

УДК 537.311.322

© 1990

ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНЫХ ПАР НА ГРАНИЦЕ ГЕТЕРОПЕРЕХОДА ВТОРОГО ТИПА

А. М. Моныхов, А. А. Рогачев

Для модельной гетероструктуры второго типа с равными параметрами справа и слева от перехода рассмотрены возможные типы поведения потенциала вблизи перехода при нулевой температуре. Показано, что при больших уровнях внешней накачки потенциал может иметь осциллирующий характер поведения.

В работе рассматривается ход потенциала, возникающий в гетероструктурах типа рис. 1 (гетероструктуры второго рода). Подобные гетероструктуры широко исследуются в настоящее время. В отличие от переходов типа GaAs—GaAlAs гетеропереходы второго рода создают вблизи одной гетерограницы две близко расположенные потенциальные ямы для электронов и дырок, что дает возможность создавать, например, высокоэффективные полупроводниковые лазеры в инфракрасной области [1].

Ниже рассмотрена модельная гетероструктура, для которой предполагается, что разрывы зон $\delta_1 = \delta_2$ (рис. 1), эффективные массы и диэлектрические константы равны справа и слева от перехода. Ясно, что в большинстве случаев $\delta_1 \neq \delta_2$, а масса электронов не равна массе дырок, однако рассматриваемая модельная система отражает наиболее важные черты реальных систем. Реальные гетеропереходы будут рассмотрены в другой работе.

Мы хотим описать ход потенциала Φ и волновых функций электронов Ψ_e и дырок Ψ_h вблизи гетерограницы в приближении Хартри, в условиях, когда в объеме полупроводника созданы неравновесные электронно-дырочные пары. Тогда слева от гетерограницы (рис. 1) приграничной потенциальной ямой будут захватываться электроны, а справа — дырки.

Концентрацией электронов можно управлять, меняя концентрацию неравновесных электронно-дырочных пар (например, меняя интенсивность внешней подсветки). Будем считать, что температура равна нулю, примеси отсутствуют либо они нейтрализованы захваченными носителями. При увеличении интенсивности внешней подсветки увеличивается энергетическое расстояние между положением квазиуровня Ферми электронов μ_e и дырок μ_h

$$\Delta E_F = \mu_e - \mu_h. \quad (1)$$

Для рассматриваемой модели будет изучаться поведение электростатического потенциала вблизи гетерограницы в зависимости от значений внешних параметров ΔE_F и δ — разрыва зон (который в данной модели предполагается равным в валентной зоне и зоне проводимости). При заданном ΔE_F и δ вблизи гетерограницы образуются заряженные слои электронов и дырок. Поверхностная плотность заряда n_s носителей ка-

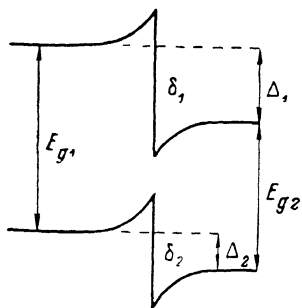


Рис. 1. Гетеропереход второго типа.

кого-нибудь одного знака и распределение заряда в направлении z , перпендикулярном гетерогранице, устроены таким образом, чтобы удовлетворить условию (1).

Низшим приближением, в котором отражаются основные черты поведения квазидвумерных систем, оказывается приближение Хартри. Однако для правильного количественного описания гетероперехода требуется учет обменно-корреляционных поправок. Часть этих поправок, относящаяся к энергии электрон-электронного или дырочно-дырочного взаимодействия, подробно рассматривалась в работах, посвященных вычислению энергии основного состояния квазидвумерного газа на поверхности полупроводника [2]. Для гетерограницы важен учет электронно-дырочных корреляций, но, к сожалению, эта задача до конца не решена, особенно в случае равных плотностей электронов и дырок, как это имеет место на гетерогранице. При этом необходимо учитывать возможность образования поверхностного экситона, особенно при низких поверхностных плотностях электронов и дырок. В случае осциллирующего потенциала (см. ниже) эти эффекты увеличивают глубину первых осцилляций за счет понижения энергии частиц, а вдали от границы обрезают осцилляции там, где для электронно-дырочной пары более выгодным окажется связывание в экситон. Данная работа посвящена качественному описанию поведения системы, вычисления проводятся в приближении Хартри.

В приближении Хартри, в единицах, аналогичных атомным, рассматриваемая система описывается уравнениями

$$\begin{aligned} -\Psi_e'' + \Phi_e \Psi_e &= \epsilon_e \Psi_e, & \Phi'(\infty) = \Phi'(-\infty) &= 0, \\ -\Psi_h'' + \Phi_h \Psi_h &= \epsilon_h \Psi_h, & \Psi_e(\infty) = \Psi_e(-\infty) = \Psi_h(\infty) = \Psi_h(-\infty) &= 0, \\ -\Phi'' &= 8\pi n_S (\Psi_e^2 - \Psi_h^2), \\ \Phi_e &= \Phi(z) \Theta(-z) + (\Phi(z) + \delta_e) \Theta(z), \\ \Phi_h &= -\Phi(z) \Theta(-z) - (\Phi(z) + \delta_h) \Theta(z), \\ \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_e^2(z) dz &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_h^2(z) dz = 1. \end{aligned} \quad (2)$$

Для структуры с равными параметрами справа и слева от перехода $\Psi(z) = \Psi_e(z) = \Psi_h(-z)$, что сильно упрощает систему (2)

$$\begin{aligned} -\Psi'' + \Phi \Psi &= \epsilon \Psi, \\ -\Phi'' &= 8\pi n_S (\Psi^2(z) - \Psi^2(-z)), \\ \Phi_e(z) &= \Phi(z) \Theta(-z) + (\Phi + \delta) \Theta(z). \end{aligned}$$

Здесь $\Theta(z)$ — ступенчатая функция, $\delta = \Phi_e(0_+) - \Phi_e(0_-)$. Величина n_S связана с положением квазиуровня Ферми μ , отсчитанного от $\Phi_e(-\infty)$ обычным соотношением

$$\mu = \epsilon + n_S/g_2, \quad (3)$$

где g_2 — двумерная плотность состояний.

Аналитическое решение этой задачи неизвестно, но она довольно легко решается на простой ЭВМ. Для этого можно записать

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= \Psi_1(-z) \Theta(-z) + \Psi_2(z) \Theta(z), \\ \Phi_e(z) &= \Phi(-z) \Theta(-z) + (\Delta - \Phi(z)) \Theta(z). \end{aligned}$$

(Не путать Δ с разрывами зон $\delta_1 = \delta_2 = \delta$, $\delta = -2\Phi(0) + \Delta$; рис. 1). Функции Φ , Ψ_1 и Ψ_2 заданы на интервале $[0, \infty)$, и систему (2) можно переписать как

$$\begin{aligned} -\Psi_1'' + \Phi \Psi_1 &= \epsilon \Psi_1, \\ -\Psi_2'' + (\Delta - \Phi) \Psi_2 &= \epsilon \Psi_2, \\ -\Phi'' &= 8\pi n_S (\Psi_1^2(z) - \Psi_2^2(z)), \\ \Psi_1(0) &= \Psi_2(0), \\ \Psi_1'(0) &= \Psi_2'(0). \end{aligned} \quad (4)$$

Дальнейшие упрощения получаются, если заметить, что уравнения Хартри автомодельны, т. е. после преобразований

$$\Psi = a^{1/2}\tilde{\Psi}, \quad \varepsilon = a^2\tilde{\varepsilon}, \quad \Phi = a^2\tilde{\Phi}, \quad \Delta = a^2\tilde{\Delta}, \quad n_S = a^3\tilde{n}_S, \quad z = \tilde{z}/a \quad (5)$$

переменные с волной также являются решением уравнений Хартри. Таким образом, из (5) следует, что принципиально различные решения могут

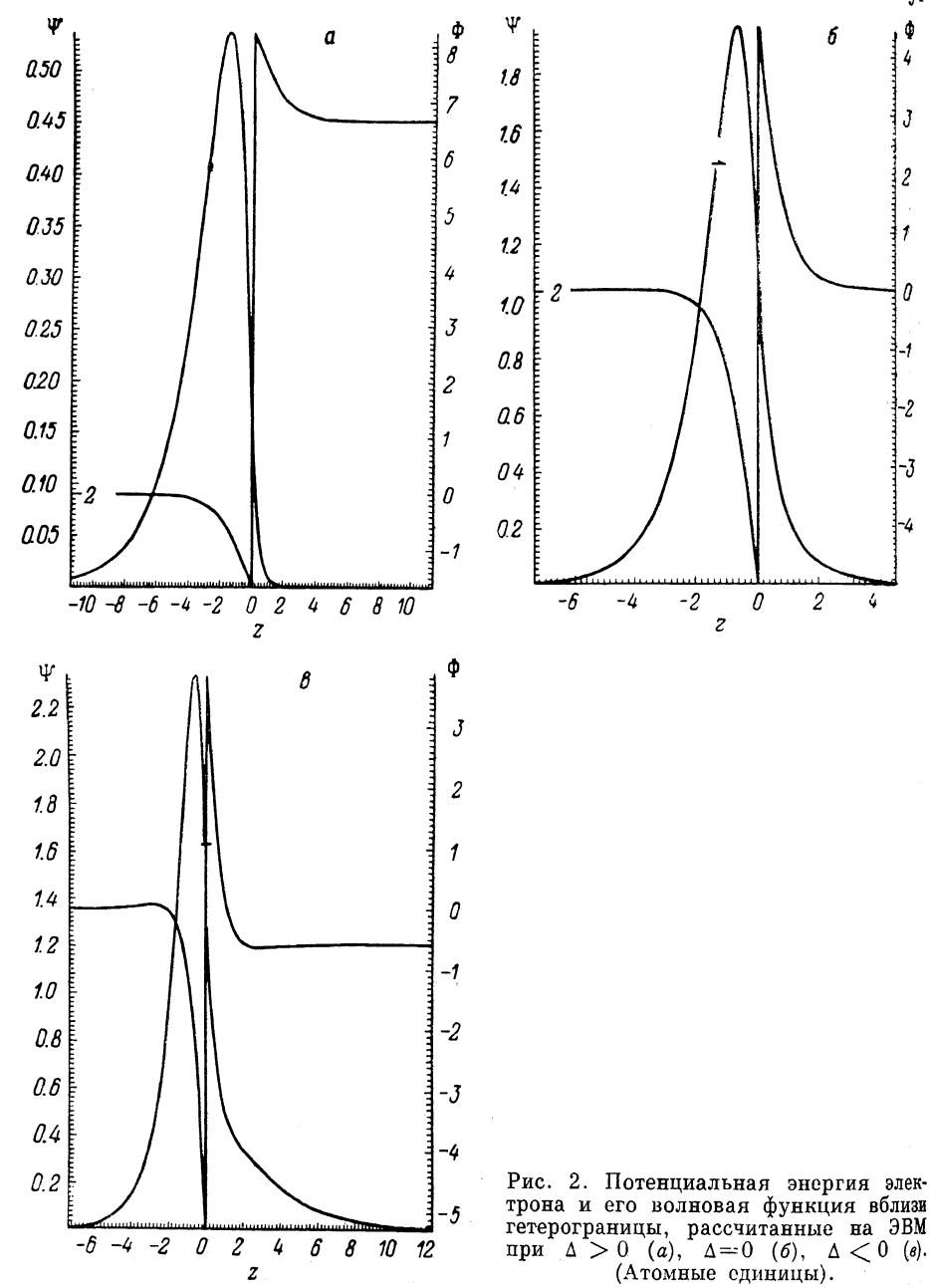


Рис. 2. Потенциальная энергия электрона и его волновая функция вблизи гетерограницы, рассчитанные на ЭВМ при $\Delta > 0$ (а), $\Delta = 0$ (б), $\Delta < 0$ (в). (Атомные единицы).

получаться при различных значениях единственного параметра Δ^3/n_S^3 , а все прочие решения получаются с помощью масштабного преобразования (5).

Система (4) решалась методом, описанным в [3], на ЭВМ. На рис. 2, а, б показаны решения уравнений (4) при $\Delta \geq 0$. При уменьшении Δ до нуля увеличивается проникновение волновой функции под барьер, но

никаких других качественных изменений не происходит. На рис. 2, *в* показано решение с $\Delta < 0$. Этот случай будет подробно рассмотрен ниже.

Выясним, какой случай (*a*, *б* или *в*) реализуется при заданных значениях ΔE_F и δ . При фиксированном δ величина ΔE_F может меняться от $E_g - \delta$ до E_g . С другой стороны, увеличивая n_S при фиксированном δ , мы переходим от случая *a* к случаю *в* (рис. 2). Величина ΔE_F возрастает от $E_g - \delta$ при $n_S = 0$ до значения, соответствующего максимальному n_S . При этом следует помнить, что n_S не может быть слишком большим, так как должно выполняться условие

$$\mu < \min(\Phi_e(\infty), \Phi_e(-\infty)). \quad (6)$$

Таким образом, если условие (6) не нарушено, то гетеропереход описывается уравнениями (4). Это выполняется по меньшей мере для некоторой области ΔE_F от $E_g - \delta$ до $\Delta E_F^0 \leq E_g$.

Выясним теперь, может ли потенциал иметь вид, отличный от приведенного на рис. 2, *a—в*, т. е. всегда ли (4) полностью описывает систему (разумеется, в приближении Хартри). Для этого подробно рассмотрим случай, когда $\Delta E_F = E_g$. Понять поведение системы в этом случае можно, рассмотрев потенциал (рис. 2, *б*). Этот потенциал удобен тем, что с помощью масштабного преобразования (5) его можно перестроить для любого разрыва зон δ .

Итак, рассмотрим рис. 2, *б* для заданного δ . В этом случае известны положение дна поверхностной подзоны ϵ и величина n_S . Тогда из (3) легко получить μ . Если величина μ совпала с $\Phi(\infty) = \Phi(-\infty)$, то из (1) следует, что $\Delta E_F = E_g$ и, таким образом, задача решена. Однако ясно, что в общем случае такого совпадения не будет. Если μ окажется ниже $\Phi(\infty)$, то $\mu_a - \mu_b < E_g$ и в потенциальную яму попадет еще некоторое дополнительное количество носителей. Это приведет к тому, что потенциал будет иметь вид (рис. 2, *в*). К этой ситуации мы еще вернемся, а пока, чтобы закончить рассмотрение, укажем, что если μ окажется выше $\Phi(\infty)$, то это означает, что для таких δ необходимо учитывать заполнение еще одного уровня в яме. Такую ситуацию в данной работе мы не рассматриваем.

При заданной двумерной плотности состояний g_2 можно определить, при каких δ реализуется первый $\mu = 0$, второй $\mu < 0$ или третий $\mu > 0$ случай для потенциала (рис. 2, *б*). Для этого проще всего воспользоваться автотомельностью приближения Хартри и построить график зависимости $\mu(\delta)$ (рис. 3). Воспользовавшись тем, что при $\Delta = 0$ $\delta = 2 [\Phi(\infty) - \Phi(0)]$, получим

$$\mu = \epsilon_0 \frac{\delta}{\delta_0} + \frac{n_S^0}{g_2} \left(\frac{\delta}{\delta_0} \right)^{3/2},$$

где все величины с индексом нуль — константы, которые можно взять из рис. 2, *б*. Область от $\delta = 0$ до точки пересечения графика с осью δ соответствует потенциалу на рис. 2, *в*, точка пересечения — потенциалу на рис. 2, *б* и, наконец, область больших δ — случаю заполнения вышележащих состояний. Следует отметить, что для реальных расчетов необходимо учитывать обменно-корреляционные поправки к энергии, которые существенно расширяют область, где $\mu < 0$ [4].

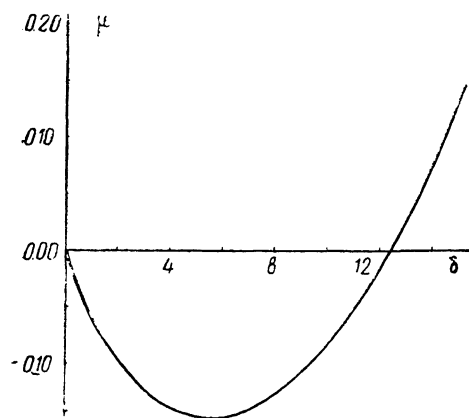
Рассмотрим подробнее случай $\mu < 0$ (по-прежнему считаем $\Delta E_F = E_g$). В этом случае яма захватывает дополнительные носители так, чтобы ΔE_F оказалось равным E_g . При этом потенциал будет иметь вид (рис. 2, *в*). В этом случае μ может оказаться выше «хвоста» потенциала, тогда картина качественно изменится и уравнения (4) будут уже не достаточны для описания системы, так как частицы смогут туннелировать под барьер и справа (на рис. 2) окажется некоторая часть электронов, а слева — дырок. Это вызовет подъем потенциала справа от барьера. В конечном счете в приближении Хартри окажется, что потенциал осциллирует, причем амплитуда колебаний уменьшается, а период увеличивается по мере отхода от гетерограницы. Показать это можно, воспользовавшись рассуж-

дениями, полностью аналогичными тем, что использовались в [3] для доказательства осцилляций в МДП структурах.

Решим систему (4) для такого n_s , при котором μ окажется точно посередине разрыва зоны δ . (Как обусловлено выше, параметры структуры таковы, что при этом оказывается, что $\Delta < 0$). При этом соблюдается условие $\Delta E_F = E_g$, но μ оказывается выше $\Phi_e(\infty)$. (Все рассуждения можно проводить для носителей одного знака, например электронов, помня, что для дырок все происходит симметричным образом). Электроны туннелируют направо, пока справа потенциал не поднимется на величину $|\Delta|/2$. Таким образом, туннелирование продолжается до тех пор, пока не образуется самосогласованный потенциал величиной

$$\Phi_1(\infty) - \Phi_1(0) = \Delta/2. \quad (7)$$

Оценим поверхностную плотность электронов, необходимую для того, чтобы создать такой потенциал. Предположим, что потенциальный барьер



вблизи гетерограницы достаточно высок и волновые функции электронов, локализованных справа и слева от барьера, слабо перекрываются. При этом, хотя левая функция электронов справа есть волновая функция возбужденного состояния, она оказывается антисимметричной комбина-

Рис. 3. Зависимость положения химического потенциала от величины разрыва зон δ для случая рис. 2, б ($\Delta=0$). (Атомные единицы).

цией волновой функции слева и функции, соответствующей основному состоянию справа, рассчитанной для случая, когда барьер бесконечно высок.

Другими словами, чтобы рассчитать эту функцию справа от барьера, необходимо решить следующие уравнения:

$$-\Psi_1'' + \Phi_1 \Psi_1 = \varepsilon_1 \Psi_1, \quad \Psi_1(0) = \Psi_1(\infty) = 0, \quad -\Phi_1'' = 8\pi n_s^{1/2} \Psi_1^2, \quad \Phi_1'(0) = 8\pi n_s^{1/2}, \quad \Phi_1'(\infty) = 0, \quad (8)$$

подобрав $n_s^{1/2}$ так, чтобы было выполнено (7). Отметим, что систему (8) нельзя применять вместо (4) для расчета потенциала на самом гетеропереходе, так как там электроны и дырки не разделены широкой стенкой и взаимное туннелирование электронов и дырок играет заметную роль в формировании потенциала вблизи барьера при нулевых и отрицательных Δ .

Систему (8) достаточно решить при каком-либо одном n_s , так как решения при других n_s можно получить с помощью соотношения (5). Таким образом, если система (8) решена, скажем, для $n_s=1$, то искомое решение можно получить из соотношений

$$n_s^{1/2} = a^2 n_0, \quad \Phi_1 = a^2 \Phi_0, \quad \varepsilon_1 = a^2 \varepsilon_0, \quad z_1 = z/a, \\ a^2 = \Delta/2 [\Phi_0(\infty) - \Phi_0(0)].$$

Следует также учесть, что положение квазиуровня Ферми электронов должно совпадать справа и слева от барьера, а для рассчитанного из (8) потенциала квазиуровень Ферми справа расположен ниже, чем слева, на величину

$$\Delta_1 = \Phi_1(0) = \varepsilon_1 + n_s^{1/2} / g_2. \quad (9)$$

Это означает, что потенциал вновь будет переэкранирован и величина этой переэкранировки в первом приближении будет равна Δ_1 . Продолжая эти рассуждения, получим

$$n_S^K = a_K^3 n_0, \quad \Phi_K = a_K^2 \Phi_0, \quad \varepsilon_K = a_K^2 \varepsilon_0,$$

$$a_K^2 = \Delta_{K-1} / 2 [\Phi_0(\infty) - \Phi_0(0)], \quad \Delta_K = \Phi_K - \varepsilon_K + n_S^K / g_2.$$

Эти формулы полностью аналогичны полученным в [3], там же показано, что Δ_K образуют убывающую геометрическую прогрессию.

На рис. 2, в видна еще одна особенность поведения потенциала при $\Delta < 0$. Даже в случае, когда учитывается только один электронный и один дырочный слой, потенциал имеет дополнительные экстремумы при $z = \pm 3$. Такое поведение потенциала связано с различным характером затухания волновых функций электронов и дырок вдали от гетерограницы. Далеко от границы $\Psi_1 \sim \exp(-\sqrt{|\varepsilon|} |z|)$, $\Psi_2 \sim \exp(-\sqrt{|\varepsilon| + \Delta} |z|)$. Если $\Delta \geq 0$, то $\Psi_2 \leq \Psi_1$ везде слева от барьера, в этом случае всегда $\Psi_1^2 - \Psi_2^2 \geq 0$ и Φ монотонно убывает. Если же $\Delta < 0$, то Ψ_2 убывает медленнее, чем Ψ_1 , и рано или поздно окажется, что $\Psi_1^2 - \Psi_2^2 < 0$. Это означает, что Φ становится выпуклой вниз, так как $-\Phi^2 \sim \Psi_1^2 - \Psi_2^2$, что приведет к появлению дополнительного максимума. Такие осцилляции являются полным аналогом осцилляций, полученных в работе [6] для МДП структур, но гораздо больше последних по амплитуде.

Таким образом, при освещении гетероперехода второго рода может происходить переход от монотонного к немонотонному поведению потенциала вблизи гетерограницы. Немонотонное поведение должно наблюдаться при высоких уровнях возбуждения, когда расстояние между квазиуровнями Ферми близко к E_g . Существует большая область величин разрыва зон, где подобное поведение потенциала может наблюдаться. Расчеты реальных гетеропереходов в приближении Хартри не представляют принципиальных сложностей, однако для сравнения данных расчета с реальным экспериментом требуется корректный учет обменно-корреляционных поправок, что представляет определенные сложности. Мы считаем, однако, что учет этих поправок не приведет к качественному изменению картины.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Баранов А. Н., Джуртанов Б. Е., Именков А. Н., Рогачев А. А., Яковлев Ю. П. // Письма в ЖТФ. 1986. Т. 12. № 11. С. 664—668.
- [2] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985. 415 с.
- [3] Монахов А. М., Рогачев А. А. // ФТТ. 1988. Т. 30, № 4. С. 1153—1160.
- [4] Левин Е. И., Монахов А. М., Рогачев А. А. // ФТП. 1988. Т. 22. № 3. С. 450—454.
- [5] Монахов А. М., Рогачев А. А. // Письма в ЖТФ. 1987. Т. 13. № 14. С. 858—862.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
15 августа 1989 г.