

## ЕНЕРГІЯ ЗВ'ЯЗКУ ПОЛЯРОНА В НАНОПЛІВКАХ HgS/CdS

В. М. Крамар

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича  
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012*

(Отримано 9 січня 2008 р.; в остаточному вигляді — 18 серпня 2008 р.)

Методом функцій Гріна досліджено вплив електрон-фононої взаємодії на положення дна основної енергетичної зони електрона у плоскій квантовій ямі скінченої глибини. На прикладі наноплівки напівпровідникового кристала  $\beta$ -HgS, розміщеного в напівпровідниковому середовищі  $\beta$ -CdS, обчислено енергію зв'язку полярона при різних значеннях товщини плівки. Показано, що, за винятком дуже тонких плівок, актуальною є взаємодія станів основної зони з просторово обмеженими фононами за участі збуджених станів із дискретної частини енергетичного спектра електрона.

**Ключові слова:** наногетеросистема, квантова яма, електрон-фононна взаємодія, полярон.

PACS number(s): 63.20.Kr, 79.60.Jv

### I. ВСТУП

Квазидвовимірні (Q2D) напівпровідникові структури — квантові ями (КЯ), гетероструктури та суперґратки — мають ряд унікальних властивостей, що дає змогу створити на їх основі швидкодіючі транзистори, електрооптичних перемикачі, приймачі та джерела випромінювання, а також прилади спінтроніки [1].

Фізика низьковимірних структур зазнала бурхливого розвитку у зв'язку з новими можливостями, що з'явилися внаслідок упровадження технологій одержання надзвичайно тонких шарів контактуючих кристалів. Важливою причиною наукового зацікавлення названими структурами є також створення новітніх ефективних теоретичних моделей, які пояснюють спостережувані або прогнозують нові явища, пов'язані з особливостями руху квазічастинок та їх взаємодії, спричинених наявністю просторових обмежень.

Багато властивостей напівпровідникових Q2D-структур пов'язано з особливостями взаємодії їхніх електронної та фононої систем [2–11]. Наявність площин гетеропереходів суттєво змінює фононний спектр таких структур порівняно з тривимірними системами. Тому коректне врахування електрон-фононої взаємодії у випадку КЯ, створеної на основі напівпровідникової гетеропари, потребує розгляду взаємодії електронів з усіма можливими типами коливань атомів [2–6].

Урахування взаємодії електронних станів із поляризаційними оптичними коливаннями в наногетеросистемах можливе в межах теорії збурень або варіаційного методу Лі–Лоу–Пайнса. Такі підходи дозволяють коректно обчислити енергію зв'язаного електрон-коливного стану (полярона) в КЯ, створеній на основі напівпровідникових гетероструктур. Зокрема, у роботах [5, 6] в наближенні другого порядку теорії збурень розраховано енергію полярона в наноплівці — плоскій одиночній КЯ на основі гетеропари GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, а також досліджено її залежність від ширини ями. Автори [6] методами теорії збурень вперше розраховували енергію зв'язку та ефективну

масу полярона з урахуванням усіх — дискретних у КЯ і континуальних у надбар'єрній області енергетичного спектра — проміжних електронних станів, а також усіх оптичних фононних мод, що з ними взаємодіють. Проаналізували також внесок кожної фононної моди у величини енергії зв'язку та ефективної маси полярона при різних значеннях ширини КЯ.

Автори [11] у межах теорії збурень та методу Лі–Лоу–Пайнса вперше дослідили залежність енергії від квазіімпульсу полярона у плоских наногетеросистемах із КЯ скінченої та нескінченної глибини.

Проте названі методи мають обмежену спроможність щодо систем із проміжним та сильним електрон-фононним зв'язком [12]. Універсальнішим щодо розрахунку енергії зв'язку полярона та дослідження її залежності від хвильового вектора й температури  $T$  є метод функцій Гріна [10, 13].

У цій статті наведено результати застосування методу функцій Гріна для розрахунку енергії зв'язку полярона у випадку плоскої наногетеросистеми з КЯ скінченої глибини (наноплівки). Розрахунок здійснено для тонкого шару напівпровідника  $\beta$ -HgS, уміщеного в напівпровідникове середовище  $\beta$ -CdS. Наносистеми на основі напівпровідникових гетероструктур  $\beta$ -HgS/ $\beta$ -CdS одержані методом йонного заміщення [14] і цікаві тим, що вони мають близькі значення сталіх ґратки та діелектричних проникностей їхніх компонент. Матеріал із області КЯ такої гетеропари характеризується значно більшою величиною константи електрон-фононої взаємодії, аніж досліджувані в роботах [5, 6] структури GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (0.139 для  $\beta$ -HgS проти значення 0.068 для GaAs [15]).

Отримано аналітичний вигляд функцій електрон-фононного зв'язку з просторово обмеженими фононами, які можна використати для розв'язування задач теорії електрон-фононої взаємодії в наногетеросистемах з КЯ скінченої глибини.

За умови відсутності зовнішніх полів та  $T = 0$  обчислено енергію зв'язку полярона як функцію товщини наноплівки. Проаналізовано парціальні внески всіх проміжних електронних станів із дискретної й конти-

нуальної ділянок спектра в енергію зв'язку полярона, утвореного взаємодією з поздовжньою гілкою просторово обмежених поляризаційних оптичних фононів, а також їх залежність від товщини плівки  $a$ . Показано, що при  $a > 50$  нм для розрахунку енергії зв'язку просторово обмеженого полярона необхідно враховувати всі стани з дискретної частини енергетичного спектра електрона.

## II. ГАМІЛЬТОНІАН СИСТЕМИ

Розглянуто електрон, що майже вільно рухається всередині КЯ, утвореної двома послідовними гетеропереходами, розміщеними у площинах  $z = \pm a/2$  декартової системи координат. У не дуже тонких плівках на основі структур GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, що мають значення параметра ґратки й константи електрон-фононного зв'язку, сумірні з відповідними параметрами досліджуваної системи, найбільший внесок у величину енергії зв'язку полярона дають просторово обмежені фонони [6]. Тому в цій роботі розглянуто взаємодію електрона виключно з поляризаційними оптичними коливаннями атомів типу просторово обмежених фононних мод. Унаслідок малої різниці сталих ґратки не взято до уваги також взаємодію електрона зі своїм дзеркальним відображенням [16].

Стаціонарні стани системи електронів, що взаємодіють із фононами у кристалі, описано гамільтоніаном

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{e-ph}. \quad (1)$$

Першим доданком тут є гамільтоніан

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

електрона у стані з хвильовим вектором  $\mathbf{k} = (k_{\parallel}, k_{\perp})$ , що майже вільно рухається в потенціальному полі типу прямокутної КЯ скінченної глибини  $V_0$ . Тут

$$V(z) = \begin{cases} 0, & m_{\perp} = \begin{cases} m_0, & |z| \leq a/2; \\ m_1, & |z| > a/2. \end{cases} \end{cases}$$

Згідно з правилом Андерсона [17], висоту потенціального бар'єра для електрона  $V_0 = \chi_{c0} - \chi_{c1}$  визначаємо різницею спорідненостей до електрона  $\chi_{cl}$  матеріалів КЯ (плівки,  $l = 0$ ) та бар'єрного шару (зовнішнього середовища,  $l = 1$ ).

Власні значення і власні функції гамільтоніана (2) подано [6] у вигляді

$$E_{\mathbf{k}} = E_{k_{\parallel}} + E_{k_{\perp}}$$

та

$$\Psi_{\mathbf{k}}(x, y, z) \equiv \Psi_{\mathbf{k}}(\rho, z) = \phi_{k_{\parallel}}(\rho) \psi_{k_{\perp}}(z).$$

Енергія поперечного руху  $E_{k_{\perp}}$  може набувати значень із дискретної множини  $\{E_n < V_0\}$ , що задовольняють рівняння

$$\operatorname{tg} \left( \frac{a}{2} \frac{\sqrt{2m_0 E_n}}{\hbar} \right) = \sqrt{\frac{m_0(V_0 - E_n)}{m_1 E_n}} \quad (3)$$

при непарних  $n$  та

$$\operatorname{ctg} \left( \frac{a}{2} \frac{\sqrt{2m_0 E_n}}{\hbar} \right) = -\sqrt{\frac{m_0(V_0 - E_n)}{m_1 E_n}} \quad (4)$$

при парних  $n$ , або з континуальної області спектра ( $E_{k_{\perp}} > V_0$ ).

Енергетичним рівням з непарними номерами відповідають симетричні

$$\psi_n(z) = \frac{C_n}{\sqrt{a}} \begin{cases} \cos(k_{0n} z), & |z| \leq a/2; \\ \cos(k_{0n} a/2) \exp[-k_{1n}(|z| - a/2)], & |z| > a/2, \end{cases} \quad (5)$$

а з парними номерами — антисиметричні хвильові функції

$$\psi_n(z) = \frac{C_n}{\sqrt{a}} \begin{cases} \sin(k_{0n} z), & |z| \leq a/2; \\ \operatorname{sign}(z) \sin(k_{0n} a/2) \exp(-k_{1n}(|z| - a/2)), & |z| > a/2 \end{cases} \quad (6)$$

з відповідними нормуючими множниками

$$C_n = \sqrt{2} \begin{cases} \sqrt{\frac{k_{0n} a}{k_{0n} a + \sin(k_{0n} a) + 2k_{0n} \cos^2(k_{0n} a)/k_{1n}}}, & n = 1, 3, 5, \dots; \\ \sqrt{\frac{k_{0n} a}{k_{0n} a - \sin(k_{0n} a) + 2k_{0n} \sin^2(k_{0n} a)/k_{1n}}}, & n = 2, 4, 6, \dots, \end{cases} \quad (7)$$

де  $k_{0n} = \sqrt{2m_0 E_n}/\hbar$ ,  $k_{1n} = \sqrt{2m_1(V_0 - E_n)}/\hbar$ .

Континуальна область енергетичного спектра також поділяється на стани з симетричними

$$\psi_{k_{\perp}}^S(z) = \frac{C_S}{\sqrt{L}} \begin{cases} \cos(k_{0\perp}z), & |z| \leq a/2; \\ \cos(k_{0\perp}a/2) \cos[k_{1n}(|z| - a/2)] - \xi^{-1} \sin(k_{0\perp}a/2) \sin[k_{1n}(|z| - a/2)], & |z| > a/2 \end{cases} \quad (8)$$

та антисиметричними

$$\psi_{k_{\perp}}^A(z) = \frac{C_A}{\sqrt{L}} \begin{cases} \sin(k_{0\perp}z), & |z| \leq -a/2; \\ \text{sign}(z) \{ \sin(k_{0\perp}a/2) \cos[k_{1n}(|z| - a/2)] + \xi^{-1} \cos(k_{0\perp}a/2) \sin[k_{1n}(|z| - a/2)] \}, & |z| > a/2 \end{cases} \quad (9)$$

хвильовими функціями [6] з відповідними нормуючими множниками

$$C_S = \left\{ \frac{1}{2} [\cos^2(k_{0\perp}a/2) + \xi^{-2} \sin^2(k_{0\perp}a/2)] \right\}^{-1/2} \quad (10)$$

або

$$C_A = \left\{ \frac{1}{2} [\sin^2(k_{0\perp}a/2) + \xi^{-2} \cos^2(k_{0\perp}a/2)] \right\}^{-1/2}, \quad (11)$$

де  $k_{0\perp} = \sqrt{2m_0 E_{k_{\perp}}}/\hbar$ ,  $k_{1\perp} = \sqrt{2m_1(E_{k_{\perp}} - V_0)}/\hbar$  — відповідні поперечні квазіімпульси, а  $\xi = m_0 k_{1\perp}/m_1 k_{0\perp}$ .

Рух електрона у площині КЯ вважається майже вільним з енергією

$$E_{\mathbf{k}_{\parallel}} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0}$$

та хвильовою функцією

$$\phi_{\mathbf{k}_{\parallel}} = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(\mathbf{k}_{\parallel}, \rho)}.$$

Перехід до представлення вторинного квантування на операторних функціях

$$\Psi(\rho, z) = \sum_{n\mathbf{k}_{\parallel}} \hat{a}_{n\mathbf{k}_{\parallel}} \Psi_{n\mathbf{k}_{\parallel}}(\rho, z) \quad (12)$$

дає змогу подати гамільтоніан електрона у вигляді

$$\hat{H}_e = \sum_{n\mathbf{k}_{\parallel}} E_{n\mathbf{k}_{\parallel}} \hat{a}_{n\mathbf{k}_{\parallel}}^+ \hat{a}_{n\mathbf{k}_{\parallel}}, \quad (13)$$

де  $\hat{a}_{n\mathbf{k}_{\parallel}}^+$  і  $\hat{a}_{n\mathbf{k}_{\parallel}}$  — оператори, відповідно, народження і знищення електрона у стані з енергією

$$E_{n\mathbf{k}_{\parallel}} = E_n + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0}. \quad (14)$$

У формулах (12)–(14) індекс  $n$  є номером рівня для дискретних станів, а для континуальних — розрізняє стани з різними значеннями  $k_{\perp}$ .

Гамільтоніан вільних фононів у представленні вторинного квантування подаємо у стандартному вигляді

$$\hat{H}_{\text{ph}} = \sum_{\lambda\mathbf{q}_{\parallel}} \hbar\omega_{\lambda}(\mathbf{q}_{\parallel}) [\hat{b}_{\lambda\mathbf{q}_{\parallel}}^+ \hat{b}_{\lambda\mathbf{q}_{\parallel}} + 1/2], \quad (15)$$

де  $\hat{b}_{\lambda\mathbf{q}_{\parallel}}^+$  та  $\hat{b}_{\lambda\mathbf{q}_{\parallel}}$  — оператори, відповідно, народження та знищення фонона у стані з хвильовим вектором  $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_{\parallel}, q_{\lambda})$  і енергією  $\hbar\omega_{\lambda}(\mathbf{q}_{\parallel})$ . Частота просторово обмежених фононів вважається незалежною від хвильового вектора і дорівнює  $\omega_{L0}$ ,  $q_{\lambda} = \lambda\pi/a$ , а індекс  $\lambda$  набуває цілих значень від 1 до  $N = \text{int}(a/a_0)$ , де  $a_0$  — стала ґратки в області КЯ [6].

Третій доданок у (1) являє собою гамільтоніан електрон-фононої взаємодії, який у представленні чисел заповнення фононних станів подано [18] у вигляді

$$\hat{H}_{e\text{-ph}} = i \sqrt{\frac{4\pi e^2 \hbar \omega_{L0}}{aS\epsilon}} \times \sum_{\lambda\mathbf{q}_{\parallel}} \frac{L_{\lambda}(z)}{\sqrt{q_{\parallel}^2 + q_{\lambda}^2}} e^{i(\mathbf{q}_{\parallel}, \rho)} (\hat{b}_{\lambda\mathbf{q}_{\parallel}} + \hat{b}_{\lambda-\mathbf{q}_{\parallel}}^+), \quad (16)$$

де  $1/\epsilon = 1/\epsilon_{\infty} - 1/\epsilon_0$ , а

$$L_{\lambda}(z) = \begin{cases} \sin[q_{\lambda}(z + a/2)], & |z| < a/2; \\ 0, & |z| \geq a/2. \end{cases} \quad (17)$$

Вибираючи в ролі  $\Psi_{n\mathbf{k}_{\parallel}}(\rho, z)$  хвильові функції симетричних та антисиметричних одноелектронних станів, здійснюємо перехід у гамільтоніані (16) від координатного — за змінними  $(x, y, z)$  — до представлення чисел заповнення електронних станів

$$\hat{H}_{e\text{-ph}} = \sum_{n, n', \mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\lambda\mathbf{q}_{\parallel}} F_{nn'}^{\lambda}(\mathbf{q}_{\parallel}) \hat{a}_{n'\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^+ \hat{a}_{n\mathbf{k}_{\parallel}} (\hat{b}_{\lambda\mathbf{q}_{\parallel}} + \hat{b}_{\lambda-\mathbf{q}_{\parallel}}), \quad (18)$$

де

$$F_{nn'}^{\lambda}(\mathbf{q}_{\parallel}) = i2\lambda \sqrt{\frac{\pi^3 e^2 a}{\epsilon S} \frac{\hbar \omega_{L0}}{(\lambda\pi)^2 + (aq_{\parallel})^2}} C_n C_{n'} X_{nn'}^{\lambda} \quad (19)$$

— функція електрон-фононного зв'язку, а

$$X_{nn'}^\lambda = \frac{(-1)^{n-1} \sin[(k_{0n} - k_{0n'})a/2]}{(\lambda\pi)^2 - [(k_{0n} - k_{0n'})a]^2} - \frac{\sin[(k_{0n} + k_{0n'})a/2]}{(\lambda\pi)^2 - [(k_{0n} + k_{0n'})a]^2}, \quad (20)$$

якщо  $\lambda = 2, 4, 6, \dots$ ,  $n$  і  $n'$  – різної парності, або

$$X_{nn'}^\lambda = \begin{cases} \frac{\cos[(k_{0n} - k_{0n'})a/2]}{(\lambda\pi)^2 - [(k_{0n} - k_{0n'})a]^2} + \frac{\cos[(k_{0n} + k_{0n'})a/2]}{(\lambda\pi)^2 - [(k_{0n} + k_{0n'})a]^2}, & n \text{ і } n' \text{ – непарні;} \\ \frac{\cos[(k_{0n} - k_{0n'})a/2]}{(\lambda\pi)^2 - [(k_{0n} - k_{0n'})a]^2} - \frac{\cos[(k_{0n} + k_{0n'})a/2]}{(\lambda\pi)^2 - [(k_{0n} + k_{0n'})a]^2}, & n \text{ і } n' \text{ – парні} \end{cases} \quad (21)$$

при  $\lambda = 1, 3, 5, \dots$

Якщо якийсь з електронних станів належить континуальній частині спектра, то роль  $n$  відіграватиме індекс симетрії ( $S$  або  $A$ ),  $k_{0n}$  замінюється на  $k_{0\perp}$  і використовується відповідний нормуючий множник.

### III. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ І ВИСНОВКИ

Енергія системи електронів, що взаємодіють із фононами, визначається положеннями полюса представлення Фур'є для електронної функції Гріна [13]

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - E_{\mathbf{k}} - M(\mathbf{k}, \omega)}.$$

За умови слабого електрон-фононного зв'язку можна використати однофононне наближення [13], подавши масовий оператор досліджуваної системи у вигляді

$$M(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega) = \sum_{n, \lambda, \mathbf{q}_{\parallel}} \frac{|F_{1n}^\lambda(\mathbf{q}_{\parallel})|^2}{\hbar\omega - E_{n\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} - \hbar\omega_{L0}}. \quad (22)$$

Оскільки при  $T = 0$  у системі можуть існувати тільки віртуальні фонони, то електрон-фононна взаємодія може відбуватися виключно у процесах з їх випромінюванням, що спричиняє зсув енергії у довгохвильову область. Тоді величину  $\hbar\omega = E_{1\mathbf{k}_{\parallel}} + M(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$  можна вважати енергією полярона в основному стані. Починаючи відлік енергії від дна найнижчої зони електронів провідності у КЯ, знаходимо енергію зв'язку полярона

$$\begin{aligned} \Delta &= -M(\mathbf{k}_{\parallel} = 0, \omega = E_1/\hbar) \\ &= - \sum_{n, \lambda, \mathbf{q}_{\parallel}} \frac{|F_{1n}^\lambda(\mathbf{q}_{\parallel})|^2}{E_1 - E_n - \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_0} - \hbar\omega_{L0}}. \end{aligned} \quad (23)$$

Використовуючи функції електрон-фононного зв'язку (20), отримуємо явний аналітичний вигляд масового оператора, визначеного на хвильових функціях проміжних електронних станів із дискретної частини спектра

$$\begin{aligned} M^{(d)}(\mathbf{k}_{\parallel} = 0, \omega = E_1/\hbar) \\ = \frac{\pi^2 e^2}{\epsilon a} C_1^2 \sum_{n=1}^{n_m} C_n^2 \sum_{\lambda=1}^N \lambda^2 |X_{1n}^\lambda|^2 \Phi_\lambda(E_n), \end{aligned} \quad (24)$$

де

$$\begin{aligned} \Phi_\lambda(E) &= \frac{\ln \left[ \left( \frac{a}{\lambda a_0} \right)^2 + 1 \right] / \left[ \left( \frac{a}{a_0} \right)^2 \eta(E) + 1 \right]}{\eta(E_1) \lambda^2 + \frac{E_1 - E}{\hbar\omega_{L0}} - 1} \\ \left( \eta(E) &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0 a^2 (\hbar\omega_{L0} + E - E_1)} \right). \end{aligned} \quad (25)$$

Підсумовування у (24) здійснюємо за індексом  $n$ , що нумерує дискретні рівні в КЯ, кількість яких  $n_m$  зростає зі збільшенням ширини ями. Конкретний розрахунок здійснено для одиночної КЯ на основі подвійного гетеропереходу  $\beta\text{-CdS}/\beta\text{-HgS}$ , параметри якої ( $a_0 = 5.851 \text{ \AA}$ ,  $m_0 = 0.036$  і  $m_1 = 0.2$  (в одиницях маси вільного електрона),  $\chi_{c0} = 5 \text{ eV}$ ,  $\chi_{c1} = 3.65 \text{ eV}$ ,  $\hbar\omega_{L0} = 27.8 \text{ meV}$ ,  $\epsilon_0 = 18.2$  і  $\epsilon_\infty = 11.36$ ) наведені у [13].

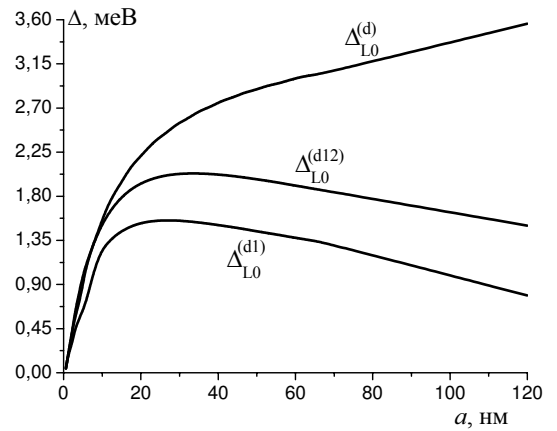


Рис. 1. Залежність від товщини плівки внесків до енергії зв'язку полярона  $\Delta$ , зумовлених взаємодією обмежених фононів зі станами основної ( $\Delta^{(d1)}$ ), основної й першої збудженої ( $\Delta^{(d12)}$ ), основної та всіх вищих ( $\Delta^{(d)}$ ) зон дискретної частини електронного спектра.

На рис. 1 показано залежності від ширини КЯ величин внесків до енергії зв'язку полярона, зумовлених електрон-фононою взаємодією за участі станів, пов'язаних з основним рівнем ( $\Delta^{(d1)}$ ), основним і першим збудженим ( $\Delta^{(d12)}$ ) та всіма станами дискретної частини електронного спектра ( $\Delta^{(d)}$ ). Видно, що у випадку тонких плівок ( $a < 10$  нм) внесок основного рівня є домінуючим; величина його стрімко зростає зі збільшенням товщини наноплівки до сорока п'яти моношарів  $\beta$ -HgS ( $a \approx 26$  нм), а потім повільно зменшується.

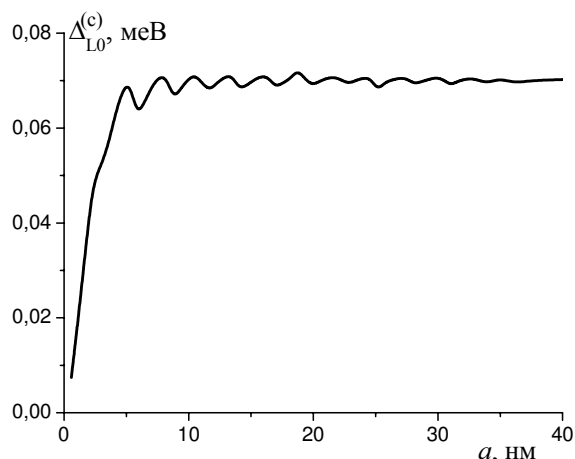


Рис. 2. Залежність внеску  $\Delta^{(c)}$  до енергії зв'язку полярона взаємодії з обмеженими фононами станів континуальної частини електронного спектра від товщини плівки  $a$ .

Урахування збуджених рівнів приводить до підняття кривої та зсуву її максимуму в бік більших товщин наноплівки. Зі збільшенням товщини плівки їх роль зростає — при  $a > 50$  нм сумарний внесок верхніх зон до енергії зв'язку полярона  $\Delta^{(d)}$  перевищує внесок від станів основної зони  $\Delta^{(d1)}$ .

Значний внесок збуджених рівнів у величину енергії просторово обмеженого полярона вимагає також дослідження ролі континуальних станів. З цією метою ми одержали вигляд масового оператора для взаємодії електрона в основному стані з просторово обмеженими фононами через стани неперервної частини спектра

$$M^{(c)}(\mathbf{k}_{\parallel} = 0, \omega = E_1/\hbar) = \frac{\sqrt{2m_0\pi} e^2}{2\hbar\epsilon a} C_1^2 \times \int_{V_0}^{\infty} \frac{dE_{k_{\perp}}}{\sqrt{E_{k_{\perp}}}} \sum_{\lambda=1}^N \lambda^2 C_{\lambda}^2 |X_{1k_{0\perp}}^{\lambda}|^2 \Phi_{\lambda}(E_{k_{\perp}}), \quad (26)$$

де

$$C_{\lambda} = \begin{cases} C_S, & \lambda=1, 3, \dots; \\ C_A, & \lambda=2, 4, \dots \end{cases} \quad (27)$$

Результат розрахунку показаний на рис. 2. Видно, що величина  $\Delta^{(c)}$  стрімко зростає зі збільшенням товщини наноплівки до 5 нм, проте у 20...40 раз менша від величини внеску дискретних станів. При  $a > 5$  нм величина  $\Delta^{(c)}$  коливається біля значення 0.07 меВ, що не перевищує 4–5% від  $\Delta_{L0}^{(d)}$ , причому амплітуда коливань швидко зменшується зі зростанням товщини плівки.

Отже, результати розрахунків показують, що залежність енергії зв'язку полярона, утвореного взаємодією основного електронного рівня з обмеженими фононами за участі всіх електронних станів, від товщини наноплівки є монотонною, нелінійно зростаючою. При товщинах наноплівки понад 200 нм, функція  $\Delta = \Delta^{(d)} + \Delta^{(c)}$  виходить на насичення, наближаючись до значення, характерного для тривимірного кристала  $\beta$ -HgS (3.85 меВ). Для розрахунку енергії зв'язку полярона у плівках товщиною понад 50 нм достатньо враховувати стани лише дискретної частини енергетичного спектра.

- 
- [1] E. L. Ivchenko, G. E. Pikus, *Superlattices and Other Heterostructures: Symmetry and Optical Phenomena* (Springer-Verlag, Berlin, 1995).
- [2] L. Wendler, *Phys. Status Solidi B* **129**, 513 (1985).
- [3] K. Huang, B. F. Zhu, *Phys. Rev. B* **38**, 13377 (1988).
- [4] N. Mori, T. Ando, *Phys. Rev. B* **40**, 6175 (1989).
- [5] G. Q. Hai, F. M. Peeters, J. T. Devreese, *Phys. Rev. B* **42**, 11063 (1991).
- [6] G. Q. Hai, F. M. Peeters, J. T. Devreese, *Phys. Rev. B* **48**, 4666 (1993).
- [7] A. Thilagam, J. Singh, *Phys. Rev. B* **49**, 15983 (1994).
- [8] В. І. Бойчук, Р. І. Пазюк, *Укр. фіз. журн.* **39**, 212 (1994).
- [9] J. Zhang, B. Zhu, K. Huang, *Phys. Rev. B* **59**, 13184 (1999).
- [10] Н. В. Ткач, Р. Б. Фартушинский, *Физ. тверд. тела* **45**, 1284 (2004).
- [11] В. І. Бойчук, В. А. Борусевич, *Журн. фіз. досл.* **10**, 39 (2006).
- [12] Ю. А. Фирсов, *Полярони* (Наука, Москва, 1975).
- [13] М. В. Ткач, *Квазічастинки у наногетеросистемах. Квантові точки і дроти* (Вид-во ЧНУ ім. Юрія Федьковича, Чернівці, 2003).
- [14] D. Schoos, A. Mews, A. Eychmuller, H. Weller, *Phys. Rev. B* **49**, 17072 (1994).
- [15] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **58**, R1 (1985).
- [16] В. І. Бойчук, Д. Ю. Кубай, *Физ. тверд. тела* **43**, 226 (2001).
- [17] R. L. Anderson, *IBM J. Res. Dev.* **4**, 283 (1960).
- [18] R. Zheng, M. Matsuura, *Phys. Rev. B* **57**, 1749 (1998).

B. M. KPAMAP

**POLARON BINDING ENERGY IN HgS/CdS NANOFILMS**

V. M. Kramar

*Chernivtsi National University,  
2, Kotsyubynsky St., Chernivtsi, UA-58012, Ukraine*

An electron-phonon interaction influence on the bottom of ground energy band of electron in a finite quantum well was investigated by using the dielectric continuum approach and the Green's function method. Polaron binding energy as a film-thickness function was calculated for the flat nanofilm of semiconductor crystal  $\beta$ -HgS situated in a semiconductor medium  $\beta$ -CdS. It is shown that with the exception of very thin nanofilms the interaction of electrons with confined phonons through the bands of the whole discrete part of energy spectrum is important.