

ТЕОРІЯ ФОНОННОГО СПЕКТРА В ЦИЛІНДРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ У КВАНТОВИХ ДРОТАХ, РОЗТАШОВАНИХ У ТРИВИМІРНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

М. В. Ткач, В. П. Жаркой, О. М. Маханець
Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича
вул. Коцюбинського, 2, 58012, Чернівці
(Отримано 20 грудня 2004 р.)

На основі моделі діелектричного континууму побудовано теорію енергетичного спектра й полів поляризації обмежених та інтерфейсних фононів для комбінованої наногетеросистеми, що складається з циліндричних квантових точок у циліндричному квантовому дроті, які розташовані в масивному тривимірному середовищі.

Ключові слова: циліндрична квантова точка, циліндричний квантовий дріт, обмежені фонони, інтерфейсні фонони, фононний спектр.

PACS number(s): 68.65.Hb, 68.65.La, 74.25.Kc

Теорія електронних, екситонних і фононних спектрів у простих квантових точках, дротах та плоских квантових ямах, що розташовані в зовнішньому масивному середовищі, розвивається вже тривалий час [1–4]. Стосовно фононного спектра, то для напівпровідникових наносистем здебільшого його отримували на базі моделі діелектричного континууму, яка, будучи досить простою, непогано пояснює основні властивості спектрів, що спостерігаються експериментально.

Бурхливий розвиток експериментальних досліджень наносистем привів до того, що вже існують досить складні комбіновані наноконструкції, які містять різноманітні просторові з'єднання квантових точок (КТ), квантових дротів (КД) та квантових ям [5]. Теоретичне вивчення таких систем лише починається, оскільки воно є доволі складним для математичного опису.

У цій статті розв'язано задачу про знаходження фононного спектра для комбінованої наногетеросистеми, що складається з трьох циліндричних КТ (“1”, “0”, “1”), розташованих у циліндричному КД (“2”) так, що вся ця наносистема перебуває в зовнішньому масивному напівпровідниковому середовищі (“3”) (рис. 1). Радіуси всіх КТ і КД однакові (ρ_0). Висота внутрішньої КТ — Δ_0 , а зовнішніх — Δ_1 . Діелектричні проникності напівпровідникових складових наносистеми вважаються відомими,

$$\varepsilon_j(\omega) = \varepsilon_{j\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{Lj}^2}{\omega^2 - \omega_{Tj}^2} \quad (j = 0, 1, 2, 3), \quad (1)$$

як і частоти оптичних коливань ($\omega_{jL,T}$) їхніх масивних аналогів.

Згідно з моделлю діелектричного континууму, фононний спектр знаходиться з рівнянь руху для вектора поляризації одиниці об'єму (\mathbf{P}), який входить у електростатичні рівняння Максвелла для середовища:

$$\nabla \mathbf{D} = 4\pi \xi(\mathbf{r}), \quad (2)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon_j(\omega) \mathbf{E} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} \quad (j = 0, 1, 2, 3), \quad (3)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \Phi, \quad (4)$$

де \mathbf{D} , \mathbf{E} , \mathbf{P} і Φ — електричне зміщення, напруженість електричного поля, густина поляризації й електростатичний потенціал відповідно, ξ — густина заряду. Комбінуючи вирази (2)–(4), отримуємо рівняння

$$\varepsilon_j(\omega) \nabla \Phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (j = 0, 1, 2, 3) \quad (5)$$

для вільних коливань системи. Як видно з (5), є два можливі розв'язки рівняння, які й визначають спектр обмежених та інтерфейсних фононів.

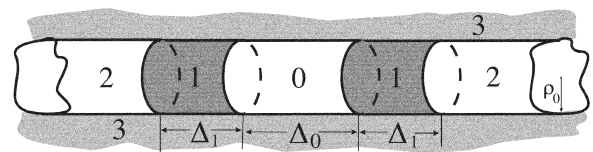


Рис. 1. Геометрична схема наносистеми трьох циліндричних квантових точок у циліндричному квантовому дроті, розташованих у зовнішньому середовищі.

І. ОБМЕЖЕНІ ФОНОНИ

З рівняння (5) при умові

$$\varepsilon_j(\omega) = 0, \quad \nabla \Phi(\mathbf{r}) \neq 0 \quad (6)$$

одержуємо спектр обмежених фононів

$$\Omega_{Lj} = \hbar \omega_{Lj}, \quad (7)$$

який, як видно, збігається з набором частот поздовжніх фононів масивних аналогів складових наносистеми. З урахуванням аксіальної симетрії системи потенціали поляризації обмежених L -фононів шукаємо у такому вигляді:

$$\Phi_m(\mathbf{r}) = J_m(k\rho)f(z)e^{im\varphi}, \quad (8)$$

де

$$f(z) = \begin{cases} A_0^+ \cos(q_0 z) + A_0^- \sin(q_0 z), & (|z| \leq \frac{\Delta_0}{2}) - \text{КТ "0"}. \\ A_1^+ \cos(q_1 z) + A_1^- \sin(q_1 z), & (\frac{\Delta_0}{2} < |z| \leq \frac{\Delta_0}{2} + \Delta_1) - \text{КТ "1"}. \\ A_2^+ \cos(q_2 z) + A_2^- \sin(q_2 z), & (|z| > \frac{\Delta_0}{2} + \Delta_1) - \text{КД}. \end{cases} \quad (9)$$

k, q_j, A_j^\pm ($j = 0, 1, 2$) визначаються електростатичними граничними умовами неперервності потенціалів поляризації $\Phi_m(\mathbf{r})$ та нормальних складових вектора електричного зміщення \mathbf{D} при $z = \pm\Delta_0/2$, $z = \pm(\Delta_0/2 + \Delta_1)$ і $\rho = \rho_0$. Оскільки наносистема має дзеркальну симетрію щодо площини $z = 0$, то електростатичний потенціал буде або симетричним ($\Phi_m^{(+)}$), або антисиметричним ($\Phi_m^{(-)}$) стосовно неї, тому повинні виконуватися умови: або $A_0^+ = 0, A_0^- \neq 0$, або $A_0^+ \neq 0, A_0^- = 0$. Відповідно, усередині КТ "0" є два розв'язки $\Phi_m^\pm(\mathbf{r})$:

$$\Phi_{0m}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = A_{mln} J_m(\chi_n^m \frac{\rho}{\rho_0}) \times \begin{cases} \cos\left(\frac{l\pi}{\Delta_0} z\right) e^{im\varphi}, & l = 1, 3, 5, \dots, \\ \sin\left(\frac{l\pi}{\Delta_0} z\right) e^{im\varphi}, & l = 2, 4, 6, \dots, \end{cases} \quad (10)$$

де χ_n^m — n -й корінь функції Бесселя m -го порядку. Обидва розв'язки описують обмежені L -фонони з квазіхвильовими числами $k = \chi_n^m/\rho_0$ і $q_0 = l\pi/\Delta_0$ відповідно.

Аналогічно знаходимо потенціали $\Phi_{1m}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ та $\Phi_{2m}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ у КТ "1" та в КД "2".

Зауважимо, що нормуючі коефіцієнти A_{nlm} обчислюємо з умови повноти хвильових функцій обмежених фононів і визначаємо при квантуванні фононного

поля.

II. ІНТЕРФЕЙСНІ ФОНОНИ

Потенціал поляризації та спектр інтерфейсних фононів визначаємо рівнянням

$$\Delta\Phi(\mathbf{r}) = 0. \quad (11)$$

Розв'язок рівняння Лапласа (11) у циліндричних координатах (ρ, φ, z) шукаємо у вигляді

$$\Phi(\mathbf{r}) = e^{im\varphi} \phi(\rho) F(z). \quad (12)$$

Залежно від того, які граничні умови задовольняють функції $\phi(\rho)$ та $F(z)$, існує два типи поверхневих фононних мод, а саме, плоскі інтерфейсні оптичні (TSO) моди, амплітуда яких спадає з віддаленням від кожної з чотирьох площин при $z = \pm\Delta_0/2$, $z = \pm(\Delta_0/2 + \Delta_1)$, і бічні інтерфейсні оптичні (SSO) моди, амплітуда яких спадає з віддаленням від бічних стінок при $\rho = \rho_0$.

а). **Спектр і потенціали поляризації TSO-мод** шукаємо так. Функції $\phi_j(\rho)$ та $F(z)$ як розв'язки рівняння (11) повинні бути такими, щоб описувати загасаючий потенціал поляризації $F^{(d)}(z)$ вздовж осі Oz та незагасаючий потенціал $\phi_j^{(n)}(\rho)$ у площині, перпендикулярній до Oz . Такими функціями є

$$\phi_j^{(n)}(\rho) = \begin{cases} J_m(q_j \rho) & (\rho \leq \rho_0) \quad j = 0, 1, 2, \\ \left(1 - \frac{N_m(q_j \rho_0)}{J_m(q_j \rho_0)}\right) J_m(q_j \rho) + N_m(q_j \rho) & (\rho > \rho_0), \end{cases} \quad (13)$$

$$F^{(d)}(z) = \begin{cases} B_0^+ \operatorname{ch}(q_0 z) + B_0^- \operatorname{sh}(q_0 z) & (|z| \leq \Delta_0/2), \\ B_1^+ \operatorname{ch}(q_1 z) + B_1^- \operatorname{sh}(q_1 z) & (\Delta_0/2 < |z| \leq \Delta_0/2 + \Delta_1), \\ B^\pm e^{-q_2 z} & (|z| > \Delta_0/2 + \Delta_1), \end{cases} \quad (14)$$

де $J_m(t)$ і $N_m(t)$ — функції Бесселя і Неймана m -го порядку. З урахуванням граничних умов неперервності потенціалу поляризації $F(z)$ та нормальних складових вектора електричного зміщення \mathbf{D} при $z = \pm\Delta_0/2$ і $z = \pm(\Delta_0/2 + \Delta_1)$ отримуємо або $B_0^+ = 0, B_0^- \neq 0$ (антисиметричні TSO-моди), або $B_0^- = 0, B_0^+ \neq 0$ (симетричні TSO-моди). Це приводить до системи чотирьох рівнянь для знаходження симетричних (ω_+) й анти-

симетричних (ω_-) TSO-мод. Увівши для скорочення запису зручні позначення функцій

$$\operatorname{sch}^\pm(t) = \begin{cases} \operatorname{sh}(t), \\ \operatorname{ch}(t), \end{cases} \quad (15)$$

запишемо цю систему так:

$$\begin{cases} B_0^\pm \operatorname{sch}^\mp(q_0 \frac{\Delta_0}{2}) = B_1^+ \operatorname{ch}(q_1 \frac{\Delta_0}{2}) + B_1^- \operatorname{sh}(q_1 \frac{\Delta_0}{2}), \\ \varepsilon_0 q_0 B_0^\pm \operatorname{sch}^\pm(q_0 \frac{\Delta_0}{2}) = \varepsilon_1 q_1 B_1^+ \operatorname{sh}(q_1 \frac{\Delta_0}{2}) + \varepsilon_1 q_1 B_1^- \operatorname{ch}(q_1 \frac{\Delta_0}{2}), \\ B_1^+ \operatorname{ch}[q_1 (\frac{\Delta_0}{2} + \Delta_1)] + B_1^- \operatorname{sh}[q_1 (\frac{\Delta_0}{2} + \Delta_1)] = B^\pm e^{-q_1 (\frac{\Delta_0}{2} + \Delta_1)}, \\ \varepsilon_1 q_1 B_1^+ \operatorname{sh}[q_1 (\frac{\Delta_0}{2} + \Delta_1)] + \varepsilon_1 q_1 B_1^- \operatorname{ch}[q_1 (\frac{\Delta_0}{2} + \Delta_1)] = -\varepsilon_2 q_2 B^\pm e^{-q_1 (\frac{\Delta_0}{2} + \Delta_1)}. \end{cases} \quad (16)$$

Умова нетривіальності розв'язків системи (16) дає рівняння для знаходження спектра частот TSO-мод:

$$g_4 \omega^8 - g_3 \omega^6 + g_2 \omega^4 - g_1 \omega^2 + g_0 = 0, \quad (17)$$

де

$$g_n = h_1 (q_2 l_n - q_1 p_n) \quad (18)$$

$$+ h_2 [q_1 \operatorname{ch}(q_1 \Delta_1) s_n + q_2 \operatorname{sh}(q_1 \Delta_1) t_n], \quad (n = 0, 1, \dots, 4),$$

$$h_1 = q_1 e^{-q_1 (\Delta_0/2 + \Delta_1)} \operatorname{sh}(q_1 \Delta_0/2) \operatorname{sch}^\mp(q_0 \Delta_0/2),$$

$$h_2 = q_0 \operatorname{sch}^\pm(q_0 \Delta_0/2), \quad (19)$$

$$\begin{aligned} l_0 &= \varepsilon_{1s} \varepsilon_{2s} u, & p_0 &= \varepsilon_{1s}^2 u, \\ s_0 &= \varepsilon_{0s} \varepsilon_{1s} u, & t_0 &= \varepsilon_{0s} \varepsilon_{2s} u, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} l_4 &= \varepsilon_{1\infty} \varepsilon_{2\infty}, & p_4 &= \varepsilon_{1\infty}^2, \\ s_4 &= \varepsilon_{0\infty} \varepsilon_{1\infty}, & t_4 &= \varepsilon_{0\infty} \varepsilon_{2\infty}. \end{aligned} \quad (21)$$

Увівши узагальнену змінну w_n , яка може набувати значень

$$w_n = l_n, p_n, s_n, t_n \quad (n = 0, 1, \dots, 4), \quad (22)$$

і застосувавши позначення

$$\begin{cases} \nu_l \equiv \nu_{01}, & \nu_p \equiv \nu_{02}, & \nu_s \equiv \nu_{12}, & \nu_t \equiv \nu_{11}, \\ \alpha_l \equiv \alpha_{12}, & \alpha_p = 2\varepsilon_{1\infty} \sqrt{\pi_p}, & \alpha_s \equiv \alpha_{01}, & \alpha_t \equiv \alpha_{02}, \\ \sigma_l \equiv \sigma_{01}, & \sigma_p \equiv \sigma_{02}, & \sigma_s \equiv \sigma_{12}, & \sigma_t \equiv \sigma_{11}, \end{cases} \quad (23)$$

$$\begin{cases} u = \nu_{02} \nu_l^2, & \nu_j = \omega_{Tj}^2, & \nu_{ij} = \nu_i \nu_j, & \alpha_{ij} = \beta_{ij} + \beta_{ji}, & \beta_{ij} = \varepsilon_{i\infty} \varepsilon_{js} \nu_j, \\ \pi_l = \nu_{12} l_0 / u, & \pi_p = \nu_l^2 p_0 / u, & \pi_s = \nu_{01} s_0 / u, & \pi_t = \nu_{02} t_0 / u, & \sigma_{ij} = \nu_i + \nu_j, \end{cases} \quad (24)$$

матимемо для відповідних змінних $l_1, p_1, \dots, s_3, t_3$ такі вирази:

$$w_1 = \pi_w \sigma_w + \alpha_w \nu_w, \quad w_2 = \pi_w + \nu_w w_4 + \alpha_w \sigma_w, \quad (25)$$

$$w_3 = \alpha_w + \sigma_w w_4.$$

Тут скрізь $i, j = 0, 1, 2$.

Коефіцієнти g_n , що входять у вираз (17), містять невідомі квазіхвильові числа q_0, q_1, q_2 , які знаходимо з граничних умов на бічних межах $\varepsilon_j(\omega)E_j^\perp \Big|_{\rho=\rho_0} = \varepsilon_3(\omega)E_3^\perp \Big|_{\rho=\rho_0}$. Ці умови приводять до системи трьох рівнянь

$$\begin{aligned} \varepsilon_j - \varepsilon_3 \left[1 - \frac{N_m(Q_j)}{J_m(Q_j)} \right] \left[\frac{mJ_m(Q_j)}{Q_j} - J_{m+1}(Q_j) \right] \\ = \varepsilon_3 \left[\frac{mN_m(Q_j)}{Q_j} - N_{m+1}(Q_j) \right], \end{aligned} \quad (26)$$

де $Q_j \equiv q_j \rho_0, j = 0, 1, 2$.

Чотири рівняння (17), (26) є нелінійною системою щодо частот TSO-мод. Розв'язками цієї системи визначаються закони дисперсії плоских симетричних (ω_+) і антисиметричних (ω_-) TSO-мод ω_j^\pm . Із цієї ж системи знаходимо коефіцієнти, а отже й потенціали фононів з точністю до нормуючих множників, які отримуємо в результаті квантування фононного поля.

б). **Спектр і потенціали поляризації (для бічних) SSO-мод** шукаємо тут у вигляді

$$\Phi(\mathbf{r}) = e^{im\varphi} \Psi(\rho, z), \quad (27)$$

$$\Psi(\rho, z) = \phi(\rho)F(z).$$

Функції $\phi_j(\rho)$ та $F_j(z)$ як розв'язки рівняння (11) повинні бути такими, щоб описувати незагасаючий потенціал поляризації $F_j^{(n)}(z)$ вздовж осі Oz та загасаючий потенціал $\phi_j^{(d)}(\rho)$ у площині, перпендикулярній до Oz . Такими функціями є

$$\phi_j^{(d)}(\rho) = \begin{cases} I_m(k_j^\perp \rho), & \rho \leq \rho_0, \\ K_m(k_j^\perp \rho), & \rho > \rho_0 \quad (j = 0, 1, 2), \end{cases} \quad (28)$$

$$F_j^{(n)}(z) = \begin{cases} D_j^{(+)} \cos(k_j^\parallel z) + D_j^{(-)} \sin(k_j^\parallel z), & \rho \leq \rho_0, \\ C_j^{(+)} \cos(k_j^\parallel z) + C_j^{(-)} \sin(k_j^\parallel z), & \rho > \rho_0 \quad (j = 0, 1, 2), \end{cases} \quad (29)$$

де $I_m(t)$ та $K_m(t)$ — відповідно модифіковані функції Бесселя m -го порядку першого і другого роду.

D_j^\pm, C_j^\pm, k_j ($j = 0, 1, 2$) і частоти SSO-мод визначаємо з електростатичних граничних умов неперервності потенціалу поляризації $\Psi_j(\rho, z)$ та нормальних складових вектора електричного зміщення \mathbf{D} при $z = \pm\Delta_0/2, z = \pm(\Delta_0/2 + \Delta_1)$ і $\rho = \rho_0$. Для j -го елемента наносистеми $k_j^\parallel = n_j^\pm \pi / \Delta_j$, і ми матимемо або $D_j^{(-)} = 0, D_j^{(+)} \neq 0$, або $D_j^{(+)} = 0, D_j^{(-)} \neq 0$. З урахуванням зручних позначень функцій

$$\text{cs}^\pm(n_j^\pm t) = \begin{cases} \cos(n_j^\pm t), \\ \sin(n_j^\pm t), \end{cases} \quad (30)$$

$$n_j^\pm = \begin{cases} 2, 4, 6, \dots, \\ 1, 3, 5, \dots, \end{cases}$$

вираз для потенціалу поляризації запишемо так:

$$\Phi_j^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} D_j^{(\pm)} I_m(k_j^\perp \rho) \text{cs}^\pm\left(\frac{n_j^\pm \pi}{\Delta_j} z\right) e^{im\varphi}, & \rho \leq \rho_0, \\ C_j^{(\pm)} K_m(k_j^\perp \rho) \text{cs}^\pm\left(\frac{n_j^\pm \pi}{\Delta_j} z\right) e^{im\varphi}, & \rho > \rho_0. \end{cases} \quad (31)$$

З урахуванням граничних умов неперервності потенціалу поляризації $\phi_j^{(d)}(\rho)$ та нормальних складових вектора електричного зміщення \mathbf{D} при $\rho = \rho_0$ отримуємо трансцендентне рівняння для знаходження k_j^\perp :

$$\varepsilon_j(\omega) \frac{I'_m(k_j^\perp \rho_0)}{I_m(k_j^\perp \rho_0)} = \varepsilon_3(\omega) \frac{K'_m(k_j^\perp \rho_0)}{K_m(k_j^\perp \rho_0)}, \quad (32)$$

$(j = 0, 1, 2).$

Дисперсійні рівняння для SSO-мод, що описують j -й елемент наносистеми, одержуємо такими:

$$\omega_m^s(k_j^\perp \rho_0) = \sqrt{\frac{b_j(k_j^\perp \rho_0) \pm \sqrt{d_j(k_j^\perp \rho_0)}}{2[\varepsilon_{j\infty} - \varepsilon_{3\infty} L_m(k_j^\perp \rho_0)]}}, \quad (33)$$

$$b_j(k_j^\perp \rho_0) = \varepsilon_{js} \omega_{Tj}^2 + \varepsilon_{j\infty} \omega_{T3}^2 - L_m(k_j \rho_0) (\varepsilon_{3\infty} \omega_{Tj}^2 + \varepsilon_{3s} \omega_{T3}^2), \quad (35)$$

де

$$d_j(k_j^\perp \rho_0) = b_j^2(k_j^\perp \rho_0) - 4c_j(k_j^\perp \rho_0) \times [\varepsilon_{j\infty} - \varepsilon_{3\infty} L_m(k_j \rho_0)], \quad (34)$$

$$c_j(k_j^\perp \rho_0) = [\varepsilon_{js} - \varepsilon_{3s} L_m(k_j \rho_0)] \omega_{Tj}^2 \omega_{T3}^2. \quad (36)$$

Тут уведено позначення

$$L_m(k_j^\perp \rho_0) = \frac{I_m(k_j^\perp \rho_0)}{K_m(k_j^\perp \rho_0)} \frac{mK_m(k_j^\perp \rho_0) - (k_j^\perp \rho_0)K_{m+1}(k_j^\perp \rho_0)}{mI_m(k_j^\perp \rho_0) + (k_j^\perp \rho_0)I_{m+1}(k_j^\perp \rho_0)}, \quad (37)$$

а $\varepsilon_{3\infty}$ і ε_{3s} — високочастотна і статична діелектричні проникності середовища “3”, яке оточує квантовий дріт. Таким чином, у цій статті вперше побудовано послідовну теорію спектра й потенціалів полів поляризації обмежених та інтерфейсних фононів для комбінованих напівпровідникових наносистем, що складаються з циліндричних КТ у КД, розташованих у масивному тривимірному середовищі. У наступних працях буде розраховано та проаналізовано фононні спектри й потенціали поляризації конкретних наносистем. Отримані тут результати дають змогу розвинути теорію електрон- та екситон-фононної взаємодії у складних комбінованих наногетеросистемах.

-
- [1] М. В. Ткач, *Квазічастинки у наногетеросистемах. Квантові точки та дроти* (Руга, Чернівці, 2003). [3] В. П. Жаркой, М. В. Ткач, Укр. фіз. журн. **47**, 876 (2002).
- [2] М. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsehivska, M. Mykhalyova, R. Fartushynsky, Phys. Stat. Solidi **225**, 331 (2001). [4] W.-S. Li, C.-Y. Chen, Physica B. **229**, 876 (1997).
- [5] R. W. Siegel, Proc. E-MRS P. 24, (2004).

THEORY OF PHONON SPECTRUM IN CYLINDRICAL QUANTUM DOTS PLACED IN QUANTUM WIRES EMBEDDED INTO THREE-DIMENSIONAL MEDIUM

M. V. Tkach, V. P. Zharkoy, O. M. Makhanets
Fedkovich Chernivtsi National University,
 2, Kotsyubinskoho St., Chernivtsi, UA-58012, Ukraine
 e-mail: rector@chnu.cv.ua

The theory of energy spectra and polarization fields of confined and interface phonons is established for the combined nanosystem consisting of cylindrical quantum dots in cylindrical quantum wire embedded into the massive three-dimensional medium within the dielectric continuum method.