EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 29. KÖIDE
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA. 1980, NR. 4

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 29
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1980, № 4

УДК 539.216

А. ШЕРМАН

ПОЛЯРОН В ТОНКОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПЛЕНКЕ

(Представил В. Хижняков)

Исследования элементарных возбуждений поверхностей кристалла и тонких кристаллических пленок приобрели в последнее время актуальность в связи с развитием техники. В первую очередь это относится к фононным и электронным элементарным возбуждениям (см. [1]). В [2] было показано, что в полупроводниковой пленке, диэлектрическая проницаемость которой значительно превышает единицу, происходит существенное усиление кулоновского взаимодействия по сравнению с бесконечным кристаллом, когда толщина пленки становится порядка или меньше расстояния между зарядами. Этот эффект приводит к усилению взаимодействия электрона проводимости с поляризацией, вызванной оптическими колебаниями пленки полярного кристалла, толщина которой приближается к радиусу полярона. При этом могут возрастать энергия связи полярона и его масса, что будет зарегистрировано оптическими измерениями или измерениями подвижности носителей. Однако отнюдь не очевидно, произойдет ли в действительности указанное возрастание, поскольку в случае приближения толщины пленки к радиусу полярона происходит его деформация, что энергетически невыгодно. Данная работа посвящена исследованию этого вопроса.

Используется модель полярона, предложенная С. И. Пекаром [3]. Эта модель пригодна в случае сильной связи и большого характерного размера полярона L:

$$|E_b| \gg \hbar\omega_0, \qquad L \gg a. \tag{1}$$

Здесь $E_b < 0$ — энергия покоящегося полярона, отсчитанная от дна зоны проводимости, ω_0 — частота LO-фонона, a — постоянная решетки. Благодаря условиям (1) пленку можно рассматривать как диэлектрический континуум и использовать адиабатическое приближение. Гамильтониан электрон-фононной системы пленки в этом случае имеет вид

$$H=\frac{p^2}{2m}+U(z)-e\sum_i \int d^3r' P_i(\vec{r}')\frac{\partial}{\partial r'_i}V(\vec{r},\vec{r}')+\frac{2\pi}{\varepsilon_0-\varepsilon}\int d^3r' P^2(\vec{r}')+$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{i,j}\int\int d^3r' d^3r'' P_i(\vec{r}')P_j(\vec{r}'')\frac{\partial^2}{\partial r'_i\,\partial r''_j}V(\vec{r}',\vec{r}''). \tag{2}$$

Здесь $\vec{p}$ — импульс электрона, m — его эффективная масса, P_i — компоненты вектора поляризации, которые обусловлены лишь смещениями ионов (в отличие от [3] здесь в $\vec{P}$ не включается вызванная этими смещениями электронная поляризация), ε_0 и ε — статическая и высокочастотная диэлектрические проницаемости соответственно, $V(\vec{r}, \vec{r}')$ — потенциал, создающийся в пленке с диэлектрической проницаемостью ε в точке $\vec{r}$ единичным точечным зарядом, находящимся в точке $\vec{r}'$ (для простоты считаем, что пленка помещена в вакуум). Вид этого потенциала можно найти, используя стандартную методику [4]:

$$V(\vec{r}, \vec{r}') = (2\pi\varepsilon)^{-1} \int d^2k f(k, z, z') \exp[i\vec{k}(\vec{\varrho}' - \vec{\varrho})]/k,$$

$$f(k, z, z') = \exp[-k|z-z'|] - \{2\,\mathrm{ch}[k(z-z')] + \varkappa \exp[k(z'+z+2d)] + \\ + \varkappa \exp[-k(z+z')]\}/[1 - \varkappa^2 \exp(2kd)], \quad (3)$$

где $\vec{k}$ — двумерный вектор, параллельный поверхностям пленки, $\vec{\varrho}$ и $\vec{\varrho}'$ также двумерные векторы, возникающие при проектировании векторов $\vec{r}$ и $\vec{r}'$ на указанные поверхности. Система координат выбрана таким образом, что эти поверхности перпендикулярны оси $\vec{z}$ и пересекают ее в точках 0 и $-d$. $\varkappa = (\varepsilon + 1)/(\varepsilon - 1)$. При $|\vec{\varrho}' - \vec{\varrho}| \gg d$ основной вклад в интеграл дают малые k: $kd \ll 1$, и формула (3) упрощается (см. также [2]):

$$V(\vec{r}, \vec{r}') \approx (\pi\varepsilon d)^{-1} \int d^2k \exp[i\vec{k}(\vec{\varrho}' - \vec{\varrho})]/[k(k+2/(\varepsilon d))]. \quad (4)$$

Предполагается, что $\varepsilon \gg 1$. Дно зоны проводимости, как правило, лежит по энергии на несколько электрон-вольт ниже уровня вакуума [5]. Эта величина значительно превышает расстояние между размерно-квантованными уровнями энергии $\hbar^2\pi^2/(2md^2)$ для рассматриваемых здесь пленок. Аппроксимируем существующие вблизи поверхностей пленки энергетические барьеры ступенчатыми функциями, причем в силу последнего обстоятельства будем считать, что образующаяся потенциальная яма имеет бесконечно высокие стенки: $U(z) = 0$ при $-d < z < 0$; $U(z) = \infty$ при $z \leqslant -d$ и $z \geqslant 0$. Такое приближение оправдано для двумерных подзон, образующихся из нескольких нижайших размерно-квантованных уровней.

Третье слагаемое в правой части (2) описывает взаимодействие поляризации с электроном, четвертое — упругую энергию, связанную с поляризацией пленки, плюс слагаемое, обусловленное полем Лоренца [6]. Наконец, пятый член в правой части формулы (2) есть кулоновская энергия поляризации минус отмеченное выше слагаемое, вызванное полем Лоренца. Взаимодействие электрона с вызванной им безынерционной поляризацией смещений электронных оболочек ионов включено, как и в [3], в определение эффективной массы электрона. Для рассматриваемых здесь макроскопически толстых пленок ($d \gg a$) последняя величина слабо зависит от толщины пленки, поскольку радиус безынерционной поляризации микроскопически мал [7].

Гамильтониан (2) можно привести к виду, использованному в [3], если устремить d к бесконечности в (3) и учесть, что для бесконечной однородной изотропной среды

$$\vec{D}(\vec{r}) - \vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}'(\vec{r}) - \vec{E}(\vec{r}) =$$

$$=-\int d^3r'[3\vec{R}\cdot\vec{P}(\vec{r}')\vec{R}-\vec{P}(\vec{r}')R^2]/R^5=4\pi\vec{P}(\vec{r})$$

и $\vec{P}(\vec{r})=\varepsilon\vec{P}'(\vec{r})$. Здесь $\vec{D}(\vec{r})$ — вектор электрической индукции, $\vec{E}'(\vec{r})$ — напряженность поля свободных зарядов, $\vec{R}=\vec{r}-\vec{r}'$, $\vec{P}'(\vec{r})$ — поляризация, созданная смещением ионов и связанной с этим смещением деформацией их электронных оболочек. Во вторично-квантованном виде гамильтониан (2) совпадает с полученными ранее другими методами [7, 8].

Как и в [3], используем для нахождения энергии покоящегося полярона прямой вариационный метод. Пленка предполагается достаточно тонкой, так что характерная энергия размерно-квантованных уровней $\hbar^2\pi^2/(2md^2)$ значительно превышает величину кулоновского взаимодействия между электроном и поляризацией (см. ниже). Поэтому поперечное относительно пленки движение электрона не меняется при учете взаимодействия с фононами и его волновую функцию следует искать в виде $\psi(\vec{r})=\psi(\vec{\rho})\psi(z)$, где $\psi(z)$ — одна из волновых функций частицы, локализованной в прямоугольной яме с бесконечно высокими стенками. Функционал, соответствующий гамильтониану (2), имеет вид

$$F=-\hbar^2(2m)^{-1}\int d^2\rho\,\psi^*(\vec{\rho})\Delta_{\vec{\rho}}\psi(\vec{\rho})-\int d^3r\,\vec{P}(\vec{r})\cdot\vec{E}(\vec{r})+$$

$$+2\pi(\varepsilon_0-\varepsilon)^{-1}\int d^3r\,P^2(\vec{r})+$$

$$+(1/2)\sum_{i,j}\iint d^3r'd^3r''P_i(\vec{r}')P_j(\vec{r}'')\frac{\partial^2}{\partial r'_i\,\partial r''_j}V(\vec{r}',\vec{r}''),\tag{5}$$

$$\vec{E}(\vec{r})=e\,\mathrm{grad}\int d^3r'|\psi(\vec{r}')|^2V(\vec{r},\vec{r}'),\tag{6}$$

где $\Delta_{\vec{\rho}}=\partial^2/\partial x^2+\partial^2/\partial y^2$, энергия отсчитывается от дна соответствующей подзоны. Варьируя F вначале по $\vec{P}(\vec{r})$, находим необходимое условие минимума

$$-E_i(\vec{r})+\frac{\partial}{\partial r_i}\sum_j\int d^3r'P_j(\vec{r}')\frac{\partial}{\partial r'_j}V(\vec{r},\vec{r}')+4\pi(\varepsilon_0-\varepsilon)^{-1}P_i(\vec{r})=0,\tag{7}$$

при выполнении которого (5) принимает вид

$$F=-\hbar^2(2m)^{-1}\int d^2\rho\,\psi^*(\vec{\rho})\Delta_{\vec{\rho}}\psi(\vec{\rho})-(1/2)\int d^3r\,\vec{P}(\vec{r})\cdot\vec{E}(\vec{r}).\tag{8}$$

Для дальнейших вычислений необходимо, исходя из (7), явно выразить $\vec{P}(\vec{r})$ через $\psi(\vec{r})$. Для этого подействуем на (7) оператором $\sum_i\partial/\partial r_i$. Учитывая, что $\Delta_{\vec{r}}V(\vec{r},\vec{r}')=-4\pi\delta(\vec{r}-\vec{r}')/\varepsilon$, находим

$$4\pi e|\psi(\vec{r})|^2/\varepsilon_0+\mathrm{div}\,\vec{E}_0(\vec{r})=0,\tag{9}$$

где $\vec{E}_0(\vec{r})=4\pi\vec{P}(\vec{r})/(\varepsilon_0-\varepsilon)$ — вектор электрического поля в пленке. Уравнения и граничные условия, которым подчиняются полное электрическое поле $\vec{E}_0(\vec{r})$ и поле электрона $\vec{E}(\vec{r})$ (6), совпадают с точностью до замены ε_0 на ε. Таким образом, решение уравнения (9) может быть записано сразу:

$$\vec{P}(\vec{r}) = (4\pi)^{-1}e(\varepsilon_0-\varepsilon)\,\mathrm{grad}\int d^3r'\,|\psi(\vec{r}')|^2 V_0(\vec{r},\vec{r}'), \tag{10}$$

где $V_0(\vec{r},\vec{r}')$ определяется формулами (3) и (4) с заменой ε на ε_0. В том, что решение (10) удовлетворяет уравнению (7), легко убедиться, используя граничные условия и теорему Гаусса—Остроградского.

В качестве аппроксимирующей функции выберем

$$\psi(\varrho) = \alpha\sqrt{2/\pi}\exp(-\alpha\varrho), \qquad \int d^2\varrho\,\psi^2(\varrho) = 1. \tag{11}$$

Предположим для простоты, что $2\alpha^{-1} \gg d$. В этом случае для $V(\vec{r},\vec{r}')$ и $V_0(\vec{r},\vec{r}')$ можно использовать приближенную формулу (4). Отметим, что в таком приближении энергии связи поляронов, образованных различными подзонами, одинаковы, поскольку $V(\vec{r},\vec{r}')$ в формуле (4) не зависит от z и z'. Подставляя (11) в выражения (6) и (10), находим из (8)

$$\begin{gathered} F = (2md^2y^2)^{-1} + [C(y) - C_0(y)]e^2/d, \\ C(y) = \varepsilon^{-1}(y/\varepsilon)(y^2/\varepsilon^2+1)^{-3}\{\pi[3(\varepsilon^2/y^2-2) - y^2/\varepsilon^2]/16 + \\ + [1+y^2/(4\varepsilon^2)]y/\varepsilon + [3/4+\ln(y/\varepsilon)]\varepsilon/y\}, \end{gathered} \tag{12}$$

где $y = \alpha^{-1}/d$, $C_0(y)$ выражается той же формулой, что и $C(y)$ с заменой ε на ε_0.

Выберем для примера следующие значения параметров: $\varepsilon = 3$, $\varepsilon_0 = 15$, $m = 0{,}1m_e$ (m_e — масса свободного электрона), $d = 20$ Å. Минимизируя F, находим: $F_{\min} = E_b = -0{,}237e^2/(\epsilon d) \approx -50$ *мэВ*, $y_{\min} = 1{,}6$ $(2\alpha_{\min}^{-1}/d = 3{,}2 \gg 1)$, $\epsilon = \varepsilon_0\varepsilon/(\varepsilon_0-\varepsilon)$. Это значение более чем в четыре раза превышает энергию связи полярона в бесконечном кристалле в модели сильной связи $E_P = -0{,}0544me^4/(\hbar\epsilon)^2$ [3]. Полученная в этой последней модели поляронная яма, однако, слишком мелка. Сравним поэтому E_b с результатом, полученным в модели промежуточной и слабой связи $E_F = -e^2\sqrt{2m\omega_0/\hbar}/(2\epsilon)$ [9]. При $\omega_0 = 1{,}5\cdot10^{13}c^{-1}$ найденное значение E_b примерно в полтора раза превышает E_F. Заметим, что для принятой величины ω_0 выполняется первое условие (1), а также, что для приведенных значений параметров энергия кулоновского взаимодействия электрона и поляризации $\int d^3r\vec{P}\cdot\vec{E} \approx e^2/(\epsilon d)$ значительно меньше расстояния между размерно-квантованными уровнями. Поэтому поперечное относительно пленки движение электрона, как и предполагалось, не изменяется при учете взаимодействия с поляризацией.

Таким образом, в тонкой пленке полярного диэлектрика происходит возрастание энергии связи (а следовательно, и массы) полярона. В связи с этим отметим работу [10], результатом которой являлось утверждение, что энергия связи полярона (вычислявшаяся в модели слабой связи) монотонно убывает с уменьшением толщины пленки. По-видимому, этот результат обусловлен тем, что в [10] не принималось во внимание взаимодействие с поверхностными фононами, которое становится существенным именно для тонких пленок. Использованная малая толщина пленки ($d = 20$ Å) «навязана» условием $2\alpha^{-1} \gg d$, позволившим значительно упростить математические выражения. По-видимому, отмеченный эффект может наблюдаться и в слоях, на порядок более толстых.

Автор признателен В. В. Хижнякову за обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Брыксин В. В., Мирлин Д. Н., Фирсов Ю. А., Успехи физ. наук, **113**, вып. 1, 29—67 (1974).
2. Келдыш Л. В., Письма в ЖЭТФ, **29**, вып. 11, 716—719 (1979).
3. Пекар С. И., Исследования по электронной теории кристалов, М.—Л., ГИТТЛ, 1951; Успехи физ. наук, **50**, вып. 2, 197—252 (1953).
4. Смайт В., Электростатика и электродинамика, М., ИИЛ, 1954.
5. Ривьере Х., В кн.: Поверхностные свойства твердых тел, М., «Мир», 1972, с. 193—316.
6. Тамм И. Е., Основы теории электричества, М., «Наука», 1976.
7. Licari, J. J., Evrard, R., Phys. Rev., **B15**, № 4, 2254—2264 (1977).
8. Брыксин В. В., Фирсов Ю. А., Физ. твердого тела, **13**, вып. 2, 496—503 (1971); Lucas, A. A., Kartheuser, E., Badro, R. G., Phys. Rev., **B2**, № 7, 2488—2499 (1970).
9. Lee, T. D., Low, F. E., Pines, D., Phys. Rev., **90**, № 2, 297—302 (1953).
10. Licari, J. J., Solid State Commun., **29**, № 8, 625—628 (1979).

Институт физики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
9/VI 1980

A. ŠERMAN

POLARON ÕHUKESES DIELEKTRILISES KILES

On arvutatud tugevasti seotud kontinuaalpolaroni omaenergia suure kõrgsagedusliku dielektrilise läbitavusega kiles, mille paksus on polaroni raadiuse suurusjärgus. On näidatud, et see omaenergia võib olla tunduvalt suurem polaroni seoseenergiast lõpmatus kristallis.

A. ŠERMAN

THE POLARON IN A THIN DIELECTRIC FILM

A Hamiltonian is obtained and a self-energy of a strong-coupling continual polaron is investigated for a thin dielectric film placed in vacuum. As it was shown by L. V. Keldysh [2], the Coulomb interaction increases in the film surrounded by the environment with a smaller dielectric constant in case the thickness of the film tends to a distance between charges. This effect may lead to the growth of the polaron self-energy and mass in a film with a large high-frequency dielectric constant as its thickness becomes of the order of the polaron radius. This growth is prevented by a simultaneously arising polaron deformation. The calculations of the self-energy are carried out by the straight variational method. It is shown that its value may really considerably exceed the coupling energy of the polaron in an infinite crystal.