

# Спектр и электрон-фононное взаимодействие в среде с цилиндрической квантовой проволокой

© Н.В. Ткач, В.П. Жаркой

Черновицкий государственный университет им. Ю. Федьковича,  
274012 Черновцы, Украина

(Получена 7 апреля 1998 г. Принята к печати 4 октября 1998 г.)

В модели диэлектрического континуума изучено влияние многофононных процессов на электронный (дырочный) спектр в наногетеросистеме  $\beta$ -HgS/CdS (цилиндрическая квантовая проволока в массивной среде). Получен гамильтониан электрон-фононного взаимодействия для модели потенциальной ямы конечной глубины. Определен сдвиг энергетического уровня электрона (дырки) за счет взаимодействия с оптическими продольными (ограниченными) и интерфейсными фононами. Найдена зависимость ширины запрещенной зоны наносистемы  $\beta$ -HgS/CdS от радиуса квантовой проволоки. Установлена преобладающая роль интерфейсных фононов в перенормировании электронного (дырочного) спектра в квантовой проволоке малых поперечных размеров.

Теория фононного спектра пространственно ограниченных гетеросистем (плоских квантовых ям (КЯ), квазиодномерных квантовых проволок (КП), квантовых точек) развивается уже давно. Существуют микроскопические [1], полумикроскопические [2] и макроскопические модели гидродинамического континуума [3] и модель диэлектрического континуума (DC) [4], которые в большей или меньшей мере определяют спектр ограниченных объемных ( $L$ ) и интерфейсных ( $I$ ) фононов в ионных полупроводниковых наногетеросистемах.

Теория электронного (дырочного) спектра хорошо развита для таких систем в приближении эффективной массы, которое неплохо работает даже тогда, когда линейные размеры наносистемы составляют всего лишь несколько постоянных решетки [5]. Теория электрон-фононного взаимодействия сейчас находится в процессе интенсивного развития, так как остаются нерешенными различные вопросы, требующие адекватного понимания и описания физических процессов в наногетеросистемах.

Одна из проблем состоит в том, что если для исследования электрон-фононного взаимодействия использовать какую-либо из микроскопических или полумикроскопических моделей, то гамильтониан взаимодействия становится столь сложным, что без дополнительных малоконтролируемых упрощений задача о перенормировке электронного спектра практически не решается. Поэтому базовой моделью для исследования такого рода задач является модель DC, которая, несмотря на сравнительную простоту, дает фононный спектр, мало отличающийся от полумикроскопической модели Хуанга—Цу [2]. Преимущество модели DC состоит еще и в том, что в ней нет свободных параметров, а фигурируют лишь известные величины энергий фононов и диэлектрических проницаемостей соответствующих массивных кристаллов.

Теория перенормировки электронного спектра фононами в цилиндрической КП развивалась в работах [1,5]. Однако там она базировалась на чрезмерно идеализированной модели, предполагающей, что КП представляет собой бесконечно глубокую потенциальную яму. Это

априори сильно уменьшает реальную роль взаимодействия электрона с  $I$ -фононами, так как поле  $I$ -фононов имеет максимальный потенциал именно там (на поверхности раздела сред), где волновая функция электрона строго равна нулю из-за предполагаемой бесконечной глубины ямы.

Поэтому цель настоящей работы — расчет перенормировки основного уровня электрона (дырки) в цилиндрической наногетеросистеме  $\beta$ -HgS/CdS за счет его взаимодействия как с  $L$ -, так и с  $I$ -фононами при наличии конечного скачка потенциала на границе раздела сред. При этом вследствие того что взаимодействие электрона с  $I$ -фононами в такой наносистеме оказалось достаточно сильным, возникла необходимость эффективного учета виртуальных многофононных процессов методом функций Грина.

## Спектр и эффективная масса электрона в цилиндрической квантовой яме $\beta$ -HgS/CdS без учета взаимодействия с фононами

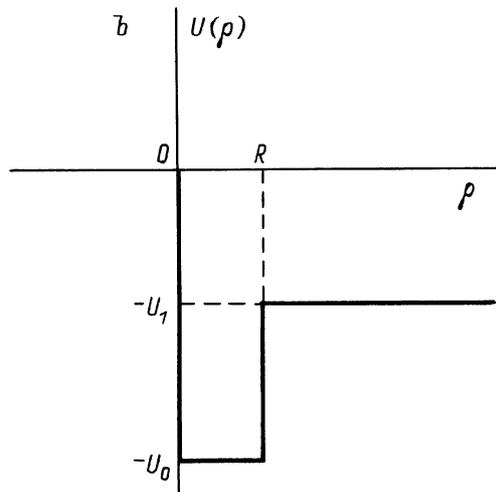
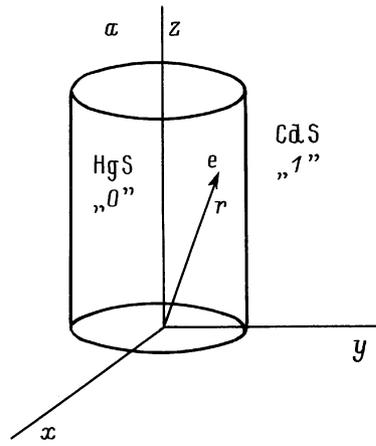
Рассматривается цилиндрическая КП  $\beta$ -HgS/CdS (рис. 1, *a*). Электрон с зарядом  $e$  и радиус-вектором  $\mathbf{r}$  характеризуется эффективной массой  $m$ , которая различна в разных средах:

$$m(\rho) = \begin{cases} m_0, & 0 \leq \rho < R & (\text{среда "0", HgS}), \\ m_1, & R < \rho < \infty & (\text{среда "1", CdS}). \end{cases} \quad (1)$$

Он движется в поле потенциала, который как функция переменной  $\rho$  имеет вид (см. рис. 1, *b*)

$$U(\rho) = \begin{cases} -U_0, & 0 \leq \rho < R, \\ -U_1, & R < \rho < \infty, \end{cases} \quad (2)$$

где  $R$  — радиус проволоки,  $U_0, U_1$  — потенциальные энергии электрона относительно вакуума в соответствую-



**Рис. 1.** Модель цилиндрической квантовой проволоки  $\beta$ -HgS/CdS. Цифрами "0" и "1" обозначены среды HgS и CdS с потенциалами  $U_0$  и  $U_1$  соответственно.

ющих средах. Для определения связанных состояний более удобно выбрать начало отсчета энергии относительно потенциала среды 1 (CdS). Тогда

$$V(\rho) = \begin{cases} -V_0, & 0 \leq \rho < R, \\ 0, & R < \rho < \infty. \end{cases} \quad V_0 = U_0 - U_1, \quad (3)$$

Гамильтониан электрона в наногетеросистеме (без учета взаимодействия с фононами) в цилиндрической системе координат имеет вид

$$H(\rho, \varphi, z) = -\frac{\hbar^2}{2\rho} \left[ \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{\rho}{m(\rho)} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m(\rho)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho). \quad (4)$$

Решение стационарного уравнения Шредингера

$$\left[ H(\rho, \varphi, z) - E_{nmk} \right] \psi_{nmk}(\rho, \varphi, z) = 0 \quad (5)$$

имеет вид

$$E_{nmk} = E_{nm} + \hbar^2 k^2 / (2\mu_{nm}), \quad (6)$$

где энергетические уровни  $E_{nm}$  квантованного движения электрона определяются корнями уравнения

$$\frac{\chi_0 J_{|m|+1}(\chi_0 R) - J_{|m|-1}(\chi_0 R)}{m_0 J_{|m|}(\chi_0 R)} = \frac{\chi_1 K_{|m|+1}(\chi_1 R) - K_{|m|-1}(\chi_1 R)}{m_1 K_{|m|}(\chi_1 R)}, \quad (7)$$

а скоррелированная эффективная масса электрона,

$$\mu_{nm} = \bar{m} / (1 + I_{nm} \bar{m}), \quad \bar{m} = (m_0 + m_1) / 2, \quad (8)$$

как характеристика этой квазичастицы в наногетеросистеме, зависит от квантовых состояний  $|nm\rangle$  через величину

$$I_{nm} = R^{-2} \left\{ |A_{|m|}|^2 \int_0^R [m^{-1}(\rho) - \bar{m}^{-1}] |J_{|m|}(\chi_0 \rho)|^2 \rho d\rho + |B_{|m|}|^2 \int_R^\infty [m^{-1}(\rho) - \bar{m}^{-1}] |K_{|m|}(\chi_1 \rho)|^2 \rho d\rho \right\}. \quad (9)$$

Собственные волновые функции электрона имеют вид

$$\psi_{nmk} = \frac{\exp[i(m\varphi + kz)]}{R\sqrt{2\pi L}} A_{|m|} \begin{cases} J_{|m|}(\chi_0 \rho), & \rho \leq R, \\ B_{|m|} K_{|m|}(\chi_1 \rho), & \rho \geq R, \end{cases} \quad (10)$$

где

$$A_{|m|}^2 = 2 / \left\{ J_{|m|}^2(\chi_0 R) - J_{|m|-1}(\chi_0 R) J_{|m|+1}(\chi_0 R) + B_{|m|}^2 [K_{|m|-1}(\chi_1 R) K_{|m|+1}(\chi_1 R) - K_{|m|}^2(\chi_1 R)] \right\}, \quad (11)$$

$$B_{|m|} = J_{|m|}(\chi_0 R) / K_{|m|}(\chi_1 R), \quad \chi_0 = \sqrt{2m_0(V_0 - |E|)/\hbar}, \quad \chi_1 = \sqrt{2m_1|E|/\hbar}, \quad (12)$$

$E$  — энергия электрона,  $n = 1, 2, 3, \dots$  — радиальное квантовое число,  $m = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$  — магнитное квантовое число,  $k$  — аксиальная компонента волнового вектора,  $J_{|m|}$  — цилиндрические функции Бесселя,  $K_{|m|}$  — модифицированные функции Бесселя.

Таким образом, движение электрона квантуется в перпендикулярном направлении к оси КП, а в продольном направлении он совершает инфинитное движение с эффективной массой  $\mu_{nm}$ .

## Перенормировка энергии основного состояния электрона $L$ - и $I$ -фононами в наногетеросистеме $\beta$ -HgS/CdS

Электрон-фононная система в квантовой проволоке (КП) с конечным скачком потенциала на границе сред в модели диэлектрического континуума (DC) описывается гамильтонианом

$$H = H_e + H_{ph} + H_{int}, \quad (13)$$

где

$$H_e = \sum_{nmk} E_{nmk} \hat{a}_{nmk}^+ \hat{a}_{nmk} \quad (14)$$

— гамильтониан электронной подсистемы, полученный путем перевода гамильтониана (4) в представление вторичного квантования согласно общей теории [6];

$$H_{ph} = \sum_{\lambda mq} \Omega_{\lambda mq} \left( \hat{b}_{\lambda mq}^+ \hat{b}_{\lambda mq} + 1/2 \right) \quad (15)$$

— гамильтониан поляризационных фононов в модели диэлектрического континуума, известный из работ [1,5]. Индекс  $\lambda = \pm$  для  $I$ -фононов и  $\lambda = L$  — для  $L$ -фононов. Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия в представлении вторичного квантования по переменным обеих подсистем

$$H_{int} = \sum_{n_1 m_1} \sum_{n_2 m_2} \sum_{nm} \sum_{k\lambda q} \Phi_{n_1 m_1}^{n_2 m_2}(\lambda, n, m, q) \hat{a}_{n_2 m_2, k+q}^+ \times \hat{a}_{n_1 m_1, k} \left( \hat{b}_{\lambda mq} + \hat{b}_{\lambda, -m, -q}^+ \right) \quad (16)$$

найден путем перевода соответствующего гамильтониана из работы [5] на базе найденной здесь системы волновых функций (10). Так как функции связи  $\Phi_{n_1 m_1}^{n_2 m_2}(\lambda, n, m, q)$  представляются весьма громоздкими аналитическими выражениями, здесь мы не будем приводить их в общем виде. Далее нас будет интересовать перенормировка основного состояния электрона в гетеросистеме с КП достаточно малых размеров. В такой системе нижняя энергетическая зона достаточно удалена от других, поэтому межзонным взаимодействием посредством фононов будем пренебрегать и учтем лишь функции связи основной зоны с фононами. Тогда

$$\Phi_{L_0}(n, q) = -\frac{e}{R^2} \sqrt{\frac{2\Omega_L (\varepsilon_{0\infty}^{-1} - \varepsilon_{0s}^{-1})}{LR^2 (q^2 + x_{n0}^2/R^2)}} A_0^2 J_1^{-1}(x_{n0}) \times \int_0^R \rho J_0^2(\chi_0 \rho) J_0(x_{n0} \rho/R) d\rho \quad (17)$$

— функция связи электрона с ограниченными  $L_0$ -фононами КП. С ограниченными  $L_1$ -фононами среды-барьера

электрон не взаимодействует ( $\Phi_{L_1} \equiv 0$ ), а его взаимодействию с двумя ветвями  $I$ -фононов соответствуют функции

$$\Phi_{\pm}(q) = -\frac{e}{R^2} \sqrt{\frac{2\pi\Omega_{\pm}(q)}{y_q R}} A_0^2 \times \begin{cases} \alpha_{1\pm}(q) \int_0^R \rho J_0^2(\chi_0 \rho) J_0(q\rho) d\rho, & \rho < R, \\ \alpha_{2\pm}(q) \frac{I_0(qR)}{K_0(qR)} B_0^2 \int_R^{\infty} \rho K_0^2(\chi_1 \rho) K_0(q\rho) d\rho, & \rho > R, \end{cases} \quad (18)$$

где

$$y_q = 2\pi Lq I_0(x) \left\{ [I_0(x)]' - I_0(x) K_0^{-1}(x) [K_0(x)]' \right\} \quad (x = qR), \quad (19)$$

$$\alpha_{j\pm}(q) = \frac{\Omega_{L_j}}{\Omega_{\pm}(q)} \times \frac{\sqrt{\varepsilon_{j\infty}^{-1} - \varepsilon_{js}^{-1}} \left[ \varepsilon_{js} \Omega_{\pm}^2(q) - \varepsilon_{j\infty} \Omega_{L_j}^2 \right]}{\Omega_{L_j}^2 (\varepsilon_{js} - \varepsilon_{j\infty})} \quad (j = 0, 1). \quad (20)$$

Здесь, согласно [5],  $\Omega_{L_{0,1}}$  — энергии ограниченных  $L$ -фононов сред 0 и 1 соответственно,  $\Omega_{\pm}(q)$  — энергии интерфейсных  $I$ -фононов определяются дисперсионным уравнением

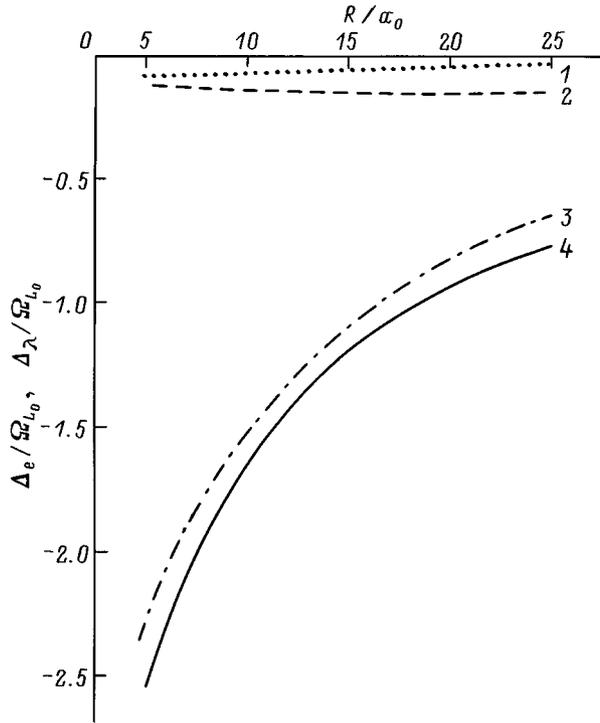
$$K_0(x) [I_0(x)]' \varepsilon_{0\infty} \frac{\Omega^2 - \Omega_{L_0}^2}{\Omega^2 - \Omega_{T_0}^2} = I_0(x) [K_0(x)]' \times \varepsilon_{1\infty} \frac{\Omega^2 - \Omega_{L_1}^2}{\Omega^2 - \Omega_{T_1}^2} \quad (x = qR), \quad (21)$$

где  $I_0$  и  $K_0$  — модифицированные бесселевы функции нулевого порядка.

Исследуем теперь, как перенормируется основное состояние электрона (дырки) при взаимодействии с фононами. В однозонном приближении при  $T = 0$  К перенормированная энергия электрона определяется полюсом фурье-образа функции Грина ( $\hbar = 1$ ) [7]

$$G(k, \omega) = 1/[\omega - E(k) - M(k, \omega)], \quad (22)$$

где  $M$  — полный массовый оператор (МО). Так как в исследуемой задаче связь электрон- $I$ -фонон оказывается достаточно сильной, а сами функции связи с фононами всех ветвей имеют резкие максимумы, то для МО можно воспользоваться представлением в виде бесконечной



**Рис. 2.** Зависимости полного ( $\Delta_e$ ) и парциальных ( $\Delta_\lambda$ ) сдвигов энергии основного уровня электрона от радиуса квантовой проволоки. Линиям 1, 2, 3, 4 соответствуют величины  $\Delta_-$ ,  $\Delta_+$ ,  $\Delta_L$ ,  $\Delta_e$ .

интегральной цепной дроби [8]

$$M(\omega) = \sum_{\lambda_1} \int_0^1 \frac{|\Phi_{\lambda_1}(Q_1)|^2 dQ_1}{\omega - E(Q_1) - \Omega_{\lambda_1}(Q_1) - \dots} - 2 \sum_{\lambda_2} \int_0^1 \frac{|\Phi_{\lambda_2}(Q_2)|^2 dQ_2}{\omega - E(Q_1 + Q_2) - \Omega_{\lambda_1}(Q_1) - \Omega_{\lambda_2}(Q_2) - \dots} - n \sum_{\lambda_n} \int_0^1 \frac{|\Phi_{\lambda_n}(Q_n)|^2 dQ_n}{\omega - E\left(\sum_{j=1}^n Q_j\right) - \sum_{j=1}^n \Omega_{\lambda_j}(Q_j) - \dots} \quad (23)$$

Здесь

$$Q_j = \frac{a_0}{\pi} q_j.$$

Перенормированное фононами положение ( $\tilde{E}$ ) дна электронной зоны ( $k = 0$ ) находится как корень дисперсионного уравнения

$$\omega - E - M_n(\omega) = 0, \quad (24)$$

где  $M_n(\omega)$  —  $n$ -фононное приближение МО (23).

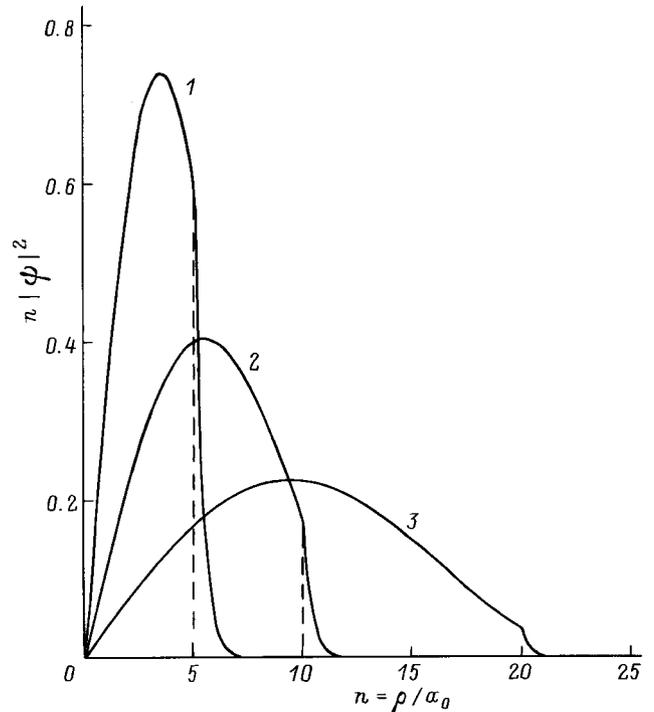
В работе выполнялся расчет положения дна (потолка) зоны проводимости (валентной зоны) для электрона (дырки) без взаимодействия с фононами  $E_e(E_h)$  и с учетом взаимодействия со всеми фононами  $\tilde{E}_e(\tilde{E}_h)$  для

гетеросистемы  $\beta$ -HgS/CdS. При этом использовались следующие известные из литературы параметры, характеризующие массивные аналоги нанокристаллов гетеросистемы:

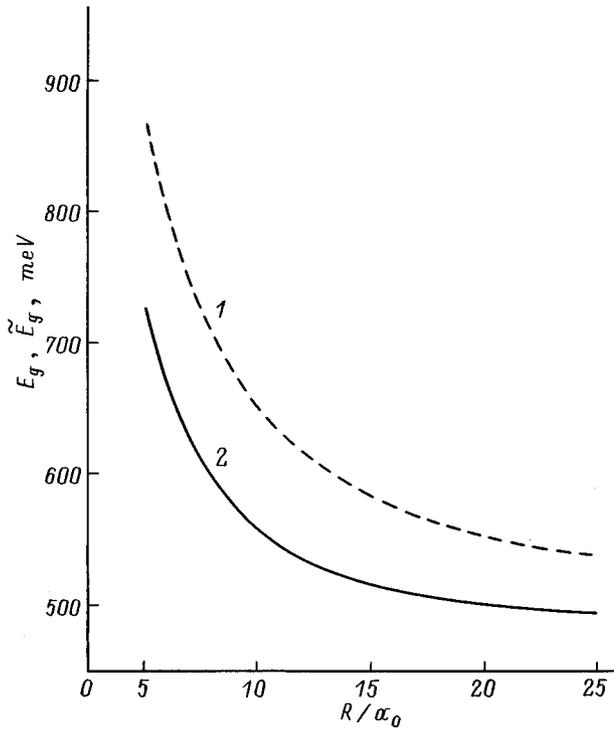
$$\begin{aligned} \Omega_{L_0} &= 27.8 \text{ мэВ}, & \varepsilon_{0\infty} &= 11.4, & \varepsilon_{0s} &= 18.2, \\ \Omega_{L_1} &= 57.2 \text{ мэВ}, & \varepsilon_{1\infty} &= 5.5, & \varepsilon_{1s} &= 9.1, \\ U_0 &= 5.0 \text{ эВ}, & E_{g0} &= 0.5 \text{ эВ}, & a_0 &= 0.585 \text{ нм}, \\ U_1 &= 3.8 \text{ эВ}, & E_{g1} &= 2.5 \text{ эВ}, & a_1 &= 0.582 \text{ нм}. \end{aligned}$$

Здесь  $a_0$ ,  $E_{g0}$  и  $a_1$ ,  $E_{g1}$  — постоянные решеток и энергии запрещенных зон HgS и CdS соответственно.

На рис. 2 приведен для примера результат расчета смещения ( $\Delta_e = \tilde{E}_e - E_e$ ) основного уровня электрона и его парциальных составляющих ( $\Delta_+$ ,  $\Delta_-$ ,  $\Delta_L$ ) в зависимости от радиуса КП. Из рисунка видно, что величина смещения  $\Delta_e$  формируется главным образом  $I_+$ -фононами, тогда как вклады ограниченных ( $L$ ) и  $I_-$ -фононов очень малы. С уменьшением радиуса КП парциальный вклад  $L_0$ -фононов слабо уменьшается, а  $I_+$ -фононов — резко увеличивается. При этом значительно возрастает роль  $I_+$ -многофононных процессов. Последнее обстоятельство понятно из физических соображений. Действительно, при уменьшении радиуса КП из-за конечной высоты потенциального барьера электрон все больше проникает из  $\beta$ -HgS в  $\beta$ -CdS, так что вероятность его пребывания на границе раздела сред увеличивается (рис. 3). Это вызывает увеличение силы



**Рис. 3.** Распределение плотности вероятности пребывания электрона в квантовой проволоке. Размеры квантовых проволок  $R/a_0$ : 1 — 5, 2 — 10, 3 — 20.



**Рис. 4.** Зависимости от радиуса квантовой проволоки ширины запрещенной зоны системы  $\beta$ -HgS/CdS. Расчет выполнен: 1 — без учета взаимодействия с фононами ( $E_g$ ), 2 — с его учетом ( $\tilde{E}_g$ ).

связи электрона с полем  $I_+$ -фононов, а значит, увеличивает роль многофононных процессов в формировании смещения электронного уровня.

Аналогично выполнялся расчет смещения основного уровня дырки,

$$\Delta_h = \tilde{E}_h - E_h.$$

В результате найдена зависимость от радиуса КП ширины запрещенной зоны наногетеросистемы  $\beta$ -HgS/CdS без учета взаимодействия электрона и дырки с фононами:

$$E_g = E_{g0} + V_{0e} + V_{0h} + E_{0e} + E_{0h}$$

и с учетом этого взаимодействия:

$$\tilde{E}_g = E_g + \Delta_e + \Delta_h.$$

Расчитанные зависимости приведены на рис. 4, из которого видно, что взаимодействие с фононами качественно не изменяет того, что с уменьшением радиуса КП ширина запрещенной зоны увеличивается. Однако за счет сильного взаимодействия электрона и дырки с  $I_+$ -фононами величина  $\tilde{E}_g$  значительно отличается от  $E_g$  (от десятков мэВ при  $R \cong 25a_0$  до сотни мэВ при  $R \cong 5a_0$ ), что должно существенно сказываться при сравнении этого расчета с экспериментальными данными.

Таким образом, главный вывод работы состоит в том, что конечный скачок потенциала на границе квантовой проволоки приводит к сильному взаимодействию

электрона и дырки с  $I_+$ -фононами, что сказывается на значительном уменьшении ширины запрещенной зоны в квантовой проволоке из  $\beta$ -HgS в среде  $\beta$ -CdS.

## Список литературы

- [1] X.F. Wang, X.L. Lei. Phys. St. Sol. (b), **175**, 433 (1993).
- [2] K. Huang, B. Zhu. Phys. Rev. B, **38**, 13 377 (1988).
- [3] B.F. Zhu. Phys. Rev. B, **46**, 13 619 (1992).
- [4] R. Fuchs, K.L. Kliwer. Phys. Rev. A, **140**, 2076 (1965).
- [5] X.F. Wang, X.L. Lei. Phys. Rev. B, **49**, 4780 (1994).
- [6] А.С. Давыдов. *Теория твердого тела* (М., Наука, 1976).
- [7] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М., Физматгиз, 1962).
- [8] Н.В. Ткач. Теорет. и мат. физика, **61**, 400 (1984).

Редактор Т.А. Полянская

## The spectrum and electron-phonon interaction in the medium with a cylindrical quantum wire

N.V. Tkach, V.P. Zharkoy

The Chernovtsy State University,  
274012 Chernovtsy, Ukraine

**Abstract** The influence of many-phonon processes on the electron (hole) spectrum in nanoheterosystem  $\beta$ -HgS/CdS (a cylindrical quantum wire embedded into massive medium) is studied within the dielectric continuum model. The Hamiltonian of the electron-phonon interaction is obtained for the model of a finite potential well. The shift of the electron (hole) energy level due to its interaction with optical longitudinal (confined) and interface phonons is found. The forbidden gap width dependence of  $\beta$ -HgS/CdS nanosystem on the quantum wire radius is obtained. The primary role of interface phonons in re-normalizing the electron hole spectrum in the quantum wire of small transverse sizes is established.