

*Brake // Cryogenics. – 2005. – Vol. 45, Is. 3. – P. 231–239. 7. Тиханський М.В., Крисько Р.Р., Партика А.І. Перехідні характеристики кріотронів на основі СКВІДів // Вісн. Нац. ун-ту “Львівська політехніка”. – 2006. – № 558. – С. 64–70. 8. Тиханський М.В., Партика А.І. // *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. – 2007. – № 4. 9. Тиханський М.В., Крисько Р.Р., Партика А.І. // Вісн. Нац. ун-ту “Львівська політехніка”. – 2005. – № 532. – С. 138–146. 10. Тиханський М.В., Партика А.І. // Вісн. Нац. ун-ту “Львівська політехніка”. – 2007. – № 592. – С. 143–148.*

УДК 537.311

К.К. Товстюк

Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра напівпровідникової електроніки

ПОЛЯРИЗАЦІЙНИЙ ОПЕРАТОР У ТЕМПЕРАТУРНІЙ ТЕХНІЦІ ФУНКЦІЙ ГРІНА ДЛЯ ДИХАЛЬКОГЕНІДІВ ПЕРЕХІДНИХ МЕТАЛІВ

© Товстюк К.К., 2008

C.C. Tovstyuk

POLARIZATION OPERATOR IN TEMPERATURE GREEN FUNCTION TECHNIQUE FOR DICHALCONIDE OF TRANSITION METALS

© Tovstyuk C.C., 2008

Розраховано залежність дійсної та уявної частин поляризаційного оператора (ПО) від температури та величини міжшарового перемішування у шаруватому напівпровідникові із Фівазовим законом дисперсії. Розрахунок виконують для параметрів GaSe. Показано, що основний внесок поляризаційних ефектів, пов'язаних із електрон-фононою взаємодією, полягає у зростанні розсіювання (зростанні півширини піка поглинання), однак сама півширина для широкої області температур залишатиметься постійною. Окрім того, така взаємодія призведе до незначного зростання частоти фонона, яка монотонно зростатиме із температурою. Зростання параметра міжшарового перемішування одночастинкового спектра електронів практично не впливатиме на поляризаційні ефекти.

Dependence of real and imagine parts of polarization operator have been calculated as functions of temperature and of interlayer mixing parameter for layered semiconductors with Fivaz energy dispersions. Calculations were carried out for GaSe datas. It is sgown that the most important contribution of polarization effects coased by electron – phonon interaction form the increasing of dispersion (increasing of half width of resonant peak), but the value of half width is constant for large temperature range. Besides, such interaction leads to the small increasing of phonon frequency, which increases monotony with temperature increasing. The increasing of interlayer mixing parameter does not influent polarization effects.

Вступ

Як відомо [1], такі сполуки, як InSe та GaSe є функціональними матеріалами для наноструктур оксидно-напівпровідникових конденсаторів (ОНК). Тому одержання зміни діелектричної сталої середовища, яка визначається через поляризаційний оператор, а також її залежність від температури становить певну зацікавленість. Окрім того, через поляризаційний оператор визначається радіус Дебаєвого екранування, а також ПО задає зміну частот фононного спектра, внаслідок електрон-фононої взаємодії,

а також зміну з температурою півширини піків поглинання. Вибір названих металів для створення ОНК обумовлений їх придатністю до ефективної інтеркаляції [1]. У обчисленнях використовується Фівазова модель одночастинкового спектра електронів для шаруватих кристалів (ШК)[2], яка містить параметр міжшарового перемішування – саме цей параметр змінюється під час інтеркаляції. Результати порівнюються із [3–5], в яких виконували аналогічні обчислення для $T=0$.

Постановка задачі та використані наближення

Як відомо [6, 7], поляризаційний оператор у температурній техніці функцій Гріна задається:

$$\Pi(\mathbf{q}, w') = 2Tg^2 \sum_n \int \frac{d^4 \mathbf{k}}{(2p)^4} G_k^{\mathbf{q}}(w) G_{k+\mathbf{q}}^{\mathbf{q}}(w+w'), \quad (1)$$

де g^2 – постійна електрон-фононної взаємодії, $G_k^{\mathbf{q}}$ – температурна функція Гріна електронного газу

$$G_k^{\mathbf{q}} = \frac{1}{i w_n - E(\mathbf{k}) + m}, \quad (2)$$

для якої

$$w_n = (2n+1)pT, \quad (3)$$

при $n = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, \infty$

В роботі простежується вплив матричного елемента взаємодії електронів двох різних шарів Ван-дер-Ваальсової щілини на записані вище фізичні величини, яка змінюватиметься внаслідок інтеркаляції сполуками, які допускають деінтеркаляцію – не утворюють стійких хімічних зв'язків і здатні покинути матрицю кристала, змінюючи тим не менше розмір Ван-дер-Ваальсової щілини [1]. Електронний спектр у шаруватому напівпровідникові подамо у вигляді [2]

$$E(\mathbf{k}) = a k_{\perp}^2 + b(1 - \cos(k_z d)) \quad (4)$$

де $a = \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^*}$, m_{\perp}^* – ефективна маса в площині шарів, β – постійна міжшарового перемішування, d

– постійна ґратки вздовж нормалі до шарів; $k_{\perp} = (k_x, k_y)$.

1. Рівняння для визначення хімпотенціалу для ШК

Рівняння для визначення хімпотенціалу для слабо виродженого газу має вигляд [8]:

$$\exp\left\{\frac{m}{T}\right\} = \frac{N}{Z(1/T)} \cdot \left[1 + N \frac{Z(2/T)}{Z^2(1/T)}\right], \quad (5)$$

де Z позначає статистичну суму (інтеграл). Як визначено в [9], для електронного газу з дисперсією (4), статистичний інтеграл має вигляд

$$Z(T) = \frac{V}{ad} T \cdot \exp\{-g\} p \cdot I_0(g), \quad (6)$$

де $g = \frac{b}{T}$, I_n – модифікована функція Бесселя уявного аргументу n -порядку. Розрахунок за формулою (5) з використанням (6) доводить до рівняння для визначення хімпотенціалу у ШК:

$$m = b \cdot \left\{ \ln\left(\frac{C_0}{T I_0(g)}\right) + \ln\left[1 + \frac{C_0 I_0(2g)}{2T I_0^2(g)}\right] \right\} \quad (7)$$

де $C_0 = \frac{nad}{p}$, n – концентрація електронів у зоні провідності при заданій температурі.

2. Вигляд дійсної та уявної частин поляризаційного оператора

Для закону дисперсії (4) поляризаційний оператор (1) матиме вигляд

$$\Pi = \sum_n \int \frac{d^3 k}{(2p)^3} \cdot \frac{2Tg^2}{i w_n - a k_{\perp}^2 + b \cos(k_z d) + m'} \cdot \frac{1}{i(w_n + w) - a(k_{\perp} + q_{\perp})^2 + b \cos((k_z + q_z) d) + m'} \quad (8)$$

де $m' = m - b$. Перейдемо в інтегруванні по k до циліндричної системи координат і проінтегруємо по кутах. Окрім того, введемо заміну $x = k_{\perp}^2$. Розглянемо взаємодію між частинками із обміном імпульсу

$$\mathbf{r} = (0, 0, q) \quad (9)$$

У таких позначення (8) перепишемо

$$\Pi = Tg^2 \sum_n \int_0^{a^2} dx \int \frac{d k_z}{(2p)^2} \cdot \frac{1}{i w_n - A(x, k_z)} \cdot \frac{1}{i(w_n + w) - B(x, k_z)} \quad (10)$$

де

$$\begin{aligned} A(x, k_z) &= ax - b \cos(k_z d) - m'; \\ B(x, k_z) &= ax - b \cos((k_z + q) d) - m'; \end{aligned} \quad (11)$$

Помноживши чисельник та знаменник (10) на комплексно спряжені вирази, запишемо дійсну та уявну частини поляризаційного оператора

$$\begin{aligned} \text{Re} \Pi(w, z_1) &= -\frac{Tg^2}{(2p)^2 ad} \sum_n \int_0^{a^2} dy \int_{-p}^p dz \frac{(A(y, z)B(y, z, z_1) - (w_n^2 + w_n w))}{(A^2(y, z) + w_n^2) \cdot ((w_n + w)^2 + B^2(y, z, z_1))}; \\ \text{Im} \Pi(w, z_1) &= -\frac{Tg^2}{(2p)^2 ad} \sum_n \int_0^{a^2} dy \int_{-p}^p dz \frac{(A(y, z) + B(y, z, z_1)) \cdot w_n + w A(y, z)}{(A^2(y, z) + w_n^2) \cdot ((w_n + w)^2 + B^2(y, z, z_1))}; \end{aligned} \quad (12)$$

В (12) $y = ax$, $z = k_z d$, $a_1 = a \frac{p^2}{a^2}$, $z_1 = q \cdot d$.

Числовий розрахунок ПО

Числовий розрахунок ПО виконували для даних GaSe [9], наведених у таблиці.

Значення фізичних параметрів GaSe, які використані в обчисленнях

Фізична величина	Позначення	Значення
Ефективна маса в площині шарів		
Ефективна маса в напрямку OZ		
Постійна ґратки в напрямку OX, OY	a	
Постійна ґратки в напрямку OZ	d	
Частота поздовжнього оптичного фонона		

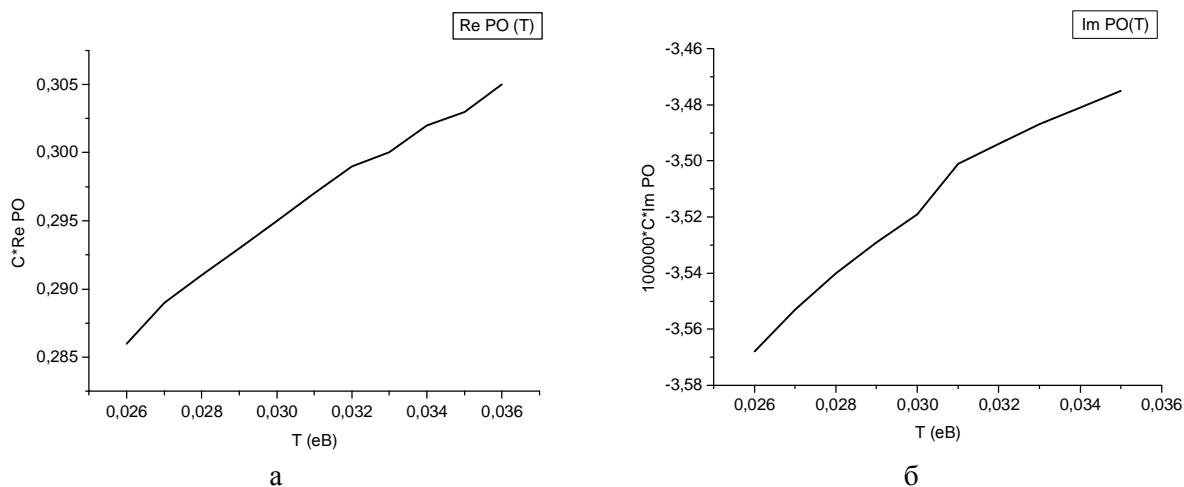
Функція Гріна (2) – узагальнена функція, тому інтегрування у (10)б (12) повинно виконуватись в сенсі головного значення:

Розрахунок дійсної та уявної частин ПО виконували в сенсі головного значення

$$\int \frac{j(x)}{f(x)} dx = \lim_{h \rightarrow 0} \int \frac{j(x) f(x)}{f^2(x) + h^2} \cdot \quad (13)$$

підсумували для $-10^3 < n < 10^3$. Зростання граничних значень n в 10 разів спричинило зміну числового значення на 2 %.

Виконані обчислення свідчать, що зміна b в межах (0, 148–0,198 eВ) не впливає на величини дійсної та уявної частин ПО. Отримані залежності ПО від температури показані на рисунку.



Залежність дійсної та уявної частин поляризаційного оператора від температури

Як зрозуміло з рисунка, спостерігається монотонно зростаюча залежність дійсної частини ПО від температури. Отже, при зростанні температури повинен відбуватися зсув піка поглинання для розглянутої частоти праворуч. У той час як ширина піка поглинання практично не змінюється із температурою: за абсолютним значенням величина уявної частини ПО майже в 10^5 разів менша від величини дійсної частини ПО. Спостерігатиметься монотонне зростання частоти фонона з температурою, у той час як півширина піка поглинання залишиться практично незмінною.

Висновки

Проаналізовано залежність поляризаційного оператора від температури та параметра міжшарового перемішування для шаруватих напівпровідників (GaSe) методом температурних функцій Гріна. Отримана монотонно зростаюча залежність дійсної частини ПО від температури та дуже слабка (зростаюча) залежність значення уявної частини ПО від температури. У той час як числове значення модуля уявної частини ПО в 10^5 разів менше від значення дійсної частини ПО. Отже, основний внесок електрон-фононної взаємодії проявиться у зростанні частоти фонона, яка монотонно зростатиме з температурою, у той час як півширина піка поглинання залишиться практично незмінною. Зростання параметра міжшарового перемішування одночастинкового спектра (β) практично не впливатиме на поляризаційні ефекти. Отримані результати узгоджуються із [3, 4], отриманими для $T = 0$.

1. Григорчак І.І. *Фізика і хімія твердого тіла*. – 2001. – 2 – С. 7–55.
2. Fivas R., Mosser E. *Electron-phonon interaction in semiconducting layer structures* // *Phys.Rev.* – 1964. – 136. – № 3A. – P. 833–836.
3. Товстюк К.Д. *Полупроводниковое материаловедение*. – К.: Наук. думка, 1984.
4. Товстюк К.К., Стахів О.В. // *Укр. фіз. журн.* – 1996. – 41 – С. 862–864.
5. Tovstyuk C.C., Lukianets V.A., Tovstyuk K.D. // *Physica BC* – 1981 – 107 – P. 747–748.
6. Абрикосов А.А., Горьков А.П., Дзялошинский И.Б. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. – М.: Физматгиз, 1962.
7. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.. *Статистическая физика*. Ч. 2. – М.: Наука, 1978.
8. Исихара А. *Статистическая физика*. – М.: Мир, 1973.
9. Tovstyuk C.C. // *Molecular Physics Reports*. – 1999 – 123 – P. 197–199.
10. Hellwege. К.Н., Madelung. O. *Zahlwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik*. – Berlin: Landolt – Bormstein, 1983.