

ДВОФОНОННЕ НАБЛИЖЕННЯ У ЗАДАЧАХ ПЕРЕНОРМУВАННЯ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРА КВАЗІЧАСТИНКИ У ПЛОСКІЙ НАПІВПРОВІДНИКОВІЙ НАНОПЛІВЦІ

Валерій КРАМАР, Микола ТКАЧ, Микола КУРГАНЕЦЬКИЙ

Чернівецький національний університет
імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського 2, Чернівці 58012
e-mail: kramar@itf.cv.ua

Редакція отримала статтю 10 лютого 2010 р.

Методом функцій Гріна досліджено вплив електрон-фононної взаємодії на розташування дна основної зони електрона у плоскій наноплівці з прямокутною квантовою ямою скінченної глибини. Отримано аналітичний вигляд масового оператора, що враховує двофононні процеси взаємодії електронів з обмеженими оптичними фононами при $T = 0 K$. На прикладі ряду середовищ з різною константою електрон-фононного зв'язку показано, що врахування двофононних процесів уточнює значення енергії електрона у наноплівці порівняно з обчисленими в однофононному наближенні. Відносна похибка цих наближень у досліджуваних наноструктурах становить 1,5 - 14,4% і лінійно зростає при збільшенні константи електрон-фононного зв'язку.

1. ВСТУП

Протягом останніх десятиліть ведуться активні пошуки технологій виготовлення та дослідження властивостей напівпровідникових наногетеросистем (квантових ям (КЯ), точок і дротів) у зв'язку з перспективою створення на їх основі новітньої електронно-оптичної техніки [1–5]. Оптичні властивості наносистем визначаються структурою енергетичного спектра електронів та фононів, що суттєво залежать від просторової вимірності наносистем, та від зовнішніх умов, у яких вони перебувають. Отже, задача обчислення перенормованого взаємодією з фононами енергетичного спектра електронів у наносистемах є актуальною.

Теоретичні дослідження електронних спектрів у плоских напівпровідникових гетероструктурах з КЯ із урахуванням їх взаємодії з фононами виконуються, як правило, методами теорії збурень [6–8], Лі-Лоу-Пайнса [9, 10] або функцій Гріна [11, 12] в однофононному наближенні, що передбачає слабкість електрон-фононного зв'язку (ЕФЗ).

Такі підходи дали змогу обчислити перенормований взаємодією з фононами енергетичний спектр електрона у КЯ, дослідити його залежність від ширини КЯ [6–11] та температури [12].

Однак у вказаних та в інших роботах такого типу слабкість ЕФЗ постулюється, проте строго не обґрунтовується. У кращому випадку робиться посилання на відповідні оцінки, виконані для масивних аналогів досліджуваних наносистем. Природно, виникає потреба у розробці та апробації математичного апарату, який дав би змогу послідовно й однозначно оцінювати точність наближень, що використовуються при обчисленні перенормованих взаємодією з фононами спектрів електронів, дірок та екситонів.

Крім того, з теорії електрон-фононої взаємодії (ЕФВ) у масивних кристалах відомо, що навіть при слабкому ЕФЗ у системі можуть виникати зв'язані стани, які експериментально проявляються у вигляді сателітів основної смуги раманівського спектра. Отже, виникає потреба в теорії ЕФВ у низьковимірних системах, яка би послідовно описувала настільки широкий діапазон енергій, що містив би фононі повторення. Зрозуміло, що теорія, яка потенційно здатна описати подібні явища, повинна враховувати багатофоновні процеси.

За умови невеликих концентрацій квазічастинок у наносистемі задачу перенормування спектра в широкому діапазоні енергій можна розв'язати методом функцій Гріна з використанням діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса [12, 13]. Однак проблема полягає у тому, що урахування багатофоновних процесів ЕФВ потребує знаходження повного масового оператора (МО) електронів, який має вигляд нескінченного ряду діаграм з усіма можливими типами і кількістю фононних ліній [13, 14]. Суму такого ряду можна знайти шляхом парціального підсумовування нескінчених 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.

Мета цієї роботи полягає в адаптації отриманого у [15] інтегрально-функціонального зображення МО до задачі обчислення перенормованого ЕФВ електронного спектра у плоскій напівпровідниковій наноплівці (НП) з КЯ із урахуванням двофоновних процесів. Розв'язок цієї задачі дав можливість вперше оцінити другу поправку до енергії електрона у НП. Конкретне обчислення, виконане на прикладі ряду НП з різною силою ЕФЗ, дало змогу послідовно обґрунтувати твердження про слабкість ЕФЗ у досліджуваних наносистемах. Крім того, отриманий позитивний результат застосованого тут математичного апарату дає змогу впевнено пропонувати його для дослідження зв'язаних електрон-фононних станів у НП.

Розглядається КЯ, утворена плоским подвійним гетеропереходом між напівпровідниками з різною шириною забороненої зони – вузькозонним матеріалом КЯ (НП, середовище “0”) та широкозонним бар'єрним матеріалом (середовище “1”). Для опису станів електронної системи використано наближення ефективної маси, а фононої – модель діелектричного континууму. Подальші обчислення виконані у припущенні про невиродженість та ізотропність енергетичного спектра електрона з використанням моделі прямокутної КЯ скінченної глибини.

Отже, у системі координат, початок якої знаходиться посередині плівки товщиною a , а площина ХОУ паралельна до її поверхні, ефективна маса (m) і обмежувачий потенціал (V) електрона, а також діелектрична проникність (ε) середовища вважаються відомими функціями змінної z :

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

Розглянемо тут НП такої товщини, що дають змогу обмежитися розглядом ЕФВ електрона, який знаходиться в одному з квантованих станів, виключно з обмеженими поляризаційними фононами, нехтуючи впливом як коливань іншого типу, так і станів континуальної частини електронного спектра. Тоді гамільтоніан електрон-фононної системи у зображенні чисел заповнення за всіма змінними має стандартний вигляд

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{e-ph}, \quad (1)$$

де

$$\hat{H}_e = \sum_{n, \vec{k}_{||}} E_{n\vec{k}_{||}} \hat{a}_{n\vec{k}_{||}}^+ \hat{a}_{n\vec{k}_{||}}, \quad (2)$$

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\lambda, \vec{q}_{||}} \Omega (\hat{b}_{\lambda, \vec{q}_{||}}^+ \hat{b}_{\lambda, \vec{q}_{||}} + 1/2), \quad (3)$$

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{\substack{n, n', \lambda \\ \vec{k}_{||}, \vec{q}_{||}}} F_{nn'}^\lambda(\vec{q}_{||}) \hat{a}_{n', \vec{k}_{||} + \vec{q}_{||}}^+ \hat{a}_{n, \vec{k}_{||}} (\hat{b}_{\lambda, \vec{q}_{||}} + \hat{b}_{\lambda, -\vec{q}_{||}}), \quad (4)$$

– відповідно, гамільтоніани електронів, обмежених фононів та ЕФВ, яка характеризується функцією зв'язку [11]

$$F_{nn'}^\lambda(\vec{q}_{||}) = i \sqrt{\frac{4\pi^3 e^2 \Omega}{\varepsilon \tilde{S}} \frac{a}{\pi^2 + (aq_{||}/\lambda)^2}} C_n C_{n'} X_{nn'}^\lambda, \quad (5)$$

де Ω – енергія обмеженого фонона; \tilde{S} – площа основної області площини гетеропереходу; $\lambda = 1, 2, \dots, N$ – квантове число, що визначає поперечну складову $q_\lambda = \lambda\pi/a$ квазіімпульсу обмеженого фонона у НП; $N = \text{int}(a/a_0)$ (a_0 – стала ґратки середовища “0”); C_n – нормувальний множник функції стану електрона з n -ої зони у КЯ; $X_{nn'}^\lambda$ – залежна від товщини НП та поперечної складової квазіімпульсу електрона $k_{0n} = \sqrt{2m_0 E_n}/\hbar$ функція, явний вигляд якої наведений у [11].

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

$$G_{nn}(\omega, \vec{k}_{||}) = \frac{1}{\hbar\omega - E_n(\vec{k}_{||}) - M_{nn}(\omega, \vec{k}_{||})}, \quad (6)$$

де $M_{nn}(\omega, \vec{k}_{\parallel})$ – повний МО, дійсна частина якого визначає перенормовану ЕФВ енергію $E_n(\vec{k}_{\parallel}) + M_{nn}(\omega, \vec{k}_{\parallel})$ електрона у стані $\vec{k} = (\vec{k}_{\parallel}, k_n)$ [14, 15].

Електронний спектр НП товщиною у десятки нанометрів ще досить “розріджений” у тому сенсі, що основна ($n = 1$) зона віддалена від інших ($n \geq 2$) на величину, що перевищує енергію обмеженого фонона, а тому ЕФВ через усі зони зберігатимемо лише у двофононному МО основної зони [15]:

$$M_{11}^{(2)}(\omega, \vec{k}_{\parallel}) = \sum_{n, \lambda, \vec{q}_{\parallel}} |F_{1n}^{\lambda}(\vec{q}_{\parallel})|^2 \{ \hbar\omega - E_n - \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}_{\parallel} + \vec{q}_{\parallel})^2 - \Omega - \widetilde{M}_{nn}^{(2)}(\omega, \vec{k}_{\parallel} + \vec{q}_{\parallel}) \}^{-1}, \quad (7)$$

де

$$\begin{aligned} \widetilde{M}_{nn}^{(2)}(\omega, \vec{k}_{\parallel} + \vec{q}_{\parallel}) &\equiv 2 \sum_{n', \lambda', \vec{q}'_{\parallel}} |F_{nn'}^{\lambda'}(\vec{q}'_{\parallel})|^2 \times \\ &\times \{ \hbar\omega - E_{n'} - \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}_{\parallel} + \vec{q}_{\parallel} + \vec{q}'_{\parallel})^2 - 2\Omega \}^{-1} \end{aligned} \quad (8)$$

– двофононний масовий оператор. Переходячи від суми за компонентами поздовжнього квазіімпульсу фонона \vec{q}_{\parallel} до інтегралу за змінними φ та $y = a_0 q_{\parallel} / \pi$ полярної системи координат, приводимо (8) до вигляду

$$\begin{aligned} \widetilde{M}_{nn}^{(2)}(\omega, y) &= 2 \sum_{n', \lambda'} \int_0^1 dy' |F_{nn'}^{\lambda'}(y')|^2 y' \cdot \\ &\cdot \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\hbar\omega - E_{n'} - \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma_0^2} (y^2 + y'^2 + 2yy' \cos \varphi) - 2\Omega}, \end{aligned} \quad (9)$$

що після інтегрування за кутовою змінною (за умови $\hbar\omega < E_1 + 2\Omega$) перетворюється на

$$\begin{aligned} \widetilde{M}_{nn}^{(2)}(\omega, y) &= -\frac{\pi^2 e^2 C_n^2}{\varepsilon a N^2 \eta_0} \sum_{n', \lambda'} (\lambda' C_{n'} X_{nn'}^{\lambda'})^2 \int_0^1 \frac{dx}{x + (\frac{\lambda'}{N})^2} \cdot \\ &\cdot \frac{1}{\sqrt{(x - y^2)^2 - 2(x + y^2)\zeta_{n'}(\omega) + \zeta_{n'}^2(\omega)}}, \end{aligned} \quad (10)$$

де $x \equiv y'^2$, $\zeta_n(\omega) = \frac{\hbar\omega - E_n - 2\Omega}{N^2 \eta_0 \Omega}$, а $\eta_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2 \Omega}$.

Згідно з (5), основний внесок у МО дають стани з малими значеннями квазіімпульсу фонона, а підкореневий вираз у (10) є функцією,

що має частинні похідні довільного порядку за змінною y . Використовуючи розвинення її у ряд і зберігаючи у ньому ненульові члени до степеня y^2 включно, виконано інтегрування у (10), що дало змогу подати двофононний МО у вигляді квадратичної функції від y

$$\widetilde{M}_{nn}^{(2)}(\omega, y) = \widetilde{M}_{nn}^{(2,0)}(\omega) + \widetilde{M}_{nn}^{(2,2)}(\omega)y^2, \quad (11)$$

де

$$\widetilde{M}_{nn}^{(2,i)}(\omega) = \frac{\pi^2 e^2}{\varepsilon a} C_n^2 \sum_{n', \lambda'} (\lambda' C_{n'} X_{nn'}^{\lambda'})^2 Y_{n'\lambda'}^{(i)}(\omega), \quad (12)$$

($i = 0, 2$), а

$$Y_{n\lambda}^{(0)}(\omega) = \frac{\Omega}{\lambda^2 \eta_0 \Omega + \hbar \omega - E_n - 2\Omega} \ln \frac{1 + (N/\lambda)^2}{N^2 \eta(\omega) + 1}; \quad (13)$$

$$\begin{aligned} Y_{n\lambda}^{(2)}(\omega) = & \frac{2N^2 \eta_0^2 \Omega^3}{(\lambda^2 \eta_0 \Omega + \hbar \omega - E_n - 2\Omega)^3} \frac{\ln \frac{1 + (N/\lambda)^2}{N^2 \eta(\omega) + 1}}{\eta(\omega)} + \\ & + L\Omega \frac{\ln \frac{1 + (N/\lambda)^2}{N^2 \eta(\omega) + 1} + \frac{2N^2 \eta(\omega)}{N^2 \eta(\omega) + 1}}{(\lambda^2 \eta_0 \Omega + \hbar \omega - E_n - 2\Omega)^2} - \\ & - \Omega \frac{\left(\frac{N^2 \eta(\omega)}{N^2 \eta(\omega) + 1} \right)^2}{\lambda^2 \eta_0 \Omega + \hbar \omega - E_n - 2\Omega}; \end{aligned} \quad (14)$$

$$\eta(\omega) = \frac{\eta_0 \Omega}{E_n + 2\Omega - \hbar \omega}, \quad L = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma_0^2}.$$

Отже, при $\vec{k}_{||} = 0$

$$M_{11}^{(2)}(\omega) = \frac{\pi^2 e^2}{\varepsilon a} C_1^2 \sum_{n, \lambda} (\lambda C_n X_{1n}^\lambda)^2 \Phi_{n\lambda}(\omega), \quad (15)$$

де

$$\begin{aligned} \Phi_{n\lambda}(\omega) = & \ln \frac{1 + (N/\lambda)^2}{N^2 \eta_n(\omega) + 1} \left\{ \lambda^2 \eta_0 \left[1 + \frac{\widetilde{M}_{nn}^{(2,2)}(\omega)}{N^2 \eta_0 \Omega} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{\hbar \omega - E_n - \widetilde{M}_{nn}^{(2,0)}(\omega)}{\Omega} - 1 \right\}^{-1}; \end{aligned} \quad (16)$$

$$\eta_n(\omega) = \frac{\eta_0 \left[1 + \frac{\widetilde{M}_{nn}^{(2,2)}(\omega)}{N^2 \eta_0 \Omega} \right]}{\frac{E_n - \hbar \omega + \widetilde{M}_{nn}^{(2,0)}(\omega)}{\Omega} + 1}.$$

Таблиця 1.

Середовище	a_0 (Å)	E_g (eВ)	ε_0	ε_∞	m (m_0)	Ω (meВ)	V_e (eВ)
0 $InAs$ ^[5]	6,058	0,47	15,15	12,25	0,022	30,0	
1 InP ^[5]	5,869	1,34	12,50	9,61	0,077	43,0	0,33
0 $GaAs$ ^[16]	5,653	1,424	13,18	10,89	0,067	36,25	
1 $AlAs$ ^[16]	5,661	2,168	10,06	8,16	0,150	50,09	0,915
0 CdS ^[17]	5,825	2,57	8,45	5,32	0,14	37,30	
1 ZnS ^[17]	5,410	3,78	8,0	5,10	0,34	43,20	0,847
0 $\beta - HgS$ ^[18]	5,851	0,5	18,20	11,36	0,036	27,80	
1 $\beta - CdS$ ^[18]	5,818	2,5	9,10	5,50	0,20	57,20	1,35

Таблиця 2.

НП	α_F	$\Delta^{(1)}/\Omega$	$\Delta^{(2)}/\Omega$	похибка, %
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

Для прикладу виконано конкретне обчислення зміщення дна основної зони електрона для НП, утворених на основі подвійних гетеропереходів GaAs/AlAs, β -HgS/ β -CdS, InP/InAs та CdS/ZnS товщиною, відповідно, 17, 30, 15 та 13 нм, що дає змогу використати обрану тут модель. Параметри середовищ, що використовувалися для моделювання вказаних наноструктур згідно з даними [5, 16 - 18], подані у табл. 1. Вказані наноструктури відрізняються силою ЕФЗ, числовою характеристикою якої є стала Фр'юліха $\alpha_F = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \sqrt{\frac{m}{2\Omega}}$.

Як показують результати обчислень (табл. 2), величина зміщення $\Delta = M_{11}(\vec{k}_{||} = 0, \hbar\omega = E_1)$ дна основної зони електрона у НП, визначеного у двофононному наближенні ($\Delta^{(2)}$), перевищує значення зміщення, одержаного в однофононному наближенні ($\Delta^{(1)}$). Величина відносної похибки двох послідовних наближень залежить від наноструктури. У випадку досліджуваних тут НП вона перебуває в межах 1,5–14,4% (табл. 2), що можна вважати обґрунтуванням застосування наближення слабого ЕФЗ у цих наноструктурах.

Результати виконаних обчислень свідчать також про наявність лінійної залежності величин зміщень, визначених у рамках обох наближень, та відносної похибки від константи ЕФЗ α_F . Знайдено яв-

ний вигляд залежності

$$\Delta/\Omega \approx -0,65\alpha_F, \quad (17)$$

що дає змогу оцінювати величину зміщення дна основної зони електрона у НП за відомим значенням константи ЕФЗ.

Презентована у цій статті теорія ЕФВ з обмеженими фононами у НП може бути застосована для визначення енергії електрона з довільної зони у КЯ, дірки або екситона. Її легко можна адаптувати для дослідження температурних змін енергетичного спектра квазічастинок у НП. Нарешті, використаний метод дає змогу виконати аналогічні дослідження з урахуванням взаємодії з інтерфейсними та напівпросторовими фононами, а також визначити положення піків фононних повторень різного порядку, про що буде повідомлено у наступних роботах.

ЛІТЕРАТУРА

- [1] *Harrison P.* Quantum Wells, Wires, and Dots: Theoretical and Computational Physics. Wiley, Chichester, 1999. 482 p.
- [2] *Mitin V.V., Kochelap V.A., Stroschio M.A.* Quantum Heterostructures. Microelectronics and Optoelectronics. Cambridge University Press, Cambridge, 1999. 635 p.
- [3] *Nolte D.D.* J. Appl. Phys. 1999. **85**. N 9. 6259-6289.
- [4] *Schooss D., Mews A., Eychemuller A., Weller H.* Phys. Rev. B. 1994. **49**. N 24. 17072-17078.
- [5] *Mohan P., Motohisa J., Fukui T.* Appl. Phys. Lett. 2006. **88**. N 13. 133105-1-3.
- [6] *Wendler L.* Phys. stat. sol. (b). 1985. **129**. N 2. 513-530.
- [7] *Huang K., Zhu B.F.* Phys. Rev. B. 1988. **38**. N 18. 13377-86.
- [8] *Mori N., Ando T.* Phys. Rev. B. 1989. **40**. N 9. 6175-6188.
- [9] *Бойчук В.И., Борусевич В.А., Білинський І.В.* Журн. фіз. досл. 2008. **8**. №2. 2601-1-2.
- [10] *Boichuk V. I., Borusevych V. A., Shevchuk I. S.* Journ. Optoelectr. Adv. Mater. 2008. **10**. N 6. 1357-1364.
- [11] *Ткач М.В., Крамар В.М.* Укр. фіз. журн. 2008. **53**. № 8. 812-820.
- [12] *Ткач М.В., Крамар В.М.* Укр. фіз. журн. 2008. **53**. №11. 1111-1119.
- [13] *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. Физматгиз: Москва, 1962. 443 с.
- [14] *Ткач М.В.* Квазічастинки у наногетеросистемах. Квантові точки і дроти. Чернівці: Вид-во ЧНУ ім. Ю. Федьковича, 2003. 311 с.

- [15] *Ткач М.В.* Журн. фіз. досл. 2002. **6**. № 1. 124-132.
- [16] *Zheng R., Matsuura M.* Phys. Rev. B. 1997. **56**. N 4. 2058-2061.
- [17] *Zheng R., Matsuura M., Taguchi T.* Phys. Rev. B. 2000. **61**. N 13. 9960-9963.
- [18] *Ткач Н.В., Головацкий В.А., Войцеховская О.Н.* Физ. техн. полупр. 2000. **34**. № 5. 602-606.

**TWO-PHONON APPROACH
IN PROBLEM OF THE ENERGY SPECTRUM
OF QUASIPARTICLE IN FLAT SEMICONDUCTOR
NANOFILM TRANSFORMATION**

Valeriy KRAMAR, Mykola TKACH, Mykola KURGANETSKII

Yuriy Fed'kovich Chernivtsi National University,
2 Kotsyubynsky Str., Chernivtsi, 58012, Ukraine

The effect of electron-phonon interaction on the bottom of ground energy band of an electron in the flat nanofilm with finite quantum well was studied by Green's function method. The analytic expression was obtained for the mass operator that takes into account the two-phonon processes of electron interaction with confined phonons in the case of $T = 0$ K. Taking as an example different materials with different values of a coupling constant it is shown that the two-phonon processes being taken into account make it possible to more carefully determine the magnitude of electron's energy in comparison with the results of one-phonon approach. Percentage error of these two consequent approaches in the studied nanostructures reaches 1.5 - 14.4 % and increases by linear law when the coupling constant increases.