1989 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 31, в. 2
1989 SOLID STATE PHYSICS Vol. 31, № 2

УДК 539.21

ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНАЯ ЖИДКОСТЬ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ С НЕПРЯМОЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЩЕЛЬЮ В ПРОСТРАНСТВЕ КООРДИНАТ

Н. В. Маркова, А. П. Силин

Для полупроводниковых сверхрешеток с непрямой энергетической щелью в пространстве координат проведен самосогласованный расчет равновесных свойств электронно-дырочной жидкости.

Полупроводниковые сверхрешетки в последнее время привлекают большое внимание своими уникальными оптическими свойствами (см. обзоры [1, 2]).

Сверхрешетки представляют собой твердотельные структуры, в которых имеется дополнительный одномерный потенциал, период которого существенно превышает постоянную решетки. Наличие такого потенциала радикально изменяет энергетический спектр системы, вследствие чего сверхрешетки приобретают ряд характерных свойств, отсутствующих у однородных материалов [1, 2].

В настоящей работе рассматриваются композиционные полупроводниковые сверхрешетки III типа [2], характерным примером которых является $In_{1-x}Ga_xAs—GaSb_{1-y}As_y$ при $x \simeq y \geqslant 0.3$ [3]. В этих сверхрешетках минимум зоны проводимости первого полупроводника ($In_{1-x}Ga_xAs$) находится в энергетической щели второго полупроводника ($GaSb_{1-y}As_y$), а максимум валентной зоны второго полупроводника — в энергетической щели первого. Благодаря такому расположению энергетических зон электроны и дырки, возбужденные в такой сверхрешетке, будут разделены в пространстве: электроны будут находиться в первом полупроводнике, а дырки во втором. Это нарушение электронейтральности приводит к искривлению энергетических зон. Наличие в таких сверхрешетках непрямой энергетической щели в пространстве координат, кроме того, должно привести (как и в легированных сверхрешетках [1, 2]) к значительному увеличению времени жизни носителей тока, что в свою очередь делает их перспективными для наблюдения в них электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ) (см., например, обзор [4]).

Нарушение электронейтральности при оптическом возбуждении полупроводниковых сверхрешеток с непрямой энергетической щелью в пространстве координат приводит также к тому, что уровень отсчета энергии ЭДЖ (дно зоны проводимости первого полупроводника) будет зависеть от плотности ЭДЖ в отличие от ЭДЖ в объемных полупроводниках [4] или сверхрешетках I типа [5], в которых электроны и дырки находятся в одном полупроводнике. Поэтому для расчета ЭДЖ необходимо самосогласованно учитывать искривление энергетических зон. В предыдущей работе [6] мы рассматривали сверхрешетки со столь тонкими слоями, что носители тока были сконцентрированы в центре слоев [7] и нарушение электронейтральности сводилось к образованию электронных и дырочных плоскостей.

© Издательство «Наука», «Физика твердого тела», 1989 г.

В настоящей работе мы предлагаем самосогласованный подход к расчету ЭДЖ для сверхрешеток с непрямой энергетической щелью в пространстве координат.

Взяв за начало отсчета энергии электронов дно зоны проводимости первого полупроводника, можно записать потенциал сверхрешетки для электронов в следующем виде:

$$\Delta_e(z) = \begin{cases} 0, & lk \leqslant z \leqslant d_1 + lk, \\ \Delta_e, & -d_2 + lk \leqslant z \leqslant lk, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots, \end{cases} \tag{1}$$

где $d_{1\,(2)}$ — толщина слоя первого (второго) полупроводника, $l=d_1+d_2$ — период сверхрешетки. Считая, что потенциал сверхрешетки и энергия ЭДЖ существенно меньше, чем энергетические щели полупроводников, составляющих сверхрешетку, мы ограничимся однозонным приближением [8] и будем отсчитывать энергию дырок от потолка валентной зоны второго полупроводника

$$\Delta_h(z) = \begin{cases} \Delta_h, & lk \leqslant z \leqslant lk + d_1, \\ 0, & -d_2 + lk \leqslant z \leqslant lk, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots . \end{cases} \tag{2}$$

В дальнейшем для простоты ограничимся случаем $\Delta_e = \Delta_h = \Delta$, $d_1 = d_2 = d$.

Гамильтониан системы N электронов и дырок, взаимодействующих по закону Кулона

$$V_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{e_\alpha e_\beta}{\varepsilon r}, \quad e_h = -e_e = e \tag{3}$$

(ε — диэлектрическая проницаемость, которую мы считаем одинаковой в обоих полупроводниках), имеет вид

$$H = \sum_{\alpha s} \int d\mathbf{r} \Psi^+_{\alpha s}(\mathbf{r}) H_{0\alpha}(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha s}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha' s s'} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi^+_{\alpha s}(\mathbf{r}) \Psi^+_{\alpha' s'}(\mathbf{r}') \times$$
$$\times V_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_{\alpha' s'}(\mathbf{r}') \Psi_{\alpha s}(\mathbf{r}), \tag{4}$$

где $\Psi^+_{\alpha s}(\mathbf{r})$ — оператор рождения электрона $\alpha = e$ или дырки $\alpha = h$ в точке $\mathbf{r}$ с проекцией спина s,

$$H_{0\alpha}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_\alpha} \nabla^2 + \Delta_\alpha(z), \tag{5}$$

m_α — эффективная масса носителей тока.

В приближении Хартри—Фока легко получить, что

$$E_{\text{HF}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{dir}} + E_{\text{exch}}, \tag{6}$$

где

$$E_{\text{kin}} = \sum_{\alpha s} \int d\mathbf{r} \langle \Psi^+_{\alpha s}(\mathbf{r}) H_{0\alpha}(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha s}(\mathbf{r}) \rangle, \tag{7}$$

$$E_{\text{dir}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha' s s'} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \Psi^+_{\alpha s}(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha s}(\mathbf{r}) \rangle V_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi^+_{\alpha' s'}(\mathbf{r}') \Psi_{\alpha' s'}(\mathbf{r}') \rangle, \tag{8}$$

$$E_{\text{exch}} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha s} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \Psi^+_{\alpha s}(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha s}(\mathbf{r}') \rangle V_{\alpha\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi^+_{\alpha s}(\mathbf{r}') \Psi_{\alpha s}(\mathbf{r}) \rangle, \tag{9}$$

$\langle \ldots \rangle$ — усреднение по основному состоянию.

Представим полевые операторы в следующем виде:

$$\Psi_{\alpha s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}, q} c_{\alpha s \mathbf{p} q} e^{i(\mathbf{p}\rho + qz)} u_\alpha(z), \tag{10}$$

где $c_{\alpha s \mathbf{p} q}$ — оператор уничтожения частицы сорта α с проекцией спина s с двумерным импульсом в плоскости слоев сверхрешетки $\mathbf{p}$ и импульсом вдоль оси сверхрешетки q; V — объем системы. Условие нормировки тогда будет

$$\frac{1}{V}\sum_{s\alpha \mathbf{p} q}\left\langle c^{+}_{\alpha s \mathbf{p} q} c_{\alpha s \mathbf{p} q}\right\rangle = N, \quad \frac{1}{l}\int_0^l dz u_\alpha^2(z) = 1. \tag{11}$$

Мы предполагаем, что носители тока заполняют (причем целиком) только одну минизону, т. е. уровень Ферми расположен в первой минищели.

Легко получить, что кинетическая энергия E_{kin} имеет вид

$$E_{\text{kin}} = N\left\{\frac{\hbar^2 k_F^2}{4\mu} + \frac{\hbar^2\pi^2}{24\mu d^2} + \sum_\alpha \frac{1}{l}\int_0^l dz \Delta_\alpha(z)\, u_\alpha^2(z) + \right.$$

$$\left. + \frac{\hbar^2}{2l}\sum_\alpha \frac{1}{m_\alpha}\int_0^l dz\left(\frac{du_\alpha}{dz}\right)^2\right\}, \tag{12}$$

где

$$\mu = m_e m_h/(m_e + m_h), \quad k_F = \sqrt{2\pi n}, \quad n = Nl/V. \tag{13}$$

Для прямого кулоновского взаимодействия E_{dir} получим

$$E_{\text{dir}} = Nn\sum_{\alpha\alpha'}\frac{1}{l^2}\int\int_0^l dz dz' u_{\alpha'}^2(z')\, V_{\alpha\alpha'}(z - z')\, u_\alpha^2(z), \tag{14}$$

где

$$V_{\alpha\alpha'}(z) = -2\pi e_\alpha e_{\alpha'} |z|/\varepsilon \tag{15}$$

— потенциал одномерного кулоновского взаимодействия.

Обменная энергия E_{exch_l} имеет следующий вид:

$$E_{\text{exch}} = -N\frac{e^2 k_F}{\pi^2\varepsilon}\sum_{k=-\infty}^{+\infty}\sum_\alpha \frac{1}{l^2}\times$$

$$\times\int\int_0^l \frac{dz dz' \sin^2\frac{\pi(z - z')}{l}\, u_\alpha^2(z)\, u_\alpha^2(z')}{((z - z')/l + k)^2}\times$$

$$\times\int_0^\infty \frac{dx}{x}\frac{J_1^2(x)}{\sqrt{x^2 + k_F^2 l\,((z - z')/l + k)^2}}, \tag{16}$$

$J_1(x)$ — функция Бесселя. Суммирование в (16) можно выполнить, если использовать для расчета интеграла интерполяционную формулу

$$\int_0^\infty \frac{dx}{x}\frac{J_1^2(x)}{\sqrt{x^2 + a^2}} = \frac{1}{2|a| + 3\pi/4}, \tag{17}$$

которая дает правильные асимптотики при $a \gg 1$ и $a \ll 1$. Используя (17), получим

$$E_{\text{exch}} = -N\frac{8k_F e^2}{3\pi\varepsilon} + N\frac{4e^2 k_F}{3\varepsilon\pi^3}\sum_\alpha \frac{1}{l^2}\int\int_0^l dz dz' u_\alpha^2(z)\, u_\alpha^2(z')\, W\left(\frac{z - z'}{l}\right), \tag{18}$$

$$W(x) = \sin^2\pi x\left\{\frac{1}{|x|\left(|x| + \frac{3\pi}{8k_F l}\right)} + \frac{16k_F l}{3\pi}\left[\psi\left(x + \frac{3\pi}{8k_F l} + 1\right) - \psi(x + 1)\right]\right\}, \tag{19}$$

$\psi(x)$ — функция Эйлера. В (18) первое слагаемое — обменная энергия двумерного электронно-дырочного газа [9], а второе слагаемое — поправки, связанные с распределением носителей тока по оси z.

Для нахождения функций $u_\alpha(z)$ необходимо решить уравнение Хартри—Фока

$$\left[\varepsilon^\alpha_{\mathrm{HF}} - \varepsilon^\alpha_{\mathrm{kin}} - \varepsilon^\alpha_{\mathrm{exch}}(z)\right] u_\alpha(z) = [\tilde{H}_{0\alpha}(z) + e_\alpha \varphi(z)]\, u_\alpha(z), \tag{20}$$

где

$$\varepsilon^\alpha_{\mathrm{HF}} = \frac{E_{\mathrm{HF}}}{2N}, \qquad \varepsilon^\alpha_{\mathrm{kin}} = \frac{k_F^2}{4m_\alpha} + \frac{\hbar^2\pi^2}{24 m_\alpha d^2},$$

$$\varepsilon^\alpha_{\mathrm{exch}}(z) = -\frac{4k_F e^2}{3\pi\varepsilon} + \frac{4k_F e^2}{3\varepsilon\pi^3}\frac{1}{l^2}\int\limits_0^l dz' u_\alpha^2(z')\, W\left(\frac{z-z'}{l}\right), \tag{21}$$

$$\tilde{H}_{0\alpha}(z) = -\frac{\hbar^2}{2m_\alpha}\frac{d^2}{dz^2} + \Delta_\alpha(z), \tag{22}$$

$$e\varphi(z) = n\,\frac{1}{l}\int\limits_0^l dz' \left[u_h^2(z') - u_e^2(z')\right] V_{eh}(z - z'). \tag{23}$$

Легко проверить, что потенциал $\varphi(z)$ удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon}\,\frac{n}{l}\,[u_h^2(z) - u_e^2(z)]. \tag{24}$$

Вместо решений Хартри—Фока (20) совместно с уравнением Пуассона мы ищем экстремум функционала $E_{\mathrm{HF}}\{u_\alpha(z)\}$ (6) вариационным методом. Для $u_\alpha(z)$ выберем следующие пробные функции:

$$u_e(z) = \begin{cases} f_1((z - d/2)/d), & 0 \leqslant z \leqslant d, \\ f_2((z + d/2)/d), & -d \leqslant z \leqslant 0, \quad u_e(z + lk) = u_e(z), \end{cases}$$

$$u_h(z) = \begin{cases} f_2((z - d/2)/d), & 0 \leqslant z \leqslant d, \\ f_1((z + d/2)/d), & -d \leqslant z \leqslant 0, \quad u_h(z + lk) = u_h(z), \end{cases} \tag{25}$$

$$f_1(x) = A\,(1 - Bx^2 + Cx^4), \quad f_2(x) = G \operatorname{ch} Dx, \tag{26}$$

где A, B, C, D, G — параметры, которые определяются из непрерывности $U_\alpha(z)$ и $du_\alpha(z)/dz$ на границах раздела (мы предполагаем, что $m_e = m_h = 2\mu$), нормировки $u_\alpha(z)$ (11) и экстремума функционала.

Вид функций $f_{1,\,2}(x)$ учитывает распределение плотностей носителей тока вдоль оси сверхрешетки.

Для определения равновесной плотности $n_{\text{ЭДЖ}}$ и энергии основного состояния ЭДЖ $E_{\text{ЭДЖ}}$ мы рассчитали полную энергию электронно-дырочной пары

$$E_{\text{ЭДЖ}} = E(n_{\text{ЭДЖ}}) = E(n)\big|_{\partial E(n,\,d)/\partial n = 0}, \tag{27}$$

где

$$E(n) = \frac{E_{\mathrm{HF}}(n) - E_{\mathrm{HF}}(n=0)}{N} + E_{\mathrm{corr}}(n), \tag{28}$$

$E_{\mathrm{corr}}(n)$ — корреляционная энергия системы электронных и дырочных плоскостей, рассчитанная в приближении высокой плотности [10].

Положение электронных и дырочных плоскостей a_α определяется максимумом плотности носителей тока $u_\alpha^2(z)$. Если

$$a_l = d/2 + lk, \quad a_h = -d/2 + lk, \tag{29}$$

то [10]

$$E_{\mathrm{corr}}(n) = -\left[f_1(n,\,d)\left(\frac{a_x}{d}\right)^2 + f_2(n,\,d)\left(\frac{d}{a_x}\right)^2\right]\frac{E_x}{(a_x/d)^2 + (d/a_x)^2}, \tag{30}$$

$$f_1(n,\ d) = +1.37\left(\frac{na_x^3}{d}\right)^{1/4}, \tag{31}$$

$$f_2(n,\ d) = \frac{9.14\sqrt{na_x^2}}{19.98\sqrt{na_x^2}+1} - \frac{0.052}{\sqrt{na_x^2}}\left(\frac{a_x}{d}\right)^{5/2}, \tag{32}$$

$$a_x = \varepsilon\hbar^2/2\mu e^2, \quad E_x = 2\mu e^4/\varepsilon^2\hbar^2. \tag{33}$$

Если

$$a_e = \begin{cases} \beta_e + lk, \\ d - \beta_e + lk, \end{cases} \qquad a_h = \begin{cases} -\beta_h + lk, \\ -d + \beta_h + lk, \quad \beta_{e,\,h} \ll d, \end{cases} \tag{34}$$

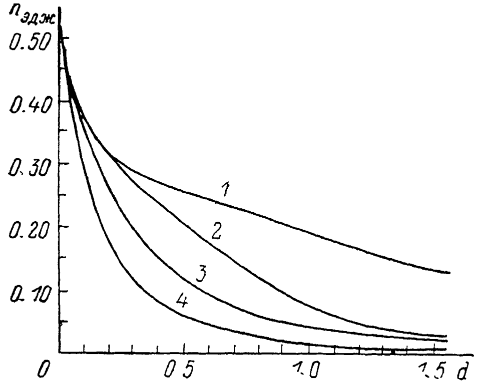

Рис. 1. Зависимость равновесной плотности $n_{ЭДЖ}$ от толщины пленок при $\Delta=1$ (*1*), 10 (*2*), 100 (*3*) и 10 [6] (*4*).

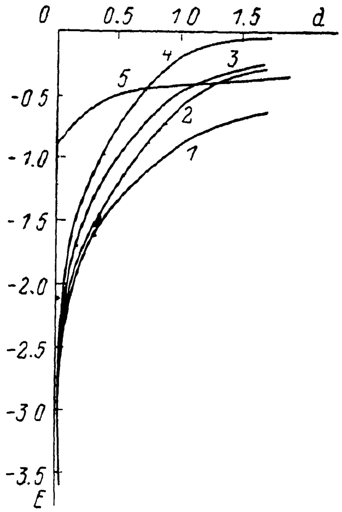

Рис. 2. Зависимости энергии основного состояния ЭДЖ $E_{ЭДЖ}$ (*1—4*) и экситона $E_{ЭКС}$ [11] (*5*) от толщины пленок d при $\Delta=1$ (*1*), 10 (*2*), 100 (*3*) и 10 (*4*) [6].

то в интерполяционной формуле (30) следует заменить f_1 на $\tilde{f}_1$ и f_2 на $\tilde{f}_2$ [10]

$$\tilde{f}_1(n,\ d) = 3.27\,(na_x^3/d)^{1/4}, \tag{35}$$

$$\tilde{f}_2(n,\ d) = \frac{9.14\sqrt{na_x^2}}{19.99\sqrt{na_x^2}+1} - \frac{0.037}{\sqrt{na_x^2}}\left(\frac{a_x}{d}\right)^{5/2}. \tag{36}$$

Результаты численных расчетов показывают, что при рассмотренных нами значениях параметров сверхрешеток случай (34) не встречается. На рис. 1, 2 представлены соответственно зависимости равновесной плотности и энергии основного состояния ЭДЖ от толщины слоев сверхрешетки d. В качестве единиц энергии и длины использованы энергия связи E_x и боровский радиус a_x двумерного экситона (33). На этих же рисунках для сравнения приведены также результаты работы [6], в которой был проведен несамосогласованный расчет ЭДЖ. В [6] предполагалось, что электроны и дырки локализованы в плоскостях, совпадающих с центрами слоев соответствующих полупроводников. Основное отличие этих методов приходится на область параметров, где $\Delta d^2 \sim 1$.

Отличие самосогласованного метода этой работы от несамосогласованного расчета [6] проиллюстрировано на рис. 3, где приведено отношение плотности электронов в центре потенциального барьера и в центре потенциальной ямы

$$h(d,\ \Delta) = u_0^2(-d/2)/u_0^2(d/2). \tag{37}$$

(В несамосогласованном расчете $h(d,\ \Delta)=0$).

Условие заполнения носителями тока целиком одной минизоны накладывает ограничения на параметры сверхрешетки. Заполнения второй минизоны при рассматриваемых значениях Δ и d не происходит, а первая минизона заполняется целиком при $d \geqslant 0.4$ для $\Delta = 100$, при $d \geqslant 0.8$ для $\Delta = 10$ и $d \geqslant 1.3$ для $\Delta = 1$.

На рис. 2 показана также зависимость энергии основного состояния экситона от толщины слоев сверхрешетки [11]. Самосогласованный расчет, используемый в настоящей работе, увеличивает область, в которой ЭДЖ будет более энергетически выгодна, чем газ свободных экситонов.

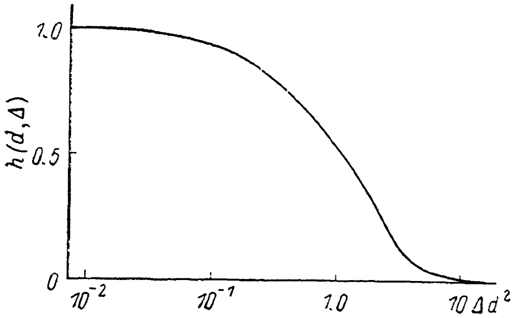

Рис. 3. Зависимость $h(d, \Delta)$ от Δd^2 в логарифмическом масштабе.

Литература

[1] Ploog K., Döhler G. H. // Adv. Phys. 1983. V. 32. N 3. P. 285—353.
[2] Силин А. П. // УФН. 1985. Т. 147. № 3. С. 485—521.
[3] Esaki L. // Lect. Notes Phys. 1980. V. 123. P. 302—323.
[4] Keldysh L. V. // Contemp. Phys. 1986. V. 27. N 5. P. 395—428.
[5] Бисти В. Е., Силин А. П. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 8. С. 2379—2385.
[6] Маркова Н. В., Силин А. П. // Кр. сообщ. по физике. 1987. № 3. С. 45—47.
[7] Маркова Н. В., Силин А. П. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 9. С. 2634—2638.
[8] Силин А. П. // Кр. сообщ. по физике. 1985. № 12. С. 13—16.
[9] Андрюшин Е. А., Силин А. П. // ФТТ. 1976. Т. 18. № 7. С. 2130—2132.
[10] Силин А. П. // Кр. сообщ. по физике. 1983. № 5. С. 30—34.
[11] Андрюшин Е. А. // ФТТ. 1976. Т. 18. № 9. С. 2493—2498.

Физический институт
им. П. Н. Лебедева АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
27 мая 1988 г.