

Перенормування енергії екситонного збудження в наноплівці дийодиду свинцю внаслідок ефектів самополяризації та електрон-фононної взаємодії

О.В. Пуганцева, В.М. Крамар

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

(Одержано 25.06.2013; у відредагованій формі – 14.10.2013; опубліковано online 17.10.2013)

Наведено результати теоретичного дослідження внесків ефекту самополяризації та електрон-фононної взаємодії у значення енергії екситону в плоскій напівпровідниковій наноплівці. Розрахунки енергій зв'язку та основного стану екситону виконані на прикладі наноплівки 2H-PbI_2 , вміщеної у сополімер етилен-метакрилової кислоти (Е-ММА). Установлено, що в ультратонких наноплівках ефект самополяризації дає більший внесок у значення енергії екситону, ніж його взаємодія з поляризаційними оптичними фононами.

Ключові слова: Наногетероструктура, Квантова яма, Екситон, Дийодид свинцю.

PACS number: 73.21.Fg

1. ВСТУП

Тонкі плівки дийодиду свинцю і низьковимірні наноструктури на його основі вважаються перспективним матеріалом для створення ряду квантових оптоелектронних пристроїв [1-5]. Великі значення зарядових чисел атомів Pb та I, ширини забороненої зони та енергії зв'язку екситону в цих структурах роблять можливим спостереження екситонних ефектів у їх оптичних спектрах [6-8].

Положення екситонних ліній в оптичних спектрах низьковимірних напівпровідникових кристалічних структур визначається умовами просторових обмежень (ПО) електронної та фононної систем [9, 10], а також ефектом самополяризації (СП) – взаємодією носіїв з поляризаційними зарядами на межах гетеропереходів [11].

Дослідженню закономірностей формування та динаміки екситонних станів у таких структурах присвячена чимала кількість експериментальних і теоретичних робіт. Екситонні спектри гетероструктур з одиночними квантовими ямами (КЯ) спостерігалися у роботах експериментального характеру [6, 8, 12-16]. Зокрема, авторами [6, 8, 15, 16] отримані гібридні – органічно-неорганічні, – гетероструктури такого типу на основі дийодиду свинцю, цікаві поєднанням властивостей обох матеріалів, у спектрах яких спостерігалися екситонні лінії. Теоретичні дослідження екситонних станів у одиночних КЯ виконані рядом авторів, різними методами, у різних наближеннях (див., наприклад, [17-21]), проте наноструктури на основі шаруватих напівпровідників у них не розглядалися.

У роботі [6] експериментально спостерігалися набори піків на довгохвильовому крилі низькотемпературної ($T = 2\text{ K}$) смуги фундаментального поглинання ультратонких мікрочастини PbI_2 (гексагональних пластинок з поперечним діаметром 2-80 нм) у матриці Е-ММА. Їх поява пов'язувалася авторами з реалізацією екситонних переходів, а відмінність положення – з дисперсією товщини пластинок. Установлено, що при збільшенні товщини пластинки максимум екситонної смуги зміщується у довгохвильову область спектра.

За умови, що товщина пластинки суттєво менша її поперечних розмірів, її можна вважати квазидво-

вимірною структурою. У цій статті наведено результати теоретичного дослідження впливу ефектів ПО, СП та екситон-фононної взаємодії (ЕФВ) на значення енергії основного екситонного стану в такій структурі – наноплівці (НП) Е-ММА / PbI_2 / Е-ММА.

У рамках моделі діелектричного континууму, використовуючи наближення ефективних мас та методи теорії функцій Гріна, отримано аналітичні вирази, що дозволяють обчислити енергію основного екситонного стану в НП та енергію його зв'язку. Розрахована залежність енергії екситону від товщини НП виявляється нелінійно спадною і визначається в основному впливом ПО. Внески ефектів СП і ЕФВ суттєво менші, а їх співвідношення змінюється при зміні товщини НП. В ультратонких НП вплив ефекту СП (зсув основного екситонного стану в бік більших енергій) переважає вплив ЕФВ (зсув протилежного напрямку). При збільшенні товщини НП вплив ефекту СП зменшується, а ЕФВ – зростає.

2. ДОСЛІДЖУВАНА МОДЕЛЬ І ГАМІЛЬТОНІАН ЗАДАЧІ

Моделюємо НП плоскою подвійною гетероструктурою І типу, ямним матеріалом якої є шаруватий напівпровідник, уміщений в масивне діелектричне середовище. Особливості кристалічної структури шаруватих напівпровідників зумовлюють атомарну гладкість їх поверхонь з малою кількістю обірваних зв'язків [22]. Отже, товщина НП a виявляється кратною до товщини шарового пакету c ($a = Nc$, де N – натуральне число). Гетероперехід такої структури можна вважати ненавантаженим, КЯ – прямокутною та, за наявності діелектричного бар'єрного середовища, – нескінченно глибокою.

За цих умов гамільтоніан екситон-фононної системи подається у вигляді суми

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{ex}} + \hat{H}_{\text{ph}} + \hat{H}_{\text{int}}$$

одночастинкових гамільтоніанів вільних екситону (\hat{H}_{ex}) і фонона (\hat{H}_{ph}), ув'язнених у НП, та оператора їх взаємодії (\hat{H}_{int}).

Розмістивши початок системи координат у центрі НП, спрямуємо вісь OZ уздовж кристалографічної осі C шаруватого кристалу, використаємо модель екситону Ваньє-Мотта. Тоді у системі центра мас екситону

$$\hat{H}_{\text{ex}} = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{\rho}}^2}{2\mu} + \sum_{j=e,h} \hat{H}_j(z_j) + V_{e-h}(\vec{\rho}, z_e, z_h), \quad (1)$$

де

$$\hat{H}_j(z_j) = -\frac{\hbar^2}{2m_j^{||}} \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} + V(z_j) + V_{\text{sp}}(z_j) \quad (2)$$

– одночастинковий гамільтоніан, що описує рух електрона ($j = e$) або дірки ($j = h$) у відповідній КЯ, яка задається обмежувачим потенціалом

$$V(z_j) = \begin{cases} 0, & |z_j| < a/2; \\ \infty, & |z_j| \geq a/2; \end{cases}$$

$$V_{\text{sp}}(z_j) = -\frac{e^2}{2\varepsilon_{\infty}^{(0)}} \sum_{n \neq 0} \frac{\xi^{|n|}}{|z_j - (-1)^n z_j + na|}$$

– потенціал взаємодії носія зі своїм електростатичним зображенням у площинах гетеропереходів (потенціал СП [11]);

$$V_{e-h}(\vec{\rho}, z_e, z_h) = -\frac{e^2}{\varepsilon_{\infty}^{(0)}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\xi^{|n|}}{\sqrt{\rho^2 + \{\varepsilon_{\infty}^{(0)} |z_e - (-1)^n z_h + na| / \varepsilon_{\infty}^{(0)}\}^2}}$$

– потенціал кулонівської взаємодії електрона і дірки одне з одним та з електростатичними зображеннями обох квазічастинок у площинах гетеропереходу [23], адаптований на випадок шаруватого напівпровідника; $m_j^{||}$ (m_j^{\perp}) та $\varepsilon_{\infty}^{(0)}$ ($\varepsilon_{\infty}^{(1)}$) – ефективна маса носія та динамічна діелектрична проникність середовища (явного при $l = 0$ чи бар'єрного при $l = 1$), характерні для напрямку вздовж (поперек) осі C ; вектор $\vec{\rho} = (x_e - x_h, y_e - y_h)$ визначає взаємне розташування електрона й дірки у НП у площині $ХОУ$;

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

Гамільтоніани вільних фононів і ЕФВ (у координатному представленні за електронними змінними) отримані у роботах [24, 25]. Адаптовані на випадок досліджуваної тут системи, вони мають наступний вигляд

$$\hat{H}_{\text{ph}} = \hat{H}_{\text{LO}} + \hat{H}_{\text{I}} = \sum_{\lambda, \vec{q}_{\perp}} \Omega_{\text{LO}}(\vec{q}_{\perp}) (\hat{b}_{\lambda \vec{q}_{\perp}}^{\dagger} \hat{b}_{\lambda \vec{q}_{\perp}} + 1/2) + \sum_{\sigma=S,A} \sum_{\vec{q}_{\perp}} \Omega_{\sigma}(\vec{q}_{\perp}) (\hat{b}_{\sigma \vec{q}_{\perp}}^{\dagger} \hat{b}_{\sigma \vec{q}_{\perp}} + 1/2), \quad (3)$$

де Ω_{LO} – енергія поздовжніх оптичних поляризаційних (LO) фононів, обмежених у середовищі КЯ; $\hat{b}_{\lambda \vec{q}_{\perp}}^{\dagger}$ і $\hat{b}_{\lambda \vec{q}_{\perp}}$ – оператори, відповідно, народження та знищення фононного стану з хвильовим вектором

$\vec{q} = (q_{||}, \vec{q}_{\perp})$, поздовжня компонента якого ($q_{||}$) квантується, набуваючи дискретних значень з множини $\lambda\pi/a$ ($\lambda = 1, 2, \dots, N$);

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

– енергії інтерфейсних (I) фононів симетричної ($\sigma = S$) або антисиметричної ($\sigma = A$) мод. Тут $\Omega_{\text{TO}} = \Omega_{\text{LO}} \sqrt{\varepsilon_{\infty} / \varepsilon_0}$ – енергія поперечних оптичних коливань,

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

$$\varepsilon_{\sigma}^{(1)}(\vec{q}_{\perp}) = \varepsilon_{\infty}^{(1)} [1 \pm \exp(-q_{\perp} a)];$$

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

Гамільтоніан ЕФВ [24, 25], приведений авторами [20] до представлення вторинного квантування за усіма змінними електрон-фононної системи,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} &= \hat{H}_{e-\text{LO}} + \hat{H}_{e-\text{I}} = \\ &= \sum_{j=e,h} \eta_j \left\{ \sum_{n_j, n'_j, \vec{k}_{\perp}} \left[\sum_{\lambda, \vec{q}_{\perp}} F_{n_j, n'_j}^{\lambda}(\vec{q}_{\perp}) \hat{a}_{n_j, \vec{k}_{\perp} + \vec{q}_{\perp}}^{\dagger} \hat{a}_{n'_j, \vec{k}_{\perp}} \hat{B}_{\lambda \vec{q}_{\perp}} + \right. \right. \\ &\left. \left. + \sum_{\sigma, \vec{q}_{\perp}} F_{n_j, n'_j}^{\sigma}(\vec{q}_{\perp}) \hat{a}_{n_j, \vec{k}_{\perp} + \vec{q}_{\perp}}^{\dagger} \hat{a}_{n'_j, \vec{k}_{\perp}} \hat{B}_{\sigma \vec{q}_{\perp}} \right] \right\} \quad (4) \end{aligned}$$

визначається функціями електрон-фононного зв'язку $F_{nn'}^{\alpha}(\vec{q}_{\perp})$, явний вигляд яких для КЯ скінченної глибини наведений у [20], а нескінченної – у [26]. Тут $\eta_e = 1$, $\eta_h = -1$; n і n' – номери підзон електрона у стані (n, \vec{k}_{\perp}) ; a – індекс фононної гілки, рівний λ у випадку LO – або σ – у випадку I-фононів; $\hat{B}_{\alpha \vec{q}_{\perp}} = \hat{b}_{\alpha \vec{q}_{\perp}} + \hat{b}_{\alpha \vec{q}_{\perp}}^{\dagger}$ – фононний, а $\hat{a}_{n \vec{k}_{\perp}}$ і $\hat{a}_{n \vec{k}_{\perp}}^{\dagger}$ – електронні оператори вторинного квантування.

Гамільтоніан (3) отриманий у припущенні, що ЕФВ здійснюється через індивідуальну взаємодію електрона і дірки, які утворюють екситон, з фононами. Така взаємодія перенормує енергетичний спектр квазічастинок, спричиняючи зсув їх станів по шкалі енергій. Зокрема, в області температур, близьких до абсолютного нуля, у системі можуть існувати тільки віртуальні фонони, тому взаємодія з фононами проявляється виключно в процесах з їх випромінюванням, що спричиняє зміщення електронних станів у довгохвильову область енергій.

Величина зміщення дна відповідної мінізони носія в цьому випадку визначається положеннями полюсів Фур'є-образу відповідної 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) електрон-фононної системи [27], визначені на власних функ-

ціях гамільтоніану (2). Явний вигляд МО в одноелектронному наближенні наведений у [26]. Розрахунок його дозволяє визначити величину зміщення дна відповідної мінізони носія у КЯ

$$\Delta \equiv -M_n(\vec{k}_\perp = 0, \hbar\omega = E_n). \quad (5)$$

Відповідно, її енергія екситону зазнає зміщення у довгохвильову область на величину, рівну сумі зміщень енергії відповідних станів електрона ($\Delta^{(e)}$) та дірки ($\Delta^{(h)}$).

Завданням цієї роботи є створення алгоритму і здійснення розрахунку енергії основного екситонного стану та енергії його зв'язку в КЯ, утвореній вміщенням НП шаруватого напівпровідника типу PbI₂ у некристалічне ізотропне діелектричне середовище, а також встановлення їх залежності від товщини НП.

3. МЕТОД РОЗРАХУНКУ ТА ОТРИМАНІ РЕЗУЛЬТАТИ

Точний розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1) неможливий, оскільки не відомі його власні функції. Для пошуку наближеного розв'язку використаємо, подібно до [20, 28], варіаційний метод Бете. Для цього перетворимо (1) до вигляду суми

$$\hat{H}_{\text{ex}} = \sum_{j=e,h} \hat{H}_j(z_j) + \hat{H}_{SS} + U_\beta(\vec{\rho}, z_e, z_h) - \frac{e^2}{\varepsilon_{\infty\perp}^{(0)}} \sum_{n \neq 0} \frac{\xi^{|n|}}{\sqrt{\rho^2 + \{\varepsilon_{\infty\parallel}^{(0)} [z_e - (-1)^n z_h + na] / \varepsilon_{\infty\perp}^{(0)}\}^2}}; \quad (5)$$

де

$$\hat{H}_{SS} = -\frac{\hbar^2 \nabla_\rho^2}{2\mu} - \frac{e^*}{\varepsilon_{\infty\perp}^{(0)}} \quad (6)$$

– гамільтоніан Шінада-Сугано [29], що описує основний стан 2D-екситону, зведена маса якого μ ; $e^* = \beta e$; β – варіаційний параметр, а

$$U_\beta(\vec{\rho}, z_e, z_h) = \frac{e^*}{\varepsilon_{\infty\perp}^{(0)}} - \frac{e^2}{\varepsilon_{\infty\perp}^{(0)} \sqrt{\rho^2 + [\varepsilon_{\infty\parallel}^{(0)} (z_e - z_h) / \varepsilon_{\infty\perp}^{(0)}]^2}} \quad (7)$$

– залежна від нього функція, що визначає збурення, викликане відмінністю руху екситону в НП від двовимірного. Останній доданок у (5) описує поляризаційну взаємодію екситону з площинами гетеропереходів [17, 23].

Власні функції $\varphi(z_j)$ і власні значення $E^{(j)}$ гамільтоніану (2), що відповідають основному стану носія у НП з урахуванням ефекту СП, наведені у [26], а гамільтоніану (6), відповідно, $\varphi(\vec{\rho})$ та E_{2D} – у [29]. Тому, вважаючи перших два члени гамільтоніану (5) основною його частиною, у першому наближенні теорії збурень власну функцію цього оператора можна подати у вигляді добутку

$$\psi(\vec{\rho}, z_e, z_h) = \phi(z_e)\phi(z_h)\varphi(\vec{\rho}), \quad (8)$$

а енергію основного стану екситону у НП (без урахування ЕФВ)

$$E_{\text{ex}}^{(0)} = \min_\beta [\langle \psi | \hat{H}_{\text{ex}} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle]$$

– у вигляді суми

$$E_{\text{ex}}^{(0)} = E_g + E^{(e)} + E^{(h)} - E_b, \quad (9)$$

де E_b – енергія його зв'язку; E_g – ширина забороненої зони ямного матеріалу.

Використавши вирази для енергії 2D-екситону (E_{2D}) та поправок на збурення, які визначаються усередненням двох останніх членів гамільтоніану (5) на функціях (8), знайдено аналітичний вираз для обчислення енергії зв'язку екситону

$$E_b = 4R_{\text{ex}}\beta_0^4 \left\{ 1 - \frac{64a}{\pi a_{\text{ex}}} [I_0(a, \beta_0) + \frac{\varepsilon_{0\parallel}^{(0)}}{\varepsilon_{0\perp}^{(0)}} \sum_{n=1}^{\infty} \xi^n I_n(a, \beta_0)] \right\}. \quad (10)$$

Тут

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

– функція, що визначає, при $n = 0$, поправку до енергії екситону за рахунок збурення (7), а при $n \geq 1$ – внаслідок ефекту СП; a_{ex} і R_{ex} – відповідно, екситонні радіус і стала Рідберга у ямному матеріалі, а β_0 – значення параметра, що мінімізує величину $E_{\text{ex}}^{(0)}$.

Формальний аналіз залежності другого доданку у (10) від змінної a показує, що, залишаючись додатним, він прямує до нуля в граничних випадках нескінченно малих та нескінченно великих a . Другий випадок виходить за рамки досліджуваної моделі, проте такий аналіз дозволяє стверджувати, що при зростанні змінної a , енергія зв'язку зменшується від значення $E_b = 4R_{\text{ex}}$, характерного для 2D-екситону.

Методика розрахунку енергії носія $E^{(j)}$ з урахуванням ефекту СП та визначення величини її зміщення $\Delta^{(j)}$ внаслідок взаємодії з фононами у НП різної товщини наведена у [26]. Використання її дає змогу дослідити зміни енергії екситону (9) за зміни умов ПО і оцінити внесок ефектів СП та ЕФВ шляхом чисельного аналізу залежної від a функції

$$E_{\text{ex}} = E_{\text{ex}}^{(0)} - \Delta^{(e)} - \Delta^{(h)}. \quad (11)$$

4. АНАЛІЗ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ І ВИСНОВКИ

Конкретні розрахунки виконані на прикладі НП шаруватого напівпровідника типу 2H-PbI₂ (параметри кристалічної ґратки $a_\perp = 4,557$ Å, $a_\parallel \equiv c = 6,979$ Å; енергія LO-фонона $\Omega_{\text{LO}} = 110$ см⁻¹ [30]; діелектричні проникності $\varepsilon_{0\parallel} = 7,5$; $\varepsilon_{0\perp} = 8,31$; $\varepsilon_{\infty\parallel} = 6,0$; $\varepsilon_{\infty\perp} = 6,25$ [32]; ефективні маси електрона $m_\parallel = 1,25$ і $m_\perp = 0,25$ [33]), вміщеного у полімер Е-МАН ($\varepsilon_0 = \varepsilon_\infty = 2,38$ [34]).

Результати чисельного розрахунку залежності від товщини НП ($a = Nc$) значення енергії дна основної мінізони електрона (дірки) $E^{(e)}$ ($E^{(h)}$) та енергії зв'язку

E_b наведені на рис. 1. При зменшенні товщини НП від 10 до 2 шарів дийодиду свинцю дно основної мінізони електрона (дірки) у КЯ зростає за нелінійним законом від 6 до 620 (від 7 до 704) меВ при $N \leq 2$ (криві 1). Зростає також і внесок ефекту СП (криві 2), набуваючи значень 50-100 меВ в ультратонких ($N \leq 2$) НП. Проте за усіх значень товщини НП домінуючим фактором, що визначає енергію носія у КЯ, є ПО; вплив ефекту СП суттєвий в ультратонких ($N \leq 2$) плівках.

Залежність енергії зв'язку основного екситонного стану від товщини НП ілюструє рис. 2. Видно, що врахування ефектів СП збільшує енергію зв'язку. Величина поправки до енергії зростає зі зменшенням товщини НП, перевищуючи, при $N \leq 2$, 50 меВ.

Збільшується при цьому й енергія переходу в основний екситонний стан (рис. 3), що пояснюється переважаним зростанням енергії носіїв ($E^{(j)}$) як за рахунок ПО, так і внаслідок ефекту СП.

Вплив ЕФВ на енергію екситону досліджено в рамках однофононного наближення з використанням аналітичних виразів для обчислення зміщення дна електронної (діркової) мінізони $\Delta^{(e)}$ ($\Delta^{(h)}$), наведених у роботі [26]. У цьому наближенні взаємодія носіїв з ЛО- та І-фононами дає адитивні внески у величину довгохвильового зсуву дна основної екситонної зони

$$\Delta = \Delta^{(e)} + \Delta^{(h)} = (\Delta_{LO}^{(e)} + \Delta_I^{(e)}) + (\Delta_{LO}^{(h)} + \Delta_I^{(h)}) = \Delta_{LO} + \Delta_I.$$

Як показує аналіз результатів обчислень, величина зсуву, викликаного взаємодією з ЛО-фононами (Δ_{LO}), нелінійно зростає при збільшенні товщини НП

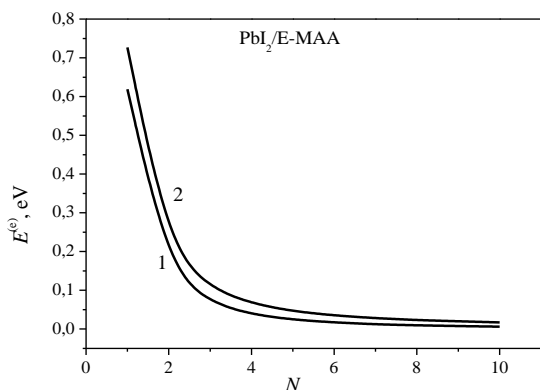


Рис. 1 – Залежність енергії дна основної міні зони електрона (вгорі) та дірки (внизу) від товщини НП, розраховані без (криві 1) та з урахуванням (криві 2) впливу СП

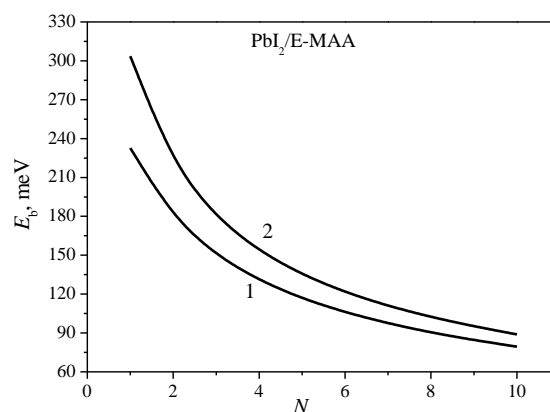


Рис. 2 – Енергія зв'язку основного екситонного стану без (крива 1) та з урахуванням (крива 2) впливу СП як функція товщини НП (N – кількість шарів PbI_2 у НП)

(рис. 4, крива 1). При цьому внесок вищих ($\lambda \geq 2$) істотно менший від внеску основного ($\lambda = 1$) фононного стану. Внесок вищих електронних станів ($n \geq 2$) у величину Δ_{LO} зростає при збільшенні товщини НП, що пояснюється зменшенням відстані між рівнями розмірного квантування, а тому й зростанням взаємного впливу електронних рівнів у процесі взаємодії з фононами.

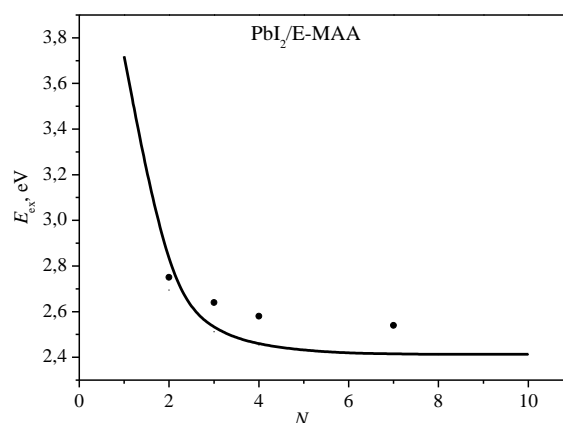


Рис. 3 – Зміна енергії переходу в основний екситонний стан при зміні товщини НП (точками позначено результати експерименту [6])

Характер впливу І-фононів інший – при збільшенні товщини НП величина зсуву Δ_I зменшується (рис. 4, крива 2). Роль вищих ($n \geq 2$) електронних станів при цьому також посилюється з тієї ж причини, що й у випадку взаємодії з ЛО-фононами, проте вплив їх тут менший, оскільки $\Omega_I < \Omega_{LO}$.

Залежність сумарного зсуву дна основної екситонної зони від товщини НП виявляється немонотонною (рис. 4, крива 3), що пояснюється вказаними відмінностями ЕФВ з ЛО- та І-фононами. В ультратонких (до $N = 8$) НП величина довгохвильового зсуву залишається суттєво меншою від величини зміщень протилежного напрямку, викликаних ефектами ПО та СП. Подальше збільшення N супроводжується ослабленням впливу СП і посиленням ролі ЕФВ, яка зменшує енергію екситону порівняно з обчисленням при врахуванні впливу тільки ПО.

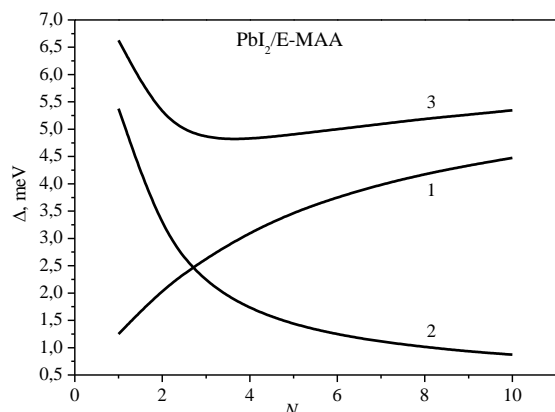


Рис. 4 – Залежність від товщини НП величини зсуву дна основної екситонної зони, викликаного взаємодією з фононами: 1 – LO; 2 – I, 3 – обох типів

Порівняння результатів розрахунку енергії екситонного збудження у НП різної товщини з результатами експерименту [6] (рис. 3) дозволяє зробити висновок, що спостережувані в ньому відмінності у положеннях екситонних піків на шкалі енергій справді пов'язані з відмінностями значень товщини досліджуваних мікрочисталітів. Кількісні розбіжності теоретичних результатів і експерименту свідчать про те, що не за будь-яких співвідношень товщини і поперечних розмірів досліджуваних авторами [6] мікрочисталітів їх правомірно моделювати плоскою НП.

Перенормирование энергии экситонного возбуждения в нанопленке диоксида свинца вследствие эффектов самополяризации и электрон-фононного взаимодействия

Е.В. Пуганцева, В.М. Крамарь

Черновицкий национальный университет им. Юрия Федьковича,
ул. Коцюбинского, 2, 58012 Черновцы, Украина

Приведены результаты теоретического исследования вкладов эффекта самополяризации и электрон-фононного взаимодействия в значение энергии экситона в плоской полупроводниковой нанопленке. Расчеты энергий связи и основного состояния экситона выполнены на примере нанопленки 2H-PbI₂, внедренной в сополимер этилен-метилакриловой кислоты (E-MAA). Установлено, что в ультратонких нанопленках эффект самополяризации дает больший вклад в значение энергии экситона, чем его взаимодействие с поляризационными оптическими фононами.

Ключовые слова: Наногетероструктура, Квантовая яма, Экситон, Диоксид свинца.

Excitonic Transition Energy Renormalization in Lead Diiodide Nanofilm Caused by Self-Polarization Effects and Electron-Phonon Interaction

O.V. Pugantseva, V.M. Kramar

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

Results of the theoretical study of the contributions of self-polarization effect and exciton-phonon interaction to the exciton transition energy in a flat semiconductor nanofilm are presented here. Calculations of the binding and exciton ground state energies are performed using 2H-PbI₂ nanofilm embedded in ethylene-methacrylic acid (E-MAA) copolymer. It has been revealed that in ultrathin nanofilms the self-polarization effect contribution to the exciton energy is more than from the interaction with polarizing optical phonons.

Keywords: Nanoheterostructure, Quantum well, Exciton, Lead diiodide.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. V. Deich, M. Roth, *Nucl. Instrum. Meth. A* **380**, 169 (1996).
2. L. Fornaro, E. Saucedo, L. Mussio, et al., *Proc. SPIE* **4507**, 90 (2001).
3. C.H. Yang, S.L. Yau, L.J. Fan, et al., *Surf. Sci.* **540**, 274 (2003).
4. J.F. Condeles, T.M. Martins, T.C. Dos Santos, et al., *J. Non-Cryst. Solids* **338**, 81 (2004).
5. M. Matuchova, K. Zdansky, J. Zavadil, et al., *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* **20**, 289 (2009).
6. A. Yamamoto, H. Nakahara, S. Yano, et al., *phys. status solidi (b)* **224**, 301 (2001).
7. V.B. Kapustyanyk, R.M. Pasternak, A.Z. Kalush, et al., *J. Appl. Spectr.* **74**, 283 (2007).
8. N. Preda, L. Mihut, I. Baltog, et al., *J. Optoelectron. Adv. Mater.* **8**, 909 (2006); **(9)**, 1358 (2007).
9. L. Wendler, R. Pechstedt, *phys. stat. sol. (b)* **141**, 129 (1987).
10. N. Mori, T. Ando, *Phys. Rev. B* **40**, 6175 (1989).
11. Л.В. Келдыш, *Письма в ЖЭТФ* **29**, 716 (1979) (L.V. Keldysh, *JETP Lett.* **29**, 658 (1978)).

12. М.Ф. Панов, Ф.Н. Пихтин, *ФТП* **31**, 848 (1997) (M.F. Panov, F.N. Pikhitin, *Semiconductors* **31**, 719 (1997)).
13. А.В. Платонов, Д.Р. Яковлев, В.П. Кочерешко и др., *ФТП* **32**, 811 (1998) (A.V. Platonov, D.R. Yakovlev, V.P. Kochereshko, et al., *Semiconductors* **32**, 811 (1998)).
14. T. Goto, S. Saito, M. Tanaka, *Solid State Commun.* **80**, 331 (1991).
15. S.H. Oh, M.S. Jang, S.H. Kim, et al., *J. Korean Phys. Soc.* **39**, 458 (2001).
16. K. Gauthron, J-S. Lauret, L. Doyennette, et al., *Opt. Express* **18**, 5912 (2010).
17. R. Zheng, M. Matsuura, *Phys. Rev. B* **58**, 10769 (1998); **(61)**, 9960 (2000).
18. R.T. Senger, K.K. Bajaj, *phys. stat. sol. (b)* **241**, 1896 (2004).
19. I.V. Ponomarev, L.I. Deych, V.A. Shuvayev, A.A. Lisyansky, *Physica E* **25**, 539 (2005).
20. В.М. Крамар, М.В. Ткач, *УФЖ* **54**, 1027 (2009) (V.M. Kramar, M.V. Tkach, *Ukr. J. Phys.* **54**, 1027 (2009)).
21. M. Soliamani, M. Izadifard, H. Arabshahi, et al., *J. Nano-Electron. Phys.* **4**, 04012 (2012).
22. З.Д. Ковалюк, О.А. Политанская, О.Н. Сидор, В.Т. Маслюк, *ФТП* **42**, 1321 (2008) (Z.D. Kovalyuk, O.A. Politanska, O.N. Sydor, V.T. Maslyuk, *Semiconductors* **42**, 1292 (2008)).
23. M. Kumagai, T. Takagahara, *Phys. Rev. B* **40**, 12359 (1989).
24. L. Wendler, R. Pechstedt, *phys. status solidi (b)* **141**, 129 (1987).
25. N. Mori, T. Ando, *Phys. Rev. B* **40**, 6175 (1989).
26. О.В. Пуганцева, В.М. Крамар, *Ж. нано- та електрон. фіз.* **4**, 04021 (2012) (O.V. Pugantseva, V.M. Kramar, *J. Nano-Electron. Phys.* **4** No 4, 04021 (2012)).
27. М.В. Ткач, *Квазічастинки у наногетеросистемах. Квантові точки і дроти* (Чернівці : Вид-во ЧНУ ім. Ю. Федьковича: 2003).
28. М.В. Ткач, Я.М. Березовський, *УФЖ* **48**, 75 (2003) (M.V. Tkach, Ya.M. Berezov's'ky *Ukr. J. Phys.* **54**, 1027 (2009)).
29. M. Shinada, S. Sugano, *J. Phys. Soc. Japan* **21**, 1936 (1966).
30. М.С. Бродин, И.В. Блонский, *Экситонные процессы в слоистых кристаллах* (Киев: Наук. Думка: 1986).
31. R. Ahuja, H. Arwin, A. Ferrera da Silva, et al., *J. Appl. Phys.* **92**, 7219 (2002).
32. O. Madelung, U. Rossler, H. Schulz, *Non-Tetrahedral Bonded Elements and Binary Compounds* (Berlin: Springer-Verlag: 1998).
33. R. Minder, G. Ottaviani, C. Canali, *J. Phys. Chem. Sol.* **37**, 417 (1976).
34. J.A. Brogan, C.C. Berndt, *Polym. Eng. Sci.* **38**, 1873 (1998).