

О.В. Пуганцева, В.М. Крамар

Залежність енергії екситону від товщини напівпровідникової наноплівки

Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського 12, м. Чернівці, 58000, Україна E-mail: kramar@itf.cv.ua

Наведено результати теоретичного дослідження впливу ефектів взаємодії квазічастинок зі своїми електростатичними зображеннями на значення енергії зв'язку та енергії екситонного переходу у наноплівках різної товщини. Конкретні розрахунки виконані на прикладі наноплівок, виготовлених на основі подвійного гетеропереходу PbI₂/E-MAA. Гетероперехід вважається ненавантаженим, наносистема моделюється нескінченно глибокою квантовою ямою і характеризується суттєвою відмінністю діелектричних проникностей по обидва боки гетеропереходу. Результати розрахунків узгоджуються з відомими даними експериментальних вимірювань.

Ключові слова: наноструктура, квантова яма, плівка, екситон, енергія зв'язку, напівпровідник, дийодид свинцю.

Стаття постуила до редакції 12.07.2011 ; прийнята до друку 15.09.2011.

Вступ

У спектрах поглинання, відбивання, фотолюмінесценції та фотопровідності плоских напівпровідникових наногетероструктур з квантовими ямами (КЯ) суттєво проявляються екситонні ефекти [1 - 3]. Експериментально встановлено домінування безфонних ліній екситонних переходів у спектрах фотолюмінесценції [4], а також залежність енергії екситону від ширини КЯ, зовнішніх полів та температури [5 - 7].

Проблемі дослідження екситонних станів та їх взаємодії з коливаннями атомів у наноструктурах з КЯ присвячено багато експериментальних і теоретичних робіт. Зокрема, у роботі [8] обчислено енергії переходу в основний ек-

ситонний стан у плоскій наноплівці (НП) та енергії зв'язку екситона (ЕЗ) у моделі прямокутної КЯ скінченної глибини без урахування взаємодії з електростатичними зображеннями у площинах гетеропереходів. Проте, за наявності істотних відмінностей діелектричних проникностей ямного та бар'єрного середовищ нехтувати цією взаємодією неправомірно [9].

У цій статті наводяться результати теоретичного дослідження впливу ефектів взаємодії квазічастинок зі своїми електростатичними зображеннями на значення ЕЗ та енергії екситонного переходу у НП

різної товщини. Конкретні розрахунки виконані на прикладі НП, виготовлених на основі гетеропереходів дийодиду свинцю і сополімеру етилен-метакрілової кислоти (Е-MAA). Гетероперехід PbI₂/E-MAA вважається ненавантаженим через особливості структури шаруватого напівпровідника PbI₂, у напрямку росту шарів якого утворюється практично плоска поверхня без обірваних зв'язків [10]). Дана наносистема характеризується суттєвою відмінністю діелектричних проникностей по обидва боки гетеропереходу (6,1 у 2H-PbI₂ [11] та 2,38 у E-MAA [12]).

І. Постановка задачі та модель

Розглянуто модель екситону Ваньє-Мотта у плоскій напівпровідниковій НП. Кожна з квазічастинок знаходиться у своїй нескінченно глибокій прямокутній КЯ і взаємодіє з іншою та з електростатичними зображеннями обох у площинах гетеропереходів.

У наближенні ефективних мас і невироджених зон, без урахування взаємодії з фононами гамільтоніан екситону в КЯ має вигляд [13]

$$\hat{H} = \sum_{j=e,h} \left\{ \frac{P_{j\parallel}^2}{2m_{j\parallel}} + \frac{P_{jz}^2}{2m_{jz}} + V(z_j) + V_s(z_j) \right\} + V_{e-h}(\rho, z_e, z_h), \quad (1)$$

де $V(z_j)$ – обмежувачий потенціал квазічастинки у КЯ;

$$V_s(z_j) = \frac{e^2}{2e_{\infty}^{(0)}} \sum_{n \neq 0} \frac{x^{|n|}}{|z_j - (-1)^n z_j + na|}$$

та

$$V_{e-h}(\mathbf{r}, z_e, z_h) = -\frac{e^2}{e_{\infty}^{(0)} r} - \frac{e^2}{e_{\infty}^{(0)}} \sum_{n \neq 0} \frac{x^{|n|}}{\sqrt{r^2 + [z_e - (-1)^n z_h + na]^2}}$$

– потенціали самополяризації (взаємодії зі своїм електростатичним зображенням у площині гетеропереходу), відповідно, електрона ($j=e$), дірки ($j=h$) і екситону [9]. Тут

$$\mathbf{x} = \frac{\mathbf{e}_{\infty}^{(0)} - \mathbf{e}_{\infty}^{(1)}}{\mathbf{e}_{\infty}^{(0)} + \mathbf{e}_{\infty}^{(1)}}$$

де справа вгорі біля діелектричної проникності (ϵ_{∞}) вказано індекс середовища – ямний (0) чи бар'єрний (1) матеріал. Використовуючи систему центра мас зв'язаних кулонівською взаємодією електрона й дірки, що здійснюють переносний рух у площині XOY, паралельній до площини гетеропереходу, подаємо (1) у вигляді

$$\hat{H} = \hat{H}_e^{\perp} + \hat{H}_h^{\perp} + \hat{H}_{SS} + U(\rho, z_e, z_h), \quad (2)$$

де \hat{H}_j^{\perp} гамільтоніан, що описує квантований рух квазічастинки у напрямку вісі OZ, перпендикулярної до площини гетеропереходу;

$$\hat{H}_{SS} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) \right] - \frac{e^{*2}}{\epsilon_{\infty}^{(0)} \rho}$$

– модифікований гамільтоніан Шінада-Сугано [14], що описує відносний рух електрона й дірки у квазідвовимірному екситоні, а доданок

$$U(\mathbf{r}, z_e, z_h) = \frac{e^{*2}}{e_{\infty}^{(0)} r} - \frac{e^2}{e_{\infty}^{(0)} \sqrt{r^2 + (z_e - z_h)^2}}$$

враховує відмінність руху електрон-діркової пари у НП від двовимірного [8]. Тут $\mathbf{r} = (x_e - x_h, y_e - y_h)$; μ – зведена маса екситону; $e^* = \beta e$, де β – варіаційний параметр.

У роботах [9, 15, 16] показано, що потенціал самополяризації $V_s(z_j)$ може суттєво вплинути на величину зсуву енергії підзони без істотної зміни відповідної хвильової функції. Тому в якості власної функції оператора (2) можна використати добуток функції основних станів електрона ($m_e = 1$), дірки ($m_h = 1$) у КЯ [17] та 2D-екситону ($n = 0, m = 0$) [14], що дало змогу знайти поправки

$$\Delta E_s^{(j)} = \frac{e^2}{e_{\infty}^{(0)} a} \sum_{n=0}^{\infty} \left[x^{2n+1} \left(\int_0^{\frac{p}{2}} \frac{\cos^2 x dx}{x + p(n+1/2)} - \int_0^{\frac{p}{2}} \frac{\cos^2 x dx}{x - p(n-1/2)} \right) + \frac{x^{2n+2}}{2n+2} \right]$$

до енергії E_1 основного стану електрона (дірки) у КЯ [17], викликані присутністю у відповідних гамільтоніанах потенціалів поляризації, а також

енергію зв'язку E_b основного екситонного стану в нескінченно глибокій КЯ шириною a

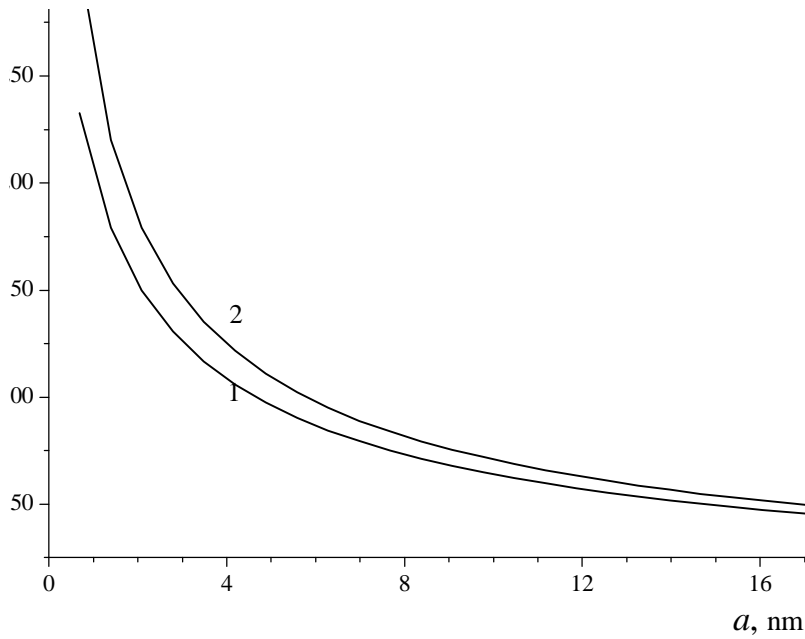


Рис. 1. Залежність енергії зв'язку екситону E_b від товщини НП a , розрахована без (1) та з урахуванням (2) ефектів поляризації площини гетеропереходу.

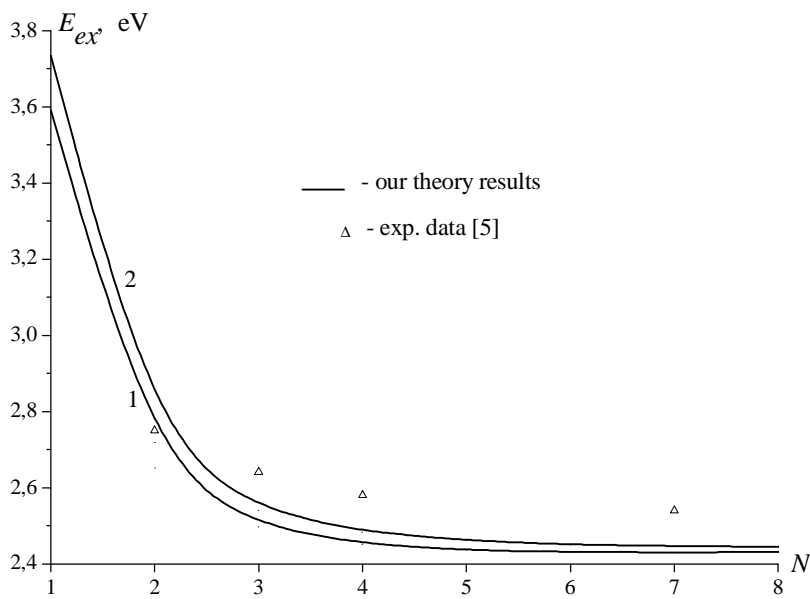


Рис. 2. Залежність енергії переходу в основний екситоний стан від товщини НП, розрахована без (1) та з урахуванням (2) ефектів поляризації площини гетеропереходу (N – кількість шарів PbI_2 у НП).

$$E_b(a) = 4R_{ex} b_0^4 \left\{ \frac{64a}{\rho a_{ex}} [I_0(a, b_0) + \frac{e_{0||}^{(0)}}{e_{0\perp}^{(0)}} \sum_{n=1}^{\infty} x^n I_n(a, b_0)] - 1 \right\}$$

Тут

$$I_n(a, \beta) = \int_0^{2\pi} \cos nx \cdot \sin^2 \frac{x}{2} \left[\frac{1}{x} - \frac{x}{x^2 + 4\pi^2} \right]^2 \frac{\ln\left(\frac{a_{ex} x}{4a\beta^2}\right)}{x^2 - \left(\frac{4a\beta^2}{a_{ex}}\right)^2} dx ;$$

$$a_{ex} = \frac{e_{\infty}^{(0)}}{m} a_B \quad R_{ex} = \frac{e^2}{2a_{ex}e_{\infty}^{(0)}} \quad \text{– відповідно,}$$

радіус і стала Рідберга екситону; a_B – радіус Бора; β_0

$$E_{ex}(a) = E_g + E_1^{(e)}(a) + \Delta E_s^{(e)}(a) + E_1^{(h)}(a) + \Delta E_s^{(h)}(a) - E_b(a)$$

II. Результати й обговорення

Обчислення енергії зв'язку та енергії переходу до основного екситонного стану у НП різної товщини а здійснено з використанням параметрів дийодиду свинцю: $\epsilon_{0||} = 9,31$; $\epsilon_{0\perp} = 26,4$; $\epsilon_{\infty} = 6,1$; $m_e = 1,25 m_0$; $m_h = 1,1 m_0$ [11]. Результати розрахунків наведені на рис. 1, 2.

З рис.1 видно, що зменшення товщини НП приводить до зростання ЕЗ екситону, що пов'язане посиленням просторового обмеження руху квазічастинок у КЯ.

Видно, що зменшення товщини НП викликає зростання ЕЗ, значення якої більше при врахуванні

– значення варіаційного параметра, що мінімізує енергію основного стану екситону у НП товщиною а

поляризаційних ефектів; вплив останніх суттєвий для малих значень товщини НП ($a < 20$ нм).

З рис. 2 видно, що й енергія переходу в основний екситонний стан зростає при зменшенні товщини НП, що якісно узгоджується з даними експерименту [5]. Поляризаційні ефекти також суттєві при малих а. Кількісне неспівпадання результатів розрахунку з даними вимірювань [5] пояснюються тим, що в них не враховано взаємодії квазічастинок з фононами, що може суттєво впливати на енергію екситону [11].

Пуганцева О.В. – аспірантка кафедри загальної фізики;

Крамар В.М. – д. ф.-м. н., завідувач кафедри кафедри загальної фізики.

- [1] Н.Н.Ф. Панов, А.Н. Пихтин. Экситонные эффекты в фотопроводимости квантово-размерных структур $Ga_xIn_{1-x}As/InP$ // *ФТП*, **31**(7), сс. 848-850 (1997).
- [2] B. Deveaud, L. Kappei, J. Berney *et al.* Excitonic effects in the luminescence of quantum wells / B. Deveaud, L. Kappei, J. Berney [et al.] // *Chem. Phys.*, **318**(1-2), pp. 104-117 (2005).
- [3] A. Amo, D. Ballarini, D. Santivo *et al.* Optically induced ultrafast quenching of the semiconductor quantum well luminescence // *Appl. Phys. Lett.*, **92**(6), pp. 061912(1-3) (2008).
- [4] W.Z. Shen, W.G. Tang, S.C. Shen. Free Exiton Binding Energy in Strained Ge_xSi_{1-x}/Si Quantum Wells // *Phys. stat. sol. (b)*, **189**(1), pp. K45-K47 (1995).
- [5] A. Yamamoto, H. Nakahara, S. Yano *et al.* Exciton dynamics in PbI_2 ultra-thin microcrystallites // *Phys. stat. sol. (b)*, **224**(1), pp. 301-305 (2001).
- [6] S.H. Oh, M.S. Jang, S.H. Kim *et al.* Dependence of the Exciton Transition on the CdTe Well Width in CdTe/ZnTe Strained Single Quantum Wells // *Journ. Korean Phys. Soc.*, **39**(3), pp. 458-461 (2001).
- [7] Yu-Hsuan Kuo and Yin-Shun Li. Direct-gap exciton and optical absorption in the Ge/SiGe quantum well system // *Appl. Phys. Lett.*, **94**(12), pp. 121101(1-3) (2009).
- [8] В.М. Крамар. Енергія екситона в напівпровідникових наноплівках // *Журнал фізичних досліджень*, **14**(1), сс. 1703(1-3) (2010).
- [9] M. Kumagai, T. Takagahara. Excitonic and nonlinear optical properties of dielectric quantum-well-structure // *Phys. Rev. B*, **40**, pp. 12359-12 (1989).
- [10] R.A. Street, M. Mulato, M. Schieber [et al.]. Comparative study of PbI_2 and HgI_2 as direct detector materials for high resolution X-ray image // *Proc. SPIE*, **4320**, pp. 1-12 (2001).
- [11] М.С. Бродин, И.В. Блонский. *Экситонные процессы в слоистых кристаллах*. Наук. думка, Киев. 253 с. (1986).
- [12] J.A. Brogan, C.C. Berndt, G.P. Simon, D. Hewitt. Physical and relaxation properties of flame-sprayed ethylene-methacrylic acid copolymer // *Polymer Engineering and Science*, **38**(11), pp. 1873-1881 (1988).
- [13] R. Zheng, M. Matsuura. Polaronic effects on excitons in quantum wells // *Phys. Rev. B*, **57**(3), pp. 1749-1761 (1998).

- [14] M. Shinada, S. Sugano. Interband Optical Transitions in Extremely Anisotropic Semiconductors // *J. Phys. Soc. Japan*, **21** (10), pp. 1936-1946 (1966).
- [15] J. Cen, R. Chen, K.K. Bajaj. Exciton binding energies in a dielectric quantum well in a magnetic field // *Phys. Rev. B*, **50**(15), pp. 10947-10952 (1994).
- [16] D.B. Tran Thoai, R. Zimmerman, M. Grudman, and D.Bimberg. Image Charges in Semiconductor Quantum Wells: Effect on Exciton Binding Energy // *Phys. Rev. B*, **42**(9), pp. 5906-5909 (1990).
- [17] N. Mori, T. Ando. Electron–optical-phonon interaction in single and double heterostructures // *Phys. Rev. B*, **40**(9), pp. 6175-6188 (1989).

O.V. Pugantseva, V.M. Kramar

Energy Dependence of Exciton the Thickness Semiconductor Nanothin Films

*Chernivtsi National University,
2 Kotsybynsky Str., Chernivtsi, 58012, Ukraine,
E-mail: kramar@itf.cv.ua*

The theoretical research results of the influence of the effects of quasiparticles interaction with their electrostatic images on the value of binding energy and transition exciton energy in different thickness nanofilms are presented in this report. Specific calculations were performed for nanofilms made on the basis of double heterojunction $\text{PbI}_2/\text{E-MAA}$. Heterojunction is unstrained ones, nanosystem modeled by an infinitely deep quantum well and characterized by significant difference of dielectric constants on the both sides of heterojunction. The calculation results are consistent with known experimental data measurements.

Key words: nanostructure, quantum well, film, exciton, binding energy, semiconductor, lead iodide.