

©2011 р. А.М. Грищук, В.В. Грищук, В.А. Нестеров

Житомирський державний університет імені Івана Франка, Житомир

## ВПЛИВ ПЕРЕНОРМОВАНОЇ ЕНЕРГІЇ ОБМЕЖЕНИХ ТА ІНТЕРФЕЙСНИХ ФОНОННИХ МОД НА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ПЛОСКОЇ БАГАТОШАРОВОЇ НАНОСТРУКТУРИ

Виконані дослідження електрон-фононої взаємодії у плоских наносистемах, знайдено вигляд гамільтоніанів взаємодії електрона з обмеженими та інтерфейсними фононами у представленні вторинного квантування. Визначено поведінку парціальних внесків усіх типів фононів в залежності від параметрів наносистем.

**Ключові слова:** наносистема, наноплівка, фонон, гамільтоніан, енергетичний спектр, електрон-фононна взаємодія.

Проведены исследования электрон-фононного взаимодействия в плоских наносистемах, найдено изображение гамильтонианов взаимодействия электрона с ограниченными и поверхностными фононами в представлении вторичного квантования. Определено поведение парциальных вкладов всех типов фононов в зависимости от параметров наносистем.

**Ключевые слова:** наносистема, нанопленка, фонон, гамильтониан, энергетический спектр, электрон-фононное взаимодействие.

The article describes the research of electron-phonon interaction in the plane nanosystems; the image of the Hamiltonian interaction of electron with confined and interface optical phonons in the representation of secondary quantization. The behaviour of all phonon tapes depending on geometrical parameters of nanofilms is defined.

**Keywords:** nanosystem, nanofilm, phonon, Hamiltonian, energy spectra, electron-phonon interaction.

### Вступ

Останнім часом експериментатори і теоретики виявляють великий інтерес до вивчення квантових плівок [1,2] і каскадних лазерів, створених на їхній основі.

На атомному рівні електрон-фононна взаємодія виникає внаслідок зміщення атомів відносно їх рівноважних положень в ідеальній ґратці, що зумовлює порушення періодичності потенціального поля, яке супроводжується локальними змінами електронних або діркових станів, і навпаки – локальні зміни станів заряджених квазічастинок приводять до локальних деформацій ґратки і до зміни збудження фононої підсистеми. Формально електрон-фононна взаємодія виявляється навіть при нульовій абсолютній температурі внаслідок існування віртуальних фононів.

В арсеналі фізики твердого тіла вже є детально розроблена теорія електрон-фононої взаємодії для масивних іонних і ковалент-

них напівпровідникових кристалів [3]. Що ж стосується напівпровідникових низькорозмірних систем різної симетрії, то тут теорія взаємодії електронів, дірок та екситонів з фононами знаходиться у стані розвитку. Найбільша частина теоретичних досліджень присвячена циліндричним [4,5] і сферичним квантовим точкам [3,6], оскільки ці наносистеми є найпростішими. Експериментальні дослідження нанокристалів різних геометричних форм виконуються методом резонансного раманівського розсіювання [7], пікосекундною раманівською спектроскопією [8] та іншими складними методами. Більшість теоретичних праць ґрунтуються на моделі діелектричного континууму, яка дозволяє аналітично отримати потенціали поля поляризації обмежених і інтерфейсних фононів "з перших принципів", тобто без будь-яких "підгоночних" параметрів. Для квантових плівок електрон-фононна взаємодія досліджувалась тільки для одного шару плівки,

проте каскадний лазер складається з декількох шарів таких плівок, а відповідної теорії електрон-фононної взаємодії для таких систем не має.

При дослідженні фізичних властивостей багат шарових квантових плівок важливим фактором, який впливає на спектр випромінювання каскадного лазера є електрон-фононна взаємодія. Тому, щоб мати змогу керувати таким лазером, необхідно знати вплив усіх типів коливань, що присутні в наносистемі. Це можна зробити тільки дослідивши закони дисперсії фононних мод і їх внесок у перенормування енергії електрона.

### Постановка задачі

Розглядаємо багат шарову наносистему (рис.1). Розміри такої системи вважатимемо відомими:

$$b_1^- = z_0 - z_{-1}, \Delta^- = z_1 - z_0, b_0 = z_2 - z_1, \Delta^+ = z_3 - z_2, b_1^+ = z_4 - z_3. \quad (1)$$

Задачу будемо розв'язувати у наближенні ефективних мас

$$\mu(z) = \begin{cases} \mu_{-2}; -\infty < z \leq z_{-1} \\ \mu_{-1}; z_{-1} \leq z \leq z_0 \\ \mu_0; z_0 \leq z \leq z_1 \\ \mu_1; z_1 \leq z \leq z_2 \\ \mu_2; z_2 \leq z \leq z_3 \\ \mu_3; z_3 \leq z \leq z_4 \\ \mu_4; z_4 \leq z \leq \infty, \end{cases} \quad (2)$$

та прямокутних потенціальних бар'єрів

$$U_j(z) = \begin{cases} U_\infty; -\infty < z \leq z_{-1} \\ 0; z_{-1} \leq z \leq z_0 \\ U_1; z_0 \leq z \leq z_1 \\ 0; z_1 \leq z \leq z_2 \\ U_0; z_2 \leq z \leq z_3 \\ 0; z_3 \leq z \leq z_4 \\ U_\infty; z_4 \leq z \leq \infty. \end{cases} \quad (3)$$

Для знаходження перенормованого спектра при наявності електрон-фононної взаємодії необхідно розв'язати таке стаціонарне рівняння Шредингера:

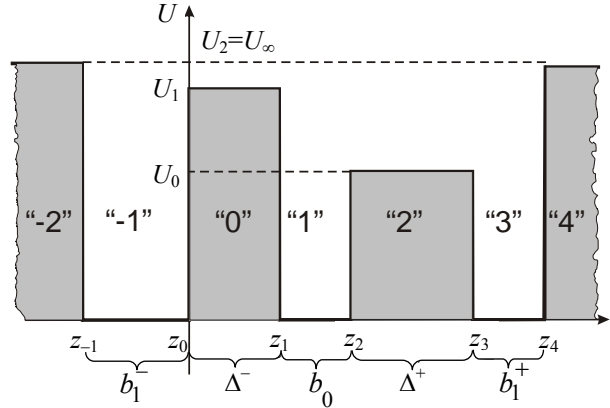


Рис. 1. Геометрична та потенціальна схема багат шарової наноструктури.

$$\hat{H}\Psi(z) = E\Psi(z), \quad (4)$$

із гамільтоніаном

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{int}, \quad (5)$$

де  $\hat{H}_e$  – гамільтоніан електрона,  $\hat{H}_{ph}$  – гамільтоніан фононів,  $\hat{H}_{int}$  – гамільтоніан взаємодії електронів із фононами.

Хвильові функції при відсутності фононів для  $i$ -го ( $i=-2, -1, \dots, 4$ ) шару задаються так:

$$\psi_i(z) = A_i \exp(k_i z) + B_i \exp(-k_i z), \quad (6)$$

$$\text{де } k_i = i \sqrt{\frac{2\mu(z)}{\hbar^2} (U(z) - E)}. \quad (7)$$

Ввівши квантовану хвильову функцію за правилом

$$\begin{cases} \hat{\Psi}(z) = \sum_n \Psi_n(z) \hat{a}_n \\ \hat{\Psi}^+(z) = \sum_n \Psi_n^*(z) \hat{a}_n^+, \end{cases} \quad (8)$$

згідно теорії вторинного квантування [1-3], можна отримати гамільтоніан "чистих" (невзаємодіючих) електронів у вигляді:

$$\hat{H}_e = \sum_n E_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n, \quad (9)$$

де  $\hat{a}_n^+$ ,  $\hat{a}_n$  оператори породження і знищення, які задовольняють ферміонним комутативним співвідношенням.

Щоб знайти гамільтоніан взаємодії електронів з фононами, потрібно записати оператор потенціалу поля поляризації у зображенні вторинного квантування за всіма змінними системи.

**Знаходження гамільтоніану взаємодії фононів з електронами у представленні вторинного квантування**

Гамільтоніан взаємодії фононів з електронами  $\hat{H}_{\text{int}}$ , згідно загальної теорії поширення поляризаційних коливань [9], у нанокристалі можна представити у вигляді:

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

де  $\hat{H}_{e-L}$  – гамільтоніан взаємодії електронів з обмеженими фононами, та  $\hat{H}_{e-I}$  – гамільтоніан взаємодії електронів з інтерфейсними фононами.

Згідно загальної теорії, спектр власних частот обмежених оптичних коливань  $\Omega_{Lj}$  збігається з частотами повздовжніх коливань у масивному кристалі [9]. Сам гамільтоніан такої взаємодії можна подати у представленні вторинного квантування за фононними змінними:

$$\hat{H}_{e-L} = - \sum_{j=-2}^4 \sum_{q_{nj}} \sqrt{2\pi e^2 \Omega_{Lj}} \sqrt{\frac{1}{\epsilon_{\infty j}} - \frac{1}{\epsilon_{0j}}} \times \frac{A_{nj}}{q_{nj}} Z_{nj} (\hat{b}_{q_{nj}} + \hat{b}_{-q_{nj}}^+), \quad (11)$$

де  $\hat{b}_{-q_{nj}}^+$ ,  $\hat{b}_{q_{nj}}$  – оператори породження і знищення фононів,  $q_{nj}$  – квазіхвильове число, що нумерує вітку фононного коливання,  $\epsilon_{\infty j}$ ,  $\epsilon_{0j}$  високочастотна і низькочастотна діелектричні проникливості  $j$ -го середовища,  $A_{nj}$  і  $Z_{nj}$  деякі коефіцієнти, які однозначно будуть визначені у процесі подальших перетворень.

Для того, щоб уможливити врахування впливу обмежених фононів на спектр електрона, необхідно у (11) перейти до представлення вторинного квантування за всіма змінними системи:

$$\hat{H}_{e-L} = \int \hat{\Psi}^+(z) \hat{H}_{e-L} \hat{\Psi}(z) dz. \quad (12)$$

Тоді гамільтоніан взаємодії електронів з обмеженими фононами у представленні вторинного квантування за всіма змінними системи буде:

$$\hat{H}_{e-L} = \sum_{\substack{n,n' \\ q,s_m}} F_{Ln}^{n'}(q, s_m) \hat{a}_n^+ \hat{a}_{n'} (\hat{b}_{q,s_m}^+ + \hat{b}_{-q,s_m}), \quad (13)$$

де

$$F_{Ln}^{n'}(q, s_m) = -\sqrt{2\pi e^2 \Omega_L} \left( \frac{1}{\epsilon_{m\infty}} - \frac{1}{\epsilon_{0m}} \right)^{1/2} \times \frac{A_m}{q_m} \int_{z_m}^{z_{m+1}} \Psi_m^*(z) Z_m(z) \Psi_m(z) dz \quad (14)$$

– функції зв'язку системи.

Аналогічні перетворення можна проробити для гамільтоніана взаємодії електронів з інтерфейсними фононами:

$$\hat{H}_{e-I} = \int \hat{\Psi}^+(z) \hat{H}_{e-I} \hat{\Psi}(z) dz. \quad (15)$$

Після математичних перетворень гамільтоніан взаємодії електронів з інтерфейсними фононами у представленні вторинного квантування за всіма змінними системи такий:

$$\hat{H}_{e-I} = \sum_{\substack{n,n' \\ q,s}} F_{In}^{n'}(q, s) \hat{a}_n^+ \hat{a}_{n'} (\hat{b}_{s,q}^+ + \hat{b}_{s,-q}), \quad (16)$$

де функції зв'язку інтерфейсних фононів

$$F_{In}^{n'}(q, s) = -\sqrt{\frac{\hbar e^2}{Y_{qs} \omega_{qs}^2}} \times \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \Psi_n^*(z) \Psi_n(z) \sum_{j=-2}^4 \frac{1}{L_j} \cdot \Phi_I^j(z) \right\} dz, \quad (17)$$

$L_j$  – товщина  $j$ -го шару плівки,  $\Phi_I^j(z)$  – потенціал поля поляризації інтерфейсних фононів,  $\omega_{qs}$  – частоти інтерфейсних коливань.

Перенормований спектр нашої системи слід шукати із рівняння Дайсона

$$G_{\mu\mu}(k, \omega) = \{\omega - E_{\mu}(k) - M_{\mu\mu}(k, \omega)\}^{-1}, \quad (18)$$

яке задає при  $T=0$  К зв'язок між Фур'є-образом функції Гріна  $G_{\mu\mu}(k, \omega)$ , масовим оператором  $M_{\mu\mu}(k, \omega)$  і перенормованою енергією електрона фононами  $E_{\mu}(k)$ .

Обмежуючись системами зі слабким зв'язком в однофононному наближенні, масовий оператор представимо у вигляді:

$$M_{\mu\mu}(k, \omega) = M_L(k, \omega) + M_I(k, \omega), \quad (19)$$

де доданок  $M_L(k, \omega)$  описує внесок у перенормування енергії електронного рівня, що відповідає взаємодії основного стану електрона з усіма обмеженими фононами, а доданок  $M_I(k, \omega)$  – взаємодії основного стану електрона з усіма інтерфейсними фононами.

Отже перенормовану енергію основного стану електрона слід шукати у вигляді:

$$\tilde{E}_{10} = E_{10} + \Delta_L + \Delta_I, \quad (20)$$

де  $E_{10}$  енергія основного стану без врахування взаємодії,  $\Delta_L$  і  $\Delta_I$  парціальні зсуви енергії спричинені взаємодією електрона із обмеженими і інтерфейсними фононами:

$$\Delta_L = \text{Re}(M_L(k, \omega)), \quad (21)$$

$$\Delta_I = \text{Re}(M_I(k, \omega)). \quad (22)$$

### Аналіз отриманих результатів

Розрахунок виконувались для наносистеми  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ , параметри якої наведені в таблиці 1.

Таблиця 1. Параметри шарів досліджуваної наносистеми

Напів-провідник	$m, m_e$	$U$ , меВ	$\epsilon_\infty$	$\omega_{LO}$ , меВ	$\omega_{TO}$ , меВ
$\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$	0,075	516	12,7	40	35
$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$	0,042	0	14,1	34	28

На рис.2а наведена залежність парціального внеску обмежених фонів в енергію основного рівня електрона  $\Delta_L(10)$  при зміні товщини двох зовнішніх шарів наносистеми  $x$ . Видно, що найбільший внесок у спектр мають фонони, які знаходяться у об'ємі зовнішніх шарів. При поступовому збільшенні товщини шарів парціальний внесок від областей "-1" і "3" зростатиме, оскільки збільшуватиметься площа перекриття хвильових функцій електрона і потенціалів поля поляризації обмежених фононів, що входять у функцію зв'язку (14).

При подальшій зміні товщини зовнішніх шарів парціальний внесок обмежених фононів почне зменшуватись, оскільки хвильова функція електрона буде розпливатись по об'єму зовнішніх шарів, спричиняючи зменшення значення інтегралу перекриття фононних і електронних функцій.

На рис.2б наведена залежність парціальних внесків обмежених фононів від товщини зовнішніх шарів системи для різного значення квантового числа  $n=1, 2, 3$ . Видно, що основний внесок у перенормування енергії дає стан із значенням квантового числа  $n=1$ , оскільки перекриття хвильової функції електрона і потенціалу поля поляризації обмежених фононів у даному випадку буде найбільший.

На рис.3а наведена залежність парціальних внесків кожної вітки інтерфейсних фононів, які виникають на межах середовищ  $\Delta_I^\pm(\omega_i)$ , і сумарний парціальний внесок  $\Delta_I$  інтерфейсних фононів у спектр електрона при зміні товщини зовнішніх шарів. Зазначимо, що при малій товщині шарів внесок інтерфейсних фононів максимальний і потім повільно зменшується при збільшенні їх розмірів, що спричинено зменшенням інтегралу перекриття у функціях зв'язку (17).

На рис.3б наведена залежність сумарного парціального внеску всіх типів фононів системи на спектр електрона основного рівня при зміні товщини зовнішніх шарів. Як видно з рисунка, при малих розмірах основний внесок у перенормування спектра основного рівня електрона дають інтерфейсні фонони. При збільшенні товщини зовнішніх шарів помітним стає вплив обмежених фононів, оскільки товщина шару вже є достатньою для виникнення таких коливань. При подальшому збільшенні товщини, вплив усіх типів фононів зменшується так, що сумарний парціальний внесок знаходиться між парціальними внесками фононів відповідних масивних монокристалів.

### Висновки

Отримані результати дозволяють знайти парціальні внески у перенормування енергії електрону кожного типу коливань, що присутні в системі, а також дослідити еволюцію спектра в залежності від товщин шарів плівок. Крім того, побудована теорія дає можливість розрахувати внесок фононних коливальних мод у спектр екситона.

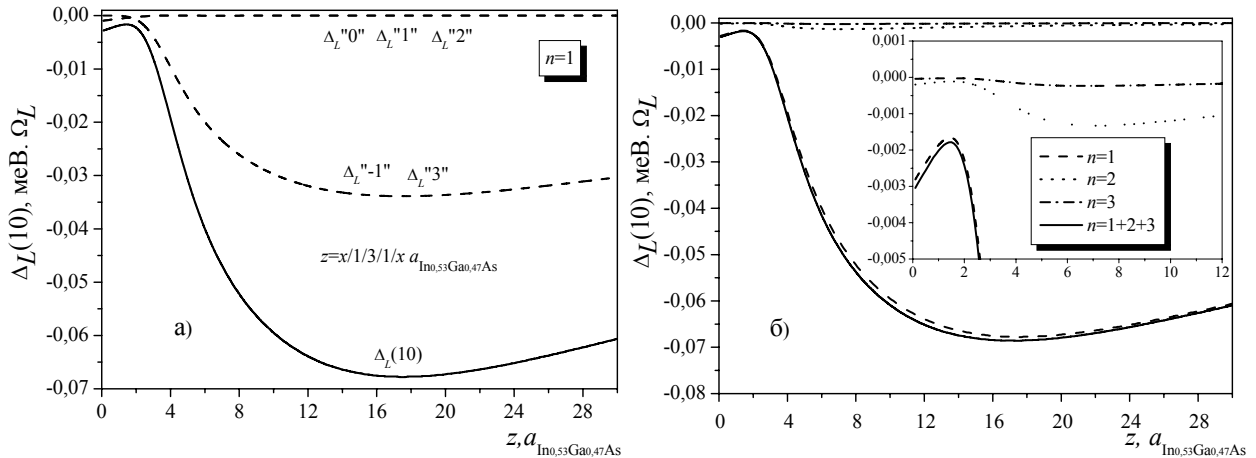


Рис. 2. Залежність парціального внеску обмежених фонових кожного шару системи від товщини  $x$  зовнішнього шару (а) і парціальних внесків при взаємодії основного рівня електрона із обмеженими фонами (б).

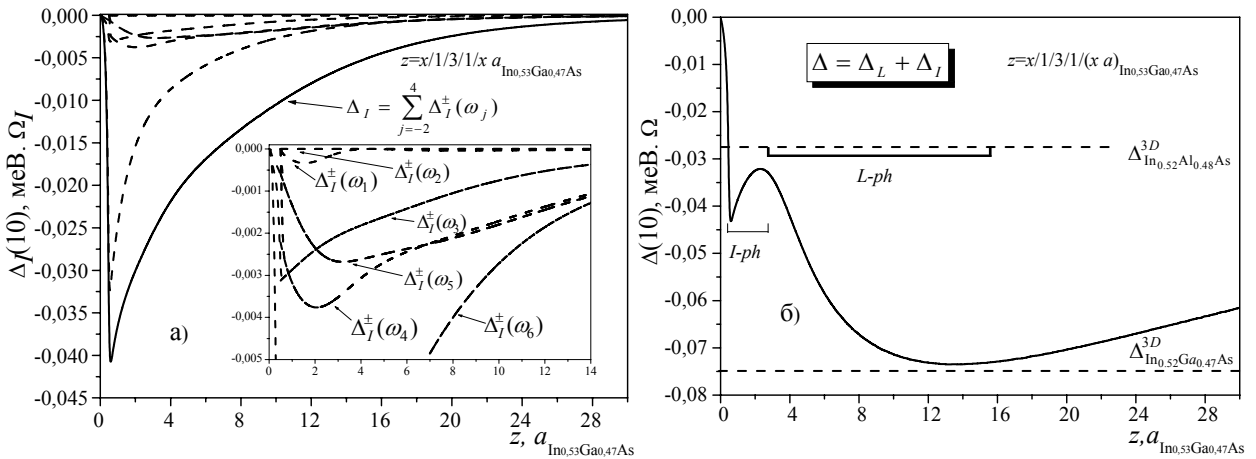


Рис. 3. Залежність парціального внеску інтерфейсних фонових від розмірів зовнішніх шарів (а) і сумарний парціальний внесок в енергію основного рівня електрона, інтерфейсних і обмежених фонових мод при зміні параметрів системи (б).

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Cao J.C. Interband impact ionization and nonlinear absorption of terahertz radiation in semiconductor heterostructures // Phys. Rev. Lett. – 2003. – **91**(23). – P.237401.
2. Bing Y.U. Interface phonon modes in quantum cascade lasers // Chin. Phys. Lett. – 2005. – **22**(9)– P.2403.
3. Makhanets O.M., Voitsekhivska O.M., Gryshchuk A.M. Spectrum of confined and interface phonons in complicated cylindrical nanoheterosystem placed into the plane quantum well in water // Advanced optical materials. – 2006. – **9**(5). – P.1564.
4. Tkach M., Holovatsky V., Voitsekhivska O. Electron and hole quasistationary states in opened cylindrical quantum wire // Physica E: Low dimensional systems and Nanostructures. – 2001. – **11**. – P.17.
5. Akiyama H., Someya T., Yoshita M. et al. Photoluminescence study of lateral confinement energy in T-shaped InGaAs quantum wires // Phys.Rev. B. – 1998. – **57**. – P.3765.
6. Makhanets O.M., Voitsekhivska O.M., Gryshchuk A.M. Confined and interface phonons in combined cylindrical nanoheterosystems // Condensed Matter Physics. – 2006. – **9**(4). – P.719.
7. Mori N., Ando T. Electron-optical-phonon interaction in single and double heterostructures // Phys.Rev. B. – 1989. – **40**. – P.6175.
8. Асеев А.Л. Одноэлектронные устройства на основе эффектов электронной интерференции и кулоновской блокады // Информационные технологии и вычислительные системы. – 2000. – №2. – С.67.
9. Ткач М.В. Квазічастинки у наносистемах. Квантові точки та дріоти. – Чернівці: Рута, 2003.