ФОНОННИЙ СПЕКТР У СФЕРИЧНІЙ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ β–CdS/HgS/ZnS/H_2O

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/H_2O. Отримано вектори поляризації та гамільтоніян 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 (прецезійні) характеристики, практично не залежні від температури.

У роботі [4] експериментально й теоретично досліджували спектр екситона, електрона і дірки в наногетеросистемах β–CdS/HgS/H_2O та β–CdS/HgS/CdS/H_2O. 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/H_2O 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/H_2O та вивчити їхні фізичні характеристики, які формуються цими квазічастками.

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

II. ФОНОННИЙ СПЕКТР У НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ CdS/HgS/ZnS/H_2O

Сферична гетеросистема CdS/HgS/ZnS/H_2O складається із середовищ, які мають відомі величини діелектричних проникностей ϵ_α^0, ϵ_α^∞ та енергії поздовжніх $\Omega_{\alpha,o} = \hbar\omega_{\alpha,0}$ 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

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

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

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

де

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

індекси r і τ позначають радіяльні та танґенційні 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 $\beta \neq \alpha$

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

а у власному середовищі α

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

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

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

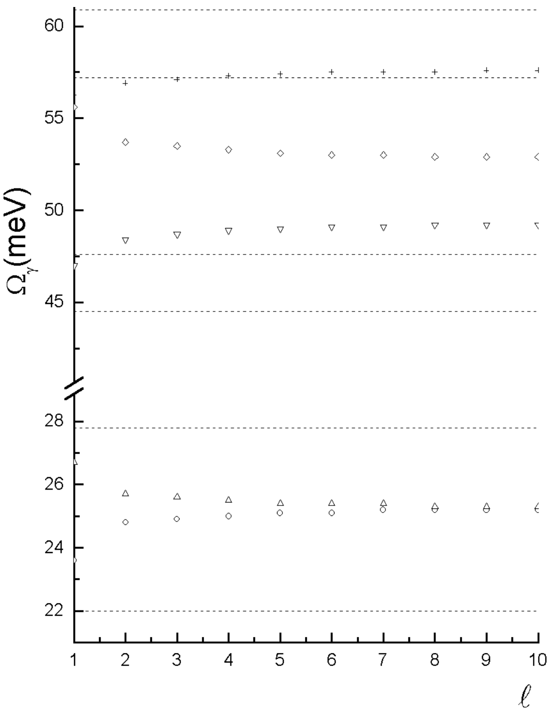

Рис. 1. Залежність спектра IO–фононів від l.

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

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

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

$$\Psi_L(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=0}^{3} \sum_{S_\alpha lm} f^L_{lS_\alpha}(\mathbf{r}) Y_{lm}(\theta, \varphi) \times (\theta(r - r_{\alpha-1}) - \theta(r - r_\alpha)), \qquad (8)$$

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

$$f^L_{lS_\alpha} = \frac{\omega_{L\alpha}}{k_{S_\alpha}\sqrt{2\pi\tilde{\epsilon}_\alpha}} \times \frac{n_l(k_{S_\alpha} r_\alpha) j_l(k_{S_\alpha} r) - j_l(k_{S_\alpha} r_\alpha) n_l(k_{S_\alpha} r)}{\sqrt{r_\alpha^3 F_l^2(k_{S\alpha} r_\alpha) - r_{\alpha-1}^3 F_l^2(k_{S\alpha} r_{\alpha-1})}}, \qquad (9)$$

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

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

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

$$F_l(k_{S_\alpha} r_p) = j_{l+1}(k_{S_\alpha} r_p) n_l(k_{S_\alpha} r_p) - n_{l+1}(k_{S_\alpha} r_p) j_l(k_{S_\alpha} r_p), \qquad (11)$$

причому

$$\tilde{\epsilon}_\alpha^{-1} = \epsilon_{\alpha\infty}^{-1} - \epsilon_{\alpha 0}^{-1};$$

$$r_{-1} = 0, r_3 \to \infty. \qquad (12)$$

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

B. Інтерфейсні фонони

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

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

У такому разі рівняння (1) переходить у систему

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

розв'язком якої є вектори поляризації інтерфейсних фононів

$$\mathbf{P}_I(\mathbf{r}) = \sum_{lm\gamma} \mathbf{P}^I_{lm\gamma} = \nabla \Psi_I(\mathbf{r}), \qquad (15)$$

де

$$\Psi_I(\mathbf{r}) = \sum_{\gamma=1}^{\tau} \sum_{\alpha=0}^{3} \sum_{lm} \Psi_{lm\gamma} f^L_{l\gamma\alpha}(\mathbf{r}) Y_{lm}(\theta, \varphi) \times (\theta(r - r_{\alpha-1}) - \theta(r - r_\alpha)) \qquad (16)$$

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

$$\alpha_N + \frac{l+1}{l}\beta_N = 0, \tag{17}$$

де α_N і β_N визначаємо рекурентними співвідношеннями

$$\alpha_N(\omega) = \left(\alpha_{N-1} + \frac{l+1}{l}\beta_{N-1}\right) R_{N-1}^{-2l-1} + \left(\alpha_{N-1} - \beta_{N-1}\right)\frac{l+1}{l} R_N^{-2l-1},$$

$$\beta_N(\omega) = \left(\left(\alpha_{N-1} + \frac{l+1}{l}\beta_{N-1}\right) R_{N-1}^{-2l-1} \tag{18}\right.$$

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

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

Радіяльні функції $f^I_{l\gamma\alpha}(r)$ задаємо виразами

$$f^I_{l\gamma\alpha(r)} = A^{(\gamma)}_{l\alpha}\left(\frac{r}{r_0}\right)^l + B^{(\gamma)}_{l\alpha}\left(\frac{r}{r_0}\right)^{-(l+1)}, \tag{21}$$

де коефіцієнти $A^{(\gamma)}_{l\alpha}$, $B^{(\gamma)}_{l\alpha}$ визначаємо крайовими умовами та умовами нормування

$$A_1^{(\gamma)} = \frac{l}{2l+1}\left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_1} + \frac{l+1}{l}\right),$$

$$B_1^{(\gamma)} = \frac{l}{2l+1}\left(1 - \frac{\epsilon_0}{\epsilon_1}\right), \tag{22}$$

$$A_N^{(\gamma)} = \frac{l}{2l+1}\left(\left(\frac{l+1}{l} + \frac{\epsilon_{N-1}}{\epsilon_N}\right) A_{N-1} + R_{N-1}^{-2l-1}\frac{l+1}{l}\left(1 - \frac{\epsilon_{N-1}}{\epsilon_N}\right) B_{N-1}\right),$$

$$B_N^{(\gamma)} = \frac{l}{2l+1}\left(R_{N-1}^{-2l-1}\left(1 - \frac{\epsilon_{N-1}}{\epsilon_N}\right) A_{N-1} + \left(1 + \frac{l+1}{l}\frac{\epsilon_{N-1}}{\epsilon_N}\right) B_{N-1}\right), \tag{23}$$

$$B_3^{(\gamma)} = 0, \quad A_{3l}(\gamma) = 0,$$

$$A_{0l}(\gamma) = 1, \quad B_3^{(\gamma)} = R_3^{-2l-1} A_3 + B_3, \tag{24}$$

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 гамільтоніян фононної системи

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_I. \tag{25}$$

Тут

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

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

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 IO–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(A)	ϵ^0_α	ϵ^{infty}_α	$\Omega_{\alpha,o}(meV)$
CdS	5.818	9.1	5.5	57.2
HgS	5.851	18.2	11.36	27.8
ZnS	5.41	8.3		
H_2O	—	1.78	1.78	—

Таблиця 1.

Як уже відзначали раніше, наносистема CdS/HgS/ZnS/H_2O 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 зручности аналізу на рис. 1 штриховими лініями.

Наявність меж розділу середовищ привела до того, що в гетеросистемі існують інтерфейсні (IO) фонони. Розрахунок показав, що в досліджуваній системі є п'ять ($\gamma = 1, 2, ..., 5$) віток IO–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.

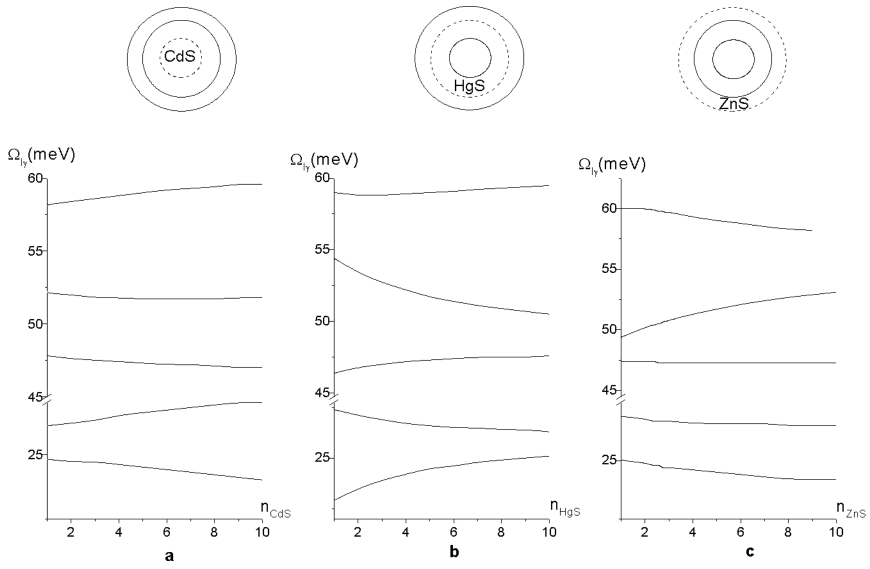

Рис. 2. Залежність спектра IO–фононів від розмірів наногетеросистеми ($l = 1$).

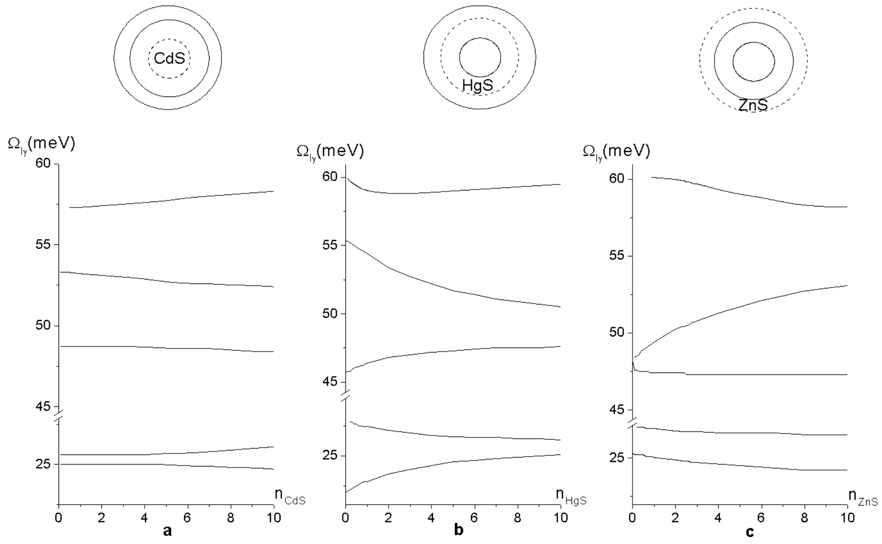

Рис. 3. Залежність спектра IO–фононів від розмірів наногетеросистеми ($l = 3$).

Результати розрахунку спектра IO–фононів наведені на рис. 1. З рис. 1 видно, що всі п'ять гілок IO–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 IO–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. 2a, спектр IO–фононів дуже слабо залежить від товщини шару CdS. На рис. 2b подана залежність енергії IO–фононів від товщини шару HgS. З рисунка видно, що невелику дисперсію спостерігаємо лише при малих значеннях товщини. Залежність енергії IO–фононів від товщини шару ZnS (рис. 2c) значна тільки для двох верхніх гілок спектра.

На рис. 3 зображена залежність енергії IO–фононів від розмірів різних шарів гетеросистеми при $l = 3$. Як видно з рис. 3a, 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 $CdS/HgS/ZnS/H_2O$, отриманий гамільтоніян (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] M. 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–$CdS/HgS/ZnS/H_2O$ 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 perfomed in the dielectric continium model for the spherical β–$CdS/HgS/ZnS/H_2O$ nanogeterosystem. The polarizational vectors as well as Hamiltonian of the phonon system have been obtained.