УДК 534.266

© 1998 р. М.В.Ткач, В.А. Головацький,
О.М. Войцехівська, М.Я. Міхальова

Чернівецький державний університет ім.Ю.Федьковича, Чернівці

НЕПЕРЕВНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА ТА ЕЛЕКТРОН - ФОНОННА ВЗАЄМОДІЯ В СКЛАДНІЙ СФЕРИЧНІЙ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ

У наближенні ефективних мас у моделі діелектричного континууму виконано теоретичне дослідження електрон-фононної взаємодії з урахуванням внутрірівневої взаємодії в складній сферичній наногетеросистемі. Встановлено явний вигляд гамільтоніана електрон-фононної взаємодії в зображенні чисел заповнення з урахуванням неперервного спектра електронів.

Theoretical investigation electron-phonon interaction with taking into account intralevel interaction in complicated spherical nanoheterosystem performed within the effective mass approximation. It is found an explicit form of electron-phonon interaction Hamiltonian in a bridging numbers representation with consideration for continuous electron spectrum.

Сферичні наногетеросистеми є цікаві об'єкти досліджень, оскільки їх фізичні властивості кардинально відрізняються від їх масивних аналогів. Особливий інтерес викликають 0-мірні квантові ями, так звані квантові точки, квазічастки яких через відсутність квазіімпульсу мають строго дискретний спектр [1]. При дослідженні взаємодії квазічасток (елекрон-, екситон-фононні взаємодії) в роботах [1-2] враховувалась лише міжзонна взаємодія. Але при деяких розмірах шарів наногетеросистеми відстань між енергетичними рівнями електрона (екситона) стає співмірною з енергією взаємодії електрона з фононами. Тому в цьому випадку необхідно враховувати внутрізонну взаємодію і взаємодію з неперервним спектром.

Сферична наногетеросистема складається з ядра, оточеного N оболонками, та зовнішнього середовища (N+1), в яке вміщено гетерокристал. Теорію будуємо для випадку, коли зовнішнє середовище має максимальну висоту потенціального бар'єра для електрона в порівнянні з бар'єрами інших середовищ.

Для знаходження спектра електрона потрібно розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m^*}\vec{\nabla}^2+V(r)\right\}\Psi=E\Psi\,. \qquad (1)$$

В залежності від знака E виникають розв'язки двох типів: дискретний (E<0) і неперервний спектр (E>0). Дискретний спектр електрона знаходиться так само, як у роботі [2]. Тому розглянемо тільки хвильові функції неперервного спектра. Вони в i-тому шарі мають вигляд:

$$R_{kl}^{i}=k_i a_i[h_l^{+}(k_i r)-S_l^{(i)}h_l^{-}(k_i r)], \qquad (2)$$

причому $S_l^{(0)}=1$ (з умови скінченності хвильової функції при r=0), $a_{N+1}=1/\sqrt{2\pi}$ (з умови нормування), $k_i=\sqrt{\frac{2m_i}{\hbar^2}(E+V_i)}$, де V_i та m_i - потенціал та ефективна маса електрона в i-тому середовищі, відповідно. Рекурентні співвідношення для коефіцієнтів a_i, $S_l^{(i)}$ визначаються з граничних умов для хвильової функції і мають вигляд:

$$S_l^{(i+1)}=\frac{F_i' h_l^{+}(k_{i+1}r_i)-F_i(h_l^{+}(k_{i+1}r_i))'}{F_i' h_l^{-}(k_{i+1}r_i)-F_i(h_l^{-}(k_{i+1}r_i))'},$$

$$a_i=\frac{k_{i+1}}{k_i}\frac{h_l^{+}(k_{i+1}r_i)-S_l^{(i+1)}h_l^{-}(k_{i+1}r_i)}{h_l^{+}(k_i r_i)-S_l^{(i)}h_l^{-}(k_i r_i)}, \qquad (3)$$

де
$$F_i=h_l^{+}(k_i r_i)-h_l^{-}(k_i r_i),$$
$$F_i'=h_l^{+}(k_i r_i)-h_l^{-}(k_i r_i)\Big|_{r=r_i}.$$

Визначимо повну систему ортонормованих хвильових функцій електрона:

$$\Psi_{\left\{ n \atop k \right\}\ell m}=\left\{ R_{n\ell}(r) \atop R_{k\ell}(r) \right\}Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\,, \qquad (4)$$

де $R_{nl}(r), R_{kl}(r)$ - радіальні функції неперервного та дискретного спектрів, відповідно.

Введемо квантовану функцію електрона:

$$\widehat{\Psi}_{n(k)lm} = \sum_{nlm} \Psi_{nlm}(\vec{r})\widehat{a}_{nlm} + + \sum_{lm} \int_0^\infty \frac{1}{k} \Psi_{klm}(\vec{r})\widehat{a}_{klm} dk \qquad (5).$$

Для знаходження спектра і потенціалу поляризації обмежених оптичних та інтерфейсних фононів використовуємо метод роботи [3], шукаючи потенціали у вигляді розкладу по повній системі сферично-симетричних функцій (4). В результаті отримаємо гамільтоніан електрон-фононної системи в зображенні чисел заповнення за всіма змінними системи:

$$\widehat{H} = \sum_{lm}\left[\sum_n E_{nlm}\widehat{a}^+_{nlm}\widehat{a}_{nlm} + \int E_{lm}(k)\widehat{a}^+_{klm}\widehat{a}_{klm} dk\right]$$
$$\sum_{i=0}^{N+1}\sum_{lms_i}\Omega_{s_i}(\widehat{b}^+_{lms_i}\widehat{b}_{lms_i} + \frac{1}{2}) +$$
$$+\sum_{sls_i}\Omega_{sl}(\widehat{b}^+_{sls_i}\widehat{b}_{sls_i} + \frac{1}{2}) +$$
$$+\sum_{\substack{n_1l_1m_1\\ n_2l_2m_2}}\sum_{i=0}^{N+1}\left\{\sum_{s_ilm}(\Phi^L_{s_il})^{n_2l_2m_2}_{n_1l_1m_i}\widehat{a}^+_{n_2l_2m_2}\widehat{a}_{n_1l_1m_1}\times\right.$$
$$\times(\widehat{b}_{lms_i} + \widehat{b}^+_{lms_i}) + \qquad (6)$$
$$+\sum_{\substack{n_1l_1m_1\\ n_2l_2m_2}}\sum_{slm}(\Phi^I_{sl})^{n_2l_2m_2}_{n_1l_1m_i}\widehat{a}^+_{n_2l_2m_2}\widehat{a}_{n_1l_1m_1}\times$$
$$\left.\times(\widehat{b}_{lms} + \widehat{b}^+_{lms_i})\right\}$$

де під сумами $\sum_{n_1,n_2}\ldots$ в двох останніх доданках розуміємо суми у випадку дискретного спектру та інтеграли у випадку неперервного.

Згідно з [4], перенормована енергія електрона, що взаємодіє з фононами, визначається Фур'є образом запізнюючої функції Гріна

$$G_{ij}(\omega) = \left(\omega - \varepsilon_i - M_{ij}(\omega)\right)^{-1} \qquad (7)$$

Отже, згідно з наведеними формулами перенормована енергія електрона з урахуванням внутрірівневої взаємодії та неперервного спектра може бути обчислена для конкретних систем, параметри яких відомі.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Schooss D., Mews A, Eychmuller A., Weller H.* Quantum dot quantum well CdS/HgS/CdS: theory and experiment // Phys. Rev. B. - 1994. - **49,** II, №24. - P.17072-17078.
2. *Tkach M., Holovatsky V., Voitsekhivska O., Mikhalyova M.* Exciton-phonon interaction in spherical nanoheterosystem CdS/HgS/H_2O // Phys. Stat. Sol. - 1997. - **203**, № 2. - P.578-592.
3. *Ткач Н.В.* Спектр поляризационных фононов в трехслойной сферической гетеросистеме // ФТТ. - 1994. - **36**, № 11. - С.3222-3232.
4. *Агранович В.М.* Теория экситонов. - М.: Наука, 1968.