УДК 535.51, 537.8

©2011 р. М.В. Ткач, Р.Б. Фартушинський

Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича, Чернівці

ПЕРЕНОРМУВАННЯ СПЕКТРУ ЕКСИТОНА ВНАСЛІДОК ВЗАЄМОДІЇ З ОПТИЧНИМИ ФОНОНАМИ У ВІДКРИТИХ СКТ

Побудована теорія перенормування резонансної енергії квазістаціонарного спектру електрона внаслідок його взаємодії з обмеженими і інтерфейсними фононами у простій відкритій сферичній квантовій точці з використанням тієї обставини, що така система є граничним випадком закритої двоямної сферичної квантової точки з зовнішньою ямою скінченого, але дуже великого розміру. У даному підході, з використанням розрахованих енергетичного спектру і хвильових функцій електрона у закритій СКТ HgS/CdS/HgS/CdS, було виконано розрахунок зміщення найнижчого резонансного рівня електрона за рахунок його взаємодії зі всіма гілками фононів (обмежені, напівобмежені та інтерфейсні) у відповідній відкритій СКТ HgS/CdS/HgS. Знайдено парціальні внески фононів у величину цього зміщення у залежності від радіуса відкритої СКТ та від величини бар'єру.
Ключові слова: відкрита СКТ, закрита СКТ, прарезонансний рівень, перенормування.

Разработана теория перенормировки резонансной энергии квазистационарного спектра вследствие его взаимодействия с ограниченными и интерфейсными фононами в простой открытой сферической квантовой точке с учетом того, что такая система является предельным случаем закрытой двухямной сферической квантовой точки с внешней ямой конечного, но очень большого размера. В данном подходе, с использованием рассчитанных энергетического спектра и волновых функций электрона в закрытой СКТ HgS/CdS/HgS/CdS, был произведен расчет смещения основного резонансного уровня электрона за счет его взаимодействия со всеми ветками фононов (ограниченные, полуограниченные и интерфейсные) в соответствующей открытой СКТ HgS/CdS/HgS. Найдено парциальные вклады фононов в величину этого смещения в зависимости от радиуса открытой СКТ и от величины барьера.
Ключевые слова: открытая СКТ, закрытая СКТ, прарезонансный уровень, перенормировка.

In this paper we developed the theory of renormalization of the resonance energy of the quasi-stationary spectrum due to its interaction with confined and interface phonons in a simple open spherical quantum dot (SQD), taking into account the fact that such a system is the limiting case of two-well closed SQD with an external very large well. In this approach, using the calculated energy spectrum and electron wave functions in a close SQD HgS/CdS/HgS/CdS was calculated shift of the electron resonant ground-state-level due to its interaction with all types of phonons (confined, semiconfined and interface) in the corresponding open SQD HgS/CdS/HgS. There are founded the partial contributions of all types of phonons into the shift depending on the radius of the open SQT and its barrier.
Keywords: open SQD, close SQD, praresonant level, renormalization

Вступ

Теорії електрон-фононної і екситон-фононної взаємодії у відкритих сферичних квантових точках (СКТ), як і в інших низькорозмірних системах, поки що немає взагалі. Проблема полягає у тому, що теоретичний апарат квантової теорії поля, розроблений для закритих систем [1, 2], зовсім не придатний для відкритих систем через особливості хвильових функцій, які описують квазістаціонарні стани електронів, дірок або інших квазічастинок у ВСКТ.

Нами вперше запропонована теорія перенормування взаємодією з фононами того електронного (діркового) рівня енергії тришарової закритої СКТ у зовнішньому середовищі, який при значній товщині зовнішнього шару-ями асимптотично переходить у резонансний рівень квазістаціонарного стану простої відкритої СКТ. Уже на основі цих отриманих перенормованих електронного і діркового спектрів з врахуванням кулонівської взаємодії будується спектр екситона при взаємодії з фононами.

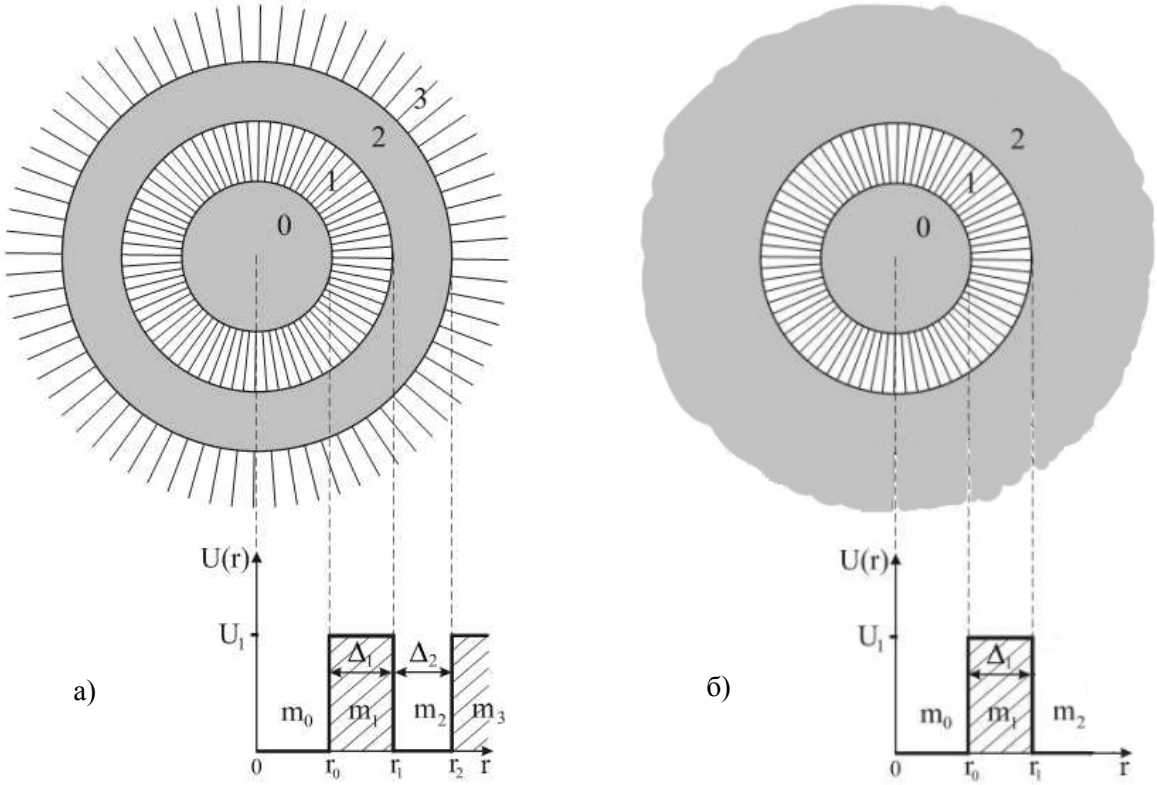

Рис. 1. Енергетичні і геометричні схеми тришарової закритої СКТ (а) та простої відкритої СКТ (б).

1. Електронна, діркова і фононна підсистеми закритої СКТ

Розглядається закрита СКТ (рис.1а), що складається з двох різних, почергово розташованих напівпровідників, один з яких є потенціальною ямою для електрона (ядро системи 0 і шар 2), а інший – бар'єром (шар 1 і масивне зовнішнє середовище 3). Якщо ширину Δ_2 зовнішньої потенціальної ями (2) збільшувати до безмежності, то дана система перейде у відкриту СКТ (рис.1б), чим автори і скористалися для розрахунку впливу обмежених фононів ядра на електронний спектр у відкритій КТ [3]. Однак, крім обмежених фононів ядра СКТ, для побудови цілісної теорії електрон-фононної взаємодії у відкритій СКТ необхідно врахувати наявність у КТ напівобмежених фононів середовищ (1), (2), (3), а також присутність інтерфейсних фононів у системі, внаслідок наявності меж розділу різних напівпровідникових середовищ.

Енергетичні спектри і хвильові функції невзаємодіючих електрона і дірки знаходяться на основі моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів [2].

Фононний спектр і потенціал поля поляризації визначаються у моделі діелектричного континууму, де вважається, що кожному шару КТ і зовнішньому середовищу відповідають свої діелектричні проникливості (ε_{i0}, $\varepsilon_{i\infty}$) і енергії оптичних фононів Ω_{iL}, такі ж, як і їх аналогів масивних кристалів. У такій моделі оптичні фонони поділяються на обмежені і інтерфейсні. Для досліджуваної наносистеми фононний гамільтоніан у зображенні вторинного квантування є сумою гамільтоніанів обмежених і інтерфейсних фононів:

$$H_{ph} = H_L + H_I \,. \qquad (1)$$

2. Перенормування резонансного електронного енергетичного рівня обмеженими і інтерфейсними фононами

Перенормування резонансного електронного рівня обмеженими і інтерфейсними фононами відкритої СКТ знайдемо як граничне значення перенормованого рівня відповідної закритої наносистеми при безмежному збільшенні товщини зовнішнього шару-ями. При різних значеннях Δ_2 завжди можна виділити, так званий, прарезонансний елек-

тронний рівень закритої тришарової СКТ, який є найближчим в енергетичній шкалі до відповідного квазістаціонарного рівня відповідної відкритої СКТ. Оскільки електронний спектр є суттєво багаторівневим, то для розрахунку його перенормування взаємодією з фононами зручно використати метод функцій Гріна.

У цьому підході енергію перенормованого електронного рівня $E_{n\ell m}$ можна записати у вигляді

$$E_{n\ell m} = E^0_{n\ell m} + \Delta_{n\ell m}, \qquad (2)$$

де повне зміщення енергетичного рівня Δ_{nlm} складається з парціальних внесків обмежених і інтерфейсних фононів

$$\Delta_{n\ell m} = \Delta^L_{n\ell m} + \Delta^I_{n\ell m}. \qquad (3)$$

Аналогічним чином з врахуванням відповідних ефективної маси і висоти потенціального бар'єра шукається перенормований взаємодією з фононами енергетичний спектр дірки.

3. Екситонний спектр

Розглянуті вище електрон-фононна і дірково-фононна підсистеми взаємодіють між собою через кулонівський потенціал. Тому є зміст ввести гамільтоніан екситон-фононної взаємодії у вигляді

$$H_{ex,ph} = H_{e,ph} + H_{h,ph} - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r}_e - \vec{r}_h|}, \qquad (4)$$

де $H_{e,ph}$, $H_{h,ph}$ – гамільтоніани електрон-фононної і дірково-фононної підсистем (без врахування електрон-діркової взаємодії), останній доданок у (4) описує електрон-діркову взаємодію.

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (4) в загальному випадку точно не розв'язується. Однак його можна розв'язати методом теорії збурень, оскільки у нашому випадку величина кулонівської взаємодії є незначною, порівняно з різницею енергій між двома сусідніми екситонними станами.

Хвильові функції екситона у нульовому наближенні матимуть вигляд

$$\psi_{ex}\begin{pmatrix} n_e\ell_e m_e \\ n_h\ell_h m_h \end{pmatrix} = \psi_{n_e\ell_e m_e}(r_e)\psi_{n_h\ell_h m_h}(r_h), \qquad (5)$$

де $\psi_{n_e\ell_e m_e}(r_e)$ і $\psi_{n_h\ell_h m_h}(r_h)$ – хвильові функції невзаємодіючих електрона і дірки, відповідно.

У першому наближенні теорії збурень енергія зв'язку екситону така

$$\Delta E^{n_e\ell_e m_e}_{n_h\ell_h m_h} = \int d^3\vec{r}_e \int d^3\vec{r}_h \left|\psi_{n_e\ell_e m_e}(r_e)\right|^2 \times \times \left[-\frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r}_e - \vec{r}_h|}\right]\left|\psi_{n_h\ell_h m_h}(r_h)\right|^2. \qquad (6)$$

4. Аналіз отриманих результатів

Числові розрахунки виконані для закритої наносистеми HgS/CdS/HgS/CdS, яка переходить у відкриту СКТ HgS/CdS/HgS, коли товщина Δ_2 зовнішньої потенціальної ями прямує до безмежності.

Із використанням методу функцій Гріна виконано розрахунок перенормованих енергій електрона і дірки у основних прарезонансних станах. Результат розрахунків енергетичного зсуву електрона, зумовленого взаємодією з всіма типами обмежених фононів, а також з інтерфейсними фононами наведений на рис.2. Видно, що зі збільшенням ширини Δ_2 зовнішньої потенціальної ями величини зсувів енергії електрона прямують, очевидно, до відповідних значень, характерних для відкритої СКТ HgS/CdS/HgS. Додатковими дослідженнями було показано, що із чотирьох, наявних у системі типів обмежених фононів, визначальний внесок у перенормування спектру електрона роблять обмежені фонони ядра HgS закритої СКТ HgS/CdS/HgS/CdS. Крім того, з порівняння рис.2а і рис.2б, видно, що величина зсуву електронного рівня через взаємодію з обмеженими фононами на порядок більша за відповідну величину зсуву, зумовленого впливом інтерфейсних фононів. Таку поведінку отриманих залежностей можна пояснити наступним чином.

Прарезонансні стани електрона і дірки відрізняються від інших станів системи максимальною ймовірністю перебування відповідної квазічастинки у ядрі HgS КТ. Тому у цих станах визначальний внесок на електрон і дірку мають саме обмежені фонони

ядра. Зрозуміло, що вплив цих фононів є тим більший, чим більшою є ймовірність перебування квазічастинки у ядрі. Зі збільшенням зовнішньої потенціальної ями HgS спостерігається тенденція до "витіснення" квазічастинки з ядра у зовнішню потенціальну яму. Це і викликає послаблення взаємодії квазічастинок з обмеженими фононами ядра. Слабкий вплив обмежених фононів зовнішньої ями HgS на квазічастинковий спектр пояснюється тим, що при збільшенні Δ_2 об'єм зовнішньої ями зростає значно швидше, ніж імовірність, яка веде до зменшення густини ймовірності, а, отже, і до зменшення величини взаємодії електрона з обмеженими фононами зовнішньої ями.

Слабку взаємодію електрона і дірки з інтерфейсними фононами КТ можна пояснити незначною імовірністю перебування цих квазічастинок біля меж розділу складових

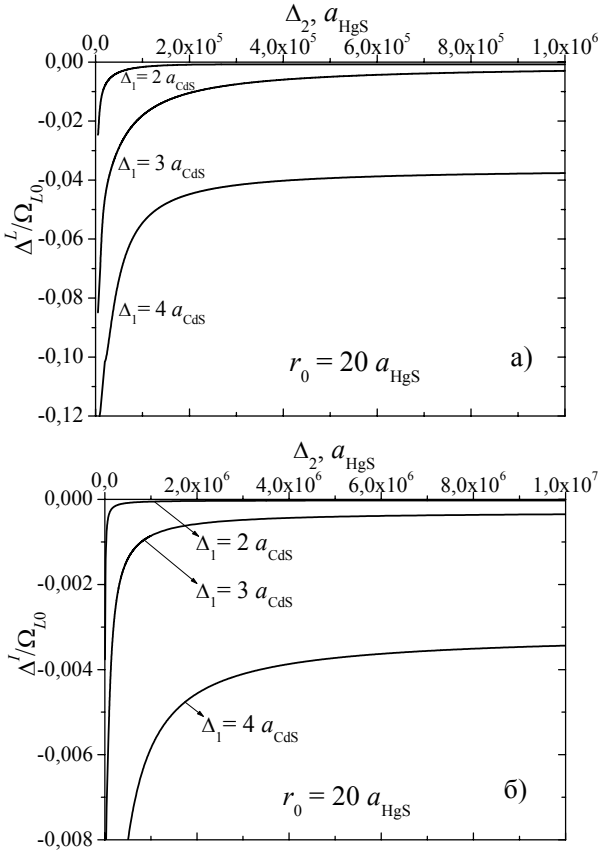

Рис. 2. Залежності величин парціальних зсувів основного прарезонансного рівня електрона, зумовлених впливом обмежених (а) та інтерфейсних (б) фононів, від ширини Δ_2 зовнішнього шару-ями закритої СКТ при фіксованих значеннях товщини бар'єру Δ_1.

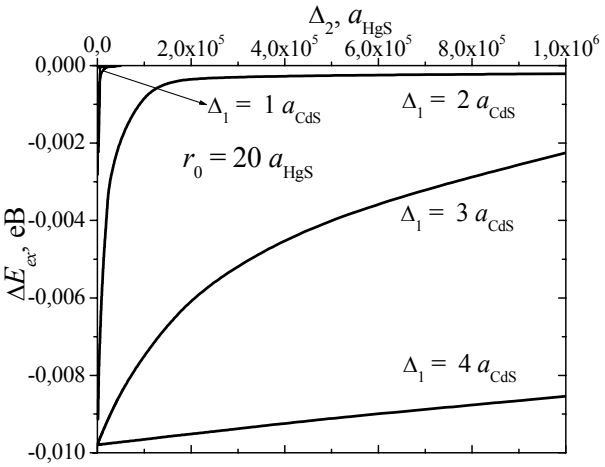

Рис. 3. Залежність величин енергій зв'язку основного прарезонансного стану екситона у СКТ HgS/CdS/HgS/CdS від ширини Δ_2 зовнішньої потенціальної ями HgS при різних значеннях ширини потенціального бар'єру Δ_1.

частин КТ, де потенціал поляризації інтерфейсних фононів є максимальним.

Ці результати підтверджують правильність вибраного підходу до вивчення електрон- і дірково-фононної взаємодій у відкритих СКТ з використанням теоретично розрахованих хвильових функцій і енергетичних спектрів квазічастинок, отриманих для відповідних закритих систем у граничному випадку безмежно широкої зовнішньої потенціальної ями.

На рис.3 наведено отримані залежності енергії зв'язку основного прарезонансного стану екситону від товщини зовнішньої потенціальної ями Δ_2 при чотирьох різних значеннях ширини потенціального бар'єру Δ_1. Як бачимо, електрон-діркова взаємодія послаблюється при зростанні ширини зовнішньої потенціальної ями і при зменшенні товщини потенціального бар'єру КТ. Цей факт легко пояснити перебуванням електрона і дірки в основному прарезонансному екситонному стані у ядрі КТ. Чим тонший бар'єр і ширша зовнішня потенціальна яма, тим більша ймовірність тунелювання електрона і дірки через бар'єр, що і призводить до збільшення ефективної відстані між ними, а, отже, і до послаблення їхньої взаємодії.

Слід також звернути увагу на те, що енергія зв'язку екситону більш ніж у 5 разів більша за сумарну зміну енергій дірки і електро-

на, зумовлених їх взаємодією з оптичними фононами всіх типів, і становить приблизно 2% енергії збудження екситону.

Висновки

Всі обчислені у роботі величини виходять на насичення при збільшенні ширини Δ_2 зовнішньої потенціальної ями закритої СКТ до безмежності і прямують, очевидно, до значень, характерних для відповідної відкритої СКТ. Отже, для виконання розрахунків величин взаємодії електрона, дірки і екситону з фононами у відкритих СКТ можна користуватись енергетичними спектрами і хвильовими функціями відповідних квазічастинок, отриманих для закритої СКТ.

Величина впливу інтерфейсних фононів на енергетичні спектри електрона і дірки у відкритих СКТ на порядок менша за відповідний вплив обмежених і напівобмежених фононів.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Ткач М.В., Головацький В.А., Войцехівська О.М., та ін.* Спектр електронів і дірок у сферичних наноструктурах // Журнал фіз. досліджень. – 2000. – **4**(3). – С.342-349.
2. *Ткач М.В.* Квазічастинки у наногетеро-системах. Квантові точки та дроти. – Чернівці: Рута, 2003.
3. *Tkach M.V., Fartushinsky R.B., Seti Ju.O.* Quasistationary electron states renormalized due to the interaction with phonons in open spherical quantum dot. – Romanian journal of physics. – 2010. – **55**(1-2). – P.93-101.