

# Полярная масса носителей в тонкой пленке на ионных подложках

© 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 30 мая 2022 г.

В окончательной редакции 5 июня 2022 г.

Принята к публикации 4 июля 2022 г.

Предложен новый подход для реализации сильного электрон-фононного взаимодействия в гетероструктурах. Исследована трехслойная структура, состоящая из ионной подложки, полупроводниковой пленки и покрывающего диэлектрика, в роли которого может выступать воздух или вакуум. Вблизи гетерограницы возникают интерфейсные оптические фононы, параметры которых определяются главным образом диэлектрическими свойствами подложки. Показано, что наличие интерфейсных фононов меняет величину эффективной массы носителей в пленке. В зависимости от степени ионности подложки это изменение может варьироваться от нескольких десятков до сотен процентов. Показано, что во многих полупроводниковых пленках возможна реализация условия сильного электрон-фононного взаимодействия. При этом измерение эффективной массы носителей в одинаковых пленках, расположенных на разных подложках, позволит проследить переход от слабого электрон-фононного взаимодействия к сильному.

**Ключевые слова:** электрон-фононное взаимодействие, эффективная масса, интерфейсные фононы, полярон, тонкие пленки.

DOI: 10.21883/FTP.2022.09.53411.9901

## 1. Введение

В последние годы достигнут значительный прогресс в описании фононных свойств наноструктур [1,2]. Проведенные исследования показали, что для описания тепловых, оптических и транспортных свойств таких объектов необходимо учитывать наличие интерфейсных оптических фононов. Особенно большое значение интерфейсные фононы имеют при исследовании электрон-фононного взаимодействия [3]. Именно взаимодействие заряженных частиц с интерфейсными оптическими фононами может привести к образованию квазидвумерных поляронов большого радиуса. При этом величина взаимодействия даже в однотипных структурах может изменяться в несколько раз [4]. Это позволяет в принципе реализовать в наноструктурах переход от слабого электрон-фононного взаимодействия к сильному.

В настоящей работе предложена несколько иная реализация перехода от сильного электрон-фононного взаимодействия к слабому. Подобный переход можно проследить, если тонкую пленку из одного и того же материала последовательно нанести на различные подложки с высокой степенью ионности. Возникающие на границе между пленкой и подложкой интерфейсные фононы будут создавать в пленке поляризацию, определяемую главным образом диэлектрическими свойствами подложки. В результате в одинаковых пленках можно исследовать проявление различных по величине полярных эффектов.

## 2. Полярная масса

В данной работе в качестве проявления электрон-фононного взаимодействия мы будем рассматривать изменение эффективной массы носителей в пленке. Теория такой полярной массы в двумерных и квазидвумерных объектах хорошо известна. В случае слабого или промежуточного взаимодействия полярная масса оказывается равной [5]

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

где  $m^*$  — эффективная масса носителей в пленке, не имеющей контакта с ионными материалами,  $\alpha$  — безразмерный параметр электрон-фононного взаимодействия. Отметим, что величина этого параметра в рассматриваемой системе зависит от диэлектрических свойств подложки. В случае сильного взаимодействия, при  $\alpha \gg 1$ , величина полярной массы оказывается равной [5]

$$m_{pol} = 0.733\alpha^4 m^*. \quad (2)$$

Из сравнения формул (1) и (2) видно, что формальный переход от сильного взаимодействия к слабому происходит при значении параметра  $\alpha \approx 1.19$ . Далее показано, что при использовании различных подложек можно реализовать в одной и той же пленке как сильное, так и слабое электрон-фононное взаимодействие.

### 3. Параметры электрон-фононного взаимодействия

Найдем величину параметра  $\alpha$  в модели диэлектрического континуума [6]. Эта модель достаточно хорошо описывает реальное взаимодействие в пленке, если радиус поляронного состояния  $r_{pol}$  превышает постоянную решетки  $a_0$ , т. е.

$$r_{pol} > a_0, \quad (3)$$

где  $r_{pol} = \sqrt{\hbar/\alpha m^* \omega_{int}}$ , а  $\omega_{int}$  — частота интерфейсных оптических фононов. Для всех рассмотренных далее типов соединений условие (3) выполняется. Рассмотрим трехслойную структуру, состоящую из подложки, пленки и покрытия. Последнее может быть вакуумом, воздухом или неполярным диэлектриком с постоянной диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon$ . Подложка и пленка имеют диэлектрические проницаемости  $\varepsilon_s(\omega)$  и  $\varepsilon_f(\omega)$  соответственно. В дальнейшем мы будем считать, что ионность подложки значительно больше ионности пленки. Именно в такой ситуации роль подложки для возникновения поляронных состояний оказывается определяющей. Будем считать, что и для подложки, и для пленки частотные зависимости  $\varepsilon_i(\omega)$  имеют вид

$$\varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_{\infty,i} \frac{\omega^2 - \omega_{LO,i}^2}{\omega^2 - \omega_{TO,i}^2}. \quad (4)$$

Найдем спектр интерфейсных фононов в рассматриваемой структуре, следуя [4,6]. Он определяется решением следующего уравнения:

$$e^{-qa} \frac{\varepsilon_f(\omega) - \varepsilon_s(\omega)}{\varepsilon_f(\omega) + \varepsilon_s(\omega)} = e^{qa} \frac{\varepsilon_f(\omega) + \varepsilon}{\varepsilon_f(\omega) - \varepsilon}, \quad (5)$$

где  $a$  — ширина пленки,  $q$  — величина двумерного вектора фонона в плоскости пленки. Решение уравнения (5) содержит два типа интерфейсных фононов. Для первого из них имеются две волны, максимум интенсивности которых лежит на границе между пленкой и подложкой. Для второго типа интерфейсных фононов есть одна волна с максимумом интенсивности между пленкой и поверхностным слоем.

Как показано далее, наибольшее электрон-фононное взаимодействие реализуется для одной из волн первого типа, которая по своим параметрам близка к LO-фононам в подложке. Следует отметить, что параметры этого возбуждения практически не изменяются в пределах малых значений  $q$ , т. е. при

$$qa \ll 1. \quad (6)$$

Характерные значения  $q$  оказываются порядка обратного радиуса поляронного состояния

$$qr_{pol} \approx 1. \quad (7)$$

Поэтому условие (6) накладывает ограничения сверху на возможную толщину пленки. В рассмотренных далее

структурах поляронный радиус оказывается в пределах от единиц до десятков нанометров. Наибольшее электрон-фононное взаимодействие реализуется тогда, когда толщина пленки не превышает величину поляронного радиуса. Для пленок большей толщины влияние интерфейсных оптических фононов на изменение эффективной массы носителей оказывается существенно меньшим. При выполнении неравенства (6) уравнение (5) для спектра значительно упрощается и возникает условие

$$\varepsilon_s(\omega) = -\varepsilon, \quad (8)$$

которое формально совпадает с уравнением для спектра интерфейсных фононов на одиночной гетерогранице между ионной подложкой и неполярным диэлектриком. Поле этих фононов проникает в пленку и взаимодействует с заряженными частицами, локализованными в пленке. Частоты интерфейсных фононов данного типа оказываются равными

$$\omega_{int}^2 = \frac{\varepsilon_{s,\infty} \omega_{LO,s}^2 - \omega_{TO}^2 \varepsilon}{\varepsilon_{s,\infty} - \varepsilon}. \quad (9)$$

Выражение (9) описывает реальные интерфейсные фононы, только если  $\varepsilon_{s,\infty} > \varepsilon$ . При этом их частота лежит в интервале между LO- и TO-фононами подложки, т. е.

$$\omega_{TO,s} < \omega_{int} < \omega_{LO,s}. \quad (10)$$

Учет зависимости частот интерфейсных фононов от волнового вектора, возникающий при использовании точного уравнения (5), приводит к появлению малых поправок, как правило, не нарушающих условие (10).

Кроме решения для интерфейсных фононов (9), в системе также сохраняются собственные LO- и TO-моды тонкой пленки, которые при конечных значениях двумерного вектора  $\mathbf{q}$  переходят в две другие интерфейсные моды в соответствии с уравнением (5). Однако для пленок из слабоионного соединения взаимодействие заряженных частиц с ними оказывается значительно меньше. Для интерфейсной моды гамильтониан взаимодействия с заряженными частицами можно представить в стандартном виде [3]:

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{q}} \left( \frac{2\lambda\omega_{int}}{L^2} \right)^{1/2} \frac{\exp(i\mathbf{q}\rho)}{\sqrt{2q}} f_{int}(q) [a_{int}(\mathbf{q}) + a_{int}^+(\mathbf{q})], \quad (11)$$

где  $L^2$  — нормировочная площадь пленки,  $a_{int}(\mathbf{q})$  и  $a_{int}^+(\mathbf{q})$  — операторы уничтожения и рождения для исследуемой моды. При выполнении условия (6) множитель  $f_{int}(0)$  имеет достаточно простой аналитический вид. Он отличается от аналогичного множителя в квантовой яме с симметричными ионными барьерами только тем, что вместо обычного выражения для оптической диэлектрической проницаемости

$$1/\varepsilon_{opt} = 1/\varepsilon_{\infty} - 1/\varepsilon_0$$

Значения параметра электрон-фононного взаимодействия  $\alpha_{\text{int}}$  и полярной массы  $m_{\text{pol}}$ , рассчитанной по формулам (1) или (2), для различных пленок на подложках AgBr, AgCl и CuBr

Подложка	AgBr				AgCl				CuBr			
	$\alpha_{\text{int}}$	$m$	$m_{\text{pol}}$ (1)	$m_{\text{pol}}$ (2)	$\alpha_{\text{int}}$	$m$	$m_{\text{pol}}$ (1)	$m_{\text{pol}}$ (2)	$\alpha_{\text{int}}$	$m$	$m_{\text{pol}}$ (1)	$m_{\text{pol}}$ (2)
TGLs	0.68	0.033	0.04	—	0.65	0.033	0.04	—	0.56	0.033	0.04	—
GaAs	0.94	0.063	0.09	—	0.9	0.063	0.09	—	0.78	0.063	0.08	—
CdSe	1.46	0.15	—	0.49	1.38	0.15	—	0.4	1.2	0.15	—	0.23
GaN	1.68	0.2	—	1.17	1.6	0.2	—	0.95	1.38	0.2	—	0.53

Примечание. Значения масс электрона  $m$  материалов пленки взяты из [7]. Все массы приведены в единицах массы свободного электрона  $m_0$ .

в него входит модифицированная величина  $\epsilon_{\text{opt}}^{\text{int}}$ , равная

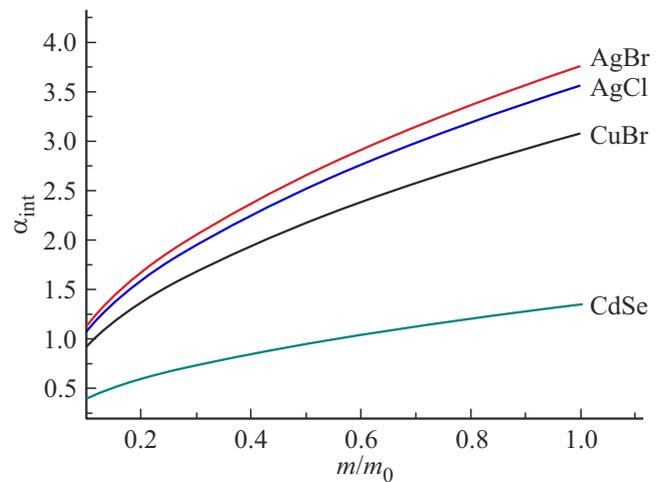
$$\epsilon_{\text{opt}}^{\text{int}} = \epsilon_{\text{opt}} \frac{\epsilon_{0s} \epsilon_{\infty s}}{2(\epsilon_{0s} - \epsilon)(\epsilon_{\infty s} - \epsilon)}, \quad (12)$$

которая зависит от диэлектрической проницаемости материала, находящегося над пленкой. Именно величина  $\epsilon_{\text{opt}}^{\text{int}}$  из (12) входит во все параметры, описывающие электрон-фононное взаимодействие в нашей системе, в частности, безразмерный параметр взаимодействия  $\alpha_{\text{int}}$ , который является аналогом постоянной Фрелиха, известной для объемных материалов. В соответствии с (11), (12) выражение для  $\alpha_{\text{int}}$  можно записать в виде

$$\alpha_{\text{int}} = \frac{e^2 \sqrt{m\omega_{\text{int}}}}{2\omega_{\text{int}} \epsilon_{\text{opt}}^{\text{int}} \hbar^{3/2}}. \quad (13)$$

Именно эта величина  $\alpha_{\text{int}}$  определяет полярную массу носителей в уравнениях (1) и (2). В таблице приведены значения эффективного параметра взаимодействия  $\alpha_{\text{int}}$  и полярной массы электронов для нескольких полупроводниковых пленок, расположенных на подложках из ионных соединений. Необходимые для расчетов параметры приведены в [7,8]. В зависимости от конкретных значений параметра  $\alpha_{\text{int}}$ , для расчета использовались формулы (1) или (2). Из таблицы видно, что даже в пленке GaAs можно в принципе реализовать электрон-фононное взаимодействие с параметром  $\alpha_{\text{int}}$ , близким к единице. В пленках, для которых в свободном состоянии эффективная масса носителей превышает  $0.1m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона, 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 взаимодействие уменьшается, и реализовать условие сильной связи оказывается сложнее. В таблице в качестве примера приведены также параметры для предельно тонких пленок из двухслойного графена (TGLs).

Поскольку в исследованной системе диэлектрические свойства пленки оказываются несущественными, наш подход в принципе применим как для описания графена, так и для других пленок с экстремальной двумерностью.



Зависимость параметра электрон-фононного взаимодействия от массы электрона  $m/m_0$  в пленке.

В двухслойном графене возможно увеличение массы носителей на несколько десятков процентов. В то же время для дихалькогенидов переходных металлов на ионных подложках следует ожидать кратного увеличения эффективной массы и реализацию режима сильного взаимодействия. Однако при этом из-за большой массы носителей в свободной пленке [9,10] при высокой ионности подложки может быть нарушено условие (3). Поэтому количественные значения полярной массы, рассчитанные по формулам (1) и (2), оказываются не вполне корректными. При этом качественный эффект сильного изменения массы носителей при использовании различных подложек должен сохраниться. Возможно, именно с ним связано значительное расхождение значений расчетной и определенной экспериментально эффективной массы носителей в дихалькогенидах, отмеченное в работах [9,10]. Но для получения количественных значений полярной массы требуются дополнительные исследования, что может стать предметом отдельной публикации.

Величина полярных эффектов существенно зависит от массы носителей в свободной пленке. Эта зависимость представлена на рисунке, из которого видно, что сильное взаимодействие возникает для большинства

пленок из полупроводниковых материалов при использовании в качестве материала подложки соединений типа  $A^I B^{VII}$ . При использовании подложек на основе соединений  $A^{II} B^{VI}$  можно получить заметное увеличение массы носителей в пленке, но достижение режима сильного взаимодействия вряд ли возможно.

Результаты, полученные в настоящей работе, относятся к подложкам из материалов, обладающих кубической симметрией. При использовании в качестве подложки менее симметричных материалов, рассмотренное взаимодействие, как правило, оказывается меньше. Однако этот вопрос требует отдельного детального исследования. Так, в симметричных квантовых ямах с барьерами из одноосных материалов, в зависимости от степени анизотропии их диэлектрических параметров, возможны как незначительное уменьшение, так и практически полное подавление взаимодействия заряженных частиц с интерфейсными оптическими фононами [11].

#### 4. Заключение

Таким образом, в тонких пленках из полупроводниковых материалов, расположенных на ионных подложках, следует ожидать значительного увеличения эффективной массы носителей заряда. Величина эффекта зависит от степени ионности подложки и значения эффективной массы носителей в свободной пленке. На подложках, изготовленных из соединений  $A^{II} B^{VI}$ , можно ожидать изменения эффективной массы на несколько десятков процентов. При использовании в качестве подложки соединений  $A^I B^{VII}$  эффективная масса носителей в пленке может увеличиться в несколько раз. При этом возможна реализация режима сильного электрон-фононного взаимодействия. Рассмотренные эффекты необходимо учитывать при изучении процессов релаксации горячих носителей, исследовании различных оптических и транспортных свойств подобных структур. Экспериментальная проверка полученных результатов позволит оценить адекватность теоретических моделей, описывающих электрон-фононное взаимодействие.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] Z. Wang, K. Reinhardt, M. Dutta, M.A. Stroschio. In: *Length-Scale Dependent Phonon Interactions*, eds by S.L. Shindé, G.P. Srivastava (Springer Science+Business Media, N.Y., USA, 2014) Chap. 2.
- [2] B.K. Ridley. *Hybrid Phonons in Nanostructures* (Oxford University Press, UK, 2017).
- [3] 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.
- [4] А.Ю. Маслов, О.В. Прошина. ФТП, **56** (1), 101 (2022).
- [5] Wu. Hiaoguang, F.M. Peeters, J.T. Devreese. Phys. Rev. B, **31**, 3420 (1985).
- [6] M. Mori, T. Ando. Phys. Rev. B, **40**, 6175 (1989).
- [7] Landolt-Bornstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Group III: Condensed Matter Vol. 44. New data and updates for III–V, II–VI and I–VII compounds. Subvolume C, ed. U. Rossler (Springer Verlag Berlin–Heidelberg, 2010).
- [8] E. McCann, V.I. Fal'ko. Phys. Rev. Lett., **96**, 086805 (2006).
- [9] 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).
- [10] 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).
- [11] А.Ю. Маслов, О.В. Прошина. ФТП, **53** (12), 1641 (2019).

Редактор Г.А. Оганесян

#### Polaron mass of carriers in a thin film on ionic substrates

A.Yu. Maslov, O.V. Proshina

loffe Institute,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** New approach for realizing the strong electron-phonon interaction in heterostructures is proposed. The three-layer structure has been investigated. This structure consists of an ionic substrate, a semiconductor film, and a covering dielectric, which can be air or vacuum. Near the hetero-interface, interface optical phonons arise. Their parameters are determined mainly by the dielectric properties of the substrate. It is shown that the presence of interface phonons changes the effective mass of carriers in the film. Depending on the degree of ionicity of the substrate, this change can vary from several tens to hundreds of percent. It is shown that in many semiconductor films it is possible to realize the condition of strong electron-phonon interaction. Thus, the measurement of the effective mass of carriers in identical films located on different substrates will make it possible to trace the transition from weak to strong electron-phonon interaction.