Б. Эшпулатов*, Э. У. Арзикулов**

ПИННИНГОВАЯ СТРУКТУРА РАЗМЕРНО-ФОНОННОГО РЕЗОНАНСА В КВАНТОВЫХ НИТКАХ

*Самаркандский филиал Ташкентского университета информационных технологий, ул. Шохрух мирзо, 47А, Самарканд, 140104, Республика Узбекистан, eshkuvat@samdu.uz
**Самаркандский государственный университет им. А. Навои, Университетский бульвар, 15, г. Самарканд, 140104, Республика Узбекистан

Введение

Оптические методы на протяжении последних десятилетий широко используются при исследовании электронных свойств систем пониженной размерности [1–2].

В связи с этим представляется актуальным исследование влияния оптических фононов на свойства электронов в квантованных полупроводниковых нитках в случае, когда электрон-фононное взаимодействие сильно искажает частотную зависимость поглощения. Одним из таких эффектов является размерно-фононный резонанс [3-4], при котором поглощение света обусловлено переходами электрона между размерно-квантованными уровнями в квантованных полупроводниковых нитках с участием LO-фонона.

Если разность энергии между размерно-квантованными уровнями, участвующими в оптическом переходе, близка к энергии оптического LO-фонона, то возникает резонансная связь между размерно-квантованными уровнями, которая может привести к пиннинговым эффектам [4].

В настоящей работе развивается теория формы линии размерно-фононного резонанса в размерно-квантованных полупроводниковых нитках при выполнении указанных выше условий.

Постановка задачи и основные соотношения

Ниже рассматриваются размерно-квантованные нитки с длиной L и площадью поперечного сечения $a \times d$, где a – ширина вдоль оси Y, d – ширина вдоль оси Z. Полупроводник предполагается кубической сингонии, закон дисперсии электронов - параболическим. Температура и концентрация электронов предполагаются достаточно низкими, так что заселен только нижний размерно-квантованный уровень, а оптические LO-фононы не возбуждены.

В рассматриваемом приближении волновая функция и энергия электрона имеют вид

$$\Psi(x,y,z)=\left(\frac{4}{adL}\right)^{1/2} e^{ik_x x}\sin\left(\frac{\pi n}{a}y\right)\sin\left(\frac{\pi m}{d}z\right), \tag{1}$$

$$\mathrm{E}_\gamma(n,m,k_x)=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m^*a^2}n_\gamma^2+\frac{\pi^2\hbar^2}{2m^*d^2}m_\gamma^2+\frac{\hbar^2k_{x\gamma}^2}{2m^*}=\hbar\omega_\gamma\,, \tag{2}$$

где m^* – эффективная масса электрона; m и n – целое число, нумерующее уровни размерного квантования в состоянии γ; k_x – непрерывное квантовое число.

Взаимодействие электрона в размерно-квантованной полупроводниковой пленке с объемными LO-фононами описывается гамильтонианом

$$H_{\text{int}}=\sum_{\alpha\alpha'\vec{q}}\left[C_{\vec{q}}I_{\alpha\alpha'}(\vec{q})\cdot b_{\vec{q}}+э.с.\right]\cdot a_\alpha^+a_{\alpha'}\ ; \tag{3}$$

$$C_{\vec{q}}=-i(\hbar\omega_0)\left[4\pi\alpha_0 l_0^3/V\right]^{1/2}(l_0q)^{-1},\, l_0=\hbar/\left(2m^*\omega_0\right)^{1/2}; \tag{4}$$

$$I_{\alpha\alpha'}(\vec{q})=\delta(k_{x\alpha'}-k_{x\alpha}+q_x)C_{\alpha\alpha'}(q_y)C_{\alpha\alpha'}(q_z)\,. \tag{5}$$

Здесь ω_0 – частота оптического LO-фонона, $k_{x\alpha}$ – одномерный волновой вектор электрона (вдоль длины нитки) в состоянии α, q_x, q_y, q_z – проекции волнового вектора фонона $\vec{q}$ на оси *OX, OУ* и *OZ* соответственно, $b^{+}_{\vec{q}}, b_{\vec{q}}, a^{+}_{\alpha}, a_{\alpha'}$ – фононные и электронные операторы рождения и уничтожения; α_0 – безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия. $C_{\alpha\alpha'}(q)$ приведены в работе [5] и из-за громоздкости выражение не приводятся.

Для расчета поглощения воспользуемся методом, развитым в [6]. В случае, когда электромагнитная волна *S*–поляризации нормально падает (из области $z < 0$ в область $z > 0$, плоскость падения *OXZ*) на нитку, то для функции $\alpha(\omega,0)$, определяющей частотную зависимость поглощения, получим

$$\alpha(\omega,0)=\frac{8\pi e^2}{\sqrt{\varepsilon_\infty}\,m_0^2 caL\hbar^2}\sum_{\substack{\alpha\gamma\\ \delta\vec{q}}}\left|N_{\alpha\gamma}\right|^2 \mathrm{Re}\frac{-in_\gamma\left|C_{\vec{q}}\right|^2\left|I_{\alpha\delta}(\vec{q})\right|^2}{\omega_{\alpha\gamma}(\omega_{\alpha\gamma}+\omega_0)\left[S+i(\omega_{\delta\gamma}+\omega_0)\right]}\ ; \tag{6}$$

$$\left|N_{\alpha\gamma}\right|^2=\frac{32n_\alpha^2 n_\gamma^2}{(n_\alpha^2-n_\gamma^2)^2}\left[1-(-1)^{n_\alpha+n_\gamma}\right],\quad S=-i\omega+\sigma,\ \ \sigma\to+0\,. \tag{7}$$

Здесь ω, c – частота и скорость света в вакууме, m_0 – масса свободного электрона, ε_∞ – высокочастотная диэлектрическая постоянная полупроводника, n_γ – функция распределения электронов в состоянии γ. При выводе (6) учитывался простейший график* (рис. 1).

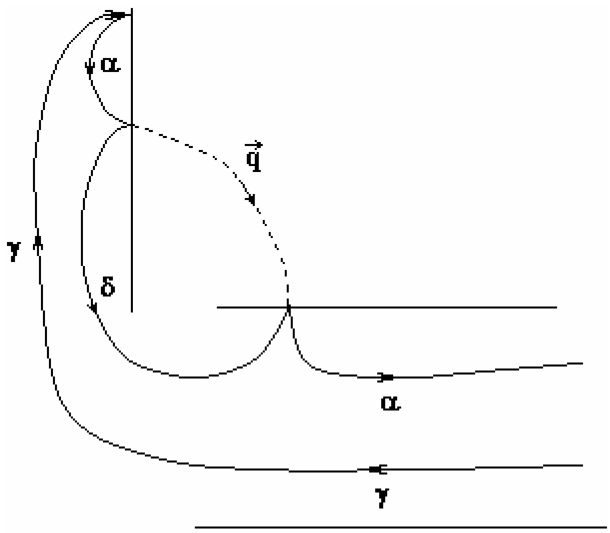

Рис.1. Простейший график угловой части, ответственный за размерно-фононное поглощение

Размерно-фононный резонанс

Рассмотрим поглощение электромагнитной волны, обусловленное переходами электрона в одномерную зону с $n = 2$ с одновременным испусканием LO-фонона, полагая, что $m = n_\gamma = 1$.

Переходя в (6) от суммирования по $\vec{q}$ к интегрированию и интегрируя по q_y и q_z, получим

$$\frac{\alpha(\omega,0)}{\alpha(0)}=\int_0^\infty n_1(t)dt\int_0^\infty du\ln\left[t^2-2tu+u^2\right]\delta(\varGamma+t^2-u^2)\,, \tag{8}$$

$$\alpha(0)=\frac{512\eta}{9\sqrt{\varepsilon_\infty}}\cdot\frac{e^2}{\hbar c}\frac{m^{*2}\omega_0^2}{m_0^2\Omega(\Omega+\omega_0)}\,,\ \Omega=\frac{3\hbar\pi^2}{2m^* a^2}\,, \tag{9}$$

$$\varGamma=\frac{\left[\omega-\omega_0-\Omega\right]}{\omega_0}. \tag{10}$$

При низких температурах $n_1(t)$ можно заменить ступенькой $n_1(t)=\theta(E_F-E_1-\hbar\omega_0 t^2)$, где

* Здесь и в дальнейшем используются терминология и графическая техника, изложенная в [7].

$\theta(x)$ – функция Хевисайда, а $E_F - E_0 = \dfrac{\hbar^2\pi^2 N_0^2}{32m^*}$.

Таким образом, интеграл (8) обрезается на $t_0 = \left[\dfrac{\hbar\pi^2 N_0^2}{32m^*\omega_0}\right]^{1/2}$, так что

$$\frac{\alpha(\omega,0)}{\alpha(0)} = \int_0^{t_0} \frac{dt}{\sqrt{\Gamma + t^2}} ln\left[\Gamma + 2t^2 - 2t\sqrt{\Gamma + t^2}\right],\ \Gamma > 0\,, \tag{11}$$

$$\frac{\alpha(\omega,0)}{\alpha(0)} = \int_{\sqrt{|\Gamma|}}^{t_0} \frac{2dt}{\sqrt{t^2 - |\Gamma|}} ln\left[t - t\sqrt{1 - \frac{|\Gamma|}{t^2}}\right], \Gamma < 0\,, \tag{12}$$

$\alpha(\omega,0) = 0$, если $\sqrt{|\Gamma|} \ge t_0$. Используя асимптотическое разложение, подынтегральным выражением можно показать, что при $\Gamma \to 0$ поглощение содержит логарифмическую сингулярность, то есть

$$\frac{\alpha(\omega,0)}{\alpha(0)} \sim ln|\Gamma|\,. \tag{13}$$

Если $\Gamma >> t^2$, то, как это следует из (11),

$$\frac{\alpha(\omega,0)}{\alpha(0)} \cong \frac{t_0}{\Gamma}\,. \tag{14}$$

Резонансное электрон-фононное взаимодействие

Предположим, что $E_2 - E_1 \approx \hbar\omega_0$, а $\omega = 2\omega_0$. Тогда энергия электромагнитной волны расходуется переброcом электрона на верхний уровень и рождением LO-фонона. Поскольку расстояние между уровнями равно энергии фонона, то возникает резонансная связь между уровнями вследствие реального перехода электрона на нижний уровень с испусканием фонона. Это взаимодействие снимает вырождение уровней электрон-фононной системы (уровень n = 2 и уровень n = 1 плюс фонон), что ведет к появлению двух ветвей спектра. В этом случае простейший график (рис. 1), как видно из (13), логарифмически расходится на частоте $\omega = 2\omega_0$, что означает расходимости графиков более высокого порядка для угловой части. Суммирование ряда теории возмущений по электрон-фононному взаимодействию приводит, как обычно, к замене величины

$$\left[S + i(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0)\right] \text{ на } \left[S + i(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0) - W\right].$$

Как показано в [4], “уходные” члены кинетического уравнения малы, и поэтому их можно не учитывать.

а) Анализ ряда теории возмущений для функции W.

Функция W, определяющая поведение поглощения в области резонанса, представляется суммой неприводимых графиков, в которых фононные линии расположены на верхнем горизонтальном участке слева от внешней фононной линии (рис. 1).

В случае $\omega = 2\omega_0$ достаточно ограничиться простейшим графиком (рис.2,*а*).

Рис.2. Графики, перенормирующие верхнюю электронную линию в угловой части

Ему соответствует

$$W_a = \sum_{\delta_1,\vec{q}_1} \frac{(i\hbar)^{-2}\left|C_{\vec{q}_1}\right|^2 \left|I_{\delta\delta_1}(\vec{q}_1)\right|^2}{S + i(\omega_{\delta_1\gamma} + 2\omega_0)}. \tag{15}$$

Используя выражение для матричного элемента, получим

$$W_a = -\frac{i\alpha_0\omega_0}{2\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\vartheta \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{\left|C_{21}(y)\right|^2 \left|C_{11}(x)\right|^2}{(u^2 - 2u\vartheta + \vartheta^2 + x^2 + y^2)} \left[\Gamma + \lambda + t^2 - \vartheta^2 + i\delta\right]^{-1}, \qquad (16)$$

где $\lambda = \dfrac{\left[\Omega - \omega_0\right]}{\omega_0}$.

При вычислении интеграла по ϑ в (16) можно с точностью до членов порядка $\alpha_0^{1/3}$ пренебречь в множителе $(u^2 - 2u\vartheta + \vartheta^2 + x^2 + y^2)$ зависимостью от u и ϑ, после чего интеграл легко вычисляется и

$$W_a = -\frac{4\alpha_0\omega_0}{3}\left[\Gamma + \lambda + t^2\right]^{-1/2}. \qquad (17)$$

б) Частотная зависимость поглощения.

Для получения частотной зависимости поглощения следует вместо $\left\lfloor S + i(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0)\right\rfloor$ в (6) подставить $\left\lfloor S + i(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0) - W\right\rfloor$. В результате получим

$$\frac{\alpha(\omega,0)}{\alpha(0)} = \begin{cases} \pi \Big/ \sqrt{f_1(\Gamma)(\Gamma + \eta^{2/3})} & \textit{при} \ \ -\eta^{2/3} \le \Gamma \le 0; \\ 0 & \textit{при} \ \ \Gamma \le -\eta^{2/3}; \\ \dfrac{\pi \ \ f_2(\Gamma)}{\left\{\left(\Gamma - \dfrac{\eta^{2/3}}{2}\right)^2 + \dfrac{3}{4}\eta^{4/3}\right\}^{1/2}} & \textit{при} \ \ \Gamma > 0, \end{cases} \qquad (18)$$

где $\eta = \dfrac{4\alpha_0}{3}$, $f_1(\Gamma) = \dfrac{\Gamma^2 - \eta^{2/3}\Gamma + \eta^{4/3}}{\Gamma^2 + \eta\sqrt{-\Gamma}}$, $f_2(\Gamma) = \left(\dfrac{\sqrt{\Gamma^4 + \eta^2\Gamma + \Gamma^2}}{2\left(\Gamma + \eta^{2/3}\right)}\right)^{1/2}$. (19)

Из приведенных формул видно, что линия размерно-фононного резонанса расщепляется на два максимума, расположенных в точках $\Gamma_1 = -\eta^{2/3}$ и $\Gamma_2 = \dfrac{1}{2}\eta^{2/3}$, как в случае магнитооптического поглощения в объемном полупроводнике [8].

Эти два максимумы соответствуют двум ветвям спектра электрон-фононной системы. Спектр определяется уравнением [8]:

$$\varepsilon + \frac{i\eta}{\sqrt{\varepsilon + \lambda}} = 0,$$

которое получено приравниванием нулю знаменателя $\left\lfloor S + i(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0) - W\right\rfloor$ и заменой W на W_a.

Развитая выше теория предсказывает расщепление пика размерно-фононного резонанса в области частот $\omega = 2\omega_0$ на две компоненты, расстояние между которыми определяется резонансным электрон-фононным взаимодействием.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Hang H., Koch S.W.* Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors. World Scientific. 1993.

2. *Воробьев Л.Е., Ивченко Е.Л., Фирсов Д.А., Шалыгин В.А.* Оптические свойства наноструктур. Спб., Наука, 2002.

3. *Басс Ф., Матулис А.Ю.* Размерно-фононные скачки поглощения света в полупроводниковых пленках // ФТТ. 1970. Т.12. С. 2039–2043.

4. *Коровин Л.И., Эшпултов Б.Э.* Пиннинговая структура размерно-фононного резонанса в инверсионных слоях // ФТТ. 1981. Т. 23. № 10. С. 3056–3062.
5. *Ridley B.K.* Quantum Processes in Semiconductors. Second edition. Oxford. Clarendon. 1988.
6. *Коровин Л.И., Эшпултов Б.Э.* Межзонное магнитооптическое поглощение приповерхностным слоем полупроводника // ФТТ. 1979. Т. 21. С. 3703–3712.
7. *Константинов О.В., Перель В.И.* Графическая техника для вычисления кинетических величин // ЖЭТФ. 1960. Т. 39. С. 197–210.
8. *Коровин Л. И., Павлов С. Т.* О влиянии оптических фононов на межзонное магнитооптическое поглощение в полупроводниках // ЖЭТФ. 1967. 53. С. 1708–1718.

Поступила 21.11.07

Summary

The dimensionally-phonon resonances in dimensionally-quantum semiconductor wires are considered. It is supposed, that the absorption of light is caused by transitions electron between dimensionally-quantum sub bands in potential well with participation is long-wavelength phonon. The influence resonant electron-phonon of interaction on a spectrum one-dimensional electron in quantum wires is investigated. Is shown, that the spectrum contains two branches, and also the splitting of peak dimensionally-phonon resonance on two components, distance between is determined by resonant electron-phonon interaction.