

ФОНОННИ ТА ПОЛЯРОННИ СТАНИ ЦИЛІНДРИЧНИХ ДРОТІВ ZnO/GaN ТА GaN/AlN

В.І. БОЙЧУК, Л.Я. ВОРОНЯК, Я.М. ВОРОНЯК

Кафедра теоретичної фізики Дрогобицького державного педагогічного університету ім. Івана Франка

(Вул. Стрийська, 3, Дрогобич 82100; e-mail: voronyak.lyubov@gmail.com)

УДК 541.183
© 2011

Для циліндричних квантових дротів (КД) кристалів гексагональної симетрії ZnO та GaN визначено залежності енергії поляризаційних фононів від хвильового вектора, а також енергії та ефективну масу полярона від радіуса КД (R). Показано, що основний внесок у основні параметри полярона (енергію та ефективну масу) задають квазіпоздовжні та інтерфейсні фононні моди. Встановлено, що в області $R > 15$ нм внесок квазіпоздовжніх фононів є основним. Проведено порівняння енергії полярона КД для кристалів кубічної та гексагональної симетрії.

чках, що виготовлені з оптично ізотропних матеріалів [14–17]. Однак, за останні роки такі анізотропні матеріали, як ZnO, GaN, AlN, та InN викликають велике зацікавлення дослідників внаслідок їхньої перспективності для електроніки [18–24]. Зокрема, використовуючи МДК, в багатьох роботах теоретично проаналізовано властивості оптичних фононів та їхньої взаємодії з електроном провідності в різних гетероструктурах кристалів типу вюрциту з плоскими межами поділу [18, 22, 23]. Значно менше дослідженими як експериментально, так і теоретично є фононні та поляронні стани у квантових дротах та квантових точках анізотропних кристалів [19–21, 24].

1. Вступ

Загальний розвиток напівпровідникових нанотехнологій за останні два десятиліття дає можливість зробити висновки про важливість взаємодії електронів з оптичними фононами в низькорозмірних системах. У таких системах електрон-фононна взаємодія може суттєво впливати на фізичні властивості електрона. Зокрема, на величину розсіяння електронів, енергетичні втрати гарячих електронів, поляронні ефекти і таке інше [1–10]. Ця взаємодія, яка називається фрьоліховською, в основному досліджується в рамках моделі діелектричного континууму (МДК). Використання МДК полягає в тому, що в рамках цієї моделі можна отримувати вирази для досліджуваних параметрів у відносно простих аналітичних формах. Крім того, результати, що одержані в рамках МДК, досить добре узгоджуються з експериментальними даними [1, 8, 11–14].

Спочатку взаємодію електрона з оптичними фононами було детально досліджено у квазідвовимірних гетеросистемах, квантових дротах і квантових то-

Запропонована робота присвячена теоретичному вивченню фононних та поляронних станів у квантових дротах анізотропних кристалів ZnO та GaN у гетероструктурах ZnO/GaN та GaN/AlN.

2. Постановка задачі та її розв'язок

Розглядається наногетероструктура, що складається з циліндричного квантового дроту радіуса R в напівпровідниковій матриці кристалів із структурою вюрциту. Направимо вісь OZ вздовж осі дроту, яка збігається з оптичною віссю кристалів c (рис. 1).

Електрон-фононна система в наближенні ефективної маси та діелектричного континууму описується гамільтоніаном:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{e-ph}. \quad (1)$$

Гамільтоніан електронної підсистеми \hat{H}_e запишемо в координатному зображенні, використовуючи цилін-

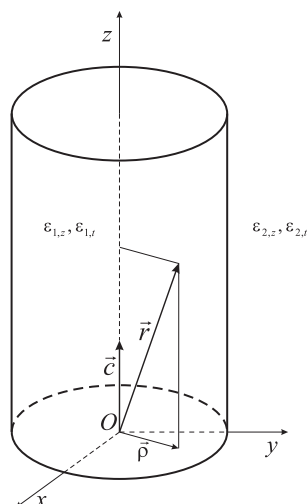


Рис. 1. Геометрична схема циліндричного квантового дроту у напівпровідниковій матриці

дичну систему координат

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{m_t(\rho)} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{m_z(\rho)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\rho), \quad (2)$$

де

$$m_{z(t)}(\rho) = \begin{cases} m_{1,z(t)}, & 0 \leq \rho < R, \\ m_{2,z(t)}, & R \leq \rho < \infty \end{cases} \quad (3)$$

– аксіальна ($m_{i,z}$) і радіальна ($m_{i,t}$) ефективні маси електрона,

$$V(\rho) = \begin{cases} -V, & 0 \leq \rho < R, \\ 0, & R \leq \rho < \infty, \end{cases} \quad V = U_1 - U_2 \quad (4)$$

– потенціал циліндричної квантової ями. U_i – потенціальна енергія електрона у масивному середовищі відносно вакууму. Індеси 1, 2 відповідають внутрішньому і зовнішньому середовищам гетеросистеми відповідно. Власні функції і власні значення оператора Гамільтона електрона мають вигляд

$$\Psi_{N,M,k}(\rho, \varphi, z) = \frac{A_{N,M}}{\sqrt{2\pi L}} \phi_{N,M}(\rho) e^{ikz+iM\varphi}, \quad (5)$$

$$\phi_{N,M}(\rho) = \begin{cases} J_{|M|}(\kappa_{1,N,M}\rho), & 0 \leq \rho < R, \\ \frac{J_{|M|}(\kappa_{1,N,M}R)}{K_{|M|}(\kappa_{2,N,M}R)} K_{|M|}(\kappa_{2,N,M}\rho), & R \leq \rho < \infty, \end{cases} \quad (6)$$

$$\kappa_{2,N,M} = \sqrt{\frac{2m_{2,t}V}{\hbar^2} - \frac{m_{2,t}\kappa_{1,N,M}^2}{m_{1,t}}}, \quad (7)$$

$$|A_{N,M}|^2 = -2 / \left(R^2 \left(J_{|M|-1}(\kappa_{1,N,M}R) J_{|M|+1}(\kappa_{1,N,M}R) - \frac{J_{|M|}(\kappa_{1,N,M}R)^2 K_{|M|-1}(\kappa_{2,N,M}R) K_{|M|+1}(\kappa_{2,N,M}R)}{K_{|M|}(\kappa_{2,N,M}R)^2} \right) \right), \quad (8)$$

$$E_{N,M}(k) = -V + \frac{\hbar^2 \kappa_{1,N,M}^2}{2m_{1,t}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{1,z}}, \quad (9)$$

k – аксіальна компонента хвильового вектора електрона, $\kappa_{1,N,M}$ – корені дисперсійного рівняння

$$\frac{\kappa_1 (J_{|M|-1}(\kappa_1 R) - J_{|M|+1}(\kappa_1 R))}{m_{1,t} J_{|M|}(\kappa_1 R)} = \frac{\kappa_2 (-K_{|M|-1}(\kappa_2 R) - K_{|M|+1}(\kappa_2 R))}{m_{2,t} K_{|M|}(\kappa_2 R)}. \quad (10)$$

$N = 1, 2, \dots, N_{\max}(R)$ – радіальне, $M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M_{\max}(R)$ – магнітне квантове число, $J_M(x)$ – циліндричні функції Бесселя, $K_M(x)$ – модифіковані функції Бесселя. Гамільтоніан фононної підсистеми \hat{H}_{ph} запишемо в зображенні чисел заповнення за фононними змінними

$$\hat{H}_{ph} = \sum_s \hat{H}_s = \sum_s \sum_{m_s, n_s, q} \hbar \omega_{s, m_s, n_s}(q) \left(b_{s, m_s, n_s, q}^+ b_{s, m_s, n_s, q} + \frac{1}{2} \right), \quad (11)$$

де $b_{s, m_s, n_s, q}^+$ ($b_{s, m_s, n_s, q}$) – оператор народження (знищення) поляризаційного фонона вітки (s, m_s, n_s, q). Індекс s відповідає типу поляризаційних фононів, $n_s = 1, 2, \dots, m_s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – радіальне і магнітне квантове число відповідно, q – аксіальна компонента хвильового вектора. Спектр поляризаційних фононів $\hbar \omega_{s, m_s, n_s}(q)$ визначається із дисперсійного рівняння

$$\left(\frac{\gamma_1 \varepsilon_{1,t}}{\gamma_2 \varepsilon_{2,t}} - \frac{Z_{1,s,|m|}(\gamma_1 q R) Z'_{2,s,|m|}(\gamma_2 q R)}{Z_{2,s,|m|}(\gamma_2 q R) Z'_{1,s,|m|}(\gamma_1 q R)} \right) = 0, \quad (12)$$

де

$$Z'_{i,s,|m|}(x) = \frac{d}{dx} Z_{i,s,|m|}(x), \quad \gamma_i = \sqrt{\left| \frac{\varepsilon_{i,z}(\omega)}{\varepsilon_{i,t}(\omega)} \right|}.$$

$$\varepsilon_{i,z}(\omega) = \varepsilon_{i,z,\infty} \frac{(\omega_{\text{LOz},i}^2 - \omega^2)}{\omega_{\text{TOz},i}^2 - \omega^2},$$

$$\varepsilon_{i,t}(\omega) = \varepsilon_{i,t,\infty} \frac{(\omega_{\text{LOt},i}^2 - \omega^2)}{\omega_{\text{TOt},i}^2 - \omega^2} \quad (13)$$

– аксіальна і радіальна компоненти тензора діелектричної проникності внутрішнього (квантового дроту, $i = 1$) і зовнішнього (матриці, $i = 2$) середовища.

Функції $Z_{i,s,|m|}$ виражаються через функції Бесселя $J_M(x)$, Неймана $Y_M(x)$, модифіковані функції Бесселя першого $I_M(x)$ та другого $K_M(x)$ роду і мають вигляд

$$Z_{1,\text{IO},|m|}(x) = I_{|m|}(x), \quad Z_{2,\text{IO},|m|}(x) = K_{|m|}(x),$$

$$Z_{1,\text{QC},|m|}(x) = J_{|m|}(x), \quad Z_{2,\text{QC},|m|}(x) = K_{|m|}(x),$$

$$Z_{1,\text{EC},|m|}(x) = J_{|m|}(x), \quad Z_{2,\text{EC},|m|}(x) = 0,$$

$$Z_{1,\text{HSL},|m|}(x) = I_{|m|}(x),$$

$$Z_{2,\text{HSL},|m|}(x) = J_{|m|}(x) - \frac{J_{|m|}(qz R_\infty \gamma_1)}{Y_{|m|}(qz R_\infty \gamma_2)} Y_{|m|}(x) \quad (14)$$

для інтерфейсних (межових, IO), обмежених (QC), строго обмежених (EC) та напівобмежених (HSL) фонових, відповідно. $R_\infty \gg R$ – радіус діелектричної матриці.

У досліджуваних наногетероструктурах вюрцитних напівпровідників існує по дві гілки IO-, QC- та HSL-фонових, частоти яких лежать в інтервалах:

IO-фони:

$$\varepsilon_{1,z}(\omega)\varepsilon_{1,t}(\omega) > 0, \quad \varepsilon_{2,z}(\omega)\varepsilon_{2,t}(\omega) > 0, \quad \varepsilon_{1,t}(\omega) > 0,$$

$$\varepsilon_{2,t}(\omega) < 0, \quad \omega_{\text{TOt},1} < \omega < \omega_{\text{TOz},2}$$

– квазіпоперечні фони (IOT),

$$\varepsilon_{1,z}(\omega)\varepsilon_{1,t}(\omega) > 0, \quad \varepsilon_{2,z}(\omega)\varepsilon_{2,t}(\omega) > 0, \quad \varepsilon_{1,t}(\omega) < 0,$$

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2011. Т. 56, №5

$$\varepsilon_{2,t}(\omega) > 0, \quad \omega_{\text{LOt},1} < \omega < \omega_{\text{LOz},2}$$

– квазіпоздовжні фони (IOL). Спектр IO фонових не залежить від радіального квантового числа, тому надалі вважатимемо, що $n_{\text{IO}} = 1$.

QC-фони:

$$\varepsilon_{1,z}(\omega)\varepsilon_{1,t}(\omega) < 0, \quad \varepsilon_{2,z}(\omega)\varepsilon_{2,t}(\omega) > 0, \quad \varepsilon_{1,t}(\omega) > 0,$$

$$\omega_{\text{TOz},1} < \omega < \omega_{\text{TOt},1}$$

– квазіпоперечні фони (QCT),

$$\varepsilon_{1,z}(\omega)\varepsilon_{1,t}(\omega) < 0, \quad \varepsilon_{2,z}(\omega)\varepsilon_{2,t}(\omega) > 0, \quad \varepsilon_{1,z}(\omega) > 0,$$

$$\omega_{\text{LOz},1} < \omega < \omega_{\text{LOt},1}$$

– квазіпоздовжні фони (QCL).

HSL-фони:

$$\varepsilon_{1,z}(\omega)\varepsilon_{1,t}(\omega) > 0, \quad \varepsilon_{2,z}(\omega)\varepsilon_{2,t}(\omega) < 0, \quad \varepsilon_{2,t}(\omega) > 0,$$

$$\omega_{\text{TOz},2} < \omega < \omega_{\text{TOt},2}$$

– квазіпоперечні фони (HSLT),

$$\varepsilon_{1,z}(\omega)\varepsilon_{1,t}(\omega) > 0, \quad \varepsilon_{2,z}(\omega)\varepsilon_{2,t}(\omega) < 0, \quad \varepsilon_{2,z}(\omega) > 0,$$

$$\omega_{\text{LOz},2} < \omega < \omega_{\text{LOt},2}$$

– квазіпоздовжні фони (HSLL).

Частота EC фонових визначається із умови:

$$\varepsilon_{1,t}(\omega) = 0, \quad \omega = \omega_{\text{LOt},1}.$$

Взаємодія електрона з поляризаційними фонанами описується гамільтоніаном вигляду

$$\hat{H}_{e\text{-ph}} = - \sum_s \sum_{m_s, n_s, q} \Gamma_{s, m_s, n_s}(q) \times \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi L}} Z_{s, m_s}(\rho) e^{iqz} e^{im_s \varphi} b_{s, m_s, n_s, q} + \text{h.c.} \right), \quad (15)$$

де

$$\Gamma_{s, m_s, n_s}(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sqrt{\frac{\hbar e^2}{2\varepsilon_0 \omega}} \times \left(\int_0^R F_{1, s, m_s}(\rho) \rho d\rho + B_{s, m_s}^2 \int_R^\infty F_{2, s, m_s}(\rho) \rho d\rho \right)^{-2}, \quad (16)$$

$$Z_{s,m_s}(\rho) = \begin{cases} Z_{1,s,m_s}(\gamma_1 q \rho), & 0 \leq \rho < R, \\ B_{s,m_s} Z_{2,s,m_s}(\gamma_2 q \rho), & R \leq \rho < \infty, \end{cases} \quad (17)$$

$$B_{s,m_s} = \frac{Z_{1,s,m_s}(\gamma_1 q R)}{Z_{2,s,m_s}(\gamma_2 q R)}, \quad (18)$$

$$F_{i,s,m_s}(\rho) = \left(\left(\frac{m_s^2}{g_{i,t}^2 \rho^2} + \frac{q^2}{g_{i,z}^2} \right) Z_{i,s,m_s}^2(\gamma_i q \rho) + \frac{\gamma_i^2 q^2 (Z'_{i,s,m_s}(\gamma_i q \rho))^2}{g_{i,t}^2} \right), \quad (19)$$

$$g_{i,t} = \sqrt{\frac{(\omega^2 - \omega_{\text{TO},i}^2)^2}{\varepsilon_{i,t,\infty}(\omega_{\text{LO},i}^2 - \omega_{\text{TO},i}^2)}}, \quad (20)$$

$$g_{i,z} = \sqrt{\frac{(\omega^2 - \omega_{\text{TO},i}^2)^2}{\varepsilon_{i,z,\infty}(\omega_{\text{LO},i}^2 - \omega_{\text{TO},i}^2)}},$$

ε_0 – діелектрична стала, $\varepsilon_{i,z,\infty}$, $\varepsilon_{i,t,\infty}$ – високочастотні аксіальна і радіальна компоненти тензора діелектричної проникності масивних кристалів.

Дослідимо перенормування енергії основного стану електрона взаємодією заряду з поляризаційними коливаннями, яка у випадку слабкого зв'язку задається

$$\Delta E_s = \sum_{N,M,n_s,q} \left(-\frac{1}{2\pi L} \frac{|G_{s,N,M,n_s}(q)|^2}{\hbar\omega_{s,M,n_s}(q) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{1,z}} + \frac{\hbar^2 \kappa_{1,N,M}^2}{2m_{1,t}} - \frac{\hbar^2 \kappa_{1,1,0}^2}{2m_{1,t}}} \right), \quad (25)$$

$$m_{\text{pol}} = \frac{m_{1,z}}{\left(1 - 4 \left(\frac{2m_{1,z}}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{2\pi L} \sum_{s,N,M,n_s,q} \frac{q^2 |G_{s,N,M,n_s}(q)|^2}{\left((q^2 + \frac{2m_{1,z}}{\hbar^2} \hbar\omega_{s,M,n_s}(q)) + \frac{m_{1,z}}{m_{1,t}} (\kappa_{1,N,M}^2 - \kappa_{1,1,0}^2) \right)^3} \right)}, \quad (26)$$

$$-\frac{G_{s,N,M,n_s}(q)}{\sqrt{2\pi L}} = \langle 1_{ph,s,M,n_s,q} | \langle \Psi_{N,-M,k-q} | H_{e-ph} | \Psi_{1,0,k} \rangle | 0_{ph} \rangle = \int_0^\infty \phi_{N,M}(\rho) \Gamma_{s,M,n_s}(q) Z_{s,M}(\rho) \phi_{1,0}(\rho) \rho d\rho. \quad (27)$$

другою поправкою теорії збурень:

$$E_{\text{pol}}(k) = E_{1,0}(k) + \sum_{N,M,s,n_s,q} \frac{|\langle 1_{ph,s,n_s,M,q} | \langle \Psi_{N,-M,k-q} | H_{e-ph} | \Psi_{1,0,k} \rangle | 0_{ph} \rangle|^2}{E_{1,0}(k) - E_{N,-M}(k) - \hbar\omega_{M,n_s}(q)}, \quad (21)$$

де $|\Psi_{1,0,k}\rangle | 0_{ph} \rangle$ – хвильова функція основного (вакуумного) стану системи, $|\Psi_{N,-M,k-q}\rangle | 1_{ph,s,n_s,M,q} \rangle$ – хвильові функції проміжних (збуджених) станів системи.

Для екстремальних значень вектора \mathbf{k} енергію $E_{\text{pol}}(\mathbf{k})$ можна розкласти в ряд і ввести ефективну масу полярона:

$$E_{\text{pol}}(k) = E_{\text{pol}}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{pol}}}, \quad (22)$$

$$\frac{1}{m_{\text{pol}}} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial k^2} E_{\text{pol}}(k) \right)_{k=0}, \quad (23)$$

$$E_{\text{pol}}(0) = E_{1,0}(0) + \Delta E_{\text{pol}}(0) = \frac{\hbar^2 \kappa_{1,1,0}^2}{2m_{1,t}} + \sum_s \Delta E_s, \quad (24)$$

3. Аналіз одержаних результатів

Конкретні обчислення енергії фононів, поляронної енергії $E_{\text{pol}}(0)$ і ефективної маси полярона проведе-

но для гетероструктур ZnO/GaN та GaN/AlN, параметри відповідних кристалів наведено у таблиці.

Енергетичний спектр поляризаційних фононів циліндричних гетеросистем ZnO/GaN та GaN/AlN по-

	$\hbar\omega_{\text{TOz}}, \text{cm}^{-1}$	$\hbar\omega_{\text{TOt}}, \text{cm}^{-1}$	$\hbar\omega_{\text{LOz}}, \text{cm}^{-1}$	$\hbar\omega_{\text{LOt}}, \text{cm}^{-1}$	ϵ_z	ϵ_t	m_z/m_0	m_t/m_0	U_i, eV
ZnO	380	413	579	591	3,78	3,7	0,27	0,27	4,77
GaN	533	561	735	743	5,29	5,29	0,2	0,2	4,1
AlN	660	673	893	916	4,68	4,68	0,4	0,4	0,6

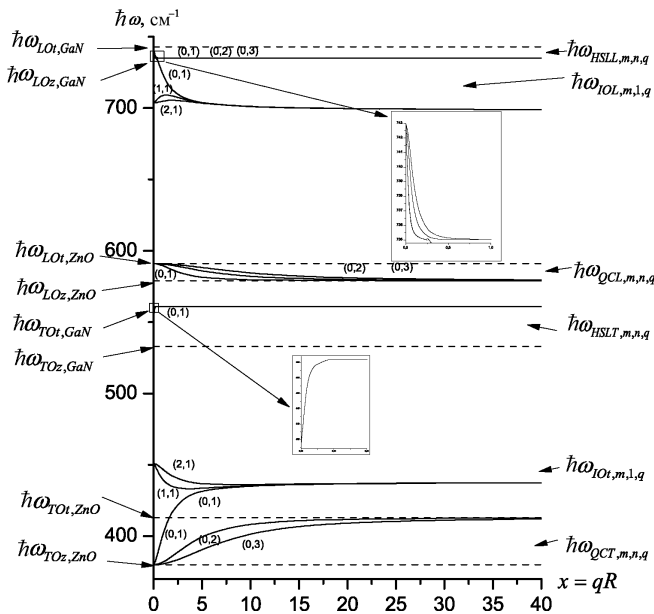


Рис. 2. Спектр поляризаційних фононів для структури ZnO/GaN

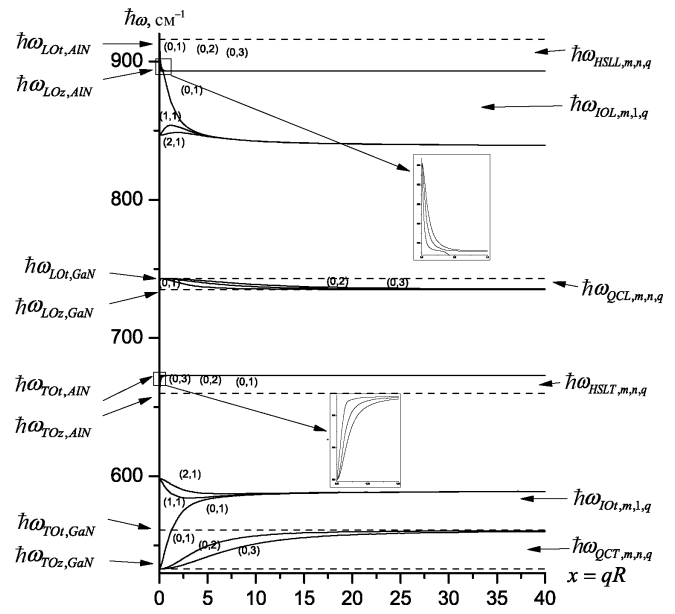


Рис. 3. Спектр поляризаційних фононів для структури GaN/AlN

дано на рис. 2 та 3. Внаслідок того, що гетероструктури утворені кристалами гексагональної симетрії стани напівобмежених ($\hbar\omega_{\text{HSLM}}$, $\hbar\omega_{\text{HSLT}}$) і обмежених ($\hbar\omega_{\text{QCL}}$, $\hbar\omega_{\text{QCT}}$) фононів в області $q > 0$ є невідродженими. Варто зазначити, що аналогічні стани гетеросистем кристалів кубічної симетрії є виродженими і для будь-якого значення хвильового вектора енергії згаданих фононів збігаються з енергіями відповідного типу фононів кристалів матриці (для напівобмежених фононів) чи дроту (для обмежених фононів) [4, 6].

Детальний аналіз $\hbar\omega_{\text{HSLM}}(q)$ та $\hbar\omega_{\text{HSLT}}(q)$ показує, що задані функції набувають різних значень при фіксованому q у невеликій області зміни хвильового вектора: $0 < qR \leq \alpha$. Як видно з рисунків, величина цієї області (α) залежить не лише від виду гетероструктури, але й від типу фононів (HSLM чи HSLT). В області $qR > \alpha$ енергія квазіпоздовжніх фононів (HSLM) практично збігається з енергією поздовжніх оптичних фононів матриці $\hbar\omega_{\text{LOz}}$, а енергія квазіпоперечних (HSLT) практично така ж, як енергія поперечних фононів матриці $\hbar\omega_{\text{TOt}}$. Обмежені поляризаційні фонони характеризуються іншою дисперсійною

залежністю. Енергія як квазіпоздовжніх (QCL), так і квазіпоперечних (QCT) фононів в усій області зміни qR залежить від m і n .

Особливістю енергетичного спектра поляризаційних фононів гетероструктур, що розглядаються, є також та, що гілка (0,1) HSLM-фононів неперервно переходить в гілку (0,1) IOL-фононів. Аналогічно гілка (0,1) QCT-фононів продовжується гілкою (0,1) IOT-фононів.

Межові (інтерфейсні) фонони (як IOL, так і IOT) характеризуються різними дисперсійними гілками (m, n), які в області великих qR ($qR > 0$) практично збігаються. Енергія цих фононів визначається енергією оптичних фононів і матриці, і КД:

$$\hbar\omega_{\text{LOz}2} \leq \hbar\omega_{\text{IOL}} < \hbar\omega_{\text{LOt}1}, \quad \hbar\omega_{\text{TOt}1} \leq \hbar\omega_{\text{IOT}} < \hbar\omega_{\text{TOz}2}.$$

У гетеросистемі квантовий дріт – матриця анізотропних кристалів існує ще один тип фононів – строго обмежені фонони (ЕС-фонони), хвильовий вектор яких дорівнює нулю, а $\hbar\omega_{\text{EC}} = \hbar\omega_{\text{LOt}1}$.

На рис. 4, 5 наведено дослідження залежності енергії зв'язку полярона $\Delta E_{\text{pol}} = E_{10}(0) - E_{\text{pol}}(0)$ ($E_{\text{pol}}(0)$ – енергія полярона при $\mathbf{k} = 0$, а $E_{10}(0)$ – енергія

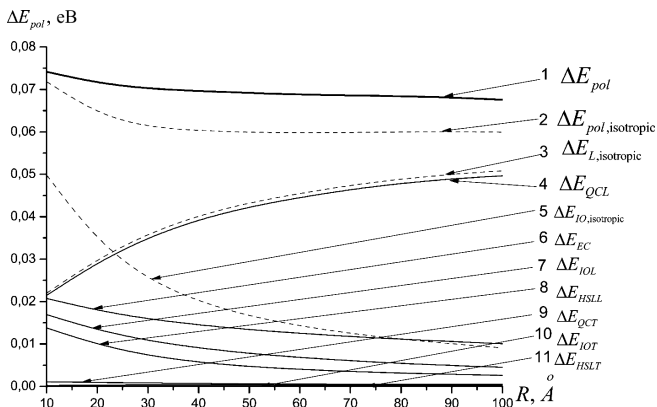


Рис. 4. Парціальні внески в енергію полярона для структури ZnO/GaN

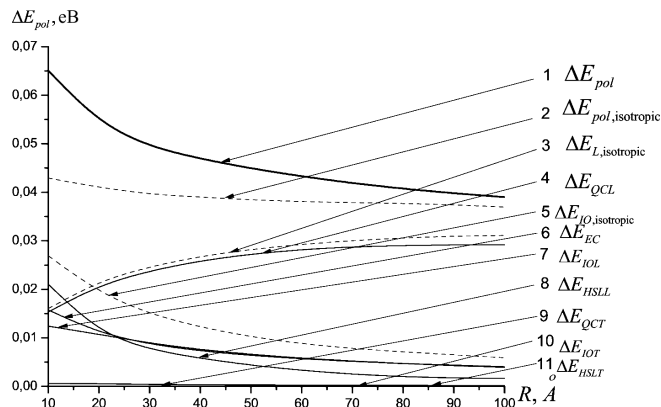


Рис. 5. Парціальні внески в енергію полярона для структури GaN/AlN

основного стану електрона) від радіуса КД гетероструктур ZnO/GaN (рис. 4) і GaN/AlN (рис. 5). Видно, що парціальний внесок у енергію полярона залежить від типу поляризаційних фононів. Зокрема, внесок квазіпоперечних фононів (QCT, IOT, HSLT) є досить малим (< 1 меВ) для всіх значень радіуса КД ($R \geq 10 \text{ \AA}$), що розглядаються. Внесок напівобмежених, межових, строго обмежених фононів в області $R \in [10 \text{ \AA}, 100 \text{ \AA}]$ змінюється від декількох до десятків міліелектронвольт. Причому зменшення R супроводжується збільшенням внеску цих фононів в енергію полярона, що пояснюється підсиленням взаємодії електрона з відповідними фононними модами. Інший характер має залежність від R парціального внеску в ΔE_{pol} обмежених фононів. Видно, що при зменшенні R ця величина (крива 4) монотонно зменшується. В результаті додавання всіх внесків в енергію зв'язку полярона отримуємо монотонне зростання ΔE_{pol} в усій області зміни R (крива 1).

На рис. 4, 5 подано також залежність енергії зв'язку полярона в КД гетероструктур ізотропних кристалів ZnO, GaN та AlN (крива 2). Параметри для цих кристалів вибирались як середні арифметичні відповідних параметрів анізотропних кристалів:

$$\omega_{\text{LO}} = \frac{1}{2}(\omega_{\text{LO}t} + \omega_{\text{LO}z});$$

$$\omega_{\text{TO}} = \frac{1}{2}(\omega_{\text{TO}t} + \omega_{\text{TO}z});$$

$$\varepsilon_{\infty} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{t,\infty} + \varepsilon_{z,\infty}).$$

Парціальні внески в енергію ΔE_{pol} межових фононів (крива 5) та обмежених фононів (крива 3) є визначальними. Внесок напівобмежених фононів є досить

малим. На графіку він не наведений. Характер залежності $\Delta E_{\text{pol}} = \Delta E(R)$ вказаних типів фононів якісно аналогічний для обох видів симетрій кристалів: внесок межових фононів зростає, а обмежених – зменшується, якщо радіус КД зменшується. В результаті додавання енергії зв'язку полярона кристалів кубічної симетрії монотонно зростає при зменшенні R . З рис. 4 видно, що різниця між енергіями ΔE_{pol} гетероструктур ZnO/GaN анізотропних та ізотропних кристалів в інтервалі малих R дорівнює приблизно ~ 2 меВ при $R = 10 \text{ \AA}$. Збільшення R супроводжується зростанням цієї різниці, яке в області $R > 100 \text{ \AA}$ практично не залежить від R . Отримане значення збігається з різницею енергії ΔE_{pol} для масивних кристалів ZnO. Для гетероструктур GaN/AlN (рис. 5) різниця між енергіями полярона із збільшенням R монотонно наближається до різниці енергій ΔE_{pol} масивних анізотропних та ізотропних кристалів GaN.

Як зазначено вище, зменшення R веде до підсилення електрон-фононної взаємодії у КД. Цей ефект видно також із залежності ефективної маси полярона від радіуса КД гетеросистеми ZnO/GaN (рис. 6). Обчислення показали, що зменшення R супроводжується збільшенням ефективної маси полярона (крива 1) і при $R = 10 \text{ \AA}$ $m_{\text{pol}} = 0,375m_0$ (m_0 – маса вільного електрона). Коли ж $R = 100 \text{ \AA}$, то маса полярона гетеросистеми практично збігається з масою полярона масивного кристала ZnO (штрихова лінія) згідно з формулою

$$m_{\text{pol}} = \frac{m_0}{1 - \alpha_0/6}, \tag{28}$$

де α_0 – константа Фр'юліха.

Отримано також, що основним в m_{pol} є внесок обмежених та інтерфейсних фононів. Якщо врахува-

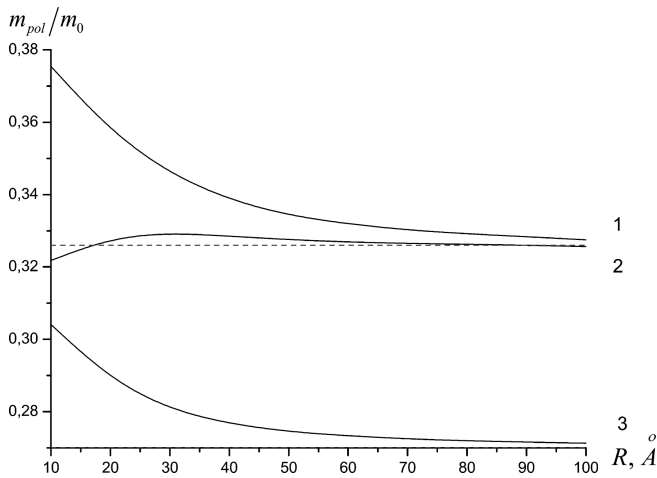


Рис. 6. Залежність ефективної маси полярона від радіуса КД для структури ZnO/GaN

ти лише обмежені та строго обмежені фонони, то залежність $m_{\text{pol}} = m_{\text{pol}}(R)$ задається кривою 2. Видно, що при $R > 60 \text{ \AA}$ вплив цих фононів на формування m_{pol} є визначальним. При врахуванні лише інтерфейсних фононів залежність ефективної маси полярона від R представляється кривою 3. Видно, що ці фонони є суттєвими при $R < 40 \text{ \AA}$.

На основі проведених обчислень можна зробити висновок, що врахування анізотропії кристалів GaN і AlN вносять поправки порівняно з моделлю кубічного кристала як в енергію поляризаційних фононів, так і в енергію поляронних станів та ефективну масу полярона. Отримані значення енергії межових, обмежених та напівобмежених фононів можна використати під час аналізу раманівських спектрів гетеросистем GaN/AlN та ZnO/GaN з квантовими дротами. Крім того, як показали обчислення, енергія зв'язку електронного полярона для моделі анізотропних напівпровідників в актуальній області радіусів КД є на 10%–15% більшою, ніж в ізотропній моделі. Аналогічний результат одержуємо для діркового полярона. Отже, врахування анізотропії уточнює енергію зонно-зонних переходів, що повинно відбиватися на енергії екситонного поглинання та люмінесценції [25, 26].

4. Висновки

Таким чином, у даній роботі проведено дослідження основного стану електронного полярона в наногетероструктурах ZnO/GaN та GaN/AlN з циліндричним КД у напівпровідниковій матриці кристалів гексагональної симетрії. При малих значеннях радіуса КД ($R < 20 \text{ \AA}$) внесок усіх фононних віток в енергію по-

лярона є співрозмірним. При $R > 20 \text{ \AA}$ внесок квазіподовжних обмежених фононів в енергію полярона є визначальним. Ефективна маса полярона при великих R формується квазіподовжними обмеженими фононами, а при малих R квазіпоперечними інтерфейсними та квазіподовжними обмеженими фононами. Анізотропія кристалів приводить до збільшення енергії зв'язку полярона.

1. N. Mori and T. Ando, Phys. Rev. B **40**, 6175 (1989).
2. H. Marcos and Degani, Phys. Rev. B **40**, 11937 (1989).
3. Li Qiang and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **40**, 5860 (1989).
4. Н.В. Ткач, В.П. Жаркой, ФТП **33**, 598 (1999).
5. М.В. Ткач, О.М. Маханець, І.В. Проць, УФЖ **46**, 727 (2001).
6. H.-J. Xie and X.-Y. Liu, Superlattices and Microstructures, **39**, 489 (2006).
7. R.L. Rodriguez Suarez and A. Matos-Abiague, Physica E **18**, 485 (2003).
8. K.W. Sun, C.L. Huang, G.B. Huang, and H.C. Lee, Solid St. Commun **126**, 519 (2003).
9. Eva M. Höhberger, Jochen Kirschbaum, Robert H. Blick, Jörg P. Kotthaus, and Werner Wegscheider, Physica E **18**, 99 (2003).
10. Y. Imanaka, H. Nojiri, Y.A. Matsuda, and N. Miura, Physic B **346-347**, 437 (2004).
11. H.C. Lee, K.W. Sun, and C.P. Lee, Solid St. Commun **128**, 245 (2003).
12. You-Bin Yu, Kaang-Xian Guo, and Shi-Ning Zhu, Physica E **27**, 62 (2005).
13. R. Betancourt- Riera, R. Betancourt, R. Rosas, R. Riera, and J.L. Martin, Physica E **24**, 257 (2004).
14. Li Zhang and Hong-Jing Xie, Physica B **363**, 146 (2005).
15. Li Zhang and Jun-jie Xie, Semicond. Sci. Technol, **20**, 592 (2005).
16. X.F. Wang and X.L. Lei, Phys. Rev. B **49**, 4780 (1994).
17. Hsu-Cheng Hsu and Wen-Feng Hsieh, Phys. Rev. B **40**, 11937 (1989).
18. S.M. Komirenko and K.W. Kim, M.A. Stroncio and M. Dutta, Phys. Rev. B **59**, 5013 (1999).
19. A.D. Andreev and E.P.O'Reilly, Phys. Rev. B **62**, 15851 (2000).
20. Li Zhang and Jun-jie Shi, Solid St. Commun **13**, 1 (2006).
21. D.E.N. Brancus and L.Ion, Phys. Rev. B **76**, 155304 (2007).
22. V.I. Boichuk, V.A. Borusevych, and I.S. Shevchuk, Journal of Optoelectronics and Advansed Materials, **10**(6), 1357 (2008).

23. V.I. Boichuk, V.A. Borusevych, and I.S. Shevchuk, *Sensor Electronics and Microsystem Technologies* **3**, 11 (2008).
24. В.І. Бойчук, Л.Я. Вороняк, Я.М. Вороняк, *Фіз. і хім. тверд. тіла*, **11**, 34 (2010).
25. L. Zhang, *Superlatt. Microstruct.* **46**, 415 (2009).
26. L. Zhang, *Phys. Lett. A* **373**, 2087 (2009).

Одержано 15.12.10

ФОНОННЫЕ И ПОЛЯРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ
ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ПРОВОЛОК ZnO/GaN И GaN/AlN

В.И. Бойчук, Л.Я. Вороняк, Я.М. Вороняк

Резюме

Для цилиндрических квантовых проволок (КП) кристаллов гексагональной симметрии ZnO и GaN определена зависимость энергии поляризационных фононов от волнового вектора, а также энергии и эффективной массы полярона от радиуса КП (R). Показано, что основной вклад в параметры полярона (энергию и эффективную массу) дают квазипродольные и интерфейсные фононные моды. Определено, что в области

$R > 15$ нм вклад квазипродольных фононов является основным. Проведено сравнение энергии полярона КП для кристаллов кубической и гексагональной симметрии.

PHONON AND POLARON STATES OF ZnO/GaN
AND GaN/AlN CYLINDRICAL WIRES

V.I. Boichuk, L.Ya. Voronyak, Ya.M. Voronyak

Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University
(3, Stryiska Str., Drohobych 82100, Ukraine;
e-mail: voronyak.lyubov@gmail.com)

S u m m a r y

The energy of polarization phonons as a function of the wave vector as well as the polaron energy and effective mass as functions of the quantum wire radius R are determined for cylindrical quantum wires (QWs) of ZnO and GaN hexagonal crystals. It is shown that the dominant contribution to the polaron energy and the effective mass is made by quasi-longitudinal and interface phonon modes. It is established that the contribution of quasi-longitudinal phonons is determinative in the region $R > 15$ nm. The energies of QW polarons for cubic and hexagonal crystals are compared.