

УДК 538.97:538.91

ПОЛЯРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ НА ИОННЫХ ПОДЛОЖКАХ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ ВЛИЯНИЕМ ИНТЕРФЕЙСНЫХ ФОНОНОВ

© 2023 г. А. Ю. Маслов¹ *, О. В. Прошина¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

“Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе Российской академии наук”, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: maslov.ton@mail.ioffe.ru

Поступила в редакцию 05.12.2022 г.

После доработки 23.12.2022 г.

Принята к публикации 27.02.2023 г.

Определен эффективный параметр электрон-фононного взаимодействия в полупроводниковой пленке на ионных подложках. Показано, что интерфейсные фононы “переносят” поляризацию среды из подложки в пленку. Обнаружено, что энергия связи полярона и эффективная масса носителей в одной и той же пленке на разных подложках могут изменяться на десятки и даже сотни процентов. Найдены условия реализации сильного взаимодействия для различных пленок.

DOI: 10.31857/S0367676523701557, EDN: VNHREX

ВВЕДЕНИЕ

В кристаллах с высокой степенью ионности взаимодействие заряженных частиц с полярными оптическими фононами оказывается сильным. Это взаимодействие принято характеризовать постоянной Фрелиха α , которая в ряде кристаллов действительно превышает единицу [1].

Сильное взаимодействие приводит к возникновению связанных состояний носителей заряда и полярных оптических фононов, которое получило название полярона большого радиуса [2]. Достаточно полный обзор современных исследований свойств поляронов приведен в работе [1]. В последнее время достаточно интенсивно исследуются свойства поляронов в наноструктурах. При этом важную роль играет значительное усложнение фононного спектра таких объектов [3, 4]. Значений постоянной Фрелиха для объемных материалов недостаточно для адекватного описания электрон-фононного взаимодействия в наноструктурах. Тем не менее, в ряде случаев удается выделить безразмерный параметр такого взаимодействия. В частности, в симметричных квантовых ямах и квантовых проволоках такой параметр содержит диэлектрические характеристики барьеров и эффективную массу локализованных в наноструктурах носителей заряда [5].

Нами предложен новый подход к реализации сильного электрон-фононного взаимодействия и изучению свойств поляронов большого радиуса. Предлагается исследовать достаточно тонкие по-

лупроводниковые пленки, расположенные на различных подложках из ионных материалов. На границе подложки и пленки возникают интерфейсные оптические фононы, которые “переносят” поляризацию из ионной подложки в полупроводниковую пленку. При этом для одной и той же пленки, расположенной на разных подложках, можно получить различные по величине полярные эффекты. В частности, оказывается возможным реализовать переход от слабого к сильному электрон-фононному взаимодействию при одном и том же составе полупроводниковой пленки. По нашему мнению, это единственный вариант осуществления подобного перехода в одном и том же материале.

ЭФФЕКТИВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Рассмотрим планарную структуру, состоящую из подложки с диэлектрической проницаемостью $\epsilon^{(s)}(\omega)$, полупроводниковой пленки толщиной d с диэлектрической проницаемостью $\epsilon^{(f)}(\omega)$ и диэлектрического покрытия с постоянным значением величины ϵ . В качестве такого покрытия может использоваться вакуум, воздух или неполярный диэлектрик. В последнем случае величина ϵ оказывается больше единицы. Как будет видно из дальнейшего рассмотрения, это приводит к уменьше-

нию параметра электрон-фононного взаимодействия в пленке.

Найдем вид гамильтониана электрон-фононного взаимодействия в модели диэлектрического континуума [6]. Для ее использования необходимо, чтобы радиус поляронного состояния r_p превышал постоянную решетки как для пленки ($a^{(f)}$), так и для подложки ($a^{(s)}$).

$$r_p > a^{(s)}, a^{(f)}. \quad (1)$$

Все полученные ниже результаты справедливы только при выполнении условия (1). Для большинства соединений A^2B^6 величина поляронного радиуса находится в интервале от единиц до десятков нанометров. Частотную зависимость диэлектрической проницаемости $\epsilon^{(i)}(\omega)$, где $i = s, f$ и относится к подложке или пленке, соответственно, в области фононных частот будем описывать стандартной формулой

$$\epsilon^{(i)}(\omega) = \epsilon_{\infty}^{(i)} \frac{\omega^2 - \omega_{LO}^{(i)2}}{\omega^2 - \omega_{TO}^{(i)2}}, \quad (2)$$

где ω_{LO} и ω_{TO} – частоты продольных и поперечных оптических фононов, соответственно, а $\epsilon_{\infty}^{(i)}$ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость в пленке или подложке. Используя стандартное граничное условие на двух гетерограницах, получим уравнение для спектра интерфейсных оптических фононов в виде:

$$e^{-qd} \frac{\epsilon^{(f)}(\omega) - \epsilon^{(s)}(\omega)}{\epsilon^{(f)}(\omega) + \epsilon^{(s)}(\omega)} = e^{qd} \frac{\epsilon^{(f)}(\omega) + \epsilon}{\epsilon^{(f)}(\omega) - \epsilon}. \quad (3)$$

Здесь q – двумерный волновой вектор фонона в плоскости пленки. В общем случае уравнение (3) содержит три ветви интерфейсных фононов. Две из них имеют максимум интенсивности на границе между подложкой и пленкой, а третья – между пленкой и поверхностным слоем.

При исследовании электрон-фононного взаимодействия наибольший интерес представляют значения волнового вектора q порядка обратного поляронного радиуса $1/r_p$, такие, что

$$qr_p \approx 1. \quad (4)$$

Поэтому при малом радиусе полярона на гетерограницах возникают интерфейсные фононы, интенсивность которых в пленке быстро падает с расстоянием. При этом взаимодействие быстро уменьшается с увеличением толщины пленки.

Более интересной оказывается противоположная ситуация, когда поляронный радиус превышает толщину пленки, то есть

$$\frac{d}{r_p} < 1. \quad (5)$$

При этом практически по всей толщине пленки наводится значительная поляризация, приводящая к сильному электрон-фононному взаимодействию. Условие (5) накладывает ограничение сверху на толщину пленок, в которых могут быть реализованы сильные поляронные эффекты. В нулевом порядке по параметру (5) в уравнении (3) можно положить $q = 0$, и все расчеты сильно упрощаются. Частота соответствующих интерфейсных фононов ω_{iph} оказывается равной

$$\omega_{iph}^2 = \frac{\epsilon_{\infty}^{(s)} \omega_{LO}^{(s)2} - \epsilon \omega_{TO}^{(s)2}}{\epsilon_{\infty}^{(s)} - \epsilon} \quad (6)$$

и лежит в интервале между частотами TO и LO -фононов подложки. В следующих порядках по параметру (5) возникает слабая зависимость частот (6) от волнового вектора, не нарушающая данное условие. Отметим, что две другие моды интерфейсных фононов возникают только в более высоких порядках по параметру (5). При этом их вклад в общую величину параметра взаимодействия оказывается малым по этому же параметру.

Гамильтониан взаимодействия выделенной интерфейсной моды (6) с заряженными частицами в пленке может быть представлен в стандартном виде [7]:

$$H_{e-iph} = \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{2\pi\omega e^2}{L^2} \right)^{1/2} \frac{\exp(i\mathbf{q}\mathbf{\rho})}{\sqrt{2q}} \times f(\mathbf{q}, z) F(\mathbf{q}, \omega) (a(\mathbf{q}) + a^+(\mathbf{q})). \quad (7)$$

Здесь L^2 – нормировочная площадь поверхности пленки, $a(\mathbf{q})$ и $a^+(\mathbf{q})$ – операторы уничтожения и рождения фононов. Множители $f(\mathbf{q}, z)$, $F(\mathbf{q}, \omega)$ приведены в [7]. Они описывают распределение интенсивности возбуждений по направлению, перпендикулярному плоскости пленки и в общем случае имеют достаточно громоздкий вид. Однако в нулевом порядке по параметру (5) их произведение сводится просто к постоянному коэффициенту. Это позволяет определить константу взаимодействия для рассматриваемой структуры, а также все существенные параметры возникающих поляронных эффектов.

Из сопоставления гамильтониана (7) с аналогичным гамильтонианом для двумерных структур из [1], получим для параметра электрон-фононного взаимодействия в тонкой пленке $\alpha^{(f)}$ следующее выражение:

$$\alpha^{(f)} = \frac{e^2 \sqrt{m\omega_{iph}}}{2\omega_{iph} \epsilon_{opt}^{(f)} \hbar^{3/2}}. \quad (8)$$

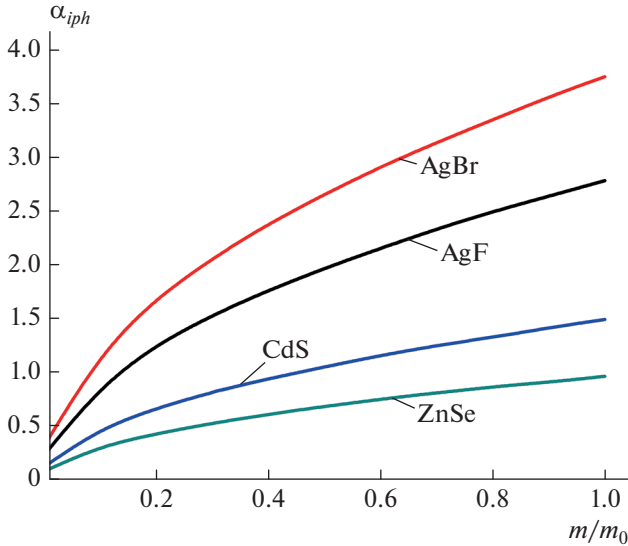


Рис. 1. Зависимость параметра электрон-фононного взаимодействия α_{iph} от массы электрона m/m_0 в пленке.

Здесь в качестве оптической диэлектрической проницаемости $\epsilon_{opt}^{(f)}$ фигурирует следующая комбинация диэлектрических проницаемостей подложки и покрытия:

$$\epsilon_{opt}^{(f)} = \left[\frac{1}{\epsilon_{\infty}^{(s)}} - \frac{1}{\epsilon_0^{(s)}} \right]^{-1} \frac{\epsilon_0^{(s)} \epsilon_{\infty}^{(s)}}{2(\epsilon_0^{(s)} - \epsilon)(\epsilon_{\infty}^{(s)} - \epsilon)}. \quad (9)$$

Выражение (9) имеет физический смысл только при $\epsilon_{\infty}^{(s)} > \epsilon$. Поэтому с ростом диэлектрической проницаемости верхнего слоя величина всех поляронных эффектов уменьшается, а при $\epsilon = \epsilon_{\infty}^{(s)}$ наше приближение становится неприменимым.

ОЖИДАЕМЫЕ ПРОЯВЛЕНИЯ СИЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В ПЛЕНКАХ

Поскольку полученный нами гамильтониан взаимодействия интерфейсных фононов с носителями заряда в тонкой пленке аналогичен гамильтониану в задаче о двумерном поляроне [1], в рассматриваемой структуре следует ожидать проявления стандартных поляронных эффектов. Условия их реализации существенно зависят от величины поляронного радиуса для конкретных пленок и подложек. При выполнении условия (5) поляризация, наведенная в пленке, оказывается сопоставимой по величине с поляризацией в ионной подложке. Приведенные на рис. 1 результаты показывают, что эффективный параметр электрон-фононного взаимодействия в пленке оказывается близким к значениям параметра Фрелиха в материале подложки. Это позволяет последователь-

но изменять величину параметра взаимодействия в пленке, используя подобранный набор ионных подложек.

Наиболее изученными параметрами являются энергия связи полярона E_{pol} и эффективная масса полярона m_{pol} . Для квази-двумерных объектов их значения получены в работе [8]. Для структур, рассмотренных в данной работе, они имеют следующий вид:

$$E_{pol} = \frac{\pi}{2} \alpha_{iph} \hbar \omega_{iph}; \quad \alpha_{iph} < 1, \quad (10)$$

$$E_{pol} \approx 0.4 \alpha_{iph}^2 \hbar \omega_{iph}; \quad \alpha_{iph} > 1,$$

$$m_{pol} = m^* \left(1 + \frac{\pi}{8} \alpha_{iph} \right); \quad \alpha_{iph} < 1, \quad (11)$$

$$m_{pol} = 0.733 m^* \alpha_{iph}^4; \quad \alpha_{iph} > 1. \quad (12)$$

Из сравнения приведенных формул видно, что они дают совпадающие с [8] значения для E_{pol} и m_{pol} при $\alpha_{iph} > 1$ т.е. в области, где приближение слабой связи неприменимо. Это означает, что имеется область промежуточных значений параметра α_{iph} , в которой существующие теоретические модели не работают.

В табл. 1 приведены значения поляронной массы электронов для нескольких полупроводниковых пленок, расположенных на подложках, изготовленных из ионных материалов. Параметры соединений, необходимые для расчетов, приведены в [9, 10]. В зависимости от конкретных значений параметра α_{iph} , использовались формулы (11) или (12). Из табл. 1 видно, что даже в пленке GaAs оказывается возможным реализовать электрон-фононное взаимодействие с параметром α_{iph} , близким к единице. В пленках, для которых в свободном состоянии эффективная масса носителей превышает $0.1m_0$, где m_0 – масса свободного электрона, в рассматриваемой структуре высокая ионность подложки позволяет реализовать переход к режиму сильного электрон-фононного взаимодействия. При расчетах предполагалось, что для материала над поверхностью пленки диэлектрическая проницаемость $\epsilon = 1$. При больших значениях ϵ взаимодействие уменьшается, и реализовать условие сильной связи оказывается сложнее. В табл. 1 в качестве примера также приведены параметры, получающиеся для предельно тонких пленок двухслойного графена (TGLs).

Предложенный в нашей работе подход позволяет, в принципе, экспериментально исследовать основные параметры поляронов в области перехода от слабого к сильному электрон-фононному взаимодействию. Энергия связи полярона может быть определена экспериментально из разности

Таблица 1. Масса полярона m_{pol} , рассчитанная по формулам (11) или (12), для пленок на подложках AgF, AgBr, CdS и ZnSe. Значения масс электрона m материалов пленки взяты из [8]. Все массы приведены в единицах массы свободного электрона m_0

Подложка	m	AgF		AgBr		CdS		ZnSe	
		m_{pol} (11)	m_{pol} (12)	m_{pol} (11)	m_{pol} (12)	m_{pol} (11)	m_{pol} (12)	m_{pol} (11)	m_{pol} (12)
Пленка									
GaN	0.2	–	0.357	–	1.17	0.253	–	0.234	–
CdSe	0.15	–	0.15	–	0.49	0.184	–	0.172	–
GaAs	0.063	0.08	–	0.09	–	0.072	–	0.069	–
TGLs	0.033	0.04	–	0.042	–	0.037	–	0.035	–

термической и оптической энергий ионизации. Поляронная масса должна определять транспортные свойства носителей заряда в полупроводниковых пленках. Из рис. 1 видно, что при использовании в качестве материала подложки соединений типа A^2B^6 можно получить увеличение эффективной массы полярона на десятки процентов. Аналогичное по величине возрастание характерно и для энергии связи полярона из выражений (10). При использовании в качестве подложки соединений A^1B^7 можно ожидать увеличение как энергии связи, так и эффективной массы полярона в несколько раз. При этом, когда масса носителей в свободной пленке $m^* > 0.1m_0$, где m_0 – масса свободного электрона, то можно проследить переход от слабого к сильному электрон-фононному взаимодействию при выполнении условий (1) и (5), которые определяют область применимости предложенной теоретической модели.

На рис. 2 приведены значения поляронного радиуса r_p в пленках, расположенных на различных подложках. Параметром, характеризующим пленку, является значение эффективной массы носителей для свободной пленки. Из рис. 2 видно, что для подложек, изготовленных из соединений A^2B^6 , условие (1) оказывается выполненным для большинства полупроводниковых пленок. В то же время, при использовании в качестве подложек соединений A^1B^7 наше рассмотрение справедливо только для пленок, в которых исходная масса носителей не превышает $0.6m_0$. Отметим также, что полученные значения поляронного радиуса r_p определяют верхнюю границу толщины пленки, в которой следует ожидать возникновения наведенных поляронных эффектов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный теоретический подход применим для описания поляронных эффектов в тонких полупроводниковых пленках, удовлетворяющих условию (5). Особый интерес представляют так называемые пленки с экстремальной двумерностью, толщина которых составляет один или два монослоя. К таким объектам относится, в частности, двухслойный графен, для которого получено увеличение эффективной массы носителей на несколько десятков процентов. Гораздо больший эффект следует ожидать для дихалькогенидов переходных металлов. Однако для этих соединений из-за большой массы носителей в свободной пленке [11, 12] радиус поляронного состояния может оказаться порядка постоянной решетки. Из-за нарушения условия (1) полученные в данной работе результаты нельзя непосредственно применить для описания поляронных эффектов в дихалькогенидах переходных металлов. При этом, по нашему мнению, качественный эффект сильного изменения массы носителей при использовании различных подложек должен сохраниться. Можно предположить, что именно с

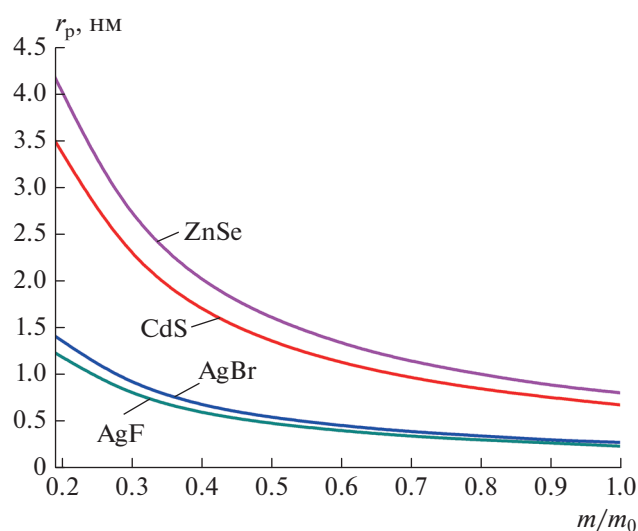


Рис. 2. Зависимость радиуса полярона r_p от массы электрона m/m_0 в пленке.

этим связано значительное расхождение значений определенной экспериментально и теоретически эффективной массы носителей в дихалькогенидах, отмеченное в работах [11, 12]. Для определения количественных значений поляронной массы необходимы дополнительные исследования, что могло бы стать предметом отдельной публикации.

Проведенное рассмотрение показывает, что для широкого класса полупроводниковых пленок, в которых эффективная масса носителей лежит в интервале $0.1m_0 < m^* < 0.6m_0$, при использовании набора подложек с различной степенью ионности возможен переход от слабого к сильному электрон-фононному взаимодействию. Насколько нам известно, модель, предложенная в настоящей работе, является единственным вариантом, позволяющим проследить подобный переход в полупроводниковых пленках одинакового состава. Экспериментальная проверка полученных результатов позволит глубже понять возможные механизмы электрон-фононного взаимодействия в наноструктурах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Devreese J.T.* // arXiv:1012.4576. 2015.
2. *Пекар С.И.* Исследования по электронной теории кристаллов. М.: Гостехиздат, 1951.
3. *Wang K., Reinhard M., Dutta M.A. et al.* // In: Length-scale dependent phonon interactions. N.Y.: Springer Science + Business Media, 2014.
4. *Ridley B.K.* Hybrid phonons in nanostructures. London: Oxford University Press, 2017.
5. *Maslov A.Yu., Proshina O.V.* Phonons in low dimensional structures. Ch. 1. London: IntechOpen Limited, 2018. P. 3.
6. *Mori M., Ando T.* // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. Art. No. 6175.
7. *Маслов А.Ю., Прошина О.В.* // ФТП. 2022. Т. 56. № 1. С. 101.
8. *Hiaoguang Wu, Peeters F.M., Devreese J.T.* // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. Art. No. 3420.
9. *Landolt-Bornstein.* Numerical data and functional relationships in science and technology. Group III. Condensed matter Volume 44. New data and updates for III–V, II–VI and I–VII compounds. Subvolume C. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2010.
10. *McCann E., Fal'ko V.I.* // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. Art. No. 086805.
11. *Pisoni R., Kormányos A., Brooks M. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 121. Art. No. 247701.
12. *Pisoni R., Kormányos A., Brooks M. et al.* // Phys. Rev. B. 2018. V. 97. Art. No. 201407(R).

Polaron effects created by interface phonons in thin film on ionic substrates

A. Yu. Maslov^{a,*}, O. V. Proshina^a

^a *Ioffe Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 194021 Russia*

*e-mail: *maslov.ton@mail.ioffe.ru*

The effective parameter of the electron-phonon interaction in a semiconductor film on ionic substrates has been determined. It is shown that interface phonons “transfer” the polarization of the medium from the substrate to the film. As a result, the polaron binding energy and the effective mass of carriers in the same film on different substrates can vary by tens or even hundreds of percent. Conditions for the realization of strong interaction for various films are found.