 R_p}{R}}, \quad (10)$$

де

$$\alpha_1 = \frac{e^2}{2R_p \hbar\omega_{LO}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right), \quad \alpha_2 = \alpha_1 \frac{\sqrt{l\epsilon_\infty}}{l\epsilon_0 + (l+1)\epsilon_d} \left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{\hbar\omega_{s2}}\right)^3.$$

Використаємо метод Лі-Лоу-Пайнса. Унітарний оператор для системи електрона, що взаємодіє з ЛО-фононами, має вигляд:

$$U = \exp \left[\sum_{s,\sigma} [F_{s\sigma}^*(\mathbf{r}) a_{s\sigma} - F_{s\sigma}(\mathbf{r}) a_{s\sigma}^\dagger] \right]. \quad (11)$$

Після унітарного перетворення гамільтоніан $\tilde{H} = U^{-1} H U$ запишеться так:

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{H}_1 + \tilde{H}_2, \quad (12)$$

де \tilde{H}_0 – доданок, який не містить фононів, \tilde{H}_1 та \tilde{H}_2 – доданки, які містять один та два фононні оператори відповідно.

$$\tilde{H}_0 = \frac{(\mathbf{p}+\mathbf{j})^2}{2m} + V_{conf}(\mathbf{r}) + \sum_{s,\sigma} \frac{\hbar^2 |\Delta F_{s\sigma}|^2}{2m} +$$

$$+ \sum_{s,\sigma} \hbar\omega_{s\sigma} |F_{s\sigma}|^2 - \sum_{s,\sigma} \hbar\omega_{s\sigma} [v_{s\sigma} S_{s\sigma} F_{s\sigma} + e.c.] \quad (13)$$

$$\tilde{H}_1 = -\frac{(\mathbf{p}+\mathbf{j}) \cdot \mathbf{J}}{2m} + \sum_{s,\sigma} \frac{[\nabla^2 F_{s\sigma} a_{s\sigma}^\dagger - \nabla^2 F_{s\sigma}^* a_{s\sigma}]}{2m} -$$

$$- \sum_{s,\sigma} \hbar\omega_{s\sigma} (F_{s\sigma}^* a_{s\sigma} + F_{s\sigma} a_{s\sigma}^\dagger) +$$

$$+ \sum_{s,\sigma} \hbar\omega_{s\sigma} [v_{s\sigma} S_{s\sigma} F_{s\sigma} + e.c.] \quad (14)$$

та

$$\begin{aligned} \tilde{H}_2 = & \sum_{s,\sigma} \hbar\omega_{s\sigma} a_{s\sigma}^\dagger a_{s\sigma} + \\ & + \frac{1}{2m} \sum_{s,\sigma} \sum_{s',\sigma'} \left[(\nabla F_{s\sigma}) (\nabla F_{s'\sigma'}) a_{s\sigma}^\dagger a_{s'\sigma'}^\dagger + \right. \\ & + (\nabla F_{s\sigma}^*) (\nabla F_{s'\sigma'}^*) a_{s\sigma} a_{s'\sigma'} + \\ & + (\nabla F_{s\sigma}) (\nabla F_{s'\sigma'}^*) a_{s\sigma}^\dagger a_{s'\sigma'} + \\ & \left. + (\nabla F_{s\sigma}^*) (\nabla F_{s'\sigma'}) a_{s\sigma}^\dagger a_{s'\sigma'} \right] \end{aligned} \quad (15)$$

Тут введено такі позначення:

$$\mathbf{J} = -i\hbar \sum_{s,\sigma} [a_{s\sigma}^\dagger \nabla F_{s\sigma} - a_{s\sigma} \nabla F_{s\sigma}^*]$$

та

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2} \sum_{s,\sigma} [F_{s\sigma}^* \nabla F_{s\sigma} - F_{s\sigma} \nabla F_{s\sigma}^*]. \quad (16)$$

Функція $F_{s\sigma}$ вибрана у наступному вигляді:

$$F_{s\sigma}(\mathbf{r}) = v_{s\sigma} f_{s\sigma} S_{s\sigma}^*(\mathbf{r}) + v_{s\sigma} g_{s\sigma}. \quad (17)$$

Пробну функцію трансформованого стану $|\Psi\rangle$ вибрано у вигляді добутку електронного стану $|\Phi\rangle$ і нульового фононного стану $|0\rangle$, тобто $|\Psi\rangle = |\Phi\rangle|0\rangle$. Тоді власне значення гамільтоніана має вигляд:

$$E = \langle \Psi | \tilde{H} | \Psi \rangle = \langle \Phi | \tilde{H}_0 | \Phi \rangle. \quad (18)$$

Вибір лише першого доданка у правій частині рівняння (17), тобто $F_{s\sigma}(\mathbf{r}) = v_{s\sigma} f_{s\sigma} S_{s\sigma}^*(\mathbf{r})$, відповідає методу проміжного електрон-фононного зв'язку. Метод проміжного зв'язку ефективно застосовується для точок більших радіусів із слабким та проміжним електрон-фононним зв'язком, коли різниці між електронними рівнями менші від енергії фонона $\hbar\omega_{s\sigma}$. Вибір лише другого доданка у правій частині рівняння (17), тобто $F_{s\sigma}(\mathbf{r}) = v_{s\sigma} g_{s\sigma}$, відповідає адіабатичному методу. Адіабатичний метод застосовний, коли відповідний електронний стан добре відокремлений від інших електронних станів. Ця ситуація реалізується при дуже малих радіусах квантової точки та у випадку сильно локалізованого стану завдяки сильному електрон-фононному зв'язку. Таким чином, очікується, що $F_{s\sigma}$ (17) даватиме добрі результати при врахуванні поляронних ефектів для широкого діапазону радіусів квантових точок та сили електрон-фононної взаємодії.

Вважатимемо, що $f_{s\sigma}$ та $g_{s\sigma}$ – дійсні і характеризують симетрію інверсії. З варіаційних умов $\partial \langle \Phi | \tilde{H} | \Phi \rangle / \partial f_{s\sigma} = 0$ і $\partial \langle \Phi | \tilde{H} | \Phi \rangle / \partial g_{s\sigma} = 0$ можна отримати варіаційні параметри $f_{s\sigma}$ і $g_{s\sigma}$:

$$f_{s\sigma} = \frac{B_{s\sigma} - A_{s\sigma}^2}{B_{s\sigma} + C_{s\sigma} - A_{s\sigma}^2}, \quad (19)$$

$$g_{s\sigma} = \frac{A_{s\sigma} C_{s\sigma}}{B_{s\sigma} + C_{s\sigma} - A_{s\sigma}^2}. \quad (20)$$

Тут $A_{s\sigma}$, $B_{s\sigma}$ і $C_{s\sigma}$ визначено наступним чином:

$$A_{s\sigma} = \langle \Phi | S_{s\sigma}(\mathbf{r}) | \Phi \rangle, \quad B_{s\sigma} = \langle \Phi | |S_{s\sigma}(\mathbf{r})|^2 | \Phi \rangle$$

$$C_{s\sigma} = \frac{\hbar}{2m\omega_{s\sigma}} \langle \Phi | |\nabla S_{s\sigma}(\mathbf{r})|^2 | \Phi \rangle$$

Для хвильової функції електронного стану $|\Phi\rangle$ вибрано функцію у вигляді:

$$\Phi(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} j_0(\pi r/R) e^{-\frac{r}{\alpha}}, \quad (21)$$

де α – варіаційний параметр, N – стала нормування, яка має вигляд $N = 4\pi \int_0^R dr r^2 j_0^2(\pi r/R) e^{-\frac{r}{\alpha}}$. Експоненціальна функція в $\Phi(r)$ описує природу локалізації полярона у випадку сильного електрон-фононного зв'язку.

Енергія полярона отримується мінімізацією функціоналу відносно варіаційного параметра α , тобто

$$\begin{aligned} E = \min_{\beta} \left\{ \left\langle \Phi \left| \frac{p^2}{2m} + V_{conf(r)} \right| \Phi \right\rangle - \right. \\ \left. - \sum_{s,\sigma} \hbar\omega_{s\sigma} v_{s\sigma}^2 \left[\frac{B_{s\sigma} (B_{s\sigma} - A_{s\sigma}^2) - A_{s\sigma}^2 C_{s\sigma}}{B_{s\sigma} + C_{s\sigma} - A_{s\sigma}^2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (22)$$

Тоді поправка до енергії ΔE для основного стану електрона визначається наступним чином:

$$\Delta E = E - \left\langle \psi_g^e \left| \frac{p^2}{2m} + V_{conf(r)} \right| \psi_g^e \right\rangle. \quad (23)$$

Величину ΔE часто називають енергією зв'язку полярона [25, 26].

Аналіз загальних формул. Числові результати

У випадку слабкої електрон-фононної взаємодії експоненціальна функція у виразі для хвильової функції електрона не відіграє суттєвої ролі, тому можна прийняти $\alpha = 0$.

Розглянемо випадок великих радіусів, тобто $R \rightarrow \infty$. У цьому випадку внеском межових фононів можна знехтувати. Достатньо розглянути обмежені фонони з великим n у фононній моді $s = (n, l, m)$ і тоді справджуються співвідношення $A_{s1} \ll B_{s1}$, $C_{s1} = R_p^2 k_s^2 B_{s1}$ і $v_{s1} = 8\pi\alpha_1 R_p/R$. Отже, варіаційні параметри f_{s1} і g_{s1} в унітарному перетворенні (11) отримують вигляд:

$$f_{s1} = \frac{1}{1 + R_p^2 k_s^2} \quad (24)$$

і

$$g_{s1} = 0 \quad (25)$$

Таким чином, енергія зв'язку полярона:

$$\Delta E = -\hbar\omega_{LO} \sum_s \frac{v_{s1}^2 B_{s1}}{1 + R_p^2 k_s^2}. \quad (26)$$

Використовуючи співвідношення між сферичною і плоскою хвилями

$$j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\pi i^l} \int d\Omega_{\mathbf{k}} Y_l^{m*}(\theta_k, \varphi_k) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (27)$$

можна показати, що $\sum_{l,m} B_{s1} = 1/4\pi$. Тоді, замінивши суму по n на інтеграл по k , отримуємо ΔE у випадку квантових точок великих розмірів

$$\Delta E = -\hbar\omega_{LO} \frac{R}{\pi} \int_0^\infty dk \frac{2\alpha_1 R_p}{R} \frac{1}{1+R_p^2} = -\alpha_1 \hbar\omega_{LO}, \quad (28)$$

добре відому енергію зв'язку полярона у випадку слабкої електрон-фононої взаємодії в об'ємному кристалі [21, 24].

У випадку малих радіусів маємо $C_{s\sigma} \gg A_{s\sigma}, B_{s\sigma}$. Отже, отримуємо $f_{s1} = f_{s2} = 0$, $g_{s1} = A_{s1}$, тоді енергія зв'язку полярона записується виразом:

$$\Delta E = -\hbar\omega_{LO} \sum_n v_{(n,0,0)1}^2 A_{(n,0,0)1}^2 \simeq -\hbar\omega_{LO} v_{(n,0,0)1}^2 A_{(n,0,0)1}^2, \quad (29)$$

що аналогічно до результату, отриманого за допомогою адіабатичного методу [11]. Варто підкреслити, що енергії зв'язку полярона ΔE , одержані вище для випадків великих та малих квантових точок (26) і (29) можна також отримати, використовуючи другий порядок теорії збурень.

У випадку сильної електрон-фононої взаємодії електрон локалізується в обмеженій ділянці. Якщо радіус цієї області набагато менший ніж радіус квантової точки, то вигляд хвильової функції електрона $\Phi(r)$ зводиться до $(8\beta^3/\pi^3)^{1/4} \exp(-\beta r^2)$. Для великих β у великій квантовій точці $C_{s1} \gg A_{s1}, B_{s1}$. Тоді величинами f_{s1} та f_{s2} можна нехтувати і отримати $g_{s1} = A_{s1}$, $g_{s2} = 0$ у виразі (17). Кінцеві результати аналогічні до одержаних за допомогою адіабатичного методу у роботі [11]. Тоді енергія полярона записується:

$$E = \min_{\beta} \left\{ 3\beta R_p^2 \hbar\omega_{LO} - \frac{2\alpha_1 R_p \sqrt{\beta}}{\sqrt{\pi}} \hbar\omega_{LO} \right\}. \quad (30)$$

Тут мінімум досягається при $\beta = \alpha_1^2/9\pi R_p^2$ і енергія зв'язку полярона ΔE має вигляд:

$$\Delta E = -\frac{\alpha_1^2}{3\pi} \hbar\omega_{LO}, \quad (31)$$

що є добре відомим виразом для енергії зв'язку полярона у випадку сильної електрон-фононої взаємодії в об'ємному кристалі [24].

Вище було показано, що запропонована теорія може давати вірні результати як у випадку слабкої, так і сильної взаємодії. Таким чином, очікується, що за допомогою нашого методу, який поєднує адіабатичний підхід та метод проміжного зв'язку, можна отримати достовірні результати у широких інтервалах. Для підтвердження теорії та її порівняння з результатами інших авторів [10-12, 27] обчислено енергії зв'язку полярона для квантових точок *CdTe*, *GaAs*, *CdSe* та *CuCl*. Фізичні параметри для обчислень для *GaAs* [26], для *CdSe* і *CuCl* [11] подано у Табл.1. Слід зауважити, що ступінь вільності обмежених фононів N у системі

з квантовою точкою обмежений, і тоді сумування по моді обмежених фононів $s = (n, l, m)$ в обчисленнях обмежується числом N , яке приблизно визначається відношенням об'єму квантової точки до об'єму елементарної комірки. Проте показано, що обмеження суми мало впливає на результати [13].

Спочатку розглянемо поправку до енергії електронного полярона у КТ *GaAs*, для якої проведемо порівняння наших результатів із результатами, отриманими за допомогою другого порядку теорії збурень [12]. Метод теорії збурень у цьому випадку можна застосувати, оскільки кристал *GaAs* характеризується слабкою електрон-фононою взаємодією. У роботі [12] енергія зв'язку полярона з точністю до другого порядку отримується з рівняння:

$$\Delta E^{(2)} = - \sum_{n,l,m} \sum_{s,\sigma} \frac{|\langle \psi_{nlm}^e | \hbar\omega_{s\sigma} v_{s\sigma} S_{s\sigma}(\mathbf{r}) | \psi_g^e \rangle|^2}{E_{nl}^e + \hbar\omega_{s\sigma} - E_g^e} \quad (32)$$

Розглянемо енергію зв'язку полярона у випадку *CdSe* і *CuCl*, для яких числові результати представлено у роботах [10, 11]. В обох роботах використано адіабатичний метод, в якому враховується лише другий доданок у правій частині виразу (17), тобто $F_{s\sigma}(\mathbf{r}) = v_{s\sigma} g_{s\sigma}$. У роботі [11], на відміну від [10], враховано ефект локалізації хвильової функції електрона внаслідок сильної електрон-фононої взаємодії наступним чином:

$$\Phi(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} j_0(\pi r/R) e^{-\beta r^2},$$

тобто вигляд експоненціальної функції відрізняється від вибраної нами (21). Розрахунки показують, що застосований нами варіаційний метод дає значно точніші результати ніж адіабатичні методи [10, 11]. Для того, щоб описати полярон у сферичній квантовій точці, потрібно врахувати обидва доданки в $F_{s\sigma}$. У геосистемі з квантовою ямою перший доданок (17) добре описує поправку до енергії полярона для широкого діапазону ширини ями [25]. Такий результат пояснюється тим, що в системі з квантовою ямою існують стани, енергія яких залежить від неперервних квантових чисел (k_x, k_y) , навіть коли ширина ями в напрямку Oz стає малою, а в системі з квантовою точкою малого розміру різниця між електронними рівнями стає набагато більшою ніж енергія фонона. У наших обчисленнях показано, що зі збільшенням радіуса КТ величини поляронних поправок різко зменшуються. Велике значення енергії зв'язку полярона пояснюється тим, що електрон існує навіть при дуже малому радіусі КТ, а це спричиняє сильнішу взаємодію між електроном та фононом. Поступове збільшення енергії зв'язку полярона у випадку великих радіусів квантової точки пояснюється зростанням вкладу неадіабатичних доданків зі збільшенням радіусу КТ.

	m_e	$\hbar\omega_{LO}(\text{meV})$	ϵ_0	ϵ_∞	α_1	$R_p(\text{Å})$	$a(\text{Å})$
<i>CdTe</i>	0.504	21.08	10.9	7.47	0.39	17.17	6.84
<i>CdSe</i>	0.13	26.54	9.3	6.1	0.46	33.23	5.2
<i>GaAs</i>	0.067	35.33	12.4	10.6	0.07	40.11	5.65
<i>CuCl</i>	0.504	25.64	7.9	3.61	2.460	17.17	5.41

Табл. 1. Параметри матеріалів, які використовуються в обчисленнях.

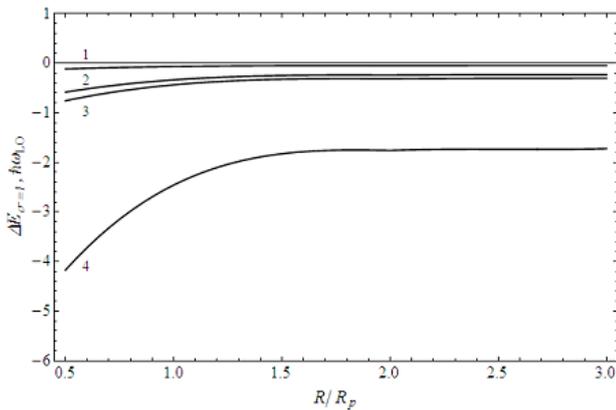


Рис. 1. Залежність енергії ΔE електронного полярона при врахуванні лише обмежених фононів від радіуса квантової точки: 1 – для кристалу *GaAs*, 2 – для кристалу *CdTe*, 3 – для кристалу *CdSe*, 4 – для кристалу *CuCl*.

Розглянемо поправку до енергії електронного полярона та загальні властивості електронного полярона у сферичній квантовій точці для різних значень фізичних параметрів системи. Ця система характеризується наступними параметрами: маса електрона m_e , статична діелектрична проникність ϵ_0 , височастотна діелектрична проникність квантової точки ϵ_∞ , діелектрична стала матриці ϵ_d , енергія об'ємного LO-фонона матеріалу квантової точки $\hbar\omega_{LO}$, радіус квантової точки R , стала ґратки матеріалу КТ a . Значення цих параметрів, а також фрьоліхівська константа електрон-ЛО-фононної взаємодії α_1 та поляронний радіус R_p для типових напівпровідників подано у Табл. 1.

У цій роботі радіус квантової точки та енергію зв'язку полярона обчислюємо в одиницях R_p та $\hbar\omega_{LO}$ відповідно. Результати числових розрахунків енергії зв'язку полярона ΔE для сферичних квантових точок *GaAs*, *CdTe*, *CdSe*, *CuCl* показано на Рис. 1-3.

На Рис. 1 показано залежність енергії зв'язку електронного полярона ΔE від радіуса квантових точок при врахуванні обмежених фононів. На Рис. 2 подано залежність енергії зв'язку полярона ΔE від радіуса квантових точок при врахуванні лише межових (інтерфейсних) фононів. Як видно з рисунку, внесок межових фононів значно менший від внеску обмежених фононів. Щоб продемонструвати роль обмежених та межових фононів у поправці

до енергії електронного полярона, на Рис. 3 показано залежність енергії зв'язку електронного полярона ΔE від радіуса квантових точок для трьох різних значень ϵ_d . З рисунка видно, що ефект діелектричної сталої матриці ϵ_d чинить невеликий вплив на енергію зв'язку електронного полярона.

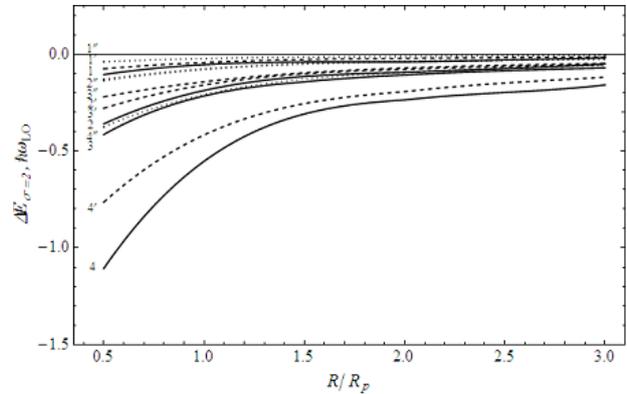


Рис. 2. Залежність енергії зв'язку електронного полярона ΔE при врахуванні лише межових фононів від радіуса квантової точки: 1, 1' – для кристалу *GaAs*, 2, 2' – для кристалу *CdTe*, 3, 3' – для кристалу *CdSe*, 4, 4' – для кристалу *CuCl*, суцільні криві 1, 2, 3 – $\epsilon_d = 1$, малий штрих 1', 2', 3' – $\epsilon_d = 2.25$, великий штрих 1'', 2'', 3'' – $\epsilon_d = 6$.

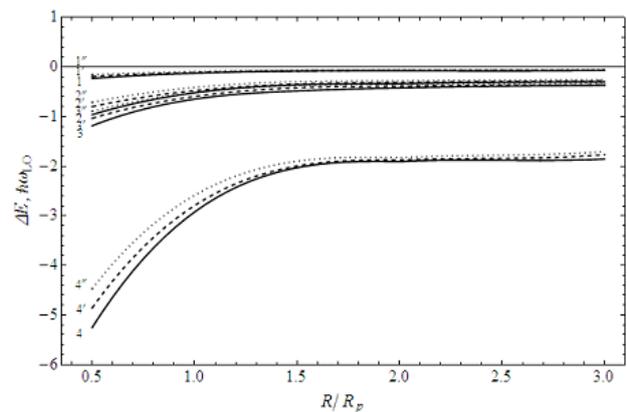


Рис. 3. Залежність енергії зв'язку полярона ΔE при врахуванні межових та обмежених фононів від радіуса квантової точки: 1, 1' – для КТ *GaAs*, 2, 2' – для КТ *CdTe*, 3, 3' – для КТ *CdSe*, 4, 4' – для кристалу *CuCl*, суцільні криві 1, 2, 3 – $\epsilon_d = 1$, малий штрих 1', 2', 3' – $\epsilon_d = 2.25$, великий штрих 1'', 2'', 3'' – $\epsilon_d = 6$.

Отже, у цій статті розглянуто вплив поляризаційних фононів на електронні стани сферичних квантових точок *GaAs*, *CdTe*, *CdSe*, *CuCl*, поміщених у неполярну матрицю. Враховано вплив обмежених та межових фононів, які характеризують таку систему. Метод, застосований у цій роботі, поєднує адиабатичний метод та метод проміжного зв'язку. Показано, що використаний нами метод підходить для широкого діапазону радіусів КТ та сили електрон-фононної взаємодії. Проведені нами обчислення показують, що обмежені фонони відіграють основну роль, а межові фонони дають лише невеликий вклад в енергію зв'язку електронного полярона.

Бібліографія

- [1] Melnikov D.V., Fowler W.B. Electron-phonon interaction in a spherical quantum dot with final potential barriers: The Frohlich Hamiltonian // *Phys. Rev. B.* – 2001. – 63. – P. 165302-1 - 65302-7.
- [2] Ren S.-F., Qin G. Microscopic interface phonon modes in structures of GaAs quantumdots embedded in AlAs shells // *Solid State Comm.* – 2002. – 121, № 4. – P. 171-175.
- [3] Devreese J. T., Fomin V.M., Gladilin V.N. Effects of Electron-Phonon Interaction in Semiconductor Quantum Dots in Handbook of Self-Assembled Semiconductor Nanostructures for Novel Devices in Photonics and Electronics. – Elsevier Ltd., 2008, – P. 346-370.
- [4] Kervan N., Altanhan T., Chatterjee A. A variational approach with squeezed-states for the polaronic effects in quantum dots // *Phys. Lett.* – 2003. – 315, № 3-4. – P. 280-287.
- [5] Prokofieva A.A., Goupalova S.V., Moskalenko A.S., Poddubnya A.N., Yassievich I.N. Carrier relaxation in Si/SiO₂ quantum dots // *Physica E.* – 2009. – 41, № 6. – P. 969-971.
- [6] Oshiro K., Matsuura M. Exciton-LO phonon interaction in a quantum dot // *Journal of Luminescence.* – 2000. – 87-89. – P. 451-453.
- [7] Cheche T.O., Chang M.C., Lin S.H. Electron-phonon interaction in absorption and photoluminescence spectra of quantum dots // *Chemical Phys.* – 2005. – 309, № 2-3. – P. 109-114.
- [8] Klein M. C., Hache F., Richard D., and Flytzanis C. Size dependence of electron-phonon coupling in semiconductor nanospheres: The case of CdSe // *Phys. Rev. B* – 1990. – 42. – P. 11123-11132.
- [9] Mahdouani M., Bourguiga R., Jaziri S. Polaronic states in Si nanocrystals embedded in SiO₂ matrix // *Physica E.* – 2008. – 41, № 2. – P. 228-234.
- [10] Pan J. S. and Pan. H. B. // *Phys. Status Solidi.* – 1988. – 148. – P. 129-132.
- [11] Marini J. S., Srebe B., and Katrheuser E. Exciton-phonon interaction in CdSe and CuCl polar semiconductor nanospheres // *Phys. Rev. B.* – 1994. – 50. – P. 14302-14308.
- [12] Klimin S. N., Pokatilov E. P., and Fomin V. M. Bulk and Interface Polarons in Quantum Wires and Dots // *Phys. Status Solidi B.* – 1994. – 184, № 2. – P. 373-383.
- [13] Oshiro K., Akai K., and Matsuura M. Polaron in a spherical quantum dot embedded in a nonpolar matrix // *Phys. Rev. B.* – 1998. – 58. – P. 7986-7993.
- [14] Cruz R. M., Teitsworth S.W., and Stroschia M. A. Bottleneck effects due to confined phonons in quantum dots // *Superlattices Microstruct.* – 1993. – 13, № 4. – P. 481-483.
- [15] Maslov A.Yu., Proshina O.V. Polarization of polaronic exciton optical emission in anisotropic quantum dots // *Fiz. i Tekhn. Poluprov.* – 1999. – 39, № 9. – P. 1111-1116 (in Russian).
- [16] Heitz R., Mukhametzhonov I. Phonon-assisted polar exciton transitions in self-organized InAs/GaAs quantum dots // *Physica E.* – 2000. – 7. – P. 398-402.
- [17] Escorcía R.A., Riva C., Mikhailov I.D. Polaronic exciton in quantum wells wires and nanotubes // *Solid State Comm.* – 2004. – 131, № 6. – P. 365-370.
- [18] Li W. S. and Chen C. Y. // *Physica B.* – 1997. – 229. – P. 375-379.
- [19] Maslov A. Yu., Proshina O. V., Rusina A. N. Interface phonon effect on optical spectra of quantum nanostructures // *Journal of Luminescence.* – 2009. – 129, № 12. – P. 1934-1936.
- [20] Mori N. and Ando T. Electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures // *Phys. Rev. B* – 1989. – 40. – P. 6175-6188.
- [21] Lee T. D., Low F., and Pines D. The motion of slow electrons in a polar crystal // *Phys. Rev. B.* – 1953. – 90, № 2. – P. 297-302.
- [22] Pollman J. and Buttner H. Effective Hamiltonians and bindings energies of Wannier excitons in polar semiconductors // *Phys. Rev. B.* – 1977
- [23] M. Matura and H. Buttner Optical properties of excitons in polar semiconductors: Energies, oscillator strength and phonon side bands // *Phys. Rev. B.* – 1980. – 21. – P. 679-682.
- [24] Callaway J., *Quantum Theory of the Solid State.* – New York: Academic Press, 1974, 656 p.
- [25] Senger R.T., Bajaj K.K. Optical properties of confined polaronic excitons in spherical ionic quantum dots // *Phys. Rev. B.* – 2003. – 48. – P. 045313-045317.
- [26] Ipatova I.P., Maslov A.Yu., Proshina O.V. Polaron states in a quantum dot with a degenerate spectrum // *Fiz. Tverd. Tela.* – 1999. – 33. – P. 832-839 (in Russian).
- [27] Zheng R. S., Ban S. L., and Liang X. X. Polaronic effect on the electron energy spectrum in a quantum well // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 1994. – 6, № 47. – P. 10307-10311.