Физика и техника полупроводников, 2015, том 49, вып. 10

# Поляронная масса носителей в полупроводниковых квантовых ямах

© А.Ю. Маслов¶, О.В. Прошина

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 2 февраля 2015 г. Принята к печати 17 марта 2015 г.)

Построена теория взаимодействия носителей заряда с оптическими фононами в квантовой яме с учетом возникновения интерфейсных оптических фононов. Выполнен детальный анализ зависимости эффективной массы полярона от размеров квантовой ямы и диэлектрических характеристик барьеров. Показано, что в узких квантовых ямах возможно возникновение квазидвумерного полярона. Однако параметры взаимодействия при этом определяются эффективной массой носителей в квантовой яме и частотами интерфейсных оптических фононов. Если барьеры изготовлены из неполярного материала, то эффективная масса полярона зависит от ширины квантовой ямы. При увеличении ширины квантовой ямы возникает новый механизм усиления электрон-фононного взаимодействия. Он реализуется в случае совпадения энергии оптического фонона с энергией одного из электронных переходов. Это приводит к немонотонной зависимости эффективной массы полярона от ширины квантовой ямы.

Взаимодействие заряженных частиц с оптическими фононами в наноструктурах оказывается значительно более сложным, чем в объемных материалах. Это связано как с квантованием электронного спектра, так и с появлением новых фононных ветвей, в частности интерфейсных оптических фононов. Теория электрон-фононного взаимодействия в квантовых ямах в режиме сильной связи была рассмотрена в работе [1]. В реальных полупроводниковых структурах, как правило, взаимодействие заряженных частиц с оптическими фононами соответствует режимам слабой или промежуточной связи. При этом даже в случае слабого взаимодействия его нельзя описать одной константой связи. Интенсивность электрон-фононного взаимодействия существенно зависит не только от параметров квантовой ямы, но и от диэлектрических свойств барьеров. В настоящей работе проведено детальное теоретическое исследование электрон-фононного взаимодействия в квантовой яме в режиме слабой или промежуточной связи. Принималось во внимание взаимодействие заряженных частиц как с локализованными в квантовой яме объемными фононами, так и с интерфейсными оптическими фононами. Найдены условия, при которых применима модель квазидвумерного полярона. Показано, что при этом возникает новая константа взаимодействия, определяемая эффективной массой носителя в квантовой яме и фононным спектром материала барьеров. Установлено, что, если энергия электронного перехода близка к энергии оптического фонона, следует ожидать усиления электрон-фононного взаимодействия. Такой механизм усиления можно назвать „резонансным“. Построена теория усиления электрон-фононного взаимодействия в квантовых ямах при выполнении „резонансных“ условий. Показано, что это приводит к немонотонной зависимости эффективной массы носителей от ширины квантовой ямы.

Гамильтониан электрона в квантовой яме с учетом сильного электрон-фононного взаимодействия запишем в стандартном виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{e-ph}, \tag{1}$$

где $\hat{H}_e$ — гамильтониан электрона без учета его взаимодействия с фононами. Оператор Гамильтона для оптических фононов $\hat{H}_{ph}$ удобно записать через операторы рождения и уничтожения фононов, $a^+_{\mathbf{q}}$ и $a_{\mathbf{q}}$. При этом следует учесть фононы, локализованные в квантовой яме, и интерфейсные фононы:

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_0 a^+_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{s} \hbar\omega^{(s)}(\mathbf{q}) a^{(s)+}_{\mathbf{q}} a^{(s)}_{\mathbf{q}}. \tag{2}$$

В выражении (2) учтены как симметричные, так и антисимметричные моды интерфейсных фононов $\omega^{(s)}(\mathbf{q})$. Как будет показано далее, симметричные моды играют основную роль при описании электрон-фононного взаимодействия вдали от резонанса. При выполнении резонансных условий существенно возрастает роль антисимметричных мод.

Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия $\hat{H}_{e-ph}$, который учитывает взаимодействие электрона как с объемными, так и с интерфейсными фононами, для симметричной квантовой ямы найден в работе [2]. Его можно представить в следующем виде:

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{\mathbf{q}} \alpha^{(s)}_S(\mathbf{q}, z)\left[a^{(s)}_{S,\pm}(\mathbf{q}) + a^{(s)+}_{S,\pm}(\mathbf{q})\right] + \sum_{\mathbf{q}} \alpha^{(s)}_A(\mathbf{q}, z)\left[a^{(s)}_{A,\pm}(\mathbf{q}) + a^{(s)+}_{A,\pm}(\mathbf{q})\right] + \sum_{\mathbf{q},k} \alpha_k(\mathbf{q}, z)\left[a_k(\mathbf{q}) + a^+_k(\mathbf{q})\right], \tag{3}$$

где $\alpha^{(s)}_{S,A}(\mathbf{q}, z)$, $\alpha_k(\mathbf{q}, z)$ — коэффициенты взаимодействия, приведенные в работе [2]. Первая и вторая суммы в выражении (3) представляют собой взаимодействие соответственно с симметричными и антисимметричными

¶ E-mail: maslov.ton@mail.ioffe.ru

модами интерфейсных фононов, третья — с локализованными фононами квантовой ямы с номером ветви $k$. В нулевом порядке по электрон-фононному взаимодействию переменные в уравнении Шредингера разделяются, и полную волновую функцию можно представить в виде произведения фононной и электронной волновых функций:

$$\Psi = \Phi_{ph}\{n_{\mathbf{q}}\}\psi_{el}(\boldsymbol{\rho}, z). \quad (4)$$

Фононную волновую функцию в выражении (4) удобно записать в зависимости от чисел заполнения различных фононных мод $n_{\mathbf{q}}$. Электронная волновая функция также разбивается на произведение двух функций, одна из которых описывает локализацию в квантовой яме, а другая — свободное движение в плоскости ямы:

$$\psi_{el}(\boldsymbol{\rho}, z) = \varphi_n(z)\exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}). \quad (5)$$

Мы предполагаем, что без учета электрон-фононного взаимодействия в квантовой яме электроны подчиняются параболическому закону дисперсии:

$$E_m(\mathbf{p}) = E_m(0) + \frac{p^2}{2m^{(w)}}. \quad (6)$$

Здесь и далее мы будем обозначать характеристики электронного и фононного спектров, соответствующие материалу квантовой ямы, индексом $(w)$, а аналогичные характеристики материала барьеров индексом $(b)$. Распределение фононов, описываемое фононной функцией $\Phi_{ph}\{n_{\mathbf{q}}\}$, в дальнейшем будет считаться равновесным. Учет электрон-фононного взаимодействия приводит к появлению поправок 2-го порядка к энергии электронных состояний.

В объемных кристаллах при слабом электрон-фононном взаимодействии происходят смещение положения уровня основного электронного состояния и увеличение эффективной массы электрона [3]. Проведенные нами вычисления показали, что аналогичные эффекты возникают и в квантовой яме, причем они обусловлены главным образом взаимодействием носителей заряда с интерфейсными оптическими фононами. Смещение положения уровней соответствует перенормировке ширины запрещенной зоны. При слабом электрон-фононном взаимодействии этот эффект достаточно мал. Поэтому в дальнейшем основное внимание мы уделим влиянию поляронных эффектов на изменение эффективной массы носителей. Изменение эффективной массы электрона при этом зависит от диэлектрических свойств как материала квантовой ямы, так и материала барьеров. Квазидвумерный аналог известных результатов для объемных материалов [3] получается в случае достаточно узких квантовых ям, для которых энергия размерного квантования $\Delta E_m$ больше энергий оптических фононов $\hbar\omega^{(w)}(\mathbf{q})$, локализованных в квантовой яме, и интерфейсных оптических фононов $\hbar\omega^{(s)}(\mathbf{q})$. Ведущий вклад в поправку к энергии основного состояния электрона по параметру $\Delta E_m/\hbar\omega^{(w)}(\mathbf{q})$ имеет вид

$$\Delta E_m = \frac{\pi}{2}\,\alpha_{\text{eff}}\hbar\omega^{(b)} + \frac{p^2}{2m^*}. \quad (7)$$

Входящая в формулу (7) частота есть $\omega^{(b)} = \omega^{(s)}(0)$, а поляронная масса оказывается равной

$$m^* = \frac{m^{(w)}}{1 - \pi\alpha_{\text{eff}}/8}. \quad (8)$$

Формулы (7) и (8) похожи на известные результаты из теории двумерного полярона [4]. Однако эффективная константа взаимодействия оказывается равной

$$\alpha_{\text{eff}} = \frac{e^2}{2\hbar\omega^{(b)}}\left(\frac{2m^{(w)}\omega^{(b)}}{\hbar}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty^{(b)}} - \frac{1}{\varepsilon_0^{(b)}}\right). \quad (9)$$

Из выражения (9) видно, что так же, как и в случае полярона сильной связи [1], эффективная константа электрон-фононного взаимодействия определяется эффективной массой электрона внутри квантовой ямы и диэлектрическими свойствами барьеров. Эта величина аналогична постоянной Фрелиха. Однако она не является характеристикой какого-то конкретного материала, а определяется свойствами рассматриваемой квантовой ямы. В конкретном приближении при выполнении условия $q \ll 1/L$, где $L$ — ширина квантовой ямы, взаимодействие заряженных частиц с полярными оптическими фононами определяется спектром интерфейсных фононов. При этом частоты интерфейсных фононов в том же приближении близки к частотам оптических фононов барьеров и могут заметно отличаться от частот оптических фононов материала квантовой ямы. Это может объяснить полученное в работе [5] расхождение между экспериментальными и теоретическими значениями эффективной массы полярона, полученными для квантовой ямы ZnO$-$ZnMgO. При оценке эффективной массы авторы [5] использовали постоянную Фрелиха для ZnO вместо эффективной постоянной $\alpha_{\text{eff}}$ из формулы (9). Использование эффективной константы из формулы (9) существенно улучшает согласие теории с экспериментальными данными.

Влияние локализованных в квантовой яме оптических фононов на эффективную массу носителей реализуется в квантовых ямах с барьерами из неполярных и слабо полярных материалов. В этом случае поправки к энергии полярона получаются при учете взаимодействия со всеми модами локализованных в квантовой яме фононов. В пределе малых импульсов для нижнего уровня размерного квантования $(m = 1)$ они имеют вид

$$\Delta E = \Delta E_1 + \frac{p^2}{2m_{\text{eff}}}, \quad (10)$$

где

$$\Delta E_1 = -\alpha^{(w)}\hbar\omega^{(w)}C_1\sqrt{\frac{m\omega^{(w)}L^2}{\hbar}}\left[\ln\frac{\hbar}{mL^2\omega^{(w)}} + C_2\right], \quad (11)$$

$$m_{\text{eff}} = \frac{m^{(w)}}{1 - C_3\alpha^{(w)}\sqrt{m\omega^{(w)}L^2/\hbar}}. \quad (12)$$

В формулах (11) и (12) $\alpha^{(w)}$ — это константа Фрелиха для материала квантовой ямы, а коэффициенты $C_1$, $C_2$, $C_3$ определяются конкретной формой квантовой ямы. В приближении прямоугольной ямы с бесконечно высокими барьерами эти коэффициенты оказываются равными:

$$C_1 = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{2k+1}\left(\frac{2}{2k+1}+\frac{1}{2k-1}+\frac{1}{2k+3}\right)^2 = 0.205, \tag{13}$$

$$C_2 = -\ln\frac{2}{\pi^2} - \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{2k+1} \times \left(\frac{2}{2k+1}+\frac{1}{2k-1}+\frac{1}{2k+3}\right)^2 \ln\frac{1}{(2k+1)^2} = 2.108, \tag{14}$$

$$C_3 = \frac{4\sqrt{2}}{\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k+1)^2} \times \left(\frac{2}{2k+1}+\frac{1}{2k-1}+\frac{1}{2k+3}\right)^2 = 0.247. \tag{15}$$

Из формул (11), (12) видно, что для достаточно узких квантовых ям энергетический сдвиг электронного уровня и изменение эффективной массы в данном случае оказываются меньше, чем для объемного кристалла, по параметру

$$\frac{m^{(w)}\omega^{(w)}L^2}{\hbar} \ll 1. \tag{16}$$

Это связано с подавлением электрон-фононного взаимодействия в квантовой яме за счет влияния неполярного барьера. Аналогичное подавление электрон-фононного взаимодействия реализуется в случае сильного электрон-фононного взаимодействия [1]. При увеличении ширины квантовой ямы, когда параметр (16) становится порядка единицы, приближение, использованное для получения формул (10)−(12), становится неприменимым. Для точного вычисления влияния электрон-фононного взаимодействия на эффективную массу при этом оказывается необходимым учитывать в формуле (7) переходы со всеми возможными изменениями номера уровня размерного квантования электрона. В этом случае возможно численное решение задачи для конкретной квантовой ямы.

Усиления поляронных эффектов следует ожидать при совпадении энергии одного из оптических фононов с расстоянием между уровнями размерного квантования электрона в яме. Для основного состояния усиление пропорционально концентрации равновесных оптических фононов. Поэтому такой механизм усиления возможен только при конечной температуре. Для возбужденных состояний электрона такое усиление возможно даже при нулевой температуре при учете процессов с испусканием фононов. Усиление взаимодействия зависит от четности тех электронных уровней, для которых реализуется условие резонанса. Наибольшая величина эффекта возникает в том случае, когда электронный переход происходит с изменением четности состояния. Для переходов между уровнями одинаковой четности влияние резонанса оказывается существенно меньшим.

Рассмотрим более подробно случай, когда энергия между первым и вторым уровнями размерного квантования близка к энергии оптического фонона:

$$\Delta \equiv E_2(0) - E_1(0) - \hbar\omega^{(w)}(\mathbf{q}) \ll \hbar\omega_0^{(w)},\ \hbar\omega^{(s)}(\mathbf{q}). \tag{17}$$

Строго говоря, совпадение энергии электронного перехода с энергией оптического фонона реализуется в любой квантовой яме при определенных значениях квазиимпульса электрона $\mathbf{p}$. Однако наибольший эффект следует ожидать для тех квантовых ям, в которых резонансные условия возникают при малых значениях $\mathbf{p}$, таких, что $pL/\hbar \ll 1$. В этом случае условие (17) неявным образом определяет ширину квантовой ямы, в которой следует ожидать усиления электрон-фононного взаимодействия. Будем считать, что энергии оптических фононов для материалов квантовой ямы и барьеров различаются достаточно сильно и выполнение резонансного условия (17) для них можно рассматривать независимо. В случае резонанса электронного перехода с энергией локализованных в квантовой яме фононов $\hbar\omega_0^{(w)}$ получим поляронную массу в виде

$$m_{\text{eff}}^{(\text{res})} = \frac{m^{(w)}}{1 - C_4\alpha^{(w)}\left[\hbar\omega^{(w)}/\Delta\right]\sqrt{\omega^{(w)}m^{(w)}/\hbar L^2}\, n_k(T)}, \tag{18}$$

где численный множитель $C_4$ в приближении ямы с бесконечными барьерами оказывается равным

$$C_4 = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left[\frac{32}{9} + \frac{1}{\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^2}\left(\frac{3}{4k^2-9}+\frac{1}{4k^2-1}\right)^2\right] = 0.135. \tag{19}$$

Отметим, что в данном случае частота интерфейсного фонона для антисимметричной моды близка к частоте локализованных фононов. При этом параметры электрон-фононного взаимодействия для этих ветвей оказываются одного порядка. Это приводит к тому, что множитель $C_4$ из (19) содержит сумму вкладов от всех фононных ветвей, для которых выполнены резонансные условия. При выполнении условия

$$1 < \frac{\hbar\omega^{(w)}}{\Delta}\sqrt{\frac{\omega m^{(w)}}{\hbar a^2}} < \frac{1}{\alpha^{(w)}} \tag{20}$$

изменение эффективной массы из формулы (18) становится больше, чем изменение, вычисленное по формуле (12). В этом и проявляется эффект резонансного усиления взаимодействия. Формула (18) становится неприменимой при нарушении правого неравенства в (20), т.е. при наступлении точного резонанса. Для описания электронных состояний в квантовой яме в этом случае следует использовать теорию возмущений для вырожденных по энергии состояний. Это приводит к стандартному эффекту расталкивания электронных уровней. Описание спектра носителей с использованием только приближения эффективной массы становится некорректным.

Резонансное усиление поляронных эффектов иного типа возникает при выполнении условия (17) для фононов материала барьеров. Отметим, что частота антисимметричного интерфейсного фонона близка к частоте ТО-фонона барьера. Именно за счет взаимодействия с такими возбуждениями и возникает резонансное усиление. В интервале значений $\Delta$, определяемом неравенствами

$$1 < \frac{\hbar\omega^{(s)}}{\Delta} < \frac{1}{\alpha_{\rm eff}^2}, \tag{21}$$

можно определить поляронную массу носителей, которая оказывается равной

$$m_{\rm eff}^{(\rm res)} = m^{(w)} \Big/ \left[1 - C_5\alpha_{\rm eff} f\left(\omega^{(b)}, \omega^{(w)}\right) \times \frac{m^{(w)}L^2\omega^{(s)}}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar\omega^{(s)}}{\Delta}}\, n_k(T)\right], \tag{22}$$

где $C_5$ — численный коэффициент, определяемый формой ямы. Для ямы с бесконечными барьерами он равен $C_5 = 8\sqrt{2}/9\pi^2$. Безразмерный множитель $f\left(\omega^{(b)}, \omega^{(w)}\right)$ определяется выражением

$$f(\omega^{(b)}, \omega^{(w)}) = \left[\frac{\varepsilon_\infty^{(w)}\omega_{\rm LO}^{(b)}}{\varepsilon_\infty^{(b)}\omega_{\rm TO}^{(b)}}\right]^2 \frac{\left(\omega_{\rm TO}^{(b)}\right)^2 - \left(\omega_{\rm LO}^{(w)}\right)^2}{\left(\omega_{\rm TO}^{(b)}\right)^2 - \left(\omega_{(\rm TO)}^{(w)}\right)^2}. \tag{23}$$

Из выражений (18) и (22) видно, что резонансное усиление поляронных эффектов наиболее сильно может проявиться в квантовых ямах со слабым электрон-фононным взаимодействием. Именно в таких структурах условия для возможного увеличения массы носителей, определяемые неравенствами (20) и (21), реализуются в некотором интервале значений ширины квантовой ямы. По мере возрастания интенсивности электрон-фононного взаимодействия эти интервалы сужаются, а сам эффект возможного усиления убывает. Поэтому проявления резонансного усиления электрон-фононного взаимодействия следует ожидать в квантовых ямах на основе соединений $\rm A^{III}B^{V}$, ширина которых определяется соотношением (17). Для квантовых ям на основе $\rm A^{II}B^{VI}$ роль резонансного усиления взаимодействия оказывается менее существенной.

Условие (17) определяет интервал значений ширины квантовой ямы, для которого происходит значительное увеличение поляронной массы. Вне этого интервала поляронная масса определяется выражениями (8) или (12). При этом в структурах с неполярными барьерами, для описания которых применима формула (12), происходит монотонное увеличение поляронной массы при возрастании ширины квантовой ямы. Возникновение немонотонной зависимости эффективной массы от ширины ямы связано с выполнением резонансного условия (17) для любой пары уровней размерного квантования с различной четностью.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта НШ-5062.2014.2.

## Список литературы

[1] А.Ю. Маслов, О.В. Прошина. ФТП, **44** (2), 200 (2010).
[2] M. Mori, T. Ando. Phys. Rev. B, **40**, 6175 (1989).
[3] О. Маделунг. *Теория твердого тела* (М., Наука, 1980). [Пер. с англ.: O. Madelung. *Introduction to Solid-State Theory* (Stuttgart, 1978)].
[4] Wu Hiaoguang, F.M. Peeters, J.T. Devreese. Phys. Rev. B, **31**, 3420 (1985).
[5] Y. Imanaka, T. Takamasu, H. Tampo, H. Shibata, S. Niki. Phys. Status Solidi C, **7**, 1599 (2010).

*Редактор Л.В. Шаронова*

## Polaron mass of carriers in semiconductor quantum wells

*A.Yu. Maslov, O.V. Proshina*

Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The theory of charge carrier interaction with optical phonons in a quantum well is developed taking into account the emergence of interface optical phonons. The detailed analysis of polaron effective mass dependence on the quantum well size and barrier dielectric characteristics is performed. It is shown that a quasi-two-dimensional polaron may occur in narrow quantum wells. However, the interaction parameters are determined by the effective mass of carriers in quantum well and interface optical phonon frequencies. When the barriers are made of a non-polar material, the polaron effective mass depends on the quantum well width. New mechanism of the electron-phonon interaction enhancement is realized with an increase of the quantum well width. It is being implemented in the case of coincidence of the optical phonon energy with the energy of one of the electronic transitions. This results in a nonmonotonic dependence of the polaron effective mass on the quantum well width.