©1995 г.

ОБРАЗОВАНИЕ КОНДЕНСОНОВ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ СЛОЯХ ДЫРОЧНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

О.В.Кибис

Новосибирский государственный технический университет,
630092, Новосибирск, Россия
(Получена 9 февраля 1994 г. Принята к печати 6 июля 1994 г.)

Показано, что в квазидвумерных слоях дырочных полупроводников возможно образование конденсонов — состояний поляронного типа, обусловленных взаимодействием носителя заряда с акустическими фононами. Проведен анализ условий возникновения конденсонов, а также получены количественные оценки для энергии связи и эффективной массы конденсона.

В классической работе Дейгена и Пекара [1] рассматривалась возможность упругой локальной деформации кристалла полем электрона и стационарной локализации электрона вблизи этой деформации. Такое состояние поляронного типа, обусловленное взаимодействием электрона с акустическими фононами, было названо конденсоном. Проведенный анализ [1] показал, что в трехмерных и двумерных системах в принципе невозможно образование конденсонов большого (по сравнению с периодом кристаллической решетки) радиуса, а для возникновения конденсонов малого радиуса требуется настолько сильное электрон-фононное взаимодействие, что критерий их возникновения не выполняется ни для одного известного полупроводникового материала. Однако необходимо отметить, что при проведении анализа [1] предполагалось наличие параболического закона дисперсии электронов $\varepsilon(k) \propto k^2$, тогда как в настоящее время известно множество проводящих систем с самыми различными видами дисперсионной зависимости. Так, в частности, в деформированных квазидвумерных ($2D$) слоях кубических полупроводников могут исчезать параболические члены в законе дисперсии дырочных подзон, так что энергетический спектр дырок вблизи вершины подзоны $\varepsilon(k) \propto k^4$. В настоящей работе будут сформулированы условия возникновения такого закона дисперсии и будет показано, что в этом случае для энергетического спектра уже сколь угодно слабое взаимодействие носителей заряда с акустическими фононами приводит к образованию конденсонов большого радиуса.

Задача определения спектра дырок в деформированных $2D$ слоях кубических полупроводников решается в рамках метода эффективной

массы [2-3] и заключается в нахождении собственных значений энергии гамильтониана

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0(u_{ij}, k_x, k_y, k_z) + V(z)I, \tag{1}$$

где $V(z)$ — квантующий потенциал $2D$ системы, $\hat{\mathcal{H}}_0$ — гамильтониан Латтинжера с деформационным слагаемым Бира–Пикуса, определяющий спектр валентной зоны в деформированных кубических полупроводниках и представляющий собой матрицу 4×4, I — единичная матрица, u_{ij} — компоненты тензора деформации, $k_z = -\partial/\partial z$ — оператор квантующейся компоненты квазиимпульса, k_x и k_y — компоненты квазиимпульса k, лежащие в плоскости $2D$ слоя. Точное решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) с формальной математической точки зрения в общем случае сводится к решению системы четырех дифференциальных уравнений, что делает невозможным получение в аналитическом виде закона дисперсии дырок $\varepsilon(k)$ при произвольном потенциале $V(z)$. Однако в практически важной ситуации, когда нас интересует вид $\varepsilon(k)$ при малых значениях k, можно воспользоваться теорией возмущений [3], так как в этом случае недиагональные матричные элементы гамильтониана (1) малы по сравнению с расстоянием между дырочными подзонами размерного квантования. Для определенности будем рассматривать $2D$ слой с ориентацией поверхности (001) и симметричным квантующим потенциалом $V(z) = V(-z)$ (реализующимся, в частности, в многослойных гетероструктурах — квантовых колодцах), подвергнутый статической деформации с отличными от нуля компонентами тензора

$$u_{xx} = u_{yy} \equiv u_\perp, \qquad u_{zz} = u_\parallel \tag{2}$$

(именно такая структура тензора u_{ij} соответствует деформациям одноосного сжатия или растяжения вдоль оси z), которые наиболее легко могут быть реализованы в эксперименте путем приложения к $2D$ системе внешней механической нагрузки. (Отметим также, что тензор (2) соответствует деформации, исходно присутствующей в любой гетероэпитаксиальной $2D$ системе из-за решеточного несоответсвия гетеослоев). В этом случае гамильтониан (1) при $k = 0$ принимает диагональный вид и уровни энергии дырок ε, а также соответствующие им волновые функции ψ, определяются обычными уравнениями Шредингера:

$$\begin{gathered}
\hat{\mathcal{H}}_h \psi_{hn} = \varepsilon_{hn}\psi_{hn}, \qquad \hat{\mathcal{H}}_l \psi_{ln} = \varepsilon_{ln}\psi_{ln}, \\
\hat{\mathcal{H}}_h = -(\gamma_1 - 2\gamma_2)\frac{d^2}{dz^2} + \varepsilon_u + V(z), \\
\hat{\mathcal{H}}_l = -(\gamma_1 + 2\gamma_2)\frac{d^2}{dz^2} - \varepsilon_u + V(z),
\end{gathered} \tag{3}$$

где

$$\begin{aligned}
\varepsilon_u &= a(2u_\perp + u_\parallel) - bu_0, \\
\varepsilon_{hn} &= \varepsilon_{hn}(0) + \varepsilon_u, \\
\varepsilon_{ln} &= \varepsilon_{ln}(0) - \varepsilon_u,
\end{aligned}$$

$$u_0 = u_{\parallel} - u_{\perp}, \quad n = 1,\ 2,\ 3, \ldots \ .$$

Здесь a и b — константы деформационного потенциала валентной зоны трехмерного кристалла, γ_1, γ_2 и γ_3 — параметры Латтинжера для валентной зоны трехмерного кристалла, записанные в единицах $\hbar^2/2m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), $\varepsilon_{hn}(0)$ ($\varepsilon_{ln}(0)$) — энергия подзон тяжелых (легких) дырок в недеформированной $2D$ системе при $k = 0$, а в качестве начала отсчета энергии выбран край валентной зоны в трехмерном недеформированном кристалле полупроводника. В дальнейшем ветви энергетического спектра дырок будем обозначать символами hn, ln, показывающими, в какой уровень энергии ($\varepsilon_{hn}(0)$, $\varepsilon_{ln}(0)$) переходит данная ветвь при $k = 0$ и в отсутствие деформации. Определяя закон дисперсии дырок при $k \neq 0$, применим теорию возмущений [3] и, ограничиваясь слагаемыми $\propto k^4$, получим энергетический спектр дырок для подзоны ln в виде

$$\varepsilon_{ln}(k) = \varepsilon_{ln}(0) - \varepsilon_u + \frac{\hbar^2}{2m_{ln}}\left(k_x^2 + k_y^2\right) +$$

$$+2\gamma_2\left(k_x^2 + k_y^2\right)\sum_s \frac{|2\sqrt{3}\gamma_3 k_+ \langle\psi_{ln}|\hat{k}_z|\psi_{hs}\rangle|^2}{\left(\varepsilon_{ln}(0) - \varepsilon_{hs}(0) + 2bu_0\right)^2} +$$

$$+\sum_s \frac{|\sqrt{3}\left(\gamma_+ k_-^2 + \gamma_- k_+^2\right)\langle\psi_{ln}|\psi_{hs}\rangle|^2}{\varepsilon_{ln}(0) - \varepsilon_{hs}(0) + 2bu_0}, \qquad (5)$$

где $\gamma_\pm = (\gamma_2 \pm \gamma_2)/2$, $k_\pm = k_x \pm ik_y$, эффективная масса дырок m_{ln} определяется соотношением

$$\frac{\hbar^2}{2m_{ln}} = \gamma_1 - \gamma_2 + 12\gamma_3^2 \sum_m \frac{|\langle\psi_{ln}|\hat{k}_z|\psi_{hm}\rangle|^2}{\varepsilon_{ln}(0) - \varepsilon_{hm}(0) + 2bu_0}, \qquad (6)$$

а границы применимости разложения (5) определяются условием

$$\left|\frac{\varepsilon_{ln}(k) - \varepsilon_{ln}(0) + \varepsilon_u}{\varepsilon_{ln}(0) - \varepsilon_{hm}(0) + 2bu_0}\right| \ll 1. \qquad (7)$$

Из (7) следует, что в отсутствие случайного вырождения подзон ln и hm в точке $k = 0$ всегда существует такая область занчений k, где справедливо выражение (5). Отметим также, что соотношения для подзоны hn получаются из (3)–(7) формальной заменой $h \leftrightarrow l$, $\gamma_2 \to -\gamma_2$, $b \to -b$.

Из (3)–(7) следует, что задача определения энергетического спектра дырок вблизи вершин подзон свелась в конечном итоге к обычным уравнениям Шредингера (3), однако некоторые важные выводы можно сделать и без решения (3), анализируя (5)–(6) в общем виде. Из уравнений (3) ясно, что $\varepsilon_{ln}(0)$, $\varepsilon_{hm}(0)$, $\psi_{ln}(z)$, $\psi_{hm}(z)$ не зависят от u_0. Поэтому из (6) с очевидностью следует, что надлежащим подбором величины u_0 можно добиться выполнения равенства $\hbar^2/2m_{ln} = 0$ для любой подзоны, что приведет к исчезновению параболических членов в законе дисперсии (5), так что вблизи вершины данной подзоны $\varepsilon_{ln}(k) \propto k^4$.

Для более подробного анализа необходимо решить уравнения Шредингера (3), предварительно задав явный вид потенциала $V(z)$.

Простейшей аппроксимацией $V(z)$ является бесконечно глубокая прямоугольная потенциальная яма шириной L (несмотря на простоту такой аппроксимации, она может быть использована для анализа энергетического спектра первых дырочных подзон в квантовых колодцах [2]). В этом случае получим из (3)

$$\varepsilon_{hn}(0) = (\gamma_1 - 2\gamma_2)\pi^2/L^2, \qquad \varepsilon_{ln}(0) = (\gamma_1 + 2\gamma_2)\pi^2/L^2,$$

$$\psi_{hn}(z) = \psi_{ln}(z) = \sqrt{2/L}\sin(\pi n z/L). \tag{8}$$

Подставив (8) в (6), можно получить выражение для эффективных масс любой подзоны в явном виде. В частности, для подзоны $l1$ имеем

$$\frac{\hbar^2}{2m_{l1}} = \gamma_1 - \gamma_2 + \sum_{m=1}^{\infty}\left(\frac{2m}{1-4m^2}\right)^2 \frac{48\gamma_3^2}{(\gamma_1+2\gamma_2)\pi^2 - 4(\gamma_1-2\gamma_2)\pi^2 m^2 + 2bu_0L^2}. \tag{9}$$

В качестве конкретного примера рассмотрим $2D$ слой GaAs, для которого $\gamma_1 = 6.85, \gamma_2 = 2.1, \gamma_3 = 2.9$. Табулируя (9) при заданных значениях параметров Латтинжера, получим, что $\hbar^2/2m_{l1} = 0$ при

$$u_0 = 8.37\hbar^2\pi^2/2m_0L^2b, \tag{10}$$

причем при данной деформации (10) подзона $l1$ является самой первой дырочной подзоной, ближайшей к краю валентной зоны в трехмерном кристалле. Для GaAs при характерном для квантовых колодцев значении $L \simeq 50$ Å величина деформации (10) невелика ($u_0 \sim 10^{-2}$) и легко может быть реализована в эксперименте.

Прежде чем записать закон дисперсии $\varepsilon_{l1}(k)$ при деформации (10), проведем некоторые упрощения в (5). Согласно (5) энергетический спектр дырок анизотропен в плоскости $2D$ слоя, поскольку содержит слагаемые $\propto k_xk_y$, причем количественной характеристикой этой анизотропии является величина $|\gamma_-/\gamma_+|$. Для GaAs $|\gamma_-/\gamma_+| \ll 1$, что позволяет пренебречь в (5) слагаемыми $\propto \gamma_-$, осуществив тем самым изотропизацию спектра в плоскости $2D$ слоя. Тогда при деформации (10)

$$\varepsilon_{l1}(k) = \varepsilon_{l1}(0) - \varepsilon_u + \alpha k^4, \tag{11}$$

где

$$\alpha = \sum_s \left[\frac{24\gamma_2\gamma_3^2|\langle\psi_{l1}|\hat{k}_z|\psi_{hs}\rangle|^2}{(\varepsilon_{l1}(0) - \varepsilon_{hs}(0) + 2bu_0)^2} + \frac{3\gamma_+^2|\langle\psi_{l1}|\psi_{hs}\rangle|^2}{\varepsilon_{l1}(0) - \varepsilon_{hs}(0) + 2bu_0}\right]. \tag{12}$$

Рассмотрим теперь взаимодействие носителей заряда с акустическими фононами при наличии закона дисперсии (11). В рамках вариационной процедуры [1] задача определения энергии конденсона сводится к нахождению экстремали функционала

$$E[\psi, \tilde{u}_{ij}] = E_0 + E_{\rm ph} + E_c, \tag{13}$$

определяющего энергию системы «носитель заряда+решетка кристалла». Здесь

$$E_0 = \int \psi^* \hat{\mathcal{H}} \psi dV \tag{14}$$

определяет кинетическую энергию носителя заряда в конденсонном состоянии,

$$E_{\text{ph}} = \int \psi^* U \psi dV \tag{15}$$

определяет энергию взаимодействия носителя заряда с решеткой (U — потенциал взаимодействия носителя заряда с фононами),

$$E_c = \int \left[\left(\frac{1}{2}\right) c_{11} \left(\tilde{u}_{xx}^2 + \tilde{u}_{yy}^2 + \tilde{u}_{zz}^2\right) + c_{12} \left(\tilde{u}_{xx}\tilde{u}_{yy} + \tilde{u}_{xx}\tilde{u}_{zz} + \tilde{u}_{yy}\tilde{u}_{zz}\right) + \right.$$

$$\left. + 2c_{44} \left(\tilde{u}_{xy}^2 + \tilde{u}_{xz}^2 + \tilde{u}_{yz}^2\right) \right] dV \tag{16}$$

определяет энергию упругой локальной деформации кубического кристалла, обусловленную взаимодействием носителя заряда с решеткой ($\tilde{u}_{ij}$ — компоненты тензора деформации, возникающей за счет взаимодействия носителя заряда с решеткой, а c_{11}, c_{12}, c_{44} — модули упругости кристалла). Для удобства дальнейших выкладок совместим начало отсчета энергии с энергией подзоны $l1$ при $k = 0$ и деформации (10). Тогда энергетический спектр (11) примет вид $\varepsilon_{l1}(k) = \alpha k^4$. Ограничимся анализом слабого взаимодействия носителей заряда с фононами, когда энергия E_{ph} существенно меньше, чем расстояние между соседними дырочными подзонами, а деформация решетки носителем заряда $\tilde{u}_{ij}$ существенно меньше, чем создаваемая внешней статической нагрузкой деформация (2). Тогда взаимодействие носителя заряда с решеткой перемешивает состояния лишь вблизи вершины подзоны $l1$, соответствующие малым значениям k. Деформационный сдвиг состояний подзоны $l1$ при малых значениях k определяется соотношением [3]

$$U = (a + b)u_{zz} + (a - b/2)(u_{xx} + u_{yy}). \tag{17}$$

Если рассматривать взаимодействие носителей заряда с фононами в рамках метода деформационного потенциала, то соотношение (17) при формальной замене $u_{ij} \to \tilde{u}_{ij}$ определяет фигурирующий в (15) потенциал взаимодействия носителя заряда с акустическими фононами. Подставляя (17) в (15) и минимизируя (13) по компонентам вектора деформации, получим систему уравнений упругости, решение которой имеет вид

$$\tilde{u}_{xx} = \tilde{u}_{yy} = \left[-\frac{a}{c_{11} + 2c_{12}} + \frac{b}{2(c_{11} - c_{12})} \right] |\psi|^2,$$

$$\tilde{u}_{zz} = \left[-\frac{b}{c_{11} - c_{12}} - \frac{a}{c_{11} + 2c_{12}} \right] |\psi|^2,$$

$$\tilde{u}_{xz} = \tilde{u}_{xy} = \tilde{u}_{yz} = 0. \tag{18}$$

Подставляя (18) в (13), получим новый функционал

$$E[\psi] = E_0[\psi] - A\int |\psi|^4 dV, \tag{19}$$

$$A = \frac{3}{2}\left[\frac{a^2}{c_{11}+2c_{12}} + \frac{b^2}{2(c_{11}-c_{12})}\right]. \tag{20}$$

Функционал (19) зависит уже только от волновой функции и его следует минимизировать по ψ при дополнительном условии нормировки $\int |\psi|^2 dV = 1$. Точная минимизация этого функционала в аналитическом виде не представляется возможной, в связи с чем ограничимся получением количественных оценок для параметров конденсонного состояния.

Конденсонное состояние существует в том случае, когда минимуму функционала (19) соответствует локализованная функция ψ, обращающаяся в нуль на бесконечности [1]. Возьмем функцию ψ, для которой характерный размер области локализации в плоскости квазидвумерного слоя есть величина r. Тогда второе слагаемое в правой части (19) есть

$$A\int |\psi|^4 dV \sim A/r^2 L. \tag{21}$$

Как уже было отмечено ранее, слабое взаимодействие носителя заряда с фононами существенно перемешивает лишь состояния подзоны $l1$, в связи с чем функция ψ может быть представлена в виде

$$\psi = \int c(k)\psi_k dk, \tag{22}$$

где ψ_k есть волновая функция состояния k в подзоне $l1$, удовлетворяющая равенству $\hat{\mathcal{H}}\psi_k = \alpha k^4 \psi_k$. Тогда из (14) следует, что

$$E_0 = \int |c(k)|^2 \alpha k^4 dV \sim \alpha/r^4. \tag{23}$$

Подставив (21) и (23) в (19) и минимизируя полученное выражение по r, получим, что энергия системы «носитель заряда+решетка» имеет минимум при

$$r \sim \sqrt{\alpha L/A}, \tag{24}$$

что означает существование конденсонного состояния с радиусом (24) и энергией связи

$$\Delta = E_0 + E_{\text{ph}} \sim A^2/\alpha L^2. \tag{25}$$

Из (24), (25) следует, что уже при сколь угодно малых величинах констант деформационного потенциала взаимодействие носителей заряда с акустическими фононами приводит к образованию конденсонного состояния. Для GaAs при $L \simeq 50$ Å величина $\Delta \sim 10^{-4}$ эВ.

Обсудим теперь возможные экспериментальные следствия появления конденсонов. Наиболее очевидно возникновение конденсонов может проявиться в оптических исследованиях, поскольку оптические

переходы конденсона между основным состоянием и возбужденными состояниями приведут к появлению тонкой структуры в спектрах излучения и поглощения (аналогично тому, как электрон-фононное взаимодействие приводит к появлению тонкой структуры пика циклотронного резонанса [4]). Изучение этих спектров может дать наиболее достоверную информацию об уровнях энергии конденсона. Помимо эффектов, связанных с изменением оптических характеристик, появление конденсонов скажется и на кинетических эффектах. Связано это с тем, что подобно полярону, конденсон не является статическим образованием и может перемещаться в кристалле под действием внешних полей. Важнейшим параметром, который характеризует кинетические свойства конденсона и может быть определен экспериментально, является эффективная масса конденсона M. Наиболее просто провести анализ движения конденсона для случая малых скоростей, когда дрейфовая скорость конденсона $\mathbf{v}$ существенно меньше скорости звука v_{ph} в кристалле, так что решетка успевает «подстраиваться» под волновую функцию носителя заряда, вследствие чего волновая функция носителя заряда и деформационная потенциальная яма движутся с одной и той же скоростью $\mathbf{v}$ относительно решетки. При анализе движения конденсона удобно перейти в систему отсчета, в которой носитель заряда покоится, а решетка движется со скоростью $(-\mathbf{v})$ относительно выбранной системы отсчета. При этом задача определения энергетического спектра конденсона сводится к минимизации энергии

$$E(v) = E_0 + E_{\text{ph}} + E_c + E_K, \tag{26}$$

где E_0, E_{ph} и E_c определяются соотношениями (14)–(16), а

$$E_K = \left(\frac{\rho}{2}\right) \int \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} - \mathbf{v}\right)^2 dV \tag{27}$$

есть кинетическая энергия решетки в выбранной системе отсчета (ρ — плотность кристалла, $\tilde{\mathbf{u}}$ — вектор деформации решетки носителем заряда). Минимизируя (26) аналогично тому, как это делалось для неподвижного конденсона, и переходя обратно в лабораторную систему отсчета, получим

$$E(v) = E(0) + \frac{Mv^2}{2}, \tag{28}$$

где

$$M \sim \frac{\Delta}{v_{\text{ph}}^2}. \tag{29}$$

Для GaAs при $L \simeq 50$ Å получаем значение $M \sim 0.1 m_0$. В заключение отметим, что наиболее благоприятные условия для наблюдения конденсонов реализуются в случае малой концентрации носителей заряда, когда заполнены лишь состояния вблизи вершины подзоны $l1$.

Список литературы

[1] М.Ф. Дейген, С.И. Пекар. ЖЭТФ, **21**, 803 (1951).
[2] О.В. Кибис, Л.Д. Шварцман. Поверхность, вып. 7, 119 (1985).
[3] О.В. Кибис. ФТП, **23**, 820 (1989).
[4] О.В. Кибис, В.С. Шадрин. ФТП, **21**, 185 (1987).

Л.В. Шаронова

The formation of condensons in quasi-two-dimensional layers of hole semiconductors

O.V. Kibis

Novosibirsk State Technological University, 630092 Novosibirsk, Russia

---