

## ВЗАЄМОДІЯ ЕЛЕКТРОНІВ І ДІРОК З ФОНОНАМИ У ВІДКРИТИХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

*Микола ТКАЧ, Ростислав ФАРТУШИНСЬКИЙ,  
Юлія СЕТИ, Оксана ВОЙЦЕХІВСЬКА*

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

Редакція отримала статтю 10 січня 2010 р.

У моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів за допомогою методу S-матриці отримуємо квазістаціонарні спектри електрона та дірки у відкритій сферичній квантовій точці. У моделі двоямною закритої сферичної квантової точки отримуємо стаціонарні спектри електрона та дірки і знаходимо такий розмір зовнішньої ями, при якому резонансні енергії відповідних квазічастинок з потрібною точністю збігаються з розв'язками попередньої задачі. Отриманий набір хвильових функцій двоямною закритої сферичної квантової точки є математичною основою для обчислення перенормованого взаємодією з фононами електронного спектра у відкритій сферичній квантовій точці. Перенормування основного стану обчислювали на прикладі наносистеми  $\text{HgS}/\text{CdS}/\text{HgS}/\text{CdS}$  при  $T = 0^\circ \text{K}$ . Отриманий результат перенормування резонансних енергій виявився фізично коректним і задовольняє граничні переходи.

### 1. ВСТУП

Теорія спектрів і хвильових функцій (електронів і дірок) у простих і багат шарових сферичних квантових точках (СКТ) побудована як для закритих (ЗСКТ) [1, 2], так і для відкритих (ВСКТ) [2, 3]. Послідовна теорія екситонів, а також взаємодії електронів, дірок і екситонів з фононами у ЗСКТ перебуває на стадії розвитку, будується на базі різних моделей фононної підсистеми (здебільшого це модель діелектричного континууму) методами квантової теорії поля [3, 6, 7].

Теорія спектрів невзаємодіючих електронів і дірок у ВСКТ була розвинута в [4, 5] на основі S-матриці розсіювання. Вона добре описує властивості квазістаціонарних енергетичних станів і часів життя електронів та дірок у цих системах. Однак оскільки хвильові функції

у цій теорії нормовані не на одиницю, а на  $\delta$ -функцію, це унеможливує перехід до зображення чисел заповнення за електронними (дірковими) змінними. Отже, в такому підході побудова теорії перенормування електронного і діркового спектрів взаємодією цих квазічастинок з фононами традиційними методами квантової теорії поля є неможливою.

Із цієї складної ситуації можна вийти, якщо замість відкритої одноямної і однобар'єрної СКТ розглядати закриту двоямну СКТ з дуже великою товщиною зовнішньої ями. Останню завжди можна обрати настільки великою, щоб енергії станів, у яких імовірності знаходження електрона у ЗСКТ максимальні, з потрібною точністю збігалися з резонансними енергіями ВСКТ, а ширини відповідних груп енергетичних рівнів, крайні з яких відповідають станам, у яких імовірності знаходження у ЗСКТ дорівнюють половині максимальної, збігалися з резонансними ширинами у ВСКТ. Отриманий набір хвильових функцій двоямної закритої СКТ слугує математичною основою для переходу до зображення чисел заповнення за всіма змінними для добре відомого гамільтоніана електрон-фононої системи. Своєю чергою, за допомогою цього гамільтоніана та методу функцій Гріна [2] розв'язується задача про перенормування електронного спектра взаємодією з фононами у відкритій СКТ. Для зручності подальшого викладу матеріалу, розглядатимемо лише електрон, оскільки відповідна теорія для дірково-фононої взаємодії будується аналогічно.

## 2. ГАМІЛЬТОНІАН, S-МАТРИЦЯ І СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА У ВІДКРИТІЙ СФЕРИЧНІЙ КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ

Вивчаються спектр, хвильові функції та час життя електрона у відкритій сферичній квантовій точці, яка характеризується радіусом внутрішньої потенціальної ями  $r_0$ , товщиною  $\Delta_1$  та висотою  $U$  потенціального бар'єра (рис. 1б).

Згідно з загальною теорією [8], беручи до уваги залежність ефективних мас квазічастинок від радіуса КТ, розв'язуємо стаціонарне рівняння Шредінгера

$$H\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}). \quad (1)$$

Гамільтоніан квазічастинки

$$H = -\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla} \frac{1}{m(r)}\vec{\nabla} + U(r), \quad (2)$$

у сферичній системі координат з початком у центрі ВСКТ містить ефективну масу та потенціальну енергію:

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r < r_0, \quad r_1 < r < \infty \\ m_1, & r_0 \leq r \leq r_1 = r_0 + \Delta_1 \end{cases} ; \quad (3)$$

$$U(r) = \begin{cases} U_0, & r < r_0, \quad r_1 < r < \infty \\ U_1, & r_0 \leq r \leq r_1 \end{cases} . \quad (4)$$

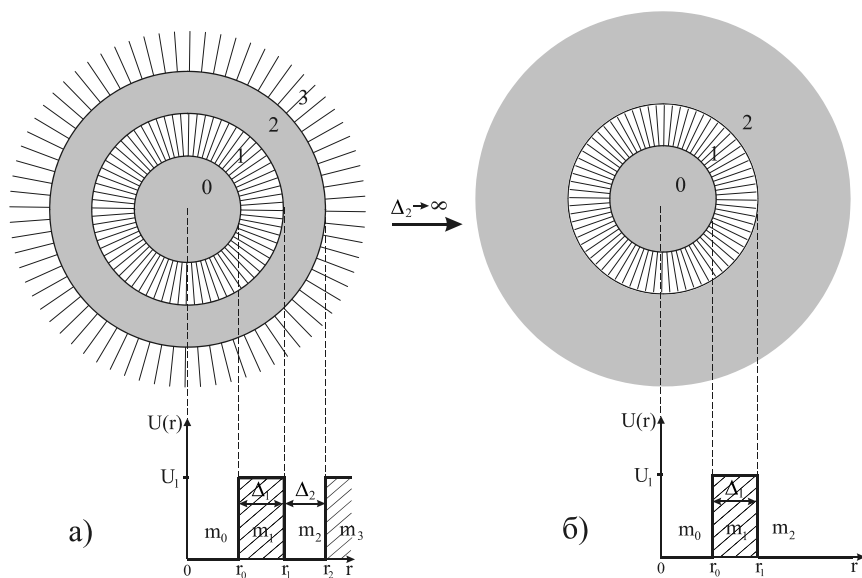


Рис. 1. Енергетична і геометрична схеми тришарової закритої (а) та простої відкритої (б) наносистем

Враховуючи сферичну симетрію, розв'язок рівняння (1) доцільно шукати у вигляді

$$\Psi_{\ell m}(\vec{r}) = R_{\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (5)$$

де  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$  – сферична функція. Для радіальних складових хвильових функцій ( $R_{\ell}(r)$ ) отримуємо систему рівнянь ( $\ell = 0, 1, 2, \dots$ ):

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + K_i^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} R_{\ell}^i(r) = 0, \quad i = 0, 1, 2, \quad (6)$$

де

$$K_i^2 = \frac{2m_i}{\hbar^2}(E - U_i) = \begin{cases} k_i^2, & i = 0, 2 \\ -\chi_i^2, & i = 1 \end{cases}. \quad (7)$$

З використанням методу S-матриці [8] розв'язки рівняння (6) можуть бути представлені у такому вигляді:

$$R_{K\ell}(r) = \begin{cases} R_{\ell}^{(0)}(kr) = kA_{\ell}^{(0)} [h_{\ell}^{-}(kr) + h_{\ell}^{+}(kr)] \\ R_{\ell}^{(1)}(i\chi r) = i\chi A_{\ell}^{(1)} [h_{\ell}^{-}(i\chi r) - S_{\ell}^{(1)} h_{\ell}^{+}(i\chi r)] \\ R_{\ell}^{(2)}(kr) = kA_{\ell}^{(2)} [h_{\ell}^{-}(kr) - S_{\ell}(k) h_{\ell}^{+}(kr)] \end{cases}, \quad (8)$$

де коефіцієнт  $A_\ell^{(2)} = 1/\sqrt{2\pi}$  визначається з умови нормування

$$\int_0^\infty R_{k\ell}^*(r)R_{k'\ell}(r)r^2dr = \delta(k - k'), \quad (9)$$

яка враховує відмінну від нуля імовірність переходу квазічастинки з внутрішньої області ВСКТ на безмежність. Умови неперервності хвильових функцій і густин потоків імовірності визначають усі невідомі коефіцієнти [9] та аналітичну форму  $S_\ell$ -матриці

$$S_\ell = \frac{\left(\alpha_\ell \frac{d}{dr_1} + \beta_\ell - \gamma_\ell \frac{d}{dr_1} - \lambda_\ell\right) h_\ell^-(kr_1)}{\left(\alpha_\ell \frac{d}{dr_1} - \beta_\ell + \gamma_\ell \frac{d}{dr_1} + \lambda_\ell\right) h_\ell^+(kr_1)}. \quad (10)$$

У кінцевому підсумку радіальні хвильові функції ( $R_{K\ell}(r)$ ), задані формулою (8), резонансні енергії та півширини електронних квазістаціонарних станів визначаються дійсною та уявною частинами полюсів  $S_\ell$ -матриці (10).

### 3. ЕЛЕКТРОН-ФОНОННИЙ ГАМІЛЬТОНІАН У СФЕРИЧНІЙ ДВОЯМНІЙ ЗАКРИТІЙ КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ

Гамільтоніан електрон-фононної взаємодії у ВСКТ будемо апроксимувати гамільтоніаном двоямної ЗСКТ з досить широкою зовнішньою потенціальною ямою.

Відповідно до вже розвинутої теорії [2], електрон-фононний гамільтоніан двоямної ВСКТ отримується в межах наближень ефективної маси та прямокутного потенціалу (3) і (4). Рівняння Шредінгера розв'язується точно. Як наслідок отримуємо повний набір ортонормованих хвильових функцій

$$\Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (11)$$

де  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$  – сферичні функції; а  $R_{n\ell}(r)$  – радіальні функції, явний вираз для яких однозначно знаходимо з умови нормування

$$\int_0^\infty R_{n'\ell'}^*(r)R_{n\ell}(r)r^2dr = \delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'} \quad (12)$$

та з умов неперервності їх і потоку густини ймовірності на межах гетеросистеми

$$\left. \begin{aligned} R_{n\ell}^{(i)}(K_{in}r) \Big|_{r=r_i} &= R_{n\ell}^{(i+1)}(K_{i+1n}r) \Big|_{r=r_{i+1}} \\ \frac{1}{m_i} \frac{\partial R_{n\ell}^{(i)}(K_{in}r)}{\partial r} \Big|_{r=r_i} &= \frac{1}{m_{i+1}} \frac{\partial R_{n\ell}^{(i+1)}(K_{i+1n}r)}{\partial r} \Big|_{r=r_{i+1}} \end{aligned} \right\}, \quad i = 0, 1, 2, 3. \quad (13)$$

З умов нетривіальності розв'язку системи (13) визначаємо

$$K_{in} = \begin{cases} k_{in} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_i |E_n|}, & 0 \leq r \leq r_0; \quad r_1 \leq r \leq r_2 \\ \chi_{in} = \hbar^{-1} \sqrt{2m_i (U - |E_n|)}, & r_0 \leq r \leq r_1; \quad r_2 \leq r < \infty \end{cases}, \quad (14)$$

і отримуємо енергетичний спектр  $E_{n\ell}$  та радіальні хвильові функції електрона

$$R_{n\ell}(r) = \sum_{i=0}^3 \left[ A_{\ell}^{(i)} J_{\ell}(K_{in}r) + B_{\ell}^{(i)} N_{\ell}(K_{in}r) \right] [\Theta(r_{i+1} - r) - \Theta(r_i - r)], \quad (15)$$

де  $\Theta(x)$  – тета-функція Хевісайда; коефіцієнти  $A_{\ell}^{(i)}$ ,  $B_{\ell}^{(i)}$  визначаються з системи рівнянь (12), (13), а функції  $J_{\ell}$  та  $N_{\ell}$  є функціями Бесселя, Неймана чи Ханкеля:

$$\begin{aligned} J_{\ell}(K_{in}r) &= \begin{cases} j_{\ell}(k_{in}r) \\ h_{\ell}^{+}(i\chi_{in}r) \end{cases}, & (16) \\ N_{\ell}(K_{in}r) &= \begin{cases} n_{\ell}(k_{in}r) & 0 \leq r \leq r_0; \quad r_1 \leq r \leq r_2 \\ h_{\ell}^{-}(i\chi_{in}r) & r_0 \leq r \leq r_1; \quad r_2 \leq r < \infty \end{cases}. \end{aligned}$$

Виконавши перехід до представлення чисел заповнення на повній системі хвильових функцій (11), отримуємо гамільтоніан електронної підсистеми

$$H_e = \sum_{p\ell m} E_{p\ell} a_{p\ell m}^{+} a_{p\ell m}. \quad (17)$$

Фононний спектр і потенціал поля поляризації гетеросистеми отримується в моделі діелектричного континууму, де вважається, що середовища-ями (0,2) та середовища-бар'єри (1,3) характеризуються постійними значеннями діелектричних сталей  $\varepsilon_{00}$ ,  $\varepsilon_{00}$ ;  $\varepsilon_{10}$ ,  $\varepsilon_{1\infty}$  відповідно та енергіями оптичних фононів  $\Omega_{L0}$ ,  $\Omega_{L1}$ . У цій моделі обмежимося дослідженням перенормованого спектра взаємодією лише з обмеженими фононами. Гамільтоніан обмежених фононів у представленні чисел заповнення має такий вигляд [2]:

$$H_L = \sum_{i=0}^3 \sum_{s_i \ell m} \Omega_{Li} \left( b_{s_i \ell m}^{+} b_{s_i \ell m}^{+} + \frac{1}{2} \right). \quad (18)$$

Гамільтоніан взаємодії електрона з обмеженими фононами у представленні вторинного квантування за всіма змінними системи, знайдений з використанням потенціалу поля поляризації та повного набору ортонормованих хвильових функцій стаціонарних станів (11)

$$H_{e-L} = \sum_{i=0}^3 \sum_{\substack{p_1 \ell_1 m_1 \\ p_2 \ell_2 m_2}} \sum_{s_i \ell m} \Phi_{p_1 \ell_1 m_1}^{p_2 \ell_2 m_2}(s_i \ell m) a_{p_2 \ell_2 m_2}^{+} a_{p_1 \ell_1 m_1} \left( b_{s_i \ell m}^{+} + b_{s_i \ell -m} \right), \quad (19)$$

містить функції зв'язку

$$\Phi_{p_1 \ell_1 m_1}^{p_2 \ell_2 m_2}(s_i \ell m) = (Y_{\ell m})_{\ell_1 m_1}^{\ell_2 m_2} (F_{\ell s_i})_{p_1 \ell_1}^{p_2 \ell_2}, \quad (20)$$

де  $(Y_{\ell m})_{\ell_1 m_1}^{\ell_2 m_2}$  та  $(F_{\ell s_i})_{p_1 \ell_1}^{p_2 \ell_2}$  сформовані сферичними та радіальними функціями відповідно:

$$(Y_{\ell m})_{\ell_1 m_1}^{\ell_2 m_2} = \int_0^\infty \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell_2 m_2}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) Y_{\ell_1 m_1}(\theta, \varphi); \quad (21)$$

$$(F_{\ell s_0})_{p_1 \ell_1}^{p_2 \ell_2} = \sqrt{\frac{4\pi \Omega_{L0} e^2}{r_0} \left( \frac{1}{\varepsilon_{0\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_{00}} \right)} (k_{s_0} r_0 j_{\ell-1}(k_{s_0} r_0))^{-1} \times \\ \times \int_0^{r_0} r^2 j_\ell(k_{s_0} r) R_{p_2 \ell_2}^{0*}(r) R_{p_1 \ell_1}^0(r) dr; \quad (22)$$

$$(F_{\ell s_i})_{n_1 \ell_1}^{n_2 \ell_2} = \sqrt{\frac{4\pi \Omega_{iL} e^2}{r_i} \left( \frac{1}{\varepsilon_{i\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_{i0}} \right)} \frac{k_{s_i} r_i}{\sqrt{|1 - r_i N_\ell^2(k_{s_i} r_i) / r_{i-1} N_\ell^2(k_{s_i} r_{i-1})|}} \times \\ \times \int_{r_{i-1}}^{r_i} R_{n_2 \ell_2}^*(r) R_{n_1 \ell_1}(r) r^2 [N_\ell(k_{s_i} r_i) J_\ell(k_{s_i} r) - J_\ell(k_{s_i} r_i) N_\ell(k_{s_i} r)] dr, \\ i = 1, 2, 3. \quad (23)$$

Тут  $k_{s_0}$  та  $k_{s_i}$  – величини, отримані з виразів

$$j_\ell(k_{s_0} r_0) = 0, \quad \frac{J_\ell(k_{s_i} r_{i-1})}{N_\ell(k_{s_i} r_{i-1})} = \frac{J_\ell(k_{s_i} r_i)}{N_\ell(k_{s_i} r_i)}, \quad (24)$$

де  $s_0$  та  $s_i$  нумерують корені відповідних рівнянь при фіксованому  $\ell$ .

Тепер гамільтоніан електрон- $L_0$ -фононої системи у ЗСКТ визначений

$$H = H_e + H_L + H_{e-L}. \quad (25)$$

Це дає змогу визначити і проаналізувати перенормований спектр електронів, використавши метод функцій Гріна [2].

#### 4. ДИСКРЕТНІ СПЕКТРИ ЕЛЕКТРОНА ТА ДІРКИ, ПЕРЕНОРМОВАНІ ВЗАЄМОДІЄЮ З ОБМЕЖЕНИМИ ФОНОНАМИ У СКТ

Аналітичні та комп'ютерні розрахунки були виконані для закритої наносистеми HgS/CdS/HgS/CdS, яка переходить у відкриту наносистему

Таблиця 1. Параметри матеріалів

|     | $m_e,$<br>( $m_0$ ) | $m_h,$<br>( $m_0$ ) | $a,$<br>(Å) | $E_g,$<br>(eV) | $U_e,$<br>(eV) | $U_h,$<br>(eV) | $\Omega_L,$<br>(meV) | $\varepsilon_\infty$ | $\varepsilon_0$ |
|-----|---------------------|---------------------|-------------|----------------|----------------|----------------|----------------------|----------------------|-----------------|
| CdS | 0,2                 | 0,45                | 5,818       | 2,5            | 3,65           | 6,3            | 57,2                 | 5,5                  | 9,1             |
| HgS | 0,036               | 0,044               | 5,851       | 0,5            | 5,0            | 5,5            | 27,8                 | 11,36                | 18,2            |

HgS/CdS/HgS, коли товщина зовнішньої потенціальної ями прямує до безмежності. Параметри складових матеріалів наносистеми подані у табл. 1.

Це дає змогу обчислити й проаналізувати перенормований спектр електронів, скориставшись методом функцій Гріна [2].

Перенормування резонансних електронного та діркового рівнів обмеженими фононами відкритої сферичної квантової точки шукали як граничне значення перенормованого рівня відповідної закритої наносистеми при достатньому збільшенні товщини  $\Delta_2$  зовнішнього шару-ями HgS. При різних значеннях  $\Delta_2$  завжди можна виділити так званий прарезонансний квазічастинковий рівень СКТ HgS/CdS/HgS/CdS, який є найближчим в енергетичній шкалі до відповідного квазістаціонарного рівня відповідної ВСКТ.

З використанням методу функцій Гріна [2] обчислено перенормовані енергетичні рівні електрона та дірки, локалізовані біля відповідних основних резонансних квазістаціонарних станів (рис. 2, 3).

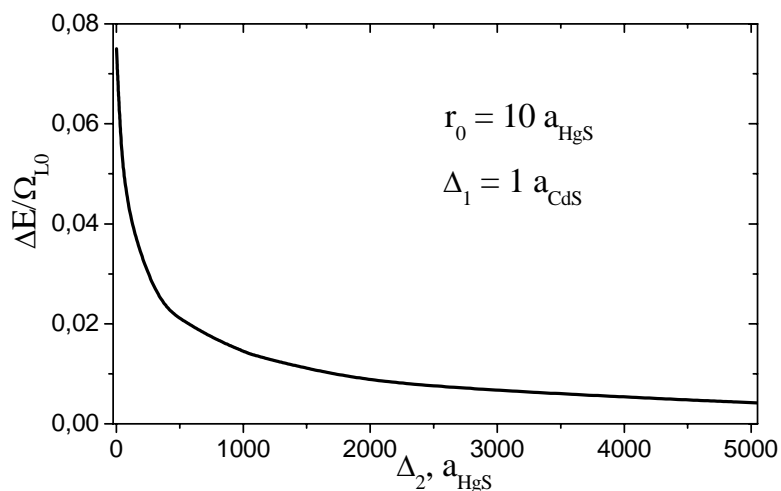


Рис. 2. Залежність парціального енергетичного зсуву  $\Delta E$ , зумовленого взаємодією між електроном в основному стані та обмеженими фононами ядра HgS, від ширини зовнішньої потенціальної ями  $\Delta_2$ .

Як бачимо з рис. 2, 3, зі збільшенням ширини зовнішньої по-

тенціальній ями  $\Delta_2$  парціальних зсуви квазічастинкових енергетичних рівнів зменшуються, прямуючи до відповідних значень у ВСКТ HgS/CdS/HgS. Це зрозуміло з фізичних міркувань, оскільки вплив обмежених фононів ядра наносистеми на електронний спектр тим більший, чим більша імовірність перебування квазічастинки у ядрі СКТ. Зі збільшенням ширини зовнішньої потенціальної ями (HgS) квазічастинка “витісняється” з ядра у зовнішній шар HgS. Це спричиняє зменшення взаємодії між електроном (діркою) та обмеженими фононами ядра.

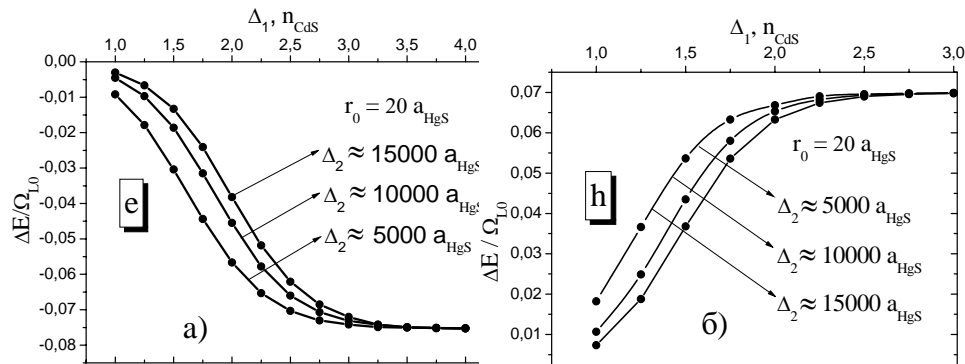


Рис. 3. Залежності величин зсувів прарезонансних енергетичних рівнів електрона (а) та дірки (б), зумовлених впливом обмежених фононів, від товщини бар'єру  $\Delta_1$ .

Отримані результати показують коректну фізичну картину електрон-фононної взаємодії у ВСКТ. Отже, запропонований підхід може бути розвинутий для детального дослідження перенормування спектрів квазічастинки взаємодією зі всіма фононами у ВСКТ.

## ЛІТЕРАТУРА

- [1] Ткач М.В., Головатський В.А., Войцехівська О.М., Михальова М.Я. Фартушинський Р.Б. Журн. фіз. досліджень. 2000. **4**. №3. 342–349.
- [2] Ткач М.В. Квазічастинки у наногетеросистемах, квантові точки та дрони. Чернівці: Рута, ЧНУ. 2003. 311 с.
- [3] Н.В. Ткач, В.А. Головатский, О.Н. Войцехивская. Физика и техника полупроводников. 2000. **34**. №5. 602–606.
- [4] Tkach M.V., Holovats'ky V.A., Berezovs'ky Y.M., Makhanets' O.M., Val' O.D. Proceedings International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers. 2003. **1**. 8–13.
- [5] Ткач М.В., Березовський Я.М. Журн. фіз. досліджень. 2003. **48**. №1. 75–81.



- [6] Wang X.F., Lei X.L. Phys.Rev. B. 1994. **49**. №7. 4780–4789.
- [7] Ткач Н.В., Головатский В.А. ФТТ. 2001. **43**. №2. 350-356.
- [8] Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука. 1971. 463 с.
- [9] Ткач Н.В., Сети Ю.А. Физика и техника полупроводников. 2006. **40**. №9. 1111.

## ELECTRON- AND HOLE-PHONON INTERACTION IN THE OPEN SPHERICAL QUANTUM DOTS

*Mykola TKACH, Rostyslav FARTUSHINSKY,  
Oksana VOITSEKHIVSKA, Julia SETI*

Yurii Fedkovich Chernivtsi National University  
58012 Chernivtsi, Kotcibinsky Str. 2, Ukraine  
e-mail: ktf@chnu.edu.ua

Within the models of effective masses and rectangular potentials models using the S-matrix method there have been obtained the electron and hole quasi-stationary spectra in an open spherical quantum dot. Within the model of two-well closed spherical quantum dot, there have been obtained the stationary spectra of electrons and holes as well as the size of outer well at which the resonance energies of the respective quasiparticles with a required exactness coincide with the solutions of the previous problem. The obtained set of wave functions for the two-well closed spherical quantum dot have been taken as the mathematical base for the calculation of electron spectrum renormalized due to the interaction with phonons in an open spherical quantum dot. The numeric calculations of the ground state renormalization have been performed for the HgS/CdS/HgS/CdS nano-system at  $T = 0^\circ \text{K}$ . The obtained results for the renormalized resonance energies are physically correct and satisfy the limit conditions.