

Полярная масса носителей в квантовых ямах из ионного материала

© А.Ю. Маслов, О.В. Прошина

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

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

Поступила в Редакцию 28 мая 2024 г.

В окончательной редакции 19 сентября 2024 г.

Принята к публикации 19 сентября 2024 г.

Построена теория взаимодействия носителей заряда с полярными оптическими фононами для квантовой ямы на основе ионного материала, в которой барьеры изготовлены из неионного соединения. Показано, что свойства барьеров могут существенно изменять параметр электрон-фононного взаимодействия. Это приводит, в частности, к появлению зависимости эффективной массы носителей от ширины квантовой ямы. Кроме того, возникают различия в величине эффективной массы на разных уровнях размерного квантования. Обсуждается применимость предложенной модели для описания транспортных свойств носителей в дихалькогенидах переходных металлов.

Ключевые слова: электрон-фононное взаимодействие, эффективная масса, интерфейсные фононы, полярон, квантовые ямы.

DOI: 10.61011/FTP.2024.07.59182.6747

1. Введение

В последние годы широкое распространение получили гетероструктуры, в которых используются слои из материалов с различной степенью ионности. В таких структурах возникает ряд новых эффектов, обусловленных переносом фононной поляризации между слоями. В наших предыдущих работах [1,2] было показано, что в квантовой яме с барьерами из ионных материалов может возникать сильное взаимодействие заряженных частиц с полярными оптическими фононами. При этом наличие собственных полярных фононов, локализованных в квантовой яме, заметной роли не играет.

С другой стороны, значительный интерес исследователей также привлекают гетероструктуры противоположного типа — когда квантовая яма изготовлена из ионного материала, а барьеры из неионного или слабо ионного. Подобные структуры возникают прежде всего при исследовании предельно узких слоев дихалькогенидов переходных металлов [3]. Было отмечено, в частности, значительное расхождение в значении эффективной массы носителей, полученной из теоретических расчетов и измеренной экспериментально [4,5]. По нашему мнению, такое различие может быть связано с тем, что измерялась „полярная“ масса электрона, которая может значительно отличаться от „затравочной“ эффективной массы [6]. Ранее обсуждались иные механизмы изменения эффективной массы, связанные с симметрией электронных состояний структуры [7], междолинным рассеянием носителей на фононах [8] и особенностями межслоевого взаимодействия носителей [9]. Предложенный в настоящей работе механизм изменения эффективной массы носителей характерен для любых квантовых ям на основе ионных материалов и при

определенных условиях может приводить к значительно большему изменению ее величины.

В настоящей работе теоретически исследованы возможности изменения полярной массы носителей в наноструктурах с квантовыми ямами на основе ионного материала. Показано, что для различных неионных барьеров при одном и том же составе квантовой ямы из ионного материала можно получить значительные изменения в величине полярной массы носителей. Это дает дополнительные возможности для исследования собственных физических свойств тонких слоев ионных материалов. Обсуждается применимость предложенной модели для описания предельно тонких слоев дихалькогенидов переходных металлов.

2. Фактор ослабления взаимодействия

Рассмотрим трехслойную структуру, состоящую из узкой квантовой ямы на основе ионного материала, окруженной двумя барьерами для носителей заряда. Ширина квантовой ямы a предполагается макроскопической и превышает постоянную решетки. Также макроскопическими предполагаются и неионные барьеры. Подобная структура, разумеется, не является ван-дер-ваальсовой [10]. Однако, по нашему мнению, ее свойства полезно учитывать и при исследовании структур Ван-дер-Ваальса.

В такой структуре носители могут взаимодействовать с очень большим (формально бесконечным) количеством полярных фононных мод. Поэтому удобным методом описания электрон-фононного взаимодействия оказывается подход, предложенный для объемных материалов Пекаром [11]. Последующие исследования [12]

показали, что метод, предложенный Пекаром, дает правильную зависимость величины полярных эффектов от параметров материалов в тех случаях, когда взаимодействие заряженных частиц со всеми фононными ветвями имеет одинаковый порядок величины. В рассматриваемой структуре реализуется именно этот случай. Применение более сложных методов дает только незначительное уточнение численных коэффициентов в полученных формулах. Следуя данным работы [11], будем описывать фононное поле макроскопическим потенциалом поляризованной среды. Тогда уравнение Шредингера для заряженной частицы в квантовой яме с учетом поляризации среды может быть записано в виде

$$\left[\widehat{H}_0 + U(\mathbf{r}) + \frac{\varepsilon_{\text{opt}}^{(w)}}{8\pi} \int_{|z| < a/2} d^3r |\nabla U(\mathbf{r})|^2 + \frac{\varepsilon_{\text{opt}}^{(b)}}{8\pi} \int_{|z| > a/2} d^3r |\nabla U(\mathbf{r})|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где \widehat{H}_0 — гамильтониан электрона в квантовой яме без учета поляризации, $\varepsilon_{\text{opt}}^{(i)} = \left[\frac{1}{\varepsilon_{\infty}^{(i)}} - \frac{1}{\varepsilon_0^{(i)}} \right]^{-1}$ — оптическая диэлектрическая проницаемость. Значок i принимает значения „ w “ в квантовой яме и „ b “ в барьерах, a — ширина квантовой ямы, ось z направлена перпендикулярно плоскости ямы. Уравнение (1) очевидным образом можно обобщить на случай двух разных барьеров. В данной работе мы ограничимся случаем, когда влиянием поляризации барьеров на общую поляризацию структуры можно пренебречь, и положим $\varepsilon_{\text{opt}}^{(b)} = 0$. Усредним выражение (1) по неизвестной пока волновой функции электрона $\Psi(\mathbf{r})$ и найдем экстремум потенциала фононного поля. Этот потенциал удовлетворяет стандартному для задачи о поляроне большого радиуса уравнению:

$$\Delta U(\mathbf{r}) = \frac{4\pi e}{\varepsilon_{\text{opt}}^{(w)}} |\Psi(\mathbf{r})|^2; \quad |z| < \frac{a}{2}. \quad (2)$$

Подобный подход применим только в том случае, если радиус полярона превышает постоянную решетки. Мы будем считать, что выполняется более жесткое условие, когда радиус полярона оказывается больше ширины квантовой ямы a , т. е.

$$r_p > a. \quad (3)$$

Тогда в уравнении (1) движение заряженных частиц вдоль оси z определяется собственным потенциалом квантовой ямы, а полную волновую функцию можно представить в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от z , а вторая от двумерного вектора ρ в плоскости ямы:

$$|\Psi(\mathbf{r})| = |\psi(z)|\chi(\rho). \quad (4)$$

Усреднив уравнение (1) по волновой функции (4) с учетом условия (3), получим энергию полярного сдвига ΔE_{pol} в следующем виде:

$$\Delta E_{\text{pol}} = -\frac{e^2 f}{2\varepsilon_{\text{opt}}^{(w)}} \int d^2\rho' \frac{|\chi(\rho')|^2}{|\rho - \rho'|}, \quad (5)$$

где безразмерный множитель f имеет смысл доли электронной плотности поперечного движения, ограниченной шириной квантовой ямы:

$$f = \int_{-a/2}^{a/2} dz |\psi(z)|^2. \quad (6)$$

Из теории двумерного полярона [13] известно, что решение уравнения (5) выражается через универсальную безразмерную функцию, которая неоднократно была рассчитана численно. При этом появление в (5) дополнительного множителя f приводит к появлению эффективного параметра взаимодействия $\alpha_{\text{eff}} = \alpha_0 f$, где α_0 — „затравочный“ безразмерный параметр взаимодействия. Эта величина играет определяющую роль в нашем рассмотрении. Для квантовой ямы с бесконечными барьерами волновая функция поперечного движения локализована внутри ямы, и параметр $f = 1$. При этом выражение (5) описывает стандартную энергию полярного сдвига в двумерной системе [12]. Но для любой ямы конечной глубины этот параметр оказывается меньше единицы. Это означает, что эффективный параметр электрон-фононного взаимодействия уменьшается пропорционально множителю f и, в зависимости от высоты потенциальных барьеров, может принимать любые значения от единицы практически до нуля. Следует отметить, что при рассмотрении усиления электрон-фононного взаимодействия [1,2] при учете конечной глубины ямы приводит к незначительным поправкам, которыми, как правило, можно пренебречь. Основным вклад в усиление взаимодействия дают интерфейсные фононы и их свойства. При этом взаимодействие заряженных частиц с интерфейсными фононами оказывается параметрически велико.

В рассматриваемом нами случае ситуация оказывается противоположной. Взаимодействие с интерфейсными фононами ничем не выделено [14] и практически не влияет на ослабление полного электрон-фононного взаимодействия. А вот „просачивание“ части электронной плотности за пределы квантовой ямы оказывается важным. Именно это и приводит к возможности ослабления взаимодействия. Нам не известны другие механизмы, которые могли бы привести к ослаблению взаимодействия заряженных частиц с полярными оптическими фононами в квантовой яме из ионного материала. В качестве простейшего примера можно рассмотреть прямоугольную потенциальную яму с барьерами высотой u_0 . Эта задача подробно исследована во многих учебниках по квантовой механике, например, в книге [15]. Используя

известные выражения для волновой функции $\psi(z)$, можно получить для множителя f следующее выражение:

$$f = \frac{q}{q+1} \left[1 + \frac{q}{q^2 + k^2} \right], \quad (7)$$

где

$$k = \frac{a\sqrt{2mE_n}}{\hbar}; \quad q = \frac{a\sqrt{2m(u_0 - E_n)}}{\hbar}, \quad (8)$$

E_n — значение n -го уровня энергии электрона в яме.

Для симметричных по волновой функции $\psi(z)$ состояний энергия определяется из решения трансцендентного уравнения

$$\operatorname{tg} k = \frac{q}{k}, \quad (9)$$

а для антисимметричных состояний из уравнения

$$\operatorname{tg} k = -\frac{k}{q}. \quad (10)$$

Интересно отметить, что зависимость ослабляющего множителя f от параметров q и k определяется уравнением (7) и остается одинаковой для обоих типов состояний из уравнений (9) и (10).

Ослабляющий электрон-фононное взаимодействие множитель f из уравнения (7) зависит от массы носителей m^* , ширины квантовой ямы a и ее глубины u_0 . Положение уровня энергии электрона E_n оказывается в данном случае вспомогательным параметром, который в явном виде в выражение (7) не входит.

На рис. 1 представлены зависимости множителя f от глубины ямы u_0 для нескольких характерных значений ширины ямы a .

Как и следовало ожидать, значительное ослабление электрон-фононного взаимодействия реализуется в достаточно узких и не слишком глубоких потенциальных

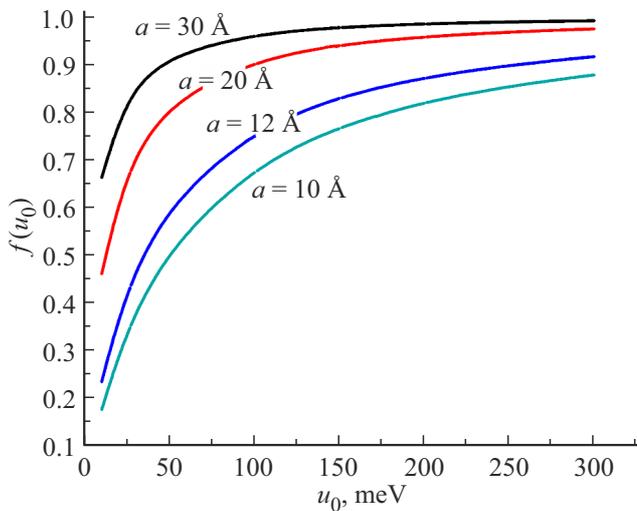


Рис. 1. Зависимости ослабляющего множителя f от глубины ямы u_0 для основного состояния электрона в квантовых ямах различной ширины a .

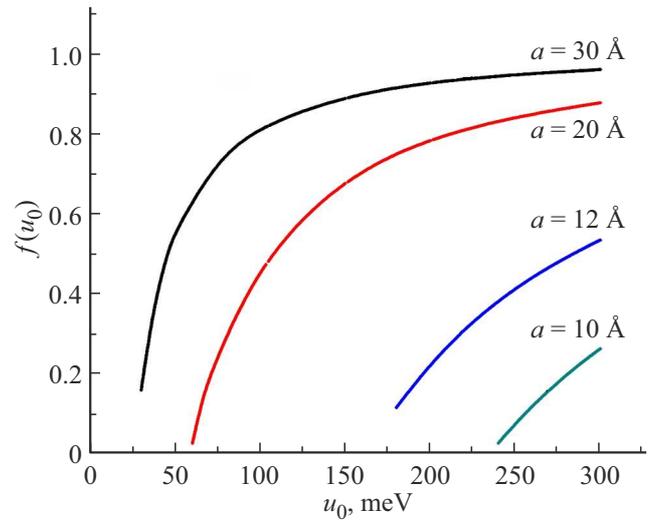


Рис. 2. Зависимости ослабляющего множителя f от глубины ямы u_0 для первого возбужденного состояния электрона в квантовых ямах различной ширины a .

ямах, когда высота барьера меньше ширины запрещенной зоны. Для определенности, в наших расчетах использовалось значение „затравочной“ эффективной массы (взятой в единицах массы свободного электрона m_0) $m^* = 0.4m_0$. „Затравочная“ масса не может быть определена экспериментально и является в некотором смысле подгоночным параметром задачи. Выбор данного значения обусловлен тем, что такое значение массы соответствует соединению MoS_2 [16].

Эффективная масса, близкая к этому значению, характерна и для ряда других соединений дихалькогенидов переходных металлов. На рис. 2 представлены зависимости множителя f для первого возбужденного состояния электрона, когда параметры ямы допускают его наличие, от глубины ямы u_0 .

При этом полученные значения f при тех же параметрах ямы оказываются существенно меньше, чем для основного состояния электрона. Это означает, что в рамках предложенной нами модели, величина электрон-фононного взаимодействия для возбужденных состояний должна быть меньше, чем для основного. Во всех приведенных расчетах условие применимости предложенной модели (3) оказывалось выполненным.

3. Полярная масса носителей

Экспериментально проверить предсказания предложенной модели можно из измерений „полярной“ массы носителей заряда в рассматриваемых структурах. При наличии достаточно сильного электрон-фононного взаимодействия эффективная масса носителей существенно зависит от безразмерного параметра взаимодействия α_0 . Аналитические выражения для такой зависимости в двумерных системах приведены в работе [17]. Мы считаем,

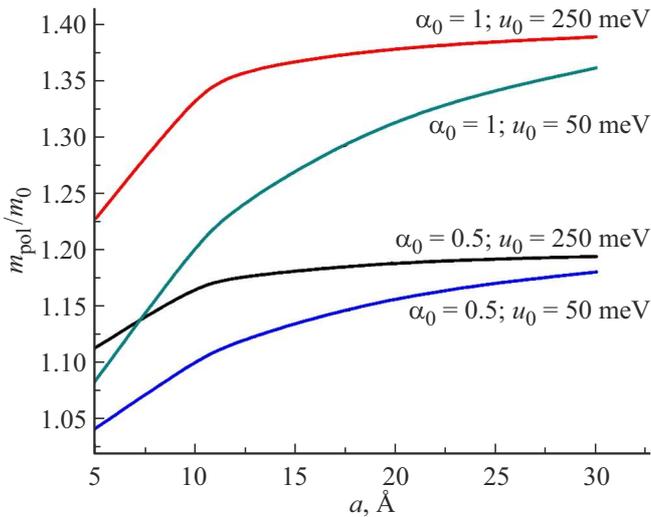


Рис. 3. Зависимости поляронной массы носителей m_{pol}/m_0 от ширины квантовой ямы a для значений собственного параметра взаимодействия $\alpha_0 \leq 1$.

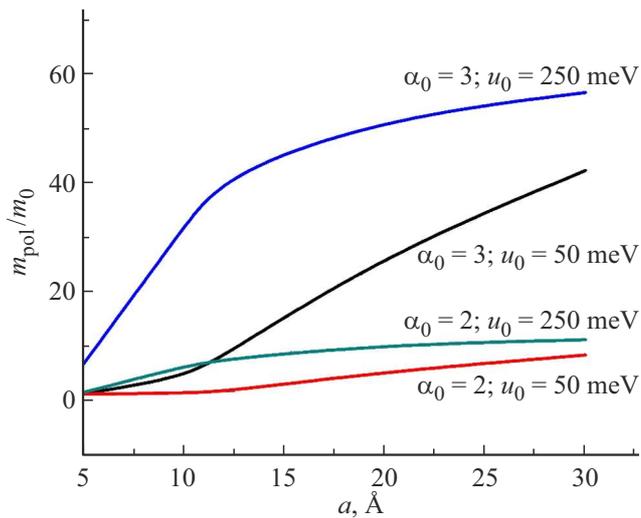


Рис. 4. Зависимости поляронной массы носителей m_{pol}/m_0 от ширины квантовой ямы a для значений собственного параметра взаимодействия $\alpha_0 > 1$.

что в рассматриваемых нами структурах в выражения для поляронной массы носителей заряда должен входить эффективный параметр взаимодействия α_{eff} , равный

$$\alpha_{\text{eff}} = f\alpha_0, \quad (11)$$

который меньше собственного параметра материала квантовой ямы α_0 за счет ослабляющего множителя f из уравнения (7). При этом выражения для поляронной массы носителей из работы [16] принимают следующий вид:

$$m_{\text{pol}} = m^* \left(1 + \frac{\pi}{8} \alpha_{\text{eff}}\right) \text{ при } \alpha_{\text{eff}} < 1, \quad (12)$$

$$m_{\text{pol}} = 0.733m^* \alpha_{\text{eff}}^4 \text{ при } \alpha_{\text{eff}} > 1. \quad (13)$$

На рис. 3 и 4 представлены зависимости поляронной массы носителей m_{pol} от ширины квантовой ямы a для нескольких значений собственного параметра взаимодействия α_0 . „Сшивки“ выражений (12) и (13) происходит при значении $\alpha_{\text{eff}} = 1.18$, что и принималось во внимание при проведении расчетов. Разумеется, использование формулы (12) при $\alpha_{\text{eff}} \gtrsim 1$ не вполне корректно. Но так как в области слабого электрон-фононного взаимодействия поправки к эффективной массе невелики, то это вряд ли приводит к существенным погрешностям в приведенных результатах.

Из рис. 3 видно, что даже при относительно слабом взаимодействии ($\alpha_0 \leq 1$) имеется заметная зависимость поляронной массы m_{pol} от ширины ямы a . Эта зависимость оказывается значительной для соединений, обладающих собственным параметром взаимодействия α_0 , превышающим единицу (рис. 4). Мы считаем, что экспериментальное подтверждение зависимости эффективной массы носителей от ширины квантовой ямы является наиболее реальным способом проверки предложенной модели.

4. Обсуждение результатов

В настоящей работе показано, что в структурах, состоящих из квантовой ямы на основе ионного материала, окруженной не очень высокими барьерами из неионного материала, возникает эффект подавления электрон-фононного взаимодействия внутри ямы. Рассчитана величина такого эффекта подавления в зависимости от высоты барьеров и ширины квантовой ямы. Показано, что данный эффект приводит к появлению зависимости эффективной массы носителей от параметров структуры. Особенно сильная зависимость ожидается для соединений, для которых собственный параметр электрон-фононного взаимодействия превышает единицу.

Из нашего рассмотрения следует, что эффективная масса носителей в возбужденном состоянии должна быть меньше, чем в основном, за счет уменьшения величины ослабляющего множителя f из уравнения (7). Этот эффект определяется общими свойствами волновых функций в яме конечной глубины и не зависит от конкретной формы квантовой ямы. Экспериментальное обнаружение такого эффекта может служить дополнительным способом проверки предложенной модели.

5. Заключение

Наша задача решена в рамках континуальной модели, в которой ширина квантовой ямы рассматривалась как непрерывный параметр. Однако все сделанные в работе приближения позволяют применить полученные результаты и к предельно узким квантовым ямам, состоящим из одного или нескольких монослоев ионного соединения. При этом диэлектрические барьеры следует считать макроскопическими. В частности, следует ожидать, что

в структурах рассмотренного типа при использовании в качестве квантовой ямы слоев дихалькогенидов переходных металлов должна наблюдаться зависимость эффективной массы носителей от числа слоев. Для количественного описания данного эффекта, возможно, потребуется более аккуратное описание формы и параметров квантовой ямы, а также возможных изменений зонной структуры многослойных материалов [18]. Однако, по нашему мнению, полученные в настоящей работе качественные закономерности должны сохраниться. Следует также подчеркнуть, что полученные результаты не могут быть использованы для описания свойств структур Ван-дер-Ваальса. Вместе с тем предсказания о зависимости эффективной массы носителей от ряда параметров окружающих яму барьеров могут быть полезны и для понимания свойств структур, состоящих из монокристаллических слоев различных материалов.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] А.Ю. Маслов, О.В. Прошина. ФТП, **56** (1), 101 (2022).
- [2] А.Ю. Маслов, О.В. Прошина. Изв. РАН. Сер. физ., **87** (6), 896 (2023).
- [3] X. Hu, L. Yan, L. Ding, N. Zheng, D. Li, T. Ji, N. Chen, J. Hu. *Coord. Chem. Rev.*, **499**, 215504 (2024).
- [4] R. Pisoni, A. Kormányos, M. Brooks, Z. Lei, P. Back, M. Eich, H. Overweg, Y. Lee, P. Rickhaus, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Imamoglu, G. Burkard, T. Ihn, K. Ensslin. *Phys. Rev. Lett.*, **121**, 247701 (2018).
- [5] R. Pisoni, A. Kormányos, M. Brooks, Z. Lei, P. Back, M. Eich, H. Overweg, Y. Lee, P. Rickhaus, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Imamoglu, G. Burkard, T. Ihn, K. Ensslin. *Phys. Rev. B*, **97**, 201407(R) (2018).
- [6] A.S. Alexandrov, J.T. Devreese. *Advances in polaron physics* (Berlin-Heidelberg, Springer Verlag, 2010).
- [7] T. Stroucken, J. Neuhaus, S.W. Koch. arXiv:2006.03037 (2020).
- [8] M.M. Glasov, M.A. Semina, C. Robert, B. Urbaszek, T. Amand, X. Marie. *Phys. Rev. B*, **100**, 041301(R) (2019).
- [9] Y. Sun, X. Wang, X.-G. Zhao, Zh. Shi, L. Zhang. *J. Semiconductors*, **39** (7), 072001 (2018).
- [10] A.K. Geim, I.V. Grigorieva. *Nature*, **499**, 419 (2013).
- [11] С.И. Пекар. *Исследования по электронной теории кристаллов* (М., Гос. изд-во техн.-теор. лит., 1951). [S.I. Pekar *Untersuchungen uber die electronentheorie kristalle* (Akademie Verlag, Berlin, 1954)].
- [12] A.Yu. Maslov, O.V. Proshina. In: *Phonons in Low Dimensional Structures*, ed. by V.N. Stavrou (IntechOpen Limited, London, UK, 2018) chap. 1, p. 3.
- [13] Xiaoguang Wu, F.M. Peeters, J.T. Devreese. *Phys. Rev. B*, **31**, 3420 (1985).
- [14] M. Mori, T. Ando. *Phys. Rev. B*, **40**, 6175 (1989).
- [15] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Курс теоретической физики. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. 6-е изд., испр. (М., Физматлит, 2004).
- [16] S. Conti, D. Neilson, F.M. Peeters, A. Perali. *Condens. Matter*, **5** (1), 22 (2020).
- [17] F.M. Peeters, Xiaoguang Wu, J.T. Devreese. *Phys. Rev. B*, **37**, 933 (1988).
- [18] B.R. Borodin, F.A. Benimetskiy, V.Y. Davydov, A.N. Smirnov, I.A. Eliseyev, P.A. Alekseev. *2D Materials*, **9**(1), 015010 (2021).

Редактор А.Н. Смирнов

Polaron mass of carriers in quantum wells based on ionic material

A.Yu. Maslov, O.V. Proshina

loffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The theory of interaction of charge carriers with polar optical phonons has been developed for the quantum well based on an ionic material with nonionic barriers. It is shown that the properties of the barrier material can significantly change the electron-phonon interaction parameter. This leads, in particular, to the appearance of a dependence of the effective carrier mass on the quantum well width. In addition, differences in the value of the effective mass arise for different levels of size quantization. The applicability of the proposed model for describing the transport properties of carriers in transition metal dichalcogenides is discussed.