

ВПЛИВ ЕЛЕКТРОН-ФОНОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ НА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА Н/П КВАНТОВОГО ДРОТУ В Н/П СЕРЕДОВИЩІ (HgS/CdS)

Досліджено механізми перенормування обмеженими (L) та інтерфейсними (I) фононами енергії основного стану електрона в напівпровідниковому циліндричному квантовому дроті (КД), розташованому в напівпровідниковому середовищі, на прикладі наносистеми HgS/CdS. Показано, що при досить великих розмірах квантового дроту зсув (Δ) основного рівня енергії в основному формується взаємодією електрона з обмеженими фононами дроту (L_0) та середовища (L_1). Внесок інтерфейсних фононів (I^+ , I^-) у величину Δ при малих розмірах квантового дроту істотно (на 1-2 порядки) перевищує внесок L -фононів. При всіх розмірах КД взаємодія з усіма фононами через стани неперервного спектра дає внесок у Δ в декілька разів менший, ніж взаємодія через стани дискретного спектра. Зі збільшенням радіуса КД внесок I -фононів спадає, а L -фононів – зростає, внаслідок чого зсув наближається до свого значення в масивному кристалі.

The renormalization of electron ground energy state due to the different types of interaction with confined (L) and interface (I) phonons in semiconductor cylindrical quantum wire (QW) embedded into semiconductor medium on the example of HgS/CdS nanosystem. At is shown that for the rather big sizes of QW the shift (Δ) of the ground energy level is mainly caused by the interaction between an electron and confined phonons of the wire (L_0) and the medium (L_1). The contribution of interface phonons (I^+ , I^-) into the shift magnitude is essentially bigger (one-two orders) than the contribution of L -phonons for the small sizes of quantum wire. For all sizes of QW the interaction with all phonons through the states of the continuous spectrum make a several times smaller contribution into shift Δ than the interaction through the states of discrete spectrum. When the QW radius increases the contribution of I -phonons decreases and L -phonons - becomes smaller, consequently the shift reaches its magnitude in massive crystal.

Вступ

Теорія електрон- та екситон-фононної взаємодії у низькорозмірних системах інтенсивно розвивається в останнє десятиріччя. Основними моделями фононних систем є ті чи інші різновиди двох макроскопічних (гідродинамічний континуум HC , діелектричний континуум DC) та напівмікроскопічної моделі Хуанга-Цу HZ . Остання модель найбільш точна, але досить складна, тому поширення набула модель DC , яка дає близькі результати до HZ , але менш складна. Для електронів, екситонів чи домішкових центрів у низькорозмірних системах використовується наближення ефективної маси та прямокутної потенціальної ями безмежної або скінченної глибини.

У межах таких підходів вивчався вплив фононів на спектр заряджених та нейтральних квазічастинок у квазідвовимірних квантових ямах

(КЯ) [1-3], квазіодновимірних квантових дротах (КД) [4-8] та у квазінульвимірних квантових точках (КТ) [9-13] різних просторових форм. Основна увага дослідників була спрямована на вивчення простих квантових ям, дротів і точок, хоча в останні роки з'явилися праці, в яких вивчається електрон-фононна взаємодія у багатошарових квантових ямах (MQW), багатошарових циліндричних КД [8] та багатошарових сферичних КТ [13].

Головними причинами математичних утруднень при розрахунках електрон-фононної взаємодії є багаторівневність (багатозонність) дискретного і наявність неперервного спектра електронів, а також існування в системі декількох гілок обмежених та інтерфейсних фононів. Застосовуване іноді наближення нескінченно глибокої потенціальної ями спрощує розрахунки, однак апіорі веде до

зменшення реального внеску інтерфейсних фононів, оскільки на межі середовищ їх потенціальне поле найбільше, а ймовірність перебування там електрона дорівнює нулеві внаслідок безмежної висоти потенціального бар'єра.

Роль різних фононних механізмів та збуджених станів дискретного і неперервного спектра електрона в перенормуванні його основного стану у квазидвовимірній КЯ GaAs/Al_xGa_{1-x}As детально досліджена в роботі [12]. У наближенні ефективної маси і скінченної глибини потенціальної ями для електрона та в моделі DC для обмежених та інтерфейсних фононів у роботі [12] показано, що зсув дна зони та ефективна маса електрона плавно змінюються у межах між відповідними тривимірними аналогами КЯ та середовища в широкому інтервалі змін розмірів КЯ.

Детальний аналіз усіх механізмів перенормування фононами електронного спектра у сферичній н/п КТ у н/п середовищі виконаний у роботі [14], де, зокрема, була виявлена суттєва роль міжрівневої взаємодії.

У роботах [15, 16] досліджувалось перенормування спектра електрона взаємодією з L- та I-фононами в циліндричному КД з урахуванням лише внутрізонної взаємодії.

Мета цієї роботи – детальне дослідження всіх фононних механізмів перенормування спектра електронів у напівпровідникових циліндричних КД, розташованих у напівпровідниковому середовищі. Розрахунок енергетичного зсуву основного рівня буде виконаний на прикладі системи HgS/CdS у моделі DC для обмежених (L) та інтерфейсних (I) фононів і в наближенні ефективної маси та скінченної глибини потенціальної ями для електронів. Застосований апарат функцій Гріна на базі гамільтоніана системи в зображенні вторинного квантування дозволяє врахувати міжзонну взаємодію з фононами як через дискретний, так і через неперервний спектр електронів.

1. Гамільтоніан електрон-фононної системи циліндричного н/п КД, розташованого у н/п середовищі

Будемо вивчати перенормування електронного спектра електрон-фононною взаємодією для тієї самої системи, що й у [15, 16], тобто в н/п циліндричному КД радіусом ρ₀, який розташований у масивному н/п середовищі (рис.1 із роботи [15]). Ця система описується гамільтоніаном

$$H = H_e + H_{ph} + H_{int}. \quad (1)$$

Складові H_e, H_{ph} та H_{int} отримано в роботі [15]

(див. формули (16), (23) та (24), відповідно).

У наближенні ефективної маси і прямокутного скінченного потенціалу для електрона стаціонарне рівняння Шредінгера розв'язується точно. У результаті отримується повний ортонормований набір хвильових функцій

$$|pmk\rangle = \psi_{pmk} = \frac{\exp[i(m\varphi + kz)]}{\rho_0 \sqrt{2\pi L}} R_{pm}(\rho). \quad (2)$$

Тут p=n, k_⊥, n=1, 2, 3,... – радіальне квантове число, що характеризує стани електрона в дискретній частині спектра, k_⊥ – радіальний квазіімпульс, що характеризує стани електрона у неперервному спектрі, а радіальні хвильові функції R_{nm}(ρ) стаціонарних станів дискретного спектра і дисперсійні рівняння для знаходження енергетичних рівнів (E_{nm}) наведено в роботі [15] (вирази (4) і (13)). Для зручності доцільно ввести перепозначення A_{nm}⁰ ≡ A_m, A_{nm}¹ ≡ C_m (формули (12), (11) з [15]), де A_{nm}¹ = J_m(χ_{nm}⁰ρ₀)/K_m(χ_{nm}¹ρ₀). Далі у виразі (2)

$$R_{pm}(\rho) = \rho^{-1/2} \begin{cases} \chi_m^0(k_{\perp}\rho), & \rho \leq \rho_0, \\ \chi_m^1(k_{\perp}\rho), & \rho \geq \rho_0, \end{cases} \quad (3)$$

– радіальні хвильові функції стаціонарних станів неперервного спектра, енергія якого пов'язана з величиною k_⊥ співвідношенням

$$E_{k_{\perp}} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_1}, \quad (4)$$

де k_⊥ відіграє роль радіального квазіімпульсу, а m₁ – ефективна маса електрона у середовищі "1" (CdS).

Тут

$$\chi_m^0(k_{\perp}\rho) = A_m(k_{\perp}\rho_0) J_m(\tilde{k}_{\perp}\rho),$$

$$\tilde{k}_{\perp} = \sqrt{\frac{m_0}{m_1} k_{\perp}^2 + \frac{2m_0 U_0}{\hbar^2}}, \quad (5)$$

$$\chi_m^1(k_{\perp}\rho) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\chi_m^{(-)}(k_{\perp}\rho) - S(k_{\perp}) \chi_m^{(+)}(k_{\perp}\rho) \right] \quad (6)$$

$$A_m(k_{\perp}\rho_0) = \frac{\chi_m^{(-)}(k_{\perp}\rho_0) - S(k_{\perp}) \chi_m^{(+)}(k_{\perp}\rho_0)}{\sqrt{2\pi} J_m(k_{\perp}\rho_0)}, \quad (7)$$

$$\chi_m^{(\pm)}(x) = \pm i \sqrt{\frac{\pi x}{2}} H_m^{(\pm)}(x),$$

$$H_m^{(\pm)}(x) = J_m(x) \pm i N_m(x), \quad (8)$$

де $H_m^{(\pm)}$, J_m , N_m – функції Ханкеля, Бесселя, Неймана відповідно, $S(k_{\perp})$ – S -матриця розсіяння,

$$S(k_{\perp}\rho_0) = \left\{ m_1 \left[\chi_m^{(0)}(k_{\perp}\rho) \right] \chi_m^{(-)}(k_{\perp}\rho) - m_0 \times \right. \\ \left. \times \chi_m^{(0)}(k_{\perp}\rho) \left[\chi_m^{(-)}(k_{\perp}\rho) \right] \right\} / \left\{ m_1 \left[\chi_m^{(0)}(k_{\perp}\rho) \right] \times \right. \\ \left. \times \chi_m^{(+)}(k_{\perp}\rho) - m_0 \chi_m^{(0)}(k_{\perp}\rho) \left[\chi_m^{(+)}(k_{\perp}\rho) \right] \right\} \Big|_{\rho=\rho_0}, \quad (9)$$

m_j – ефективна маса електрона в j -му середовищі ($j=0, 1$).

Гамільтоніан електрон-фононої взаємодії в зображенні вторинного квантування за всіма змінними системи знаходиться через потенціал поля поляризації на повній ортонормованій системі хвильових функцій (2) і має вигляд

$$\hat{H}_{\text{int}} = \hat{H}_{e-L} + \hat{H}_{e-I}. \quad (10)$$

Тут гамільтоніан взаємодії електрона з обмеженими фононами

$$\hat{H}_{e-L} = \sum_{j=0}^1 \sum_{p_1 p_2} \sum_{m q s_j} F_{p_1 m_1 k_1}^{p_2, m_1+m, k_1+q}(m, q, s_j) \times \\ \times \bar{a}_{p_2, m_1+m, k_1+q}^+ \bar{a}_{p_1 m_1 k_1} (\bar{b}_{m q j}^+ + \bar{b}_{-m, -q, j}) \quad (11)$$

містить функції зв'язку $F_{p_1 m_1 k_1}^{p_2, m_1+m, k_1+q}(m, q, s_0)$ (вираз (26) із [15]) та

$$F_{p_1 m_1 k_1}^{p_2, m_1+m, k_1+q}(m, q, s_1) = \\ = \alpha_1 \lim_{\rho_1 \rightarrow \infty} \left\{ A_{p_1 m_1}^1 A_{p_2, m_1+m}^1 \times \right. \\ \times B_{m s_1} \int_{\rho_0}^{\rho_1} \left[J_m \left(\frac{\lambda_{s_1} \rho}{\rho_0} \right) N_m \left(\frac{\lambda_{s_1} \rho_1}{\rho_0} \right) - \right. \\ \left. - J_m \left(\frac{\lambda_{s_1} \rho_1}{\rho_0} \right) N_m \left(\frac{\lambda_{s_1} \rho}{\rho_0} \right) \right] \times \\ \left. \times \rho K_{m_1} \left(\chi_{p_1 m_1}^1 \rho \right) K_{m_2} \left(\chi_{p_2, m_1+m}^1 \rho \right) d\rho \right\}, \quad (12)$$

де x_{ms_0} – s_0 -й нуль функції Бесселя m -го порядку, тобто $J_m(x_{ms_0}) = 0$,

$$\alpha_j = \frac{-e}{\pi L} \sqrt{\frac{\Omega_{Lj}}{2L} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty j}} - \frac{1}{\varepsilon_{0j}} \right)} \quad (j=0, 1), \\ B_{m s_1} = \frac{\pi \lambda_{s_1}}{2 \sqrt{1 - J_m^2(\lambda_{s_1} \rho_1 / \rho_0) / J_m^2(\lambda_{s_1})}}, \quad (13)$$

λ_{s_1} – s_1 -й корінь рівняння

$$J_m(\lambda) N_m(\lambda \rho_1 / \rho_0) - J_m(\lambda \rho_1 / \rho_0) N_m(\lambda) = 0.$$

Зауважимо, що радіус ρ_1 умовного циліндра введено для зручності практичних розрахунків взаємодії електрона з обмеженими фононами зовнішнього середовища.

Гамільтоніан взаємодії електрона з інтерфейсними фононами

$$\hat{H}_{e-I} = \sum_{p_1 p_2} \sum_{m q s} F_{p_1 m_1 k_1}^{p_2, m_1+m, k_1+q}(m, q, s) \times \\ \times \bar{a}_{p_2, m_1+m, k_1+q}^+ \bar{a}_{p_1 m_1 k_1} (\bar{b}_{m q s}^+ + \bar{b}_{-m, -q, s}) \quad (14)$$

містить функції зв'язку

$$F_{p_1 m_1 k_1}^{p_2, m_1+m, k_1+q}(m, q, s) = \beta_{m q s} \left[A_{p_1 m_1}^0 A_{p_2, m_1+m}^0 \times \right. \\ \times \int_0^{\rho_0} \rho J_{m_1} \left(\chi_{p_1 m_1}^0 \rho \right) J_m(q\rho) J_{m_1+m} \left(\chi_{p_2, m_1+m}^0 \rho \right) d\rho + \\ + A_{p_1 m_1}^1 A_{p_2, m_1+m}^1 \int_{\rho_0}^{\infty} \rho K_{m_1} \left(\chi_{p_1 m_1}^1 \rho \right) K_m(q\rho) \times \\ \left. \times K_{m_1+m} \left(\chi_{p_2, m_1+m}^1 \rho \right) d\rho \right]. \quad (15)$$

Отже, гамільтоніан електрон-фононої системи в циліндричному квантовому дроті, розташованому в зовнішньому середовищі, цілком визначений,

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_L + \hat{H}_I + \hat{H}_{e-L} + \hat{H}_{e-I}, \quad (16)$$

що дозволяє застосувати метод функцій Гріна для знаходження перенормованого фононами електронного спектра.

2. Перенормування L - та I -фононами електронного спектра КД з урахуванням дискретних і континуальних станів

Унаслідок скінченної глибини потенціальної ями електронний спектр КД є суттєво багатозонним і завжди містить континуальну частину. Отже, для розрахунку його перенормування взаємодією електрона з фононами зручно використовувати математичний апарат функцій Гріна.

Як відомо [17], у випадку багатозонної системи електронів, які взаємодіють із фононами й описуються гамільтоніаном (16), при $T=0$ К Фур'є-образ електронної функції Гріна пов'язаний із масовим оператором рівнянням Дайсона

$$G_{\mu\mu'}(k, \omega) = G_{\mu}^0(k, \omega) \delta_{\mu\mu'} + G_{\mu}^0(k, \omega) \times \\ \times \sum_{\mu_1} M_{\mu\mu_1}(k, \omega) G_{\mu_1\mu'}(k, \omega), \quad (17)$$

$$G_{\mu}^0(k, \omega) = \{\omega - E_{\mu}(k) + i\eta\}^{-1}, \quad (18)$$

а $\mu = \{pm\}$ – сукупність усіх дискретних квантових чисел, що характеризують електронний стан.

Із системи рівнянь (17) знаходиться точний розв'язок для діагональних Фур'є-образів функцій Гріна

$$G_{\mu\mu}(k, \omega) = \{\omega - E_{\mu}(k) - M_{\mu\mu}(k, \omega) - d_{\mu\mu}^{-1}(k, \omega) \times \sum_{\mu_1 \neq \mu}^{\tau} (-1)^{\mu+\mu_1} M_{\mu\mu_1}(k, \omega) d_{\mu_1\mu}(k, \omega)\}^{-1}, \quad (19)$$

де $d_{\mu\mu}(k, \omega)$ – відповідний визначник, а τ – кількість усіх зон у системі.

Якщо недіагональні складові $M_{\mu\mu'}(k, \omega)$ містять малий параметр (його роль виконують відповідні функції зв'язку), то за умови, що останній доданок у виразі (19) значно менший ніж $M_{\mu\mu}(k, \omega)$, для $G_{\mu\mu}(k, \omega)$ отримується

$$G_{\mu\mu}(k, \omega) = \{\omega - E_{\mu}(k) - M_{\mu\mu}(k, \omega)\}^{-1}, \quad (20)$$

де масовий оператор $M_{\mu\mu}(k, \omega)$ визначений діаграмним зображенням [18].

У випадку слабкої електрон-фононої взаємодії (яка реалізується у досліджуваній далі гетеросистемі β -HgS/CdS), для системи з гамільтоніаном (16) отримується масовий оператор, який визначає перенормовану енергію основного стану

$$M(k, \omega) = M_L(k, \omega) + M_I(k, \omega). \quad (21)$$

Тут

$$M_L(k, \omega) = M_{Ld}^{(0)}(k, \omega) + M_{Lc}^{(0)}(k, \omega) + M_{Ld}^{(1)}(k, \omega) + M_{Lc}^{(1)}(k, \omega) \quad (22)$$

– доданки масового оператора, які описують внески в перенормовану енергію основної зони від взаємодії обмежених фононів з електроном у дискретних станах $(M_{Ld}^{(0)})$ і в станах неперервного спектра $(M_{Lc}^{(0)})$, та від взаємодії напівобмежених фононів з електроном у дискретних станах $(M_{Ld}^{(1)})$ і в станах неперервного спектра $(M_{Lc}^{(1)})$ (a_j – стала ґратки j -го середовища),

$$M_I(\omega) = M_{I^+d}(\omega) + M_{I^+c}(\omega) + M_{I^-d}(\omega) + M_{I^-c}(\omega) \quad (23)$$

– доданки масового оператора, які описують внески в перенормування енергії основної зони від взаємодії інтерфейсних (I^{\pm}) фононів з електроном у дискретних (d) та неперервних (c) станах.

Перенормована фононами енергія (\tilde{E}_{10}) основного електронного рівня ($k=0$) визначається з дисперсійного рівняння

$$\omega - \tilde{E}_{10} - M(\omega) = 0. \quad (24)$$

Величину \tilde{E}_{10} доцільно виразити через енергію дна основної зони E_{10} і повний зсув (Δ) основного рівня,

$$\tilde{E}_{10} = E_{10} + \Delta. \quad (25)$$

З урахуванням структури масового оператора (21) стає очевидним, що повний зсув доцільно подати у вигляді суми парціальних зсувів

$$\Delta = \Delta_{Ld}^{(0)} + \Delta_{Lc}^{(0)} + \Delta_{Ld}^{(1)} + \Delta_{Lc}^{(1)} + \Delta_{I^+d} + \Delta_{I^+c} + \Delta_{I^-d} + \Delta_{I^-c}, \quad (26)$$

які зумовлені відповідними (зрозумілими з попередніх позначень) механізмами електрон-фононої взаємодії.

3. Аналіз механізмів формування зсуву основного електронного рівня в наногетеросистемі HgS/CdS

Дослідимо механізми формування L - та I -фононами зсуву основного рівня електрона у циліндричному напівпровідниковому КД, розташованому в напівпровідниковому середовищі, на прикладі наногетеросистеми HgS/CdS.

Одразу ж необхідно зауважити, що оскільки при $T=0$ К у системі існують лише віртуальні фонони, то їхня взаємодія з електроном відбувається виключно у процесах випромінювання, а тому основний стан зміщується тільки у напрямку менших енергій, залишаючись при цьому стаціонарним (затухання відсутнє).

На рис. 1а,б,в зображено картину формування парціальних зсувів основного електронного рівня обмеженими фононами внутрішнього (Δ_{Ld}^0) і зовнішнього (Δ_{Ld}^1) середовищ у залежності від розміру КД. Радіус КД (ρ_0) подається в безрозмірних числах $(n_0 = \frac{r_0}{a_{HgS}})$ моношарів HgS. Величини зсувів подаються в безрозмірних одиницях відносно енергії оптичних фононів (Ω_{L0}) масивного кристала HgS.

З рис. 1а,б,в видно, що, як тільки у квантовій ямі з'явився основний рівень ($k=0$) найнижчої енергетичної зони ($n_p=1, m=0$), то зсув її дна формується обмеженими фононами обох середовищ через внутрішню взаємодію та через взаємодію

між основною зоною та континуумом станів, що описуються радіальним квазіімпульсом k_{\perp} . З рис. 1а видно, що зі збільшенням радіуса (n_0) КД внесок внутрізонної взаємодії в абсолютну величину Δ_{Ld}^0 швидко збільшується, досягає максимального значення (при $n_0 \approx 10$), а потім повільно зменшується. Зі збільшенням розміру КД у потенціальній ямі з'являються зони, що відповідають більшим значенням квантових чисел n_p і m , кінематична взаємодія з якими через L_0 -фонони формує відповідні парціальні внески у Δ_{Ld}^0 , причому залежність цих внесків від n_0 якісно однакова – після появи кожної нової зони зі збільшенням n_0 її внесок у абсолютну величину Δ_{Ld}^0 спочатку повільно збільшується, досягає певного максимуму, а потім повільно зменшується. Внаслідок великої глибини потенціальної ями HgS навіть мале збільшення розмірів КД приводить до швидкого збільшення кількості зон у ямі. З цієї причини конфігураційна взаємодія електрона в основному стані через L_0 -фонони зі станами, що відповідають дискретному спектру електрона при $k=0$, приводить до того, що зі збільшенням n_0 їх сумарний внесок у абсолютну величину Δ_{Ld}^0 збільшується і має досить плавний характер з добре вираженим мінімумом при малих значеннях n_0 і з повільною тенденцією до насичення при великих значеннях n_0 (рис. 1а).

На рис. 1б зображено залежність парціального зсуву Δ_{Ld}^1 від радіуса (n_0) КД. З рисунка видно, що величина Δ_{Ld}^1 значна лише при малих розмірах КД. Це зрозуміло, оскільки лише в таких умовах електрон з великою ймовірністю проникає в середовище-бар'єр CdS, внаслідок чого суттєво взаємодіє з L_1 -фононами цього середовища.

На кривій Δ_{Ld}^1 виділяються три гострих мінімуми, сформовані взаємодією електрона з L_1 -фононами внутрізонною (10) і через найнижчі збуджені зони (11, 12). При збільшенні n_0 вищі зони дають дуже малі внески у Δ_{Ld}^1 і тому їх вклади непомітні на кривій Δ_{Ld}^1 . Оскільки при збільшенні n_0 електрон все інтенсивніше "виштовхується" з бар'єра в яму, внаслідок чого його взаємодія з L_1 -фононами в усіх станах зменшується, то при цьому величина Δ_{Ld}^1 швидко прямує до нуля.

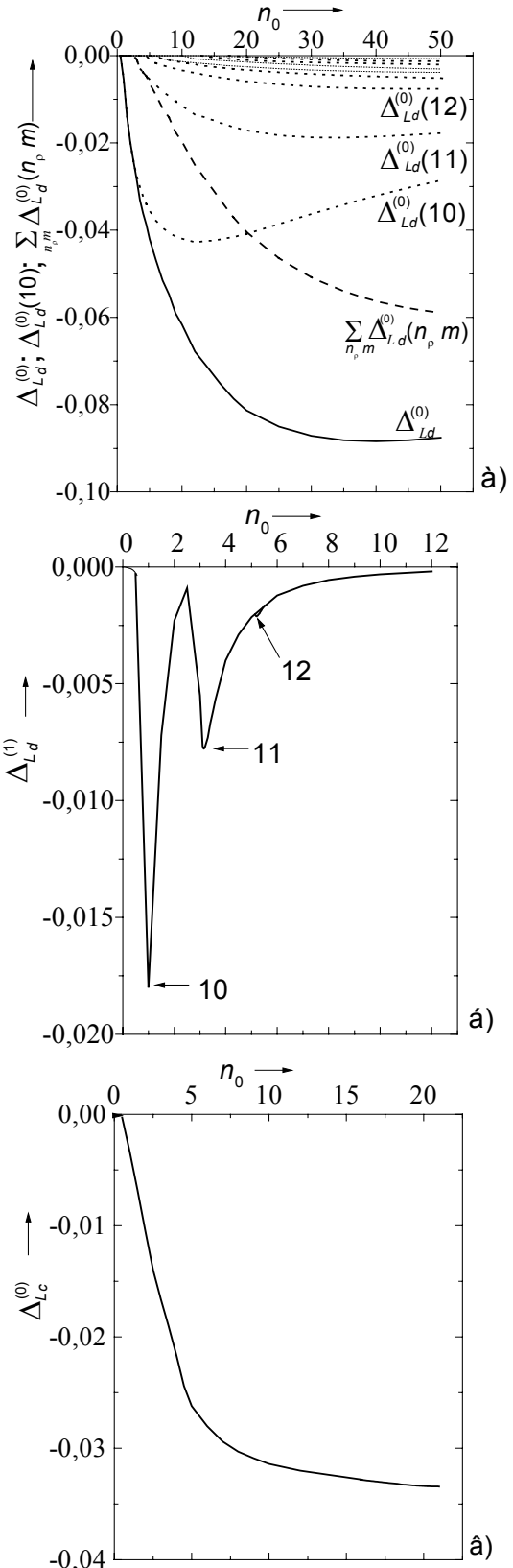


Рис.1. Залежності парціальних зсувів від розміру КД (n_0), сформованих L_0 (а)- і L_1 (б)-фононами через стани дискретного спектра, та L_0 -фононами (в) через континуум.

На рис. 1в наведено залежність від розмірів КД парціального зсуву (Δ_{Lc}^0), зумовленого взаємодією електрона в основному стані з L_0 -фононами через континуальні стани. З рис. 1в видно, що зі збільшенням n_0 величина Δ_{Lc}^0 швидко зростає, а потім виходить на насичення. Це зрозуміло, оскільки при малих розмірах КД електрон із великою ймовірністю перебуває в середовищі бар'єра і тому з напівобмеженими (L_1) фононами взаємодіє сильніше, ніж з обмеженими (L_0) фононами КД. Однак незначне збільшення n_0 приводить до швидкої локалізації електрона в межах КД, а тому подальше збільшення n_0 практично не впливає на Δ_{Lc}^0 . З цих самих міркувань ясно, що зсув Δ_{Lc}^1 , зумовлений L_1 -фононами, суттєвий лише при дуже малих величинах n_0 , де застосовність використаної моделі вже сумнівна. Зі збільшенням n_0 величина Δ_{Lc}^1 повинна швидко зменшуватися, як і у випадку КТ, тому враховувати цей механізм недоцільно.

На рис. 2а, 2б, 2в зображено картину формування парціальних зсувів основного рівня взаємодією електрона з інтерфейсними фононами через стани дискретного ($\Delta_{I^\pm}^d$) та неперервного ($\Delta_{I^\pm}^c$) спектра. З рисунка видно, що парціальні зсуви $\Delta_{I^+}^d$ та $\Delta_{I^-}^d$, зумовлені наявністю станів дискретного (d) спектра, значно менші за відповідні зсуви, зумовлені внутрізонною взаємодією електрона з фононами. Хоча зі збільшенням розмірів КД кількість збуджених зон зростає, але взаємодія з кожною з них при цьому зменшується, так що $|\Delta_{I^\pm}^d|$, досягнувши максимальних значень в околі $n_0 \sim 2$ для I^+ і $n_0 \sim 7$ для I^- , далі повільно спадають до нуля при збільшенні n_0 . При всіх розмірах КД величина $|\Delta_{I^+}^d|$ на порядок перевищує величину $|\Delta_{I^-}^d|$.

Коли радіус КД збільшується і стає таким, що в ямі виникає основний стан дискретного спектра, електрон у цьому стані взаємодіє з інтерфейсними фононами через усі стани континуального спектра, внаслідок чого формуються парціальні зсуви $\Delta_{I^+}^c$ і $\Delta_{I^-}^c$.

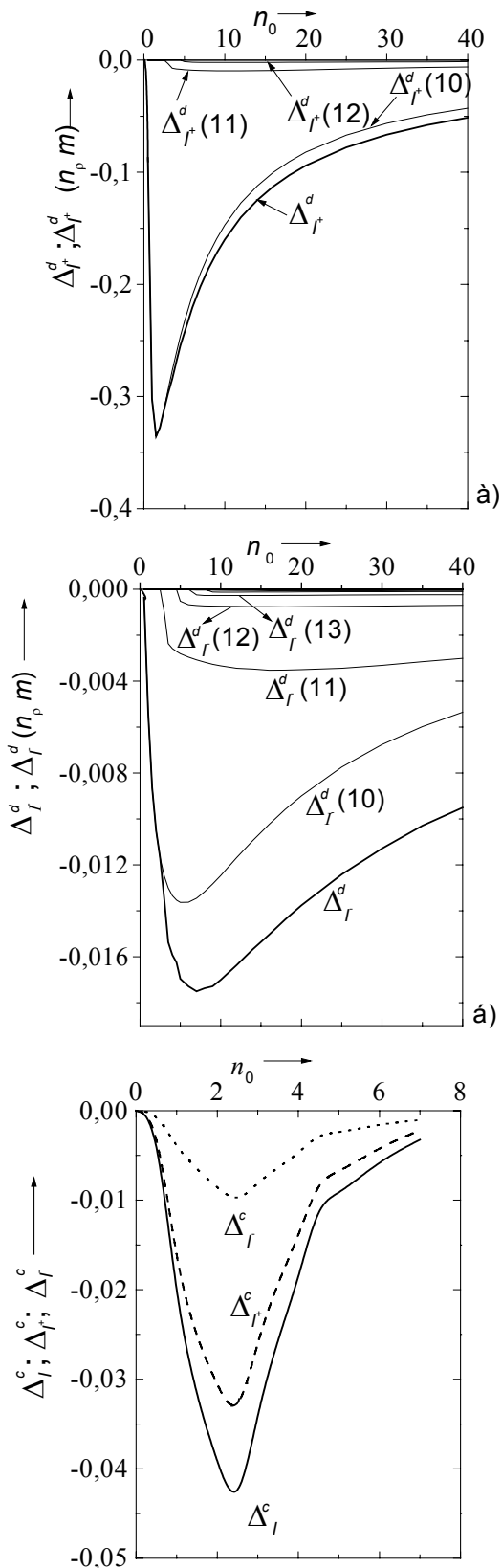


Рис.2. Залежності парціальних зсувів від розміру КД (n_0), зумовлених Γ^+ (а)- та Γ^- (б)-фононами через стани дискретного спектра, та I -фононами (в) через континуум.

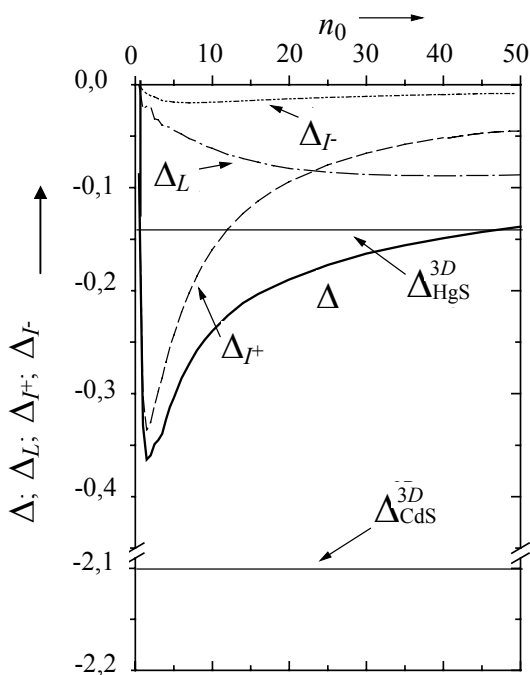


Рис.3. Залежності повного і парціальних зсувів від радіуса КД

Як видно з рис.2в, залежність обох цих величин від n_0 якісно однакова, а кількісно $|\Delta_{I^+}^-|$ переважає $|\Delta_{I^-}^-|$ у декілька разів при всіх значеннях n_0 . Причина різких мінімумів у кривих $\Delta_{I^\pm}^c$ полягає в тому, що величина взаємодії електрона з інтерфейсними фононами пропорційна густині ймовірності місцезнаходження електрона $w_m(\rho)$ в околі поверхні поділу середовищ ($\rho \sim \rho_0 \pm \delta$), де потенціал I -фононного поля має максимальну величину. Як видно з рис.2 роботи [16], при збільшенні n_0 в інтервалі (1÷20), величина $w_m(\rho) = n|\psi_m|^2$ у δ -околі ρ_0 спочатку зростає (до $n_0 \sim 5$), внаслідок чого збільшується взаємодія з I^\pm -фононами, а отже й $|\Delta_{I^\pm}^-|$. З подальшим зростанням n_0 $w_m(\rho)$ у δ -околі ρ_0 лише зменшується, тобто зменшуються і взаємодія, і $|\Delta_{I^\pm}^-|$.

На рис.3 зображено залежності від радіуса n_0 КД повного (Δ) та парціальних (Δ_L і Δ_I) зсувів, зумовлених взаємодією електрона з обмеженими (L) та інтерфейсними (I) фононами. Там само, для порівняння, наведено парціальні зсуви Δ_L (10) і

Δ_I (10), спричинені внутрізонною взаємодією з L_0^- , L_1^- , I^+ , I^- -фононами, та зсуви основного рівня електрона в масивних кристалах HgS (Δ_{HgS}^{3D}) і CdS (Δ_{CdS}^{3D}).

Внутрізонна взаємодія електрона з L_0^- , L_1^- , I^+ та I^- -фононами майже повністю формує зсув основного рівня лише при таких розмірах КД, при яких у ямі ще немає збудженого стану, а основний стан проявляється у вигляді різкого мінімуму $|10\rangle$ на кривій Δ . Для розглянутих досить малих розмірів КД величина Δ переважає відповідну величину зсуву в масивному кристалі HgS ($\Delta_{\text{HgS}}^{3D} \approx 0,137\Omega_{\text{HgS}}$), але вона менша, ніж величина зсуву в масивному кристалі CdS ($\Delta_{\text{CdS}}^{3D} = 1,02\Omega_{\text{CdS}}$). Зауважимо, що, хоча при гранично малих розмірах КД наближення ефективної маси та модель діелектричного континууму втрачають строгий сенс, загальна поведінка Δ , як функції n_0 , залишається цілком фізичною.

При $n_0 \leq 15$ внесок у зсув основного рівня від взаємодії з I -фононами перевищує $|\Delta_L|$, для $n_0 \sim 20$ ці внески порівнянні, а при $n_0 \geq 25$ навпаки, $|\Delta_L|$ перевищує $|\Delta_I|$.

Взаємодія електрона з I -фононами зі збільшенням n_0 спочатку зростає, при $n_0 \sim 3$ $|\Delta_I|$ досягає максимального значення, яке значно перевищує $|\Delta_L|$. У результаті повний зсув Δ при дуже малих розмірах КД практично повністю формується взаємодією електрона з I -фононами. Поясненням цьому служить істотна роль поверхні розділу середовищ та пов'язаних з нею ефектів при таких незначних радіусах КД ($n_0 \rightarrow 0$). При великих значеннях n_0 Δ наближається, як і повинно бути, до Δ_{HgS}^{3D} .

Нарешті, з рис.3 випливає головний висновок. В області нанорозмірних КД зсув основного рівня електрона формується взаємодією цієї квазічастинки з L - та I -фононами за участю всіх станів дискретного й неперервного спектрів (при $n_0 \geq 10$). Цей зсув при збільшенні n_0 усе слабше залежить від розміру КД і наближається до величини зсуву основного рівня в масивному кристалі (HgS), з якого утворено КД.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Zhu B., Huang K.* Long-wavelength optic vibrations in a superlattice // *Phys. Rev. B.* - 1988. - **38.** - No.3. - P. 2183 - 2186.
2. *Mori N., Ando T.* Electron- optical- phonon interaction in single and double heterostructures // *Phys. Rev. B.* - 1989. - **40.** - No.9. - P. 6175 - 6188.
3. *Hai G.O., Peeters F.M., Devreese J.T., Wendler L.* Screening of the electron- phonon interaction in quasi-one dimensional semiconductor structures // *Phys. Rev. B.* - 1993. - **48.** - No.16. - P. 12016 - 12022.
4. *Stroscio M.A., Kim K.W., Littlejohn M.A., Chuang H.* Polarization eigenvectors of surface-optical phonon modes in a rectangular quantum wire // *Phys. Rev. B.* - 1990. - **42.** - No.2. - P. 1488 - 1491.
5. *Knipp P.A., Reineke T.L.* Classical interface modes of quantum dots // *Phys. Rev. B.* - 1992. - **46.** - P. 10310 - 10320.
6. *Ercelebi A., Senger R.T.* Ground-state description of quasi-one-dimensional polarons with arbitrary electron-phonon coupling strength // *Phys. Rev. B.* - 1996. - **53.** - No.16. - P. 11008 - 11015.
7. *Tanatar B., Guven K., Bennett C.R., Constantinou N.C.* Screening effects on the confined and interface polarons in cylindrical quantum wires // *Phys. Rev. B.* - 1996. - **54.** - No.16. - P. 10866 - 10870.
8. *Ткач М.В.* Електрон-фононна взаємодія в складних напівпровідникових квантових дротах // *Журнал фізичних досліджень.* - 1999. - **3.** - № 3. - P. 377 - 387.
9. *Wang X.F., Lei X.L.* Polar-optic phonons and high-field electron transport in cylindrical GaAs/AlAs quantum wires // *Phys. Rev. B.* - 1994. - **49.** - No. 7. - P. 4780 - 4789.
10. *Klein M.C., Hache F., Ricard D., Flytzanis C.* Size dependence of electron-phonon coupling in semiconductor nanospheres. The case of CdSe // *Phys. Rev. B.* - 1990. - **42.** - No. 17. - P. 11123 - 11133.
11. *Nomura S., Kobayashi T.* Exciton-LO-phonon couplings in spherical semiconductor microcrystallites // *Phys. Rev. B.* - 1992. - **45.** - No. 3. - P. 1305 - 1316.
12. *Marini J.C., Stebe B., Kartheuser E.* Exciton-phonon interaction in CdSe and CuCl polar semiconductor nanospheres // *Phys. Rev. B.* - 1994. - **50.** - No. 19. - P. 14302 - 14308.
13. *Ткач Н.В.* Електрон-фононное взаимодействие в сферических многослойных наногетероструктурах // *ФТТ.* - 1997. - **39.** - № 6. - С. 1109 - 1113.
14. *Ткач М., Holovatsky V., Voitsekhivska O., Mykhalyyova M., Fartushynsky R.* Electron-phonon interaction in semiconductor spherical quantum dot embedded into semiconductor medium (HgS/CdS) // *Phys. Stat. Sol.* - 2001. - **225.** - No. 2. - P. 331 - 342.
15. *Ткач М.В., Жаркої В.П., Маханець О.М.* Електрон-фононна взаємодія в циліндричному квантовому дроті. // *УФЖ.* - 1997. - **42.** - № 4. - С. 493 - 498.
16. *Жаркої В.П., Маханець О.М., Ткач М.В.* Вплив L- та I-фононів на спектр електрона в циліндричному квантовому дроті з потенціальною ямою скінченної глибини // *УФЖ.* - 1999. - **44.** - № 3. - С. 402 - 406.
17. *Агранович В.М.* Теория экситонов. - М.: Наука, 1968. - 384 с.
18. *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. - М.: Физматгиз, 1962. - 442 с.