

ВПЛИВ ФОНОНІВ НА ЕЛЕКТРОННИЙ СПЕКТР У НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ МАЛИХ РОЗМІРІВ, РОЗТАШОВАНИХ У ДІЕЛЕКТРИЧНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Методом діаграмної техніки для функцій Гріна з врахуванням багатофононних процесів досліджено електронні рівні та відповідні фононні повторення напівпровідникової квантової точки, розташованої у діелектрику. На прикладах квантових точок GaAs, CdSe, CuCl, введених у скло, показано, що при скінченній глибині потенціальних ям квантових точок зі зменшенням розмірів квантових точок величини зсувів електронних рівнів зменшуються незалежно від сили електрон-фононного зв'язку у наногетеросистемі. Теоретично розраховані положення фононних повторень для CdSe у склі добре узгоджуються з тими, що встановлені експериментально методом раманівського розсіяння.

The electron levels and respective phonon repetitions of semiconductor quantum dot (QD) embedded into dielectric are studied using the diagram technique for the Green functions taking into account the manyphonon processes. On the examples of GaAs, CdSe, CuCl QDs embedded into glass it is shown that for the QDs with potential wells of finite depth the magnitudes of electron levels shifts decrease independently on the electron-phonon binding when the QD sizes decrease. The location of phonon repetitions in CdSe embedded into glass are theoretically calculated and well correspond to the experimentally obtained within the Raman scattering method.

Впродовж тривалого періоду розвитку теорії електрон-фононої взаємодії у низькорозмірних системах взагалі [1-3] і у квантових точках (КТ) зокрема [3-8] головна увага зверталася на перенормування фононами основних зон чи рівнів у залежності від розмірів наносистем.

Для дослідження квантовоточкових наносистем зі слабким зв'язком застосовувалися різновиди теорії збурень [3-5]. У таких системах усі механізми дають практично адитивний вклад у величину зсуву основного рівня, а тому в різних моделях наносистем вивчалася роль L - та I -фононів, а також внутрі- та міжрівневої взаємодії у перенормуванні положень електронних рівнів у шкалі енергій. Головна увага зверталася на аналіз відносних вкладів різних механізмів у величину зсуву основного рівня в залежності від розмірів КТ.

У наносистемах з проміжним і сильним електрон-фононним зв'язком механізми формування зсувів електронних рівнів неадитивні і тому виділяти їх парціальні вклади можна досить умовно. Отже, у роботах, де вивчалися КТ з проміжним і сильним зв'язком, досліджувалася залежність зсуву основного рівня від розмірів КТ і порівнюва-

лися між собою результати розрахунків у різних моделях, наближеннях та математичних підходах.

Однак виявляється, що навіть тоді, коли результати різних підходів добре корелюють між собою при всіх розмірах КТ, насправді вони не коректні при малих радіусах квантових точок. Так, у роботах [5,8] показано, що при зменшенні радіуса напівпровідникових сферичних КТ, розташованих у діелектрику, різко зростають величини зсувів основних електронних рівнів у наносистемах незалежно від величини електрон-фононного зв'язку. Хоча такий результат формально правильний, він є фізично некоректним, бо зумовлений тим, що автори цитованих робіт використали наближення безмежно глибокої потенціальної ями, яке є несправедливим саме при малих розмірах КТ. Адже з фізичних міркувань зрозуміло, що зменшення розміру безмежно глибокої ями локалізує у просторі квазічастинку, чим збільшує силу її зв'язку з фононами, що й призводить до формально вірного збільшення величини зсуву. Однак при реально скінченній глибині ями зменшення радіуса КТ призводить до "виштовхування" квазічастинки з ями, тобто делокалізує її у прос-

торі, а тому зменшує взаємодію з фононами, внаслідок чого величина зсуву повинна зменшуватися, що й буде показано в цій роботі.

Необхідно також зазначити, що застосовувані раніше методи дослідження електрон-фононої взаємодії не давали можливості вивчати фононі повторення у спектрах наносистем, які вже досліджуються експериментально, зокрема методом раманівського розсіяння.

Метою цієї роботи є адаптація апарату діагностичної техніки у методі функцій Гріна при $T=0$ К для вивчення перенормування L - та I -фононами електронних рівнів та відповідних фононних повторень напівпровідникових сферичних КТ, які розташовані у зовнішньому діелектричному середовищі з довільною силою електрон-фононного зв'язку.

Гамільтоніан електрон-фононої системи у напівпровідниковій сферичній квантовій точці, розташованій у діелектричному середовищі

Гамільтоніан електрон-фононої системи у напівпровідниковій сферичній квантовій точці (СКТ) з радіусом r_0 , розташованій у масивному діелектрику, є частковим випадком більш загальної наносистеми: напівпровідникова СКТ, розташована у напівпровідниковому середовищі, яка розглянута у роботах [6-7]. Згідно з роботою [6], електрон у наближенні ефективної маси та прямокутного потенціалу скінченної величини

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r \leq r_0 \\ m_1, & r \geq r_0 \end{cases}, \quad U(r) = \begin{cases} -U, & r \leq r_0 \\ 0, & r \geq r_0 \end{cases}, \quad (1)$$

у зображенні вторинного квантування характеризується гамільтоніаном

$$\hat{H}_e = \sum_{p\ell m} E_{p\ell m} \hat{a}_{p\ell m}^+ \hat{a}_{p\ell m}, \quad \left\{ \begin{array}{l} p=n, k; \ell=1, 2, \dots; \\ m=0, \pm 1, \dots, \pm \ell \end{array} \right\}. \quad (2)$$

Дискретна $E_{n\ell}$ та неперервна E_k частина спектра, а також повна ортонормована система хвильових функцій

$$|p\ell m\rangle = \Psi_{p\ell m}(\vec{r}) = R_{p\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad R_{p\ell}(r) = \begin{cases} R_{p\ell}^0(r), & r \leq r_0 \\ R_{p\ell}^1(r), & r \geq r_0 \end{cases}, \quad (3)$$

визначені у роботі [12].

Фононний гамільтоніан наносистеми у моделі діелектричного континууму має вигляд [12]

$$\hat{H}_{ph} = \hat{H}_L + \hat{H}_I. \quad (4)$$

Тут

$$\hat{H}_L = \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{m\ell=0} \Omega_L \left(\hat{b}_{s\ell m}^+ \hat{b}_{s\ell m} + \frac{1}{2} \right), \quad (5)$$

$$\hat{H}_I = \sum_{m\ell=1} \Omega_{I\ell} \left(\hat{b}_{\ell m}^+ \hat{b}_{\ell m} + \frac{1}{2} \right),$$

де у гамільтоніані обмежених фононів \hat{H}_L енергії Ω_L збігаються з енергіями поздовжніх фононів відповідного масивного кристала, а енергії $\Omega_{I\ell}$ інтерфейсних фононів у \hat{H}_I визначаються розв'язками дисперсійного рівняння

$$\Omega_{I\ell} = \Omega_L \sqrt{\frac{\varepsilon_{\infty}(\ell+1)\varepsilon_d + \ell\varepsilon_0}{\varepsilon_0(\ell+1)\varepsilon_d + \ell\varepsilon_{\infty}}}, \quad \ell=1, 2, \dots \quad (6)$$

де ε_{∞} , ε_0 – високо- та низькочастотна проникності матеріалу КТ, а ε_d – діелектрична проникність середовища (діелектрика).

Гамільтоніан взаємодії електрона з обмеженими та інтерфейсними фононами має вигляд

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{\substack{p_1\ell_1m_1 \\ p_2\ell_2m_2}} \sum_{\lambda\ell m} \Phi_{p_1\ell_1m_1}^{p_2\ell_2m_2}(\lambda\ell m) \times \hat{a}_{p_2\ell_2m_2}^+ \hat{a}_{p_1\ell_1m_1} \left(\hat{b}_{\lambda\ell m} + \hat{b}_{\lambda\ell-m}^+ \right). \quad (7)$$

Тут функції зв'язку

$$\Phi_{p_1\ell_1m_1}^{p_2\ell_2m_2}(\lambda\ell m) = (Y_{\ell m})_{\ell_1m_1}^{\ell_2m_2} (F_{\ell\lambda})_{p_1\ell_1}^{p_2\ell_2}, \quad (\lambda = \{s, I\}) \quad (8)$$

містять спільну для обмежених та інтерфейсних фононів кутову частину

$$(Y_{\ell m})_{\ell_1m_1}^{\ell_2m_2} = \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \times Y_{\ell_2m_2}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) Y_{\ell_1m_1}(\theta, \varphi). \quad (9)$$

Радіальна частина функцій зв'язку електрона з обмеженими фононами задається виразом ($\lambda=s$)

$$(F_{s\ell})_{p_1\ell_1}^{p_2\ell_2} = \sqrt{\frac{4\pi\Omega_L e^2}{r_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right)} \times \frac{\int_0^{r_0} r^2 j_{\ell}(k_s r) R_{p_2\ell_2}^{0*}(r) R_{p_1\ell_1}^0(r) dr}{|k_s r_0 j_{\ell-1}(k_s r_0)|}, \quad (10)$$

у якому значення k_s знаходяться з рівнянь для

функцій Бесселя

$$j_\ell(k_{s_0} r_0) = 0, \ell = 1, 2, \dots, \quad (11)$$

де індекс $s=1, 2, \dots$ нумерує корені цих рівнянь при заданому ℓ .

Радіальна частина функції зв'язку електрона з інтерфейсними фононами задається виразом

$$(F_{I\ell})_{p_1 \ell_1}^{p_2 \ell_2} = \frac{\varepsilon_\infty}{(\ell+1)\varepsilon_d + \ell\varepsilon_0} \times \\ \times \sqrt{\frac{2\pi e^2 \ell \Omega_\ell}{r_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right)} \sqrt{\frac{(\ell+1)\varepsilon_d + \ell\varepsilon_\infty}{(\ell+1)\varepsilon_d + \ell\varepsilon_0}} \times \\ \times \left\{ \int_0^{r_0} R_{p_2 \ell_2}^{0*}(r) R_{p_1 \ell_1}^0(r) \left(\frac{r}{r_0} \right)^\ell r^2 dr + \right. \\ \left. + \int_{r_0}^\infty R_{p_2 \ell_2}^{1*}(r) R_{p_1 \ell_1}^1(r) \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\ell+1} r^2 dr \right\}. \quad (12)$$

Отже, гамільтоніан електрон-фононої системи у напівпровідниковій СКТ, розташованій у діелектричному середовищі, у зображенні чисел заповнення визначений

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_L + \hat{H}_I + \hat{H}_{e-L} + \hat{H}_{e-I}. \quad (13)$$

Це дозволяє застосувати метод функцій Гріна для аналізу не лише перенормування електронних енергетичних рівнів, але й фононних повторень, які виникають у спектрі досліджуваної наногетеросистеми.

Масовий оператор з урахуванням міжрівневої взаємодії та багатофононних процесів

Щоб досліджувати перенормований фононами електронний спектр у широкому інтервалі енергії, який містить фононні повторення, у електронній функції Гріна, необхідно враховувати багатофононні процеси. Для системи, що є квантовою точкою у середовищі, це можна зробити за допомогою діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса при $T=0$ К [10].

Запишемо гамільтоніан (10) у компактній формі

$$H = \sum_\mu E_\mu a_\mu^\dagger a_\mu + \sum_\beta \Omega_\beta \left(b_\beta^\dagger b_\beta + \frac{1}{2} \right) + \\ + \sum_{\mu_1 \mu_2 \beta} \varphi_{\mu_1 \mu_2}(\beta) a_{\mu_1}^\dagger a_{\mu_2} (b_\beta + b_\beta^\dagger), \quad (14)$$

де індекси $\mu = \{p, \ell, m\}$ та $\beta = \{\sigma, \ell, m\}$ характеризують сукупність електронних та фононних квантових чисел відповідно, а для функцій зв'язку вве-

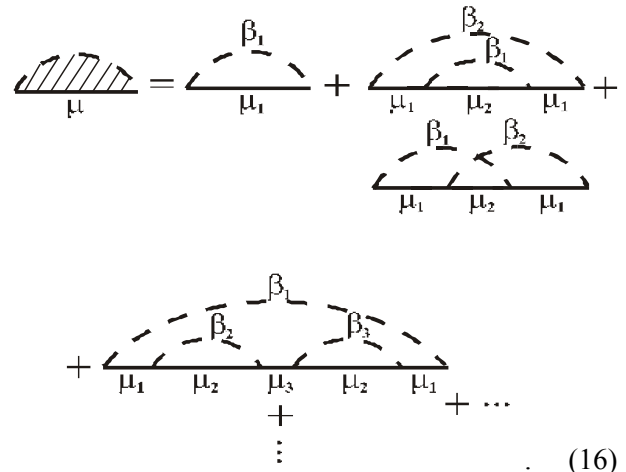
дено компактне позначення

$$\varphi_{\mu_1 \mu_2}(\beta) = \Phi_{p_2 \ell_2 m_2}^{p_1 \ell_1 m_1}(\sigma \ell m).$$

Фур'є-образ діагональної функції Гріна визначається рівнянням Дайсона

$$G_\mu(\omega) = G_{\mu\mu}(\omega) = \left\{ \omega - E_\mu - M_\mu(\omega) \right\}^{-1} \quad (15)$$

через масовий оператор (МО) $M_\mu(\omega)$, який у техніці Пайнса задається безмежною сукупністю діаграм



Згідно з діаграмною технікою Пайнса

$$\text{Diagram 2} = \sum_{\mu_1 \beta_1} \frac{|\varphi_{\mu \mu_1}(\beta_1)|^2}{\omega - E_{\mu_1} - \Omega_{\beta_1}}, \quad (17)$$

$$\text{Diagram 3} = \sum_{\mu_1 \mu_2 \beta_1 \beta_2} \frac{|\varphi_{\mu \mu_1}(\beta_1)|^2}{(\omega - E_{\mu_1} - \Omega_{\beta_1})^2} \times \\ \times \frac{|\varphi_{\mu_1 \mu_2}(\beta_2)|^2}{(\omega - E_{\mu_2} - \Omega_{\beta_1} - \Omega_{\beta_2})}, \quad (18)$$

$$\text{Diagram 4} = \sum_{\mu_1 \mu_2 \beta_1 \beta_2} \frac{\varphi_{\mu \mu_1}(\beta_1) \varphi_{\mu_1 \mu}^*(\beta_2)}{(\omega - E_{\mu_1} - \Omega_{\beta_1})} \times \\ \times \frac{\varphi_{\mu_1 \mu_2}(\beta_2) \varphi_{\mu_2 \mu_1}^*(\beta_1)}{(\omega - E_{\mu_1} - \Omega_{\beta_2})(\omega - E_{\mu_2} - \Omega_{\beta_1} - \Omega_{\beta_2})}. \quad (19)$$

Аналогічно знаходяться вклади довільних діаграм вищих порядків.

У загальному вигляді ряд діаграм (16) не згортається до простого аналітичного виразу. Однак, як відомо з [10], всі діаграми без перетинів фононних (штрихових) ліній

$$\bar{M}_\mu(\omega) = \text{diagram} + \left[\text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \dots \right] + \left[\text{diagram} + 2 \text{diagram} + \dots \right] + \left[\text{diagram} + \dots \right] \quad (20)$$

згортаються точно і дають інтегральне рівняння

$$\tilde{M}_\mu(\omega) = \sum_{\mu_1 \beta_1} \frac{|\Phi_{\mu \mu_1}(\beta_1)|^2}{\omega - E_{\mu_1} - \Omega_{\beta_1} - \tilde{M}_{\mu_1}(\omega - \Omega_{\beta_1})}, \quad (21)$$

яке еквівалентне безмежному сумарному ланцюговому інтегральному дробові

$$\bar{M}_\mu(\omega) = \sum_{\mu_1 \beta_1} \frac{|\Phi_{\mu \mu_1}(\beta_1)|^2}{\omega - E_{\mu_1} - \Omega_{\beta_1} - \sum_{\mu_2 \beta_2} \frac{|\Phi_{\mu_1 \mu_2}(\beta_2)|^2}{\omega - E_{\mu_2} - \Omega_{\beta_1} - \Omega_{\beta_2} - \dots} - \sum_{\mu_n \beta_n} \frac{|\Phi_{\mu_{n-1} \mu_n}(\beta_n)|^2}{\omega - E_{\mu_n} - \sum_{i=1}^n \Omega_{\beta_i} - \dots}}. \quad (22)$$

Цей МО є нижньою оцінкою повного МО (16), але у випадках неслабкої взаємодії чи при розрахунку фононних повторень він дає надто грубі результати.

Ідея підсумовування рядів діаграмної техніки у сумарний ланцюговий дріб дозволяє отримати хорошу апроксимацію точного МО (16) з врахуванням багатогофонних процесів. Це здійснює-

ться так.

Спочатку знайдемо апроксимоване значення $\tilde{M}_\mu^{(2)}(\omega)$ точного двофононного МО ($M_\mu^{(2)}(\omega)$), який визначається всіма діаграмами, що містять не більше, ніж дві фононні лінії над однією електронною. Згідно з формулою (16), точний МО $M_\mu^{(2)}(\omega)$ задається діаграмним рядом

$$M_\mu^{(2)}(\omega) = \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \dots + \text{diagram} + 2 \text{diagram} + \dots + \text{diagram} + \text{diagram} + \dots \quad (23)$$

Нижня оцінка $M_\mu^{(2)H}(\omega)$ отримується з ряду (20) точним підсумовуванням діаграм без перетинів штрихових ліній, що дає

$$M_\mu^{(2)H} = \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \dots =$$

$$= \sum_{\mu_1 \beta_1} \frac{|\varphi_{\mu \mu_1}(\beta_1)|^2}{\omega - E_{\mu_1} - \Omega_{\beta_1} - 1} \cdot \sum_{\mu_2 \beta_2} \frac{|\varphi_{\mu_1 \mu_2}(\beta_2)|^2}{\omega - E_{\mu_2} - \Omega_{\beta_1} - \Omega_{\beta_2}}. \quad (24)$$

Щоб отримати верхню оцінку $M_{\mu}^{(2)}(\omega)$, врахуємо, що у діаграмах довільного порядку кожна діаграма з перетинами фононних ліній дає за оцінками менший вклад, ніж відповідна діаграма того ж порядку без перетинів фононних ліній. Тому, оцінюючи кожен діаграму з перетином штрихових ліній еквівалентною діаграмою без перетинів цих ліній, для верхньої оцінки $M_{\mu}^{(2)}(\omega)$ з (23) отримується ряд, який точно підсумовується і дає аналітичний вираз

$$M_{\mu}^{(2)B} = \text{[diagram 1]} + 2 \text{[diagram 2]} + 2^2 \text{[diagram 3]} + 2^3 \text{[diagram 4]} + \dots =$$

$$= \sum_{\mu_1 \beta_1} \frac{|\varphi_{\mu \mu_1}(\beta_1)|^2}{\omega - E_{\mu_1} - \Omega_{\beta_1} - 2} \cdot \sum_{\mu_2 \beta_2} \frac{|\varphi_{\mu_1 \mu_2}(\beta_2)|^2}{\omega - E_{\mu_2} - \Omega_{\beta_1} - \Omega_{\beta_2}}. \quad (25)$$

Як видно з виразів (24) і (25), нижня і верхня оцінки МО двофононного наближення відрізняються лише множниками (1) і (2) біля перенормовуючого знаменник доданка. Отже, взявши середнє значення обох цих множників ($\frac{3}{2}$), отримується апроксимація двофононного МО

$$\tilde{M}_{\mu}^{(2)}(\omega) = \sum_{\mu_1 \beta_1} \frac{|\varphi_{\mu \mu_1}(\beta_1)|^2}{\omega - E_{\mu_1} - \Omega_{\beta_1} - \frac{3}{2}} \cdot \sum_{\mu_2 \beta_2} \frac{|\varphi_{\mu_1 \mu_2}(\beta_2)|^2}{\omega - E_{\mu_2} - \Omega_{\beta_1} - \Omega_{\beta_2}}. \quad (26)$$

З формули Пайнса (22) для нижньої оцінки МО n -фононного наближення видно, що множником біля перенормовуючого доданка є (1). Розрахунок показує, що для верхньої оцінки таким множником є n . Отже, апроксимуючим МО, що враховує n -фононні процеси є

$$\tilde{M}_{\mu}^{(n)}(\omega) = \sum_{\mu_1 \beta_1} \frac{|\varphi_{\mu \mu_1}(\beta_1)|^2}{\omega - E_{\mu_1} - \Omega_{\beta_1} - \frac{3}{2}} \cdot \sum_{\mu_2 \beta_2} \frac{|\varphi_{\mu_1 \mu_2}(\beta_2)|^2}{\omega - E_{\mu_2} - \Omega_{\beta_1} - \Omega_{\beta_2} - \dots}$$

$$\dots - \frac{N+1}{2} \sum_{\mu_n \beta_n} \frac{|\varphi_{\mu_{n-1} \mu_n}(\beta_n)|^2}{\omega - E_{\mu_n} - \sum_{i=1}^n \Omega_{\beta_i}}. \quad (27)$$

Оскільки отриманий МО враховує і міжрівневу взаємодію, і багатофононні процеси, то він дозволяє досліджувати перенормування електронних енергетичних рівнів і відповідних їм фононних повторень при різних силах електрон-фононного зв'язку.

Аналіз зсувів та фононних повторень електронних рівнів на прикладі квантових точок GaAs, CdSe, CuCl у склі

Розрахунок перенормованих взаємодією з фононами електронних спектрів на основі розвинутої теорії виконувався на прикладі напівпровідникових КТ GaAs, CdSe, CuCl, введених у скло.

Таблиця 1. Параметри кристалів.

середовище	U (меВ)	m_e (m_0)	ϵ_0	ϵ_∞	Ω_L (меВ)	Ω_T (меВ)
CdSe	1820	0,13	9,3	6,1	26,54	21,49
GaAs	2028	0,067	12,9	10,9	36,2	33,3
CuCl	1100	0,504	7,9	3,61	25,64	17,33

Вибір цих матеріалів зумовлений тим, що при цьому охоплюється широка область енергій зв'язку (від слабкої у GaAs до досить сильної у CuCl), та можливістю зіставлення теоретичних й експериментальних результатів з раманівського розсіяння у наногетеросистемах CdSe у склі. Крім того, перенормування основного електронного рівня у цих самих наносистемах вивчалось різними авторами іншими методами [4-5], що дає можливість зіставити і проаналізувати отримані результати.

Фізичні параметри наносистем, які використовуються при розрахунках, наведені у табл.1. За винятком глибин потенціальних ям, решта параметрів такі ж, як у роботі [8].

Перенормований взаємодією з обмеженими L та інтерфейсними I фононами електронний спектр СКТ у діелектричному середовищі згідно з теорією функцій Гріна [11] характеризується функцією густини

$$\rho_{nlm}(\omega) = -2\text{Im}G_{nlm}(\omega) = -2\text{Im}\{\omega - E_{n\ell} - M_{n\ell m}(\omega)\}^{-1}, \quad (28)$$

де, згідно з попереднім параграфом, апроксимуючий МО, що враховує багаторівневість системи і багатфононні процеси, має вигляд

$$\tilde{M}_{n\ell m}(\omega) = \sum_{\substack{p_1\ell_1m_1 \\ \lambda_1'\ell_1'm_1'}} \frac{|\Phi_{n\ell m}^{p_1\ell_1m_1}(\lambda_1'\ell_1'm_1')|^2}{\omega - E_{p_1\ell_1} - \Omega_{\lambda_1'\ell_1'}} - \dots - \frac{N+1}{2} \sum_{\substack{p_N\ell_Nm_N \\ \lambda_N'\ell_N'm_N'}} \frac{|\Phi_{n-1\ell_N-1m_N-1}^{p_N\ell_Nm_N}(\lambda_N'\ell_N'm_N')|^2}{\omega - E_{p_N\ell_N} - \sum_{i=1}^N \Omega_{\lambda_i'\ell_i'}} - \dots - \quad (29)$$

Тут компактне позначення попереднього параграфа деталізоване:

$$\Phi_{\mu_1\mu_2}(\beta_1) = \Phi_{111}^{n_2\ell_2m_2}(\lambda_1'\ell_1'm_1').$$

Оскільки при $T=0$ К взаємодія електрона відбувається лише у процесах випромінювання L -та I -фононів, то у МО (29) не виникає скінченної величини уявної частини при будь-яких енергіях ω , а тому спектральні лінії, що задаються формулою (28), мають δ -подібну форму. Внаслідок цього, положення цих ліній у шкалі енергій ω визначається дисперсійним рівнянням (ДР)

$$\omega - E_{n\ell} - \tilde{M}_{n\ell m}(\omega) = 0, \quad (30)$$

розв'язки якого задають перенормований спектр системи, тобто положення електронних рівнів $\tilde{E}_{n\ell m}$ і відповідних N_L -х L -фононних $\tilde{E}_{n\ell m}^{N_L}$, N_I -х I -фононних та комбінованих $\tilde{E}_{n\ell m}^{N_L, N_I}$ фононних повторень.

Зсуви електронних рівнів внаслідок електрон-фононної взаємодії визначаються величинами

$$\Delta_{n\ell m} = \tilde{E}_{n\ell m} - E_{n\ell}, \quad (31)$$

і, оскільки взаємодія (як видно з МО) знімає виродження за орбітальним квантовим числом ℓ , а залишає його за величиною квантового числа m , то з врахуванням електрон-фононної взаємодії кожен колишній ℓ -й електронний рівень розщеплюється на $\ell+1$ енергетичних рівнів.

Ще один загальний висновок полягає у тому, що, оскільки у сферично-симетричних станах ($\ell=m=0$) інтерфейсні фонони відсутні, а електрон у таких станах не взаємодіє з будь-якими I -фононами, що перебувають у інших станах (внаслідок симетрії функцій зв'язку), то біля електронних рівнів, що відповідають симетричним станам, не можуть утворюватися жодні I -фононні, а лише L -фононні повторення.

Перш ніж проаналізувати перенормований спектр конкретних наногетеросистем, зауважимо, що, оскільки КТ характеризуються скінченною глибиною потенціальних ям, то при розрахунку електронного МО підсумовування за квантовим числом p включає не лише дискретний спектр ($n=1, 2, \dots$), але й неперервний ($0 \leq k < \infty$), причому

$$\sum_k \Rightarrow \frac{\sqrt{2m_1\Omega}}{\hbar} \int_0^\infty dk, \quad \left(k = \frac{\sqrt{2m_1E}}{\hbar}, E > 0 \right). \quad (32)$$

Варто зауважити, що, хоча врахування електрон-фононної взаємодії через стани неперервного спектра значно збільшує числові розрахунки, однак воно необхідне, оскільки, як показують конкретні обчислення, незалежно від сили зв'язку, цей механізм дає не менше 10% вкладу в перенормовані параметри спектра.

Тепер проаналізуємо результати розрахунків перенормованого електронного спектра, виконані на основі МО (29) для КТ GaAs, CdSe, CuCl у склі з фізичними параметрами, наведеними у таблиці 1.

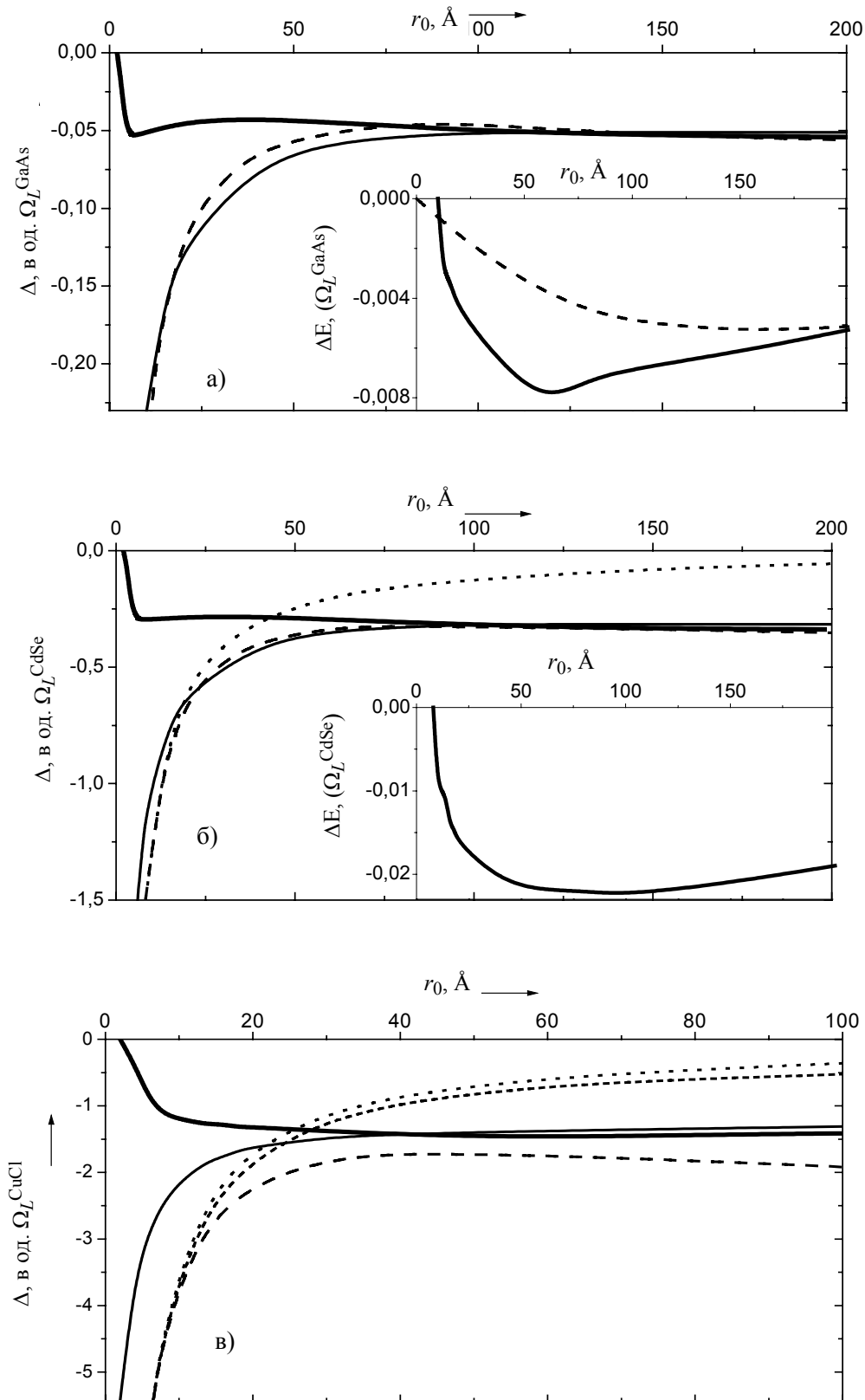


Рис.1. Залежність Δ від радіуса КТ GaAs (а); CdSe (б); CuCl (в). Результати розрахунку Δ у відповідних роботах зображені так: наші – суцільною жирною лінією ($U \neq \infty$) та суцільною тонкою лінією ($U \rightarrow \infty$); [8] – довгоштрихова лінія; [5] – короткоштрихова лінія; [8] – точкова лінія.

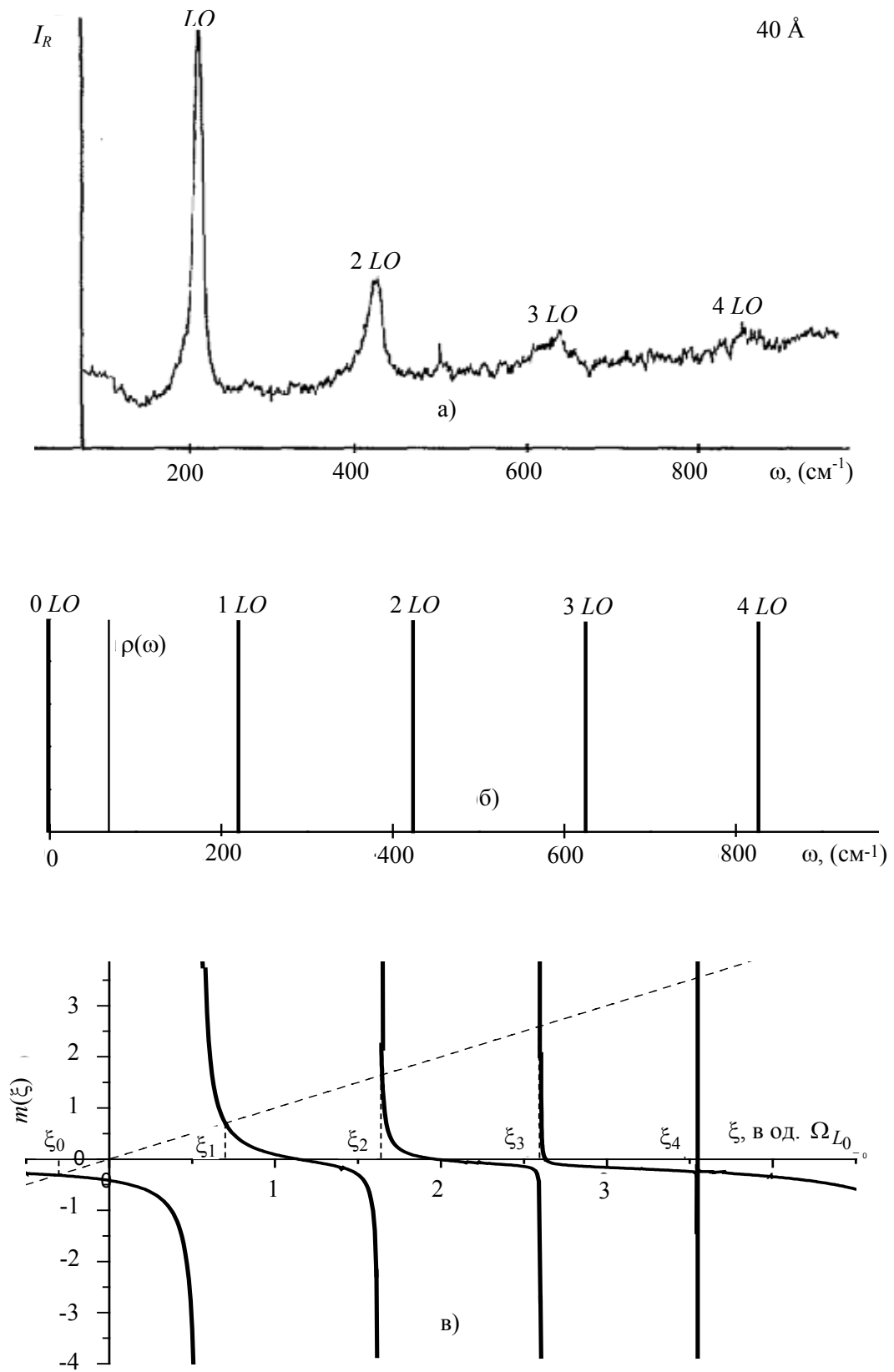


Рис.2. Залежність m (а), ρ (б) та інтенсивності раманівського розсіяння I_R (в) від частот при $r_0=40\text{\AA}$.

Результати розрахунків залежності зсувів (Δ_{100}) основних рівнів від радіусів всіх трьох типів КТ при скінченній і безмежній глибинах потенціальних ям наведені на рис. 1а, б, в жирними і тонкими суцільними лініями відповідно. Там же вказані залежності Δ_{100} від r_0 , знайдені методом унітарних перетворень Лі-Лоу-Пайнса у роботі [8] – довгоштрихові лінії, методом адіабатичного наближення [8] – короткоштрихові лінії.

З рис. 1а, б, в видно, що у моделі з безмежною глибиною потенціальної ями застосований нами метод розрахунку зсуву дає результати, близькі до методу Лі-Лоу-Пайнса при всіх розмірах КТ. Однак реальні КТ мають скінченну глибину потенціальних ям. Врахування цієї обставини суттєво змінює залежність зсуву від радіуса КТ. У такій моделі, на противагу попередній, як видно з рис. 1, зменшення радіуса КТ призводить не до збільшення, а до зменшення величини зсуву. Це обумовлено тим, що при зменшенні розміру КТ рівень виштовхується з ями, електрон делокалізується, а тому, незалежно від величини поля поляризації (яке обмежене розміром КТ), сила електрон-фононної взаємодії зменшується.

У квантових точках GaAs та CdSe електрон-фононний зв'язок досить слабкий, тому вклади I - та L -фононів у зсув можна вважати адитивними. Їх відносну роль добре видно з рис. 1а, б. У КТ CuCl зв'язок сильний і тому недоцільно виділяти парціальні вклади I - та L -фононів у загальний зсув електронного рівня.

Отриманий нами МО (29), який враховує багатогононні процеси, дозволяє розрахувати не лише перенормоване положення основного (безфононного) енергетичного рівня, але й положення фононних повторень. Результат розрахунку $\rho(\omega)$ та $M(\omega)$ стосовно основного електронного рівня та його фононних повторень для КТ CdSe у склі (при $r_0=40$ Å) наведено на рис. 2б, в. Там же (рис. 2а) наведено залежність інтенсивності раманівського розсіяння від частоти, отриману експериментально у роботі [3]. Як видно з рис. 2, розраховані положення L -фононних повторень у шкалі частот досить добре узгоджуються з положенням відповідних ліній раманівського експериментального спектра.

Загальний висновок такий. Розвинутий метод діаграмної техніки для функцій Гріна у формі безмежного ланцюгового інтегрального (сумарного) дробу дозволяє ефективно досліджувати багаторівневі електрон-фононні системи (зокрема КТ у середовищах). Встановлено, що при ма-

лих розмірах КТ у діелектричному середовищі, зменшення радіуса КТ призводить до зменшення величини зсуву основного рівня. Знайдені положення L -фононних повторень добре узгоджуються з експериментом із раманівського розсіяння.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Mori N, Ando T.* Electron-optical-phonon interaction in single and double hetero-structures // *Phys. Rev. B.* - 1989. - **40**, No9. - P.6175-6188.
2. *Hai G.Q., Peeters F.M., Devreese J.T., Wendle L.* Screening of the electron-phonon interaction in quasi-one dimensional semiconductor structures // *Phys. Rev. B.* - 1993. - **48**, No16. - P.12016-12022.
3. *Klein M., Huche F., Ricard D., Flytzanis C.* Size dependence of electron-phonon coupling in semiconductor nanospheres: The case of CdSe // *Phys. Rev. B.* - 1990. - **42**, No16. - P.11123-11133.
4. *Crus R.M., Teitsworth S.W., Strocia M.A.* Interface phonons in spherical GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum dots // *Phys. Rev. B.* - 1995. - **52**, No12. - P.1489-1496.
5. *Marini J.C., Srebe B., Kartheuser E.* Exciton-phonon interaction in CdSe and CuCl polar semiconductor nanospheres // *Phys. Rev. B.* - 1994. - **50**, No19. - P.14302.
6. *Ткач Н.В.* Электрон-фононное взаимодействие в сферических наногетероструктурах // *ФТТ.* - 1997. - **39**, 6. - P.1109-1113.
7. *Tkach M., Holovatsky V., Voitsehivska O., Min'kova M.* Exciton-phonon interaction in spherical nanohetero-system CdS/HgS/H₂O // *Phys. Stat. Sol.* - 1997. - **203**, No2. - P.373-386.
8. *Oshiro K., Akai K., Matsuura M.* Polaron in a spherical quantum dot embedded in a nonpolar matrix // *Phys. Rev. B.* - 1998. - **58**, No12. - P.7986-7993.
9. *Tkach M., Holovatsky V., Voitsehivska O., Mykhal'yova M., Fartushynsky R.* Electron-phonon interaction in Semiconductor Spherical Quantum Dot Embedded in a Semiconductor Medium (HgS/CdS) // *Phys. Stat. Sol. B.* - 2001. - **225**, No2. - P.331-342.
10. *Фурсов Ю.А.* Полярони. - М.: "Наука", 1975.
11. *Madelung O.* Semiconductors - Basic Data. Berlin: Springer, 1996. - P.247.
12. *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзелошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. - М.: Физматгиз, 1962.