

Чернівецький державний університет
ім. Ю.Федьковича

На правах рукопису

Білинський
Ігор Васильович

Екситонні та електронні стани надтонких
напівпровідникових плівок і простих
гетероструктур напівпровідників

(01.04.10 - фізика напівпровідників і діелектриків)

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Чернівці - 1995



Дисертація є рукопис

Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики Дрогобицького державного педагогічного інституту ім. І.Франка

Науковий керівник: кандидат фізико-математичних наук,
доцент Бойчук Василь Іванович

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук,
професор Головка Мирослав Федорович

кандидат фізико-математичних наук,
Валь Олександр Данилович

Провідна організація: Чернівецьке відділення інституту
матеріалознавств НАН України

Захист відбудеться «28» серпня 1995р. о 15 год. на засіданні вченої спеціалізованої ради д.07.01.06 при Чернівецькому державному університеті ім. Ю.Федьковича за адресою: 274012, м.Чернівці, вул.Коцюбинського,2.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Чернівецького державного університету ім. Ю.Федьковича.

Автореферат розісланий «27» травня 1995р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради

М.В.Курганецький

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми досліджень. Тенденція зменшення розмірів і великої інтеграції напівпровідникових приладів, а також дальший розвиток електроніки, ставить задачі детального дослідження властивостей кристалів малих розмірів. Увага багатьох дослідників звернута до вивчення фізичних властивостей квазічастинок, що знаходяться біля поверхні напівпровідників або поміщені в надтонкі напівпровідникові плівки (НТП), які межують з напівобмеженими середовищами різної природи. Такі гетерогенні системи характеризуються ефектами, які відсутні в масивних кристалах. Це пов'язано з особливостями міжчастинкової взаємодії при наявності меж поділу середовищ та розмірним квантуванням руху квазічастинок (у випадку НТП). Існує ряд експериментальних робіт, де показано, що енергія, ефективна маса поверхневого полярона залежить не лише від властивостей напівпровідника, в якому знаходиться квазічастинка, але й від фізичних параметрів зовнішнього середовища. Для різних напівпровідників одержано також, що екситонний спектр поглинання в НТП залежить від товщини плівки і фізичних властивостей межуючих середовищ. Теоретичних робіт, які присвячені цим питанням, є немало. Однак ряд експериментальних результатів не знайшли до цього часу однозначного фізичного трактування.

В дисертаційній роботі проводиться дослідження впливу сил зображень, вибору хвильової функції та електрон-діркової взаємодії на спектри екситонів в НТП. Розв'язуються також задачі впливу багатофононних віртуальних процесів на спектр електрона поверхневого стану в простій гетероструктурі іонних напівпровідників. Проводиться зіставлення одержаних результатів з відомими традиційними методами обчислення. Показано, що метод функцій Гріна (ФГ) з успіхом можна використовувати як для дослідження збуджених поверхневих станів електрон-фононної системи, так і для вивчення поверхневого полярона при малих і проміжних константах електрон-фононної взаємодії.

Метод роботи є дослідження спектрів екситонів в НТП, а також вивчення ролі багатофононних віртуальних процесів в перенормуваних спектра електрона в простій гетероструктурі напівпровідників.

Завдання, які ставляться в дисертаційній роботі, полягають в наступному:

- дослідити залежність спектру екситонів від вибору хвильової функції та електрон-діркової взаємодії в надтонких напівпровідникових плівках;
- вивчити вплив сил зображень на спектр екситонів в НТНП;
- дослідити вплив багатофононних процесів на спектр поверхневих електронів;
- провести порівняння значень величини енергії основного поляронного стану, числа фононів в цьому стані та ефективної маси полярона обчислених варіаційним методом Лі- Лоу- Пайнса (ЛЛП)¹ і методом ФГ.

Загальна методика досліджень. При визначенні спектра екситона, локалізованого силами зображень використовувалось наближення ефективних мас. Для вивчення екситонних спектрів в НТНП розглядалась модель екситона великого радіуса (модель Ваньє-Мотта) при різних потенціалах електрон-діркової взаємодії і рівняння Шредингера розв'язувалось варіаційним методом Рітца. Дослідження електрон-фононних станів простої гетероструктури напівпровідників проводилось методом ЛЛП¹ та методом ФГ. Аналіз енергетичного спектра поверхневого електрона, що взаємодіє з поверхневими та напівобмеженими оптичними фононами виконується в рамках нового підходу, який ефективно враховує багатофононні віртуальні процеси².

При аналізі одержаних результатів, використовувались різні числові методи (Монте-Карло, Гауса, порозрядного наближення, і ін.).

Наукова новизна. Вперше досліджено вплив вибору хвильової функції екситона, і потенціальної енергії взаємодії між частинками на спектр екситона в НТНП. Одержано залежність основного стану екситона від товщини плівки.

Вперше знайдено число зображень, які необхідно знати, для коректного обчислення фізичних параметрів екситона НТНП в потенціалі екситон поверхневої взаємодії, при різних товщинах плівки.

¹T.D.Lee, F.E.Low and D.Pines The Motion of Slow Electrons in a Polar Crystal//Phys.Rev.-1953.-v.90,N2.-p.297-306.

²Ткач Н.В. Система точних уравнений для массового оператора квазичастиц, взаимодействующих с фононами// ТМФ.-1984.-т.61, №3.-с.400-408.

Вперше детально досліджено вплив багатофононних віртуальних процесів на спектр електронів поверхневих станів простої гетероструктури напівпровідників в області порогових значень енергії.

Вперше проведено зіставлення результатів обчислення основного поляронного стану, середнього числа фононів в поляронному стані і ефективної маси полярона варіаційним методом ЛЛП і методом ФГ. Досліджено залежність порядку наближення для M_0 , неохідне для коректного обчислення параметрів полярона гетероструктури від константи електрон-фононної взаємодії. Показано, що енергія поляронного стану при взаємодії електрона з поверхневими і об'ємними фононами приймає мінімальне значення при певних відстанях електрона до поверхні.

Практична цінність роботи полягає в можливості використання розробленої теорії для пояснення експериментальних результатів по спектрах екситонів в НТНП. Виконані результати стимулюють постановку нових експериментів по вивченню явищ локалізації екситонів границями розділів напівпровідникових середовищ.

Дослідження властивостей резонансних явищ, що зв'язані з виникненням збуджених станів, можуть знайти реальне практичне застосування при розробці різного роду оптичних приладів.

Одержана інформація може бути корисною при створенні принципово нових оптикоелектронних приладів з високою швидкістю і малою енергією споживання.

На захист виносяться:

1. Висновки про вигляд хвильової функції екситона для різних товщин НТНП і кількості параметрів необхідних для її опису.
2. Результати досліджень спектра екситонів НТНП в залежності від вибору потенціалу електрон-діркової взаємодії.
3. Залежність числа зображень в потенціалі екситон-поверхневої взаємодії, яке достатнє для коректного обчислення фізичних параметрів екситона НТНП.
4. Висновки про існування крім основного також і збуджених електрон-фононних станів при врахуванні взаємодії електрона поверхневого стану з поверхневими оптичними фононами. Врахування взаємодії з об'ємними фононами при певних значеннях параметрів

(відстані електрона до поверхні, величини константи електрон-фононої взаємодії) веде до виникнення нових збуджених станів електрон-фононої системи.

5. Існування екстремальних значень в залежностях енергії та ефективної маси поверхневого полярона і середнього числа фононів в поляронному стані від відстані електрона до поверхні.
6. Результати досліджень, що визначають кількість наближень в масовому операторі електронів, які необхідні для коректного обчислення фізичних параметрів простої гетероструктури, в залежності від величини константи електрон-фононої взаємодії.

Публікації і особистий внесок дисертанта. За матеріалами дисертації опубліковано 13 наукових робіт, перелік яких наведено в кінці автореферату.

Проведено розрахунки масового оператора електронів в одно-, дво-, і три-фононному наближенні, потенціалу екситона в полі сил зображень, розв'язано рівняння Шредінгера.

Апробація роботи. Основні результати дисертаційної роботи доповідались на наступних конференціях: III-Всесоюзна конференція з фізики і техніки тонких напівпровідникових плівок (м. Ів.-Франківськ, 1990); IV Міжнародна конференція з фізики і техніки тонких плівок (м. Ів.-Франківськ, 1991); Ювілейна конференція ІЕФ-93, (Ужгород, 1993); I Міжнародна науково-технічна конференція "Матеріалознавство алмазоподібних і халькогенідних напівпровідників" (м. Чернівці, 1994). Доповідалися і обговорювалися на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України, Чернівецького державного університету, Дрогобицького педінституту;

Структура і об'єм дисертації. Дисертація складається з вступу, чотирьох розділів, висновків і списку цитованої літератури. Робота викладена на 125 сторінках, включає 39 рисунків і список літератури, що містить 110 джерел.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі коротко описано зміст роботи, обговорюється актуальність теми, сформульовано положення, що захищаються, новизна, наукова і практична цінність задач, які розв'язуються в дисертації.

У першому розділі зроблено короткий огляд як теоретичних, так і експериментальних досліджень, присвячених екситонним спектрам в напівпровідникових тонких плівках. Крім цього, викладені основні результати, досягнуті у вивченні взаємодії електронів з фононами в масивних кристалах і напівпровідникових гетероструктурах.

У другому розділі за допомогою варіаційного методу розв'язано рівняння Шредінгера для зв'язаного електрон-діркового стану. Причому, електрон-діркову взаємодію взято кулонівською, логарифмічною і загальною, а також враховано за допомогою сил електростатичних зображень вплив межуєчого середовища. Хвильова функція вибиралась досить загальною, з двома варіаційними параметрами, що дозволило розглядати напівпровідникові плівки з товщинами порядку борівського радіуса екситона.

Для визначення спектра екситона в НТНП товщиною L , розглядалось рівняння Шредінгера з гамільтоніаном

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + \frac{\hat{p}_e^2}{2m} + \frac{\hat{p}_h^2}{2\mu} + W_{int}(z_e, z_h), \quad (1)$$

де $m = m_e + m_h$ - повна маса екситона, $1/\mu = 1/m_e + 1/m_h$ - його зведена ефективна маса, $\rho = [(z_e - z_h)^2 + (y_e - y_h)^2]^{1/2}$, $\vec{R} = (m_e \vec{r}_e + m_h \vec{r}_h)/m$, $\vec{R}_\parallel = (X, Y, 0)$, $\hat{p}_e = -\hbar \nabla_{\vec{r}_e}$, $\hat{p}_h = -\hbar \nabla_{\vec{r}_h}$. $W_{int}(z_e, z_h)$ - енергія взаємодії частинок між собою і з поверхнями плівки.

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1) точно розв'язати неможливо, тому задачу розв'язано мінімізацією функціоналу $J(\alpha, \beta) = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$, згідно варіаційного принципу Рітта. Пробна хвильова функція екситона основного стану вибиралась у вигляді: $\psi(\rho, z_e, z_h) = A \sin(\pi z_e/L) \sin(\pi z_h/L) \exp(-[\alpha^2 \rho^2 + \beta^2 (z_e - z_h)^2]^{1/2})$. (2)
Вибір хвильової функції у вигляді (2) є досить загальним, бо дозволяє розглянути в єдиному підході три різні випадки: $\beta=0$ (дво-мірний екситон), $\alpha=\beta$ (сферично-симетричний екситон), $\alpha \neq \beta$ ("деформований" екситон). Аналіз енергії взаємодії W_{int} точкових зарядів показав, що електрон-діркова взаємодія залежить від товщин плівки L , а також діелектричних проникностей ϵ плівки і межуєчого середовища. Загальний вигляд потенціалу взаємодії електрона і дірки при

врахуванні поверхень НТНП задається формулою:

$$V(\vec{\rho}, z_0, z_h) = \frac{e^2}{2\pi\epsilon} \int d\vec{k} \frac{1}{k} e^{i\vec{k}\vec{\rho}} \left[\frac{e^{-k|z_0 - z_h|} + \text{ch}[\eta_2 - \eta_1 + k(L - z_0 - z_h)] + e^{-kL + \eta_1 - \eta_2} \text{ch}[k(z_0 - z_h)]}{\text{sh}(kL + \eta_1 + \eta_2)} \right] \quad (3)$$

де $\eta_i = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\epsilon + \epsilon_i}{\epsilon - \epsilon_i} \right)$, $i=1,2$.

Взаємодія з поверхнями зобразимо за допомогою безмежної прямокутної потенціальної ями. Тоді

$$W_{int} = \begin{cases} \omega, & z_{0,h} = 0, L \\ V(\rho, z_0, z_h), & 0 < z_{0,h} < L. \end{cases} \quad (4)$$

Якщо розглядати плівки лише малих товщин (порядку борівського радіуса екситона), то потенціал (4) зображається в досить спрощеному логарифмічному вигляді. Для плівок товщини, яких більші за відстані між частинками взаємодія електрона і дірки є кулонівською.

Результати обчислень подано графічно. З рис. 1 видно, що хвильову функцію у вигляді (2) для ізотропної плівки досить великих товщин ($L > 4a_0$, (a_0 - борівський радіус екситона)) з непоганою точністю можна вибрати в одному варіаційним параметром $\alpha = \beta$. В області $L < 0,77a_0$ хвильова функція може бути ще простішою ($\beta = 0$).

Для зіставлення одержаних результатів з експериментальними побудовано залежність $V(L^{-2})$. Розрахунки проведено для плівок кристалів різних типів (Cu_2O , WBe_2 , CuI , AgI і ін.). Якщо врахувати лише розмірне квантування в НТНП, то графік буде прямою лінією. Розглядувана зміна енергії для кулонівської взаємодії веде до відхилення від прямої, яке збільшується з зменшенням товщини. Найкращий результат (найбільше відхилення від прямої) одержано у випадку загального потенціалу.

Потенціал (4) враховує взаємодію частинок з поверхнями плівки в найпростішому вигляді. Методом зображень можна врахувати взаємодію частинок не лише з "чужими" зображеннями (потенціал (3)), а й з "своїми". Тоді вираз для потенціальної енергії запишеться:

$$W_{int}(\vec{\rho}, z_0, z_h) = - \frac{e^2}{\epsilon[\rho^2 + (z_0 - z_h)^2]^{3/2}} + \sum_{k=1}^{\infty} W_{int}^{(k)} \quad (5)$$

де $W_{int}^{(k)}$ - енергія взаємодії електрона і дірки з k-ми зобра-

женнями, $k=1,2,3,\dots$. Для $k=1$ потенціал має вигляд:

$$W_{\text{int}}^{(k)}(\rho, z_e, z_h) = \frac{e^2}{\epsilon} \alpha_k \left[\frac{1}{4z_e} + \frac{1}{4z_h} - \frac{1}{[\rho^2 + (z_e + z_h)^2]^{1/2}} \right] + \frac{e^2}{\epsilon} \alpha_k \left[\frac{1}{4(L-z_e)} + \frac{1}{4(L-z_h)} - \frac{1}{[\rho^2 + (2L-z_e-z_h)^2]^{1/2}} \right]. \quad (6)$$

Згідно (5) вираз для E є нескінченим рядом. Тому виникає питання про швидкість збігання даного ряду і можливість його обриву на якомусь члені. Для цього вказані величини обчислено з врахуванням різної кількості зображень. На першому етапі знайдено E з врахуванням тільки перших зображень, тобто $W_{\text{int}}^{(1)}$. Потім обчислено E враховуючи два зображення $W_{\text{int}}^{(1)} + W_{\text{int}}^{(2)}$ і т.д. Одержано, що при $L > 3a_0$ значення E повністю визначається першими зображеннями, для $1,5a_0 < L < 3a_0$ необхідно врахувати і перші і другі зображення, а для $0,5a_0 < L < 1,5a_0$ - три зображення.

Визначалась також залежність енергії від діелектричної проникності плівки ϵ . Показано, що при фіксованому L збільшення ϵ приводить до зменшення E , яке наближається до відповідного значення, одержаного без врахування сил зображень.

Третій розділ присвячений вивченню властивостей поверхневих станів електрона, що взаємодіє з оптичними коливаннями кристалічної ґратки на базі масового оператора (МО), в якому послідовно враховано багатохонні віртуальні процеси. Задача розв'язана в одно-, дво-, і трифононному наближенні для МО. На відміну від традиційних підходів, застосований метод дозволив вивчити спектр не лише основного стану, але й декількох збуджених станів електрон-фононної системи.

Розглядається проста гетероструктура двох напівпровідників і вивчається електрон-фононні стани даної системи. Гамільтоніан системи запишеться у вигляді:

$$H = T + H_p + H_{ep, \pm} + H_{ep, \pm}^{\nu} \quad (7)$$

$$\text{де } T = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \theta(z) \nabla - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \theta(-z) \nabla, \quad H_p = \hbar \omega_c \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + \hbar \omega_L \sum_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha},$$

$$H_{sp, \pm}^{\pm} = \sum_{\vec{q}} \left[\frac{\omega_{\pm} e^2}{2\epsilon_0 L^3} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{2}{\beta_1^{-1}(\omega_{\pm}) + \beta_2^{-1}(\omega_{\pm})} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{2Q}} e^{i\vec{a}\vec{R}} e^{-a|z|} [b_{\pm}^{\rightarrow}(\vec{q}) + b_{\pm}^{\leftarrow}(-\vec{q})]$$

$$H_{sp, n}^{\nu} = \sum_{\vec{q}, q_z > 0} \left[\frac{\omega_{Ln} e^2}{2\epsilon_0 L^3} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{\epsilon_{\omega n}} \frac{1}{\epsilon_{0n}} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{e^{i\vec{a}\vec{R}}}{\sqrt{Q^2 + q_z^2}} H_n(z) 2\sin(q_z z) [b_{n, q_z}^{\rightarrow}(\vec{q}) + b_{n, q_z}^{\leftarrow}(-\vec{q})] -$$

кінетична енергія електрона, сумарна енергія об'ємного і поверхневого фононів, енергія взаємодії електрона з поверхневими і об'ємними фонона відповідно.

В роботах М.В.Ткача (див., наприклад, [2]) розвинутий новий підхід до підсумовування діаграм, що дозволив отримати систему рівнянь для МО електронів, яка ефективно враховує віртуальні багатофононні процеси. Це дало можливість розв'язувати задачі дослідження спектра електронів, які взаємодіють з коливаннями ґратки незалежно від сили зв'язку. Тоді згідно [2], МО в n-фононному наближенні запишеться у вигляді:

$$M(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{q}} \frac{|\varphi(\vec{q})|^2}{\omega' - \omega_{\vec{k}-\vec{q}} - \Omega - M_n(\vec{k}, \vec{q}, \omega)}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8)$$

де $M_n(\vec{k}, \vec{q}, \omega)$ в свою чергу має структуру (8), а його вигляд залежить від вибору наближення для МО.

Оператори електрон-фононої взаємодії (див. (7)) в зображенні вторинного квантування за електронними змінними одержано, на функції Фанга-Ховарда:

$$\varphi(\vec{R}, z) = \left(\frac{b^a}{2S} \right)^{\frac{1}{2}} e^{i\vec{k}\vec{R}} z e^{-\frac{1}{2}bz}, \quad z > 0, \quad (10)$$

де b - параметр, що визначає найбільш ймовірну відстань електрона до поверхні. Тому

$$\alpha_{i, n}^{\pm} = \sum_{\vec{q}} \varphi_n(\vec{q}) \alpha_{\vec{k}-\vec{q}}^{\pm} \alpha_{\vec{k}}^{\pm} [b(\vec{q}) + b^{\pm}(-\vec{q})],$$

$$\text{де } \varphi_n(\vec{q}) = \left[\frac{\omega_n e^2}{2\epsilon_0 S} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{\beta_1^{-1}(\omega_n) + \beta_2^{-1}(\omega_n)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{q} (1+q/b)^n},$$

$$\alpha_{i, n}^{\nu} = \sum_{\vec{q}, q_z} \varphi_{\nu}(\vec{q}, q_z) \alpha_{\vec{k}-\vec{q}}^{\pm} \alpha_{\vec{k}}^{\pm} [b(\vec{q}, q_z) + b^{\pm}(-\vec{q}, q_z)],$$

$$\Phi_{\nu}(\vec{q}, q_z) = \left(\frac{2\pi\omega_{L_n} e^2}{V} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{\epsilon_{\omega l}} - \frac{1}{\epsilon_{\omega l}} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{2b^3 q_z}{(q^2 + q_z^2)^{1/2}} \frac{3b^2 - q_z^2}{(b^2 + q_z^2)^3}$$

Для зручності проведення обчислень введено безрозмірні величини $\xi' = (\omega' - \omega_0) / \omega_0$, $\alpha = \pi / (ab)$, $R(\xi) = \omega_0^2 M(\omega)$.

Обчислення показали, що розв'язки дисперсійного рівняння $\xi - R(\xi) = 0$, які задають енергії станів електрон-фононної системи, існують як для $\xi < 0$, так і для $\xi > 0$ (рис.2). В області $\xi < 0$ для будь-яких значень a, g існує один розв'язок рівняння з енергією ξ_0 , що відповідає поляронному стану системи. При $\xi > 0$ кількість станів електрон-фононної системи залежить від параметрів a, g . Обчислення, проведені в трифононному наближенні для M_0 , дали можливість обчислити фізичні системи з більшими значеннями g .

У четвертому розділі досліджуються ефективна маса, енергія основного стану, середнє число фононів в поверхневому поляронному стані простої гетероструктури напівпровідників методом ФГ і проведено порівняння його з методом ЛПП.

Якщо взаємодія електрона з полем поляризації відносно мала, то такі величини, як ефективна маса, число фононів, енергія основного стану можна обчислити по теорії збурень. Інші методи розрахунку (метод ЛПП) використовувались, коли взаємодія не є малою. При використанні методу ФГ, як правило обмежувались однофононним наближенням, яке еквівалентне другому порядку теорії збурень, що накладає сильне обмеження на величину константи електрон-фононної взаємодії. Новий підхід до підсумовування діаграм дозволяє розширити рамки застосувань методу ФГ. Тому цікавим є порівняння результатів обчислень параметрів поверхневого полярона різними методами.

Як відмічалось раніше, енергія електрон-фононної системи визначається як розв'язок дисперсійного рівняння. Для знаходження ефективної маси полярона необхідно знати залежність безрозмірної величини ξ від хвильового вектора K . Тоді відношення ефективної маси полярона до маси електрона в кристалі без врахування фононів (m) визначається формулою:

$$\frac{m}{m_0} = 2p / \left[\frac{\partial^2 \xi(K)}{\partial K^2} \right]_{K=0} \quad (11)$$

Середнє число фононів в поляронному стані визначається масовим оператором та енергією полярона

$$\langle \nu \rangle = - \left[\frac{\partial \mathcal{M}(0, \xi)}{\partial \xi} \right]_{\xi = \xi_{po}} / \left[1 - \left[\frac{\partial \mathcal{M}(0, \xi)}{\partial \xi} \right]_{\xi = \xi_{po}} \right]. \quad (12)$$

Для того щоб переконатись в правильності наближень для МО, який використовується при обчисленні фізичних параметрів системи, обчислено їх також методом ЛП. Значення енергії поверхневого полярона знаходиться з виразу

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (1 - \eta^2) - \sum_{\mathbf{q}_a} \frac{|\varphi_a(\mathbf{q}_a)|^2}{\mathbf{q}_a \left\{ \omega_a - \frac{\mathbf{q}_a \mathbf{k}}{m} \hbar (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}_a^2}{2m} \right\}} - \sum_{\mathbf{q}_v} \frac{|\varphi_v(\mathbf{q}_v)|^2}{\mathbf{q}_v \left\{ \omega_v - \frac{\mathbf{q}_v \mathbf{k}}{m} \hbar (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}_v^2}{2m} \right\}},$$

де варіаційний параметр η визначається як розв'язок рівняння:

$$\eta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{q}_a} \frac{|\varphi_a(\mathbf{q}_a)|^2 \mathbf{q}_a}{\mathbf{q}_a \left\{ \omega_a - \frac{\mathbf{q}_a \mathbf{k}}{m} \hbar (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}_a^2}{2m} \right\}^2} + \sum_{\mathbf{q}_v} \frac{|\varphi_v(\mathbf{q}_v)|^2 \mathbf{q}_v}{\mathbf{q}_v \left\{ \omega_v - \frac{\mathbf{q}_v \mathbf{k}}{m} \hbar (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}_v^2}{2m} \right\}^2}.$$

Середнє число фононів в поляронному стані запишеться:

$$\langle \nu \rangle = \sum_{\mathbf{q}_a} \frac{|\varphi_a(\mathbf{q}_a)|^2}{\mathbf{q}_a \left\{ \omega_a - \frac{\mathbf{q}_a \mathbf{k}}{m} \hbar (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}_a^2}{2m} \right\}^2} + \sum_{\mathbf{q}_v} \frac{|\varphi_v(\mathbf{q}_v)|^2}{\mathbf{q}_v \left\{ \omega_v - \frac{\mathbf{q}_v \mathbf{k}}{m} \hbar (1 - \eta) + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}_v^2}{2m} \right\}^2}.$$

Для обчислення ефективної маси полярона необхідно скористатись формулою:

$$\frac{m_p}{m} = 2p / - \left[\frac{\partial^2 (E/\omega_p)}{\partial K^2} \right]_{K=0}.$$

Результати обчислень $\xi_{po}, m_p/m, \langle \nu \rangle$ проводились для різних a і g . Одержано, що збільшення константи g веде до зменшення ξ_{po} , і збільшення m_p/m , та $\langle \nu \rangle$. Проте для конкретного g числовий результат залежить від наближення для МО або від методу обчислення. Якщо обчислені методом ЛП результати взяти за основу, то в області малих g ($g < 0,1$) однофононне наближення дає можливість точно обчислити фізичні параметри полярона. Збільшення g веде до розбіжності між значеннями одержаними для МО і методом ЛП. Щоб одержати при таких g кращі результати необхідно використовувати трифононне або вищі наближення для МО. Якщо розглянути відносну похибку (η_p) фізичних величин, одержаних при певних наближеннях

для МО ($n=1,2,3$) і в методі ЛЛП, то область зміни g , для яких $\eta_n < 10\%$ для різних наближень МО досить суттєво відрізняється: $0 < g \leq 0,14$ при $n=1$, $0 < g \leq 0,7$ для $n=2$, $0 < g \leq 1,6$ при $n=3$.

Більш складною є залежність величин $\xi_{p_0, m_p} / m_e \langle v \rangle$ від середньої відстані електрона до межі поділу середовищ, що задається параметром α (рис.3). В результаті сумарного вкладу об'ємних і поверхневих фонових одержано немонотонну залежність даних величин від параметра α . При деяких значеннях цього параметра відповідні функції приймають екстремальні значення.

В примітці визначено особистий вклад дисертанта в постановці задач, проведенні розрахунків і аналізу одержаних результатів в роботах, надрукованих у співавторстві.

Основні результати і висновки

1. Розмірне квантування дає основний вклад в зміну спектра екситонів напівпровідникових плівок з товщиною $L > 10a_0$. Для плівок товщиною порядку Борівського радіуса екситона необхідно врахувати не тільки взаємодію електрона і дірки між собою, але й з поверхнями плівки, що веде до збільшення енергії зв'язку екситона.
2. Показано, що екситон Ванье-Мотта для малих ($L < 0,77a_0$) товщин плівки може вважатись двомірним, і пробна хвильова функція екситона може бути вибрана з одним варіаційним параметром. У випадку плівок з $L > 4a_0$ хвильова функція екситона має сферично-симетричний вигляд і також залежить від одного варіаційного параметра. Для проміжних значеннях L екситон є "деформованим" і хвильова функція залежить від двох варіаційних параметрів.
3. Кількість зображень, що необхідно врахувати в потенціалі екситон поверхневої взаємодії для коректного обчислення фізичних параметрів екситона в НТНП визначається товщиною плівки L : $L > 3a_0$ - одне зображення, два - при $1,5a_0 \leq L < 3a_0$ і три зображення для $0,5a_0 \leq L < 1,5a_0$.
4. Збільшення діелектричної проникності зовнішнього середовища для фіксованої товщини НТНП приводить до зменшення енергії екситона, значення якої наближається до відповідного значення енергії екситона без врахування сил зображень.

5. При взаємодії електрона в поверхневому стані з поверхневими оптичними фононами виникають основний і збуджені електрон-фононні стани. У випадку взаємодії з об'ємними фононами збуджені стани для такої системи виникають лише при визначених значеннях параметрів α, ξ .
6. Дослідження поверхневого поляронного стану при врахуванні взаємодії електрона з поверхневими і об'ємними фононами показали, що енергія цього стану при певних значеннях відстані електрона до поверхні приймає мінімальне значення, а середнє число фононів в поляронному стані і ефективна маса полярона максимальні значення.
7. Величина константи електрон-фононої взаємодії визначає кількість наближень, які необхідні для коректного обчислення фізичних параметрів простої гетероструктури. Для $0 \leq g \leq 0,14$ достатньо використовувати однофононне наближення, $0 \leq g \leq 0,7$ - двофононне, $0 \leq g \leq 1,6$ - трифононне наближення.

Основні результати дисертаційної роботи викладені в наступних публікаціях:

1. Бойчук В.І., Білинський І.В. Залежність енергії екситона Ваньє-Мотта від товщини напівпровідникової плівки // УСЖ. - 1990. - т. 35, №2. - с. 239-296.
2. Бойчук В.И., Билинский И.В. Экситон Ваньє-Мотта в пленках полупроводников произвольной толщины // Известия вузов. Физика. - 1990. - №10. - с. 116-117.
3. Бойчук В.І., Білинський І.В. Вплив сил електростатичних зображень на екситонний спектр тонких плівок // УСЖ. - 1990. - т. 35, №10. - с. 1495-1497.
4. Бойчук В.І., Стасів Н.І., Білинський І.В. Основний стан екситона Ваньє-Мотта в тонкій анізотропній плівці // УСЖ. - 1991. - т. 36, №2. - с. 177 - 180.
5. Бойчук В.І., Білинський І.В. Основний стан екситона Ваньє-Мотта в тонкій плівці // Фізична електроніка. - 1992. - вип. 42, - с. 49-53.
6. Boychuk V.I., and Bilynskii I.V. Bound Energy of the Wannier Exciton in Similar Heterogenous Double Structures // Phys.Stat.

Sol. B.- 1992.- v.174, p.463-470.

7. Білінський І.В., Бойчук В.І., Ткач М.В. Електрон-коливні стани простої гетероструктури напівпровідників//УФЖ.-1993.-т.38,№7.- с.1057 - 1062.
8. Білінський І.В., Бойчук В.І. Вплив оптичних фононів на інтерфейсні стани електрон-фононної системи//УФЖ.-1994.-т.39,№4.- с.447-450.
9. Бойчук В.И., Билинский И.В. Исследование интерфейсных поляронных состояний простой гетероструктуры полупроводников//ФТТ.- 1995.-№3.-с.1016-1021.
10. В.И. Бойчук, И.В. Билинский, Н.И. Стасив, Р.И. Пазик Экситон Ванье-Мотта в полупроводниковой пленке // Материалы III - Всесоюзной конференции по физике и технике тонких полупроводниковых пленок, г.Ив.-Франковск, 1990, ч. II, с.233.
11. И.В. Билинский, В.И. Бойчук, Р.И. Пазик Исследование состояний электрон-фононной системы простой и двойной гетероструктуры полупроводников//Материалы IV - Міжнародної конференції з фізики і техніки тонких плівок, Ів.-Франківськ, 1991, ч. I, с.330.
12. В.І. Бойчук, І.В. Білінський, Ковальчук С.М., Р.І. Пазик, Н.І. Стасів Стани електрон-діркових систем в квантовій ямі простої гетероструктури//Збірник доповідей щвілейної конференції ІЕФ-93, Ужгород, с.95-98.
13. В.І. Бойчук, І.В. Білінський, Н.І. Стасів Дослідження поляронних ефектів в простій напівпровідниковій гетероструктурі і в сильному магнітному полі//Збірник доповідей і Міжнародної науково-технічної конференції "Матеріалознавство алмазоподібних і калькогенідних напівпровідників" м. Чернівці, 1994 р., ст.31.

Ключові слова: надтонкі напівпровідникові плівки, потенціал взаємодії, хвильова функція, електрон-фононна взаємодія, багатофононні віртуальні процеси.

Билынский И.В. Экситонные и электронные состояния сверхтонких полупроводниковых пленок и простых гетероструктур полупроводников. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10-физика полупроводников и диэлектриков;Черновицкий государственный университет,Черновцы,1995. Защищаются 13 научных работ,содержащих исследование спектра сверхтонких полупроводниковых пленок в зависимости от выбора волновой функции, потенциала взаимодействия между частицами, а также электрон-фононные состояния простой гетероструктуры полупроводников.Установлено,что при взаимодействии электрона с поверхностными и объемными фононами всегда возникает поляронные состояния, а возбужденные возникают по-разному, в зависимости от силы связи.Произведено сравнение результатов вычислений параметров поверхностного полярона методом Ли-Лоу-Пайнса и метода функций Грина,в котором использован новый подход в суммировании диаграмм,что позволяет эффективно учитывать многофононные виртуальные процессы.

Bilynskii I. V. Exciton and electron states of superthin semiconductor films and simple semiconductor heterostructures.

Thesis on search of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.10-Physics of semiconductors and dielectric; Chernivtsi State University, Chernivtsi, 1995.

13 scientific works are presented for defence, which contain investigation of the spectrum of superthin semiconductor films depending on the choice of the wave function and on the interaction potential between the particles, and electron-phonon states of a simple semiconductor heterostructure as well. It is established that the interaction of an electron with surface and volumetric phonons always causes polaron states, but excited states appear indifferent ways, depending on the force of interaction. We compared the calculation results of surface polaron parameters obtained by means of Lee-Low-Pines method and the method of functions of Green, in which a new approach to diagram summation is used, and this allows to take into account multi-phonon virtual processes more effectively.

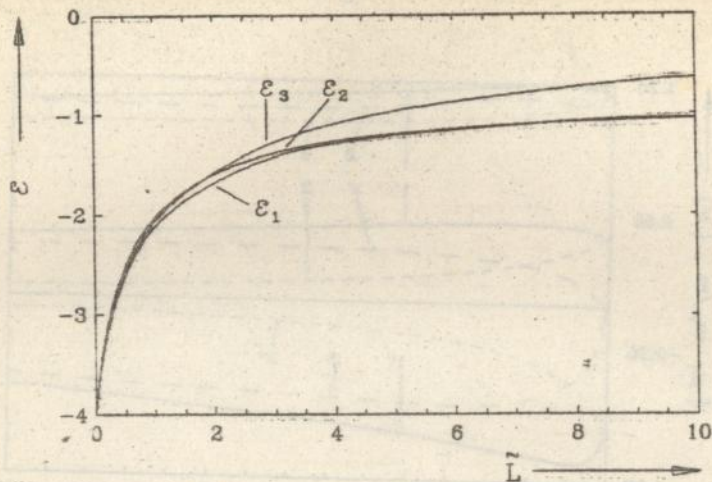


Рис. 1 Залежності ε_1 ($\tilde{\alpha} \neq \tilde{\beta}$), ε_2 ($\tilde{\alpha} = \tilde{\beta}$) і ε_3 ($\tilde{\beta} = 0$) від \tilde{L} .

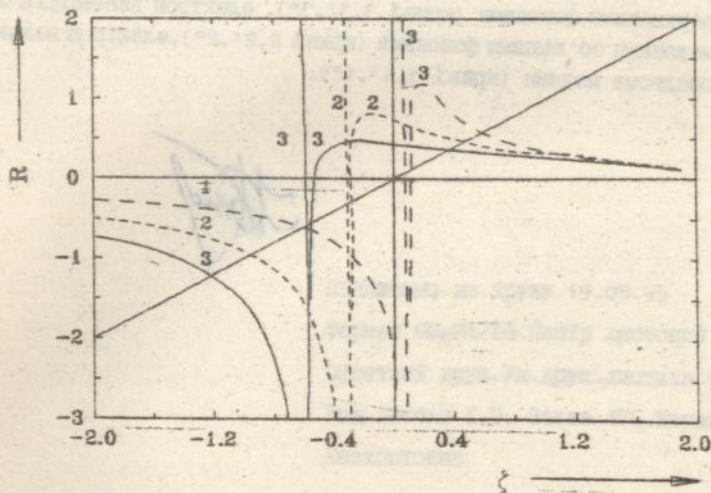


Рис 2 Залежність дійсної частини МО від ξ при $g=1$, $\alpha=10$ (1), $\alpha=20$ (2) і $\alpha=50$ (3).

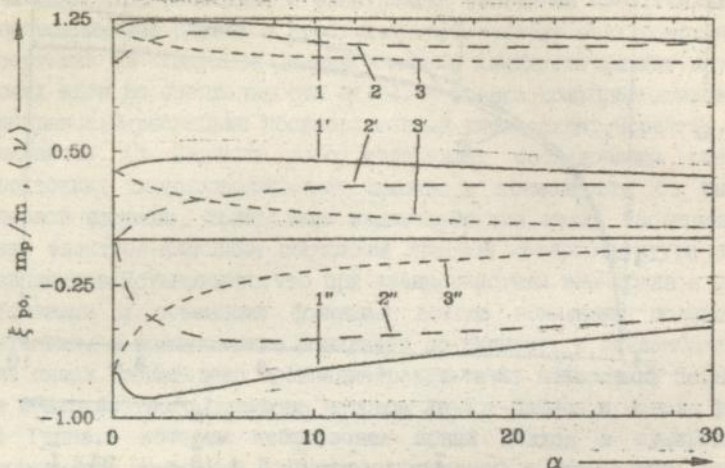


Рис. 3 Залежність ξ_{p_0} (криві 1'', 2'', 3''), m_p/m (криві 1, 2, 3), $\langle \nu \rangle$ (криві 1', 2', 3') при $g=0,5$, якщо електрон взаємодіє лише з поверхневими фононами (криві 3, 3', 3''), електрон взаємодіє лише з обмеженими об'ємними фононами (криві 2, 2', 2''), електрон взаємодіє з обидвома модами (криві 1, 1', 1'').

[Handwritten signature]

Підписано до друку 19.05.95
Формат 60x84/16.Папір листовий НІ
Офсетний друк.Ум.друк.листків 0,93
Вид.листів І,О. Заказ 476.Тираж 100
Безкоштовно

Лабораторія копірувально-тиражувального друку Львівського
СПТУ №57, м.Львів-34

448668

AB 32.449

AB 32.449



Faint, illegible text, possibly a title or header, located below the graph area.

Faint, illegible text, possibly a list or a set of instructions, located in the lower middle section of the page.

Faint, illegible text at the bottom of the page, possibly a footer or a reference.