ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА З ФОНОННИМИ ПОВТОРЕННЯМИ У ПЛОСКІЙ НАПІВПРОВІДНИКОВІЙ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРІ З КВАНТОВОЮ ЯМОЮ

В.М. КРАМАР, М.В. ТКАЧ

Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича
(Вул. Коцюбинського, 2, Чернівці 58012)

УДК 538.975; 538.915

Досліджено перенормування енергетичного спектра електрона у плоскій напівпровідниковій наногетероструктурі з прямокутною квантовою ямою скінченої глибини внаслідок взаємодії з оптичними поляризаційними фононами. У рамках методу функцій Гріна одержано аналітичний вигляд масового оператора, де враховано двофононні процеси електрон-фононної взаємодії при $T = 0$ К. Обчислено поправку до енергії дна основної зони електрона та положення перших фононних повторень, викликаних його взаємодією з обмеженими, напівпросторовими та інтерфейсними фононами.

1. Вступ

Перспектива створення новітньої електронно-оптичної техніки на основі напівпровідникових наногетеросистем (квантових ям (КЯ), точок і дротів) стимулює активні пошуки технологій виготовлення таких систем та дослідження їх властивостей [1–5]. Фізичні властивості наносистем у значній мірі визначаються структурою енергетичного спектра електронів та фононів, а також ефективністю їх взаємодії. Усе це суттєво залежить від просторової вимірності наносистеми та від зовнішніх умов, у яких вона знаходиться. Отже, вивчення закономірностей перенормування енергетичного спектра електронів у наносистемах внаслідок їх взаємодії з фононами залишається актуальною задачею як фундаментальних, так і прикладних досліджень у галузі фізики низьковимірних систем.

Теоретичні дослідження електронних спектрів у плоских напівпровідникових наногетероструктурах з КЯ (наноплівках, НП) із урахуванням їх взаємодії з фононами виконуються [6–11], як правило, в однофононному наближенні. Однак, з теорії електрон-фононної взаємодії (ЕФВ) у масивних кристалах відомо, що така взаємодія може приводити до появи зв'язаних станів, які експериментально проявляються у вигляді сателітів основної смуги спектра КРС (фононних повторень). Отже, виникає потреба в теорії ЕФВ у низьковимірних системах, здатної послідовно описувати настільки широкий діапазон енергій, що містив би область фононних повторень. Природно, така теорія повинна враховувати багатофононні процеси.

За умови невеликих концентрацій квазічастинок у наносистемі задача перенормування спектра в широкому діапазоні енергій розв'язується методом функцій Гріна з використанням діаграмної техніки Фейнмана–Пайнса [13, 14]. Однак проблема полягає в тому, що урахування багатофононних процесів ЕФВ потребує знаходження повного масового оператора (МО) електронів, який має вигляд нескінченного ряду діаграм з усіма можливими типами і кількістю фононних ліній. У моделі бездисперсійних фононів сума такого ряду може бути знайдена шляхом парціального підсумовування нескінченних рядів діаграм з фіксованою максимальною кількістю віртуальних фононів в усіх порядках за степенем константи зв'язку [15]. Це приводить до інтегрально-функціонального зображення МО електрона, практичне використання якого у конкретних задачах є надзвичайно складним завданням.

Метою цієї роботи є адаптування отриманого у [15] інтегрально-функціонального зображення МО загального вигляду для розрахунку перенормованого ЕФВ електронного спектра у НП із урахуванням двофононних процесів. Розв'язок цієї задачі дав можливість вперше здійснити розрахунок енергії дна основної зони електрона, перенормованої ЕФВ з усіма типами поляризаційних оптичних фононів, та встановити положення зв'язаних електрон-фононних станів у НП.

2. Гамільтоніан електрон-фононної системи у плоскій наноплівці. Перенормування електронного спектра при $T = 0$ K

Розглянемо плоску НП – напівпровідник товщиною a (середовище "0"), вміщений у зовнішнє напівпровідникове середовище ("1") з більшою шириною забороненої зони. Для опису станів електронної системи використаємо наближення ефективної маси, а фононної – модель діелектричного континууму. Подальші розрахунки виконані у припущенні про невиродженість та ізотропність енергетичного спектра електрона з використанням моделі прямокутної КЯ скінченої глибини.

Отже, у системі координат, початок якої знаходиться посередині плівки, а площина XOY паралельна до її поверхні, ефективна маса m і обмежуючий потенціал V електрона, а також діелектрична проникність ε середовища, в якому він знаходиться, вважаються відомими функціями z-ї компоненти радіус-вектора квазічастинки:

$$m(z) = \begin{cases} m_0, \\ m_1, \end{cases} \varepsilon(z) = \begin{cases} \varepsilon^{(0)}, \\ \varepsilon^{(1)}, \end{cases} V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \le \frac{a}{2}; \\ V, & |z| > \frac{a}{2}. \end{cases}$$

Гамільтоніани вільних електронів і фононів для такої моделі отримані у роботах [6–8]; відомий також гамільтоніан ЕФВ у зображенні чисел заповнення за всіма змінними системи [11].

З метою уникнення надто громіздких математичних викладок, обмежимося розглядом НП такої товщини, при якій у КЯ існує лише одна електронна зона з енергією

$$E(\mathbf{k}) = E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

де $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ – двовимірний квазіімпульс електрона. Тоді гамільтоніан електрон-фононної системи у зображенні чисел заповнення за всіма змінними має вигляд

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{\text{ph}} + \hat{H}_{\text{e-ph}}, \tag{1}$$

де

$$\hat{H}_e = \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \hat{a}^+_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \tag{2}$$

– електронний гамільтоніан;

$$\hat{H}_{\text{ph}} = \hat{H}_{L_0} + \hat{H}_{L_1} + \hat{H}_I = \sum_{\lambda,\mathbf{q}} \Omega_0 (\hat{b}^+_{\lambda,\mathbf{q}} \hat{b}_{\lambda,\mathbf{q}} + 1/2) +$$

$$+ \sum_{q_\perp,\mathbf{q}} \Omega_1 (\hat{b}^+_{q_\perp,\mathbf{q}} \hat{b}_{q_\perp,\mathbf{q}} + 1/2) + \sum_{\sigma,p,\mathbf{q}} \Omega_{\sigma,p} (\hat{b}^+_{\sigma,p,\mathbf{q}} \hat{b}_{\sigma,p,\mathbf{q}} + 1/2) \tag{3}$$

– гамільтоніан системи поляризаційних фононів у наногетеросистемі: обмежених у КЯ (L_0), стани яких відрізняються значеннями поперечної компоненти квазіімпульсу $q_\lambda = \lambda\pi/a$, де $\lambda = 1, 2, ..., N = \text{int}(a/a_0)$, a_0 – стала ґратки середовища "0"; напівобмежених (L_1) у бар'єрному середовищі та інтерфейсних ($I_{\sigma p}$) – симетричних ($\sigma = s$) і антисиметричних ($\sigma = a$), високо- ($p = +$) і низькоенергетичних ($p = -$) [6–8];

$$\hat{H}_{\text{e-ph}} = \hat{H}_{e-L_0} + \hat{H}_{e-L_1} + \hat{H}_{e-I\sigma p} =$$

$$= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mu} F_\mu(\mathbf{q}) \hat{a}^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mu\mathbf{q}} \tag{4}$$

– гамільтоніан взаємодії електрона з усіма гілками оптичних поляризаційних фононів у КЯ ($\mu = L_0$, L_1, $I_{\sigma\pm}$). Тут $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ – поздовжній квазіімпульс фонона у НП; решта позначення — типові; їх та явний вигляд функцій зв'язку $F_\mu(\mathbf{q})$ наведено у роботі [11].

Згідно з теорією функцій Гріна [13, 14] перенормований ЕФВ спектр електрона при $T = 0$ K визначається фур'є-образом функції Гріна:

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar\omega - E(\mathbf{k}) - M(\omega, \mathbf{k})}, \tag{5}$$

де $M(\omega, \mathbf{k})$ – повний МО [14, 15].

Ураховуючи слабкість електрон-фононного зв'язку, збережемо у повному МО [15] лише ту його частину, що описує двофононні процеси розсіювання електрона з основної зони при взаємодії зі всіма гілками фононів у НП [11]: обмеженими, напівпросторовими та симетричними інтерфейсними (високо- і низькоенергетичними) –

$$M(\omega, \mathbf{k}) =$$

$$= \sum_{\mu,\mathbf{q}} \frac{|F_\mu(\mathbf{q})|^2}{\hbar\omega - E - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2 - \Omega_\mu - M_2(\omega, \mathbf{k}+\mathbf{q})}, \quad (6)$$

де

$$M_2(\omega, \mathbf{k}+\mathbf{q}) \equiv$$

$$\equiv \sum_{\mu_1,\mathbf{q}_1} \frac{2|F_{\mu_1}(\mathbf{q}_1)|^2}{\hbar\omega - E - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}_1)^2 - \Omega_\mu - \Omega_{\mu_1}}; \quad (7)$$

$$\Omega_\mu = \begin{cases} \Omega_l, & \text{при} \quad \mu = L_l; \\ \Omega_\pm, & \text{при} \quad \mu = I_{s\pm}; \end{cases}$$

($l = 0,\ 1$; а $\Omega_\pm$ – усереднені енергії симетричних інтерфейсних фононів).

Переходячи у (7) від підсумовування за вектором $\mathbf{q}_1$ до інтегрування за змінними (q_1, φ) полярної системи координат при $\mathbf{k} = 0$, отримуємо

$$M_2(\omega, q) = \frac{S}{2\pi^2} \sum_{\mu_1} \int\limits_0^{q_{\max}} q_1 |F_{\mu_1}(q_1)|^2 dq_1 \times$$

$$\times \int\limits_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\hbar\omega - E - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\mathbf{q}+\mathbf{q}_1)^2 - \Omega_\mu - \Omega_{\mu_1}}. \quad (8)$$

Інтеграл за змінною φ береться точно. Результатом інтегрування є функція

$$J_{\mu,\mu_1}(\omega, q, q_1) = -2\pi \left\{ \left[\hbar\omega - E - \frac{\hbar^2}{2m_0}(q^2 + q_1^2) - \right.\right.$$

$$\left.\left. -\Omega_\mu - \Omega_{\mu_1} \right]^2 - \left[\frac{\hbar^2 q q_1}{m_0} \right]^2 \right\}^{-1/2}, \quad (9)$$

що дозволяє, використавши явний вигляд функцій ЕФЗ, записати

$$M_2(\omega, q) = \frac{2e^2}{a} C \sum_\mu \left\{ \frac{\pi \Omega_{L_0}}{\varepsilon^{(0)}} \times \right.$$

$$\times \sum_{\lambda=1}^{N} (\lambda X_\lambda)^2 \int\limits_0^{\pi/a_0} \frac{J_{L_0,\mu}(\omega, q, q_1) q_1 dq_1}{q_1^2 + (\lambda\pi/a)^2} +$$

$$+ a \sum_{p=\pm} \Omega_p \int\limits_0^{\pi/a_0} \frac{J_{sp,\mu}(\omega, q, q_1) f_s^2(q_1) dq_1}{\epsilon_s^{(0)}(q_1)\zeta_{sp}^{(0)}(q_1) + \epsilon_s^{(1)}(q_1)\zeta_{sp}^{(1)}(q_1)} +$$

$$\left. + \frac{2a_1^3 \Omega_{L_1}}{\pi^2 a \varepsilon^{(1)}} \cos^4 \frac{k_0 a}{2} \int\limits_0^{\pi/a_1} J_{L_1,\mu}(\omega, q, q_1) I(q_1) q_1 dq_1 \right\}, \quad (10)$$

де

$$C = \frac{4}{\left[1 + \frac{\sin(k_0 a)}{k_0 a} + 2\frac{\sin^2(k_0 a/2)}{k_1 a} \right]^2}; \quad \frac{1}{\varepsilon^{(l)}} = \frac{1}{\varepsilon_\infty^{(l)}} - \frac{1}{\varepsilon_0^{(l)}};$$

$$\epsilon_s^{(l)}(q) = \varepsilon_\infty^{(l)} [1 - (-1)^l \exp(-qa)];$$

$$\zeta_{sp}^{(l)}(q) = \frac{\varepsilon^{(l)} \Omega_{sp}^2(q)}{\varepsilon_0^{(l)} \Omega_{T_l}^2} \left[\frac{\Omega_{L_l}^2 - \Omega_{T_l}^2}{\Omega_{T_l}^2 - \Omega_{sp}^2(q)} \right]^2;$$

$$I(q) = \int\limits_0^{\pi/a_1} \frac{a_1 q_\perp^2 dq_\perp}{(q^2 + q_\perp^2)[(2k_1 a_1)^2 + (q_\perp a_1)^2]^2}; \quad (11)$$

$$k_0 = \sqrt{2m_0 E}/\hbar, k_1 = \sqrt{2m_1(V - E)}/\hbar,$$

а X_λ і $f_s(q)$ – наведені у [11] функції, залежні від товщини НП a та поперечної складової квазіімпульсу k_l електрона у середовищі l (l=0, 1), що входять до відповідної функції зв'язку. Зокрема, для використаної тут моделі

$$X_\lambda = \frac{1 - (-1)^\lambda}{2} \left[\frac{1}{(\lambda\pi)^2} + \frac{\cos(k_0 a)}{(\lambda\pi)^2 - (2k_0 a)^2} \right],$$

$$f_s(q) = \frac{\sqrt{1 + \exp(-qa)}}{a} \left\{ \frac{2\cos^2(k_0 a/2)}{2k_1 + q} + \right.$$

$$\left. + \mathrm{th}\left(\frac{qa}{2}\right) \left[\frac{q\cos(k_0 a)}{4k_0^2 + q^2} + \frac{1}{q} \right] + \frac{2k_0 \sin(k_0 a)}{4k_0^2 + q^2} \right\}.$$

Візьмемо також до уваги, що основний внесок до МО дають стани з малими значеннями квазіімпульсу [11], а функція (9) має частинні похідні довільного порядку. Розкладаючи її в ряд та зберігаючи у ньому доданки не вище другого степеня, виконаємо інтегрування у (10) за змінною q_1. Отримаємо

$$M_2(\omega, q) = M_2^{(0)}(\omega) + M_2^{(2)}(\omega) q^2, \quad (12)$$

де

$$M_2^{(i)}(\omega) = -\frac{4e^2 m_0 a}{\hbar^2} C \sum_\mu \left\{ \frac{\Omega_0}{\varepsilon^{(0)}} \sum_{\lambda=1}^{N} (\lambda X_\lambda)^2 Y_{\lambda\mu}^{(i)}(\omega) + \right.$$

$$+\frac{2a}{\pi^2}\sum_{p=\pm}\Omega_p Z^i_{p\mu}(\omega)+\frac{2\Omega_1}{\pi\varepsilon^{(1)}}\cos^4(\frac{k_0a}{2})I(0)W^{(i)}_\mu(\omega)\Big\};\qquad(13)$$

$$Y^{(0)}_{\lambda\mu}(\omega)=\frac{N^2\eta_{L_0\mu}(\omega)}{\lambda^2\eta_{L_0\mu}(\omega)+1}\ln\frac{1-N^2\eta_{L_0\mu}(\omega)}{1+(N/\lambda)^2};$$

$$Y^{(2)}_{\lambda\mu}(\omega)=\frac{a^2}{\pi^2}\Big\{\frac{2\eta_{L_0\mu}(\omega)}{[\lambda^2\eta_{L_0\mu}(\omega)+1]^3}\ln\frac{1-N^2\eta_{L_0\mu}(\omega)}{1+(N/\lambda)^2}+$$

$$+\frac{N^2\eta^2_{L_0\mu}(\omega)}{[\lambda^2\eta_{L_0\mu}(\omega)+1]^2}\left[\frac{2N^2\eta_{L_0\mu}(\omega)}{N^2\eta_{L_0\mu}(\omega)-1}-\right.$$

$$\left.-\ln\frac{1-N^2\eta_{L_0\mu}(\omega)}{1+(N/\lambda)^2}\right]-$$

$$-\frac{N^4\eta^3_{L_0\mu}(\omega)}{[\lambda^2\eta_{L_0\mu}(\omega)+1][N^2\eta_{L_0\mu}(\omega)-1]^2}\Big\};$$

$$Z^{(0)}_{p\mu}(\omega)=\int\limits_0^{\pi/a_0}\frac{\eta_{p\mu}(\omega)}{(qa/\pi)^2\eta_{p\mu}(\omega)-1}\times$$

$$\times\frac{f^2_s(q)dq}{\epsilon^{(0)}_s(q)\zeta^{(0)}_{sp}(q)+\epsilon^{(1)}_s(q)\zeta^{(1)}_{sp}(q)};$$

$$Z^{(2)}_{p\mu}(\omega)=\frac{a_0^2}{\pi^2}\int\limits_0^{\pi/a_0}\left[\frac{1}{[(qa/\pi)^2\eta_{p\mu}(\omega)-1]^2}+\right.$$

$$\left.+\frac{2}{[(qa/\pi)^2\eta_{p\mu}(\omega)-1]^3}\right]\eta^2_{p\mu}(\omega)\times$$

$$\times\frac{f^2_s(q)dq}{\epsilon^{(0)}_s(q)\zeta^{(0)}_{sp}(q)+\epsilon^{(1)}_s(q)\zeta^{(1)}_{sp}(q)};$$

$$W^{(0)}_\mu(\omega)=(\frac{a_1}{a})^3\ln[1-(\frac{a}{a_1})^2\eta_{L_1\mu}(\omega)];$$

$$W^{(2)}_\mu(\omega)=\frac{aa_1}{\pi^2}\left[\frac{a_1^2\eta_{L_1\mu}(\omega)}{a^2\eta_{L_1\mu}(\omega)-a_1^2}\right]^2;$$

$$\eta_{\mu\mu_1}(\omega)=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2(\hbar\omega-E-\Omega_\mu-\Omega_{\mu1})}$$

і покладено

$$I(q_1)\approx I(0)=\frac{1}{8\pi(k_1a)^2}\left[\frac{1}{(2k_1a_1/\pi)^2+1}+\right.$$

$$\left.+\frac{\pi}{2k_1a_1}\mathrm{arctg}\frac{\pi}{2k_1a_1}\right].$$

У цих позначеннях повний МО набуває вигляду

$$M(\omega)=-\frac{\pi e^2}{a}C\Big\{\frac{\pi}{\varepsilon^{(0)}}\sum_{\lambda=1}^{N}(\lambda X_\lambda)^2\Phi_\lambda(\omega)+\frac{aa_0^2}{2\pi^3}\times$$

$$\times\sum_{p=\pm}\frac{\Omega_p\eta_{sp}(\omega)}{\hbar^2/(2m_0)+M^{(2)}_2(\omega)}\int\limits_0^{\pi/a_0}\frac{1}{(qa_0/\pi)^2\eta_{sp}(\omega)-1}\times$$

$$\times\frac{f^2_s(q)dq}{\epsilon^{(0)}_s(q)\zeta^{(0)}_{sp}(q)+\epsilon^{(1)}_s(q)\zeta^{(1)}_{sp}(q)}+$$

$$+\frac{2a_1^3\Omega_1}{\pi^2a\varepsilon^{(1)}}\cos^4(\frac{k_0a}{2})I(0)\frac{\ln[1-\eta_{L_1}(\omega)]}{\hbar^2/(2m_0)+M^{(2)}_2(\omega)}\Big\},\qquad(14)$$

де

$$\Phi_\lambda(\omega)=\frac{\Omega_0\eta_{L_0}(\omega)a_0^2}{\pi^2[\hbar^2/(2m_0)+M^{(2)}_2(\omega)]}\frac{\ln\frac{1-\eta_{L_0}(\omega)}{1+(N/\lambda)^2}}{(\lambda/N)^2\eta_{L_0}(\omega)+1};$$

$$\eta_\mu(\omega)=\frac{\pi^2}{a_\mu^2}\frac{\hbar^2/(2m_0)+M^{(2)}_2(\omega)}{\hbar\omega-E-\Omega_\mu-M^{(0)}_2(\omega)};$$

$$a_\mu=\begin{cases}a_0, & \text{при } \mu=L_0,\ I_{s\pm};\\ a_1, & \text{при } \mu=L_1.\end{cases}$$

Перенормоване ЕФВ положення дна основної зони електрона у НП визначається густиною станів

$$g(\omega)=\frac{\mathrm{Im}M(\omega)}{[\hbar\omega-E-\mathrm{Re}M(\omega)]^2+[\mathrm{Im}M(\omega)]^2},\qquad(15)$$

а в області $\hbar\omega\le E$ – також з рівняння

$$\hbar\omega-E=M(\omega).\qquad(16)$$

Понад дном зони, компоненти двофононного МО $M_2(\omega,q)$ можуть набувати комплексних значень, а інтервали дійсних значень кожної з них – різні. Відповідно повний МО $M(\omega)$ також стає комплексним. Виокремлення його дійсної і уявної частин дозволяє знайти густину зв'язаних електрон-фононних станів $g(\omega)$.

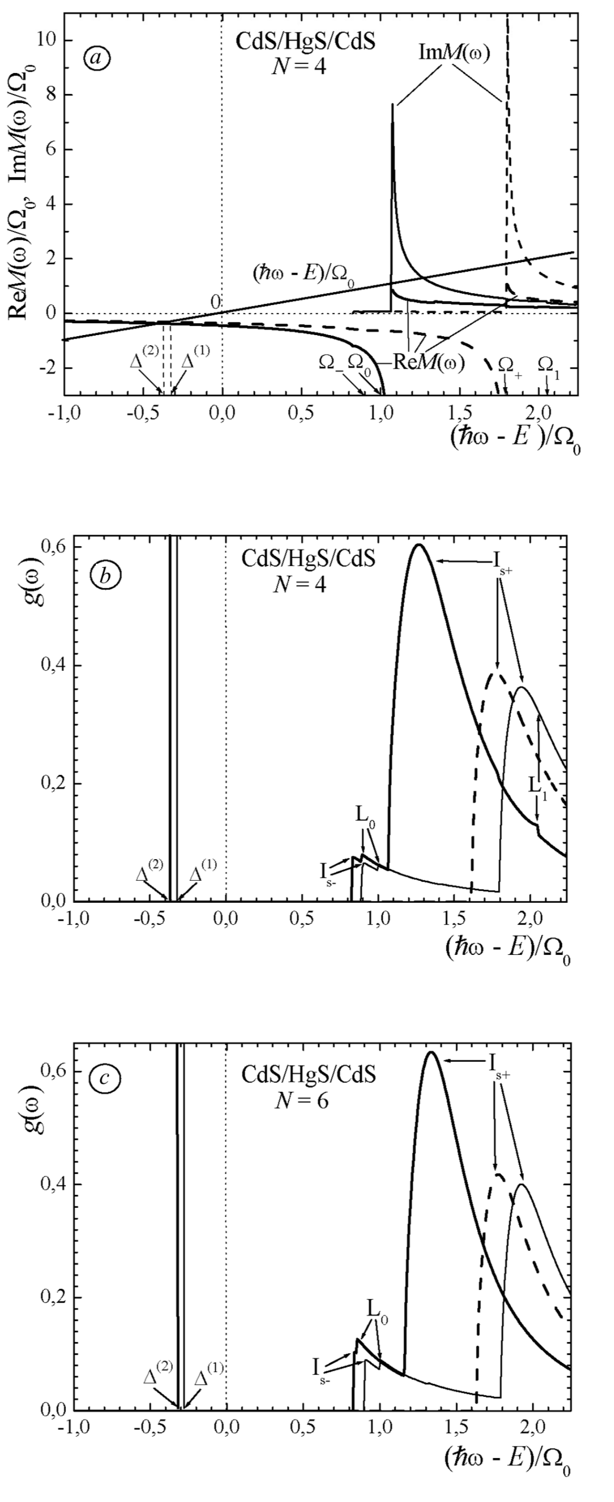

Рис. 1. Спектральні залежності дійсної та уявної частин масового оператора у одно- (розривні лінії) і двофононному (суцільні лінії) наближеннях (a) та густини зв'язаних станів у одно- (тонкі лінії) та двофононному (товсті лінії) наближеннях (b, c)

3. Результати і обговорення

Конкретні розрахунки виконані на прикладі НП β-HgS, оточеної масивним середовищем β-CdS, з використанням наведених у [11] параметрів системи.

На рис. 1,a наведено спектральні залежності дійсної та уявної частин МО, розраховані у одно- (розривні лінії) та двофононному (суцільні лінії) наближеннях для НП товщиною 2,34 нм ($N = 4$). Видно, що зміщення дна основної зони ($\Delta^{(2)} = -0,371\Omega_0$), визначене у двофононному наближенні, перевищує аналогічне значення ($\Delta^{(1)} = -0,321\Omega_0$), одержане у рамках однофононного наближення. Відрізняються також положення піків уявних частин МО та їх висоти.

На рис. 1,b,c показано залежності густин зв'язаних станів, розрахованих в обох наближеннях, від енергії. Дельтаподібний пік та локальні максимуми кривої $g(\omega)$ визначають, відповідно, положення дна зони та фононних повторень першого порядку.

У рамках однофононного наближення повторення, пов'язані з кожною із фононних гілок, визначаються значенням енергії відповідного фонона Ω_μ, а дно зони зміщується у довгохвильову область на величину $\Delta^{(1)}$. Як наслідок, кожне фононне повторення виявляється віддаленим від дна зони на відстань $|\Delta^{(1)}| + \Omega_\mu$, що перевищує енергію відповідного фонона.

Двофононне наближення, уточнюючи положення дна зони, визначає перенормовані взаємодією з фононами енергії зв'язаних електрон-фононних станів. Як показують розрахунки, зміщення кожного піка густини станів, що відповідає певному фононному повторенню, перевищує приріст зміщення дна зони $\Delta^{(1)}$–$\Delta^{(2)}$. Тому відстань кожного фононного повторення від дна зони зменшується, наближаючись до значення Ω_μ. Цю обставину проілюстровано на рис. 1,b, де розривною лінією показано пік фононного повторення I_{s+}, визначений у двофононному наближенні з урахуванням взаємодії виключно з високоенергетичною гілкою симетричних інтерфейсних фононів. Зміщення піків, пов'язаних з іншими гілками, подібні, але значно менші за величиною.

Урахування у двофононному МО взаємодії електрона з усіма гілками фононів у НП приводить до того, що густина станів (товста суцільна лінія на рис. 1,b) відрізняється від простої суперпозиції її парціальних компонент, одну з яких (I_{s+}) показано розривною кривою. Видно, що взаємний вплив різних гілок фононного спектра у НП проявляється у нелінійному зміщенні максимумів та збільшенні ширини кожного з піків функції $g(\omega)$. Останнє є проявом факту зменшення часу життя відповідного зв'язаного стану за рахунок взаємодії з усіма гілками фононів у НП.

На рис. 1,*c* наведено результати аналогічних розрахунків, виконаних для НП з більшою товщиною (3,51 нм, $N = 6$). Видно, що положення дна основної зони електрона і фононних повторень залежать від товщини НП – при її збільшенні густина станів, пов'язаних з обмеженими фононами, зростає, а з напівпросторовими – зменшується. Відносна висота відповідних максимумів та їх положення, а отже і вигляд спектрів КРС у НП будуть суттєво залежати від її товщини. Це дає принципову можливість контролю геометричних розмірів наногетеросистеми методами КРС-спектроскопії.

У таблиці наведено також результати розрахунків зміщення дна основної зони електрона у КЯ, виконаних в одно- та двофононному наближеннях з урахуванням ЕФВ виключно з обмеженими фононами для ряду НП, що відрізняються значеннями константи електрон-фононного зв'язку:

$$\alpha_F = \frac{e^2}{\hbar}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right)\sqrt{\frac{m}{2\Omega}}.$$

Як видно, у НП зі слабким електрон-фононним зв'язком відмінність між результатами одно- та двофононного наближень невелика (не перевищує 15%) і тим менша, чим менша стала α_F. Це дозволяє стверджувати, що використання однофононного наближення для розрахунку енергії електрона у КЯ, перенормованої його взаємодією з фононами у наносистемах зі слабким електрон-фононним зв'язком, є цілком виправданим.

4. Висновки

1. Запропоновано теорію, що вперше дала можливість послідовного розгляду ролі двофононних процесів у формуванні енергетичного спектра електрона з урахуванням його взаємодії з усіма типами оптичних поляризаційних фононів у НП.

НП	α_F	$\Delta^{(1)}/\Omega$	$\Delta^{(2)}/\Omega$	різниця, %
InP/InAs/InP	0,048	–0,0270	–0,0274	1,5
AlAs/GaAs/AlAs	0,079	–0,0482	–0,0496	2,6
ZnS/CdS/ZnS	0,139	–0,0882	–0,0923	4,6
β-CdS/β-HgS/β-CdS	0,497	–0,2796	–0,3199	14,4

2. Показано, що у НП зі слабким електрон-фононним зв'язком відмінність між результатами розрахунків енергії електрона в одно- та двофононному наближеннях невелика. Визначення ж положень перших фононних повторень КРС-спектрів у НП можливе у наближенні, що враховує не менше, ніж двофононні процеси.

3. Розвинута у двофононному наближенні теорія ЕФВ може бути поширена, шляхом врахування багатофононних процесів, на ширший інтервал енергій з метою визначення положення наступних фононних повторень при $T = 0$ К. Застосування діаграмної техніки Пайнса за умови малих концентрацій електронів також дасть можливість адаптувати цю теорію на випадок довільних температур, що передбачається виконати у наступних роботах.

1. P. Harrison, *Quantum Wells, Wires, and Dots: Theoretical and Computational Physics* (Wiley, Chichester, 1999).
2. V.V. Mitin, V.A. Kochelap, and M.A. Stroscio, *Quantum Heterostructures. Microelectronics and Optoelectronics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1999).
3. D.D. Nolte, J. Appl. Phys. **85**, 6259 (1999).
4. D. Dorfs, H. Henschel, J. Kolny, and A. Eychmuller, J. Phys. Chem. B **108**, 1578 (2004).
5. P. Mohan, J. Motohisa, and T. Fukui, Appl. Phys. Lett. **88**, 133105 (2006).
6. L. Wendler, Phys. stat. sol. (b) **129**, 513 (1985).
7. K. Huang and B.F. Zhu, Phys. Rev. B **38**, 13377 (1988).
8. N. Mori and T. Ando, Phys. Rev. B **40**, 6175 (1989).
9. В.І. Бойчук, В.А. Борусевич, Журн. фіз. досл. **10**, 39 (2006).
10. V.I. Boichuk, V.A. Borusevych, and I.S. Shevchuk, J. Optoelectron. Adv. Mater. **10**, 1357 (2008).
11. М.В. Ткач, В.М. Крамар, УФЖ **53**, 812 (2008).
12. М.В. Ткач, В.М. Крамар, УФЖ **53**, 1111 (2008).
13. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (Физматгиз, Москва, 1962).
14. М.В. Ткач, *Квазічастинки у наногетеросистемах. Квантові точки і дроти* (Вид-во ЧНУ ім. Юрія Федьковича, Чернівці, 2003).
15. М.В. Ткач, Журн. фіз. досл. **6**, 124 (2002).

Одержано 03.08.09

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ
СПЕКТР ЭЛЕКТРОНА
С ФОНОННЫМИ ПОВТОРЕНИЯМИ
В ПЛОСКОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ
НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРЕ С КВАНТОВОЙ ЯМОЙ

В.М. Крамар, Н.В. Ткач

Р е з ю м е

Исследовано перенормирование энергетического спектра электрона в плоской полупроводниковой наногетероструктуре с прямоугольной квантовой ямой конечной глубины вследствие взаимодействия с оптическими поляризационными фононами. В рамках метода функций Грина получено аналитическое выражение для массового оператора, учитывающего двухфононные процессы электрон-фононного взаимодействия при $T = 0$ K. Вычислена поправка к энергии дна основной зоны электрона и положение первых фононных повторений, вызванных его взаимодействием с ограниченными, полуограниченными и интерфейсными фононами.

ENERGY SPECTRUM OF AN ELECTRON
WITH PHONON REPLICAS IN A FLAT SEMICONDUCTOR
NANOHETEROSTRUCTURE WITH QUANTUM WELL

V.M. Kramar, M.V Tkach

Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University
(*2, Kotsyubyns'kyi Str., Chernivtsi 58012*)

S u m m a r y

We investigated the renormalization of the energy spectrum of an electron in a flat semiconductor nanoheterostructure with a rectangular quantum well of finite depth due to its interaction with optical polarization phonons. The analytical form of the mass operator with regard for two-phonon processes of the electron-phonon interaction at $T = 0$ K is obtained in the framework of the Green function method. The corrections to the main-band bottom energy of an electron and positions of the first phonon replicas induced by its interaction with confined, half-space, and interface phonons are calculated.