ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 11, № 1 (2010) С. 34-38

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 11, № 1 (2010) P. 34-38

PACS: 71.38.-K, 73.21.HB

ISSN 1729-4428

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

Енергія полярона у квантовому дроті кристалу GaN

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, інститут фізики, математики та інформатики, кафедра теоретичної фізики, вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100, Львівська обл., E-mail: voronyak.lyubov@gmail.com

Для циліндричного квантового дроту (КД) кристалу гексагональної симетрії *GaN* визначено залежність енергії та ефективної маси полярона від радіуса КД (R). Показано, що основний внесок у основні параметри полярона (енергію та ефективну масу) задають квазіповздовжні та інтерфейсні фононні моди. Встановлено, що в області R>15 нм внесок квазіповздовжних фононів є основним. Проведено порівняння енергії полярона КД для кристалу кубічної та гексагональної симетрії.

Ключові слова: квантовий дріт, полярон, ефективна маса, енергія.

Стаття поступила до редакції 22.03.2009; прийнята до друку 15.12.2009.

Вступ

Аналіз загального розвитку провідникових нанотехнологій за останні два десятиліття вказує на важливість дослідження 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 [1-9]. 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, 7, 10-13].

Спочатку взаємодія електрона з оптичними фононами була детально досліджена у квазідвовимірних гетеросистемах, квантових дротах і квантових точках, що виготовлені з оптично ізотропних матеріалів [13-16]. Однак, за останні роки такі анізотропні матеріали як *ZnO*, *GaN*, *AlN*, та *InN* викликають велике зацікавлення дослідників через їхню перспективність при застосуванні в електроніці [17-22]. 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 [17, 21, 22]. Значно менше дослідженими як експериментально, так і теоретично є фононні та поляронні стани у квантових дротах та квантових точках анізотропних кристалів [18-20].

Запропонована робота присвячена теоретичному вивченню поляронних станів у квантовому дроті анізотропного кристалу *GaN*.

I. Постановка задачі. Основні формули

Розглядається циліндричний квантовий дріт напівпровідника типу вюрциту (рис. 1), що

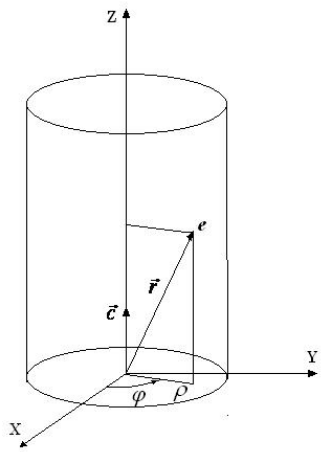

Рис. 1.

поміщений у діелектричне середовище. Нехай $\vec{c}$ – вісь кристалу, направлена вздовж осі квантового дроту (КД). Виберемо вісь OZ системи координат таким чином, щоб вона збігалась з віссю квантового дроту та $\vec{c}$ – віссю кристалу. Тоді у наближенні діелектричного континууму та ефективної маси

електрон-фононна система буде описуватись гамільтоніаном:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{int}, \qquad (1)$$

де

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}\frac{1}{m_\perp(\rho)}\vec{\nabla} - \frac{\hbar^2\partial^2}{2m_{//}\partial z^2} + V(\vec{r}),$$

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{n,m,q,s} \hbar\omega_{nms}(q)[b^+_{nms}(q)b_{nms}(q) + 1/2], \qquad (2)$$

$$\hat{H}_{int} = -\sum_{n,m,q,s} \Gamma_{nms}(q)[W_{mq}(z,\varphi)g_{nms}(|q|\rho)b_{nms}(q) + e.c.],$$

$b^+_{nms}(q)$, $\hbar\omega_{nms}(q)$ – оператор народження та енергія поляризаційного фонона гілки s і квазіімпульсу $\hbar\vec{q}$ ($\vec{q} \uparrow\downarrow OZ$), $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$, $n = 1, 2, 3, \ldots$,

$$W_{mq}(z,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{iqz} e^{im\varphi}, \qquad (3)$$

$= L$ – довжина КД. Вигляд функцій $\Gamma_{nms}(q)$ і $g_{nms}(|q|\rho)$ визначається типом фононів. Для інтерфейсних фононів ($s = 0, n = 1$) $\Gamma_{1m0}(q)$ має вигляд [19, 20]:

$$\Gamma_{1m0}(q) = \frac{\left(\frac{4\pi\hbar e^2}{|q|R}\right)^{1/2}}{\left|\left[I_{|m|}\left(\frac{|q|R}{\sqrt{\beta(\omega)}}\right) I'_{|m|}\left(\frac{|q|R}{\sqrt{\beta(\omega)}}\right)\frac{\partial f_{1m0}(q,\omega)}{\partial\omega}\right]_{\omega=\omega_{1m0}(q)}\right|^{1/2}},$$

$$f_{1m0}(q,\omega) = \frac{\varepsilon_\perp(\omega)}{\sqrt{\beta(\omega)}} - \frac{I_m(\frac{|q|R}{\sqrt{\beta(\omega)}})K'_m(|q|R)}{I'_m(\frac{|q|R}{\sqrt{\beta(\omega)}})K_m(|q|R)},$$

$$g_{1m0}(|q|\rho) = I_{|m|}\left(\frac{|q|\rho}{\sqrt{\beta(\omega_{mq0})}}\right), \quad \beta(\omega) = \frac{\varepsilon_\perp(\omega)}{\varepsilon_{//}(\omega)}, \qquad (4)$$

$\varepsilon_\alpha(\omega) = \varepsilon_\alpha(\infty)\frac{(\omega^\alpha_{LO})^2 - \omega^2}{(\omega^\alpha_{TO})^2 - \omega^2}$, $\alpha = \{\perp, //\}$, ω^α_{LO}, ω^α_{TO} – частоти поздовжніх і поперечних коливань в α-напрямку, $J_{|m|}(x)$ – функція Бесселя першого роду, $I_{|m|}(x), K_{|m|}(x)$ – модифіковані функції Бесселя першого та другого роду.

Обмежені фононні моди задаються такими функціями $\Gamma_{nms}(q)$, $g_{nms}(|q|\rho)$:

$$\Gamma_{nms}(q) = \frac{\left(\frac{4\pi\hbar e^2}{|q|R}\right)^{1/2}}{\left|\left[J_{|m|}\left(\frac{|q|R}{\sqrt{|\beta(\omega)|}}\right) J'_{|m|}\left(\frac{|q|R}{\sqrt{|\beta(\omega)|}}\right)\frac{\partial f_{nms}(q,\omega)}{\partial\omega}\right]_{\omega=\omega_{nms}(q)}\right|^{1/2}},$$

$$f_{nms}(q,\omega) = \frac{\varepsilon_\perp(\omega)}{\sqrt{|\beta(\omega)|}} - \frac{J_m(\frac{|q|R}{\sqrt{\beta(\omega)}})K'_m(|q|R)}{J'_m(\frac{|q|R}{\sqrt{\beta(\omega)}})K_m(|q|R)},$$

$$g_{nms}(|q|\rho) = J_{|m|}\left(\frac{|q|\rho}{\sqrt{\beta(\omega_{nms}(q))}}\right). \qquad (5)$$

Частоти інтерфейсних ($\omega_{1m0}(q)$) та обмежених ($\omega_{nms}(q)$) фононів знаходяться з дисперсійних рівнянь:

$$f_{1m0}(q,\omega) = 0, \quad f_{nms}(q,\omega) = 0. \qquad (6)$$

Для визначення енергії електрона квантовий дріт моделюємо нескінченою потенціальною квантовою ямою:

$$V(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho < R \\ \infty, & \rho = R \end{cases}. \qquad (7)$$

Тоді хвильові функції стаціонарних станів записуються у вигляді:

$$\Psi_{NMk}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi LR}} e^{ikz} e^{iM\varphi} \frac{J_{|M|}\left(\frac{\gamma_{N|M|}}{R}\rho\right)}{\left|J_{|M|+1}(\gamma_{N|M|})\right|}, \qquad (8)$$

де $\vec{k}$ – хвильовий вектор електрона ($\vec{k} \uparrow\downarrow OZ$), $M = 0, \pm1, \pm2, \ldots$, $N = 1, 2, 3$ – номер нуля функції Бесселя $J_{|M|}(x)$:

$$J_{|M|}(\gamma_{N|M|}) = 0. \qquad (9)$$

Енергія електрона визначається формулою:

$$E_{NM}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{||}} + \frac{\hbar^2}{2m_\perp}\left(\frac{\gamma_{N|M|}}{R}\right)^2. \qquad (10)$$

На основі формул (3)-(5) та (9), (10) можна визначити енергію полярона. У випадку слабкої електрон-фононної взаємодії її величина задається другою поправкою теорії збурень:

$$E_{pol}(k) = E_{1,0}(k) + \sum_{\substack{N,q \\ n,m,s}} \frac{\left|\langle\Psi_{1,0,k}|\hat{H}_{int}|\Psi_{N,-m,k-q}\rangle\right|^2}{E_{1,0}(k) - E_{N,-m}(k-q) - \hbar\omega_{nms}(q)} \qquad (11)$$

II. Аналіз одержаних результатів

Конкретні обчислення енергії (11) та ефективної маси полярона

$$\frac{1}{m_{pol}} = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E_{pol}(k)}{\partial k^2}\right)_{k=0} \qquad (12)$$

проведено для КД кристалу *GaN*. Як видно з формули (11), енергія полярона формується внеском різних гілок фононних коливань:

$$E_{pol}(k) = E_{1,0}(k) + \Delta E_{QL} + \Delta E_{QT} + \Delta E_S = E_{1,0}(k) + \Delta E, \qquad (13)$$

де ΔE_{QL}, ΔE_{QT}, ΔE_S – внески в енергію квазіповздовжних, квазіпоперечних обмежених та інтерфейсних фононів. З формули (11) видно, що при

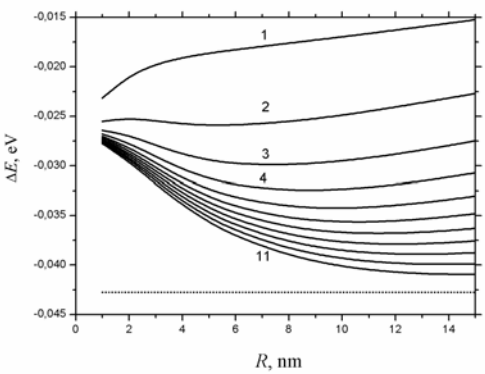

Рис. 2. Залежність ΔE_{QL} від радіуса КД при різних значеннях $|m|_{\max}$: $1-|m|_{\max}=0$, $2-|m|_{\max}=1,\ldots,11-|m|_{\max}=10$.

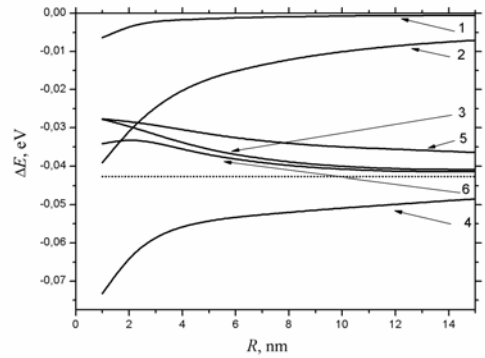

Рис. 3. Парціальні внески гілок коливань в енергію полярона для різних R.

визначенні енергій ΔE_{QL}, ΔE_{QT} та ΔE_S необхідно, крім інтегрування по хвильовому вектору q, продовжити підсумовування по квантових числах N,n,m. Залежно від гілки коливань та радіуса квантового дроту необхідно визначити достатні максимальні значення квантових чисел. На рис. 2 наведено значення ΔE_{QL} при різних $|m|_{max}$ та R, якщо $N_{max}=n_{max}=5$. Видно, що врахування декількох доданків по магнітному квантовому числу задає або неправильну залежність $\Delta E_{QL}=\Delta E_{QL}(R)$, або область зміни повинна бути досить вузькою. Для отримання задовільних значень цієї енергії в області $R\le 15\,нм$ необхідно, щоб $|m|_{max}=10$. Аналогічні дослідження збіжності рядів проведено для інших фононних гілок.

На рис. 3 подано залежності ΔE_{QL}, ΔE_{QT} та ΔE_S від радіуса квантового дроту. Видно, що в усій області зміни R внесок QT-фононів (крива 1) є невеликим і монотонно зменшується зі збільшенням R. Основними величинами в енергії (13) є доданки, які враховують взаємодію електрона з квазіповздовжніми та інтерфейсними фононами. В області малих R ($R\le 2,1\,нм$) внесок інтерфейсних фононів (крива 2) в енергію полярона стає більшим за внесок обмежених QL-фононів (крива 3). Якщо збільшувати радіус КД, то $|\Delta E_S|$ плавно зменшується, а $|\Delta E_{QL}|$ – збільшується. Енергія полярона ΔE задається сумою трьох зазначених енергій (крива 4). Обчислення показують для $R=1\,нм$ енергія $\Delta E=-0,074\,eB$, тобто суттєво менша за енергію полярона масивного кристалу (на графіку вона позначена штриховою лінією) - $\Delta E=-0,042\,eB$. Збільшення радіуса R веде до монотонного збільшення ΔE (зменшення енергії зв'язку полярона). Якщо $R=10\,нм$, то отримуємо енергію $\Delta E=-0,052\,eB$.

З наведених формул видно, що при отриманні енергії полярона квантового дроту врахування гексагональної симетрії елементарної комірки кристалу *GaN* вимагає громіздких обчислень. Аналогічні формули для КД кристалів кубічної симетрії є значно простішими. В роботі проведено обчислення парціальних внесків в енергію полярона обмежених та інтерфейсних фононів моделі кубічного кристалу *GaN*, в якій діелектричні проникності і частоти є середніми від дійсних значень. Результати обчислень внеску в енергію обмежених фононів для такої моделі квантового дроту *GaN* подано також на рис. 3 (крива 5). Для порівняння наведено сумарне значення енергії обмежених фононів анізотропного КД (крива 6). Видно, що в ізотропному КД енергія є меншою, ніж в анізотропному. Похибка складає не менше 20 %.

На рис. 4 подано залежність ефективної маси полярона від радіуса КД. Видно, що врахування лише QT-фононів (крива 3) практично не змінює ефективну масу електрона. Якщо врахувати лише поверхневі фонони (крива 1), то ефективна маса зі зменшенням R монотонно зростає, але стає більшою за ефективну масу полярона масивного кристалу (штрихова лінія) лише якщо $R<3\,нм$. Квазіповздовжні фонони (крива 2) спричиняють те, що ефективна маса квазічастинки стає більшою за ефективну масу полярона масивного кристалу. Врахування всіх фононних гілок дає можливість отримати істинну залежність ефективної маси

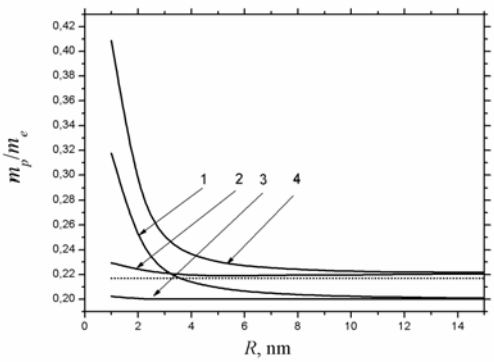

Рис. 4. Парціальні внески гілок коливань в масу полярона для різних R.

полярона КД (крива 4) від радіуса. Видно, що в усій області зміни R, ефективна маса m_p є плавною функцією радіуса і приймає більші значення, ніж це було у масивному кристалі. Отриманий результат узгоджується з залежністю енергії полярона від R і вказує на ефективне збільшення ефективної електрон-фононної взаємодії при зменшенні радіуса КД.

Таким чином, у роботі проведено дослідження поляронних станів квантового дроту кристалу гексагональної симетрії GaN. Показано, що для малих значень радіуса КД ($R < 15\,нм$) основний внесок у енергію полярона задають квазіповздовжні та інтерфейсні фонони. Встановлено, що в області $R > 15\,нм$ квазіповздовжні фонони є визначальними для формування енергії полярона. Обчислено залежність ефективної маси полярона від радіуса КД і визначено парціальні внески у величину m_p всіх фононних гілок (поверхневих, квазіпоперечних та квазіповздовжних фононів).

Бойчук В.І. **–** доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри, директор інституту;
Вороняк Я.М. **–** кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри;
Вороняк Л.Я. **–** аспірант.

[1] N. Mori, T. Ando. Electron–optical-phonon interaction in single and double heterostructures // *Phys. Rev. B*, **40**(9), pp. 6175-6188 (1989-II).
[2] H. Marcos. Degani. Energy-momentum relation for polarons in quantum-well wire // *Phys. Rev. B*, **40**(17), pp. 11937-11939 (1989-I).
[3] Li Qiang and S. Das Sarma. Collective exitation spectra of one-dimentional electron systems // *Phys. Rev. B*, **40**(8), pp. 5860-5863 (1989-I).
[4] Н.В. Ткач, В.П. Жаркой. Спектр и электрон-фононное взаимодействие в среде с цилиндрической квантовой проволокой // *ФТП*, **33**(5), с. 598-602 (1999).
[5] М.В. Ткач, О.М. Маханець, І.В. Проць. Властивості фононних, електронних та діркових спектрів деяких циліндричних наногетеросистем// *УФЖ*, **46**(7), С.727-734 (2001).
[6] R.L. Rodriguez Suarez, A.Matos-Abiague. Fractional-dimensional polaron corrections in asymmetric GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum wells. // *Physica E*, **18**, pp. 485-491 (2003).
[7] K.W. Sun, C.L. Huang, G.B. Huang, H.C. Lee. Inter- and intra-subband relaxation of hot electrons in GaAs/AlGaAs quantum wells // *Solid St. Commun*, **126**, pp. 519-522 (2003).
[8] Eva M. Höhberger, Jochen Kirschbaum, Robert H. Blick, Jörg P. Kotthaus, Werner Wegscheider. Electron-phonon interaction in freely suspended quantum dots// *Physica E*, **18**, pp. 99-100 (2003).
[9] Y. Imanaka, H. Nojiri, Y.A. Matsuda, N. Miura. Cyclotron resonance and Faraday rotation in n-type CdS at ultra-high magnetic fields // *Physic B*, **346-347**, pp. 437-441 (2004).
[10] H.C. Lee, K.W. Sun, C.P. Lee. Significance of dimensionality and dynamical screening on hot carrier relaxation in bulk GaAs and quantum wells // *Solid St. Commun*, **128**, pp. 245-250 (2003).
[11] You-Bin Yu, Kaang-Xian Guo, Shi-Ning Zhu. Polaron influence on the third-order nonlinear optical susceptibility in cylindrical quantum wires // *Phisica E*, **27**, pp. 62-66 (2005).
[12] R. Betancourt- Riera, R. Betancourt, R. Rosas, R. Riera, J.L. Martin. One phonon resonant Roman scattering in quantum wires and free standing wires // *Physica E*, **24**, pp. 257-267 (2004).
[13] Li Zhang, Hong-Jing Xie. Interface and surface optical phonons in a free-standing GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ cylindrical quantum wire // *Physica B*, **363**, pp. 146-157 (2005).
[14] Li Zhang and Jun-jie Xie. Polar interface optical phonon modes and Fröflich electron-phonon interaction Hamiltonians in wurtzite quantum well wire // *Semicond. Sci. Technol*, **20**, pp. 592-600 (2005).
[15] X.F. Wang, X.L. Lei. Polar-optic phonon and high-field electron transport in cylindrical GaAs/AlAs quatum wires // *Phys. Rev. B*, **49**(7), pp. 4780-4789 (1994-I).
[16] Hsu-Cheng Hsu, Wen-Feng Hsieh. Exitonic polaron and phonon assisted photoluminescence of ZnO nanowires // *Phys. Rev. B*, **40**(17), pp. 11937-11939 (1989-I).
[17] S.M. Komirenko and K.W. Kim, M.A. Stroncio and M. Dutta. Dispersion of polar optical phonons in wurtzite quantum wells // *Phys. Rev. B*, **59**, pp.5013-5020 (1999.-I).
[18] A.D. Andreev and E.P.O'Reilly. Nheory of the electronic structure of GaN/AlN hexagonal quantum dots // *Phys. Rev. B*, **62**(23), pp. 15851-15870 (2000-I).
[19] Li Zhang, Jun-jie Shi. Fröhlih electron-interface and -propagation optical phonon interactions in a wurtzite multi-shell cylindrical heterostructure // *Solid St. Commun*, **13**(2), pp. 1-6 (2006).
[20] D.E.N. Brancus and L.Ion. Full optical phonon spectrum and Fröhlich Hamiltonian in wurtzite-type free-standing quantum well wires // P*hys. Rev. B*, **76**(15), pp. 155304-155315 (2007).
[21] V.I. Boichuk, V.A. Borusevych, I.S. Shevchuk. Electronic polaron of the AlN/GaN/AlN double nanoheterostructure of hexagonal symmetry crystals // *Journal of Optoelectronics and Advansed Materials*, **10**(6), pp. 1357-1364 (2008).

[22] V.I. Boichuk, V.A. Borusevych, I.S. Shevchuk. Phonon and polaron states of a quantum well heterostructure of crystals with a hexagonal lattice structure // *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*, (3), pp. 11-24 (2008).

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

Polaron Energy in GaN Quantum Wire

Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, Institute of Physics, Mathematics and Computer Science, Department of Theoretical Physics, 3 Stryiska St., Drohobych, Lviv Region, 82100 E-mail: voronyak.lyubov@gmail.com

For a cylindrical *GaN* quantum wire (QWR) of hexagonal symmetry the dependence of both the polaron self-energy and polaron effective mass is determined as the function of the QWR radius (R). It is shown, that the major contribution at main parameters of a polaron (self-energy and effective mass) determines by the quasilongitudinal and the interface phonon modes. It is defined, that in region R>15 nm the contribution of quasilongitudinal phonons is basic. Comparison of polaron self-energy of QW for a crystal of cubic and hexagonal symmetry is executed.

Key words: quantum wire, polaron, effective mass, energy