

До питання про ефективність електрон-фононної взаємодії у наноплівках дйодиду свинцю

О.В. Пуганцева, В.М. Крамар

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

(Одержано 25.06.2013; опубліковано online 31.01.2014)

Обговорюється питання ефективності електрон-фононної взаємодії у формуванні енергетичного спектру електрона, дірки та екситону в плоскій напівпровідниковій наноплівці 2H-PbI₂. На основі аналізу результатів теоретичних розрахунків енергії дна екситонної зони в наноплівках різної товщини та її залежності від температури визначено оптимальний набір параметрів теорії, що забезпечує узгодження її результатів з даними експериментальних вимірювань.

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

PACS number: 73.21.Fg

1. ВСТУП

У роботі [1] нами наведено методику і результати напівемпіричних розрахунків залежності енергетичного спектра електрона в плоских напівпровідникових наноструктурах з подвійним гетеропереходом I-го типу – наноплівках (НП), – від їх товщини. Методика заснована на використанні методу функцій Гріна, діаграмної техніки Фейнмана-Пайнса та наближення ефективних мас для системи електронів і діелектричного континууму – для фононів. Вона дозволяє виконувати подальші теоретичні розрахунки залежностей енергетичних спектрів електрона та дірки від товщини НП. Це, у свою чергу, дає змогу розрахувати аналогічні залежності характеристик екситонного поглинання в наносистемах указанного типу за різних товщин і температур [2].

Конкретні розрахунки виконані на прикладі НП 2H-PbI₂, вміщеної у середовище E-MAA. Такими структурами можна вважати мікрочастинки, отримані і досліджувані експериментально в роботі [3]. Проте, співставлення результатів цих розрахунків з даними експериментальних вимірювань ускладнюється суттєвою розбіжністю відомостей щодо величин ефективних мас електрона (m_e) і дірки (m_h) в цьому матеріалі [4-8], а також значень його статичної (ϵ_0) та динамічної (ϵ_∞) діелектричних проникностей [4, 9, 10].

Наведені в [1] результати отримані з використанням такого набору параметрів теорії:

– значення ефективних мас електрона $m_{||} = 1,25$ ($m_{\perp} = 0,25$), визначені в роботі [6] за даними експериментальних досліджень температурних змін рухливості носіїв у напрямку, паралельному (перпендикулярному) до кристалографічної осі шаруватого напівпровідника 2H-PbI₂;

– величини статичних діелектричних проникностей $\epsilon_{0||} = 7,5$ ($\epsilon_{0\perp} = 8,31$), встановлені за результатами експериментальних вимірювань і теоретичних розрахунків дійсної частини діелектричної функції цього кристалу [9].

За наведеною в [2] методикою з використанням цього набору параметрів нами обчислено енергії переходу в основний екситонний стан вказаних НП. Їх порівняння з даними експериментальних дослі-

джень [3, 11] екситонних спектрів мікрочастинок нанорозмірної товщини PbI₂ свідчать про те, що використання цих параметрів дає суттєво занижені величини зсувів енергії переходу, порівняно з вимірюваними експериментально.

Так, згідно [11], при температурі $T = 77$ К мінімум смуги, пов'язаної з екситонними переходами, у спектрах пропускання мікрочастин PbI₂, вирощених у скляній матриці, виявився зміщеним у короткохвильову область відносно його положення в об'ємному кристалі на величину від 35 (при $N = 7$) до 60 (при $N = 4$) меВ (N – кількість шарів PbI₂ у наноструктурі). Різниця цих величин становить 25 меВ, що суттєво перевищує значення, обчислене нами з використанням вказаних параметрів теорії для тих самих товщин НП, – 5 меВ.

При нагріванні системи до кімнатної спостерігалося зміщення екситонних піків у область менших енергій на 0,08 еВ [11]. Розрахунки температурних залежностей зсувів енергії дна екситонної зони у НП різної товщини, виконані нами за наведеною в [12] методикою, також дають занижені, порівняно з даними [11], результати: 10 меВ при $N = 4$ та 16 – при $N = 7$.

Температурні зміщення у досліджуваних НП викликаються взаємодією з фононами – обмеженими у НП (ЛО) та інтерфейсними (І). Характеристики бар'єрного матеріалу визначають вплив ефекту самополяризації (ЕСП) та ефективність взаємодії з І-фононами. Діелектричної проникності середовищ, в яких вирощувалися мікрочастинки дйодиду свинцю (полімер E-MAA у роботі [3] та скло – у [11]), різні. Тому внески вказаних ефектів у значення енергії екситону в НП PbI₂, вміщеного в ці середовища, будуть різними. Як показують розрахунки, за умови $N > 3$ внесок І-фононів у величину зсуву енергії основного екситонного стану НП PbI₂ менший від внеску ЛО-фононів. Тож можна припустити, що за цих умов температурні зміни її екситонного спектра визначаються властивостями переважно ямного матеріалу – 2H-PbI₂, а тому мають бути близькими для обох бар'єрних середовищ – скла та E-MAA. Оскільки ж результати розрахунків з використанням в [1] набором параметрів цього кристалу несумірні зі спостережуваними в [11], то слід визнати, що він – неоптимальний.

У цьому повідомленні подано результати аналогічних розрахунків, виконаних з використанням наведених у [10] значень діелектричних проникностей дийодиду свинцю $\epsilon_{0||} = 9,3$ і $\epsilon_{0\perp} = 26,4$, а також ефективних мас (m_{\perp}) електрона та дірки – відповідно, 0,28 і 0,40 маси вільного електрона, – визначених за даними експериментальних досліджень екситонного спектра в цьому кристалі [13].

2. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ РОЗРАХУНКІВ

Результати розрахунків дозволяють стверджувати, що загальні висновки, сформульовані подані в роботі [1], по суті залишаються справедливими – в ультратонких ($N \leq 4$) НП вплив ЕСП суттєво переважає вплив електрон-фононної взаємодії (ЕФВ) (рис. 1).

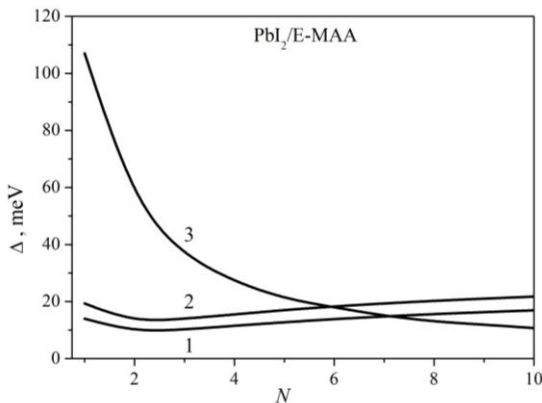


Рис. 1 – Абсолютні величини довгохвильового зсуву дна основної мінізони електрона (1) і дірки (2) внаслідок ЕФВ та їх короткохвильового зсуву (3), зумовленого ефектом СП, при 0 К (N – кількість шарів PbI_2 у НП)

Проте, за умови використання вказаного вище набору значень ефективних мас і діелектричних проникностей отримуються істотно більші значення поправки до енергії електрона і дірки. Так, у НП, що складаються з 6-7 (5-6) шарів дийодиду свинцю, величина поправки до енергії електрона (дірки) за рахунок ЕФВ виявляється близькою до величини поправки на ЕСП. У НП більшої товщини довгохвильовий зсув дна мінізони, спричинений ЕФВ, переважає його зміщення в короткохвильову область внаслідок ЕСП.

Порівняння наведених на рис. 2 результатів розрахунку величин зсуву (в область менших енергій) дна основної екситонної зони у НП за рахунок взаємодії з фононами та зміщень протилежного напрямку внаслідок ЕСП (рис. 3) дає підстави стверджувати, що, за винятком ультратонких ($N \leq 2$) НП, домінуючою є взаємодія з LO-фононами.

При $N \leq 6$ зміщення у бік більших енергій, спричинене ЕСП (рис. 3, крива 1), переважає дію протилежного напрямку, зумовлену ЕФВ (рис. 3, крива 2).

Тож сумарний зсув, зумовлений обома чинниками, – короткохвильовий (рис. 3, крива 3). При $N \geq 7$ дно екситонної зони зсувається, внаслідок зростаючого впливу LO-фононів, у довгохвильову область і тим сильніше, чим більша товщина НП.

Різниця значень енергій дна основної екситонної зони у НП $2H-PbI_2/E-MAA$ товщиною $N = 4$ і $N = 7$, обчислених з урахуванням ефектів розмірного квантування, ЕСП та

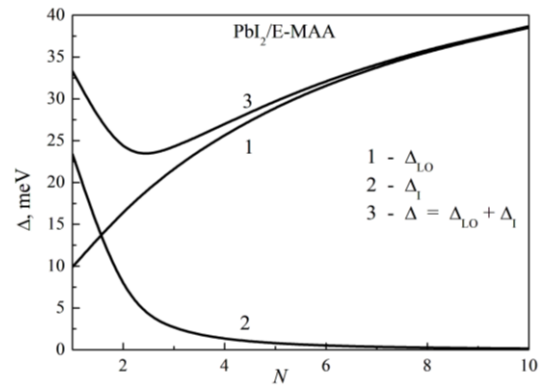


Рис. 2 – Залежність величини зміщення енергії дна найнижчої екситонної зони, зумовленого взаємодією з LO- та I-фононами від товщини НП

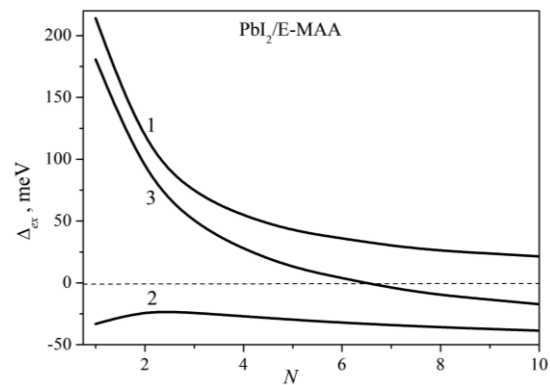


Рис. 3 – Зсуви дна найнижчої екситонної зони при 0 К, зумовлені ЕСП (1) та ЕФВ (2); 3 – сумарний зсув

ЕФВ з використанням вказаного набору параметрів, становить 34 меВ, що узгоджується з даними, наведеними у [3] (50 меВ). Аналогічна різниця, обчислена для $N = 3$ і $N = 4$ становить 60,5 меВ, що близьке до даних [3] (50 меВ), а для $N = 2$ і $N = 3$ – 180 проти 110 меВ, визначених у цій роботі. Як видно, розраховані величини – одного порядку з експериментально визначеними.

На рис. 4 наведені результати теоретичних розрахунків температурної залежності енергії E_{ex} переходу в основний екситонний стан, виконаних нами за методикою [12]. Видно, що нагрівання системи має супроводжуватись зсувом дна екситонної зони в довгохвильову область тим більшим, чим більші товщина НП і температура. При збільшенні температури до 300 К величина зсуву у НП товщиною $4 \leq N \leq 6$ зростає приблизно на 80 меВ, що збігається з даними, наведеними в [11].

3. ВИСНОВКИ

Співмірність значень величини енергетичного зсуву дна екситонної зони у НП дийодиду свинцю, розрахованих теоретично та визначених з експериментальних даних, свідчить про наступне.

Використання в якості параметрів теорії параметрів $2H-PbI_2$ $\epsilon_{0||} = 9,3$; $\epsilon_{0\perp} = 26,4$; $m_{e\perp} = 0,28$ і $m_{h\perp} = 0,40$ краще, ніж наведені в [1], описує експериментально спостережувану температурну динаміку екситонних спектрів у наногетероструктурах на його основі.

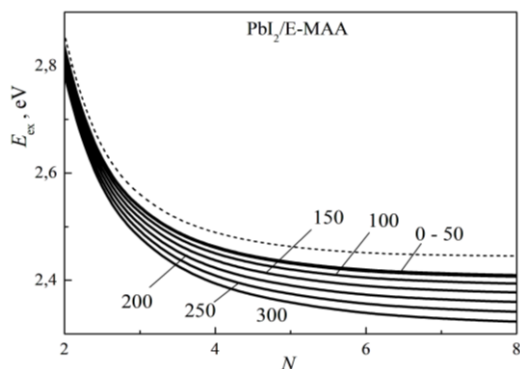


Рис. 4 – Температурні зміни енергії переходу в основний екситонний стан (E_{ex}) у НП різної товщини (цифрами біля кривих вказано температуру в К). Пунктирна лінія демонструє залежність E_{ex} від товщини НП N , розраховану без урахування ЕФВ

Положення екситонних піків у спектрах поглинання, пропускання або люмінесценції в НП на основі

дійодиду свинцю визначається переважно ефектом розмірного квантування. При зменшенні товщини НП максимум відповідної смуги зсувається в короткохвильову область внаслідок підняття рівнів електрона і дірки у своїх КЯ.

Вплив ЕСП і ЕФВ менш суттєвий; ці ефекти спричиняють додаткові зміщення протилежного напрямку, величина яких також залежить від товщини НП. Короткохвильовий зсув за рахунок ЕСП суттєво переважає дію протилежного напрямку, спричинену ЕФВ у НП товщиною до 6 шарів дійодиду свинцю. При збільшенні її товщини понад $N=7$ вплив ЕСП зменшується, а ЕФВ – повільно зростає, в основному за рахунок взаємодії з обмеженими фононами. При $N \geq 5$ вплив інтерфейсних фононів у досліджуваній наноструктурі нехтовно малий.

Суттєві температурні зміни екситонних спектрів можливі у НП, товщиною понад три шари дійодиду свинцю, за температур понад 75 К і пов'язані вони зі зростанням взаємодії екситону переважно з обмеженими фононами.

To the Question of the Efficiency of the Electron-Phonon Interaction in Lead Iodide Nanofilms

O.V. Pugantseva, V.M. Kramar

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

The question of the efficiency of the electron-phonon interaction in the formation of the electron, hole, and exciton energy spectrum in 2H-PbI₂ semiconductor flat nanofilm is discussed. Based on the analysis of the theoretical calculation results of the bottom of the exciton energy band and its temperature dependence in nanofilms of different thickness, the optimal set of theory parameters which provides its agreement with the experimental measurement data is determined.

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

К вопросу об эффективности электрон-фононного взаимодействия в нанопленках иодида свинца

Е.В. Пуганцева, В.М. Крамарь

Обсуждается вопрос эффективности электрон-фононного взаимодействия в формировании энергетического спектра электрона, дырки и экситона в плоской полупроводниковой нанопленке 2H-PbI₂. На основе анализа результатов теоретических расчетов энергии дна экситонной зоны в нанопленках различной толщины и ее температурной зависимости определен оптимальный набор параметров теории, обеспечивающий согласование ее результатов с данными экспериментальных измерений.

Ключевые слова: Наногетероструктура, Квантовая яма, Иодид свинца, Экситон.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. О.В. Пуганцева, В.М. Крамар, *Ж. нано-електрон. фіз.* **4**, 04021 (2012) (O.V. Pugantseva, V.M. Kramar, *J. Nano-Electron. Phys.* **4** No 4, 04021 (2012)).
2. В.М. Крамар, М.В. Ткач, *УФЖ* **54**, 1027 (2009) (V.M. Kramar, M.V. Tkach, *Ukr. J. Phys.* **54**, 1027 (2009)).
3. A. Yamamoto, H. Nakahara, S. Yano et al., *phys. status solidi b* **224**, 301 (2001).
4. М.С. Бродин, И.В. Блонский, *Экситонные процессы в слоистых кристаллах* (Киев: Наук. думка: 1986).
5. F. Baldini, J. Franchi, *Phys. Rev. Lett* **26**, 503 (1971).
6. R. Minder, G. Ottaviani, C. Canali, *J. Phys. Chem. Sol.* **37**, 417 (1976).
7. P.D. Bloch, J.W. Hodby, F. Levy, C. Shwab, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **11**, 4997 (1978).
8. S.G. Elkomoss, J. Biellmann, *Phys. Rev. B* **29**, 4697 (1984).
9. R. Ahuja, H. Arwin, A. Ferrera da Silva, et al., *J. Appl. Phys.* **92**, 7219 (2002).
10. O. Madelung, U. Rossler, H. Shulz, *Non-Tetrahedral Bonded Elements and Binary Compounds* (Springer-Verlag: Berlin: 1998).
11. А.С. Аблицова, В.Ф. Агекян, А.Ю. Серова, *ФТП* **38**, 151 (1998).
12. В.М. Крамар, *УФЖ* **54**, 1225 (2009) (V.M. Kramar, *Ukr. J. Phys.* **54**, 1225 (2009)).
- И.В. Блонский, М.С. Бродин, Т.Н. Сушкевич, *УФЖ*, **22**, 1907 (1977).