

УДК 539.12-164 + 539.3

## Вплив деформації на електронні стани полярона в квантовій точці *InAs/GaAs*

Пелещак Р.М., Грушка В.І., Угрин Ю.О., Брижко В.С.

email: grushka\_vira@rambler.ru

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,  
кафедра загальної фізики

Розглянуто напружену наногетеросистему *InAs/GaAs* із сферичними квантовими точками *InAs*. Показано, що в даній системі існують деформаційні поля, які виникають на межі розподілу квантова точка-матриця, що призводять до підсилення поляронних ефектів порівняно з недеформованими матеріалами. Розраховано всебічну деформацію матеріалів КТ *InAs* сферичної симетрії та матриці *GaAs* і енергію зв'язку деформаційного електронного полярона в напруженій наногетеросистемі *InAs/GaAs*. Встановлено, що деформація матеріалів квантової точки і матриці призводить до збільшення енергії зв'язку електронного полярона.

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

### ВСТУП

В останні роки великий інтерес представляють дослідження квантово-розмірних структур, а, зокрема, квантових точок (КТ), в яких здійснюється просторове обмеження носіїв заряду у всіх трьох напрямках [1,2]. Такі структури мають потенційно дуже широке застосування в багатьох галузях науки і техніки. Дослідження та використання напружених наногетеросистем (*InAs/GaAs*; *CdTe/ZnTe*) з КТ (*InAs*; *CdTe*) є перспективним шляхом для створення новітніх приладів та матеріалів.

Деформація стиску матеріалів КТ (*InAs*; *CdTe*) приводить до збільшення ступеня локалізації заряджених квазічастинок і екситонів у цих КТ і до значного зростання взаємодії квазічастинок між собою та з повздовжніми оптичними фононами. Матеріали цих КТ володіють великим значенням деформаційного потенціалу, що приводить до збільшення поляронних ефектів порівняно з об'ємними матеріалами.

Для дослідження поляронних ефектів в наноструктурних матеріалах використовуються різні наближення: метод канонічних перетворень [3], фейманівський метод інтегрування за траєкторіями, та метод Буймистрова і Пекара. Зокрема, у роботі [4] 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.

У даній роботі розраховано енергію зв'язку електронного полярона з врахуванням деформації наногетеросистеми *InAs/GaAs* із напруженими КТ *InAs* сферичної симетрії.

### 1. ГЕОМЕТРИЧНА МОДЕЛЬ НАПРУЖЕНОЇ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМИ З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ

Розглянемо наногетеросистему *InAs/GaAs* із напруженими КТ *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 [5,6]. 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 наступне 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 розділу квантова точка – матриця за рахунок неузгодження параметрів ґраток

$$(f = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(2)}} \approx 7\%)$$

У роботі [4] було показано, що поляронні ефекти зростають зі зменшенням розміру квантової точки. Параметром підсилення  $\epsilon$  відношення радіуса поляронного стану  $a_0$  до радіуса квантової

точки,  $R_0$  тобто  $p_0 = a_0 / R_0 \gg 1$ . У випадку, коли матеріал квантової точки зазнає

деформації стиску ( $Sp\hat{\epsilon}^{(1)} < 0$ ) значення параметра підсилення  $p$  буде зростати, оскільки розмір квантової точки  $R_0$  буде зменшуватись із збільшенням деформації стиску матеріалу квантової точки за рахунок неузгодження параметрів ґраток, тому такі неузгодження приводять до підсилення поляронних ефектів порівняно з недеформованими матеріалами

$$p = \frac{a_0}{R_0(1 - |Sp\hat{\epsilon}^{(1)}|)} \quad (1)$$

де  $Sp\hat{\epsilon}^{(1)}$  – сума діагональних компонентів тензора деформації матеріалу квантової точки.

Компоненти тензора деформації знаходиться з умови механічної рівноваги [7]

$$\bar{\nabla} \text{div} \bar{u} = 0, \quad (2)$$

де  $\bar{u}(\bar{r})$  – зміщення атомів у матеріалі КТ, з такими граничними умовами:

$$\begin{cases} 4\pi R_0^2 \left( \left. u_r^{(2)} \right|_{r=R_0} - \left. u_r^{(1)} \right|_{r=R_0} \right) = \Delta V_s, \\ \left. \sigma_{rr}^{(1)} \right|_{r=R_0} = \left. \sigma_{rr}^{(2)} \right|_{r=R_0} - P_L, & P_L = \frac{2\alpha}{R_0} \\ \left. \sigma_{rr}^{(2)} \right|_{r=R_1} = -\sigma_{\sigma'}(N-1), \end{cases} \quad (3)$$

де  $R_0$  – радіус недеформованої квантової точки,  $R_1$  – радіус матриці,  $P_L$  – Лапласівський тиск,  $\Delta V = f 4\pi R_0^3$ ,

$f = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(2)}} \approx 7\%$  – параметр неузгодження постійних ґраток InAs, GaAs

$$\alpha = \frac{2 \int_0^{R_1} \rho^{(i)} (c^{(i)})^2 (\epsilon^{(i)})^2 (r) r^2 dr}{R_0 u_r^{(1)}(R_0)}$$

наноматеріалів,

[8] – міжфазна вільна енергія між матеріалом КТ InAs та матриці GaAs,  $c^{(i)}$  – поздовжня швидкість звуку в  $i$ -тому

середовищі,  $i = \begin{cases} 1 \equiv InAs \\ 2 \equiv GaAs \end{cases}$ ,  $\rho^{(i)}$  – густина  $i$ -того середовища.

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

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

де  $\nu_i$ ,  $E_i$  – коефіцієнт Пуассона і модуль Юнга матеріалу КТ та оточуючої матриці.

У випадку сферичних КТ розв'язок рівняння (2) має вигляд:

$$\begin{cases} u_r^{(1)} = C_1 r + \frac{C_2}{r^2}, & 0 \leq r \leq R_0 \\ u_r^{(2)} = C_3 r + \frac{C_4}{r^2}, & R_0 \leq r \leq R_1 \end{cases} \quad (5)$$

Оскільки в т.  $r = 0$  зміщення повинно бути скінченим, то в розв'язку (5) покладаємо  $C_2 = 0$ .

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

$$\begin{cases} \epsilon_{rr}^{(1)} = \epsilon_{\phi\phi}^{(1)} = \epsilon_{\theta\theta}^{(1)} = C_1, \\ \epsilon_{rr}^{(2)} = C_3 - \frac{2C_4}{r^3}, & \epsilon_{\phi\phi}^{(2)} = \epsilon_{\theta\theta}^{(2)} = C_3 + \frac{C_4}{r^3}, \end{cases} \quad (6)$$

Коефіцієнти  $C_1$ ,  $C_3$ ,  $C_4$  знаходяться з розв'язку системи (3) з врахуванням (4) – (6).

$$\text{Тоді } Sp\hat{\epsilon}^{(1)} = 3C_1. \quad (7)$$

Підставивши вираз (7) у (1) отримаємо параметр підсилення поляронних ефектів у деформованій КТ

$$p = \frac{a_0}{R_0(1 - |3C_1|)}. \quad (8)$$

## 2. ЕЛЕКТРОННИЙ ДЕФОРМАЦІЙНИЙ ПОЛЯРОН

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

$$\left[ \hat{H}_e + U_e + \sum_q \hbar \omega_q a_q^+ a_q + e \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\varepsilon\varepsilon_0}} \sum_q \frac{\sqrt{\omega_q}}{q} (a_q e^{iqr} + a_q^+ e^{-iqr}) \right] \psi_{ln}(\mathbf{r}) = E \psi_{ln}(\mathbf{r}) \quad (9)$$

де  $a_q, a_q^+$  – оператори знищення і народження фононів,  $\varepsilon$  – оптична діелектрична проникність,

$$U_e(r) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq R_0 \\ \Delta E_c(0) - \left| a_c^{(1)} \varepsilon^{(1)} \right| - \left| a_c^{(2)} \varepsilon^{(2)} \right|, & R_0 \leq r \leq R_1 \end{cases}$$

де  $\Delta E_c(0)$  – глибина потенціальної ями для електрона в ненапруженій квантовій точці,  $a_c^{(i)}$  – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності.

Оскільки параметр підсилення  $p \gg 1$ , то для знаходження енергії полярона використаємо адіабатичне наближення, при якому швидким є рух електрона в КТ, а повільним – поляронний рух. Усереднимо рівняння (9) за хвильовими функціями нульового наближення  $\psi_{0ln}^{(i)}(\vec{r})$ , які знаходимо з рівняння Шредінгера

$$\hat{H}_{0e}^{(i)} \psi_{0nl}^{(i)}(\mathbf{r}) = E_{nl}^{(0)} \psi_{0nl}^{(i)}(\mathbf{r}) \quad (10)$$

з гамільтоніаном

$$\hat{H}_{0e}^{(i)} = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m_e} \vec{\nabla} + U_e(r) \quad (11)$$

Розв'язок рівняння (10) у сферичній системі координат представимо у вигляді [7]

$$\psi_{0nl}^{(i)}(r, \theta, \phi) = R_{nl}^{(i)}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (12)$$

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

$$R_{nl}^{(i)}(r) = \frac{\chi_{nl}^{(i)}(r)}{r}$$

Радіальні функції виражаються через сферичні функції Бесселя:

$$\chi_{nl}^{(1)}(r) = A \cdot j_l(k_{1e}r) + B \cdot n_l(k_{1e}r), \quad 0 \leq r \leq R_0 \quad (13)$$

$$\chi_{nl}^{(2)}(r) = C \cdot h_l^{(1)}(ik_{2e}r) + D \cdot h_l^{(2)}(ik_{2e}r), \quad R_0 \leq r \leq R_1 \quad (14)$$

$$\text{де } k_{1e}^2 = \frac{2m_1}{\hbar^2} E_{nl}^{(e)},$$

$$k_{2e}^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2} \left( \Delta E_c(0) - \left| a_c^{(1)} \varepsilon^{(1)} \right| - \left| a_c^{(2)} \varepsilon^{(2)} \right| - E_{nl}^{(0)} \right).$$

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  $r \rightarrow R_1$ , а також з врахуванням нормування знаходимо

енергію основного стану електрона  $E_{ln}^{(0)}$  в сферичній КТ з трансцендентного рівняння:

$$\frac{m_2^{(e)}}{m_1^{(e)}} \left[ 1 - k_{1e} R_0 \cdot \text{ctg}(k_{1e} R_0) \right] = \frac{1 + k_{2e} R_0 + e^{2k_{2e}(R_0 - R_1)} \cdot (k_{2e} R_0 - 1)}{1 - e^{2k_{2e}(R_0 - R_1)}} \quad (15)$$

Таким чином, усереднене рівняння (9) за хвильовими функціями (12) прийме вигляд:

$$\hat{H}^{(ln)} = E_{ln}^{(0)} + \sum_q \hbar \omega_q a_q^+ a_q + e \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\varepsilon\varepsilon_0}} \sum_q \frac{\sqrt{\omega_q}}{q} (\rho_{ln}(q) a_q + \rho_{ln}^*(q) a_q^+), \quad (16)$$

де

$$\rho_{ln}(q) = \int e^{iqr} \psi_{0ln}^2(\mathbf{r}) d^3r, \quad (17)$$

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

Застосувавши унітарне перетворення

$$U_{ln} = \exp \left[ \sum_q \frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\varepsilon\varepsilon_0 \hbar \omega_q}} (\rho_{ln}(q) a_q^+ - \rho_{ln}^*(q) a_q) \right] \quad (18)$$

до рівняння (16) отримаєм

$$\hat{H}^{(ln)} = E_{ln} - \frac{2\pi e^2}{V\varepsilon\varepsilon_0} \sum_q \frac{|\rho_{ln}(q)|^2}{q} + \sum_q \hbar \omega_q a_q^+ a_q. \quad (19)$$

Пі доданок в правій частині рівняння (19) є енергією зв'язку деформаційного полярона  $\Delta E^{(ln)}$  на рівні  $(ln)$  у напруженій наногетеросистемі з КТ. Отже, підставивши у (19) величину  $\rho_{ln}(q)$  із (17) і перейшовши від сумування по  $q$  до інтегрування отримаєм:

$$\Delta E^{(ln)} = -\frac{e^2}{2\varepsilon\varepsilon_0} \int \frac{(\psi_{0ln}^{(i)}(\mathbf{r}))^2 (\psi_{0ln}^{(i)}(\mathbf{r}'))^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r d^3r', \quad (20)$$

де  $\psi_{0ln}^{(i)}(\mathbf{r}), \psi_{0ln}^{(i)}(\mathbf{r}')$  – хвильові функції (12) електрона у напруженій наногетеросистемі з деформованою КТ.

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки проведено для наногетеросистеми  $InAs/GaAs$  при таких значеннях параметрів:  $\Delta E_c = 830 \text{ meV}$ ,  $a_c^{(1)} = -5.08 \text{ eV}$ ,  $a_c^{(2)} = -7.17 \text{ eV}$ ,  $m_1 = 0.065 m_0$ ,  $m_2 = 0.057 m_0$  [9]. З використанням співвідношень (2)–(5) були розраховані компоненти тензора деформації і всебічна деформація наногетеросистеми  $InAs/GaAs$  із напруженими КТ  $InAs$  сферичної симетрії. Всебічна деформація матеріалу КТ  $InAs$  і оточуючої кристалічної матриці графічно представлена на рис. 1. Як бачимо, кристалічна ґратка матеріалу сферичної квантової точки зазнає всебічної дефор-

матриці стиску  $Sp\varepsilon^{(1)}$ , а матриці – всебічної деформації розтягу  $Sp\varepsilon^{(2)}$ . Якщо всебічна деформація стиску матеріалу сферичної КТ радіусом  $R_0=30 \text{ \AA}$  дорівнює  $Sp\varepsilon^{(1)} = -3.099 \cdot 10^{-2}$ , то масивна матриця ( $R_1=500 \text{ \AA}$ ) менш деформована: деформація всебічного розтягу матеріалу матриці дорівнює  $Sp\varepsilon^{(2)} = 4.735 \cdot 10^{-6}$ . Вплив поверхні КТ виявляється у збільшенні (на  $\sim 15\%$ ) всебічної деформації стиску матеріалу КТ та зменшенні (на  $\sim 12\%$ ) деформації всебічного розтягу матеріалу оточуючої матриці.

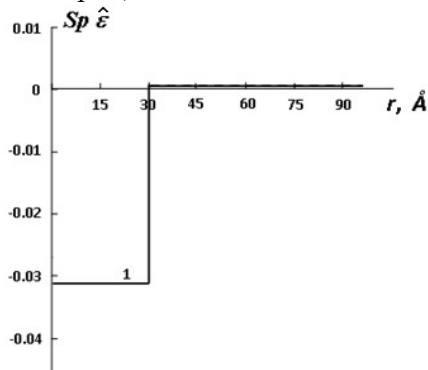


Рис. 1– Всебічна деформація матеріалів КТ InAs сферичної симетрії та матриці GaAs:

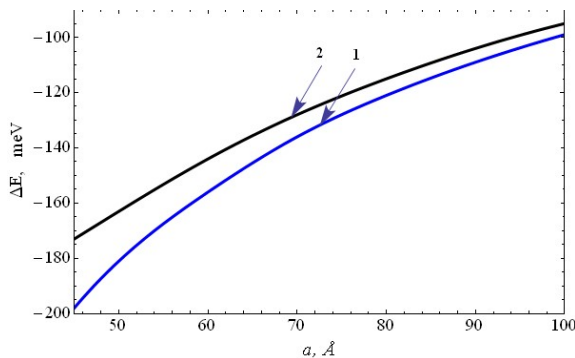


Рис. 2– Енергія зв'язку електронного полярона в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs, де 1– енергія зв'язку полярона у недеформованій, 2 – у деформованій КТ.

На рис.2 наведена залежність енергії зв'язку електронного полярона основного стану від радіуса КТ для недеформованої (рис.2, крива 1) і деформованої (рис.2, крива 2) наногетеросистеми. Із рис.2 бачимо, що енергія зв'язку електронного полярона в обох випадках (з деформацією і без деформації КТ в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs) зі зменшенням радіуса КТ збільшується за модулем. Зокрема, при  $R_0=45 \text{ \AA}$ , енергія зв'язку електронного полярона у недеформованій КТ становить  $-199 \text{ meV}$ , тоді як у деформованій КТ –  $-174 \text{ meV}$ . Таким чином, деформація матеріалів КТ і матриці призводить до збільшення енергії зв'язку

електронного полярона, при чому зі зменшенням радіуса КТ вплив деформації є більшим. Із збільшенням розмірів  $R_0$  КТ енергія зв'язку деформаційного електронного полярона асимптотично наближається до енергії зв'язку електронного полярона в не деформованій КТ, оскільки деформація матеріалу зменшується.

## ВИСНОВКИ

1. Встановлено, що напружена гетерогема між КТ-матрицею приводить до підсилення поляронних ефектів. Зокрема, для напруженої гетеросистеми InAs/GaAs з КТ InAs розміром  $45 \text{ \AA}$  параметр підсилення поляронних ефектів у КТ зростає на  $8,5\%$ .
2. Показано, що як і у випадку недеформованої КТ так і деформованої у напруженій гетеросистемі InAs/GaAs енергія зв'язку електронного полярона зі зменшенням розміру КТ монотонно збільшується. При чому, в КТ (InAs/GaAs) розміром  $45 \text{ \AA}$  деформація матеріалу КТ приводить до збільшення енергії зв'язку електронного полярона на  $25 \text{ meV}$ .
3. Встановлено, що деформація стиску матеріалу КТ (InAs), яка знаходиться в матриці (GaAs) призводить до збільшення енергії зв'язку електронного полярона, при чому зі зменшенням розміру КТ вплив деформації матеріалу КТ стає суттєвішим.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] М. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mykhaylova, R. Fartushynsky, Phys. Status Solidi B 225, 331 (2001).
- [2] M. Korkusinski, P. Hawrylak, Phys. Rev. B 63, 195311 (2001).
- [3] M. Krishna, S. Mukhopadhyay, A. Chatterjee, Phys. Lett. A 360, 655 (2007).
- [4] И. Ипатова, А. Маслов, О. Прошина, ФТП 33, No7, 832 (1999).
- [5] В.Г. Талалаев, Б.В. Новиков, ФТП 34, No4, 467 (2000).
- [6] Z.M. Wang, K. Holmes, Yu.I. Mazur, G.J. Salamo, Appl. Phys. Lett. 84, 1931 (2004).
- [7] Б.В. Новиков, Г.Г. Зегря, Р.М. Пелешак, О.О. Даньків, В.А. Гайсин, В.Г. Талалаев, И.В. Штром, Г.Э. Цырлин, ФТП 42, No 9, 1094 (2008).
- [8] Р.М. Пелешак, О.О. Даньків, О.В. Кузик, УФЖ 56, No4, 346(2011).
- [9] В.П. Евтихийев, О.В. Константинов, А.В. Матвеевцев, А.Е. Романов, ФТП 36, No1, 79 (2002).