

Роль ефекту самополяризації та електрон-фононної взаємодії у формуванні енергетичного спектру електрона в наноплівці PbI₂, вміщеній у полімер Е-МАН

О.В. Пуганцева, В.М. Крамар

Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2, 58012 Чернівці, Україна

(Одержано 20.10.2012; опубліковано online 29.12.2012)

Наведено результати теоретичного дослідження ролі ефекту самополяризації та електрон-фононної взаємодії у формуванні енергетичного спектру електрона у плоскій напівпровідниковій наноплівці. Конкретні розрахунки виконані на прикладі наноплівки 2H-PbI₂, вміщеної у сополімер метил-акрилової кислоти (Е-МАН). Установлено, що в ультратонких наноплівках ефект самополяризації дає більший внесок у значення енергії електрона, ніж його взаємодія з поляризаційними оптичними фононами.

Ключові слова: Наногетероструктура, Квантова яма, Енергетичний спектр, Діодид свинцю.

PACS number 73.21.Fg

1. ВСТУП

Властивості діюдида свинцю і гетероструктур на його основі активно досліджуються протягом декількох останніх десятиліть. Це пояснюється їх високою хімічною стабільністю і перспективністю використання для створення квантових оптоелектронних пристроїв: датчиків температури [1], фотоприймачів [2], біомедичних сенсорів [3], а також детекторів Х-та γ-випромінювання, здатних працювати в широкому інтервалі температур [4]. Великі значення ширини забороненої зони та енергії зв'язку екситону в цих структурах сприяють проявам екситонних ефектів у їх оптичних спектрах [5, 6].

Просторові обмеження руху квазічастинок у низьковимірних структурах спричиняють зміни структури енергетичних спектрів, що спостерігалося експериментально за відповідними змінами їх оптичних властивостей багатьма авторами [7]. Поряд з цим теоретично розмірні та температурні залежності енергетичних і оптичних спектрів таких структур досліджені недостатньо.

У цій статті наведено метод і результати розрахунку залежності енергетичного спектра наноплівки (НП) 2H-PbI₂, вміщеної в ізотропне органічне діелектричне середовище, від її товщини. Структурами такого типу можна вважати ультратонкі мікросталіти, отримані і досліджені експериментально у роботах [6, 8].

Показано, що зміна товщини НП приводить до нелінійного зсуву енергетичних рівнів електрона в квантовій ямі (КЯ) у довгохвильову область спектра. Встановлено домінування внеску ефекту самополяризації (СП) [9] у величину зсуву над внеском електрон-фононної взаємодії (ЕФВ) [10].

2. ДОСЛІДЖУВАНА МОДЕЛЬ І ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Розглядається плоска напівпровідникова НП, вміщена у масивне середовище з широкою забороненою зоною. Така структура з подвійним гетеропереходом утворює КЯ скінченної або нескінченної глибини [10, 11]. Будемо вважати профіль КЯ прямокутним і виберемо

систему координат так, щоб її початок був розміщений у центрі НП товщиною a , а площина XOY була паралельною до її поверхні.

Теоретичні дослідження напівпровідникових наногетероструктур зазвичай здійснюються у наближенні ефективних мас для електронної та моделі діелектричного континууму – для фононної систем [11]. Оскільки далі мова буде йти про НП шаруватого напівпровідника, вміщену в аморфне органічне середовище, то гетероперехід можна вважати ненавантаженим і гамільтоніан електрона у КЯ подати у вигляді

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \nabla_{\perp}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + V_s(z) = \hat{H}_0 + V_s(z). \quad (1)$$

Тут m_{\parallel} (m_{\perp}) – ефективна маса електрона у НП, що характеризує його рух у напрямку, паралельному (перпендикулярному) до осі OZ , спрямованої вздовж кристалграфічної осі C шаруватого напівпровідника; ∇_{\perp}^2 – оператор Лапласа, виражений через змінні (x, y) ; V – обмежуючий потенціал КЯ;

$$V_s(z) = \frac{e^2}{2\varepsilon_{\infty}^{(0)}} \sum_{l=\pm 1, \pm 2, \dots} \frac{\xi^{|l|}}{|z - (-1)^l z + la|} \quad (2)$$

– потенціал СП [12];

$$\xi = \frac{\varepsilon_{\infty}^{(0)} - \varepsilon_{\infty}^{(1)}}{\varepsilon_{\infty}^{(0)} + \varepsilon_{\infty}^{(1)}};$$

$\varepsilon_0^{(l)}$ та $\varepsilon_{\infty}^{(l)}$ – статична та динамічна діелектричні проникності мною ($l = 0$) чи бар'єрного ($l = 1$) матеріалу.

Вважаючи бар'єрне середовище діелектриком, прийемо модель нескінченно глибокої КЯ. Тоді власні значення гамільтоніану \hat{H}_0 (енергія електрона у КЯ) визначаються співвідношенням

$$E_n^{(0)}(\vec{k}_{\perp}) = \frac{nh^2}{8m_{\parallel}a^2} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}}, \quad (3)$$

де \vec{k}_{\perp} – хвильовий вектор електрона з n -ої мінізони у

площині XOY. Оскільки потенціал СП $V_s(z)$ може суттєво вплинути на положення енергетичного рівня у КЯ без істотної зміни відповідної хвильової функції [12], то власними функціями оператора (1) можна вважати

$$\psi_{n\vec{k}_\perp}(\vec{\rho}, z) = \sqrt{\frac{2}{a}} e^{i\vec{k}_\perp \cdot \vec{\rho}} \begin{cases} \cos(n\pi z / a), & n = 1, 3, 5, \dots; \\ \sin(n\pi z / a), & n = 2, 4, 6, \dots, \end{cases} \quad (4)$$

де $\vec{\rho}$ – радіус-вектор електрона у площині XOY. Система функцій (4) є повною і ортонормованою, що дозволяє визначити енергію електрона у КЯ з урахуванням ефекту СП площин гетеропереходу

$$E_n(\vec{k}_\perp) = \frac{n\hbar^2}{8m_e a^2} + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_\perp} + \Delta E_{ns}, \quad (5)$$

де $\Delta E_{ns} = \langle \psi_{n\vec{k}_\perp} | V_s(z) | \psi_{n\vec{k}_\perp} \rangle$.

Гамільтоніан вільних фононів у досліджуваній системі можна подати у вигляді

$$\hat{H}_{ph} = \hat{H}_{LO} + \hat{H}_I = \sum_{\lambda, \vec{q}_\perp} \Omega_{LO} (\hat{b}_{\lambda\vec{q}_\perp}^\dagger \hat{b}_{\lambda\vec{q}_\perp} + 1/2) + \sum_{\sigma=S,A} \sum_{\vec{q}_\perp} \Omega_\sigma(\vec{q}_\perp) (\hat{b}_{\sigma\vec{q}_\perp}^\dagger \hat{b}_{\sigma\vec{q}_\perp} + 1/2), \quad (6)$$

де Ω_{LO} – енергія поздовжніх оптичних поляризаційних фононів, обмежених у середовищі КЯ; $\hat{b}_{\lambda\vec{q}_\perp}^\dagger$ ($\hat{b}_{\lambda\vec{q}_\perp}$) – оператор народження (знищення) фононного стану з хвильовим вектором $\vec{q} = (q_\perp, \vec{q}_\perp)$, поздовжня компонента якого (q_\perp) квантується, набуваючи дискретних значень з множини $\lambda\pi/a$ ($\lambda = 1, 2, \dots, N = \text{int}(a/a_0)$ – кількість шарів речовини ямного середовища, стала ґратки якого a_0);

$$\Omega_\sigma(\vec{q}_\perp) = \sqrt{\frac{\epsilon_\sigma^{(0)}(\vec{q}_\perp)\Omega_{LO}^2 + \epsilon_\sigma^{(1)}(\vec{q}_\perp)\Omega_{TO}^2}{\epsilon_\sigma^{(0)}(\vec{q}_\perp) + \epsilon_\sigma^{(1)}(\vec{q}_\perp)}} \quad (7)$$

– енергії інтерфейсних фононів симетричної ($\sigma = S$) та антисиметричної ($\sigma = A$) мод [10, 11]. Тут $\Omega_{TO} = \Omega_{LO} \sqrt{\epsilon_\infty / \epsilon_0}$ – енергія поперечних оптичних коливань,

$$\epsilon_{\sigma=\{S\}}^{(0)}(\vec{q}_\perp) = \epsilon_\infty^{(0)} [1 \mp \exp(-q_\perp a)],$$

$$\epsilon_{\sigma=\{A\}}^{(0)}(\vec{q}_\perp) = \epsilon_\infty^{(0)} [1 \pm \exp(-q_\perp a)],$$

$\hat{b}_{\sigma\vec{q}_\perp}^\dagger$ ($\hat{b}_{\sigma\vec{q}_\perp}$) – оператор народження (знищення) відповідного фононного стану.

Гамільтоніан ЕФВ у НП знайдено у роботі [10]. Для дослідження обраної тут моделі його зручно подати у представленні вторинного квантування за усіма змінними електрон-фононної системи

$$\hat{H}_{e-ph} = \hat{H}_{e-LO} + \hat{H}_{e-I} = \sum_{n, n', \vec{k}_\perp} [\sum_{\lambda, \vec{q}_\perp} F_{nn'}^\lambda(\vec{q}_\perp) \hat{a}_{n\vec{k}_\perp}^\dagger \hat{a}_{n'\vec{k}_\perp + \vec{q}_\perp} \hat{b}_{\lambda\vec{q}_\perp} + \sum_{\sigma, \vec{q}_\perp} F_{nn'}^\sigma(\vec{q}_\perp) \hat{a}_{n\vec{k}_\perp}^\dagger \hat{a}_{n'\vec{k}_\perp} \hat{B}_{\sigma\vec{q}_\perp}], \quad (8)$$

де $\hat{B}_{\lambda\vec{q}_\perp} = \hat{b}_{\lambda\vec{q}_\perp} + \hat{b}_{\lambda\vec{q}_\perp}^\dagger$ (λ – індекс фононної гілки, рівний λ у випадку LO- або σ -у випадку I-фононів), а $F_{nn'}^\lambda(\vec{q}_\perp)$ – функції електрон-фононного зв'язку, явний вигляд яких (для прямокутної КЯ скінченної глибини) знайдений у [13].

ЕФВ перенормує електронний спектр, спричиняючи зсув станів по шкалі енергій на величину, значення якої може бути знайдене методом функцій Гріна [14]. Зокрема, в області низьких температур (формально, при $T = 0$ К) енергія електрона з n -ї мінізони у КЯ визначається положеннями полюсів фур'є-образу відповідної електронної функції Гріна

$$G_n(\vec{k}_\perp, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - E_n(\vec{k}_\perp) - M_n(\vec{k}_\perp, \omega)}$$

де $M_n(\vec{k}_\perp, \omega) \equiv M_{nn}(\vec{k}_\perp, \omega)$ – діагональні матричні елементи масового оператора (МО) досліджуваної системи [14], визначені на хвильових функціях (4). В одноелектронному наближенні

$$M_n(\vec{k}_\perp, \omega) = \sum_{n', \Lambda, \vec{q}_\perp} \frac{|F_{nn'}^\Lambda(\vec{q}_\perp)|^2}{\hbar\omega - E_n(\vec{k}_\perp) - \frac{\hbar^2}{2m_\perp} (\vec{k}_\perp + \vec{q}_\perp)^2 - \Omega_\Lambda} \quad (9)$$

При $T = 0$ у системі можуть існувати тільки віртуальні фонони, тому ЕФВ проявляється виключно в процесах з їх випромінюванням, що спричиняє зміщення електронних станів у довгохвильову область енергій. Величина зміщення дна відповідної мінізони дається виразом

$$\Delta \equiv -M_n(\vec{k}_\perp = 0, \hbar\omega = E_n). \quad (10)$$

Завданням цієї роботи є створення алгоритму і здійснення розрахунку енергії основного стану електрона у КЯ, утвореній вміщенням наноплівки 2H-PbI₂ у некрystalічне діелектричне середовище, та встановлення її залежності від товщини НП.

3. ОТРИМАНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1 Вплив ефекту самополяризації

Використовуючи хвильові функції (4), знайдено поправку до енергії електрона за рахунок СП площин гетеропереходу

$$\Delta E_{ns} = \langle \psi_{n\vec{k}_\perp} | V_s(z) | \psi_{n\vec{k}_\perp} \rangle = \frac{e^2}{\epsilon_\infty^{(0)} a} \sum_{l=0}^{\infty} \left[\xi^{2l+1} \left(\int_0^{\pi/2} \frac{\cos^2 x dx}{x + \pi(l+1/2)} - \int_0^{\pi/2} \frac{\cos^2 x dx}{x - \pi(l-1/2)} \right) + \frac{\xi^{2l+2}}{2l+2} \right]. \quad (11)$$

Розрахунок енергії електрона, виконаний для НП 2H-PbI₂ (параметри кристалічної ґратки $a_\perp \equiv a_0 = 4,557$ Å, $a_\parallel \equiv c_0 = 6,979$ Å; енергія LO-фонона $\Omega_{LO} = 110$ см⁻¹ [15]; діелектричні проникності $\epsilon_{0\parallel} = 9,3$; $\epsilon_{0\perp} = 26,4$; $\epsilon_{\infty\parallel} = 6,0$; $\epsilon_{\infty\perp} = 6,25$ [16]; ефективні маси електрона $m_{\parallel} = 1,25$ і $m_\perp = 0,25$ [17]), вміщеної у полімер Е-МАН ($\epsilon_0 = \epsilon_\infty = 2,38$ [18]), показав, що вплив ефекту СП сут-

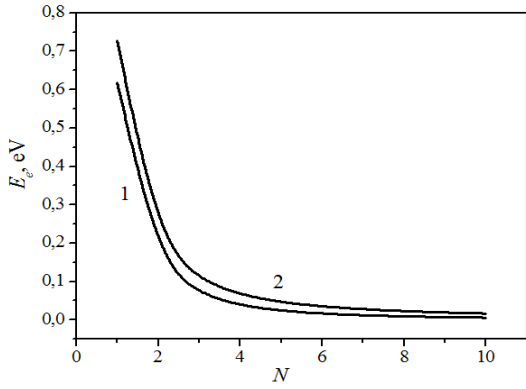


Рис. 1 – Енергія основного рівня електрона без (крива 1) та з урахуванням (крива 2) впливу СП як функція товщини НП (N – кількість шарів PbI_2 у НП)

тевий в ультратонких плівках. Урахування поправки (11) збільшує енергію основного одноелектронного рівня у КЯ тим сильніше, чим менша товщина НП (рис. 1). У НП товщиною в один шар PbI_2 поправка (11) сягає 17 % величини енергії основного рівня у КЯ.

3.2 Вплив електрон-фоновної взаємодії

Отримані у роботі [13] функції електрон-фоновної зв'язку легко трансформуються на випадок нескінченно глибокої КЯ. Для обмежених фононів вони набувають вигляду

$$F_{nn'}^\lambda(\vec{q}_\perp) = i4\lambda \sqrt{\frac{e^2\Omega_{LO}a}{\pi\varepsilon^{(0)}\tilde{S}[(\lambda\pi)^2 + (aq_\perp)^2]}} \times \begin{cases} \frac{\cos[0.5(n-n')\pi]}{\lambda^2 - (n-n')^2} - \frac{(-1)^n \cos[0.5(n+n')\pi]}{\lambda^2 - (n+n')^2} \\ (\lambda = 1, 3, \dots; n \text{ і } n' \text{ однакової парності}); \\ \frac{(-1)^{n-1} \sin[0.5(n-n')\pi]}{\lambda^2 - (n-n')^2} - \frac{\sin[0.5(n+n')\pi]}{\lambda^2 - (n+n')^2} \\ (\lambda = 2, 4, \dots; n \text{ і } n' \text{ різної парності}), \end{cases}$$

а для інтерфейсних –

$$F_{nn'}^\sigma(\vec{q}_\perp) = i \frac{2}{a} \sqrt{\frac{\pi e^2 \Omega_\sigma(\vec{q}_\perp)}{\varepsilon_\sigma^{(0)}(\vec{q}_\perp) \zeta_\sigma(\vec{q}_\perp) \tilde{S} q_\perp}} \cdot f_{nn'}^\sigma(\vec{q}_\perp).$$

Тут i – уявна одиниця; \tilde{S} – площа основної частини поверхні НП;

$$\zeta_\sigma = \frac{\varepsilon^{(0)}\Omega_\sigma^2(\vec{q}_\perp)}{\varepsilon_0^{(0)}\Omega_{TI}^2} \left(\frac{\Omega_{Ll}^2 - \Omega_{TI}^2}{\Omega_{TI}^2 - \Omega_\sigma^2(\vec{q}_\perp)} \right)^2, \quad \frac{1}{\varepsilon^{(0)}} = \frac{1}{\varepsilon_0^{(0)}} - \frac{1}{\varepsilon_\sigma^{(0)}};$$

а

$$f_{nn'}^\sigma(\vec{q}_\perp) = a^2 \sqrt{1 + \exp(-q_\perp a)} \cdot \delta_{\sigma S} \cdot q_\perp \times \text{th} \frac{q_\perp a}{2} \left\{ \frac{\cos[0.5(n-n')\pi]}{[(n-n')\pi]^2 + [q_\perp a]^2} \pm \frac{\cos[0.5(n+n')\pi]}{[(n+n')\pi]^2 + [q_\perp a]^2} \right\},$$

якщо n і n' – однакової парності, та, аналогічно,

$$f_{nn'}^\sigma(\vec{q}_\perp) = -a^2 \sqrt{1 - \exp(-q_\perp a)} \cdot \delta_{\sigma A} \cdot q_\perp \times \text{coth} \frac{q_\perp a}{2} \left\{ \frac{\sin[0.5(n-n')\pi]}{[(n-n')\pi]^2 + [q_\perp a]^2} \pm \frac{\sin[0.5(n+n')\pi]}{[(n+n')\pi]^2 + [q_\perp a]^2} \right\},$$

якщо n і n' – різної парності (знак плюс береться у випадку $n = 1, 3, 5, \dots$, для $n = 2, 4, 6, \dots$ – мінус); $\delta_{oo} - \delta$ -символ Кронекера.

Функції зв'язку основного стану електрона у КЯ з ЛО-фононами за участі n -го стану (F_{1n}^λ) є спадними функціями хвильового вектора фонона у площині КЯ (\vec{q}_\perp) (рис. 2). Значення їх залежать параметрично від квантових чисел електронного (n , рис. 2, а) та фоновного (λ , рис. 2, б) станів – стрімко зменшуються при збільшенні цих параметрів. Такий характер залежності дозволяє обмежити кількість доданків у (9), обриваючи суми за n і λ на тих їх значеннях, за яких відповідні функції зв'язку стають нехтовно малими порівняно з F_{11}^1 .

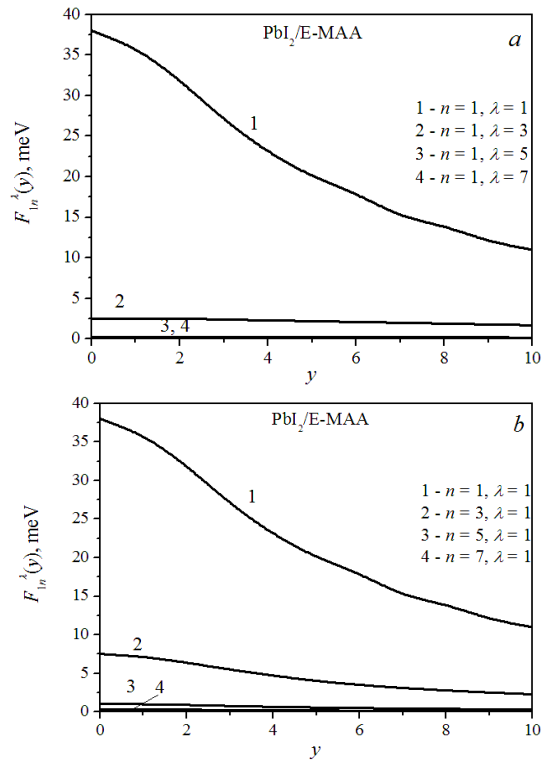


Рис. 2 – Залежність функцій зв'язку з ЛО-фононами від безрозмірного хвильового вектора фонона $y = aq_\perp$ при різних λ (а) та n (б)

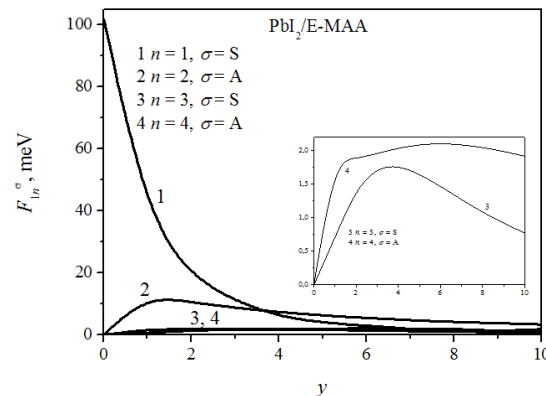


Рис. 3 – Залежність функцій зв'язку з І-фононами від безрозмірного хвильового вектора фонона $y = aq_\perp$ при різних значеннях n

Зв'язок з І-фононами також послаблюється при збільшенні номера комбінуючого рівня n , проте залежність F_{nn}^σ від \bar{q}_\perp , за винятком $n = 1$, не монотонна (рис. 3).

Указані закономірності можна використати для знаходження сум відповідних рядів у (9).

Переходячи у (9) від суми за \bar{q}_\perp до інтеграла, отримуємо МО електрон-фононної системи у НП

$$M_1(\bar{k}_\perp, \omega) = \frac{\tilde{S}}{4\pi^2} \int_0^{\pi/a_0} q_\perp dq_\perp \int_0^{2\pi} d\phi \times \left\{ \sum_{n \geq 2} \left[\frac{|F_{1n}^\lambda(q_\perp)|^2}{\lambda \hbar \omega - E_n - \hbar^2/(2m)(k_\perp^2 + 2k_\perp q_\perp \cos \phi + q_\perp^2) - \Omega_{LO}} + \frac{|F_{1n}^\sigma(q_\perp)|^2}{\hbar \omega - E_n - \hbar^2/(2m)(k_\perp^2 + 2k_\perp q_\perp \cos \phi + q_\perp^2) - \Omega_\sigma(q_\perp)} \right] \right\}.$$

Використовуючи знайдені функції зв'язку, отримано явний вигляд залежності МО від енергії електрона $\hbar\omega$ і товщини НП a в області дна основної мінізони ($n = 1, \bar{k}_\perp = 0$):

$$M_1(\omega, a) = M_{11}^{(LO)}(\omega, a) + M_{11}^{(I_s)}(\omega, a) + \sum_{n \geq 2} [M_{1n}^{(LO)}(\omega, a) + M_{1n}^{(I_s)}(\omega, a)] \quad (12)$$

де

$$M_{1n}^{(LO)}(\omega, a) = \frac{4e^2}{\pi^2 \varepsilon(0) a} \times \sum_{\lambda} \frac{\lambda^2}{(\hbar\omega - E_n)/\Omega_{LO} + (\pi\hbar\lambda)^2/(2m_\perp a^2 \Omega_{LO}) - 1} \times \ln \frac{1 + (a/\lambda a_0)^2}{1 - (\pi\hbar)^2/[2m_\perp a^2 (\hbar\omega - E_n - \Omega_{LO})]} \times \begin{cases} \left(\frac{\cos[0.5(1-n)\pi]}{\lambda^2 - (1-n)^2} + \frac{\cos[0.5(1+n)\pi]}{\lambda^2 - (1+n)^2} \right)^2 & (\lambda = 1, 3, \dots; n \text{ не парне}); \\ \left(\frac{\sin[0.5(1-n)\pi]}{\lambda^2 - (1-n)^2} - \frac{\sin[0.5(1+n)\pi]}{\lambda^2 - (1+n)^2} \right)^2 & (\lambda = 2, 4, \dots; n \text{ парне}); \end{cases}$$

і

$$M_{11}^{(I_s)}(\omega, a) = \frac{2e^2}{a^3} \times \int_0^{\pi a/a_0} \frac{\Omega_\sigma(y) |f_{1n}^\sigma(y)|^2}{\varepsilon^{(0)}(y) \zeta_\sigma(y) [\hbar\omega - E_n - \Omega_\sigma(y) - \hbar^2 y^2 / 2m_\perp a^2]} dy$$

– доданки, що визначають внесок взаємодії основного рівня електрона в КЯ з LO- та І-фононом за участі n -го стану, відповідно ($y = a q_\perp$).

На рис. 4а наведено результат розрахунку величини зміщення основного енергетичного рівня елек-

трона у КЯ, викликаного взаємодією з LO-фононами (без участі вищих ($n \geq 2$) рівнів) ($\Delta_{LO} = -M_{11}^{(LO)}(E_1, a)$) для НП різної товщини. Видно, що взаємодія з LO-фононами зміщує основний рівень електрона у довгохвильову область тим сильніше, чим більша товщина НП. Внесок вищих ($\lambda \geq 2$) LO-фононних станів (крива 2) малий порівняно з внеском основного (крива 1).

Вплив вищих електронних станів ($n \geq 2$) показаний на рис. 4б). Видно, що ЕФВ за участі вищих електронних станів (крива 2) зміщує основний рівень електрона в КЯ у довгохвильову область тим сильніше, чим більша товщина НП.

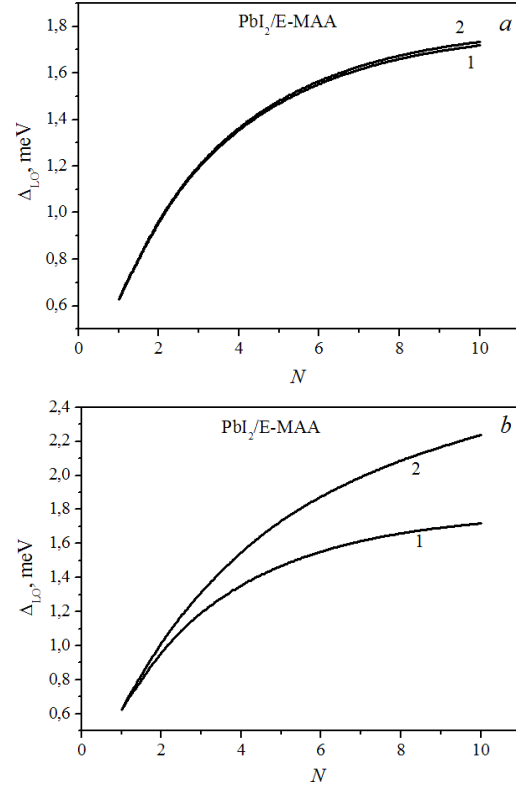


Рис. 4 – Величина зсуву основного енергетичного рівня електрона, викликаного ЕФВ з LO-фононами, як функція товщини НП (N), розрахована в наближеннях взаємодії за участі тільки основного (а) та вищих (б) електронних станів

Цей факт пояснюється тим, що при збільшенні товщини НП зменшується відстань між основним та збудженими рівнями, що й зумовлює зростання внеску останніх у величину зсуву.

Результати аналогічних розрахунків, виконаних для випадку взаємодії електрона з І-фононами, наведені на рис. 5.

Взаємодія з І-фононами зміщує основний рівень у довгохвильову область. Проте, характер залежності величини зміщення від товщини НП тут інший – спадний. Хід кривих 2 ілюструє вплив вищих електронних станів на значення величини зсуву основного енергетичного рівня, на відміну від кривих 1, які показують залежність $\Delta_l(N)$, отриману без урахування впливу вищих рівнів. Видно, що взаємодія з І-фононами за участі вищих електронних станів посилює зсув дна мінізони в довгохвильову область і тим більше, чим більша товщина НП.

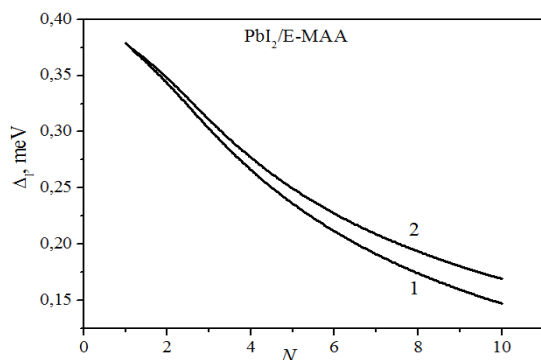


Рис. 5 – Величина зсуву основного енергетичного рівня електрона, викликаного ЕФВ з І-фононами, як функція товщини НП (N), розрахована в наближеннях взаємодії за участі тільки основного (1) та вищих (2) станів

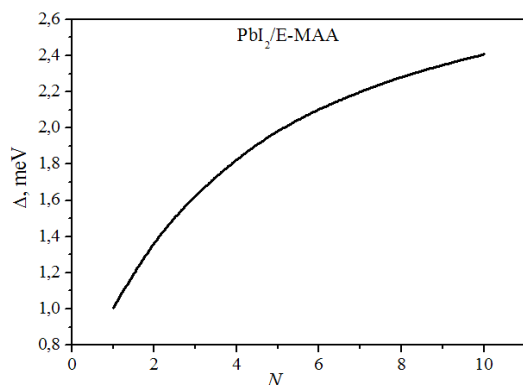


Рис. 6 – Величина сумарного зсуву (Δ) основного рівня електрона, викликаного взаємодією з LO-та І-фононами, як функція товщини НП (N)

Як видно з (12), величина сумарного зміщення (Δ), спричиненого фононами обох типів, визначається сумою парціальних зміщень

$$\Delta = \Delta_{LO} + \Delta_I.$$

Характер залежності величини сумарного зміщення дна основної мінізони електрона у КЯ від товщини НП наведено на рис. 6, з якого видно, що вона є нелінійною, монотонно зростаючою функцією аргументу N .

4. ВИСНОВКИ

Отримано явний вигляд поправки на СП, функцій зв'язку електрона з оптичними поляризаційними фононами та МО електрон-фононої системи у нескінченно глибокій КЯ. У рамках обраної моделі досліджено вплив ЕФВ на положення дна основної мінізони вільного носія у НП.

Розрахунок, виконаний на прикладі НП 2H-PbI₂, вміщеної у полімер Е-ММА, показав, що у цій наносистемі ефект СП площин гетеропереходів дає суттєво більший внесок (до 100 меВ) у значення енергії одноелектронного стану в КЯ, аніж ЕФВ (декілька меВ). Вплив ефекту СП стрімко зростає при зменшенні товщини НП, тоді як ЕФВ проявляється сильніше при її збільшенні.

Отримані результати можуть бути використані для дослідження оптичних властивостей нанокристалів дийодиду свинцю, зокрема залежності його екситонного спектру від товщини та температури.

Self-polarization Effect and Electron-phonon Interaction Contributions in Forming of Electron Energy Spectrum of PbI₂ Nanofilm Embed in E-MAA Copolymer

O.V. Pugantseva, V.M. Kramar

Yuriy Fed'kovych Chernivtsi National University, 2 Kotsiubynskogo Str., 58012 Chernivtsi, Ukraine

The paper describes results of theoretical study of the role of self-polarization effect and electron-phonon interaction in the formation of the energy spectrum of electrons in semiconductor flat nanofilm. Concrete calculations are performed using the example of 2H-PbI₂ nanofilm embed in the methyl-acrylic acid copolymer (E-MAA). It was found that contribution of self-polarization's effect to the value of the electron energy in ultrathin nanofilms is more than from the interaction with polarizing optical phonons.

Keywords: Nanoheterostructure, Quantum well, Energy spectrum, Lead iodide.

Роль ефекта самополяризації і електрон-фононного взаємодіяння у формуванні енергетичного спектра електрона в наноплівці PbI₂, помещеної в полімер Е-ММА

О.В. Пуганцева, В.М. Крамар

*Черновецкий национальный университет им. Юрия Федьковича,
Ул. Коцюбинского, 2, 58012 Черновцы, Украина*

Наведены результаты теоретического исследования роли эффекта самополяризации и электрон-фононного взаимодействия у формировании энергетического спектра электрона в плоской полупроводниковой нанопленке. Конкретные расчеты сделаны на примере нанопленки 2H-PbI₂, помещенной в сополимер метил-акриловой кислоты (Е-ММА). Установлено, что в ультратонких нанопленках эффект самополяризации дает больше вклад в значение энергии электрона, чем его взаимодействие с поляризационными оптическими фононами.

Ключевые слова: Наногетероструктура, Квантовая яма, Энергетический спектр, Дийодид свинца.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. V. Deich, M. Roth, *Nucl. Instrum. Meth.* **380**, 169 (1996).
2. C.-H. Yang, S.-L. Yau, L.-J. Fanl, *Surf. Sci.* **540**, 274 (2003).
3. J.F. Condeles, T.M. Martins, T.C. Dos Santos, *J. Non-Cryst. Solids* **338**, 81 (2004).
4. M. Matuchova, K. Zdansky, J. Zavadil, *J. Mather. Sci.-Mater. El.* **20**, 289 (2009).
5. V.B. Kapustyanyk, R.M. Pasternak, A.Z. Kalush, *J. Appl. Spectr.* **74**, 283 (2007).
6. A. Yamamoto, H. Nakahara, S. Yano, *phys. status solidi B* **224**, 301 (2001).
7. M. Balkanski, R.F. Wallis, *Semiconductor Physics and Applications* (Oxford University Press: Oxford and New York: 2000).
8. N. Preda, L. Mihut, I. Baltog, *J. Optoelectron. Adv. M.* **8**, 909 (2006).
9. Л.В. Келдыш, *Письма в ЖЭТФ* **29**, 776 (1979).
10. N. Mori, T. Ando, *Phys. Rev. B* **40**, 6175 (1989).
11. L. Wendler, R. Pechstedt, *phys. status solidi b* **141**, 129 (1987).
12. M. Kumagai, T. Takagahara, *Phys. Rev. B* **40**, 12359 (1989).
13. М.В. Ткач, В.М. Крамар, *УФЖ* **53**, 810 (2008) (M.V. Tkach, V.M. Kramar, *Ukr. J. Phys.* **53** No8, 810 (2008)).
14. М.В. Ткач, *Квазічастинки у наногетеросистемах. Квантові точки і дроти* (Чернівці: Вид-во ЧНУ ім. Ю. Федьковича: 2003).
15. М.С. Бродин, И.В. Блонский, *Экситонные процессы в слоистых кристаллах* (Киев: Наук. думка: 1986).
16. O. Madelung, U. Rossler, H. Schulz, *Non-Tetrahedraly Bonded Elements and Binary Compounds* (Springer-Verglag: Berlin: 1998).
17. R. Minder, G. Ottaviani, C. Canali, *J. Phys. Chem. Sol.* **37**, 417 (1976).
18. J.A. Brogan, C.C. Berndt, *Polym. Eng. Sci.* **38**, 1873 (1998).