

ПОЛЯРОННІ СТАНИ ЕЛЕКТРОНА У ПОДВІЙНІЙ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРІ КРИСТАЛІВ ГЕКСАГОНАЛЬНОЇ СИМЕТРІЇ (НА ПРИКЛАДІ AlN/GaN/AlN)

В. І. Бойчук, В. А. Борусевич, І. В. Білинський

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка
кафедра теоретичної фізики, вул. Івана Франка, 24, Дрогобич, UA-82100, Україна
(Отримано 24 грудня 2007 р.; в остаточному вигляді — 21 лютого 2008 р.)*

У роботі теоретично досліджено закон дисперсії поляронів у кристалі GaN та в подвійній наногетероструктурі AlN/GaN/Al. Ураховано всі типи поляризаційних коливань, із якими взаємодіє електрон. Проведено обчислення в межах моделі скінченного та нескінченного розриву зон. Показано, що зі збільшенням товщини наноплівки внесок міжповерхневих фононів в енергію полярона зменшується, а обмежених фононів збільшується. Подано результати обчислень закону дисперсії полярона в області $k < k_f$ при різних напрямках хвильового вектора полярона щодо C -осі кристала. Обчислено середню швидкість та ефективну масу полярона. Показано, що зі зменшенням розмірності системи виникає ефективне підсилення електрон-фононної взаємодії.

Ключові слова: квантова точка, полярон, теорія збурень, наногетероструктура, варіаційний метод.

PACS number(s): 63.20.Kr, 79.60.Jv

I. ВСТУП

Останніми роками інтерес до квантових гетероструктур, що утворені нітридами третьої групи таблиці Менделєєва (GaN, AlN, InN), значно зріс у зв'язку з потенціальними можливостями їх застосування в оптоелектроніці [1–5].

Зокрема досягнення технології вирощування структур із квантовими ямами на основі кристалів гексагональної симетрії дали змогу створити фотодетектори та лазери, робота яких ґрунтується на міжпідзонних переходах. Електрон-фононна взаємодія в таких процесах відіграє важливу роль.

Крім того, вони є також цікавими з чисто фізичного погляду. Це пов'язано з тим, що кристали симетрії вюрциту мають нижчу симетрію, ніж кристали цинкової обманки, які вивчені набагато краще. Між кристалами обох типів симетрії виникає різниця не лише у спектрі електронів та дірок, але й у фононному спектрі та у взаємодії фононів із квазічастинками [6–8].

За останнє десятиріччя опубліковано низку теоретичних та експериментальних праць, що присвячені дослідженню поляризаційних й акустичних фононів, а також електрон-фононної взаємодії у гетероструктурах на основі напівпровідників типу вюрциту [8–13]. У більшості робіт із використанням моделі діелектричного континууму та одновісної моделі Лоудона для кристала досить докладно вивчено фононні спектри в гетеросистемах з однією квантовою ямою [6–9], а також дисперсію фононів у надґраткових структурах [12,13]. Одержано дисперсійні рівняння для всіх типів поляризаційних фононів, побудовано й проаналізовано графіки дисперсійних залежностей цих фононів. Наведено загальні формули гамільтоніана електрона, що взаємодіє з різними фононними гілками.

Однак поляронні стани в гетеросистемах із квантовими ямами на основі кристалів типу вюрциту мало вивчені [14–15]. В основному роботи присвячені вивченню поляронних станів масивних кристалів.

Метою роботи є теоретичне дослідження закону дисперсії поляронів у кристалі GaN та в подвійній наногетероструктурі AlN/GaN/AlN.

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ. ЗАГАЛЬНІ ФОРМУЛИ

Розглянемо масивний ідеальний кристал типу вюрциту, тобто з елементарною коміркою у вигляді шестигранної призми. Нітриди третьої групи таблиці елементів належать до групи симетрії C_{6v}^4 . Вони утворені двома взаємно проникними гексагонально упакованими підґратками, які зсунуті вздовж C -осі (осі OZ системи координат) на $5/8$ сталого ґратки у цьому напрямку. Примітивна комірка містить чотири атоми. Тому існує дев'ять оптичних та три акустичні фононні гілки. Але лише дві області оптичних фононів є активними в інфрачервоній ділянці спектра та під час комбінаційного розсіяння. Вони відповідають незвідним представленням A_1 та E_1 групи хвильового вектора в точці Γ зони Брілюєна. A_1 та E_1 моди розщеплюються на LO і TO компоненти.

Внаслідок оптичної анізотропії таких кристалів довгохвильові оптичні коливання можна класифікувати відповідно до орієнтації C -осі, хвильового вектора фононів \mathbf{Q} , електричного поля \mathbf{E} і поляризації \mathbf{P} . Ця класифікація зводиться до поділу коливань на дві групи: звичайних (ordinary) і незвичайних (extraordinary) оптичних фононів. Звичайні фонони з E_1 -симетрією завжди поперечні (обидва \mathbf{E} і \mathbf{P} є перпендикулярними до \mathbf{Q} і C -осі одночасно) і поляризовані

в площині, що перпендикулярна до вектора \mathbf{Q} . Частота звичайних фононів не залежить від кута θ між вектором \mathbf{Q} та C -віссю. Незвичайні фонони пов'язані з z - та \perp -поляризованими коливаннями. Поляризована у напрямку осі OZ мода має A_1 -симетрію, а \perp -поляризована має E_1 -симетрію. Коли кут θ дорівнює нулеві, одне коливання є A_1 (LO)-фононом, а інше — E_1 (TO)-фононом. Якщо θ змінюється від 0 до $\pi/2$, то ці моди поступово стають A_1 (TO) і E_1 (LO)-фононами без визначеної властивості LO - чи TO -характеру і A_1 - чи E_1 -симетрії. Отже, для $\theta \neq 0$ і $\theta \neq \pi/2$ незвичайні коливання є комбінацією LO і TO мод.

Закон дисперсії незвичайних фононів масивного кристала у довгохвильовій області має вигляд:

$$\varepsilon_{\perp}(\omega) q_{\perp}^2 + \varepsilon_z(\omega) Q_z^2 = 0, \quad (1)$$

де $\varepsilon_{\perp}(\omega) = \varepsilon_{\perp}^{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{\perp L}^2}{\omega^2 - \omega_{\perp T}^2}$, $\varepsilon_z(\omega) = \varepsilon_z^{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{z L}^2}{\omega^2 - \omega_{z T}^2}$, $\varepsilon_{\perp}^{\infty}$, ε_z^{∞} — височастотні діелектричні проникності, $\omega_{\perp L}$ і $\omega_{z L}$ — довгохвильові E_1 (LO)- і A_1 (LO)-фононні частоти, $\omega_{\perp T}$ і $\omega_{z T}$ — поперечні E_1 (TO) і A_1 (TO)-фонони для $\mathbf{Q} = 0$.

Для дослідження поляронних станів гетероструктури розглянемо гамільтоніан системи фононів, які

взаємодіють з електроном:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{int}. \quad (2)$$

У наближенні ефективної маси \hat{H}_e для одновісного кристала має вигляд:

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \nabla_{\rho}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V, \quad \nabla_{\rho}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad (3)$$

де m_{\perp} і m_{\parallel} — ефективні маси електрона в перпендикулярному і паралельному до C -осі напрямку, V — потенціальна енергія електрона. Для об'ємного кристала $V = 0$.

Оператор енергії фононів у представленні чисел заповнення є таким:

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\mathbf{Q}, \nu} \hbar \omega_{\nu}(\mathbf{q}) \left(b_{\mathbf{Q}, \nu}^{\dagger} b_{\mathbf{Q}, \nu} + 1/2 \right), \quad (4)$$

де $b_{\mathbf{Q}, \nu}^{\dagger}$ — оператор народження фонона з хвильовим вектором \mathbf{Q} фононної гілки ν .

Частоту поляризаційних фононів ω знаходимо з дисперсійного рівняння (1). Для розглянутих вищевказаних виборів виконуються умови [7]:

$$|\omega_{\perp, L} - \omega_{z, L}|, |\omega_{\perp, T} - \omega_{z, T}| \ll |\omega_{\perp, L} - \omega_{\perp, T}|, |\omega_{z, L} - \omega_{z, T}|. \quad (5)$$

Якщо врахувати, що $q = Q \cdot \sin(\theta)$, а $Q_z = Q \cdot \cos(\theta)$, то з рівняння (1) при умовах (5) можна одержати два розв'язки для ω :

$$\omega_{\perp}^2 = \omega_{z, L}^2 \cos^2 \theta + \omega_{\perp, L}^2 \sin^2 \theta, \quad (6)$$

$$\omega_{\perp}^2 = \omega_{z, T}^2 \sin^2 \theta + \omega_{\perp, T}^2 \cos^2 \theta. \quad (7)$$

Перший розв'язок назвемо частотою переважно поздовжніх мод, а другий — частотою переважно поперечних мод. Оператор взаємодії електрона з фононами для масивного кристала можна записати формулою [6, 7]:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{\mathbf{Q}} V^{(1)}(\mathbf{Q}) \cdot V^{(2)}(\mathbf{Q}, z) e^{i\mathbf{q}\rho} \left(b_{\mathbf{Q}} + b_{-\mathbf{Q}}^{\dagger} \right), \quad (8)$$

де

$$V^{(1)} = \frac{C}{\sqrt{S\tilde{L}}} \frac{1}{Q} \left[\frac{\partial}{\partial \omega} \left(\varepsilon_{\perp}(\omega) \sin^2 \theta + \varepsilon_z(\omega) \cos^2 \theta \right) \right]^{-1},$$

$$V^{(2)}(\mathbf{Q}, z) = e^{iQ_z z},$$

$$C = (4\pi\hbar e^2)^{1/2}, \quad Q^2 = q^2 + Q_z^2,$$

$S\tilde{L}$ — об'єм кристала, похідну за частотою беремо в точці $\omega = \omega_l$.

Неважко переконатися, що у випадку

$$\omega_{\perp, L} = \omega_{z, L}, \quad \omega_{\perp, T} = \omega_{z, T}, \quad (9)$$

$$\varepsilon_{\perp}^{\infty} = \varepsilon_z^{\infty} \quad (10)$$

рівняння (6)–(8) переходять у відомі формули для кристала кубічної симетрії [16, 17].

Для гетероструктури гексагональної симетрії, у якій два напівобмежені кристали межують із наноплівкою (подвійна наногетеросистема), існують чотири різні типи оптичних фононних мод. Ці моди називають, як і для гетеросистем кристалів цинкової обманки, міжповерхневими (interface), обмеженими (confined), напівобмеженими (semiconfined). Крім того, взагалі кажучи, може існувати в системі новий (порівняно з гетероструктурою кристалів кубічної симетрії) тип фононів — фонони, що поширюються в середовищі (propagating phonons). Як і у випадку гетеросистем для кристалів кубічної симетрії, оператор взаємодії електрона з різними модами можна представити як суму симетричної та антисиметричної частини, тобто з усіх названих типів існують ще симетричні та антисиметричні фонони.

У загальному випадку оператор електрон-фононої взаємодії є сумою восьми доданків, кожен із яких має вигляд:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\rho} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}), \quad (11)$$

де \mathbf{q} – хвильовий вектор фонона: $\mathbf{q} (q_x, q_y)$.

Різниця між тим, з якими фононами взаємодіє електрон, визначається функцією $V(\mathbf{q})$. Для міжповерхневих симетричних чи антисиметричних фононів $V(\mathbf{q})$ можна записати формулою:

$$\begin{aligned} V_{IF} \begin{Bmatrix} S \\ A \end{Bmatrix}(\mathbf{q}) &= V_{IF}^{(1)}(\mathbf{q}) \cdot V_{IF}^{(2)}(\mathbf{q}, z) \\ &= \frac{C}{\sqrt{S}} \left[2q \left| \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\varepsilon_{c1} \begin{Bmatrix} \text{th} \left(\varepsilon_{b1} \frac{qL}{2} \right) \\ \text{cth} \left(\varepsilon_{b1} \frac{qL}{2} \right) \end{Bmatrix} - \varepsilon_{c2} \right) \right| \right]^{-1/2} \\ &\times \begin{cases} \begin{Bmatrix} \text{ch}(\varepsilon_{b1} qz) / \text{ch} \left(\varepsilon_{b1} \frac{qL}{2} \right) \\ \text{sh}(\varepsilon_{b1} qz) / \text{sh} \left(\varepsilon_{b1} \frac{qL}{2} \right) \end{Bmatrix}, & |z| \leq \frac{L}{2} \\ \begin{Bmatrix} 1 \\ \text{sgn}(z) \end{Bmatrix} \exp[-\varepsilon_{b2} q (|z| - \frac{L}{2})], & |z| > \frac{L}{2} \end{cases}. \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V_C \begin{Bmatrix} S \\ A \end{Bmatrix}(\mathbf{q}) &= V_C^{(1)}(\mathbf{q}) \cdot V_C^{(2)}(\mathbf{q}, z) = \frac{C}{\sqrt{S}} \left[\frac{\partial}{\partial \omega} (\varepsilon_{1\perp} q^2 + \varepsilon_{1z} k_m^2) \frac{L}{2} - 2q \frac{\partial}{\partial \omega} \begin{Bmatrix} f_S(\omega) \cos \left(\frac{k_m L}{2} \right) \\ f_A(\omega) \sin \left(\frac{k_m L}{2} \right) \end{Bmatrix} \right]^{-1/2} \\ &\times \begin{cases} \begin{Bmatrix} \cos(k_m z) \\ \sin(k_m z) \end{Bmatrix}, & |z| < \frac{L}{2} \\ \begin{Bmatrix} \cos \left(\frac{k_m L}{2} \right) \\ \text{sgn}(z) \sin \left(\frac{k_m L}{2} \right) \end{Bmatrix} \exp[-\kappa_2 (|z| - \frac{L}{2})], & |z| > \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (14) \end{aligned}$$

$$\text{де } \begin{Bmatrix} f_S(\omega) \\ f_A(\omega) \end{Bmatrix} = \text{sgn}(\varepsilon_{1z}) \sqrt{-\varepsilon_{1\perp}(\omega) \varepsilon_{1z}(\omega)} \begin{Bmatrix} \sin \left(\frac{k_m L}{2} \right) \\ \cos \left(\frac{k_m L}{2} \right) \end{Bmatrix} - \text{sgn}(\varepsilon_{2z}) \varepsilon_{c2} \begin{Bmatrix} \cos \left(\frac{k_m L}{2} \right) \\ \sin \left(\frac{k_m L}{2} \right) \end{Bmatrix},$$

k_m визначається з рівняння:

$$\varepsilon_{1z} k_m \begin{Bmatrix} \sin \left(\frac{k_m L}{2} \right) \\ \cos \left(\frac{k_m L}{2} \right) \end{Bmatrix} - \varepsilon_{2z} \kappa_2 \begin{Bmatrix} \cos \left(\frac{k_m L}{2} \right) \\ \sin \left(\frac{k_m L}{2} \right) \end{Bmatrix} = 0,$$

при умові, що $\frac{\pi}{L} \begin{Bmatrix} 2m \\ 2m-1 \end{Bmatrix} < k_m < \frac{\pi}{L} \begin{Bmatrix} 2m+2 \\ 2m+1 \end{Bmatrix}$.
Для симетричних фононів $m = 0, 1, 2, \dots$, а для анти-

Частоти симетричних (антисиметричних) фононів визначаються з дисперсійних рівнянь:

$$\varepsilon_{c1} \begin{Bmatrix} \text{th} \left(\varepsilon_{b1} \frac{qL}{2} \right) \\ \text{cth} \left(\varepsilon_{b1} \frac{qL}{2} \right) \end{Bmatrix} - \varepsilon_{c2} = 0, \quad (13)$$

коли справедливі нерівності:

$$\varepsilon_{1z}(\omega) \varepsilon_{2z}(\omega) < 0, \quad \varepsilon_{1\perp}(\omega) \varepsilon_{1z}(\omega) > 0$$

і

$$\varepsilon_{2\perp}(\omega) \varepsilon_{2z}(\omega) > 0.$$

У формулах (12), (13) уведено позначення:

$$\varepsilon_{ci}(\omega) = \sqrt{\varepsilon_{i\perp} \varepsilon_{iz}}, \quad \varepsilon_{bi}(\omega) = \sqrt{\varepsilon_{i\perp} / \varepsilon_{iz}}, \quad i = 1, 2, \dots$$

Для обмежених фононів (симетричних та антисиметричних) $V(\mathbf{q})$ є таким:

симетричних — $m = 1, 2, 3, \dots$

Напівобмежені поляризаційні фонони, для яких E_{\perp} та D_z є неперервними функціями на кожному з інтерфейсів і за властивостями аналогічні до фононів масивного кристала, якщо $z = \pm\infty$, характеризуються такою функцією $V(Q)$ для гілок симетричних та антисиметричних фононів:

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} V_{HS}^S(\mathbf{Q}) \\ V_{HS}^A(\mathbf{Q}) \end{Bmatrix} &= V_{HS}^{(1)}(\mathbf{Q}) V_{HS}^{(2)}(\mathbf{Q}, z) = \frac{C}{\sqrt{LS}} \left[\frac{\partial}{\partial \omega} (\varepsilon_{2\perp} \sin^2 \theta_2 + \varepsilon_{2z} \cos^2 \theta_2) \right]^{-1/2} \frac{\sqrt{2}}{Q} \\ &\times \left[\varepsilon_{1z}^2 \kappa_1^2 \begin{Bmatrix} \text{sh}^2 \left(\frac{\kappa_1 L}{2} \right) \\ \text{ch}^2 \left(\frac{\kappa_1 L}{2} \right) \end{Bmatrix} + \varepsilon_{2z}^2 Q_z^2 \begin{Bmatrix} \text{ch}^2 \left(\frac{\kappa_1 L}{2} \right) \\ \text{sh}^2 \left(\frac{\kappa_1 L}{2} \right) \end{Bmatrix} \right]^{-1/2} \\ &\times \begin{cases} \begin{Bmatrix} 1 \\ \text{sgn}(z) \end{Bmatrix} \varepsilon_{1z} \kappa_1 \begin{Bmatrix} \text{sh} \left(\frac{\kappa_1 L}{2} \right) \\ \text{ch} \left(\frac{\kappa_1 L}{2} \right) \end{Bmatrix} \sin(Q_z (|z| - \frac{L}{2})) + \varepsilon_{2z} Q_z \begin{Bmatrix} \text{ch} \left(\frac{\kappa_1 L}{2} \right) \\ \text{sh} \left(\frac{\kappa_1 L}{2} \right) \end{Bmatrix} \cos(Q_z (|z| - \frac{L}{2})), & |z| > \frac{L}{2} \\ \begin{Bmatrix} \varepsilon_{2z} Q_z \\ \text{sh}(\kappa_1 z) \end{Bmatrix}, & |z| < \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (15) \end{aligned}$$

де хвильовий вектор фонона $\mathbf{Q} = (\mathbf{q}, Q_z)$ утворює з віссю OZ кут θ_2 .

Рівняння (15) справедливі за умови, що виконується нерівність $\varepsilon_{1\perp}\varepsilon_{1z} > 0$, бо лише в цьому випадку коливання будуть загасати в ділянці півки, адже $\kappa_1 = \sqrt{\frac{\varepsilon_{1\perp}(\omega)}{\varepsilon_{1z}(\omega)}}q$.

Для існування ще одного типу коливань — таких, що поширюються у середовищі, необхідне виконання двох нерівностей:

$$\varepsilon_{1\perp}(\omega)\varepsilon_{1z}(\omega) < 0, \quad \varepsilon_{2\perp}(\omega)\varepsilon_{2z}(\omega) < 0. \quad (16)$$

Аналіз показує, що у гетеросистемі AlN/GaN/AlN не існує такої області частот, щоб нерівності (16) виконувалися, тому таких фононів у досліджуваній гетеросистемі нема [7].

Для визначення енергії електрона необхідно розв'язати рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (3):

$$\hat{H}_e\psi_e(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\psi_e(\mathbf{r}). \quad (17)$$

Потенціальну енергію електрона в гетеросистемі вибрано у вигляді прямокутної потенціальної ями:

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| < \frac{L}{2} \\ V_0, & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases}. \quad (18)$$

Тоді хвильова функція є такою:

$$\psi_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}}e^{i\mathbf{k}\rho}\varphi_n(z),$$

де

$$\varphi_n(z) = \begin{cases} Ae^{\chi_0 z}, & z < -L/2 \\ \alpha \sin(\chi z) + \beta \cos(\chi z), & |z| < L/2 \\ Be^{-\chi_0 z}, & z > L/2 \end{cases}, \quad (19)$$

$$\chi_0 = \sqrt{\frac{2m_{||2}}{\hbar^2}(V_0 - E)}, \quad \chi = \sqrt{\frac{2m_{||1}}{\hbar^2}\tilde{E}_n},$$

а енергія електрона представляється формулою:

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{p^2}{2m_{\perp}} + \tilde{E}_n, \quad (20)$$

\mathbf{p} — імпульс електрона, а \tilde{E}_n знаходиться з дисперсійного рівняння, яке є наслідком умови неперервності хвильової функції та густини потоку ймовірності на межах поділу середовищ.

При визначенні енергії полярона використано метод теорії збурень і варіаційний метод Лі–Лоу–Пайнса (ЛЛП) [17, 18]. Застосовуючи метод ЛЛП, ми врахували, що досліджувана система містить швидко й повільну підсистему. Швидкою підсистемою буде рух електрона в перпендикулярному до меж поділу напрямі. Тому використано адиабатичне наближення — гамільтоніан (2) усереднено на хвильових функціях основного стаціонарного стану електрона для руху вздовж осі OZ :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{ef}} &= \langle \varphi_1(z) | \hat{H} | \varphi_1(z) \rangle \\ &= \tilde{E}_1 + \frac{p^2}{2m_{\perp}} + \hat{H}_{\text{ph}} + \sum_{\mathbf{q}} V^{(1)}(\mathbf{q}) (e^{i\mathbf{q}\rho} M_{11} b_{\mathbf{q}} + e.c.), \end{aligned} \quad (21)$$

де $M_{1n} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1^*(z) V^{(2)}(\mathbf{q}, z) \varphi_n(z) dz$, $n = 1$.

До гамільтоніана (21) застосовано послідовно два унітарні перетворення за допомогою операторів:

$$\hat{S} = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{P} - \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \hbar \mathbf{q} \right) \rho \right],$$

$$\hat{U} = \exp \left[\sum_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^+ f(\mathbf{q}) - b_{\mathbf{q}} f^*(\mathbf{q})) \right],$$

де $\mathbf{P} = \hbar \mathbf{k}$ — імпульс полярона.

Після усереднення одержаного виразу за вакуумними фононним станом та мінімізації функціонала за $f(\mathbf{q})$ і $f^*(\mathbf{q})$ знайдено енергію полярона гетеросистеми [20–22]:

$$E_{\text{pol}}(\mathbf{k}) = \tilde{E}_1 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\perp}} (1 + \eta^2) + \sum_{\mathbf{q}} \frac{-2 \cdot |V^{(1)}(\mathbf{q})|^2 |M_{11}|^2}{\hbar\omega - \frac{\hbar\mathbf{q}\mathbf{P}}{m_{\perp}} (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{||}}} + \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V^{(1)}(\mathbf{q})|^2 |M_{11}|^2 \left\{ \hbar\omega - \frac{\hbar\mathbf{q}\mathbf{P}}{m_{\perp}} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\perp}} \right\}}{\left\{ \hbar\omega - \frac{\hbar\mathbf{q}\mathbf{P}}{m_{\perp}} (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\perp}} \right\}^2}, \quad (22)$$

де

$$\eta\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{q}} |f_{\text{min}}(\mathbf{q})|^2 \hbar \mathbf{q},$$

$$f_{\text{min}}(\mathbf{q}) = -\frac{V^{(1)*}(\mathbf{q}) M_{11}^*}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\perp}} - \frac{\hbar^2}{m_{\perp}} \mathbf{k}\mathbf{q} (1 - \eta)}.$$

Енергія полярона в масивному кристалі визначається аналогічними формулами [17]. Різниця полягає в тому, що формула (22) містить функцію M_{11} , яка виникає внаслідок порушення трансляційної симетрії системи в напрямку OZ .

Вираз (22) задає залежність енергії полярона від хвильового вектора — закон дисперсії квазічастинки.

III. ЧИСЛОВІ РОЗРАХУНКИ. АНАЛІЗ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

При дослідженні поляронних станів, як правило, розглядають ділянку малих значень хвильових векторів ($k \approx 0$). Величини $\eta(\mathbf{k})$ і $E_{\text{pol}}(\mathbf{k})$ одержують, розкладаючи відповідні вирази в ряди, обмежуючись першими членами розкладу [17]. Маючи на увазі дослідження закону дисперсії полярона в невеликій, але скінченній області зміни хвильового вектора: $0 \leq k < k_f$, $k_f = \sqrt{\frac{2m_+ \omega}{\hbar}} \ll k_0$, де k_0 — граничне значення хвильового вектора в зоні Бріллюена, обчислення $E_{\text{pol}} = E_{\text{pol}}(\mathbf{k})$ в цій роботі проведено без використання додаткових спрощень формули (22).

Із наведених вище формул видно, що функції взаємодії електрона з різними фононними гілками поляризаційних коливань гетероструктури кристалів гексагональної симетрії є складними. Тому варто розглянути функції, що задають імовірності розсіяння електрона на цих фононах. Для безрозмірних хвильових векторів ($q = \tilde{q} \frac{\pi}{a}$) такою функцією буде:

$$\Phi(\tilde{q}) = \frac{\pi S}{2a^2} |V^{(1)}|^2 |M_{1n}|^2 \tilde{q},$$

де a — стала ґратки.

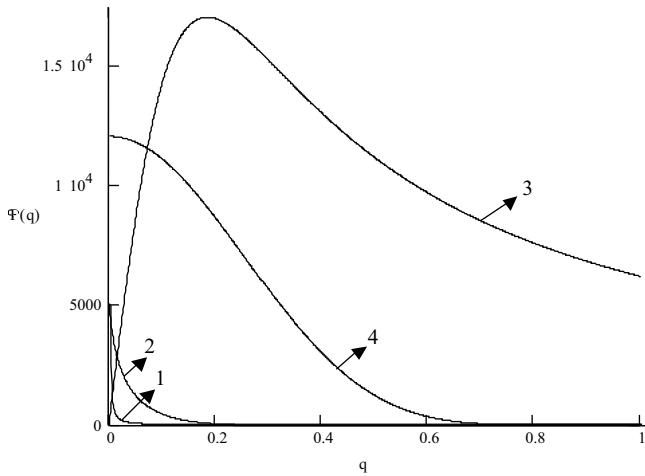


Рис. 1. Залежність функції $\Phi(q)$ для напівобмежених (1), міжповерхневих (2), обмежених (3) поляризаційних фононів та фононів масивного кристала (4) при $L = 25 \text{ \AA}$ і $n = 1$.

На рис. 1 подано залежність даної функції для трьох типів (обмежених, міжповерхневих, напівобмежених) поляризаційних фононів при $L = 25 \text{ \AA}$ і $n = 1$. Аналогічні залежності отримано для $L = 50 \text{ \AA}$, $L = 75 \text{ \AA}$, $L = 100 \text{ \AA}$, $L = 125 \text{ \AA}$, $L = 150 \text{ \AA}$. Аналіз показує, що для малих значень товщини наноплівки міжповерхневі фонони роблять значний внесок в енергію полярона. Збільшення L зменшує цей внесок. Якщо $L > 100 \text{ \AA}$, то домінуючу роль у формуванні енергії полярона відіграють обмежені фонони.

Варто підкреслити ще один результат. З рис. 1 видно, що в інтегральній формі крива 4 відображає поведінку кривих 1–3. Тому якщо вибрати модель, у межах якої поляризаційні фонони гетеросистеми залишаються такими, як у масивному кристалі, то результат обчислень енергії непогано узгоджуватиметься з тим, коли враховувати всі типи поляризаційних коливань [20–22]. Ця властивість поляризаційних фононів є досить загальною. Можна довести, що форм-фактор, який задає ефективну міжелектронну взаємодію за допомогою поляризаційних коливань для фононів масивних кристалів дорівнює сумі форм-факторів усіх поляризаційних мод гетеросистеми [18].

Енергію полярона найзручніше відраховувати від енергії першого рівня електрона \tilde{E}_1 . У цьому випадку виникає можливість для порівняння енергій полярона в різних квантових ямах і в масивному кристалі.

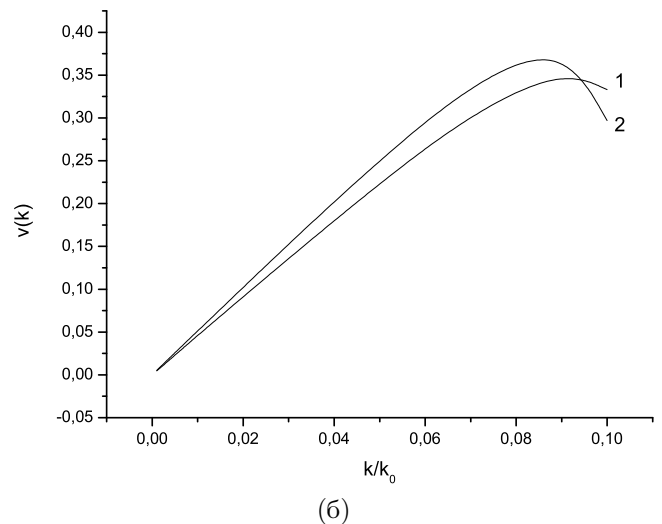
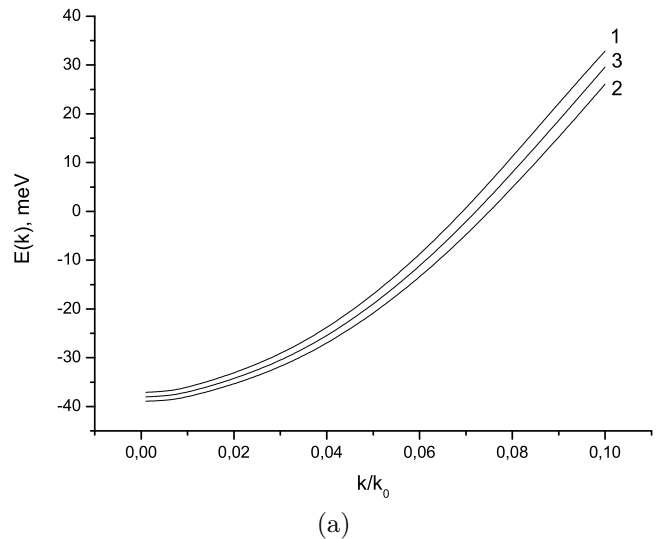
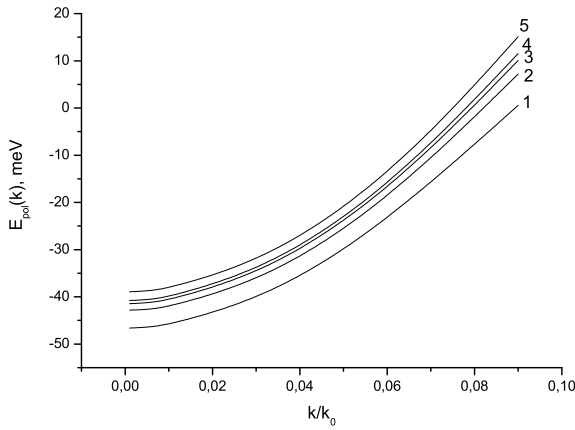
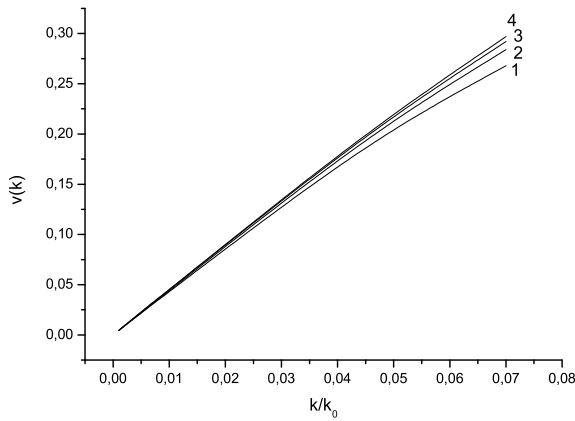


Рис. 2. Закон дисперсії (а) та середня швидкість (б) полярона для кристала GaN у випадках, коли $\theta = 0$ (1), $\theta = \pi/2$ (2), $\theta = \pi/4$ (3).



(а)



(б)

Рис. 3. Залежність $E_{\text{pol}} = E_{\text{pol}}(\mathbf{k})$ (а) та $v = v(\mathbf{k})$ (б) для $L = 25 \text{ \AA}$ (1), $L = 50 \text{ \AA}$ (2), $L = 75 \text{ \AA}$ (3), $L = 100 \text{ \AA}$ (4), $L = \infty$ (5).

На рис. 2а подано результати обчислень закону дисперсії полярона в області $k < k_f$ для кристала GaN при різних напрямках хвильового вектора полярона відносно C -осі кристала (кутах θ_k). Видно, що функція $E_{\text{pol}} = E_{\text{pol}}(\mathbf{k})$ залежить не лише від модуля хвильового вектора, але й кута θ_k для всіх значень k . Крім того, в області дуже малих k закон дисперсії має параболічний характер. Збільшення k веде до “деформації” закону дисперсії. Останній результат добре видно із залежності середньої швидкості полярона

$$v = \frac{1}{\hbar} |\nabla E_{\text{pol}}(\mathbf{k})|.$$

В області малих значень k середня швидкість є лінійною функцією від k (рис. 2б). Різницю у прямих визначаємо вихідною масою електрона, яка для різних напрямків різна. Проте подальше збільшення k веде до відхилення $v = v(\mathbf{k})$ від лінійної залежності. Очевидно, що така поведінка $v = v(\mathbf{k})$ повинна впливати на електричні та оптоелектричні властивості кристала.

Для гетеросистеми AlN/GaN/AlN вказані вище властивості функції $E_{\text{pol}} = E_{\text{pol}}(\mathbf{k})$ та $v = v(\mathbf{k})$ також наявні. Обчислення (рис. 3а, б) показують, що в цьому випадку всі особливості закону дисперсії та швидкості посилюються. З рис. 3а видно, що енергія зв'язку полярона ($|E_{\text{pol}}(0)|$) у масивному кристалі є меншою, ніж у гетеросистемі. Зменшення ширини квантової ями (L) веде до збільшення цієї енергії та до зростання деформації закону дисперсії.

Важливою фізичною характеристикою полярона є його ефективна маса (m_p). Маючи закон дисперсії, можна обчислити m_p :

$$\frac{1}{m_p} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_{\text{pol}}(0)}{\partial k^2}.$$

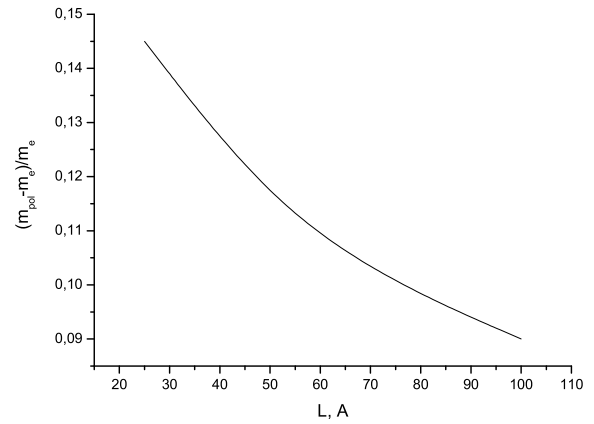


Рис. 4. Залежність ефективної маси полярона від товщини наноплівки для гетеросистеми AlN/GaN/AlN.

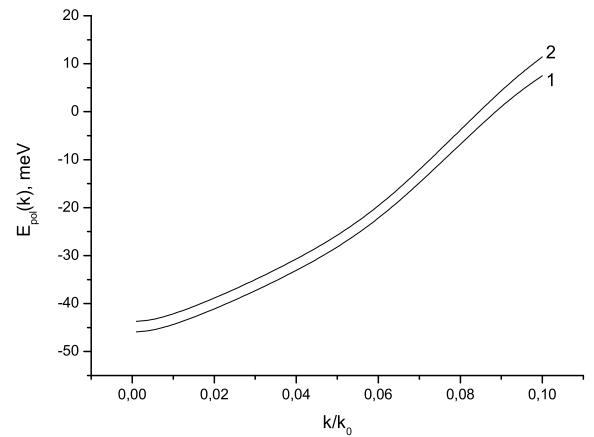


Рис. 5. Закон дисперсії полярона гетеросистеми AlN/GaN/AlN при $L = 25 \text{ \AA}$ для НКЯ (крива 1) і СКЯ (крива 2).

На рис. 4 подана залежність m_p від товщини на-
ноплівки гетеросистеми. Видно, що зменшення L су-
проводжується збільшенням m_p . Цей результат, як
і попередні, вказує на те, що в межах вибраної мо-
делі зі зменшенням мірності системи виникає ефек-
тивне підсилення електрон-фононної взаємодії. Ана-
логічний висновок справедливий і для гетеросистем
кристалів кубічної симетрії [20–22]. Пояснюємо такий
результат тим, що зменшення L веде до обмеження (в
одному напрямку) руху електрона.

Для підтвердження цієї думки проведено обчислен-
ня $E_{\text{pol}} = E_{\text{pol}}(\mathbf{k})$ в межах моделі скінченного (СКЯ)
та нескінченного (НКЯ) розриву зон. У першому ви-
падку електрон може тунелювати в матрицю, а у дру-
гому — ймовірність такого процесу дорівнює нулеві.
З рис. 5 видно, що у випадку сильнішого обмеження
руху електрона (потенціал на межах поділу дорівнює

нескінченності) енергія зв'язку полярона для кожно-
го L є більшою.

Отже, у праці теоретично досліджено закон диспер-
сії поляронів у кристалі GaN та у подвійній наногете-
роструктурі AlN/GaN/Al, з урахуванням усіх типів
поляризаційних коливань, з якими взаємодіє елект-
рон, у межах моделі скінченного та нескінченного роз-
риву зон. Обчислено середню швидкість та ефектив-
ну масу полярона. Показано, що зі збільшенням тов-
щини наноплівки внесок міжповерхневих фононів в
енергію полярона зменшується, а обмежених фононів
— збільшується. Подано результати обчислень закону
дисперсії полярона в області $k < k_f$ при різних на-
прямках хвильового вектора полярона відносно -осі
кристала. Зменшення мірності системи, збільшення
хвильового вектора \mathbf{k} спричиняють ефективне зрос-
тання електрон-фононної взаємодії.

-
- [1] M. Gehler, M. Ramsteiner, O. Brandt, H. Yang, K. H. Ploog, Appl. Phys. Lett. **67**, 733 (1995).
 [2] P. Perlin, A. Polian, T. Suski, Phys. Rev. B. **47**, 2874 (1993).
 [3] M. Asif Khan, J. N. Kusunina, A. R. Bhattarai, D. T. Olson, Appl. Phys. Lett. **62**, 1786 (1993).
 [4] M. F. Mac Millan, R. P. Devaty, W. J. Choyke, J. Appl. Phys., **80**, 2372 (1996).
 [5] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, Y. Sugimoto, H. Kiyoku, Appl. Phys. Lett. **70**, 616 (1997).
 [6] B. C. Lee, K. W. Kim, M. A. Stroscio, M. Dutta, Phys. Rev. B **58**, 4860 (1998).
 [7] S. M. Komirenko, K. W. Kim, M. A. Stroscio, M. Dutta, Phys. Rev. B **59**, 5013 (1999).
 [8] J. Gleize, M. A. Renucci, J. Frandon, F. Demangeot, Phys. Rev. B **60**, 15985 (1999).
 [9] Jun-jie Shi, Phys. Rev. B **68**, 165335–1 (2003).
 [10] Jun-jie Shi, Xing-li Chu, E. M. Goldys, Phys. Rev. B **70**, 115318–1 (2004).
 [11] М. А. Якобсон, Д. К. Нельсон, О. В. Константинов, Ф. В. Матвеевцев, Физ. техн. полупр. **39**, 1459 (2005).
 [12] J. T. Lu, J. C. Cao, J. Appl. Phys., **97** 033502–1, (2005).
 [13] Jun-jie Shi, Solid State Commun. **123**, 51 (2003).
 [14] M. E. Mora-Ramos, F. J. Rodriguez, L. Quiroga, J. Phys.: Condens. Matter **11**, 8223 (1999).
 [15] M. E. Mora-Ramos, Phys. Status Solidi B **219**, R1 (2000).
 [16] M. E. Mora-Ramos, Phys. Status Solidi B **223**, 843 (2001).
 [17] T. D. Lee, F. E. Low, D. Pines, Phys. Rev. **90**, 297 (1953).
 [18] Ю. А. Фирсов, *Полярони* (Наука, Москва, 1975).
 [19] N. Mori, T. Ando, Phys. Rev. B **40**, 6175 (1989).
 [20] V. I. Boichuk, V. A. Borusevych, Ukr. J. Phys. **51**, 168 (2006).
 [21] В. І. Бойчук, В. А. Борусевич, Журн. фіз. досл. **10**, 39 (2006).
 [22] V. I. Boichuk, V. A. Borusevych, I. P. Kogoutiuk, Condens. Matter Phys. **10**, 219 (2007).

В. І. БОЙЧУК, В. А. БОРУСЕВИЧ, І. В. БЛИНСЬКИЙ

**POLARON STATES OF AN ELECTRON IN A DOUBLE NANOSCALE
HETEROSTRUCTURE OF HEXAGONAL SYMMETRY CRYSTALS
(ON THE BASIS OF AlN/GaN/AlN)**

V. I. Boichuk, V. A. Borusevych, I. V. Bilynsky
*Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,
24 Ivan Franko St., Drohobych, UA-82100, Ukraine
bva@mail.lviv.ua*

We have studied theoretically a polaron dispersion law in the GaN crystal and AlN/GaN/AlN double nanoscale heterostructure. Every type of polarization oscillation an electron interacts with is taken into account. Calculations are performed in the framework of infinite and finite band-gap models. We show that with the nanofilm thickness increase interface phonon contribution in the polaron energy decreases, while that of confined phonons gains in value. We present calculation results of a polaron dispersion law in the region $k < k_f$ at different polaron's wave-vector directions with respect to c -axis of the crystal. We also calculated polaron average speed and effective mass. The results suggested an effective enhancement of electron-phonon interaction at the lowering of the system's dimensions number.