

УДК 538.956//958+538.971/975

©1994

СПЕКТР ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ФОНОНОВ В ТРЕХСЛОЙНОЙ СФЕРИЧЕСКОЙ ГЕТЕРОСИСТЕМЕ

Н.В.Ткач

В модели диэлектрического континуума выполнен расчет фононного спектра тройной гетерогенной системы сферической формы. Показано, что в спектре, кроме продольных и поперечных оптических фононов, присутствуют в общем случае ветви интерфейсных фононов, энергии которых зависят от числа $l = 1, 2, \dots, \infty$.

При исследовании спектра фононов и других квазичастиц в гетеросистемах главное внимание уделялось объектам с плоскими границами раздела контактирующих сред. Например, фононный спектр и электрон(экситон)-фононное взаимодействие в таких гетеросистемах исследовались в работах [1-4] в модели диэлектрического континуума. Однако, кроме упомянутых, уже сейчас исследуются теоретически и экспериментально и даже находят технологическое применение гетеросистемы с неплоскими границами раздела — цилиндрические (микротранзисторы, тонковолокновная система), сферические (баблоны, диспергированные микрокристаллы в диэлектрическую среду) [5-7].

Понимание физических процессов в гетеросистемах с неплоскими границами требует построения теории спектров различных квазичастиц и их взаимодействия. Составной частью такой общей задачи является разработка теории фононного спектра, которой пока не существует.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы на основе модели диэлектрического континуума рассчитать спектр поляризационных фононов трехслойной системы сферической формы. Будет показано, что в общем случае этот спектр состоит из бездисперсионных объемных продольных и поперечных фононов, а также четырех ветвей интерфейсных фононов, энергии которых зависят от квантового числа $l = 1, 2, \dots, \infty$, отношения толщины сферической пленки к радиусу внутренней сферы Δ/R и соотношения диэлектрических проницаемостей контактирующих сред. В пределе бесконечного радиуса найденный спектр совпадает с ранее известным [1] для гетеросистемы с плоскими границами раздела сред.

1. Полная система уравнений для фоновых мод сферической гетеросистемы в модели диэлектрического континуума

Рассматривается гетерогенная система сферической формы, состоящая из трех контактирующих сред с известными величинами диэлектрических проницаемостей ε_ν^∞ , ε_ν^0 и энергиями продольных $\omega_{\nu L}$ и поперечных $\omega_{\nu T}$ оптических фононов ($\nu = 1, 2, 3$). Все три сферы рассматриваются как поляризующиеся диэлектрические континуумы. Радиус внутренней сферы R , толщина сферической пленки Δ .

Чтобы найти фоновый спектр исследуемой модели, пренебрегая эффектами запаздывания электромагнитных волн, необходимо решить систему макроскопических уравнений

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_\nu(\mathbf{r}) &= \chi_\nu(\omega) \mathbf{E}_\nu(\mathbf{r}), \\ \mathbf{E}_\nu(\mathbf{r}) &= -\text{grad } \varphi_\nu(\mathbf{r}), \\ \Delta \varphi_\nu(\mathbf{r}) &= -4\pi \rho_\nu(\mathbf{r}), \\ \rho_\nu(\mathbf{r}) &= -\text{div } \mathbf{P}_\nu(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1)$$

с граничными условиями, которые в сферической системе координат ($\mathbf{r} = r\mathbf{n}_r$) имеют вид

$$\mathbf{E}_{1r}(r = R) = \mathbf{E}_{2r}(r = R), \quad \mathbf{E}_{2r}(r = R + \Delta) = \mathbf{E}_{3r}(r = R + \Delta),$$

$$\mathbf{D}_{1\tau}(r = R) = \mathbf{D}_{2\tau}(r = R), \quad \mathbf{D}_{2\tau}(r = R + \Delta) = \mathbf{D}_{3\tau}(r = R + \Delta). \quad (2)$$

Здесь

$$\chi_\nu(\omega) = \frac{\varepsilon_\nu(\omega) - 1}{4\pi} \quad (\nu = 1, 2, 3) \quad (3)$$

— восприимчивость сферы ν с диэлектрической проницаемостью

$$\varepsilon_\nu(\omega) = \varepsilon_\nu^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{\nu L}^2}{\omega^2 - \omega_{\nu T}^2}, \quad (4)$$

индексы r и τ обозначают радиальные и тангенциальные составляющие соответствующих векторов. Остальные обозначения общеприняты.

Преобразовав систему (1) и условия (2) так, чтобы они были записаны только относительно вектора поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, получим

$$\text{rot} (\chi_\nu^{-1}(\omega) \mathbf{P}_\nu(\mathbf{r})) = 0,$$

$$\text{div} (\varepsilon_\nu(\omega) \chi_\nu^{-1}(\omega) \mathbf{P}_\nu(\mathbf{r})) = 0, \quad (5)$$

$$\chi_1^{-1}(\omega) \mathbf{P}_{1r}(r = R) = \chi_2^{-1}(\omega) \mathbf{P}_{2r}(r = R),$$

$$\chi_2^{-1}(\omega) \mathbf{P}_{2\tau}(r = R + \Delta) = \chi_3^{-1}(\omega) \mathbf{P}_{3\tau}(r = R + \Delta),$$

$$\varepsilon_1(\omega) \chi_1^{-1}(\omega) \mathbf{P}_{1r}(r = R) = \varepsilon_2(\omega) \chi_2^{-1}(\omega) \mathbf{P}_{2r}(r = R),$$

$$\varepsilon_2(\omega) \chi_2^{-1}(\omega) \mathbf{P}_{2\tau}(r = R + \Delta) = \varepsilon_3(\omega) \chi_3^{-1}(\omega) \mathbf{P}_{3\tau}(r = R + \Delta). \quad (6)$$

Уравнения (5) и граничные условия (6) дают возможность найти вектор поляризации и фоновый спектр исследуемой гетеросистемы.

2. Объемные фононы

Вектор поляризации, соответствующий продольным (10) оптическим фононам в среде ν , находится из уравнений (5) при условии, что во внешних средах $\beta \neq \nu$

$$\mathbf{D}_\beta(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_\beta(\mathbf{r}) = \mathbf{P}_\beta(\mathbf{r}) = 0,$$

а в собственной среде

$$\varepsilon_\nu(\omega) = \varepsilon_\nu^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{\nu L}^2}{\omega^2 - \omega_{\nu T}^2} = 0. \quad (7)$$

Из (7) следует, что энергия продольных оптических фононов в каждой части гетеросистемы такая же ($\omega_{\nu L}$), как и в соответствующих гомогенных средах.

Для определения $\mathbf{P}_\nu(\mathbf{r})$ из системы (5) остается только уравнение

$$\text{rot } \mathbf{P}_\nu(\mathbf{r}) = 0 \quad (8)$$

с граничными условиями

$$\mathbf{P}_{\nu\tau}(r = R) = 0, \quad \mathbf{P}_{\nu\tau}(r = R + \Delta) = 0. \quad (9)$$

Полагая

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \nabla \Psi(\mathbf{r}) \quad (10)$$

и разлагая $\Psi(\mathbf{r})$ по полной системе сферических функций

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{lm} f_{lm}(\mathbf{r}) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (11)$$

будем искать ортогональную систему векторов $\mathbf{P}_{lm}^s(\mathbf{r})$, через которую выражается вектор

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \sum_{slm} \mathbf{P}_{lm}^s(\mathbf{r}).$$

Условие ортогональности векторов поляризации

$$\int \mathbf{P}_{l'm'}^{s'*}(\mathbf{r}) \mathbf{P}_{lm}^s(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0 \quad (s \neq s', l \neq l', m \neq m'),$$

выраженное через функцию Ψ_{lm}^s в сферической системе координат, имеет вид

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^\infty r^2 dr \left(\frac{\partial \Psi_{l'm'}^{s'*}}{\partial r} \frac{\partial \Psi_{lm}^s}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial \Psi_{l'm'}^{s'*}}{\partial \vartheta} \frac{\partial \Psi_{lm}^s}{\partial \vartheta} + \right. \\ \left. + \frac{m^2}{r^2 \sin^2 \vartheta} \Psi_{l'm'}^{s'*} \Psi_{lm}^s \right) = 0 \quad (s \neq s', l \neq l', m \neq m'). \quad (12)$$

Интегрируя в первых двух слагаемых по частям, учитывая (11) и уравнение для сферических функций Y_{lm} , из (12) получим

$$\int_0^{\infty} f_{lm}^{s' *} r^2 dr \left[\frac{\partial^2 f_{lm}^s}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial f_{lm}^s}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} f_{lm}^s \right] = 0.$$

Отсюда следует, что искомые функции f_{lm}^s удовлетворяют уравнению

$$\frac{\partial^2 f_{lm}^s(kr)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial f_{lm}^s(kr)}{\partial r} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) f_{lm}^s(kr) = 0, \quad (13)$$

а значит, в общем случае они представляются линейной комбинацией функций Бесселя $j_l(kr)$ и $n_l(kr)$. Значение k и один из коэффициентов линейной комбинации определяются граничными условиями (9), поэтому

$$\Psi_{lm}^{s\alpha}(r, \vartheta, \varphi) = a_{lm}^{s\alpha} [n_l(k_{s\alpha} x_\alpha) j_l(k_{s\alpha} r) - j_l(k_{s\alpha} x_\alpha) n_l(k_{s\alpha} r)] Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (14)$$

Здесь индексу $\alpha = 1, 2, 3$ соответствует область изменения в пределах

$$x_{\alpha-1} \leq r \leq x_\alpha,$$

где

$$x_1 = R, \quad x_2 = R + \Delta, \quad x_3 = R + \Delta + \delta, \quad x_0 = 0, \quad \delta \rightarrow \infty.$$

Значения $k_{s\alpha}$ определяются уравнениями

$$\frac{n_l(k_{s\alpha} x_{\alpha-1})}{j_l(k_{s\alpha} x_{\alpha-1})} = \frac{n_l(k_{s\alpha} x_\alpha)}{j_l(k_{s\alpha} x_\alpha)}.$$

Коэффициенты $a_{lm}^{s\alpha}$ находятся из условия нормировки так, чтобы совпадали величины полной энергии системы, выраженные через поляризацию $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ и полный набор векторов поляризации. Тогда

$$a_{lm}^{s\alpha} = \frac{\omega_{\alpha L}}{k_{s\alpha} \sqrt{2\pi \tilde{\epsilon}_\alpha}} \left[|x_\alpha^3 F_{l+1}^2(k_{s\alpha} x_\alpha) - x_{\alpha-1}^3 F_{l-1}^2(k_{s\alpha} x_{\alpha-1})| \right]^{-1/2},$$

где

$$\tilde{\epsilon}_\alpha^{-1} = (\epsilon_\alpha^\infty)^{-1} - (\epsilon_\alpha^0)^{-1},$$

$$F_{l+1}(k_{s\alpha} x_\alpha) = n_l(k_{s\alpha} x_\alpha) j_{l+1}(k_{s\alpha} x_\alpha) - j_l(k_{s\alpha} x_\alpha) n_{l+1}(k_{s\alpha} x_\alpha).$$

Таким образом, решена задача о спектре и полном ортонормированном наборе векторов поляризации для исследуемой гетеросистемы.

Что касается ТО-фононов, то они находятся из уравнений (5) при условиях

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

Отсюда следует, что энергии ТО-фононов подсистем такие же ($\omega_{\nu T}$), как и соответствующие им энергии гомогенных сред. Ортонормированный набор векторов поляризации поперечных фононов можно искать так же, как для продольных фононов. Однако, поскольку ТО-фононы не взаимодействуют с электронами, что предполагается исследовать в дальнейшем, соответствующий расчет не представляет непосредственного интереса.

3. Интерфейсные фононы

Энергия и компоненты вектора поляризации интерфейсных фононов находятся при выполнении условий

$$\varepsilon_\nu(\omega) \neq 0, \quad \varepsilon_\beta(\omega) \neq 0, \quad \chi_\nu^{-1}(\omega) \neq 0, \quad \chi_\beta^{-1}(\omega) \neq 0. \quad (15)$$

В таком случае система уравнений (5) переходит в

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{P}(\mathbf{r}) &= 0, \\ \operatorname{div} \mathbf{P}(\mathbf{r}) &= 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Поэтому, снова представляя вектор \mathbf{P} в виде $\mathbf{P} = \nabla \Psi$, получим, что первое уравнение из (16) удовлетворяется тождественно, а второе дает

$$\Delta \Psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (17)$$

Для решения уравнения (17) $\Psi(\mathbf{r})$ разлагается по полной системе сферических функций $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{lm} F_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (18)$$

Тогда, учитывая, что

$$[\Delta_{\vartheta, \varphi} + l(l+1)] Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = 0,$$

для $F_l(r)$ получается уравнение

$$\frac{d^2 F_l(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF_l(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} F_l(r) = 0, \quad (19)$$

общим решением которого (в обозначениях, введенных ранее) является функция

$$F_l^\alpha(r) = A_l^{(\alpha)} x_\alpha^l + B_l^{(\alpha)} x_\alpha^{-(l+1)} \quad (l = 1, 2, \dots, \infty). \quad (20)$$

Из условий конечности F_l при $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$ следует

$$A_l^{(3)} = 0, \quad B_l^{(1)} = 0, \quad (21)$$

а граничные условия приводят к системе уравнений

$$\begin{aligned} (\chi_1^{-1} A_l^{(1)} - \chi_2^{-1} A_l^{(2)}) R^{2l+1} - \chi_2^{-1} B_l^{(2)} &= 0, \\ (\chi_1^{-1} \varepsilon_1 A_l^{(1)} - \chi_2^{-1} \varepsilon_2 A_l^{(2)}) l R^{2l+1} + \chi_2^{-1} \varepsilon_2 (l+1) B_l^{(2)} &= 0, \\ \chi_2^{-1} (R + \Delta)^{2l+1} A_l^{(2)} + \chi_2^{-1} B_l^{(2)} - \chi_3^{-1} B_l^{(3)} &= 0, \\ \chi_2^{-1} \varepsilon_2 l (R + \Delta)^{2l+1} A_l^{(2)} + (\chi_3^{-1} \varepsilon_3 B_l^{(3)} - \chi_2^{-1} \varepsilon_2 B_l^{(2)}) (l+1) &= 0. \end{aligned} \quad (22)$$

Отсюда коэффициенты $A_l^{(2)}$, $B_l^{(2)}$, $B_l^{(3)}$ выражаются через $A_l^{(1)}$

$$\begin{aligned} A_l^{(2)} &= A_l^{(1)} \frac{\chi_2}{\chi_1} \frac{\varepsilon_1 l + \varepsilon_2(l+1)}{\varepsilon_2}, \\ B_l^{(2)} &= A_l^{(1)} \frac{\chi_2}{\chi_1} \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2} l R^{2l+1}, \\ B_l^{(3)} &= A_l^{(1)} \frac{\chi_3}{\chi_1} \frac{2l+1}{l} \frac{\varepsilon_1 l + \varepsilon_2(l+1)}{\varepsilon_2 - \varepsilon_3} (R + \Delta)^{2l+1}, \end{aligned} \quad (23)$$

а коэффициент $A_l^{(1)}$ находится из условия нормировки так, чтобы суммарная энергия поляризационных интерфейсных мод совпадала с энергией поляризации

$$\begin{aligned} A_l^{(1)} &= \frac{\chi_1}{2} \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\pi}} (2l+1) \left[l (\mu_1 \chi_1^2 \varepsilon_2 - \mu_2 \chi_2^2 \varepsilon_1) R^{2l-1} + \right. \\ &\left. + \frac{[\varepsilon_1 l + \varepsilon_2(l+1)]^2}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)^2 (l+1)} (\mu_3 \chi_3^2 \varepsilon_2 - \mu_2 \chi_2^2 \varepsilon_3) (R + \Delta)^{2l-1} \right]^{-1/2}, \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\mu_\alpha = \frac{[\varepsilon_\alpha^\infty (\omega_{\alpha L}^2 - \omega^2) - (\omega_{\alpha T}^2 - \omega^2)]^2}{\varepsilon_\alpha^\infty (\omega_{\alpha L}^2 - \omega_{\alpha T}^2)} \quad (\alpha = 1, 2, 3).$$

Спектр интерфейсных фононов находится из условия нетривиальности решения системы (22), что приводит к уравнению

$$\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)l(l+1)}{[\varepsilon_1 l + \varepsilon_2(l+1)][\varepsilon_2 l + \varepsilon_3(l+1)]} = \left(1 + \frac{\Delta}{R}\right)^{2l+1}. \quad (25)$$

Прежде чем анализировать особенности спектра интерфейсных фононов в общем виде, исследуем предельные свойства уравнения (25).

В пределе $R \rightarrow \infty$ это уравнение должно описывать спектр интерфейсных фононов плоской пленки (ε_2), окруженной средами с различными диэлектрическими проницаемостями ($\varepsilon_1, \varepsilon_3$). Чтобы найти этот предел, положим $l = qR$, где параметр q играет роль волнового числа. Тогда

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)qR(qR+1)}{[\varepsilon_1 qR + \varepsilon_2(qR+1)][\varepsilon_2 qR + \varepsilon_3(qR+1)]} = \lim_{R \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{\Delta}{R}\right)^{2qR+1},$$

откуда следует

$$\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2)} = e^{2q\Delta}. \quad (26)$$

В случае, когда проницаемости окружающих пленку сред совпадают ($\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = \varepsilon_e$), уравнение (26) распадается на два уравнения

$$\frac{\varepsilon_e - \varepsilon_2}{\varepsilon_e + \varepsilon_2} = \pm e^{q\Delta}, \quad (27)$$

которые эквивалентны ранее известным [1]

$$\begin{aligned} \varepsilon_e \operatorname{th} \left(\frac{q\Delta}{2} \right) + \varepsilon_2 &= 0, \\ \varepsilon_e \operatorname{cth} \left(\frac{q\Delta}{2} \right) + \varepsilon_2 &= 0 \end{aligned} \quad (28)$$

для такой гетеросистемы.

В пределе $R \rightarrow 0$, полагая $\varepsilon_1 = 0$, из (25) получается уравнение

$$\varepsilon_2 l + \varepsilon_1 (l + 1) = 0. \quad (29)$$

Оно описывает спектр интерфейсных фононов гетеросистемы, состоящей из сферы радиуса Δ с проницаемостью ε_2 , помещенной в среду с проницаемостью ε_3 .

Полагая в (29) $l = qR$ и рассматривая предел $\Delta \rightarrow \infty$, получим известное ранее [1] уравнение

$$\varepsilon_2(\omega) + \varepsilon_3(\omega) = 0 \quad (30)$$

для спектра интерфейсных фононов гетеросистемы, состоящей из двух сред ($\varepsilon_2, \varepsilon_3$), разделенных плоской границей. Естественно, это же уравнение получается из (27) при $\Delta \rightarrow \infty$.

Возвращаясь к исследованию общего уравнения (25), заметим, что с учетом (7) оно переходит в следующее:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^\infty \varepsilon_3^\infty (\omega^2 - \omega_{2T}^2) (\omega^2 - \omega_{1L}^2) (\omega^2 - \omega_{3L}^2) + (\varepsilon_2^\infty)^2 (\omega^2 - \omega_{2L}^2) \times \\ \times (\omega^2 - \omega_{1T}^2) (\omega^2 - \omega_{3T}^2) + \varepsilon_2^\infty (\omega^2 - \omega_{2L}^2) (\omega^2 - \omega_{2T}^2) \times \\ \times [\varepsilon_1^\infty (\omega^2 - \omega_{1L}^2) (\omega^2 - \omega_{3T}^2) \eta_{1l} + \varepsilon_3^\infty (\omega^2 - \omega_{2L}^2) (\omega^2 - \omega_{1T}^2) \eta_{3l}] = 0, \end{aligned} \quad (31)$$

где

$$\begin{aligned} \eta_{1l} &= \frac{l\zeta_l + l + 1}{(l + 1)(\zeta_l - 1)}, \quad \eta_{3l} = \frac{(l + 1)\zeta_l + 1}{l(\zeta_l - 1)}, \\ \zeta_l &= \left(1 + \frac{\Delta}{R} \right)^{2l+1}. \end{aligned}$$

При фиксированном значении l и произвольном соотношении между $\varepsilon_1^\infty, \varepsilon_2^\infty, \varepsilon_3^\infty, \omega_{1L}, \dots, \omega_{3L}$ уравнение (31) может иметь четыре действительных корня; так как $l = 1, 2, 3, \dots, \infty$, то это означает, что в общем случае в исследуемой гетеросистеме существуют четыре ветви интерфейсных фононов $E_i(l)$ ($i = 1, 2, 3, 4$). Не выписывая громоздкого решения уравнения (31) в общем виде, далее мы приведем примеры фоновых спектров, рассчитанных на ЭВМ для конкретных моделей. Пока же рассмотрим модель гетеросистемы, для которой существует простое аналитическое решение. Это сферическая полупроводниковая

пленка (Δ, ε_2) , контактирующая со средами с равными проницаемостями $(\varepsilon_1 = \varepsilon_3)$. Тогда уравнение (31) преобразуется в два уравнения

$$\varepsilon_1(\omega) + \Phi_g(l)\varepsilon_2(\omega) = 0 \quad (g = 1, 2),$$

которые при фиксированном значении l имеют в общем случае четыре решения

$$E_g^\pm(l) = 2^{-1/2} [\varepsilon_1^\infty + \Phi_g(l)\varepsilon_2^\infty]^{-1/2} \left[\varepsilon_1^\infty \Omega_{12}^+ + \varepsilon_2^\infty \Phi_g(l) \Omega_{21}^+ \pm \sqrt{[\varepsilon_1^\infty \Omega_{12}^- - \varepsilon_2^\infty \Phi_g(l) \Omega_{21}^-]^2 + 4\varepsilon_1^\infty \varepsilon_2^\infty \Phi_g(l) \Omega_{11}^- \Omega_{22}^-} \right]^{1/2}, \quad (32)$$

где

$$\Phi_g(l) = \frac{1 + \zeta_l[l(l+1) + 1/2]}{\zeta_l[l(l+1) - 1]} + (-1)^g \sqrt{\left[\frac{1 + \zeta_l[l(l+1) + 1/2]}{\zeta_l[l(l+1) - 1]} \right]^2 - 1},$$

$$\Omega_{g_1 g_2}^\pm = \omega_{g_1 L}^2 \pm \omega_{g_2 T}^2 \quad (g, g_1, g_2 = 1, 2).$$

Если пленка (ε_2, Δ) ограничена вакуумом с обеих сторон $(\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 1)$, то в спектре (32) две ветви E_g^+ исчезают, а две остаются

$$E_g^-(l) = \omega_{2T} \sqrt{\frac{1 + \Phi_g(l)\varepsilon_2^0}{1 + \Phi_g(l)\varepsilon_2^\infty}}.$$

Так как $\Phi_g(l \rightarrow \infty) = 1$, то из $E_g^-(l)$ следует, что при $R \rightarrow \infty$ сферическая пленка превращается в плоскую с энергией интерфейсного фонона

$$E = \omega_{2T} \sqrt{\frac{1 + \varepsilon_2^0}{1 + \varepsilon_2^\infty}}.$$

Дальнейший анализ спектра интерфейсных фононов целесообразно осуществить на примерах конкретных гетеросистем. В качестве наиболее общего случая рассматривалась система, состоящая из трех

	ε^∞	ω_L , meV	ω_T , meV
TlBr	5.42	13.4	5.7
GaAs	10.9	36.2	33.3
AlAs	8.16	50.1	44.8

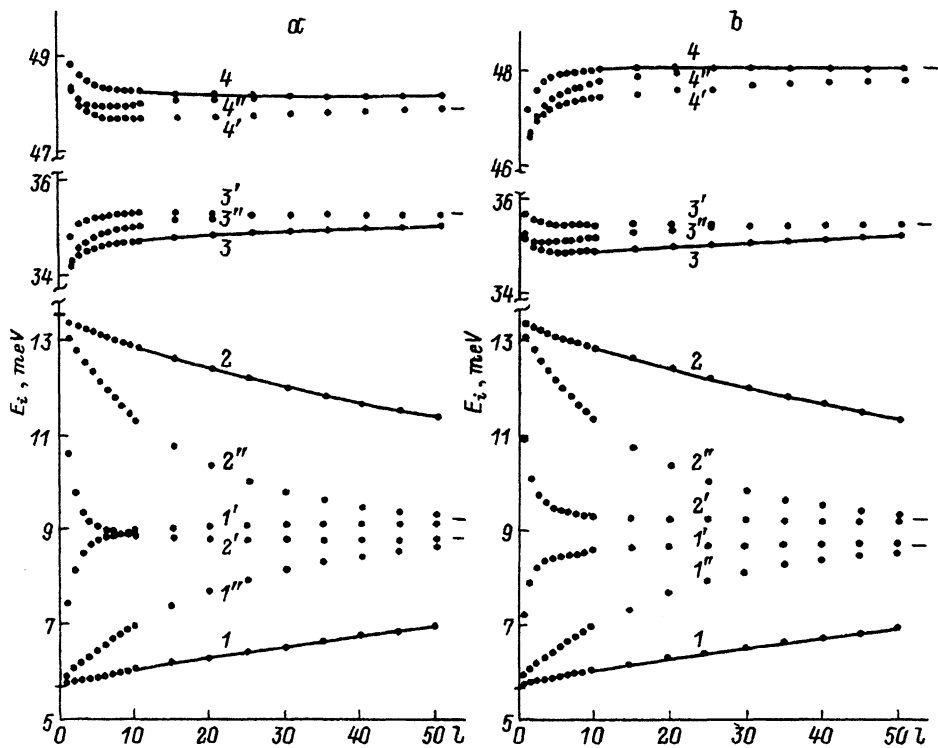


Рис. 1. Зависимость E_i от l в системах (GaAs|TlBr|AlAs) (a) и (AlAs|TlBr|GaAs) (b) при $\Delta/R = 1$ (1-4), 0.02 (1''-4''), 0.01 (1'-4').

кристаллов (GaAs|TlBr|AlAs) с различными параметрами, значения которых даны в таблице. Результат рассчитанного спектра приведен на рис. 1. Из этого рисунка видно следующее.

При всех возможных отношениях толщины пленки к радиусу Δ/R в гетеросистеме существуют четыре ветви интерфейсных фононов. Две ветви всегда находятся между энергиями продольного и поперечного оптических фононов кристалла, образующего пленку (TlBr). На рисунках энергии оптических фононов указаны соответствующими черточками. Из двух других ветвей одна (3) находится между энергиями продольного и поперечного фононов одного (GaAs), а другая (4) — другого (AlAs) кристаллов. Дисперсия всех ветвей существенна при малых значениях l и незначительна при больших l . Считая положительной дисперсию (при малых l) в том случае, когда значение энергии возрастает с увеличением l , и отрицательной в противном случае, из рис. 1 видим следующее. В зависимости от того, какой кристалл находится внутри, а какой — снаружи пленки, дисперсия двух ветвей (1, 2), находящихся между энергиями продольного и поперечного фононов пленки, не изменяется, а двух других (3, 4) — изменяется на противоположную. Максимальная дисперсия каждой ветви $|E_i(1) - E_i(\infty)|$ при фиксированной толщине Δ с увеличением R уменьшается, стремясь к нулю при $R \rightarrow \infty$. Независимо от величины Δ/R при $l \rightarrow \infty$ четыре ветви интерфейсных фононов имеют своими пре-

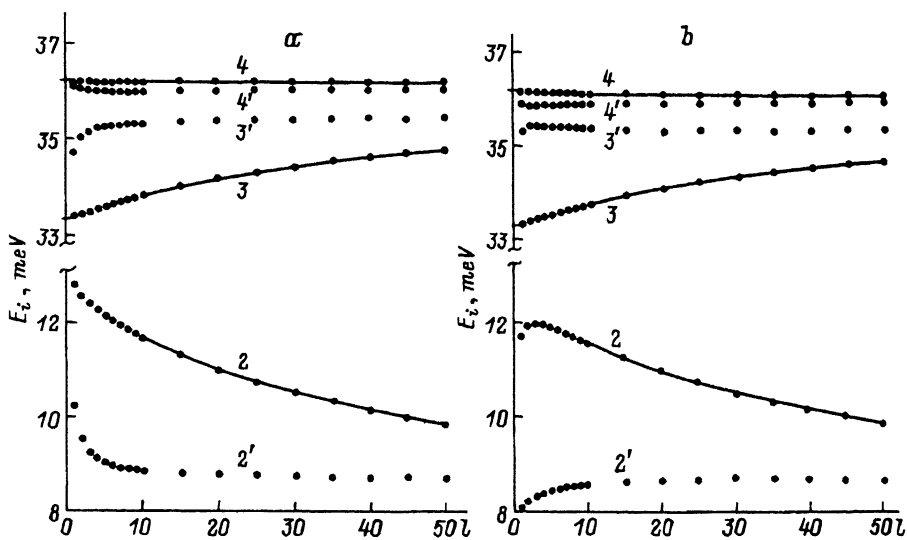


Рис. 2. Зависимость E_i от l в системах (вакуум|GaAs|TlBr) (а) и (TlBr|GaAs|вакуум) (b) при $\Delta/R = 1$ (2-4) и 0.01 (2'-4').

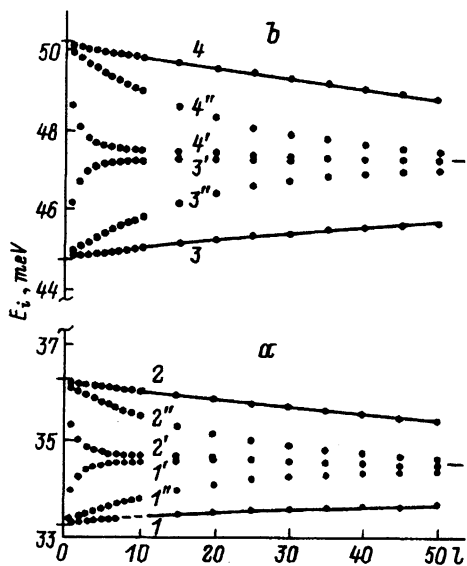


Рис. 3. Зависимость E_i от l в системах (GaAs|AlAs|GaAs) (а) и (AlAs|GaAs|AlAs) (b) при $\Delta/R = 1$ (1-4), 0.2 (1''-4''), 0.01 (1'-4').

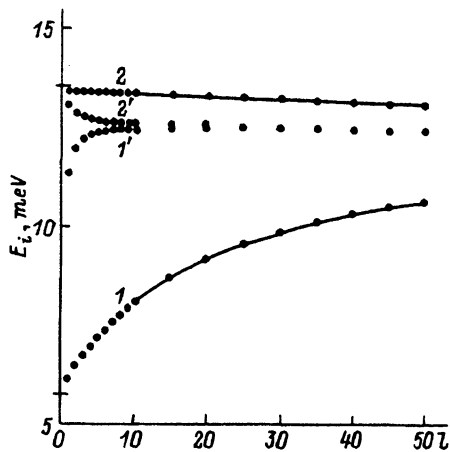


Рис. 4. Зависимость E_i от l в системе (вакуум|TlBr|вакуум) при $\Delta/R = 1$ (1, 2) и 0.01 (1', 2').

дельными значениями ($\beta = 1, 3$)

$$E_{\beta}^{\pm} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\beta}^{\infty} \Omega_{\beta 2}^{+} + \varepsilon_2^{\infty} \Omega_{2\beta}^{+} \pm \sqrt{[\varepsilon_{\beta}^{\infty} \Omega_{\beta 2}^{-} - \varepsilon_2^{\infty} \Omega_{2\beta}^{-}]^2 + 4\varepsilon_2^{\infty} \varepsilon_{\beta}^{\infty} \Omega_{\beta\beta}^{-} \Omega_{22}^{-}}}{2(\varepsilon_2^{\infty} + \varepsilon_{\beta}^{\infty})}}$$

На рис. 1 эти значения помечены горизонтальными черточками справа.

На рис. 2 приведен спектр интерфейсных фононов гетеросистемы, в которой одна из контактирующих сред — вакуум (v). В этом случае спектр содержит три ветви. Отсутствие четвертой обусловлено вакуумом, который можно рассматривать как среду с $\omega_{Lv} = \omega_{Tv} = 0$, а поскольку одна из ветвей должна находиться между ω_{Lv} и ω_{Tv} , то она исчезает. Остальные особенности спектра те же, что и обсуждавшиеся уже.

Так как экспериментально и теоретически ^[1-3] часто исследовались гетеросистемы (GaAs|AlAs|GaAs) и (AlAs|GaAs|AlAs) с плоскими границами, то был выполнен расчет спектра интерфейсных фононов для этих же систем сферической формы. Результаты приведены на рис. 3. Оказалось, как и следовало ожидать, что спектр не зависит от того, какая среда образует пленку, а какая — окружение. Две интерфейсные ветви (1, 2) находятся между продольным и поперечным фононами одного (GaAs), а две (3, 4) — другого (AlAs) кристаллов. Как и должно быть, при $l \rightarrow \infty$ четыре ветви вырождаются в две, соответствующие интерфейсным фононам плоской пленки.

На рис. 4 приведен спектр интерфейсной системы, образованной сферической пленкой (TlBr), окруженной вакуумом с обеих сторон. В этом случае система обладает лишь двумя ветвями (1, 2), находящимися между продольным и поперечным фононами TlBr. Две ветви из-за вакуума исчезли. В пределе $l \rightarrow \infty$ ветви 1, 2 вырождаются в одну с энергией, характерной для плоской пленки в вакууме.

Следует еще отметить, что при прочих равных условиях максимальная дисперсия всех ветвей интерфейсного спектра имеет место для систем, в которых хотя бы одной контактирующей средой является вакуум.

Список литературы

- [1] Mori N., Ando T. // Phys. Rev. (b). 1989. V. 40. N 9. P. 6175-6188.
- [2] Wandler L. // Phys. Stat. Sol. (b). 1985. V. 129. N 2. P. 513-530.
- [3] Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985. 415 с.
- [4] Покатилов Е.П., Фомин В.М., Берил С.И. Колебательные возбуждения, поляроны и экситоны в многослойных системах и сверхрешетках. Кишинев: Штиинца, 1990. 278 с.
- [5] Шикин В.Б. // Письма в ЖЭТФ. 1978. Т. 2. № 1. С. 44-47.
- [6] Богомолов В.Н., Поборчий В.В., Холодкевич С.В., Шагин С.И. // Письма в ЖЭТФ. 1983. Т. 38. № 9. С. 439-441.
- [7] Ефремов Н.А., Покутный С.И. // ФТТ. 1985. Т. 2. № 1. С. 48-56.

Черновицкий государственный университет им. Ю.Федьковича

Поступило в Редакцию
1 марта 1994 г.