

ЭКРАНИРОВАННОЕ КУЛОНОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И ПОЛЯРОННЫЙ ЭКСИТОН В МДП СТРУКТУРЕ

С. И. Берил, Е. П. Покатилов, А. С. Зотов, М. Фарах, Л. К. Фай

Молдавский государственный университет, Кишинев, Молдова
(Получена 5.03.1992. Принята к печати 21.05.1992)

Рассчитаны энергия основного состояния и энергия связи полярного экситона, образованного неосновными носителями (дырками), связанными с электронами в приповерхностном слое структуры металл—диэлектрик—полупроводник. Учтена экранировка кулоновского взаимодействия: а) газом свободных носителей, б) свободными носителями в инверсионном канале и поляронный эффект. Показано, что учет эффектов экранировки кулоновского взаимодействия заметно понижает величину энергии связи экситона с поверхностью, что приводит к образованию для экситонов у поверхности «мертвой зоны».

Выведен гамильтониан электрон-фононного взаимодействия с поверхностными и объемными фононами с учетом разных вариантов экранировки.

Введение. В экспериментальных работах [1–3] сообщалось об обнаружении особенностей в спектрах люминесценции кремниевых структур металл—окисел—полупроводник (МОП), которые интерпретировались как проявление электронно-дырочных рекомбинационных процессов на контакте кремния с диэлектриком SiO₂.

Теория электронно-дырочных состояний на контакте полупроводника с диэлектриком состояла в простой модели учета влияния экранировки свободными носителями заряда кулоновского взаимодействия и потенциальной энергии сил изображения. Затем она была развита в работах [4, 5] для частного случая, когда экранирующие заряды образуют тонкий инверсионный слой. Однако экспериментальные условия таковы, что возникает существенная необходимость несколько расширить постановку задачи: во-первых, рассмотреть вариант, когда электроны образуют на контакте в полупроводнике слой конечной толщины; во-вторых, учесть то существенное обстоятельство, что слой диэлектрика (SiO₂) полярный.

Взаимодействие электронов (дырок) с полярными колебаниями превращает их в полярны, поэтому речь должна идти о полярных экситонах на контакте. Задача о полярном экситоне рассматривалась многими авторами [6–12].

Мы разовьем в этой работе теорию электронно-дырочных состояний на контакте в МДП структуре с учетом полярного эффекта — методом, изложенным в [9, 10, 12], и экранировки кулоновского взаимодействия: а) газом свободных носителей, образующих на контакте слой конечной толщины [13]; б) свободными носителями в инверсионном канале [11].

1. Экситонный гамильтониан на контакте полупроводник—полярный диэлектрик

Рассмотрим контакт двух полубесконечных кристаллов: полярного, занимающего область пространства $z < 0$, и неполярного — $z \geq 0$. Электрон и дырка движутся соответственно в зоне проводимости и валентной зоне неполярного кристалла. В области контакта их взаимодействие экранируется поверхностными

поляризационными оптическими колебаниями полярного кристалла и газом свободных электронов, находящимся в области $z \geq 0$. Используя подход [9, 10], найдем эффективный экранированный потенциал электронно-дырочного взаимодействия, в котором экранирование взаимодействия электрона (дырки) с поверхностными оптическими фононами рассматривается в пределе Хакена [6].

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\hat{H}_t = \hat{K}_e + \hat{K}_h + \hat{H}_{ph}^S + W_0^{sc}(\rho, z_e, z_h) + \sum_{i=e,h} U_{ie}^{sc}(z_i) + \hat{H}_{e-ph}^S + W_b(z_e, z_h). \quad (1)$$

Здесь

$$\hat{K}_{e,h} = \frac{\hat{P}_{e,h\perp}^2}{2m_{e,h\perp}} + \frac{\hat{P}_{e,h\parallel}^2}{2m_{e,h\parallel}} \quad (2)$$

— кинетическая энергия электрона и дырки; $W_0^{sc}(\rho, z_e, z_h)$ — экранированная газом свободных носителей (электронов) потенциальная энергия электронно-дырочного взаимодействия, которая для случая а) следует из формулы (16) работы [13] и в пределе $L \rightarrow \infty$ имеет вид

$$W_0^{sc}(\rho, z_e, z_h) = -\frac{e^2}{\epsilon_2} \int_0^\infty d\eta J_0(\eta\rho) \frac{\eta}{\eta} \left[e^{-\tilde{\eta}|z_e - z_h|} + \delta e^{-\tilde{\eta}(z_e + z_h)} \right], \quad (3)$$

$$\tilde{\eta} = \sqrt{\eta^2 + \eta_0^2}, \quad \eta_0 \equiv \rho_{sc}^{-1} = 2 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/6} \left(\frac{m^* e^2}{\epsilon_2 \rho^{-2}} \right)^{1/2} N_S^{1/4},$$

$$\delta = \frac{\epsilon_2 \tilde{\eta} - \epsilon_1 \eta}{\epsilon_1 \tilde{\eta} + \epsilon_1 \eta}, \quad (4)$$

для случая б) потенциальная энергия представлена в работе [5] формулами (14б), которые удобно преобразовать к следующему виду:

$$W_0^{sc}(\rho, z_e, z_h) = -\frac{e^2}{\epsilon_2} \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} - \frac{e^2 (\epsilon_2 - \epsilon_1)}{\epsilon_2 (\epsilon_2 + \epsilon_1)} \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e + z_h)^2}} + \frac{2e^2 \tilde{\eta}_S}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \int_0^\infty \frac{J_0(x\rho) e^{-x(z_e + z_h)}}{\tilde{\eta}_S + x} dx \quad (5)$$

$[J_0(x)$ — функция Бесселя, $\tilde{\eta}_S = 4g_v \epsilon_2 / a_0 (\epsilon_1 + \epsilon_2)$ — параметр экранировки, $g_v = 2$ — число эквивалентных экстремумов, a_0 — боровский радиус электрона: $a_0 = \hbar^2 \epsilon_2 / m^* e^2$]. В пределе $\eta_0 \eta_S \rightarrow 0$ из (3)—(5) следует известное выражение для неэкранированного потенциала электронно-дырочного взаимодействия на контакте двух кристаллов:

$$W_0^{sc}(\rho, z_e, z_h) = -\frac{e^2}{\epsilon_2} \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} - \frac{e^2 (\epsilon_2 - \epsilon_1)}{\epsilon_2 (\epsilon_2 + \epsilon_1)} \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e + z_h)^2}} \quad (6)$$

$U_{ie}^{sc}(z_i)$ — электронная часть экранированного потенциала сил изображения, которая для случая а) следует из формул (16) работы [5] и на основе подхода, развитого в работе [11], приводится к виду

$$U_{ie}^{sc}(z_i) \equiv U_b^{sc}(z_i) = \frac{e^2}{2\varepsilon_2} \int_0^\infty \frac{\eta}{\tilde{\eta}} \frac{(\varepsilon_2 \tilde{\eta} - \eta)}{(\varepsilon_2 \tilde{\eta} + \eta)} e^{-2\tilde{\eta} z_i}, \quad i = e, h. \quad (7)$$

Для случая б) $U_{ie}^{sc}(z_1)$ получена в работе [5]:

$$U_{ie}^{sc}(z_i) = \frac{e^2 (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{4\varepsilon_2 (\varepsilon_2 + \varepsilon_1) z_i} + \frac{e^2 \tilde{\eta}_S}{(\varepsilon_2 + \varepsilon_1)} e^{-2\tilde{\eta}_S z_i} E_i(-2\tilde{\eta}_S z_i). \quad (8)$$

В частном случае $\eta_0, \eta_S = 0$ из формул (7), (8) следует известный результат для неэкранированного потенциала сил изображения:

$$U_{ie}^{sc}(z_i) \equiv U_b^{sc}(z_i) = \frac{e^2}{4z_i} \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\varepsilon_2 (\varepsilon_2 + \varepsilon_1)}. \quad (9)$$

\hat{H}_{ph}^S — гамильтониан поверхностных оптических фононов:

$$\hat{H}_{ph}^S = \sum_{\mathbf{q}} \sim \Omega_S \hat{b}_{\mathbf{q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}}. \quad (10)$$

\hat{H}_{e-ph}^S — гамильтониан взаимодействия электрона (дырки) с поверхностными оптическими фононами с учетом экранировки газом свободных электронов. Для случаев а) и б) он получен на основе общего подхода, изложенного в монографии [12], и имеет вид

$$\hat{H}_{e-ph}^S = \sum_{\mathbf{q}} V_S^{sc}(\eta) e^{-\eta z_i} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_0} (\hat{b}_{-\mathbf{q}}^+ + \hat{b}_{\mathbf{q}}), \quad (11)$$

где квадрат модуля экранированной константы электрон-фононного взаимодействия в случае а) равен

$$|V_S^{sc}(\eta)|^2 = \frac{2\pi}{L^2} \frac{e^2 (\tilde{\varepsilon}_{10} - \varepsilon_1)}{(\tilde{\varepsilon}_{10} + \varepsilon_2) (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \frac{\sim \Omega_S'}{\tilde{\eta}}, \quad (11a)$$

в случае б)

$$|V_S^{sc}(\eta)|^2 = \frac{2\pi}{L^2} \frac{e^2}{(\eta + \tilde{\eta}_S)} \frac{(\tilde{\varepsilon}_{10} - \varepsilon_1) \sim \Omega_S''}{(\tilde{\varepsilon}_{10} + \varepsilon_2) (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}, \quad (11b)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{10,1} = \varepsilon_{10,1} \eta / \tilde{\eta}.$$

Приведем также результат для гамильтониана взаимодействия электронов с объемными оптическими фононами с учетом экранирования газом электронов:

$$\hat{H}_{e-ph}^V = \sum_{\mathbf{q}} C_q^{sc} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_0} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{z} z} - e^{-\mathbf{q} \cdot \mathbf{z} z} (\hat{b}_{-\mathbf{q}}^+ + \hat{b}_{\mathbf{q}}), \quad (11в)$$

где

$$|C_q^{sc}| = \frac{4\pi\alpha_V (\sim \omega_0)^2 R_V}{V} \frac{q^2}{(q^2 + q_0^2)^2}, \quad (11r)$$

$$\alpha_V = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \left(\frac{m_e^*}{2\hbar\omega_0} \right)^{1/2}, \quad (11д)$$

q_0 — обратная длина экранирования Дебая, $q_0^2 = \frac{e^2 n}{\varepsilon k_B T}$. Гамильтониан (11в) в случае экранировки газом свободных электронов взаимодействия с объемными оптическими фононами имеет такой же вид, как и полученный в [14].

W_b — потенциальный барьер на контакте:

$$W_b = \begin{cases} \infty, & z_i < 0; \\ 0, & z_i > 0; \end{cases} \quad i = e, h. \quad (12)$$

В выражениях (3)—(11) введены обозначения: ε_{10} , ε_1 — статическая и высоко-частотная диэлектрические проницаемости полярного кристалла; ε_2 — диэлектрическая проницаемость неполярного кристалла; η_i , $\Omega'_S(\eta)$ — волновой вектор и перенормированная частота поверхностных оптических фононов соответственно.

В пределе плоской электронно-дырочной системы ($z_e = z_h = 0$) для W_0 (ρ , z_e , z_h) из выражений (3), (5) получаем для случая а):

$$W_0^{sc}(\rho) = -\frac{2e^2}{\varepsilon_2} \int_0^\infty \frac{\eta J_0(\eta\rho) d\eta}{\sqrt{\eta^2 + \eta_0^2} + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \eta}, \quad (13)$$

и приближенное выражение при сильной экранировке ($\eta_0\rho \gg 1$)

$$W_0^{sc}(\rho) = -\frac{2e^2}{\rho\varepsilon_2} \left\{ 1 - \frac{\pi\varepsilon_2\eta_0\rho}{2\varepsilon_1} \left[H_0\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\eta_0\rho\right) - N_0\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\eta_0\rho\right) \right] \right\}; \quad (14)$$

для случая б):

$$W_0^{sc}(\rho) = -\frac{2e^2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\rho} + \frac{e^2\tilde{\eta}_S\pi}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} [H_0(\tilde{\eta}_S\rho) - N_0(\tilde{\eta}_S\rho)], \quad (15)$$

где $H_0(x)$ и $N_0(x)$ — функции Струве и Неймана соответственно.

В пределе η_0 , $\eta_S \rightarrow 0$ из формул (13), (14) получаем незэкранированный двумерный кулоновский потенциал:

$$W_0(\rho) = -\frac{2e^2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\rho}. \quad (16)$$

2. Эффективный экранированный гамильтониан

Получаем эффективный экситонный гамильтониан путем усреднения (1) на хакеновской волновой функции [усредняя из гамильтониана (1) фононные операторы]:

$$\begin{aligned} \Psi \left((\rho, z_e, z_h), \{ \hat{b}_\eta^+, \hat{b}_\eta \} \right) &= C e^{i\mathbf{K}_1 \mathbf{R}_\perp + \varphi} (\rho, z_e, z_h) \times \\ &\times \exp \left[\sum_\eta \hat{b}_\eta^+ f_\eta (\rho, z_e, z_h) - \hat{b}_\eta f_\eta (\rho, z_e, z_h) \right] |0\rangle, \end{aligned} \quad (17)$$

где $\varphi(\rho, z_e, z_h)$ — вариационная волновая функция, описывающая относительное движение электрона и дырки внутри экситона и имеющая вид

$$\varphi(\rho, z_e, z_h) = C \prod_{i=e,h} z_i e^{-\beta_j z_i} e^{-\alpha \rho}, \quad (18)$$

α, β_j — вариационные параметры, C — константа нормировки, K_{\perp} — квазиимпульс центра тяжести экситона в плоскости xOy ; $f_{\eta}^e(\rho, z_e, z_h)$, $f_{\eta}^h(\rho, z_e, z_h)$ — вариационные амплитуды смещения операторов свободных мод. В результате получим экранированную электронную часть потенциальной энергии экситон-поляризационного взаимодействия $W_{\text{eff}}^{\text{sc}}(\rho, z_e, z_h)$, которая, как и неэкранированная энергия, имеет следующую структуру:

$$W_{\text{eff}}^{\text{sc}}(\rho, z_e, z_h) = W_0^{\text{sc}}(\rho, z_e, z_h) + \sum_{i=e,h} U_{ie}^{\text{sc}}(z_i) + W_{\text{ph}}^{\text{sc}}(\rho, z_e, z_h) + \sum_{i=e,h} U_{\text{ph}}^{\text{sc}}(z_i). \quad (19)$$

Здесь $W_0^{\text{sc}}(\rho, z_e, z_h)$ — затравочная потенциальная энергия электронно-дырочного взаимодействия, в котором учтена экранировка за счет поляризации валентных электронов и газом свободных электронов в соответствии с формулами (3), (5) для двух различных случаев экранирования.

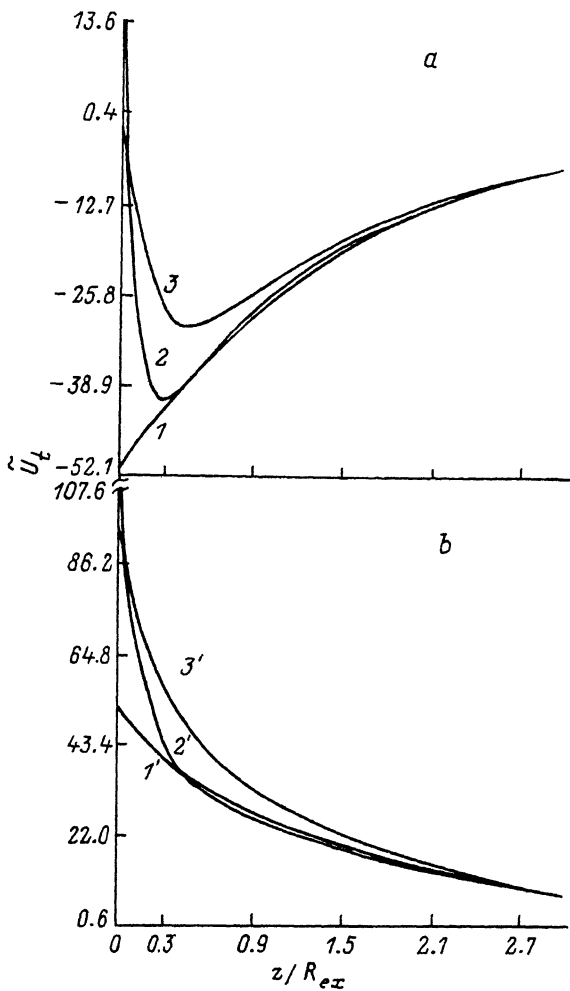
Хакеновские вклады от поляризации оптических колебаний в кулоновское взаимодействие $[W_{\text{ph}}^{\text{sc}}(\rho, z_e, z_h)]$ и энергию самовоздействия $\left[\sum_{i=e,h} U_{\text{ph}}^{\text{sc}}(z_i) \right]$, определенные согласно (19), имеют явный вид в случае а):

$$W_{\text{ph}}^{\text{sc}}(\rho, z_e, z_h) = e^2 \int_0^{\infty} d\eta J_0(\eta\rho) e^{-2\tilde{\eta}(z_e+z_h)} \frac{\eta}{\tilde{\eta}} \left\{ \frac{1}{\epsilon_1 \frac{\eta}{\tilde{\eta}} + \epsilon_2} - \frac{1}{\epsilon_{10} \frac{\eta}{\tilde{\eta}} + \epsilon_2} \right\} \left\{ \frac{1}{1 + R_S^2 \eta^2} + \frac{1}{1 + R_{S'}^2 \eta^2} \right\}, \quad (20)$$

$$U_{\text{ph}}^{\text{sc}}(z_i) = -e^2 \int_0^{\infty} \frac{d\eta \eta}{\tilde{\eta}} \left\{ \frac{1}{\epsilon_1 \frac{\eta}{\tilde{\eta}} + \epsilon_2} - \frac{1}{\epsilon_{10} \frac{\eta}{\tilde{\eta}} + \epsilon_2} \right\} \times \frac{e^{-2\tilde{\eta}z}}{(1 + R_{S'}^2 \eta^2)}; \quad (21)$$

в случае б):

$$W_{\text{ph}}^{\text{sc}}(\rho, z_e, z_h) = \sum_{i=e,h} \frac{e^2 (\epsilon_{10} - \epsilon_1)}{(\epsilon_{10} + \epsilon_2) (\epsilon_1 + \epsilon_2)} \int_0^{\infty} d\eta J_0(\eta\rho) e^{-\eta(z_e+z_h)} \times \left\{ \frac{1 + \tilde{\eta}_S^2 R_{S'}^2}{1 + \tilde{\eta}^2 R_S^2} - \frac{\eta_S}{(\eta + \tilde{\eta}_S)} \frac{1}{(1 + \tilde{\eta}_S^2 R_{S'}^2)} + \frac{\eta \tilde{\eta}_S R_{S'}^2}{(1 + \eta^2 R_{S'}^2) \cdot (1 + \tilde{\eta}_S^2 R_{S'}^2)} \right\}, \quad (22)$$



Потенциальная энергия электрона (a) и дырки (b) в канале структуры Me—SiO₂—Si без учета экранирования (1, 1'), с учетом экранирования двумерным газом электронов (2, 2'), газом электронов в области $z > 0$ (3, 3').

$$U_{ph}^{sc}(z_i) = -\frac{e^2(\epsilon_{10} - \epsilon_1)}{(\epsilon_{10} + \epsilon_2)(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \left\{ \frac{1}{(1 + \tilde{\eta}_s^2 R_{Si}^2)} S_1 \left(\frac{2z_i}{R_{Si}} \right) - \frac{\tilde{\eta}_s}{(1 + \tilde{\eta}_s^2 R_{Si}^2)} S_2 \left(\frac{2z_i}{R_{Si}} \right) + \frac{\tilde{\eta}_s e^{-2\tilde{\eta}_s z_i}}{(1 + \tilde{\eta}_s^2 R_{Si}^2)} E_i(-2\tilde{\eta}_s z_i) \right\}. \quad (23)$$

Здесь

$$S_1(x) = \text{ci}(x) \sin(x) - \text{si}(x) \cos(x),$$

$$S_2(x) = -\text{ci}(x) \cos(x) - \text{si}(x) \sin(x), \quad (23a)$$

$\text{ci}(x)$ и $\text{si}(x)$ — интегральный косинус и синус.

На рисунке представлены результаты расчета полной потенциальной энергии самовоздействия $\tilde{U}_i(z_i)$ с учетом эффектов экранировки как электрона, так и дырки для структуры $\text{Me}-\text{SiO}_2-\text{Si}$;

в случае а)

$$\begin{aligned} \tilde{U}_i(z_i) = & \frac{e^2}{2\epsilon_2} \sum_i \int_0^\infty \frac{\eta(\epsilon_2\tilde{\eta} - \epsilon_1\eta)}{\tilde{\eta}(\epsilon_2\tilde{\eta} + \epsilon_1\eta)} e^{-2\tilde{\eta}z_i} d\eta - \\ & - e^2 \sum_i \int_0^\infty \frac{\eta}{\tilde{\eta}} \left\{ \frac{1}{\left(\epsilon_1 \frac{\eta}{\tilde{\eta}} + \epsilon_2\right)} + \frac{1}{\left(\epsilon_{10} \frac{\eta}{\tilde{\eta}} + \epsilon_2\right)} \right\} \frac{e^{-2\tilde{\eta}z_i}}{(1 + \eta^2 R_{Si}^2)}; \end{aligned} \quad (24)$$

в случае б)

$$\begin{aligned} \tilde{U}_i(z_i) = & \frac{e^2(\epsilon_2 - \epsilon_1)}{4\epsilon_2(\epsilon_2 + \epsilon_1)z_i} + \frac{e^2\tilde{\eta}e^{-2z_i\tilde{\eta}S}}{(\epsilon_1 + \epsilon_2)(1 + \tilde{\eta}_S^2 R_{Si}^2)} - \\ & - \frac{e^2(\epsilon_{10} - \epsilon_1)}{(\epsilon_{10} + \epsilon_2)(\epsilon_1 + \epsilon_2)} \left\{ \left[\frac{S_1\left(\frac{2z_i}{R_{Si}}\right)}{(1 + \tilde{\eta}_S^2 R_{Si}^2)R_{Si}} - \frac{\tilde{\eta}_S S_2\left(\frac{2z_i}{R_{Si}}\right)}{(1 + \tilde{\eta}_S^2 R_{Si}^2)} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{\tilde{\eta}_S e^{-2\tilde{\eta}_S z_i}}{(1 + \tilde{\eta}_S^2 R_{Si}^2)} E_i(-2\tilde{\eta}_S z_i) \right\}, \end{aligned} \quad (25)$$

$i = e, h.$

Кривые 1—3 на рисунке, а относятся к потенциальным энергиям электрона в канале соответственно без учета экранирования, с учетом экранирования двумерным газом электронов, газом электронов в области $z \geq 0$. Кривые 1'—3' на рисунке, б — соответствующие результаты для дырки в валентной зоне. При построении кривых на рисунке энергия электрона и дырки в канале полагалась равной

$$e \sum_{i=e,h} V_0(z_i) = V_0 \sum_{i=e,h} \exp(-\kappa z_i), \quad (26)$$

где V_0 и κ — параметры, определявшиеся аналогично тому, как это сделано авторами [4] [формула (20)].

Как видно из рисунка, в области контакта эффект самовоздействия приводит к существенной перенормировке ширины запрещенной зоны неполярного кристалла, причем координатная зависимость дна зоны проводимости в области контакта ($z \leq 0.5R_{ex}$) становится немонотонной (т. е. в непосредственной близости к границе кристалла силы притяжения изменяют свой характер — возникает отталкивание).

3. Энергия связи поляронного экситона в МДП структуре

Используем полученные в разделе 1 результаты для исследования энергии связи поверхностного поляронного экситона в МДП структуре с толстым полярным слоем в качестве диэлектрика в случае б). Экситонные состояния Ванье—Мотта в такой степени были экспериментально обнаружены авторами работ [1, 2]. В частности, в спектре краевой люминесценции структуры $\text{Al}-\text{SiO}_2-\text{Si}$ была обнаружена люминесценция, обусловленная рекомбинацией электронов, локализо-

ванных в инверсионном канале, с дырками, находящимися у поверхности кремния в слое пространственного заряда. Для интерпретации результатов этих экспериментов были выполнены детальные теоретические расчеты поверхностных экситонных состояний с учетом эффектов экранировки двумерным электронным газом, локализованным на геометрической границе раздела полупроводника с диэлектриком. При этом слой двуокиси кремния считался гомеополярным.

Известно, однако, что он обладает выраженными полярными свойствами. Это приводит к появлению в приповерхностной области контактирующего с ним кремния полей, создаваемых поверхностными оптическими фононами слоя двуокиси кремния [15], которые экранируют электронно-дырочное взаимодействие и создают дополнительные вклады в потенциальные энергии электрона и дырки в области контакта, учет которых может существенно изменить средние удаления электрона и дырки от границы [16]. Представляет интерес исследовать этот эффект и его влияние на состояние поверхностного экситона в рассматриваемой системе.

Запишем гамильтониан электронно-дырочно-фононной системы для случая б) (в системе центра масс для движения в плоскости xOy):

$$\hat{H}_{\text{ex-ph}} = \frac{\hat{p}_\rho^2}{2\mu_\perp} + \frac{\hat{p}_{z_e}^2}{2m_{z_e}^*} + \frac{\hat{p}_{z_h}^2}{2m_{z_h}^*} + W_{\text{eff}}^{\text{sc}}(\rho, z_e, z_h) + eV_0(z_h) - eV_0(z_e), \quad (27)$$

где $W_{\text{eff}}^{\text{sc}}(\rho, z_e, z_h)$ определяется формулами (19), (5) и (25); $V_0(z_i)$ — потенциал в канале, который согласно [4, 5] аппроксимируется выражением (26) и формируется в результате экранирования внешнего поля и сил самовоздействия (параметры V_0 и λ выбираются таким же образом, как и в работах [4, 5]).

Для вычисления энергии используем вариационный метод. Пробная волновая функция выбирается в виде [4, 5, 10]

$$\Psi(\rho, z_e, z_h) = \varphi(\rho) \varphi(z_e) \varphi(z_h), \quad (28)$$

где

$$\varphi(\rho) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\lambda\rho}, \quad (29)$$

$$\varphi(z_i) = 2\beta^{-3/2} z_i e^{-\beta z_i}, \quad i = e, h, \quad (30)$$

λ, β — вариационные параметры. Выбор $\varphi(z_i)$ в виде (30) удовлетворяет граничному условию

$$\varphi(z_i) = 0 \text{ при } z_i = 0, \quad (31)$$

которое соответствует бесконечному потенциальному барьеру на контакте кристаллов.

Усредняя гамильтониан (27) на волновой функции (28)—(30), получаем вариационную формулу для энергии основного состояния поверхностного экситона, по которой для структуры Al—SiO₂—Si были проведены расчеты энергии основного состояния поверхностного экситона E_{0S}^{ex} и энергии связи поверхностного экситона E_{BS}^{ex} , определенной как

$$E_{BS}^{\text{ex}} = E_{0S}^{\text{ex}} - (E_{0S}^e + E_{0S}^h), \quad (32)$$

где E_{0S}^i — энергия основного состояния электрона ($i=e$) и дырки ($i=h$), локализованных на контакте Si—SiO₂ в кремнии.

Расчетные значения энергии основного состояния E_{0S}^{ex} , энергии связи E_{BS}^{ex} поверхностного экситона и величины фононного вклада в экранировку $e-h$ -взаимодействия для структуры Al-SiO₂-Si

$N_S \cdot 10^{-11}$, см ⁻²	E_{0S}^{ex} , мэВ	E_{BS}^{ex} , мэВ	E_{ph}^{ex} , мэВ	E_{0S}^{ex} , мэВ [5]	E_{BS}^{ex} , мэВ [5]
2	-16.81	-7.02	1.79	-18.2	-8.81
4	-21.05	-5.71	2.11	-23.2	-7.82
6	-22.07	-4.32	2.62	-24.5	-6.98
8	-23.73	-2.15	2.90	-26.9	-5.05
10	-24.51	0.36	3.11	-27.9	-2.75

В численном расчете были использованы следующие параметры структуры: $\epsilon_2 = 10$, $\epsilon_{10} = 3.9$, $\epsilon_1 = 2$, $m_{\parallel}^e = 0.9 m_0$, $m_{\perp}^h = m_{\parallel}^h = 0.5 m_0$. В таблице приведены результаты расчета E_{0S}^{ex} , E_{BS}^{ex} в зависимости от двумерной концентрации N_S электронного газа. Приведены также численные значения E_{ph}^{ex} величины фононного вклада в экранировку $e-h$ -взаимодействия и значения E_{0S}^{ex} , E_{BS}^{ex} , полученные авторами работы [5].

Из таблицы следует, что фононный вклад в экранировку $e-h$ -взаимодействия составляет ~10% от E_{0S}^{ex} и заметно понижает величину энергии связи экситона с поверхностью. По этой причине экситону становится энергетически невыгодна локализация на контакте кристаллов (вблизи поверхности возникает для экситонов мертвая зона) при меньших концентрациях N_S поверхностных электронов, чем без учета поляризационной экранировки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] П. Д. Алтухов, А. А. Бакун, А. В. Крутицкий, А. А. Рогачев, Г. П. Рубцов. Письма ЖЭТФ, 46, 427 (1987).
- [2] И. В. Кукушкин, В. Б. Тимофеев. ЖЭТФ, 92, 258 (1987).
- [3] А. С. Батырев, Б. В. Новиков, А. Е. Чередниченко. Письма ЖЭТФ, 33, 459 (1981).
- [4] Н. С. Аверкиев, Г. Е. Пикус. ФТП, 21, 1493 (1987).
- [5] Н. С. Аверкиев, Г. Е. Пикус, М. Л. Шматов. ФТТ, 30, 3276 (1988).
- [6] Н. Накен. Z. Physik, 146, 527 (1956).
- [7] Г. Хакен. УФН, 68, 566 (1959).
- [8] Н. И. Мейер. Physica, 22, 109 (1956).
- [9] С. И. Берил, Е. П. Покатилов. ФТП, 14, 37 (1980).
- [10] С. И. Берил, Е. П. Покатилов, И. С. Чебан. УФЖ, 27, 585 (1982).
- [11] Е. Р. Pokatilov, S. I. Beryl, N. N. Semenovskaja, M. Fahood. Phys. St. Sol. (b), 158, 165 (1990).
- [12] Е. П. Покатилов, В. М. Фомин, С. И. Берил. Колебательные возбуждения, поляроны и экситоны в многослойных структурах и сверхрешетках, 288. Кишинев (1990).
- [13] Н. С. Рытова. Вестн. МГУ, вып. 3, 30 (1967).
- [14] Б. Ридли. Квантовые процессы в полупроводниках, 304. М. (1986).
- [15] K. Hess. Sol. St. Electron., 21, 123 (1978).
- [16] С. И. Берил, Е. П. Покатилов, Д. И. Кожухарь, М. А. Френк, С. Мадкур, М. Фахуд. Деп. в МолдНИНТИ, № 1125, Кишинев (1989).

Редактор Л. В. Шаронова