

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ПОЛЯРОНА У ПЛОСКИХ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМАХ ІЗ КВАНТОВОЮ ЯМОЮ СКІНЧЕНОЇ ТА НЕСКІНЧЕНОЇ ГЛИБИНИ

В. І. Бойчук, В. А. Борусевич

*Дрогобицький державний педагогічний університет ім. Івана Франка
вул. Івана Франка, 24, Дрогобич, 82100, Україна*

(Отримано 5 жовтня 2005 р.; в остаточному вигляді — 5 травня 2006 р.)

Досліджено енергетичний спектр полярону квазидвовимірних гетеросистем із різною величиною параметра електрон-фононої взаємодії ($0 < \alpha < 3$) залежно від хвильового вектора. Використовуючи метод теорії збурень та варіаційний метод Лі–Лоу–Пайнса, зроблено порівняльний аналіз енергетичного спектра полярону в гетероструктурах із плоскою квантовою ямою скінченної та нескінченної глибини. Конкретні обчислення проведені для гетероструктур: AlAs/GaAs/AlAs, скло/CdSe/скло і скло/CuCl/скло, для яких реалізується слабкий і проміжний електрон-фононний зв'язок: $\alpha = 0.071$, $\alpha = 0.0461$ і $\alpha = 2.091$ відповідно. Визначено також середню кількість віртуальних фононів, що охоплюють електрон. Обчислено енергію зв'язку полярону та його ефективну масу як функцію хвильового вектора. Виконано порівняльний аналіз структур із різним електрон-фононним зв'язком.

Ключові слова: полярон, квантова яма.

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

I. ВСТУП

На сьогодні фізика напівпровідникових гетероструктур розвивається особливо інтенсивно. Це пов'язано як із цікавими фізичними властивостями таких систем, так і з перспективою їх використання в сучасній оптоелектроніці.

Надтонкі плівки напівпровідників, що межують із двома середовищами, відрізняються від відповідних монокристалів своїми фізичними властивостями, зміною енергетичних спектрів заряджених частинок (електронів, дірок) та спектрів коливань атомів.

Електрон-фононна взаємодія є предметом вивчення багатьох теоретичних праць [1–3]. Великою мірою це стосується також і фізики наногетеросистем [4–13].

У теоретичних дослідженнях найбільш поширеними є два методи: метод теорії збурень [2,3] та метод Лі–Лоу–Пайнса (ЛЛП), який ґрунтується на певних унітарних перетвореннях. Причому теорія збурень дає правильне значення енергії зв'язку поляронного стану та ефективної маси при малих значеннях константи електрон-фононої взаємодії ($\alpha \ll 1$), тоді як метод ЛЛП можна використати для $\alpha \leq 6$ [3]. Що стосується значення закону дисперсії полярону для $k > 0$, то згадані методи можна використовувати з певними застереженнями [2]. Особливо, коли розглядати значення k , при яких енергія електрона близька до енергії фонона ($k = k_f = (\frac{2m\omega}{\hbar})^{1/2}$). Більш універсальним у цьому плані є метод функцій Гріна [6, 14, 15], який дає змогу, при врахуванні основних діаграм, отримати енергію полярону з великою точністю в усій ділянці спектра. Проте часто ця проблема є до-

сить непростю математичною задачею [2].

При дослідженні наногетеросистем, для яких трансляційна симетрія не виконується у трьох, двох або в одному напрямі, теорія поляронних станів ще більше ускладнюється. Це пов'язано зі зміною в гетеросистемах фононного та електронного енергетичних спектрів [4] та функції електрон-фононої взаємодії [8]. Отже, і далі недостатньо дослідженими є проблеми, що стосуються залежності закону дисперсії поляронів від основних параметрів системи. Важливо також вивчити, який вплив на отримані результати має вибір методу розв'язку поляронної задачі.

Ця стаття присвячена встановленню залежності енергії полярону від хвильового вектора для квазидвовимірних гетеросистем із різною величиною параметра електрон-фононої взаємодії ($0 < \alpha < 3$) із скінченною та нескінченною глибокою квантовою ямою. З цією метою використовується теорія збурень та варіаційний метод Лі–Лоу–Пайнса. Для гетеросистем типу GaAs/AlAs, CdSe/скло, CuCl/скло обчислено також енергію зв'язку полярону, його ефективну масу як функцію хвильового вектора.

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ. ЗАГАЛЬНІ ФОРМУЛИ

Гетероструктура з двома плоскими межами поділу, в якій ЛО-фонони взаємодіють з електроном провідності, описується гамільтоніаном:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\hat{p}_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + V(z) + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega \left(b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (1)$$

де $\hat{\mathbf{p}}_{\parallel}$ і $\hat{\mathbf{p}}_{\perp}$ — оператори імпульсу електрона в площині xy та в напрямку осі z декартової системи координат, m_{\parallel} , m_{\perp} — відповідні ефективні маси електрона, а $V(z)$ — потенціальна енергія електрона в наногетероструктурі. У випадку скінченно глибокої квантової ями (СКЯ) $V(z)$ має вигляд:

$$V(z) = \begin{cases} 0, & 0 < z < L \\ V_0, & z \leq 0, z \geq L \end{cases}, \quad (2)$$

а для нескінченно глибокої квантової ями (НКЯ):

$$V(z) = \begin{cases} 0, & 0 < z < L \\ \infty, & z \leq 0, z \geq L \end{cases}. \quad (3)$$

Оператор електрон-фононної взаємодії в зображенні чисел заповнення за фононними змінними є таким:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{q}} \{V_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + V_{\mathbf{q}}^* b_{\mathbf{q}}^+\}, \quad (4)$$

де $b_{\mathbf{q}}$ — оператор знищення фонона з енергією $\hbar\omega$ і хвильовим вектором \mathbf{q} . Функцію електрон-фононної взаємодії $V_{\mathbf{q}}$ для гетеросистеми запишемо так:

$$V_{\mathbf{q}} = -\frac{\hbar\omega i}{q} \left(\frac{\hbar}{2m_e\omega} \right)^{1/4} \left(\frac{4\pi\alpha}{SL} \right)^{1/2} e^{i\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}} \sin\left(\frac{\pi}{L}nz\right), \quad (5)$$

де

$$m_e = \sqrt{m_{\parallel}m_{\perp}}, \quad (6)$$

$$\alpha = \frac{e^2}{2\hbar c} \left(\frac{2m_e c^2}{\hbar\omega} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon} \right)$$

— константа електрон-фононної взаємодії [1], S — площа поверхні межі поділу середовищ.

Вибраний гамільтоніан електрон-фононної підсистеми не враховує наявності інтерфейсних поляризаційних фононів. Фізично це означає, що повинні розглядатись такі гетероструктури, у яких впливом зовнішніх середовищ на енергію полярону у квантовій ямі можна знехтувати. Таке наближення справедливе лише для такої квантової ями, коли вона більша за поляронний радіус.

Цікаво порівняти одержані дані для гетеросистем із відповідними розрахунками для 3D- і 2D-систем, оскільки ця гетеросистема є проміжною системою між

тривимірним масивним кристалом (3D) та двовимірною (2D) системою. Функція $V_{\mathbf{q}}$ для 3D-системи добре відома:

$$V_{\mathbf{q}} = -\frac{\sqrt{4\pi\alpha}(\hbar\omega i)}{\sqrt{LS} \cdot q^2} \left(\frac{\hbar}{2m_e\omega} \right)^{1/4} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (7)$$

а для 2D-системи вона є такою:

$$V_{\mathbf{q}} = -\frac{\sqrt{2\pi\alpha}(\hbar\omega i)}{\sqrt{S} \cdot q_{\parallel}} \left(\frac{\hbar}{2m_e\omega} \right)^{1/4} e^{i\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}}. \quad (8)$$

При визначенні енергії полярону в цій праці використано метод теорії збурень і метод Лі-Лоу-Пайнса. Застосовуючи метод ЛЛП, враховано те, що розглядана система містить швидку й повільну підсистеми. Як швидка підсистема виступає рух електрона в перпендикулярному до меж поділу напрямі. Тому використано адіабатичне наближення — заданий гамільтоніан (1) усереднено на хвильових функціях основного стаціонарного стану для руху вздовж осі OZ :

$$\hat{H}_{\text{eФ}} = \langle \psi_1(z) | \hat{H} | \psi_1(z) \rangle, \quad (9)$$

де функція $\psi_n(z)$ є розв'язком рівняння Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_{\perp}} \frac{d}{dz} + V(z) \right] \psi_n(z) = E_n \psi_n(z), \quad (10)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Отже, якщо квантова яма має вигляд (2), то хвильову функцію частинки в потенціальній ямі зі скінченним потенціалом запишемо формулою:

$$\psi_1(z) = \begin{cases} Ae^{\kappa z}, & z < 0 \\ \alpha \sin(\chi z) + \beta \cos(\chi z), & 0 \leq z \leq L \\ Be^{-\kappa z}, & z > L \end{cases}, \quad (11)$$

$$\text{де } \kappa = \sqrt{\frac{2m_{\perp}}{\hbar^2} (|E - U_0|)}, \quad \chi = \sqrt{\frac{2m_{\perp}}{\hbar^2} (E)}.$$

Використовуючи умови зшивання, одержимо систему з чотирьох однорідних рівнянь. З умови існування розв'язку системи однорідних рівнянь отримано дисперсійне рівняння.

Отже,

$$\hat{H} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \hat{H} \psi_1 dz = E_1 + \frac{\hat{p}_{\parallel}^2}{2m} + \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \hbar\omega + \sum_{\mathbf{q}} (V_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}} M_{11} + V_{\mathbf{q}}^* b_{\mathbf{q}}^+ e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}} M_{11}^*), \quad (12)$$

де

$$M_{11} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_1 e^{iq_z z} dz.$$

Для нескінченного потенціалу вираз для M_1 має досить простий вигляд:

$$M_{11} = \frac{2}{L} \int_0^L e^{iq_z z} \sin^2\left(\frac{\pi}{L} z\right) dz.$$

Можна довести, що оператор квазіімпульсу

$$\mathbf{p}_{||} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}$$

комутує з гамільтоніаном задачі. Це враховано при унітарних перетвореннях гамільтоніана.

До гамільтоніана (9) використано послідовно два унітарні перетворення за допомогою операторів:

$$\hat{S} = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{P} - \sum_{\mathbf{q}_{||}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \hbar \mathbf{q}_{||} \right) \mathbf{r}_{||} \right],$$

$$\hat{U} = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^+ f(\mathbf{q}) - b_{\mathbf{q}} f^*(\mathbf{q})) \right\},$$

де $\mathbf{P} = \hbar \mathbf{k}$ — імпульс полярону.

Маючи відомі співвідношення для унітарних перетворень операторів $b_{\mathbf{q}}$ і $b_{\mathbf{q}}^+$ [17], можна отримати вираз для гамільтоніана електрон-фононної системи у вигляді:

$$\begin{aligned} \hat{H}'' = S^+ U^+ \hat{H}' U S = E_1 + & \frac{\left(\hbar \mathbf{k} - \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \hbar \mathbf{q} \right)^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \left[-2\mathbf{k} \sum_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}'}^+ f(\mathbf{q}') \mathbf{q}' - 2\mathbf{k} \sum_{\mathbf{q}'} f^*(\mathbf{q}') b_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' - 2\mathbf{k} \sum_{\mathbf{q}'} |f(\mathbf{q}')|^2 \mathbf{q}' \right] \\ & + \frac{\hbar^2}{2m} \left[2 \sum_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}'}^+ b_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' \sum_{\mathbf{q}''} b_{\mathbf{q}''}^+ f(\mathbf{q}'') \mathbf{q}'' - \sum_{\mathbf{q}'} f(\mathbf{q}') q'^2 b_{\mathbf{q}'}^+ + 2 \sum_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}'}^+ b_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' \sum_{\mathbf{q}''} f^*(\mathbf{q}'') b_{\mathbf{q}''} \mathbf{q}'' + \sum_{\mathbf{q}'} f^*(\mathbf{q}') q'^2 b_{\mathbf{q}'} \right] \\ & + 2 \sum_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}'}^+ b_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' \sum_{\mathbf{q}''} |f(\mathbf{q}'')|^2 \mathbf{q}'' + 2 \sum_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}'}^+ f(\mathbf{q}') \mathbf{q}' \sum_{\mathbf{q}''} |f(\mathbf{q}'')|^2 \mathbf{q}'' \\ & + 2 \sum_{\mathbf{q}'} f^*(\mathbf{q}') b_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' \sum_{\mathbf{q}''} |f(\mathbf{q}'')|^2 \mathbf{q}'' + \sum_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}'}^+ f(\mathbf{q}') \mathbf{q}' \sum_{\mathbf{q}''} b_{\mathbf{q}''}^+ f(\mathbf{q}'') \mathbf{q}'' + \sum_{\mathbf{q}'} f^*(\mathbf{q}') b_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' \sum_{\mathbf{q}''} f^*(\mathbf{q}'') b_{\mathbf{q}''} \mathbf{q}'' \\ & + 2 \sum_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}'}^+ f(\mathbf{q}') \mathbf{q}' \sum_{\mathbf{q}''} f^*(\mathbf{q}'') b_{\mathbf{q}''} \mathbf{q}'' + \sum_{\mathbf{q}'} q'^2 |f(\mathbf{q}')|^2 + \left(\sum_{\mathbf{q}'} |f(\mathbf{q}')|^2 \mathbf{q}' \right)^2 \Big] \\ & + \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \hbar \omega + \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ f(\mathbf{q}) \hbar \omega + \sum_{\mathbf{q}} f^*(\mathbf{q}) b_{\mathbf{q}} \hbar \omega + \sum_{\mathbf{q}} |f(\mathbf{q})|^2 \hbar \omega \\ & + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} M_{11} + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} f(\mathbf{q}) M_{11} - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ M_{11}^* - \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} f^*(\mathbf{q}) M_{11}^*. \end{aligned}$$

Після усереднення за вакуумним фононним станом $|0\rangle$ одержано функціонал :

$$\begin{aligned} \varepsilon(f) = \langle 0 | S^{-1} U^{-1} H U S | 0 \rangle = E_1 + \frac{P^2}{2m_e} + \sum_{\mathbf{q}} \{ V_{\mathbf{q}} M_{11} f(\mathbf{q}) + V_{\mathbf{q}}^* M_{11}^* f(\mathbf{q}) \} + \frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \sum_{\mathbf{q}} |f(\mathbf{q})|^2 \mathbf{q} \right\}^2 \\ + \sum_{\mathbf{q}} |f(\mathbf{q})|^2 \left\{ \hbar \omega - \frac{\mathbf{q} \mathbf{P}}{m_e} \hbar + \frac{q^2}{2m_e} \hbar^2 \right\}. \end{aligned}$$

Мінімізуючи $\varepsilon(f)$ по $f(\mathbf{q})$ і $f^*(\mathbf{q})$, знайдемо енергію полярону гетеросистеми. Відлік енергії полярону зручно вести від рівня розмірного квантування E_1 :

$$E_{\text{pol}}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} (1 + \eta^2) + \sum_{\mathbf{q}} \frac{-2 \cdot |V_{\mathbf{q}}|^2 |M_{11}|^2}{\hbar\omega - \frac{\hbar\mathbf{q}\mathbf{P}}{m_e} (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e}} + \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2 |M_{11}|^2 \cdot \left\{ \hbar\omega - \frac{\hbar\mathbf{q}\mathbf{P}}{m_e} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e} \right\}}{\left\{ \hbar\omega - \frac{\hbar\mathbf{q}\mathbf{P}}{m_e} (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e} \right\}^2}, \quad (13)$$

$$\text{де } \eta\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{q}} |f_{\min}(\mathbf{q})|^2 \hbar\mathbf{q}_{\parallel},$$

$$f_{\min}(\mathbf{q}) = -\frac{V_{\mathbf{q}}^* M_{11}^*}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_e} - \frac{\hbar^2}{m_e} \mathbf{k}\mathbf{q}_{\parallel} (1 - \eta)}.$$

Вираз (12) відрізняється від відповідних формул для 3D- та 2D-систем наявністю функції $M_{11}(\mathbf{q}_z)$, яка виникла внаслідок використання адіабатичного наближення й усереднення за швидкою підсистемою в напрямку z .

Для слабкого електрон-фононного зв'язку енергію полярону можна визначити за допомогою теорії збурень:

$$E_{\text{pol}}(\mathbf{k}) = E_1 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \sum_{n,\mathbf{q}} \frac{|\Phi_{1,n}(\mathbf{q})|^2}{E_1 - E_n - \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{q})^2}{2m}}, \quad (14)$$

$$\text{де } E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad \Phi_{1,n}(\mathbf{q}) = M_{1,n}(\mathbf{q}) \cdot V_{\mathbf{q}}.$$

Функція $M_{1,n}(\mathbf{q})$ для нескінченно глибокої потенціальної ями (3) має вигляд:

$$M_{1,n}(q_z) = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{\pi}{L} z\right) \sin\left(\frac{\pi}{L} n z\right) e^{iq_z z} dz,$$

а коли $V(z)$ задається формулою (2):

$$\begin{aligned} M_{1,n}(q_z) &= \int_{-\infty}^0 \frac{A'_1 A'_n}{L} e^{\kappa_1 z} e^{\kappa_n z} e^{iq_z z} dz \\ &+ \int_0^L \frac{1}{L} \left(\alpha'_1 \sin(\chi_1 z) + \beta'_1 \cos(\chi_1 z) \right) \\ &\times \left(\alpha'_n \sin(\chi_n z) + \beta'_n \cos(\chi_n z) \right) e^{iq_z z} dz \\ &+ \int_L^{\infty} \frac{B'_1 B'_n}{L} e^{-\kappa_1 z + \kappa_1 L} e^{-\kappa_n z + \kappa_n L} e^{iq_z z} dz \end{aligned}$$

де коефіцієнт κ_n задається формулою (11) і відповідає n -ому рівню енергії. Вибираючи відлік енергії, як у формулі (13), одержимо:

$$E_{\text{pol}}^{(\mathbf{k})} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}, n} \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2 |M_{1n}|^2}{E_1 - E_n - \hbar\omega - \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{k}}{m_e}}. \quad (15)$$

На відміну від методу ЛЛП, при отриманні формули (15) не використовували адіабатичного наближення. Якщо ж його застосувати, то формула для $E_{\text{pol}}(k)$ спрощується:

$$E_{\text{pol}}^{(\mathbf{k})} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2 |M_{11}|^2}{-\hbar\omega - \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{k}}{m_e}} \quad (15a)$$

Вирази (13) і (15) задають залежність енергії полярону від хвильового вектора – закон дисперсії полярону.

III. ЧИСЛОВІ РОЗРАХУНКИ. АНАЛІЗ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

У більшості праць [1, 2, 7] розглянуто ділянки малих значень хвильових векторів ($k \approx 0$). Тому величини $\eta(k)$ і $E_{\text{pol}}(k)$ одержують при розкладі відповідних виразів у ряди, обмежуючись першими членами розкладу. У цій праці розглянуто ділянку хвильових векторів, коли не виникає народження реального фону електронном:

$$0 \leq k < k_f, \quad k_f = \sqrt{\frac{2m_e \omega}{\hbar}}.$$

Це значення хвильового вектора суттєво менше за його граничне значення в зоні Брілюена: $k_f \ll k_0 = \frac{\pi}{a}$.

Конкретні обчислення проведено для гетероструктур: GaAs/AlAs, CdSe/скло і CuCl/скло із скінченною та нескінченною КЯ, для яких реалізовується слабкий і проміжний електрон-фононний зв'язок: $\alpha = 0.071$, $\alpha = 0.0461$ і $\alpha = 2.091$ відповідно.

Для визначення закону дисперсії полярону $E_{\text{pol}} = E_{\text{pol}}(k)$ у відповідних формулах (13) та (15) необхідно перейти від суми до інтегрування і конкретні обчислення провести з допомогою ЕОМ. На рис. 1 подано результати залежності $E_p = E_p(k)$ для кристала CdSe. Як видно з наведеного графіка, в ділянці малих значень хвильового вектора як для масивного кристала, так і для квазідвовимірної системи (гетеросистеми) чи двовимірного кристала закон дисперсії має параболічний характер. Збільшення хвильового вектора веде до зміни залежності $E_p = E_p(k)$. Кожна дисперсійна крива характеризується точкою перегину (k_p), а також точкою максимуму (k_m). Зменшення

мірності системи веде до зменшення числових значень k_p та k_m . Указана деформація енергетичного спектра пояснюється тим, що зі зростанням k збільшується ефективна електрон-фононна взаємодія. Цей висновок підтверджується, якщо звертатись до властивостей інших параметрів електрон-фононної системи. Зокрема, середньої кількості віртуальних фононів від хвильового вектора, що представлено нижче.

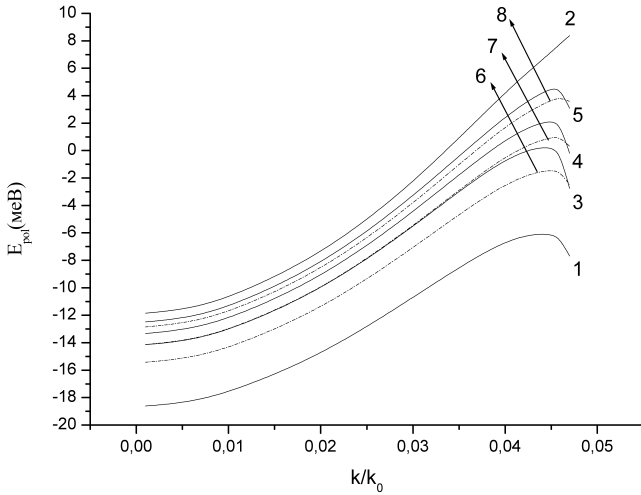


Рис. 1. Закон дисперсії згідно з ТЗ для кристала CdSe та гетероструктури CdSe/скло; 1, 2 — енергія 2D-, 3D-системи кристала CdSe, 3, 4, 5 — гетеросистема CdSe/скло зі скінченною глибокою КЯ шириною 25 Å, 50 Å, 100 Å відповідно, 6, 7, 8 — гетеросистема CdSe/скло з нескінченно глибокою КЯ шириною 25 Å, 50 Å, 100 Å відповідно.

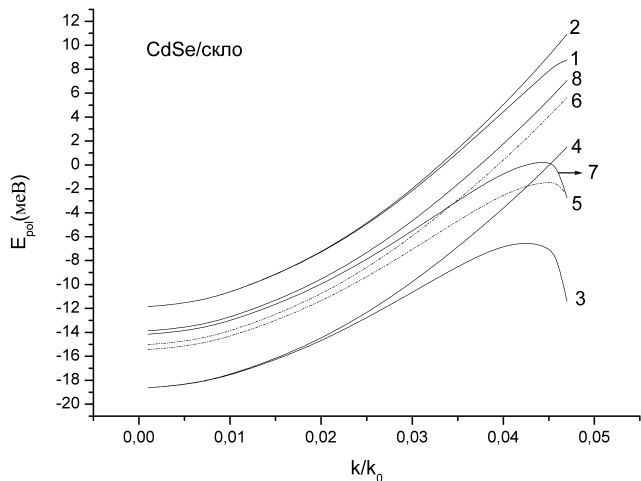


Рис. 2. Енергія полярону для кристала CdSe та гетероструктури CdSe/скло. 1, 2 — енергія 3D-системи кристала CdSe, обчислена ТЗ і ЛЛП відповідно; 3, 4 — енергія 2D-системи кристала CdSe, обчислена ТЗ і ЛЛП відповідно; 5, 6 — гетеросистема CdSe/скло з нескінченно глибокою КЯ шириною 25 Å, обчислена ТЗ і ЛЛП відповідно; 7, 8 — гетеросистема CdSe/скло зі скінченною глибокою КЯ шириною 25 Å, обчислена ТЗ і ЛЛП відповідно.

Аналогічні обчислення $E_p = E_p(k)$ проведено методом ЛЛП. На рис. 2 подано результати підрахунку енергії полярону для 2D- та 3D-систем кристала CdSe і гетеросистеми CdSe / скло з НКЯ та СКЯ шириною $L = 25 \text{ \AA}$, обчисленою ТЗ та ЛЛП. Для малих хвильових векторів ($k \approx 0$) одержано практично таку ж залежність, як і методом ТЗ. Збільшення хвильового вектора супроводжується зростанням відхилень між вихідним параболічним та отриманим законами дисперсії. Якщо порівняти результати, одержані різними методами обчислень, то видно, що в розгляданій ділянці ($k \leq k_f$) при фіксованому k зменшення вимірності кристалічної системи веде до збільшення різниці між значеннями енергії полярону, отриманими методами ТЗ і ЛЛП. Цей результат можна зрозуміти, якщо врахувати, що зменшення мірності системи спричиняє збільшення електрон-фононної взаємодії. Щоб підтвердити зроблений висновок аналогічні обчислення зроблено для кристала з більшою константою електрон-фононної взаємодії.

Обчислення для кристала CuCl та гетеросистеми CuCl /скло, який характеризується більшим значенням α , показує, що якісно закони дисперсії аналогічні до кристала CdSe. Проте різниця між результатами обох методів обчислень для гетеросистем на основі CuCl більша, ніж на основі CdSe.

При визначенні енергії полярону використано допоміжну функцію η , яка залежить від хвильового вектора \mathbf{k} . Знаючи функцію $\eta = \eta(k)$, можна встановити середню кількість віртуальних фононів, що охоплюють електрон:

$$n = n(k) = \langle \psi^* | \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} | \psi \rangle = \sum_{\mathbf{q}} |f_{\min}(\mathbf{q})|^2. \quad (16)$$

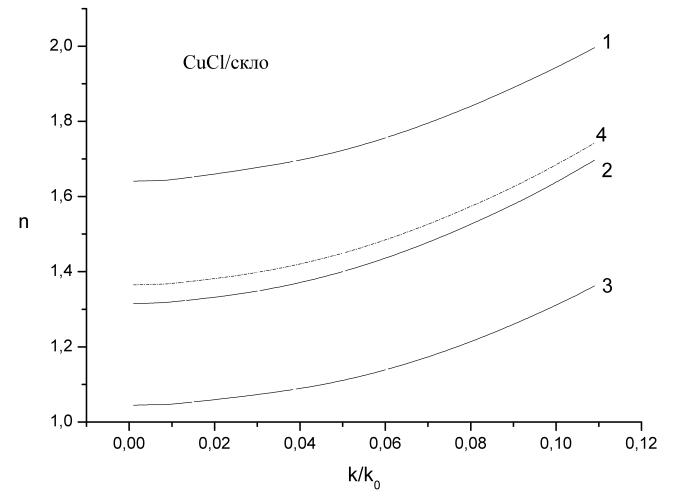


Рис. 3. Середня кількість віртуальних фононів; 1 — 2D-структура, 3 — 3D-структура, 4, 2 — гетероструктура CuCl/скло з $L = 25 \text{ \AA}$ з НКЯ та СКЯ відповідно.

На рис. 3 подано залежності $n = n(k)$ для масивного, двовимірного кристалів CuCl та гетероструктури CuCl/скло з НКЯ та СКЯ товщиною проміжного шару $L = 25 \text{ \AA}$.

Видно, що зі збільшенням k функція $n = n(k)$ монотонно зростає, що повністю узгоджується з наведеним вище висновком про зростання ефективної електрон-фононної взаємодії при збільшенні k . Причому в ділянці малих k маємо параболічну залежність. Збільшення k супроводжується відхиленням функції $n = n(k)$ від параболи. Середня кількість віртуальних фононів у СКЯ є меншою, ніж у НКЯ. Цей результат, як і закони дисперсії на рис. 1 і рис. 2, пояснюється тим, що у випадку НКЯ ефективна електрон-фононна взаємодія є більшою, ніж у СКЯ.

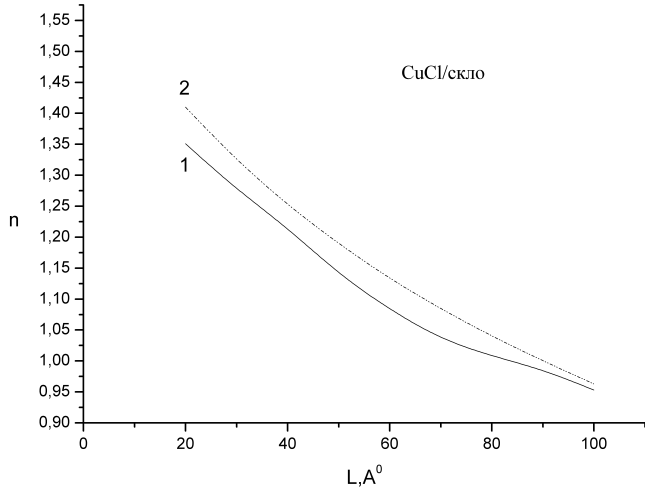


Рис. 4. Середня кількість віртуальних фононів; 1, 2 — гетероструктура CuCl/скло з СКЯ та НКЯ відповідно.

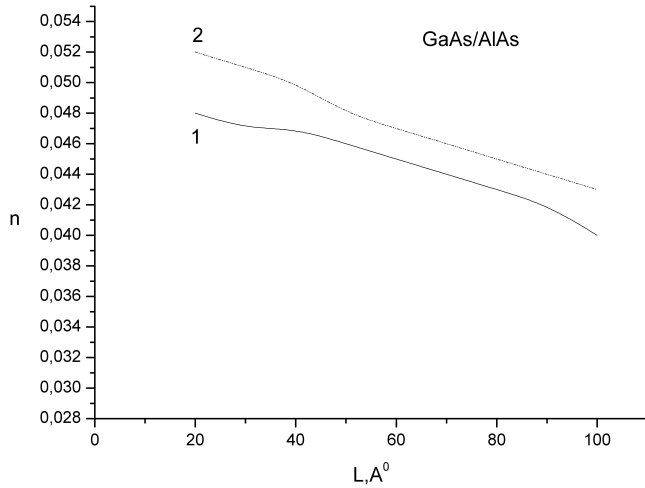


Рис. 5. Середня кількість віртуальних фононів; 1, 2 — гетероструктура GaAs/AlAs з СКЯ та НКЯ відповідно.

На рис. 4 та 5 зображено залежність середньої кількості віртуальних фононів від ширини КЯ (L) в гетероструктурах CuCl/скло і GaAs/AlAs з НКЯ та СКЯ. Видно, що зі збільшенням L середня кількість віртуальних фононів (n) зменшується. Також у гетероструктурі зі сильнішою електрон-фононною взаємодією (CuCl/скло з $\alpha = 2.091$) різниця між значеннями n при малих значеннях L є меншою, ніж у гетероструктурі зі слабшою електрон-фононною взаємодією

(GaAs/AlAs з $\alpha = 0.071$).

Маючи залежність $E_{\text{pol}} = E_{\text{pol}}(k)$, яка одержана методами ТЗ та ЛЛП, можна визначити параметр, що називають ефективною масою полярону:

$$m_p^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}.$$

На рис. 6 подано залежності $m_p = m_p(k)$ для гетеросистеми GaAs/AlAs. У ділянці малих k обидва методи дають однакові значення. Зростання k веде до збільшення різниці між функціями $m_p = m_p(k)$, одержаними різними методами. Зокрема, $m_p = m_p(k)$ згідно з ТЗ (рис. 6, а) при $k \rightarrow k_p$ прямує до нескінченності, що зрозуміло, бо k_p є точкою перегину на відповідних графіках $E_{\text{pol}} = E_{\text{pol}}(k)$ (рис. 2). Функція $m_p = m_p(k)$, що одержана методом ЛЛП (рис. 6, б), є плавнішою і в ділянці $k \approx k_p$ досягає максимального значення. Ефективна маса полярону в гетеросистемі з НКЯ є більшою, ніж у гетеросистемі з СКЯ.

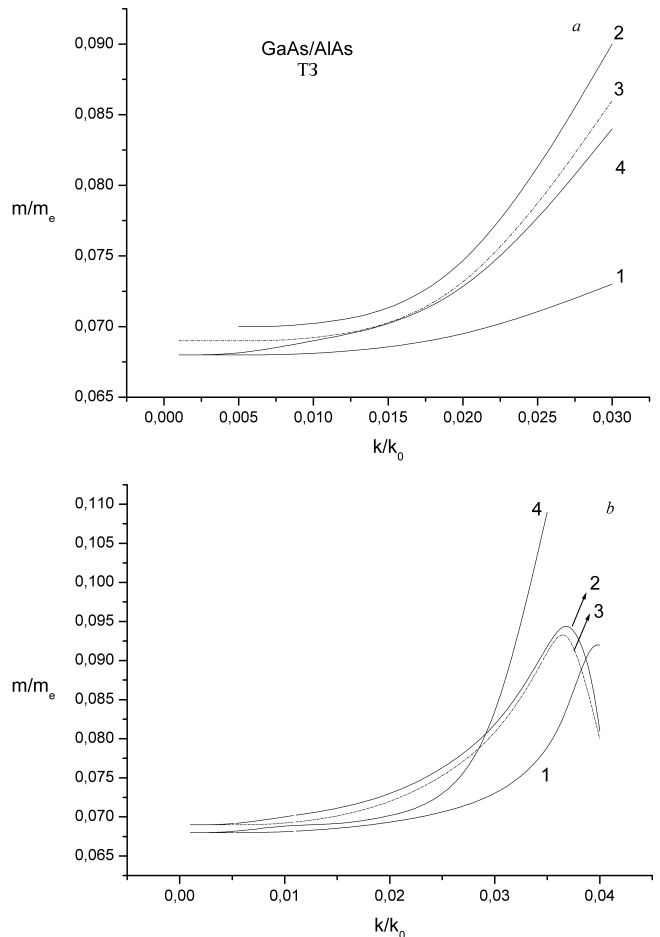


Рис. 6. Залежність $m_p = m_p(k)$ згідно з ТЗ (криві а) та ЛЛП (криві б): 1 — 3D-кристал GaAs; 2 — 2D-кристал GaAs; 3, 4 — гетеросистема GaAs/AlAs з $L = 25 \text{ \AA}$ з НКЯ та СКЯ відповідно.

Отже, у праці досліджено енергетичний спектр полярону квазидвовимірних гетеросистем з різною вели-

чиною параметра електрон-фононої взаємодії ($0 < \alpha < 3$) залежно від хвильового вектора. Використовуючи метод теорії збурень та варіаційний метод Лі–Лоу–Пайнса, обчислено енергетичний спектр полярону та середню кількість віртуальних фононів для різних ширин КЯ. З проведених обчислень видно, що

врахування електрон-фононої взаємодії веде до деформації енергетичного спектра частинки. Збільшення хвильового вектора k , зменшення мірності системи та збільшення локалізації частинки в ямі спричиняє ефективне зростання електрон-фононої взаємодії.

-
- [1] T. D. Lee, F. E. Low, D. Pines, *Phys. Rev.* **90**, 297 (1953).
 [2] G. Whitfield, R. Puff, *Phys. Rev.* **139**, 338 (1965).
 [3] Ю. А. Фирсов, *Полярони* (Наука, Москва, 1975).
 [4] И. Б. Левинсон, Э. И. Рашба, *Усп. физ. наук* **111**, 683 (1973).
 [5] В. І. Бойчук, Р. І. Пазюк, *Укр. фіз. журн.* **39**, 212 (1994).
 [6] Н. В. Ткач, Р. Б. Фартушинский, *Физ. тверд. тела* **45**, 1284 (2003).
 [7] A. Thilagam, J. Singh, *Phys. Rev. B* **49**, 13583 (1994).
 [8] M. C. Klein, F. Nache, D. Ricard, C. Flytzanis, *Phys. Rev. B* **42**, 11123 (1990).
 [9] El. B. Amrani, M. Fliyou, M. Barnoussi, M. Bouayad, *Phys. Status Solidi B* **219**, 39 (2000).
 [10] И. П. Ипатова, А. Ю. Маслов, О. В. Прошина, *Физ. техн. полупр.* **33**, 832 (1999).
 [11] H. Marcos Degani, *Phys. Rev. B* **40**, 11937 (1989).
 [12] R. Zheng, M. Matsuura, *Phys. Rev. B* **57**, 1749 (1998).
 [13] V. Frongillo, Y. Lepine, *Phys. Rev. B* **40**, 3570 (1989).
 [14] И. Б. Левинсон, Э. И. Рашба, *Усп. физ. наук* **111**, 683 (1973).
 [15] В. І. Бойчук, И. В. Бильнский, *Физ. тверд. тела* **37**, 734 (1995).
 [16] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (Наука, Москва, 1971).
 [17] Х. Хакен, *Квантово-полевая теория твердого тела* (Наука, Москва, 1980).

POLARON ENERGY SPECTRUM IN QUASI-TWO-DIMENSIONAL NANOHETEROSYSTEMS WITH A QUANTUM WELL OF FINITE AND INFINITE DEPTH

V. I. Boichuk, V. A. Borusevych
Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,
24 Ivan Franko St., Drohobych, UA-82100, Ukraine,
e-mail: bva@mail.lviv.ua

The wave vector dependence of the polaron energy spectrum is considered in quasi-two-dimensional heterosystems of various values ($0 < \alpha < 3$) of electron-phonon interaction parameter. The comparative analyses of the polaron energy spectrum of heterostructures of finite and infinite energy band disruption on the boundary of media is made by using the perturbation approach and variation Lee–Low–Pines method. Actual calculations are conducted for the following heterostructures: GaAs/AlAs, CdSe/glass and CuCl/glass, where the weak and transition electron-phonon coupling is realized: $\alpha = 0.071$, $\alpha = 0.0461$ and $\alpha = 2.091$, respectively. The average number of virtual phonons surrounding the electron is also determined. The polaron coupling energy and its effective mass as a function of the wave vector is calculated. The structures of a varying electron-phonon coupling are compared.