

ФОНОННИЙ СПЕКТР У СФЕРИЧНІЙ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ β -CdS/HgS/ZnS/H₂O

М. Ткач, В. Головацький, О. Войцехівська, М. Міхальова
Чернівецький державний університет, кафедра теоретичної фізики,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 274012, Україна
(Отримано 10 квітня 1998 р.; в остаточному вигляді — 4 грудня 1998 р.)

У моделі діелектричного континууму виконано теоретичне дослідження спектрів інтерфейсних та обмежених оптичних фононів у сферичній наногетеросистемі β -CdS/HgS/ZnS/H₂O. Отримано вектори поляризації та гамільтоніан фононної системи.

Ключові слова: наногетеросистема, фонон.

PACS number(s): 63.20.Dj, 79.60.Jv

I. ВСТУП

Перспектива застосування напівпровідникових наногетеросистем у лазерній техніці та техніці наносхем для обчислювальних машин стимулює інтенсивний розвиток фізики квантових ям. Особливий інтерес викликають нуль-мірні напівпровідникові системи, так звані квантові точки [1–3], оскільки вони мають якісно нові характеристики. Квазічастки в таких системах через відсутність квазіімпульсу мають строго дискретний спектр. Отже, прилади, розроблені на основі таких нуль-мірних систем, можуть мати особливо точні (прецизійні) характеристики, практично не залежні від температури.

У роботі [4] експериментально й теоретично досліджували спектр екситона, електрона і дірки в наногетеросистемах β -CdS/HgS/H₂O та β -CdS/HgS/CdS/H₂O. Через те що β -модифікація вказаних кристалів у звичайних умовах не стійка, то наносистему створювали у воді під високим тиском шляхом йонного заміщення.

На відміну від кристалів CdS та HgS, кристал ZnS є стійким у β -модифікації. Тому, створивши наносистему CdS/HgS/ZnS/H₂O з достатньо товстим зовнішнім шаром ZnS, можна сподіватись, що вона буде достатньо стійкою у звичайних умовах, а отже, може бути застосована в конкретних приладах. Таким чином, виникає актуальна задача — дослідити спектри квазічасток (фононів, електронів, дірок, екситонів) у наногетеросистемі CdS/HgS/ZnS/H₂O та вивчити їхні фізичні характеристики, які формуються цими квазічастками.

У цій роботі на базі моделі діелектричного континууму отримано гамільтоніан обмежених поздовжніх та інтерфейсних фононів, знайдено відповідні вектори поляризації та встановлено фононний спектр.

II. ФОНОННИЙ СПЕКТР У НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ CdS/HgS/ZnS/H₂O

Сферична гетеросистема CdS/HgS/ZnS/H₂O складається із середовищ, які мають відомі величини ді-

електричних проникностей ϵ_α^0 , ϵ_α^∞ та енергії поздовжніх $\Omega_{\alpha,0} = \hbar\omega_{\alpha,0}$ і поперечних фононів $\Omega_{\alpha,i} = \hbar\omega_{\alpha,i}$ ($\alpha = 0, 1, 2, 3$). Нехтуючи ефектами запізнення електромагнетних хвиль у моделі діелектричного континууму, фононний спектр отримуємо, як і в роботі [5], із системи макроскопічних рівнянь Максвелла

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_\alpha(\mathbf{r}) &= \chi_\alpha(\omega)\mathbf{E}_\alpha(\mathbf{r}), & \mathbf{E}_\alpha(\mathbf{r}) &= -\text{grad}\phi_\alpha(\mathbf{r}), \\ \nabla^2\phi_\alpha(\mathbf{r}) &= -4\pi\rho_\alpha(\mathbf{r}), & \rho_\alpha(\mathbf{r}) &= -\text{div}(\mathbf{P})_\alpha(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1)$$

$\alpha = 0, 1, 2, 3$, з крайовими умовами

$$E_{i,r}|_{r=r_i} = E_{i+1,r}|_{r=r_i}, \quad D_{i,\tau}|_{\tau=\tau_i} = D_{i+1,\tau}|_{\tau=\tau_i}, \quad (2)$$

де

$$\chi_\alpha(\omega) = \frac{\epsilon_\alpha(\omega) - 1}{4\pi}, \quad (3)$$

індекси r і τ позначають радіальні та тангенційні складові векторів.

A. Обмежені LO-фонони

Складову вектора поляризації $\mathbf{P}_L(\mathbf{r})$, що визначається поздовжніми оптичними фононами в середовищі α , знаходимо з умови, що в інших середовищах $\beta \neq \alpha$

$$\mathbf{D}_\beta(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_\beta(\mathbf{r}) - \mathbf{P}_\beta(\mathbf{r}), \quad (4)$$

а у власному середовищі α

$$\epsilon_\alpha(\omega) = \epsilon_{\alpha,\infty}(\omega) \frac{\omega^2 - \omega_{L\alpha}^2}{\omega^2 - \omega_{T\alpha}^2}. \quad (5)$$

З (5) випливає, що енергія поздовжніх обмежених оптичних фононів збігається з відповідною енергією в масивних кристалах.

$$\Omega_{L\alpha} = \hbar\omega_{L\alpha}. \quad (6)$$

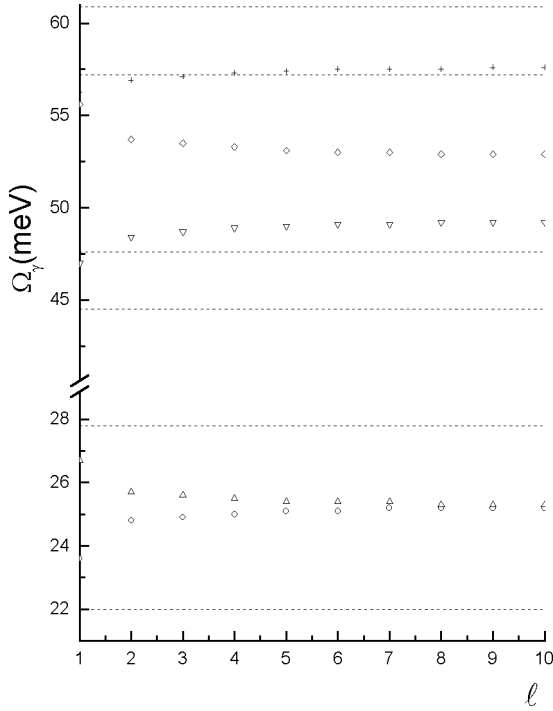


Рис. 1. Залежність спектра ІО-фононів від l .

Розв'язком рівняння (1) з умовами (2) є вектор поляризації поздовжніх обмежених фононів

$$\mathbf{P}_L(\mathbf{r}) = \sum_{slm} \mathbf{P}_{slm}(\mathbf{r}) = \nabla \Psi_L(\mathbf{r}), \quad (7)$$

який визначаємо потенціалом поляризації $\Psi_L(\mathbf{r})$, розкладеним за повною системою функцій

$$\begin{aligned} \Psi_L(\mathbf{r}) = & \sum_{\alpha=0}^3 \sum_{S_\alpha l m} f_{l S_\alpha}^L(\mathbf{r}) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ & \times (\theta(r - r_{\alpha-1}) - \theta(r - r_\alpha)), \end{aligned} \quad (8)$$

де $\theta(r - r_\alpha)$ — функція Гевісайда,

$$\begin{aligned} f_{l S_\alpha}^L = & \frac{\omega_{L\alpha}}{k_{S_\alpha} \sqrt{2\pi\epsilon_\alpha}} \\ & \times \frac{n_l(k_{S_\alpha} r_\alpha) j_l(k_{S_\alpha} r) - j_l(k_{S_\alpha} r_\alpha) n_l(k_{S_\alpha} r)}{\sqrt{r_\alpha^3 F_l^2(k_{S_\alpha} r_\alpha) - r_{\alpha-1}^3 F_l^2(k_{S_\alpha} r_{\alpha-1})}}, \end{aligned} \quad (9)$$

величини k_{S_α} визначаємо з рівнянь ($\alpha = 0, 1, 2, 3$)

$$\frac{j_l(k_{S_\alpha} r_{\alpha-1})}{n_l(k_{S_\alpha} r_{\alpha-1})} = \frac{j_l(k_{S_\alpha} r_\alpha)}{j_l(k_{S_\alpha} r_\alpha)}, \quad (10)$$

$j_l(x)$ та $n_l(x)$ — сферичні функції Бесселя та Неймана відповідно, а функції

$$\begin{aligned} F_l(k_{S_\alpha} r_p) = & j_{l+1}(k_{S_\alpha} r_p) n_l(k_{S_\alpha} r_p) \\ & - n_{l+1}(k_{S_\alpha} r_p) j_l(k_{S_\alpha} r_p), \end{aligned} \quad (11)$$

причому

$$\begin{aligned} \epsilon_\alpha^{-1} = & \epsilon_{\alpha\infty}^{-1} - \epsilon_{\alpha 0}^{-1}; \\ r_{-1} = & 0, r_3 \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (12)$$

Формули (6) та (8–12) визначають енергетичний спектр та потенціал поля поляризації обмежених оптичних фононів.

В. Інтерфейсні фонони

Енергії (Ω_I) та складову вектора поляризації ($\mathbf{P}_I(\mathbf{r})$), що обумовлена інтерфейсними фононами, знаходимо з умов

$$\epsilon_\alpha(\omega) \neq 0, \quad \epsilon_\beta(\omega) \neq 0, \quad \chi_\alpha^{-1}(\omega) \neq 0, \quad \chi_\beta^{-1}(\omega) \neq 0. \quad (13)$$

У такому разі рівняння (1) переходить у систему

$$\begin{cases} \text{rot } \mathbf{P}_I(\mathbf{r}) = 0, \\ \text{div } \mathbf{P}_I(\mathbf{r}) = 0, \end{cases} \quad (14)$$

розв'язком якої є вектори поляризації інтерфейсних фононів

$$\mathbf{P}_I(\mathbf{r}) = \sum_{lm\gamma} \mathbf{P}_{lm\gamma}^I = \nabla \Psi_I(\mathbf{r}), \quad (15)$$

де

$$\begin{aligned} \Psi_I(\mathbf{r}) = & \sum_{\gamma=1}^{\tau} \sum_{\alpha=0}^3 \sum_{lm} \Psi_{lm\gamma} f_{l\gamma\alpha}^L(\mathbf{r}) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ & \times (\theta(r - r_{\alpha-1}) - \theta(r - r_\alpha)) \end{aligned} \quad (16)$$

— потенціали відповідних поляризаційних полів. Тут τ -число віток інтерфейсних частот ($\omega_{\gamma,l}$), які при фіксованому квантовому числі ($l = 1, 2, \dots, \infty$) знаходимо з дисперсійних рівнянь

$$\alpha_N + \frac{l+1}{l}\beta_N = 0, \quad (17)$$

де α_N і β_N визначаємо рекурентними співвідношеннями

$$\begin{aligned} \alpha_N(\omega) &= \left(\alpha_{N-1} + \frac{l+1}{l}\beta_{N-1} \right) R_{N-1}^{-2l-1} \\ &+ \left(\alpha_{N-1} - \beta_{N-1} \right) \frac{l+1}{l} R_N^{-2l-1}, \\ \beta_N(\omega) &= \left(\left(\alpha_{N-1} + \frac{l+1}{l}\beta_{N-1} \right) R_{N-1}^{-2l-1} \right. \\ &\left. + \left(\beta_{N-1} - \alpha_{N-1} \right) R_N^{-2l-1} \right) \frac{\epsilon_N + 1}{\epsilon_N}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$+ \left(\beta_{N-1} - \alpha_{N-1} \right) R_N^{-2l-1} \frac{\epsilon_N + 1}{\epsilon_N}, \quad (19)$$

$$\beta_0(\omega) = \frac{\epsilon_1(\omega)}{\epsilon_0(\omega)}, \quad \alpha_0 = 1, \quad R_N = \frac{r_N}{r_0}. \quad (20)$$

Радіальні функції $f_{l\gamma\alpha}^I(r)$ задаємо виразами

$$f_{l\gamma\alpha}^I(r) = A_{l\alpha}^{(\gamma)} \left(\frac{r}{r_0} \right)^l + B_{l\alpha}^{(\gamma)} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{-(l+1)}, \quad (21)$$

де коефіцієнти $A_{l\alpha}^{(\gamma)}$, $B_{l\alpha}^{(\gamma)}$ визначаємо крайовими умовами та умовами нормування

$$\begin{aligned} A_1^{(\gamma)} &= \frac{l}{2l+1} \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_1} + \frac{l+1}{l} \right), \\ B_1^{(\gamma)} &= \frac{l}{2l+1} \left(1 - \frac{\epsilon_0}{\epsilon_1} \right), \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} A_N^{(\gamma)} &= \frac{l}{2l+1} \left(\left(\frac{l+1}{l} + \frac{\epsilon_{N-1}}{\epsilon_N} \right) A_{N-1} \right. \\ &\left. + R_{N-1}^{-2l-1} \frac{l+1}{l} \left(1 - \frac{\epsilon_{N-1}}{\epsilon_N} \right) B_{N-1} \right), \\ B_N^{(\gamma)} &= \frac{l}{2l+1} \left(R_{N-1}^{-2l-1} \left(1 - \frac{\epsilon_{N-1}}{\epsilon_N} \right) A_{N-1} \right. \\ &\left. + \left(1 + \frac{l+1}{l} \frac{\epsilon_{N-1}}{\epsilon_N} \right) B_{N-1} \right), \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} B_3^{(\gamma)} &= 0, \quad A_{3l}(\gamma) = 0, \\ A_{0l}(\gamma) &= 1, \quad B_3^{(\gamma)} = R_3^{-2l-1} A_3 + B_3, \end{aligned} \quad (24)$$

Здійснивши, згідно з загальною теорією [5], квантування поля поляризації переходом від векторів

$\mathbf{P}_{lm\lambda}$ і відповідних їм узагальнених імпульсів $\mathbf{\Pi}_{lm\lambda} = \mu_\lambda^{-1}(\mathbf{P})_{lm\lambda}$ до операторів народження $\hat{b}_{lm\lambda}^+$ та знищення $\hat{b}_{lm\lambda}$ ($\lambda = \{\gamma; S_\alpha; \alpha\}$) фононів, отримуємо повний гамільтоніан фононної системи

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_I. \quad (25)$$

Тут

$$\hat{H}_L = \sum_{\alpha=0}^3 \sum_{lms_\alpha} \Omega_{Ls_\alpha} (\hat{b}_{lms_\alpha}^+ \hat{b}_{lms_\alpha} + 1/2), \quad (26)$$

$$\hat{H}_I = \sum_{lm\gamma} \Omega_{l\gamma} (\hat{b}_{lm\gamma}^+ \hat{b}_{lm\gamma} + 1/2), \quad (27)$$

де $\Omega_{L\alpha}$ — енергія обмежених оптичних фононів середовища α , а $\Omega_{l\gamma} = \hbar\omega_{l\gamma}$ — енергія інтерфейсних фононів з частотами, які визначаємо з рівнянь (17), причому γ нумерує число віток ІО-фононів.

III. АНАЛІЗ І ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Розрахунок фононного спектра в розглянутій гетеросистемі виконували згідно з отриманими в попередніх параграфах формулами і з використанням параметрів системи, наведених у табл. 1.

середовище	a(Å)	ϵ_α^0	ϵ_α^{inf}	$\Omega_{\alpha,o}$ (meV)
CdS	5.818	9.1	5.5	57.2
HgS	5.851	18.2	11.36	27.8
ZnS	5.41	8.3		
H ₂ O	—	1.78	1.78	—

Таблиця 1.

Як уже відзначали раніше, наносистема CdS/HgS/ZnS/H₂O характеризується тими ж енергіями обмежених оптичних фононів ($\Omega_{l\alpha}$), що існують у відповідних масивних кристалах, з яких складається наногетеросистема. Величини енергій обмежених оптичних фононів не залежать від розмірів квантової ями. Вони зображені для зручності аналізу на рис. 1 штриховими лініями.

Наявність меж розділу середовищ привела до того, що в гетеросистемі існують інтерфейсні (ІО) фонони. Розрахунок показав, що в досліджуваній системі є п'ять ($\gamma = 1, 2, \dots, 5$) віток ІО-фононів, які існують при всіх значеннях квантового числа l , крім $l = 0$. Кількість гілок обумовлюється числом і діелектричними проникливостями контактуючих середовищ. Кожне середовище формує дві гілки, якщо з обох його боків — напівпровідникові середовища, і одну гілку, якщо з одного боку напівпровідникове, а з другого — діелектричне середовище.

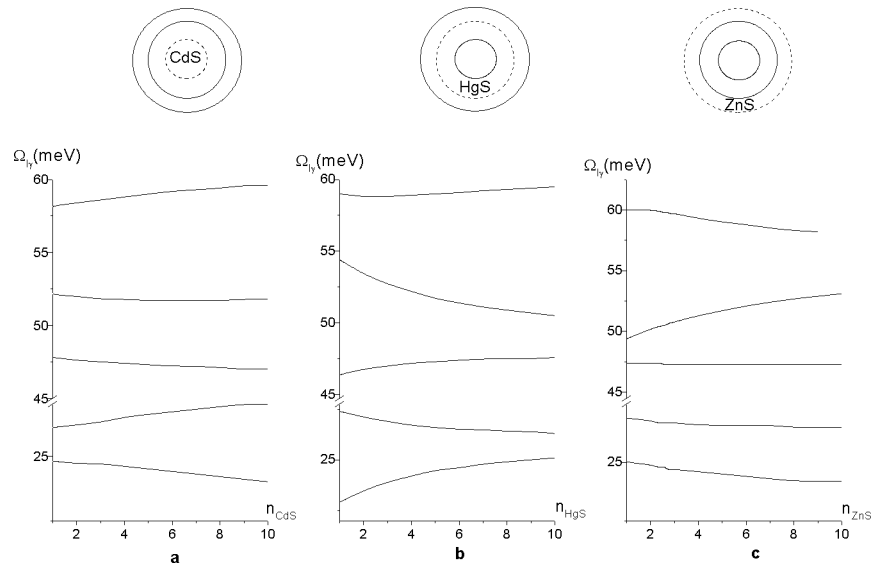


Рис. 2. Залежність спектра ІО-фононів від розмірів наногетеросистеми ($l = 1$).

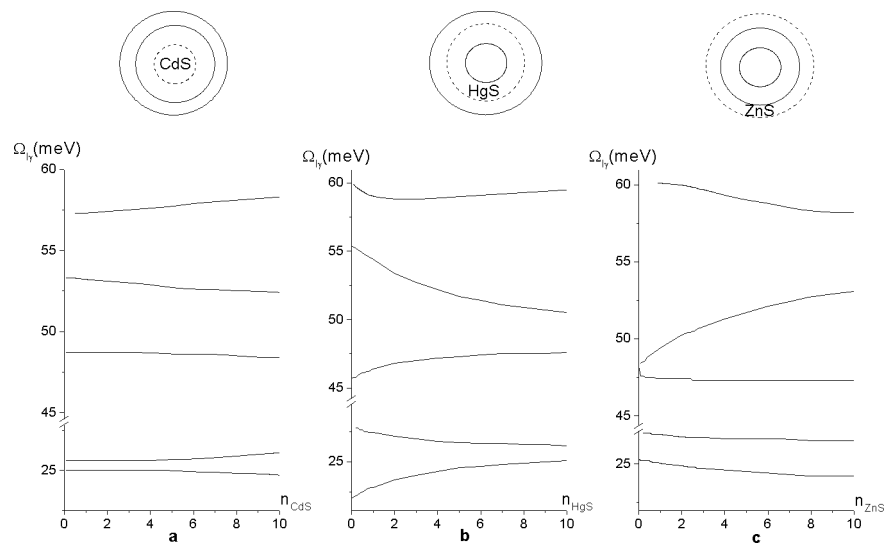


Рис. 3. Залежність спектра ІО-фононів від розмірів наногетеросистеми ($l = 3$).

Результати розрахунку спектра ІО-фононів наведені на рис. 1. З рис. 1 видно, що всі п'ять гілок ІО-фононів мають слабку дисперсію (залежність від числа l). При цьому дві нижні гілки знаходяться між енергіями поздовжніх і поперечних фононів масивного кристала HgS, третя — між енергіями таких же фононів CdS, четверта і п'ята — ZnS.

На рис. 2 зображена залежність енергії ІО-фононів від розмірів різних шарів гетеросистеми при $l = 1$. Зверху кожного рисунка схематично зображена сферична гетеросистема з виділеним шаром, від товщини якого розглядаємо залежність. Як видно з рис. 2а,

спектр ІО-фононів дуже слабо залежить від товщини шару CdS. На рис. 2b подана залежність енергії ІО-фононів від товщини шару HgS. З рисунка видно, що невелику дисперсію спостерігаємо лише при малих значеннях товщини. Залежність енергії ІО-фононів від товщини шару ZnS (рис. 2c) значна тільки для двох верхніх гілок спектра.

На рис. 3 зображена залежність енергії ІО-фононів від розмірів різних шарів гетеросистеми при $l = 3$. Як видно з рис. 3а, товщина шару CdS практично не впливає на спектр інтерфейсних фононів. При зміні товщини шару HgS (рис. 3b) для двох верхніх рівнів

вираженим є ефект розштовхування рівнів, або ефект “пляшкового горла”. Два найнижчі рівні при збільшенні товщини шару практично зливаються в один, тобто відбувається виродження рівня (рис. 3b, 3c). З рис. 3c видно, що третій рівень не відчуває зміни товщини шару ZnS. Для двох найнижчих рівнів спостерігаємо ефект розштовхування.

Таким чином, вивчені особливості фононного спектра наногетеросистеми CdS/HgS/ZnS/H₂O, отриманий гамільтоніан (24) фононної системи та вектори поляризації (7), (15) дають змогу дослідити електрон-фононну взаємодію в цій гетеросистемі, що буде виконано в наступній роботі.

-
- [1] Ж. И. Алферов, *Физ. тех. полупроводн.* **32**, 3 (1998).
[2] М. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Min'kova, *Phys. Status Solidi B* **203**, 373 (1997).
[3] А. И. Екимов, А. А. Онущенко, *Письма журн. эксп.*

- теор. физ.* **40**, 337 (1984).
[4] D. Schooss, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller, *Phys. Rev. B* **24**, 17072 (1994).
[5] Н. В. Ткач, *Физ. тверд. тела* **39**, 1109 (1997).

PHONON SPECTRUM IN SPHERICAL β -CdS/HgS/ZnS/H₂O NANOHETEROSYSTEM

M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mikhalyova
*Chernivtsi State University, Department of Theoretical Physics,
2 Kotsubinsky str., UA-274012, Chernivtsi, Ukraine*

The theoretical investigation of interface and confined optical phonons spectra is performed in the dielectric continuum model for the spherical β -CdS/HgS/ZnS/H₂O nanoheterosystem. The polarizational vectors as well as Hamiltonian of the phonon system have been obtained.