1988 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 30, в. 11
1988 SOLID STATE PHYSICS Vol. 30, № 11

УДК 537.311.322

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЭКСИТОНЫ И АКЦЕПТОРЫ В МДП СТРУКТУРАХ

Н. С. Аверкиев, Г. Е. Пикус, М. Л. Шматов

Рассчитана энергия связи и определены параметры вариационной функции экситона и акцепторного центра, образованных неосновными носителями (дырками), связанными с электронами в приповерхностном слое, или с акцепторами, находящимися на границе диэлектрик—полупроводник. Учитывается экранирование заряда электрона, дырки и акцептора другими свободными электронами приповерхностного слоя. Показано, что в кремниевых МДП структурах (100) поверхностные экситоны могут существовать при концентрации поверхностного заряда n_s порядка 10^{11}—10^{12} см$^{-2}$. Рассчитаны относительные интенсивности линии экситонной люминесценции и полосы, обусловленной рекомбинацией дырки в экситоне со свободными электронами.

В работе [1] была обнаружена люминесценция, обусловленная рекомбинацией неосновных носителей, генерируемых светом, с основными носителями в приповерхностном слое МДП структуры. Соответствующие спектры люминесценции детально исследовались на кремниевых МДП структурах [2, 3] и приповерхностных слоях германия [4-6]. Эти работы поставили вопрос о структуре приповерхностного слоя при наличии заметной концентрации неравновесных носителей обоих знаков. В [1, 2, 4-6] наблюдаемая люминесценция объяснялась образованием вблизи границы двойного слоя — основных и неосновных носителей. В [3, 7] предполагалось, что неосновные носители локализованы на акцепторных центрах, находящихся в объеме полупроводника вблизи границы. В [7] считалось, что указанный механизм рекомбинации со связанными дырками ответствен за появление дополнительной D-линии, спектральное положение которой отличается от S-линии, обнаруженной в [1, 2]. Во всех указанных экспериментах интенсивность возбуждения была сравнительно высокой и соответственно концентрация неосновных носителей относительно высока.

В работе [8] двумя авторами настоящей статьи было показано, что при малых концентрациях неосновных носителей они могут связываться с основными, образуя поверхностные экситоны, энергия которых меньше энергии экситонов в объеме.

В работе [9] новая линия в спектре люминесценции кремниевых МДП структур, обнаруженная авторами при малых уровнях возбуждения, была интерпретирована как линия такого поверхностного экситона. Неосновные носители могут также связываться на примесных центрах, находящихся на границе раздела диэлектрик—полупроводник. В [7] появление D-линии связывалось именно с такими поверхностными акцепторами. Эти поверхностные примесные уровни отличаются от рассмотренных в [10, 11] наличием квантового слоя основных носителей у поверхности. При этом поле объемного заряда отталкивает неосновные носители от поверхности, а экранирование заряда центра подвижными носителями ослабляет связь с ним. Тем не менее, как показывает приведенный ниже расчет, состояния такого рода при низких температурах оказываются устойчивыми. В отличие от спектров люминесценции поверхностных экситонов, содержащих наряду с широкой полосой и интенсивную узкую линию, в спектрах люминесценции рассматриваемых поверхностных центров подобная узкая линия отсутствует.

В работе [8] при расчете энергии связи поверхностного экситона не учитывалось экранирование заряда рассматриваемой пары другими подвижными основными носителями. Также не принимались во внимание требования, накладываемые на волновую функцию электрона в экситоне условием ее ортогональности к волновым функциям свободных электронов, лежащих ниже уровня Ферми.

Цель данной работы — расчет энергии связи и спектров люминесценции поверхностных экситонов и примесных центров с учетом указанных эффектов и соответственно определение области концентрации поверхностного заряда, в которой возможно существование таких связанных состояний. В связи с этим мы начнем с расчета потенциала взаимодействия при наличии экранирующего слоя подвижных основных носителей.

1. Экранирование кулоновского взаимодействия

Для определения поля точечного заряда e, помещенного в точку $\mathbf{r}_0$, при наличии слоя квазидвумерных электронов в приповерхностной области необходимо решить уравнение Пуассона

$$\varepsilon(z)\nabla^2\varphi = -4\pi\left[e\delta(z-z_0)\delta(\rho)+Q\right]. \tag{1}$$

Здесь z, ρ — координаты по нормали к слою и в плоскости слоя соответственно; Q — плотность наведенного заряда. Предполагается, что $\rho_e=0$, $z_0>0$. В полупроводнике, т. е. при $z>0$, $\varepsilon(z)=\varepsilon$; в диэлектрике при $z<0$ $\varepsilon(z)=\varepsilon_1$. Скачок диэлектрической проницаемости на границе раздела приводит к скачку поля на границе

$$\varepsilon_1\frac{\partial\varphi}{\partial z}\bigg|_{z=0^-}=\varepsilon\frac{\partial\varphi}{\partial z}\bigg|_{z=0^+}. \tag{2}$$

Если поле пробного заряда не меняет волновую функцию электронов $\psi(z)$, то при $E_F\gg kT$, где E_F — уровень Ферми для квазидвумерных электронов, величина Q в приближении Томаса—Ферми равна

$$Q(\rho,z)=-e^2f(z)\frac{\partial n_s}{\partial E_F}\bar{\varphi}(\rho), \tag{3}$$

где n_s — поверхностная концентрация электронов; $\bar{\varphi}(\rho)$ — усредненный по координате z потенциал, действующий на электрон

$$\bar{\varphi}(\rho)=\int_0^\infty\varphi(\rho,z)f(z)\,dz,\qquad f(z)=|\psi(z)|^2. \tag{4}$$

Для двумерных или квазидвумерных электронов [1]

$$\partial n_s/\partial E_F=g_v m_\parallel^e/\pi\hbar^2. \tag{5}$$

Здесь g_v — число эквивалентных экстремумов (для поверхности (100) Si $g_v=2$), $m_\parallel^e$ — эффективная масса электрона в плоскости слоя. Отсюда для $\varphi(\mathbf{r})$ получаем известное уравнение [11]

$$z>0:\ \nabla^2\varphi-2q_sf(z)\bar{\varphi}(\rho)=-4\pi\frac{e}{\varepsilon}\delta(z-z_0)\delta(\rho),$$
$$z<0:\ \nabla^2\varphi=0, \tag{6}$$

[1] Формула (3), предполагающая линейное экранирование, при $\bar{\varphi}(\rho)<0$ (экранирование заряда электрона) справедлива при $|\bar{\varphi}|<E_F/e$. При $\bar{\varphi}(\rho)>0$ (экранирование заряда дырки) она применима и при $\bar{\varphi}\gtrsim E_F/e$, так как для двумерного электронного слоя $\partial n_s/\partial E_F$ не зависит от n_s.

где $q_s=2g_v/a_B^*$, a_B — боровский радиус для электрона, $a_B=\hbar^2\varepsilon/(m_{\parallel}^* e^2)$. В отличие от [12] мы найдем решение уравнения (6) при произвольной функции $f(z)$. Разлагая $\varphi(\mathbf{r})$ в интеграл Фурье—Бесселя

$$\varphi(\mathbf{r})=\int_0^\infty J_0(\rho q)\, q\Phi_0(q,\ z)\,dq, \tag{7}$$

получим уравнение для $\Phi_0(q,\ z)$

$$z>0:\ \frac{d^2\Phi_0}{dz^2}-q^2\Phi_0-2q_s f(z)\,\bar{\Phi}_0(q)=-\frac{2e}{\varepsilon}\,\delta(z-z_0),$$

$$z<0:\ d^2\Phi_0/dz^2-q^2\Phi_0=0, \tag{8}$$

где $\bar{\Phi}_0(q)=\int\limits_0^\infty f(z)\,\Phi_0(q,\ z)\,dz$. Уравнения (8) надо решить при граничных условиях

$$\varepsilon_1\frac{d\Phi_0}{dz}\bigg|_{z=0^-}=\varepsilon\,\frac{d\Phi_0}{dz}\bigg|_{z=0^+},\qquad \Phi_0(z)\,|_{z\to\pm\infty}=0. \tag{9}$$

Если не учитывать зависимость $\varepsilon(q)$, решение этих уравнений можно записать в виде

$$z<0:\ \Phi_0(q,\ z)=\frac{2e}{q\varepsilon(1+\xi)}\,e^{q(z-z_0)}-\frac{2q_s\bar{\Phi}_0(q)}{q(1+\xi)}\,e^{qz}\int_0^\infty f(z)\,e^{-qz}dz, \tag{10а}$$

$$z>0:\ \Phi_0(q,\ z)=\frac{e}{q\varepsilon}\left[e^{-q|z-z_0|}+\frac{1-\xi}{1+\xi}\,e^{-q(z+z_0)}\right]-$$

$$-\frac{q_s}{q}\,\bar{\Phi}_0(q)\left[\int_0^\infty f(z')\,e^{-q|z-z'|}dz'+\frac{1-\xi}{1+\xi}\int_0^\infty f(z')\,e^{-q(z+z')}dz'\right], \tag{10б}$$

здесь $\xi=\varepsilon_1/\varepsilon$. Из (9) следует, что

$$\bar{\Phi}_0(q)=\frac{e}{\varepsilon q}\left\{\int_0^\infty e^{-q|z-z_0|}f(z)\,dz+\frac{1-\xi}{1+\xi}\int_0^\infty e^{-q(z+z_0)}f(z)\,dz\right\}\times$$

$$\times\left\{1+\frac{q_s}{q}\left[\int_0^\infty f(z)\,dz\int_0^\infty f(z')\,e^{-q|z-z'|}dz'+\left(\int_0^\infty f(z)\,e^{-qz}dz\right)^2\frac{1-\xi}{1+\xi}\right]\right\}^{-1}. \tag{11}$$

При $f(z)=\delta(z)$

$$z<0:\ \Phi_0(q,\ z)=\frac{e}{\bar{\varepsilon}}\,\frac{1}{q+\tilde{q}_s}\,e^{q(z-z_0)}, \tag{12а}$$

$$z>0:\ \Phi_0(q,\ z)=\frac{e}{q\varepsilon}\left\{e^{-q|z-z_0|}+e^{-q(z+z_0)}\left[\frac{\varepsilon-\varepsilon_1}{2\bar{\varepsilon}}-\frac{\varepsilon}{\bar{\varepsilon}}\,\frac{\tilde{q}_s}{q+\tilde{q}_s}\right]\right\}, \tag{12б}$$

где $\tilde{q}_s=q_s\bar{\varepsilon}/\varepsilon$, $\bar{\varepsilon}=(\varepsilon+\varepsilon_1)/2$. Подставив (12) в (17) и учитывая, что

$$\int_0^\infty J_0(q\rho)\,e^{-qz}\,\frac{dq}{q+q_s}=\int_0^\infty e^{-q_s z'}\,\frac{dz}{[\rho^2+(z+z')^2]^{1/2}}, \tag{13}$$

для потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ получим

$$z<0:\ \varphi(\mathbf{r})=\frac{e}{\bar{\varepsilon}}\left\{\frac{1}{[\rho^2+(|z|+z_0)^2]^{1/2}}-\tilde{q}_s\int_0^\infty\frac{e^{-\tilde{q}_s z'}dz'}{[\rho^2+(|z|+z_0+z')^2]^{1/2}}\right\}, \tag{14а}$$

$$z>0:\ \varphi(\mathbf{r})=\frac{e}{\varepsilon}\left\{\frac{1}{[\rho^2+(z-z_0)^2]^{1/2}}+\frac{\varepsilon-\varepsilon_1}{2\bar{\varepsilon}}\,\frac{1}{[\rho^2+(z+z_0)^2]^{1/2}}-\right.$$

$$-\frac{\varepsilon}{\bar{\varepsilon}}\tilde{q}_s\int\limits_0^\infty \frac{e^{-\tilde{q}_s z'}dz'}{[\rho^2+(z+z_0+z')^2]^{1/2}}\Bigg\}. \tag{14б}$$

Видно, что экранирование приводит к появлению заряда зеркального изображения обратного знака, размазанного по z от $z=-z_0$ до $z=-\infty$. При $\tilde{q}_s\to\infty$ этот заряд локализован в точке $z=-z_0$.

2. Волновая функция и энергия поверхностного экситона

Как и в [8], выберем вариационную функцию экситона в виде

$$\psi_{ex}=A_{ex}z_e z_h e^{-(\alpha_e z_e+\alpha_h z_h+\alpha_s\rho)}e^{i\mathbf{KR}}, \tag{15}$$

где

$$A_{ex}^2=(32/\pi)\,\alpha_e^3\alpha_h^3\alpha_s^2,\qquad \rho=\rho_e-\rho_h,\qquad \mathbf{R}=(m_\parallel^e\rho_e+m_\parallel^h\rho_h)/(m_\parallel^e+m_\parallel^h),$$

$\mathbf{r}_e\,(\rho_e,\ z_e)$, $\mathbf{r}_h\,(\rho_h,\ z_h)$ — координаты электрона и дырки; $m_\parallel^h$ — эффективная масса дырки в плоскости слоя; $\mathbf{K}$ — волновой вектор экситона. Гамильтониан электронно-дырочной пары имеет вид (без учета обменного взаимодействия)

$$\mathscr{H}_{ex}=-\frac{\hbar^2}{2m_\parallel^e}\nabla_{\perp,e}^2-\frac{\hbar^2}{2m_\parallel^h}\nabla_{\perp,h}^2-\frac{\hbar^2}{2m_\perp^e}\frac{\partial^2}{\partial z_e^2}-\frac{\hbar^2}{2m_\perp^h}\frac{\partial^2}{\partial z_h^2}-eV_0(z_e)+eV_0(z_h)-$$

$$-e\varphi_{eh}(\mathbf{r}_e,\ \mathbf{r}_h)-e\varphi_e(z_e). \tag{16}$$

Здесь $\nabla_\perp^2=(1/\rho)\,\partial/\partial\rho\ \ \rho\,\partial/\partial\rho+(1/\rho^2)\,\partial^2/\partial\varphi^2$; $m_\perp^{e,\,h}$ — эффективные массы электрона и дырки в направлении z; $V_0\,(z)$ — потенциал в канале; $\varphi_e\,(z_e)$ — потенциал сил изображения для электрона; $\varphi_{eh}\,(\mathbf{r}_e,\ \mathbf{r}_h)$ — потенциал взаимодействия электрона и дырки, включающий помимо потенциала φ и взаимодействие дырки с наводимым ею зарядом зеркального изображения $\varphi_h\,(z_h)$. Для $\varphi\,(\mathbf{r}_e,\ \mathbf{r}_h)$ мы используем выражение для тонкого двумерного слоя (14б) при $\rho=\rho_e-\rho_h$, $z=z_h$, $z_0=z_e$. Выражение для $\varphi_h\,(z_h)$ получается из (14б) исключением первого слагаемого, введением общего множителя $-1/2$ и подстановкой $\rho=0$, $z=z_0=z_h$:

$$\varphi(z)=-\frac{e}{\varepsilon}\,\frac{\varepsilon-\varepsilon_1}{\varepsilon+\varepsilon_1}\,\frac{1}{4z}+\frac{e}{2\bar{\varepsilon}}\,\tilde{q}_s\int\limits_0^\infty\frac{e^{-\tilde{q}_s z'}dz'}{2z+z'}. \tag{17}$$

Мы предположим, что величина α_e для электрона в экситоне сохраняется такой же, как и для свободного электрона в слое, для которого вариационная волновая функция имеет вид

$$\psi_{e0}=2\alpha_e^{3/2}z_e e^{-\alpha_e z_e}e^{i\mathbf{k}_e\rho_e}. \tag{18}$$

Это предположение подтверждается расчетом, проведенным в [8]. Поэтому в отличие от [8] при расчете экситонной волновой функции в данной работе α_e в (15) не рассматривается как вариационный параметр. Значение α_e и энергия электрона в канале E_0, отсчитанная от дна зоны проводимости, определялись, используя метод, развитый в [11, 13]. Параметр α_e находился из минимума полной энергии электронов в приближении Хартри. При этом, согласно [13], учитывается действие на электрон потенциала $V_0\,(z)$, формирующегося в результате экранирования внешнего поля, и сил изображения, возникающих вследствие неравенства диэлектрических проницаемостей полупроводника и диэлектрика. Мы также учли взаимодействие электрона с зарядом, наведенным им в двумерном слое, рассчитанное по (17). Поскольку эта формула не учитывает нелинейность экранирования (см. сноску 1) и тем самым завышает $|\,E_0\,|$, мы ниже приводим оба значения E_0 — рассчитанные без учета (17) и с его учетом в первом порядке теории возмущений.

При решении уравнения Пуассона с плотностью заряда — $e\rho = -en_s\,|\psi_{e0}|^2$, определяемой (18), выражение для $V_0(z)$ имеет вид (см., например, [5])

$$V_0(z) = \frac{6\pi e n_s}{\varepsilon \alpha_e}\left(\frac{2\alpha_e^2 z^2}{3} + \frac{4\alpha_e z}{3} + 1\right) e^{-2\alpha_e z}. \qquad (19)$$

Как показывает расчет [11, 13], обменное взаимодействие между электронами дает существенный вклад в энергию связи $|E_0|$, однако слабо изменяет величину α_e. Поэтому среднее значение обменной энергии E_{exc} можно находить в первом порядке теории возмущений. Соответственно мы прибавляем к энергии связи, найденной с учетом (19) и сил изображения, значение E_{exc}, определенное согласно [13] с использованием ранее вычисленного α_e. Поскольку E_{exc} не очень сильно зависит от импульса электрона $\hbar k_e$ [13], мы принимаем E_{exc} одинаковым для всех электронов и равным значению, рассчитанному для $k_e = k_F$. Кроме того, мы не учитываем возможного отличия E_{exc} для электрона в экситоне и свободного электрона в слое. Отметим, что в работе [8] потенциал в канале выбирался в виде

$$V_0(z) = V_0 e^{-\varkappa z}, \qquad (20)$$

при этом $V_0\varkappa = 4\pi e n_s/\varepsilon$, а отношение $V_0/\varkappa$ подбиралось так, чтобы рассчитанная по (18), (20) энергия связи $|E_0|$ совпадала с приведенной [14]. Расчет экранированного потенциала, проведенный в разделе 1, строго применим, если длина экранирования $\tilde{q}_s^{-1}$ существенно больше межэлектронного расстояния в плоскости границы, т. е. число электронов на площади $\tilde{q}_s^{-2}$, равное $n_s\tilde{q}_s^{-2} \gg 1$. Для n-канала в кремнии (100) $\tilde{q}_s \approx 6 \times 10^6$ см$^{-1}$ и в области n_s, в которой существуют экситоны, имеет место обратное неравенство $n_s\tilde{q}_s^{-2} \ll 1$. Очевидно, что экранирование не может осуществляться на длине, меньшей межэлектронного расстояния. Поэтому мы при дальнейших расчетах заменим $\tilde{q}_s$ в (12)—(14) и (17) на $n_s^{1/2}$.
Энергия экситона $E = \langle\psi_{\text{ex}}^* \mid \mathscr{H}_{\text{ex}} \mid \psi_{\text{ex}}\rangle$ с гамильтонианом (16) и вариационной функцией (15) может быть вычислена аналитически. Мы не будем приводить здесь соответствующие весьма громоздкие выражения, отметим лишь, что расчет вклада $\langle\psi_{\text{ex}}^* \mid e\varphi_{eh} \mid \psi_{\text{ex}}\rangle$ существенно упрощается, если записать $\varphi(\mathbf{r})$ в виде (7) и выполнить вначале независимые интегрирования по ρ и z_e, z_h с $\Phi_0(q, z_e, z_h)$, определяемой (12б), а затем проинтегрировать по q. Далее вариационные параметры α_h и α_3 определялись минимизацией $E(\alpha_h, \alpha_3)$ путем численных расчетов на ЭВМ. При этом предполагалось, что слой основных носителей образуется электронами на поверхности (100) кремния. Соответственно [11] полагалось $m_{\parallel}^e = 0.19\,m_0$, $m_{\perp}^e = 0.916 m_0$, $m_{\parallel}^h = m_{\perp}^h = 0.5 m_0$, $\varepsilon = 11.5$, $\varepsilon_1 = 3.9$ (m_0 — масса свободного электрона). Сложный характер валентной зоны не учитывался. Вариационный расчет показал, что при $n_s \geqslant 6 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$ величина α_3 оказывается меньше k_F. Это указывает на то, что при таких концентрациях становятся существенными ограничения, накладываемые условием ортогональности волновой функции электрона в экситоне к волновым функциям свободных электронов с $k_e \leqslant k_F$. Нормированную волновую функцию

$$\psi_\rho = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\alpha_3 e^{-\alpha_3 \rho} \qquad (21)$$

можно разложить в ряд Фурье и записать в виде

$$\psi_\rho = \sum_{k=0}^{\infty} c_k e^{i\mathbf{k}\rho}, \quad c_k = 2\sqrt{2\pi}\,\alpha_3^2\,(\alpha_3^2 + k^2)^{-3/2}. \qquad (22)$$

При $K=0$, когда $k_e = -k_h = k$, условию ортогональности можно удовлетворить, ограничив суммирование значениями $k \geqslant k_F$. В этом случае c_k приобретает вид

Таблица 1

Квантоворазмерный слой, поверхностный экситон и поляризационное притяжение дырки к слою

$n_s \cdot 10^{-11}$, $см^{-2}$	E_0, мэВ	E_0^*, мэВ	$\alpha_e \cdot 10^{-6}$, $см^{-1}$	E_F, мэВ	$k_F \cdot 10^{-6}$, $см^{-1}$	E^s_{ex}, мэВ	E^{s*}_{ex}, мэВ	E^s_h, мэВ	$\alpha_h \cdot 10^{-6}$, $см^{-1}$	$\alpha_3 \cdot 10^{-6}$, $см^{-1}$	$\alpha^0_h \cdot 10^{-6}$, $см^{-1}$	E_h, мэВ
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1	−5.6	−8.5	1.66	0.6	0.56	12.1	15.0	0.28	1.10	1.3	0.19	6.8
2	−8.0	−12.0	2.21	1.3	0.79	14.2	18.2	0.35	1.20	1.3	0.24	7.1
4	−11.8	−17.2	2.87	2.5	1.12	17.8	23.2	0.44	1.40	1.3	0.29	8.0
6	−14.4	−20.8	3.35	3.8	1.37	18.1	24.5	0.50	1.71	$\sqrt{2}\,k_F$	0.33	7.0
8	−17.0	−24.2	3.73	5.0	1.59	19.3	26.5	0.54	1.89	$\sqrt{2}\,k_F$	0.35	6.8
10	−19.3	−27.2	4.06	6.3	1.77	19.6	27.5	0.58	2.01	$\sqrt{2}\,k_F$	0.37	6.0
20	−28.3	−38.9	5.25	12.6	2.51	13.6	24.2	0.69	2.41	$\sqrt{2}\,k_F$	0.43	−2.8
40	−42.1	−56.3	6.73	25.2	3.54	−0.9	13.3	0.82	2.96	$\sqrt{2}\,k_F$	0.51	−18.6
60	−52.6	−69.4	7.79	37.8	4.34	−16.2	0.6	0.91	3.32	$\sqrt{2}\,k_F$	0.55	−39.9
80	−62.0	−80.9	8.63	50.4	5.01	−47.2	−28.3	0.97	3.69	$\sqrt{2}\,k_F$	0.58	−59.8
100	−69.7	−90.4	9.34	63.0	5.60	−69.7	−49.0	1.01	3.80	$\sqrt{2}\,k_F$	0.61	−77.4

$$c_k = 2\sqrt{2\pi}\,\frac{\alpha^2 + k_F^2}{(\alpha^2 + k^2)^{3/2}}. \qquad (23)$$

В работе [15] при расчете энергии связи двумерного экситона в квантовой яме используется аналогичная функция, в которой α^2 заменено на $b^2 - k_F^2$ и b^2 рассматривается как вариационный параметр. Соответственно

$$c_k = 2\sqrt{2\pi}\,\frac{b^2}{\left(k^2 + b^2 - k_F^2\right)^{3/2}}. \qquad (24)$$

Согласно [15], b^2 существенно зависит от ширины ямы и в области n_s, где требования ортогональности становятся существенными, величина b^2 меняется в интервале (0.3—1) k_F^2. Однако аналитический расчет кулоновской энергии с функцией (24) даже в простейшем двумерном случае, когда $V(\mathbf{r}) \sim 1/\rho$, оказывается невозможным. Поэтому мы для приближенного учета условий ортогональности выберем величину α_3 так, чтобы значение $\bar{k}^2 = \alpha_3^2$ совпало с ее величиной, вычисленной по (24): $\bar{k}^2 = b^2 + k_F^2$, выбрав $b^2 = k_F^2$. Соответственно при тех значениях, когда вариационный расчет приводит к $\alpha_3 < \sqrt{2}k_F$, мы положим $\alpha_3 = \sqrt{2}k_F$. Конечно, при этом мы не обеспечиваем точного выполнения условий ортогональности и, хотя и завышаем кинетическую энергию $\hbar^2\bar{k}^2/(2\mu)$, $\mu^{-1} = (m^e_{\|})^{-1} + (m^h_{\|})^{-1}$, но и увеличиваем потенциальную. Это видно из того, что значение $|\psi_s(0)|^2$ для функции (21) равно $2\alpha_3^2/\pi = 4k_F^2/\pi$ вместо величины $2b^2/\pi$ для функции (24).[2]

Результаты расчета приведены в табл. 1. Звездочкой помечены результаты, получаемые при учете поляризации квантоворазмерного слоя электроном с помощью выражения (17) (такое же обозначение используется в табл. 2). В стб. 2—6 указаны значения энергии электрона E_0 и E_0^*, отсчитанные от дна зоны проводимости при $z \to \infty$; величины α_e, рассчитанной по [11, 13]; энергии Ферми E_F, отсчитанной от E_0, и k_F. В стб. 7, 8 показаны значения энергии связи экситона E^s_{ex} и E^{s*}_{ex}, т. е. разность между

[2] По-видимому, можно более точно учесть условие ортогональности, выбрав функцию ψ_ρ в виде $(b + a\rho)\exp(-\alpha\rho)$. Связь a и α с b определяется из условия нормировки и требования $\bar{k}^2 = k_F^2 + b^2$, а величину b можно рассматривать как вариационный параметр.

шириной запрещенной зоны и энергией экситона. В стб. 9 приведена энергия связи свободной дырки E_h^s вблизи поверхности, обусловленная взаимодействием дырки с наведенным ею зеркальным зарядом. Эта энергия вычисляется аналогичным образом с вариационной функцией, отличающейся от (18) заменой α_e на α_h^0. Соответствующий гамильтониан включает помимо кинетической энергии дырки потенциал $V_0(z)$ и энергию взаимодействия с наведенным зарядом, определяемую (17).

Поскольку при распаде экситона на свободную пару электрон переходит на уровень Ферми, то энергия, необходимая для распада на такую пару, равна $\Delta E_h = E_{ex}^s - E_h^s + E_F + E_0$. В табл. 1 также приведены значения α_h и α_3, позволяющие судить о виде волновой функции экситона, и значение α_h^0 для дырки, удерживаемой вблизи поверхности силами зеркального изображения. Очевидно, что поверхностный экситон является устойчивым по отношению к выходу в объем при энергии связи $E_{ex}^s > E_{ex}^V$, где E_{ex}^V — энергия связи экситона в объеме, равная для кремния 14.7 мэВ. Другим условием стабильности экситона является малость kT по сравнению с ΔE_h. При $kT \simeq \Delta E_h$ поверхностный экситон будет распадаться на свободную пару поверхностных носителей. Из табл. 1 видно, что в области концентраций n_s порядка 10^{11}—10^{12} см$^{-2}$ условия стабильности поверхностного экситона выполняются. Как при малых, так и при больших значениях n_s энергия связи поверхностного экситона становится меньше E_{ex}^V.

3. Поверхностный акцептор

Энергия связи дырки с зарядом $-e$, находящимся на поверхности, рассчитывалась с использованием вариационной функции, подобной (15)

$$\psi_h^a = \left(\frac{8}{\pi}\right)^{1/2} \alpha_h^{3/2} \alpha_3 z e^{-\alpha_h z - \alpha_3 \rho}. \tag{25}$$

Предполагалось, что акцепторный центр находится в точке $z=0$, $\rho=0$ и соответственно гамильтониан $\mathscr{H}_a$ включает кроме кинетической энергии дырки и потенциала $eV_0(z)$ энергию взаимодействия дырки с заряженным центром, определяемую формулами (14б) или (12б) с $z_e=0$, и с наведенным зарядом, определяемую по (17). Расчет энергии связи акцептора проводился тем же методом, что и для экситона. Результаты вычислений приведены в табл. 2. В стб. 2 указана энергия связи дырки на акцепторе E_a, отсчитанная от вершины валентной зоны при $z \to \infty$, в стб. 3 — энергия ионизации E_{ia} с образованием дырки, удерживаемой силами зеркального изображения, т. е. разность $E_a - E_h^s$. Кроме того, приведены значения параметров α_3 и α_h для акцептора. Видно, что E_{ia} превышает

Таблица 2

Поверхностный акцептор и локализация пары на поверхности без образования экситона

$n_s \cdot 10^{-11}$, см$^{-2}$	E_a, мэВ	E_{ia}, мэВ	$\alpha_h \cdot 10^{-6}$, см$^{-1}$	$\alpha_3 \cdot 10^{-6}$, см$^{-1}$	ΔE_s, мэВ	ΔE_s^*, мэВ	ΔE_a, мэВ	ΔE_a^*, мэВ
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	2.37	2.09	0.9	0.7	5.3	8.2	7.3	10.3
2	2.24	1.89	0.9	0.7	7.1	11.1	9.0	12.9
4	2.11	1.67	0.9	0.7	9.7	15.1	11.4	16.8
6	1.96	1.46	0.9	0.6	11.1	17.5	12.6	19.0
8	1.93	1.39	0.9	0.6	12.5	19.7	13.9	21.1
10	1.90	1.22	0.9	0.6	13.6	21.5	14.9	22.8
20	1.72	1.03	1.0	0.5	16.4	27.0	17.4	28.1
40	1.70	0.88	1.0	0.5	17.7	31.9	18.6	32.8
60	1.64	0.73	1.0	0.5	15.7	32.5	16.4	33.3
80	1.64	0.67	1.0	0.4	12.6	31.5	13.2	32.2
100	1.64	0.63	1.1	0.5	7.7	28.4	8.3	29.1

1 мэВ в интервале n_s $(1-20)\cdot 10^{11}$ см$^{-2}$. Для перехода дырки из экситона на акцептор с выбросом электрона на уровень Ферми требуется энергия $\Delta E_{ha}=-E_a+E^s_{\text{ex}}+E_F+E_0$. Из табл. 2 следует, что $\Delta E_{ha}>0$ в интервале n_s $(1-10)\cdot 10^{11}$ см$^{-2}$.

Поверхностные состояния дырок являются устойчивыми, если сумма энергии связи дырки и энергии связи электрона на уровне Ферми, отсчитанная от дна зоны в объеме, превышает энергию связи объемного экситона. В обратном случае становится выгодным уход пар в объем с образованием свободного экситона (предполагается, что при освещении все примесные уровни в объеме заполнены и нейтральны). Соответствующие суммарные энергии связи $\Delta E_s=-E_0-E_F+E^s_h$ и $\Delta E_z=-E_0-E_F+E^s_a$, а также ΔE^*_s и ΔE^*_a приведены в табл. 2. Видно, что при n_s порядка $10^{11}-10^{12}$ см$^{-2}$ удержание дырки поляризационными силами и тем более связывание на акцептор энергетически выгодны. Следует иметь в виду, что вариационная функция для дырки, аналогичная (18), занижает энергию связи. В [6] было показано, что замена функции, подобной (18), функцией

$$\psi(z_h)=0 \quad \text{при} \quad z_h\leqslant a, \quad \psi(z_h)=2\alpha^{3/2}(z_h-a)\,e^{-\alpha(z_h-a)} \quad \text{при} \quad z_h>a \tag{26}$$

дает заметное увеличение энергии связи (аналитический расчет энергии связи экситона или акцептора с функцией (26) оказывается невозможным). Также надо учитывать, что при больших значениях n_s начинается заполнение следующего уровня размерного квантования электронов.

4. Форма линии экситонной люминесценции

Поскольку равновесная функция распределения экситонов больцмановская, то пик экситонной люминесценции должен иметь ширину порядка kT. Случайный потенциал примесей, расположенных в слое диэлектрика или в полупроводнике, может приводить к уширению этого пика. Интенсивность экситонного пика определяется интегралом перекрытия волновых функций электрона и дырки в экситоне. При этом необходимо учесть, что в кремнии рекомбинация электрона и дырки происходит с излучением или поглощением фонона с волновым вектором, близким к волновому вектору электрона k_0 в точке экстремума Δ. Поэтому полная интенсивность излучения

$$I_{\text{ex}}=c\sum_{k'}\left|\int \psi^s_{\text{ex}}(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_h)\Big|_{\mathbf{r}_e=\mathbf{r}_h} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}_e}d^3\mathbf{r}_e\right|^2. \tag{27}$$

Константа c определяется матричными элементами для переходов с участием фотона и фонона, рассчитанными на соответствующих блоховских функциях, и зависит от типа излучаемого фонона [16]. Величина $\mathbf{k}'$ в (27) представляет собой волновой вектор фонона, отсчитанный от точки $\mathbf{k}_0$. В силу правил отбора поперечная компонента $\mathbf{k}_\perp'=\mathbf{K}$, где $\mathbf{K}$ — волновой вектор экситона. Подставив (15) в (27), после интегрирования по r_e и $k'_\parallel$ получим для I_{ex} следующее выражение:

$$I_{\text{ex}}=\frac{3}{4}\pi c A^2_{\text{ex}}(a_e+a_h)^{-5}. \tag{28}$$

Дырка в экситоне может также рекомбинировать с одним из свободных электронов приповерхностного слоя; при этом электрон, связанный в экситоне, выбрасывается в состояния, находящиеся выше уровня Ферми. Соответствующая полоса люминесценции простирается в длинноволновую сторону от экситонной линии, и ее ширина $\Delta\omega\approx E_F/\hbar+\hbar a_3^2/(2m^e_\parallel)$. Полная интенсивность излучения в полосе

$$I_b=c\sum_{k<k_F}\sum_{k''>k_F}\sum_{k'}\left|\int\psi^*_{e\mathbf{k}''}(\mathbf{r}_e)\,d^3\mathbf{r}_e\int\psi_{\text{ex}}(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_h)\,\psi_{e\mathbf{k}}(\mathbf{r}_h)\,e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}_h}d^3\mathbf{r}_h\right|^2. \tag{29}$$

Здесь $\mathbf{k}$ — волновой вектор электрона, рекомбинирующего с дыркой из экситона, а $\mathbf{k}''$ — выбрасываемого электрона.

Как известно [16-19], взаимодействие этого электрона с вырожденным электронным газом приводит к появлению особенностей в спектре излучения при энергии $E(k'')\simeq E_F$. Однако учет этой особенности мало сказывается на интегральной интенсивности, и мы ее рассчитаем по (29), подставляя соответствующие функции (15) и (18). Согласно правилам отбора, в этом случае $\mathbf{k}_{\perp}'=-\mathbf{k}''+\mathbf{k}+\mathbf{K}$ и при $K \ll k_F$

$$I_b=\frac{3\pi}{32}c\frac{A_{\mathrm{ex}}^2\alpha_3^2k_F^2}{(a_e+a_h)^5}(\alpha_3^2+k_F^2)^{-2}. \tag{30}$$

Из (28) и (30) следует, что отношение интенсивностей широкой полосы и экситонного пика равно

$$\frac{I_b}{I_{\mathrm{ex}}}=\frac{\pi}{4g_v}\frac{n_s}{\alpha_3^2}\left(1+\frac{2\pi n_s}{g_v\alpha_3^2}\right)^{-2}. \tag{31}$$

Поскольку мы приняли $\alpha_3 \geqslant \sqrt{2k_F}$, то в этом случае $I_b/I_{\mathrm{ex}} \leqslant 1/36$. Однако это значение, по-видимому, сильно занижено, так как замена функции (24) на (21), как указано выше, завышает значение $|\psi_\rho(0)|^2$. При использовании функции (24) расчет I_{ex} по (27) приводит к выражению, отличающемуся от (28) заменой α_3^2 на $b^2-k_F^2$ в A_{ex}^2. Аналогично расчет I_b по (29) приводит к выражению, подобному (30)

$$I_b=\frac{3\pi}{32}cA_{\mathrm{ex}}^2\frac{k_F^2}{b^2}(a_e+a_h)^{-5}, \tag{32}$$

где также в A_{ex}^2 α_3^2 заменено на b^2. Отсюда следует, что

$$\frac{I_b}{I_{\mathrm{ex}}}=\frac{1}{8}\frac{k_F^2}{b^2}=\frac{\pi n_s}{4g_vb^2}. \tag{33}$$

Видно, что при $b^2=k_F^2/3$ это отношение равно 3/8.

Как показывают приведенные выше расчеты, наблюдение люминесценции поверхностных экситонов возможно лишь при сравнительно низкой плотности основных носителей в канале. При таких значениях n_s флуктуации потенциала, вызываемые заряженными примесями в слое диэлектрика и на его границе с полупроводником, могут быть сравнимы и даже превышать энергию E_F. В результате электроны должны скапливаться вблизи положительно заряженных центров, а дырки отталкиваться от них. Потому такие флуктуации потенциала будут сказываться как на энергии связи экситона, так и на форме полосы его люминесценции. Очевидно, роль этих флуктуаций зависит как от концентрации n_s, так и от концентрации заряженных примесей в диэлектрике и их распределения, которые должны зависеть от технологии изготовления образцов. Поскольку флуктуации потенциала могут создавать потенциальные ямы, не обладающие цилиндрической симметрией, они должны приводить к существенному смешиванию наинизших дырочных состояний с моментами дырок $j_z=\pm 3/2$ с более высоколежащими состояниями с $j_z=\pm 1/2$. Такое смешивание должно иметь место и в том случае, когда основными носителями на поверхности являются дырки, а неосновными электроны. Это смешивание будет сказываться на поляризации излучения в магнитном поле. При больших концентрациях электронов уровень Ферми приближается к энергии первого возбужденного уровня размерного квантования E_1 с волновой функцией электрона $\psi_{e1}(z)$, ортогональной к $\psi_{e0}(z)$. Экситон, у которого электронная волновая функция $\psi_e(z)$ подобна $\psi_{e1}(z)$, может иметь энергию, меньшую, чем экситон с $\psi_e(z)$, совпадающей с $\psi_{e0}(z)$, поскольку для него условие ортогональности к волновым функциям свободных электронов не накладывает никаких ограничений на вид $\psi(\rho)$. Возможность существования таких экситонов, связанных с возбужденными уровнями размерного квантования в квантовых ямах, обсуждалась в [15]; соответствующие линии в спектре наблюдались в [20]. Возможно, именно с таким экситоном связан коротковолновый пик люминесценции, наблюдавшийся в [21] при $n_s > 3\cdot10^{12}$ см$^{-2}$. Однако эти вопросы будут рассматриваться в отдельной статье.

Мы благодарим П. Д. Алтухова, А. А. Бакуна, А. А. Рогачева, Г. П. Рубцова за полезные обсуждения и ознакомление со статьей [21] до ее опубликования и В. М. Аснина за полезные обсуждения.

Литература

[1] *Алтухов П. Д., Иванов А. В., Ломасов Ю. Н., Рогачев А. А.* Письма в ЖЭТФ, 1983, т. 38, № 1, с. 5—8.
[2] *Алтухов П. Д., Иванов А. В., Ломасов Ю. Н., Рогачев А. А.* ФТТ, 1985, т. 27, № 6, с. 1690—1696.
[3] *Кукушкин И. В., Тимофеев В. Б.* ЖЭТФ, 1987, т. 92, № 1, с. 258—278.
[4] *Аснин В. М., Рогачев А. А., Степанов В. И., Чурилов А. Б.* Письма в ЖЭТФ, 1986, т. 43, № 6, с. 284—287.
[5] *Аснин В. М., Рогачев А. А., Степанов В. И., Чурилов А. Б.* ФТТ, 1987, т. 29, № 6, с. 1713—1722.
[6] *Аснин В. М., Степанов В. И., Чурилов А. Б., Шматов М. Л.* ФТТ, 1987, т. 29, № 11, с. 3203—3209.
[7] *Алтухов П. Д., Бакун А. А., Рогачев А. А., Рубцов Г. П.* Тез. докл. Всес. совещ. «Люминесценция молекул и кристаллов». Таллин, 1987, с. 186.
[8] *Аверкиев Н. С., Пикус Г. Е.* ФТП, 1987, т. 21, № 8, с. 1493—1495.
[9] *Алтухов П. Д., Бакун А. А., Крутицкий А. В.* и др. Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 46, № 11, с. 427—430.
[10] *Чаплик А. В., Энтин М. В.* ЖЭТФ, 1971, т. 61, № 6 (12), с. 2496—2503.
[11] *Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф.* Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985. 415 с.
[12] *Stern F., Howard W. E.* Phys. Rev., 1967, vol. 163, N 3, p. 816—835.
[13] *Stern F.* Jap. J. Appl. Phys. Suppl., 1974, vol. 2, pt 2, p. 323—328.
[14] *Алтухов П. Д., Рогачев А. А.* ФТТ, 1985, т. 27, № 11, с. 3443—3446.
[15] *Kleinman D. A.* Phys. Rev. B, 1985, vol. 32, N 6, p. 3766—3771.
[16] *Пикус Г. Е.* ФТТ, 1977, т. 19, № 6, с. 1653—1664.
[17] *Mahan G. D.* Phys. Rev., 1967, vol. 153, N 3, p. 882—889.
[18] *Roulet B., Gavoret J., Nozieres P.* Phys. Rev., 1969, vol. 178, N 3, p. 1072—1083.
[19] *Гинзбург С. Л.* ФТТ, 1971, т. 13, № 12, с. 3616—3623.
[20] *Miller R. C., Kleinman D. A.* J. of Lumin., 1985, vol. 30, p. 520—540.
[21] *Алтухов П. Д., Бакун А. А., Рогачев А. А., Рубцов Г. П.* ФТТ, 1988, т. 30, № 11, с. 3021—3023.

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

Поступило в Редакцию
24 мая 1988 г.