

В.І. Гуцул, О.М. Маханець, А.І. Кучак

## Енергетичний спектр оптичних фононів у плоскій багат шаровій резонансно-тунельній наноструктурі

Чернівецький національний університет імені Ю. Федьковича, 58012 вул. Коцюбинського, 2,  
Чернівці, Україна, e-mail: [ktf@chnu.edu.ua](mailto:ktf@chnu.edu.ua)

У роботі у рамках моделі діелектричного континууму виконано розрахунок енергетичного спектра обмежених та інтерфейсних оптичних фононів у плоскій багат шаровій резонансно-тунельній наноструктурі на основі гетеропереходів GaAs/AlAs. Показано, що енергії обмежених оптичних фононів у даній напівпровідниковій наногетеросистемі співпадають з енергіями повздовжніх поляризаційних коливань в окремих масивних кристалах, з яких утворена відповідна наносистема. Досліджені залежності енергій інтерфейсних оптичних фононів від їх квазіімпульсу та геометричних розмірів наночастин GaAs та AlAs.

**Ключові слова:** оптичні фонони, резонансно-тунельна наноструктура, потенціал поляризації, наноплівка, модель діелектричного континууму.

Стаття постуила до редакції 05.11.2013; прийнята до друку 15.12.2013.

### Вступ

Визначні перспективи використання багатоманітних наноструктур у різних галузях науки і техніки спонукають багатьох дослідників до всебічного вивчення їх властивостей. Плоскі наноструктури (наноплівки), квантові точки та квантові дроти, а також їх комбінації можуть бути використані в якості елементної бази для різноманітних напівпровідникових приладів. Так, наприклад, на основі багат шарових наноплівок GaAs/AlAs створені квантові каскадні лазери [1-3], які мають слабку температурну залежність своїх характеристик, чого не вдається досягнути для лазерів на базі масивних напівпровідникових кристалів. Подальший прогрес у цій області [4-7] показав можливість розширення спектрального діапазону таких квантових каскадних лазерів. Тому теоретичні та експериментальні дослідження енергетичних спектрів різноманітних квазічастинок у багат шарових наноплівках є важливими з точки зору розуміння фізичних процесів у подібних системах.

У даній роботі виконано дослідження енергетичного спектра та потенціалів полів поляризації обмежених та інтерфейсних оптичних фононів у багат шаровій наноплівці на основі гетеропереходів між напівпровідниками GaAs та AlAs. Така резонансно-тунельна наноструктура реалізується в якості інжектора у квантових каскадних лазерах [4]. Доцільність такого

дослідження пояснюється тим, що взаємодія електронів із відповідними фононами приводить до перенормування енергетичного спектра квазічастинок, що, в свою чергу, впливає на спектральні характеристики наноструктури.

### I. Теорія енергетичного спектра оптичних фононів

Розглянемо багат шарову наноплівку на основі гетеропереходів між напівпровідниками GaAs (середовище 0) та AlAs (середовище 1) (рис. 1). Вісь  $z$  вибираємо у напрямку перпендикулярному до площин гетеропереходів наносистеми, при цьому розміри вздовж осі  $z$  однакові для всіх п'яти наночастин GaAs –  $a$  та для всіх чотирьох наночастин AlAs –  $b$ .

Діелектрична проникність  $i$ -того середовища вважається відомою і такою, що задовольняє співвідношенню

$$\varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_{i\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{iL}^2}{\omega^2 - \omega_{iT}^2} \quad (i=0,1), \quad (1)$$

де  $\varepsilon_{i\infty}$  – високочастотна діелектрична проникність,  $\omega_{iL}$  та  $\omega_{iT}$  – частоти повздовжніх та поперечних фононів у відповідних масивних напівпровідникових кристалах.

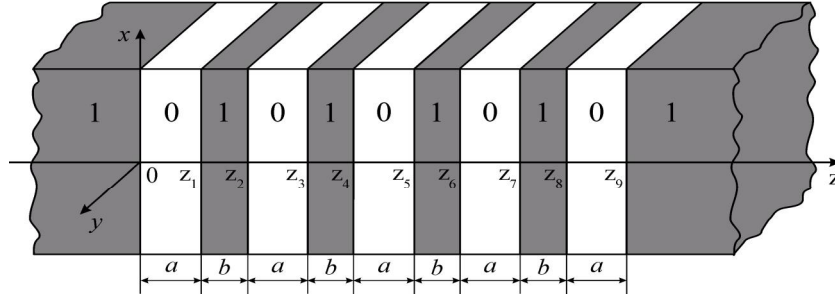


Рис. 1. Геометрична схема наногетеросистеми.

Згідно моделі діелектричного континууму [8] потенціал поля поляризації та енергетичний спектр оптичних фононів наносистеми визначається з рівнянь Максвела для середовищ

$$\begin{cases} \vec{D} = \varepsilon(\vec{r}, \omega) \vec{E}, \\ \vec{E} = -\nabla \Phi, \\ \nabla \cdot \vec{D} = 0, \end{cases} \quad (2)$$

де  $\vec{D}$  – вектор індукції електричного поля,  $\vec{E}$  –

вектор напруженості електричного поля,  $\Phi$  – потенціал поля поляризації,  $\varepsilon(\vec{r}, \omega)$  – діелектрична проникність, що має наступну залежність від координат:

$$\varepsilon(\vec{r}, \omega) = \begin{cases} \varepsilon_0(\omega), & z \in [z_0, z_1] \cup [z_2, z_3] \cup [z_4, z_5] \cup [z_6, z_7] \cup [z_8, z_9], \\ \varepsilon_1(\omega), & z \in (-\infty, z_0] \cup [z_1, z_2] \cup [z_3, z_4] \cup [z_5, z_6] \cup [z_7, z_8] \cup [z_9, +\infty), \end{cases} \quad (3)$$

де  $z_0 = 0$ . З (2) одержується рівняння:

$$\varepsilon_i(\omega) \Delta \Phi(\vec{r}) = 0, \quad (i=0,1), \quad (4)$$

розв'язки якого визначають спектр частот фононів наногетеросистеми. Як видно із (4) існують два типи розв'язків:

а) якщо

$$\varepsilon_i(\omega) = 0, \quad \Delta \Phi(\vec{r}) \neq 0, (i=0,1), \quad (5)$$

то отримується спектр частот обмежених оптичних фононів;

б) якщо

$$\varepsilon_i(\omega) \neq 0, \quad \Delta \Phi(\vec{r}) = 0, (i=0,1), \quad (6)$$

то отримується спектр частот інтерфейсних оптичних фононів наногетероструктури.

#### А. Обмежені оптичні фонони.

Умова (5) еквівалентна системі рівнянь

$$\begin{cases} \varepsilon_0(\omega) = \varepsilon_{0\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{0L}^2}{\omega^2 - \omega_{0T}^2} = 0, \\ \varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_{1\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{1L}^2}{\omega^2 - \omega_{1T}^2} = 0. \end{cases} \quad (7)$$

З формул (7) видно, що частоти  $\omega_i$  обмежених оптичних фононів наносистеми збігаються з відповідними частотами  $\omega_{iL}$  поздовжніх оптичних фононів у масивних кристалах, а отже, енергії обмежених фононів є наступними

$$\Omega_{iL} = \hbar \omega_{iL} \quad (i=0,1). \quad (8)$$

Зважаючи на симетрію наногетеросистеми, потенціал поляризації обмежених оптичних фононів можна подати у вигляді:

$$\Phi_L(\vec{r}) = \sum_{n=0}^{10} \Phi_{Ln}(\vec{r}) \sigma(z - z_n), \quad (9)$$

де

$$\sigma(z - z_n) = \begin{cases} 1, & z_{n-1} \leq z \leq z_n, \\ 0, & \text{інша область,} \end{cases} \quad (10)$$

тут  $z_{-1} = -\infty$ ,  $z_{10} = +\infty$ . При цьому величини  $\Phi_{Ln}(\vec{r})$  визначаються так:

$$\Phi_{Ln}(\vec{r}) = \Phi_{Ln}(x, y, z) = \sum_{k_x, k_y, k_n} A_n e^{i(k_x x + k_y y)} \sin k_n z \quad (11)$$

Вираз (11) – це розклад потенціалу  $\Phi_{L_n}(\mathbf{r})$  за повною ортонормованою системою функцій. При цьому коефіцієнти розкладу  $A_n$  і повздовжній  $k_n$  квазіімпульси обмежених оптичних фононів визначаються з умов рівності нулю потенціалу поляризації на гетерограницях наносистеми:

$$\Phi_L(\mathbf{r})\Big|_{z=z_n} = 0, \quad n = 0, 1, \dots, 9, \quad (12)$$

та з умов ортонормованості повної системи функцій за якими відбувається розклад в (11).

### Б. Інтерфейсні оптичні фонони.

З умови (6) отримуємо рівняння для потенціалу поляризації інтерфейсних оптичних фононів, яке запишемо у вигляді

$$\Delta \Phi_I(\mathbf{r}) = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Phi_I(x, y, z) = 0 \quad (13)$$

Оскільки наночастинки системи чергуються вздовж осі  $z$ , то відповідний потенціал  $\Phi_I(x, y, z)$  доцільно подати у вигляді:

$$\Phi_I(x, y, z) = \sum_{n=0}^{10} \Phi_{In}(x, y, z) \sigma(z - z_n), \quad (14)$$

де

$$\Phi_{In}(x, y, z) = R_n(x, y) f_n(z). \quad (15)$$

Оскільки у площині  $XOY$  рух квазічастинок є вільним, то розв'язок  $R_n(x, y)$  отримується у вигляді:

$$R_n(x, y) = B_n e^{i(q_x x + q_y y)}, \quad (16)$$

де  $q_x, q_y$  – поперечні квазіімпульси інтерфейсних оптичних фононів. Підставляючи (14) - (16) у рівняння (13), отримаємо розв'язки для  $f_n(z)$  у вигляді:

$$\begin{cases} f_0(z) = C_0 e^{qz}, & z_{-1} \leq z \leq z_0 \\ f_n(z) = C_{n1} e^{qz} + C_{n2} e^{-qz}, & z_{n-1} \leq z \leq z_n, \\ f_{10}(z) = C_{10} e^{-qz}, & z_9 \leq z \leq z_{10} \end{cases} \quad (n=1, 2, \dots, 9). \quad (16)$$

де  $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$  – повздовжній квазіімпульс інтерфейсних оптичних фононів.

Енергетичний спектр інтерфейсних оптичних фононів та коефіцієнти  $B_n, C_0, C_{n1}, C_{n2}, C_{10}$  в (16) і (17) визначаються з умов неперервності потенціалу поляризації та вектора електричного зміщення на гетеропереходах наносистеми вздовж осі  $z$ :

$$\begin{cases} \Phi_{In}(x, y, z_n) = \Phi_{In+1}(x, y, z_n); & \epsilon_1(\omega) \Phi'_{In}(x, y, z_n) = \epsilon_0(\omega) \Phi'_{In+1}(x, y, z_n); & (n = 0, 2, 4, 6, 8); \\ \Phi_{In}(x, y, z_n) = \Phi_{In+1}(x, y, z_n); & \epsilon_0(\omega) \Phi'_{In}(x, y, z_n) = \epsilon_1(\omega) \Phi'_{In+1}(x, y, z_n); & (n = 1, 3, 5, 7, 9). \end{cases} \quad (18)$$

## II. Аналіз отриманих числових результатів

На основі отриманих формул виконувався розрахунок енергетичних спектрів інтерфейсних оптичних фононів для вище описаної наногетеросистеми (енергії поздовжніх  $\Omega_L$  та поперечних  $\Omega_T$  фононів, низькочастотна  $\epsilon_0$  та

Таблиця

	GaAs	AlAs
$\Omega_L$ (meV)	36,2	50,1
$\Omega_T$ (meV)	33,3	44,9
$\epsilon_0$	13,18	10,06
$\epsilon_\infty$	11,15	8,08
$a_{GaAs}, a_{AlAs}$ (Å)	5,65	5,66

високочастотна  $\epsilon_\infty$  діелектричні проникності, а також постійні ґратки  $a_{GaAs}$  та  $a_{AlAs}$  матеріалів наведені у таблиці).

На рис. 2 показана еволюція спектра енергій інтерфейсних фононів як функції від повздовжнього квазіімпульсу  $q$  при фіксованих геометричних параметрах наносистеми  $a = 10a_{GaAs}$  та  $b = 5a_{GaAs}$ .

З рис. 2 видно, що внаслідок наявності у наносистемі десяти плоских поверхонь гетеропереходів, існують двадцять гілок фононних коливань: десять з позитивною дисперсією, та десять з від'ємною дисперсією по  $q$ . При малих значеннях  $q$  шістьнадцять гілок фононних коливань вироджуються у чотири, тоді загалом буде вісім гілок фононних коливань. При збільшенні  $q$  виродження для описаних вище шістьнадцяти гілок фононних коливань знімається, а інші чотири гілки вироджуються у дві, тому в цьому випадку буде вісімнадцять гілок фононних коливань.

На рис. 3 приведені залежності енергій інтерфейсних фононів від розміру  $a$  наночастин GaAs при постійних  $q = 0$  та розміру  $b = 5a_{GaAs}$  наночастин AlAs.

Рисунок 3 ілюструє, що при малих значеннях  $a$

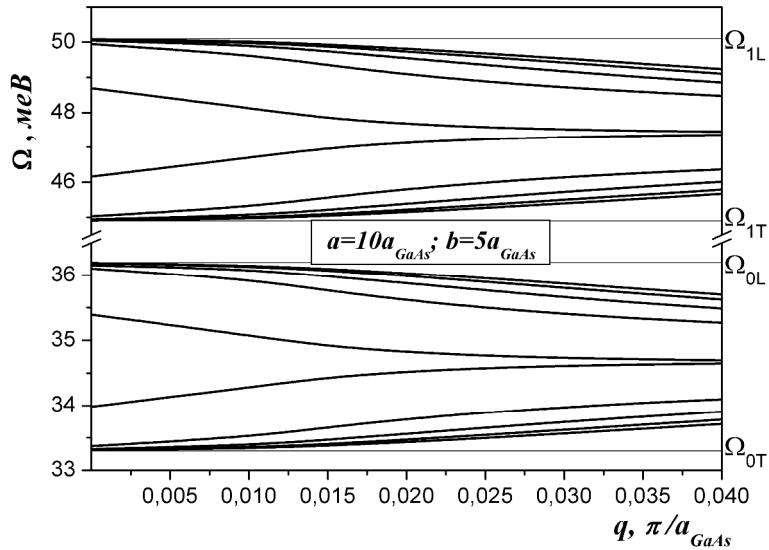


Рис. 2. Еволюція спектра інтерфейсних фононів в залежності від  $q$  при постійних геометричних параметрах наносистеми.

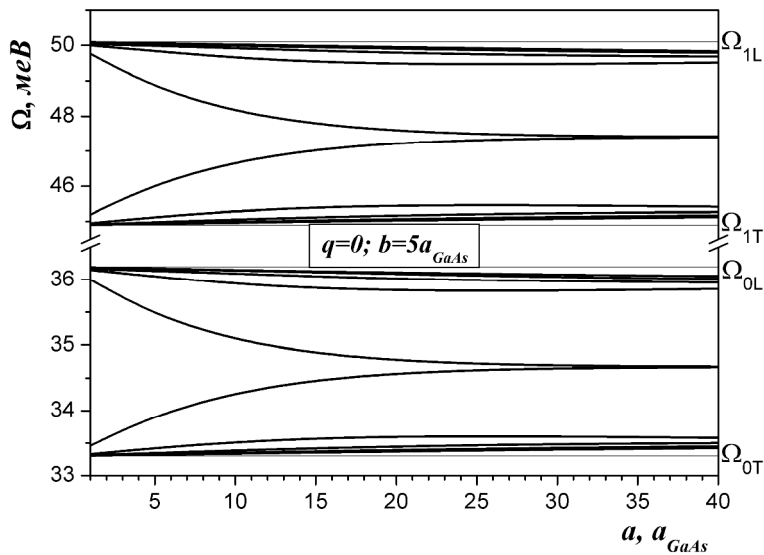


Рис. 3. Залежності енергій інтерфейсних фононів від  $a$  при  $q = 0$  та  $b = 5a_{GaAs}$ .

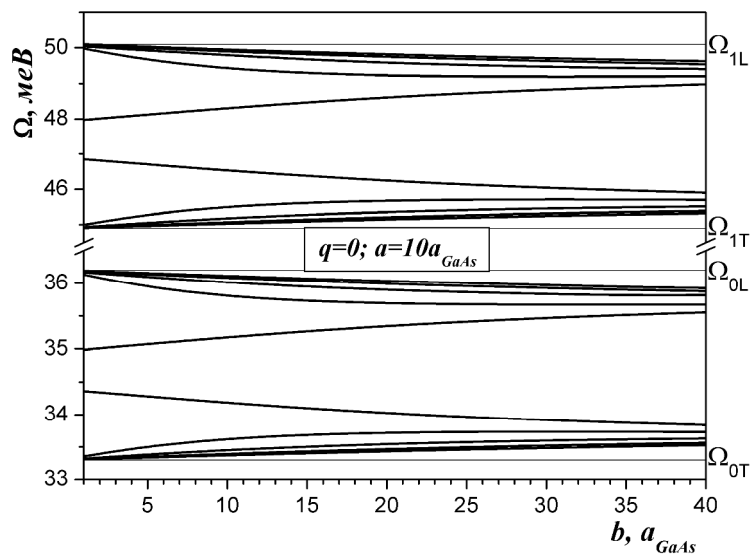


Рис. 4. Залежності енергій інтерфейсних фононів від  $b$  при  $q = 0$  та  $a = 5a_{GaAs}$ .

двадцять гілок фононних коливань вироджуються у вісім гілок. При великих значеннях  $a$  шістнадцять фононних гілок вироджуються у чотири квазінеперервні енергетичні мінізони по чотири гілки у кожній, а інші чотири гілки вироджуються у дві гілки фононних коливань.

На рис. 4 наведені залежності енергій інтерфейсних фононів від розміру  $b$  наночарів AlAs при постійних  $q = 0$  та розмірі  $a = 10a_{GaAs}$  наночарів GaAs.

Рисунок 4 показує, що при малих значеннях  $b$  із двадцяти гілок фононних коливань внаслідок виродження фактично присутні лише вісім гілок. При великих значеннях  $b$  виродження знімається і фононні гілки утворюють чотири квазінеперервні енергетичні мінізони по п'ять фононних гілок у кожній.

## Висновки

Розвинута теорія енергетичного спектра оптичних фононів у плоскій багатошаровій

резонансно-тунельній наноструктурі на основі гетеропереходів GaAs/AlAs вказує на те, що у такій наносистемі існують два типи поляризаційних коливань: обмежені та інтерфейсні.

Енергетичний спектр обмежених оптичних фононів співпадає з енергіями повздовжніх поляризаційних коливань в окремих макроскопічних кристалах GaAs та AlAs.

Внаслідок наявності у наносистемі десяти плоских поверхонь гетеропереходів, спектр енергій інтерфейсних оптичних фононів складається з двадцяти гілок, які в залежності від величини квазіімпульсу та геометричних параметрів складових даної наноструктури, можуть вироджуватись, а також утворювати квазінеперервні енергетичні мінізони.

**Маханець О.М.** - доктор фізико-математичних наук, доцент, професор кафедри теоретичної фізики;  
**Гуцул В.І.** - кандидат фізико-математичних наук, асистент кафедри теоретичної фізики;  
**Кучак А.І.** - аспірантка кафедри теоретичної фізики.

- [1] M. Beck, D. Hofstetter, T. Aellen, J. Faist, et al. Science 264: 553 (1994).
- [2] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, A. Y. Cho. Appl. Phys. Lett. 66, 538 (1995).
- [3] C. Sirtori, J. Faist, F. Capasso and A. Y. Cho, Pure App. Opt. 7, 373 (1998).
- [4] C. Gmachl, F. Capasso, D. L. Sivco, A. Y. Cho, Rep. Prog. Phys. 64, 1533 (2001).
- [5] F.R. Giorgetta, E. Baumann, D. Hofstetter, et al. Appl.Phys.Lett. 91, 111115 (2007).
- [6] D. Hofstetter, C. Manz, K. Köhler, et al. Appl.Phys.Lett. 94, 221106 (2008).
- [7] Qi Jie Wang, C. Pflung, L. Diehl, F. Capasso, et al. Appl.Phys.Lett. 94, 011103 (2009).
- [8] M. A. Strosio and M. Dutta, Phonons in Nanostructures (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).

V.I. Gutsul, O.M. Makhanets, A.I. Kuchak

## Energy Spectrum of Optical Phonons in the Plane Multi-Layer Resonance Tunnel Nanostructure

Chernivtsi National University, 58012 Kotsiubynsky Str., 2, Chernivtsi, Ukraine, e-mail: [ktf@chnu.edu.ua](mailto:ktf@chnu.edu.ua)

In the paper, using the dielectric continuum model, we present the investigation of energy spectra of confined and interface optical phonons in the plane multi-layer resonance tunnel nanostructure produced at the base of heterotransitions GaAs/AlAs. We show that the energies of confined optical phonons in this semiconductor nanoheterostructure are determined by the energies of longitudinal polarization vibrations in the respective massive crystals, creating the nanostructure. We observe the dependences of the energies of interface optical phonons on their quasi-momentum and geometrical sizes of GaAs and AlAs nanoshells.

**Keywords:** optical phonons, resonance tunnel nanostructure, polarization potential, nanolayer, dielectric continuum model.