

А.М. Гришук¹, В.В. Гришук¹, І.В. Бойко²

Потенціал поля поляризації та оптичні фононні моди в багат шаровій квантовій наноплівці

¹Житомирський державний університет імені Івана Франка, м. Житомир
вул. Бердичівська 40, 10008, e-mail: teor-caf@meta.ua

²Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
м. Чернівці, вул. Коцюбинського 2, 58012, e-mail: ktf@chnu.edu.ua

В роботі виконано теоретичні дослідження спектрів всіх типів поляризаційних коливань, а також наведено вигляд потенціалу поля поляризації для багат шарової наносистеми. Розрахунки виконувались для наноплівки, яка складається з п'яти плоских шарів $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ вміщених у середовище $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$.

Ключові слова: квантові плівки, наносистеми, наноласери, фонони, потенціал поля поляризації, діелектричний континуум, інтерфейсні моди.

Стаття поступила до редакції 20.05.2011; прийнята до друку 15.09.2011.

Вступ

Останніми роками експериментатори і теоретики проявляють великий інтерес до вивчення квантових плівок [1, 2], та каскадних лазерів, створених на їхній основі. При дослідженні фізичних властивостей квантових плівок важливим фактором, який повинен враховуватись є електрон – фононна взаємодія. Тому, щоб мати змогу керувати каскадним лазером отриманим на основі наноплівок, необхідно визначити вплив усіх типів коливань, що присутні в наносистемі. Це можна зробити тільки дослідивши закони дисперсії фононних мод.

Необхідно відмітити, що теорії фононного поля та електрон-фононної взаємодії у відкритих системах немає, оскільки неможна точно розв'язати електронну (діркову) задачу в них. В статтях [3, 4] був запропонований спосіб, яким чином можна перейти від закритої наносистеми до відкритої. Це було зроблено для квантових точок (КТ) та квантових дротів (КД). Схожий перехід можна здійснити і для квантових плівок. Але, щоб описати електрон-фононну взаємодію необхідно знати не тільки закон дисперсії усіх типів коливань, а й поведінку їх потенціалів поля поляризації в таких системах. Тому такі дослідження є актуальними і являються предметом даної статті. Фононний спектр отримується у моделі діелектричного континууму, яка широко використовується для вивчення низькорозмірних кристалічних структур [4 - 6] і результати якої збігаються з експериментальними даними. До уваги приймаються лише оптичні

фононні коливання, оскільки саме вони дають максимальний внесок в перенормування енергії як електрона так і екситона, що виникають напівпровідниковому нанокристалі.

I. Теорія спектра фононних коливань та знаходження потенціалу поля поляризації.

Вивчаються фононні спектри усіх типів вільних коливань, присутніх у плоскій багат шаровій наносистемі (рис. 1), яка складається з п'яти шарів плоских плівок $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ вміщених у середовище $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ (рис. 1). Товщина кожного

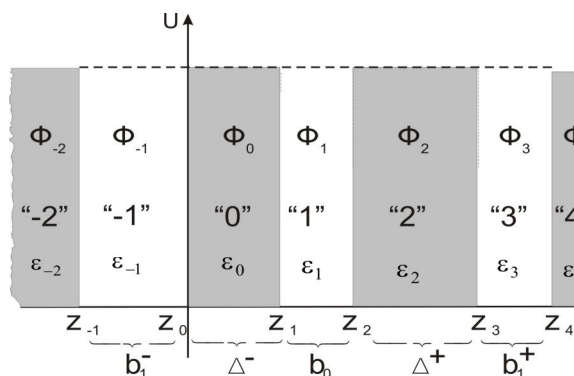


Рис. 1. Геометрична схема багат шарової квантової наноплівки.

шару наноплівки, а також діелектричні проникливості вважають відомими

$$\begin{aligned}
 b_1^- &= z_0 - z_{-1} \\
 \Delta^- &= z_1 - z_0 \\
 b_0 &= z_2 - z_1, \\
 \Delta^+ &= z_3 - z_2 \\
 b_1^+ &= z_4 - z_3 \\
 e_i(w) &= e_{i\infty} \frac{w^2 - w_{Li}^2}{w^2 - w_{Ti}^2}, \quad i = -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4
 \end{aligned} \quad (1)$$

де $\epsilon_{i\infty}$ - високочастотна діелектрична проникність, ω_{Li} та ω_{Ti} - частоти поздовжніх і поперечних оптичних фононів відповідних масивних кристалів. Фононний спектр для такої системи можна знайти з електростатичних рівнянь Максвелла [5, 6], в

$$\Phi_{L_j} = \sum_{qn_j} \Phi(qn_j) A_{n_j} \left(e^{-iqn_j z} + \frac{B_{n_j}}{A_{n_j}} e^{iqn_j z} \right), \quad j = -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4; \quad (3)$$

де A_{n_j} та B_{n_j} - коефіцієнти, які знаходяться з умов того, що потенціали поля поляризації обмежених фононів на межі спадають до нуля і задаються у вигляді

$$\begin{aligned}
 A_{n_j} &= -B_{n_j} e^{2iqn_j z_j}, \quad \text{тут } qn_j = \frac{2pn}{z_j - z_{j-1}} \\
 j &= -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4;
 \end{aligned} \quad (4)$$

а коефіцієнти розкладу ряду $\Phi(qn_j)$ визначаються з оберненого перетворення Фур'є

$$\Phi(qn_j) = \int_{z_{j-1}}^{z_j} \Phi_{L_j}(z) A_{n_j} \left(e^{-iqn_j z} - e^{iqn_j(z-2z_j)} \right) dz \quad (5)$$

У випадку $\nabla^2 \Phi(z) = 0$ отримаємо спектр інтерфейсних фононів, які виникатимуть на межах поділу наноплівок, а потенціал поля поляризації інтерфейсних фононів буде виглядати наступним чином:

$$\begin{cases} \Phi_{-2}^I(z) = B_{-2} e^{qz}, & z < z_{-1} \\ \Phi_j^I(z) = A_j e^{-qz} + B_j e^{qz}, & z_j < z < z_{j+1}, \\ \Phi_4^I(z) = A_4 e^{-qz}, & z > z_4 \end{cases} \quad (6)$$

де q квазіімпульс фононних інтерфейсних коливань. Для знаходження закону дисперсії цих коливань із граничних умов для потенціалу поляризації і нормальних складових вектора електричного зміщення отримується дисперсійне рівняння для знаходження спектра інтерфейсних фононів у вигляді

$$h_{-2} = \frac{-e^{-qn_{-2} z_{-2}} + C_{-1} e^{qn_{-2} z_{-2}}}{e^{-qn_{-2} z_{-2}} + C_{-1} e^{qn_{-2} z_{-2}}} \quad (7),$$

результаті одерженно

$$e_i(w) \nabla^2 \Phi(z) = 0 \quad (2)$$

де $\Phi(z)$ - потенціал поляризаційного поля фононів. Зрозуміло, що існують два можливих розв'язки цього рівняння, з яких визначаються спектри обмежених та інтерфейсних фононів, які розглядаються далі. У випадку коли $e_i(w) = 0$, отримаємо спектр обмежених фононів $\Omega_{Li} = \hbar \omega_{Li}$, який буде рівний величині поздовжніх енергій у відповідному масивному кристалі. Потенціал поля поляризації обмежених фононів у такому випадку буде задаватись у вигляді розкладу

$$\text{де в } h_j = \frac{e_j}{e_{j+1}}, \quad C_j = \frac{B_j}{A_j}, \quad j = -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4.$$

Невідомі коефіцієнти A_j та B_j знаходяться з тих же граничних умов що й дисперсійне рівняння методом Т-матриці [7] і задаються у вигляді:

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1+h_j) & (1-h_j)e^{2qn_j z_{j+1}} \\ (1-h_j)e^{-2qn_j z_{j+1}} & (1+h_j) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (8)$$

$$\text{тут } A_{-2} = B_4 = 0.$$

II. Обговорення результатів

Результати числових розрахунків енергій та потенціалів поля поляризації обмежених та інтерфейсних фононів представлені на рисунках 2-5. Очевидно, що спектри інтерфейсних фононів залежать від геометричних параметрів наносистем, а енергії цих фононних мод завжди знаходяться між енергіями LO та TO фононів для відповідних об'ємних кристалів (Ω_{L_j} , Ω_{T_j} , приведені на рисунках штриховими лініями).

На рис. 2 подано залежність енергії інтерфейсних фононів від величини квазіімпульса при постійних розмірах наносистеми. Як видно з рисунка, при збільшенні величин квазіімпульса, енергії інтерфейсних фононів вироджуються у зони із слабким законом дисперсії від величини q .

На рис. 3а, б, показано еволюцію спектра інтерфейсних фононів як функції розмірів системи. На рис. 3 а. при фіксованих параметрах внутрішньої ями $b_0 = 5a_{InGaAs}$, та товщини бар'єрів

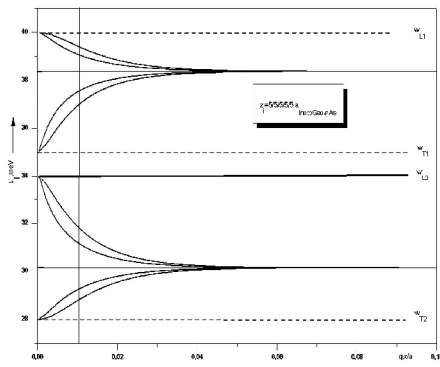


Рис. 2. Залежність енергії інтерфейсних фононів від квазіхвильового числа q .

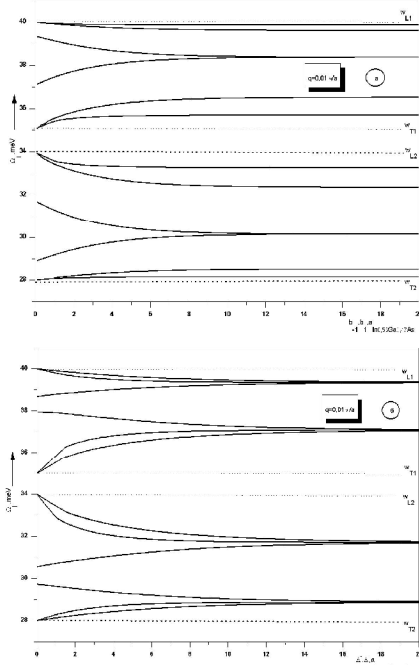


Рис. 3. Залежність енергії інтерфейсних фононів від товщини а) зовнішніх шарів ям при фіксованих розмірах.

$\Delta^{\pm} = 1a_{InGaAs}$ подано еволюцію спектра інтерфейсних фононів від зміни товщини зовнішніх ям b_1^{\pm} . При великих товщинах зовнішніх ям спектр нашої системи відповідатиме в граничному випадку спектру відкритої наносистеми. Як видно з рисунка, по два рівні з протилежними поляризаціями вироджуватимуться в один. На рис. 3.б. представлена аналогічна залежність при фіксованих товщинах зовнішніх ям $b_1^{\pm} = 5a_{InGaAs}$ при зміні товщини бар'єрів Δ^{\pm} . Як видно з рисунка, при збільшенні розмірів бар'єру енергії інтерфейсних фононів вироджуються в чотири рівні, що відповідають трьом окремим одношаровим наносистемам.

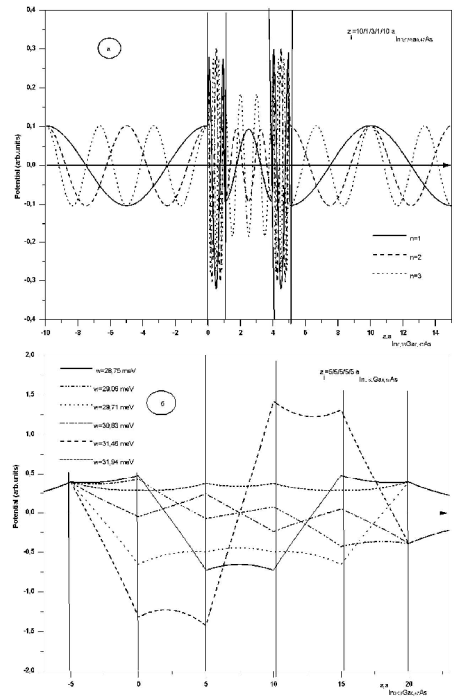


Рис. 2. Залежність енергії інтерфейсних фононів від квазіхвильового числа q .

На рис. 4,а подано потенціал поля поляризації обмежених фононів в середовищі з фіксованими розмірами для $n = 1, 2, 3$. Як видно з рисунка, потенціал при $n=1$ має один максимум в середині наноплівки і спадає до нуля на її границях. Така поведінка фононного поля відповідає загальноприйнятій теорії Хуанга-Цу, згідно якої потенціал повинен спадати при наближенні до границі поділу між шарами наносистеми.

На рис. 4,б зображено залежність потенціалу поля поляризації інтерфейсних фононів при фіксованих розмірах наносистеми для різних значень енергії фононів. Як видно з рисунка потенціал поля поляризації інтерфейсних фононів симетричний відносно інверсійного центру системи, що зумовлено симетрією електромагнітної взаємодії відносно тієї ж точки інверсії. Також видно, що основний внесок в енергію взаємодії фононів з електронами та екситонами, при заданих розмірах наносистеми дає рівень із максимальним за модулем значенням потенціалу поля поляризації, а саме рівень із енергією $w = 31.46$ меВ. Крім того потенціал поля поляризації інтерфейсних фононів приймає екстремальні значення на межах середовищ, і мінімальні значення в середині квантових плівок.

Отримані частоти та потенціали поля поляризації обмежених та інтерфейсних фононів та їх закони дисперсії можуть бути використані для вивчення взаємодії між квазічастинками та цими типами коливань.

- [1] Cao J C Interband Impact Ionization and Nonlinear Absorption of Terahertz Radiation in Semiconductor Heterostructures // *Phys. Rev. Lett.* **91** (23) pp. 237401.-237405 (2003).
- [2] Y.U. Bing. Interface phonon modes in quantum cascade lasers // *Chin.phus.lett.*, **22**(9), pp.2403-2406 (2005).
- [3] Н.В. Ткач, Ю.А. Сети. Свойства электронного спектр в двухъямной закрытой сферической квантовой точке и его эволюция при изменении толщины внешней ямы, // *ФТП.***40**(9). С. 1111-1119 (2006).
- [4] Ткач М.В., Сети Ю.О. Еволюція електронного спектра сферично-симетричних станів при переході від закритої двох ямної до простої відкритої сферичної квантової точки // *Укр.Фізичний Журнал*, **51**(9), pp.907-915 (2006).
- [5] Rucker H., Molinari E., Lugli P. Microscopic calculation of the electron-phonon interaction in quantum wells // *Phys.Rev.B*, **45**, pp. 6747-6756 (1992).
- [6] Zhang L., Xie H.J. and C.Y. Chen Surface and interface optical phonon modes and electron-phonon interaction in a multi-shell spherical system // *Eur.Phys.J.*, **27**, pp.577-582.(2002).
- [7] Michael A. Strosio and G. J. Iafrate. Transfer matrix method for interface optical-phonon modes in multiple-interface heterostructure systems // *J. Appl. Phys.* **82** (7), pp. 3363-3367(1997).

A.M. Gryshchuk¹ V.V. Gryshchuk¹, I.V. Boyko²

Electrostatic Potential and Optical Phonon Modes in Multilayered Quantum Nanowells

¹ *Franco Zhitomir State University, Zhitomir, 10008, Ukraine, teor-caf@meta.ua*

² *Fedkovych Chernivtsi National University, Chernivtsi, 58012, Ukraine, kff@chnu.edu.ua*

In working are considered the spectra of all types' phonons existing in a multilayered quantum nanowell. It is shown that there are confined optical (LO) and interface phonons of vibration in such nanosystem. The dependences of the phonons energy on the quantum layers and the Hamiltonian electron-phonon interaction are researched. Here we consider the nanoheterosystem consisting of five layers of flat nanowells $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$. The system is placed into external medium $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$.