

УДК 539.21

ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНАЯ ЖИДКОСТЬ В ТОНКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НИТЯХ

В. Е. Бисти, А. П. Силин

Для систем тонких полупроводниковых нитей с большой диэлектрической проницаемостью вычислены энергия основного состояния электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ) и равновесное значение плотности в зависимости от толщины нити. Исследована возможность образования диэлектрической ЭДЖ.

Изготовление и исследование одномерных полупроводниковых систем является в настоящее время одной из наиболее интересных проблем физики твердого тела [1]. Достижения современной технологии позволили создать системы тонких полупроводниковых нитей в диэлектрической матрице, такие, как совокупность одномерных нитей (квантовых проволок) GaAs в $Al_xGa_{1-x}As$ [2, 3], плоские сверхрешетки (периодическая модуляция плотности поверхностного заряда в системе металл—диэлектрик—полупроводник) [4], ультратонкие каналы в GaAs [5] и кремниевых полевых транзисторах [6-8]. Однако в этих системах диэлектрические проницаемости полупроводниковой нити ϵ_1 и диэлектрической матрицы ϵ близки.

Интересующий нас случай

$$\alpha = \epsilon_1/\epsilon \gg 1 \quad (1)$$

реализуется при введении полупроводников и полуметаллов в каналы диэлектрических матриц кристаллов (хризотиловых асбестов), обладающих кристаллографически упорядоченными системами полостей и каналов (диаметр канала 20—150 Å) [9]. Как показано в [10], кулоновское взаимодействие в тонких полупроводниковых и полуметаллических нитях, находящихся в диэлектрической среде при $\alpha \gg 1$, сильно возрастает при уменьшении толщины нити.

Будем рассматривать нити такого диаметра a , что выполняется условие

$$a_0 \ll a \ll a_1, \quad (2)$$

где a_0 — межатомное расстояние, $a_1 = \epsilon_1 \hbar^2 / m e^2$ — боровский радиус экситона в объемном полупроводнике нити (m — приведенная масса экситона). Тогда энергия взаимодействия зарядов e_1 и e_2 , расположенных внутри нити в точках $z_1=0$, $\rho_1=0$ и $z_2=z$, $\rho_2=\rho$ (ось z совпадает с осью нити) при $|z| \gg a$, не зависит от ρ и имеет вид

$$V(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \cos kz V(k). \quad (3)$$

При z , удовлетворяющих условию

$$a \ll |z| \ll a \sqrt{\alpha \ln \alpha}, \quad (4)$$

$$V(k) = \frac{e_1 e_2 a \ln \alpha}{\epsilon_1} \frac{1}{1 + \frac{\alpha}{2} (ak)^2 \ln \alpha}. \quad (5)$$

При этом потенциал (3) имеет вид

$$V(z) = \frac{e_1 e_2}{\varepsilon_1 a} \sqrt{\frac{\alpha \ln \alpha}{2}} \left[1 - \frac{|z|}{a} \sqrt{\frac{2}{\alpha \ln \alpha}} \right]. \quad (6)$$

Для того чтобы пренебречь движением частиц перпендикулярно оси нити, необходимо, чтобы расстояния между размерно квантованными уровнями энергии поперечного движения $E_{кв} \sim \hbar^2/m\bar{a}^2$ было существенно больше характерных значений для движения вдоль оси. При выполнении этого условия частицы заполняют только низший квантовый уровень, и задача об относительном движении зарядов становится одномерной.

Для полупроводниковых нитей, удовлетворяющих условию

$$a_1 (\alpha \ln \alpha)^{-1/2} \ll a \ll a_1, \quad (7)$$

как было получено в [10], эффективные радиусы основного и первых возбужденных состояний попадают в область применимости потенциала (6).

Энергия основного состояния экситона E^* равна

$$E^* = -E_x + \beta \bar{E} = -E_x (1 - 2^{1/6} \beta \gamma^{-1/3}), \quad (8)$$

$$\beta = 1.02, \quad E_x = \frac{e^2}{\varepsilon_1 a} \sqrt{\frac{\alpha \ln \alpha}{2}}, \quad \gamma = (\alpha \ln \alpha)^{3/2} \frac{a}{a_1}, \quad (9)$$

$\gamma \gg 1$ (в силу (7)). Эффективный радиус основного состояния экситона $a_x = \bar{a} = (a^2 a_1 / 2)^{1/2}$ удовлетворяет условию (4), а характерное значение средней энергии движения вдоль оси $\hbar^2/m\bar{a}^2 \ll E_{кв}$.

Целью данной работы является расчет энергии основного состояния системы электронов и дырок, возбужденных в тонких полупроводниковых нитях, удовлетворяющих условию (7). Предполагается, что среднее расстояние между частицами в системе удовлетворяет условию (4), т. е. $a \ll z_{op} \ll a \sqrt{\alpha \ln \alpha}$. При этом для энергии взаимодействия можно использовать выражения (5) и (6), а энергия Ферми $E_F \ll E_{кв}$ и все частицы находятся на низшем квантовом уровне.

Расчет проводится по схеме, предложенной в [11] для тонких полупроводниковых пленок.

Многочастичное уравнение Шредингера имеет вид

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^N \frac{d^2}{dz_i} \Psi - \frac{\hbar^2}{2m_h} \sum_{j=1}^N \frac{d^2}{dz_j} \Psi + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i_1, i_2=1 \\ i_1 \neq i_2}}^N V_{i_1 i_2} \Psi + \\ & + \sum_{\substack{j_1, j_2=1 \\ j_1 \neq j_2}}^N V_{j_1 j_2} \Psi + \sum_{i, j=1}^N V_{ij} \Psi = E_N \Psi. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь m_e и m_h — эффективные массы электронов и дырок (далее полагаем для простоты $m_e = m_h = 2m$), N — число электронно-дырочных пар, i и j нумеруют соответственно электроны и дырки, Ψ — полная волновая функция системы, $V_{e_1 e_2}$ — кулоновское взаимодействие (6). Совершив замену переменных $z_i = \bar{a} \zeta_i$, получаем безразмерное уравнение Шредингера

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{d^2}{d\zeta_i} \Psi - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{d^2}{d\zeta_j} \Psi - \frac{1}{2} \sum_{\substack{i_1, i_2=1 \\ i_1 \neq i_2}}^N |\zeta_{i_1} - \zeta_{i_2}| \Psi - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\substack{j_1, j_2=1 \\ j_1 \neq j_2}}^N |\zeta_{j_1} - \zeta_{j_2}| \Psi + \sum_{i, j=1}^N |\zeta_i - \zeta_j| \Psi = \gamma_N \Psi, \end{aligned} \quad (11)$$

$$E_N = -E_x (N - \gamma_N 2^{1/6} \gamma^{-1/3}). \quad (12)$$

Уравнение (11) не содержит параметров задачи, поэтому основной вклад в энергию ЭДЖ и любых конечных многочастичных комплексов есть большая величина $-E_x N$, что следует и для экситона из формулы (8).

Энергия основного состояния электронно-дырочной системы на пару частиц (подробно о методах ее вычисления см. [12, 13])

$$E(n) = E_{\text{эпн}} + E_{\text{обм}} + E_{\text{корр}}. \quad (13)$$

Кинетическая энергия

$$E_{\text{эпн}} = p_F^2/6m. \quad (14)$$

$$p_F = \hbar\pi n/2 = \hbar\pi/2r_s \bar{a}, \quad r_s = (n\bar{a})^{-1}, \quad (15)$$

n — плотность электронно-дырочных пар на единицу длины. Обменная энергия

$$E_{\text{обм}} = -E_x \{1 - f(p_F, \alpha)\}, \quad (16)$$

$$f(p_F, \alpha) = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\ln(1+\xi)}{\sqrt{\xi}} + 2 \arctg \frac{1}{\sqrt{\xi}} \right], \quad \xi = \frac{2}{\hbar^2} p_F^2 \alpha^2 \ln \alpha. \quad (17)$$

причем $f(p_F, \alpha) \ll 1$.

Обменная энергия содержит ту же большую величину $-E_x$, что и энергия экситона (8), и, согласно (12), является основной частью энергии взаимодействия.

Корреляционная энергия системы рассчитывается в приближении хаотических фаз

$$E_{\text{корр}} = \frac{\hbar^2}{2\pi^2 n} \int_0^\infty dk \int_0^\infty d\omega \frac{\omega V(k) \Pi(k, \omega) \frac{\partial V(k) \Pi(k, \omega)}{\partial \omega}}{1 + V(k) \Pi(k, \omega)}, \quad (18)$$

где $V(k)$ определяется по формуле (5), а суммарный поляризационный оператор электронов и дырок в одномерном случае имеет вид

$$\Pi(k, \omega) = \frac{4m}{\hbar\pi k} \ln \frac{\hbar^2 \omega^2 + \left(\frac{p_F k \hbar}{2m} + \frac{k^2 \hbar^2}{4m} \right)^2}{\hbar^2 \omega^2 + \left(\frac{p_F k \hbar}{2m} - \frac{k^2 \hbar^2}{4m} \right)^2}. \quad (19)$$

Разлагая $\Pi(k, \omega)$ в ряд и совершив замену переменных $x = \hbar k/2p_F$, $y = \hbar\omega/p_F^2$, получим

$$\Pi(x, y) = \frac{2m}{\pi p_F x} \times$$

$$\begin{cases} \frac{4x}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \left[1 + 4x^2 \left(\frac{1/3}{\left(1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2\right)^2} - \frac{1/4}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \right) + \dots \right], & x \ll 1, \\ \frac{4/x}{1 + \left(\frac{y}{x^2}\right)^2} \left[1 + \frac{4}{x^2} \left(\frac{1/3}{\left(1 + \left(\frac{y}{x^2}\right)^2\right)^2} - \frac{1/4}{1 + \left(\frac{y}{x^2}\right)^2} \right) + \dots \right], & x \gg 1. \end{cases} \quad (20)$$

$$\times \begin{cases} \frac{4x}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \left[1 + 4x^2 \left(\frac{1/3}{\left(1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2\right)^2} - \frac{1/4}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \right) + \dots \right], & x \ll 1, \\ \frac{4/x}{1 + \left(\frac{y}{x^2}\right)^2} \left[1 + \frac{4}{x^2} \left(\frac{1/3}{\left(1 + \left(\frac{y}{x^2}\right)^2\right)^2} - \frac{1/4}{1 + \left(\frac{y}{x^2}\right)^2} \right) + \dots \right], & x \gg 1. \end{cases} \quad (21)$$

Ряды (20), (21) сходятся довольно быстро, поэтому можно ограничиться первыми членами разложений (при $x=1$ оба разложения совпадают). Поэтому в формуле (18) можно разбить интегрирование по k (по x) на два интервала, в одном из которых (x от 0 до 1) используется разложение (20), в другом (от 1 до ∞) — разложение (21).

$$E_{\text{корр}} = E_{\text{корр}}^0 + E_{\text{корр}}^\infty, \quad (22)$$

$$E_{\text{корр}}^0 = \frac{p_F^2}{2m} \left\{ -\frac{1}{2} - \frac{\delta}{4} \ln(1+\xi) - \frac{\sqrt{1+\delta\xi}}{2\xi} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{3\xi}\right) \sqrt{1 + \frac{\delta\xi}{1+\xi}} + \right. \\ \left. + \frac{\delta}{4} \ln \left((\sqrt{1+\delta\xi} - 1)(\sqrt{1+\delta\xi} + 1)^{-1} \left(\sqrt{1 + \frac{\delta\xi}{1+\xi}} + 1 \right) \left(\sqrt{1 + \frac{\delta\xi}{1+\xi}} - 1 \right)^{-1} \right) \right\}, \quad (23)$$

$$E_{\text{корр}}^{\infty} = \frac{p_F^2}{2m} \left(-\frac{\delta \sqrt{\xi}}{2} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{\xi}} + \int_1^{\infty} dx \frac{\delta \xi}{(1 + \xi x^2) \left(\sqrt{1 + \frac{\delta \xi}{x^2(1 + \xi x^2)} + 1} \right)} \right), \quad (24)$$

$\delta = 2\hbar^3/\pi (p_F \bar{a})^3$ — параметр сжатости.

Для более точного учета корреляционной энергии на больших импульсах вводим поправку Хаббарда (замена Π на $\frac{3}{4}$ Π так, чтобы на больших импульсах $E_{\text{корр}}^{\infty}$ переходила в сумму прямой и обменной диаграмм второго порядка).

Равновесная ЭДЖ по определению

$$E_{\text{ЭДЖ}} = E(n) \Big|_{\frac{\partial E}{\partial n} = 0}. \quad (25)$$

Если выбрать в качестве единицы энергии E_x , а в качестве единицы длины \bar{a} , то единственным параметром, характеризующим систему, будет пропорциональная толщине нити величина

$$\gamma = (\alpha \ln \alpha)^{3/2} \frac{a}{a_1} \gg 1. \quad (26)$$

С учетом ограничения (2) и того, что реально $\alpha \sim 10-100$, этот параметр может принимать значения $\sim 10-1000$. Зависимости от γ энергии экситона E^* (8), энергии ЭДЖ (25) и энергии связи ЭДЖ относительно экситона

$$E_{\text{св}} = E^* - E_{\text{ЭДЖ}} \quad (27)$$

(в единицах E_x), а также соответствующего ЭДЖ равновесного значения r_s приведены в таблице.

Мы видим, что уменьшение толщины нити более выгодно для ЭДЖ, чем для экситона (при этом увеличиваются как $E_{\text{св}}$ в относительных единицах, так и сама единица измерения E_x).

Зависимость характеристик экситона и ЭДЖ (в единицах E_x и a_x) от параметра γ

γ	10	100	1000	10000
E^* (7)	-0.47	-0.75	-0.8	-0.947
$E_{\text{ЭДЖ}}$ (25)	-0.62	-0.80	-0.90	-0.951
$E_{\text{св}}$ (27)	0.15	0.05	0.02	0.004
r_s	3.7	3.0	2.8	2.7

Получающиеся при этом значения r_s слабо зависят от γ ($r_s \sim 2-4$) и удовлетворяют условию применимости (4) потенциала (6).

Изложенный выше расчет относится к случаю металлической ЭДЖ и справедлив в области высоких и промежуточных плотностей. Его недостатком в области низких плотностей является использование в качестве нулевого приближения свободного электронно-дырочного газа, энергия которого при $n \rightarrow 0$ не переходит в энергию экситона, а стремится к нулю.

При малых плотностях более обоснован выбор в качестве нулевого приближения газа свободных экситонов [14-16]. Для этого проводится каноническое преобразование гамильтониана (10), учитывающее когерентное спаривание электронов и дырок. Полученные при этом выражения отличаются от соответствующих из работ [14-16] лишь размерностью пространства и видом кулоновского взаимодействия (5).

Энергия основного состояния диэлектрической ЭДЖ в приближении Хартри—Фока определяется экстремумом функционала [14-16]

$$U\{\varphi_k\} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sin^2 \varphi_k -$$

$$-2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dkdk'}{(2\pi)^2} V(k-k') \left(\sin^2 \varphi_k \sin^2 \varphi_{k'} + \frac{1}{4} \sin 2\varphi_k \sin 2\varphi_{k'} \right) \quad (28)$$

совместно с условием нормировки

$$n = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \sin^2 \varphi_k \quad (29)$$

При малых плотностях φ_k связана с волновой функцией основного состояния экситона $\Psi_0(k)$

$$\sin \varphi_k = \sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_0(k) \quad (30)$$

При этом условие (29) выполняется автоматически, а энергия электронно-дырочной пары при $n \rightarrow 0$ совпадает с энергией основного состояния экситона E^* .

Если выбрать

$$\Psi_0(k) = \frac{2}{\sqrt{b}} \frac{1}{1+k^2 b^2}, \quad (31)$$

где b — вариационный параметр, то легко получить, что

$$E^* = -E_x + \tilde{\beta}(\gamma) E = -E_x (1 - \tilde{\beta}(\gamma) 2^{1/2} \gamma^{-1/2}), \quad (7a)$$

где $\tilde{\beta}(\gamma) = 0.9 - 1.19$ при $\gamma = 10 - 1000$, в то время как точное значение $\beta = 1.02$ (8).

В следующем приближении по плотности для химического потенциала электронно-дырочной пары в приближении Хартри—Фока легко получить, что [14]

$$\mu(n) = E^* + \mu_1 \frac{n}{2}, \quad (32)$$

$$\mu_1 = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dkdk'}{(2\pi)^2} \Psi_0(k) \Psi_0(k') [\Psi_0^2(k) - \Psi_0(k) \Psi_0(k')] V(k-k') = 3\tilde{\beta}(\gamma) 2^{1/2} \gamma^{-1/2}. \quad (33)$$

Энергия электронно-дырочной пары в приближении Хартри—Фока при низких плотностях

$$E_{X\Phi}^D(n) = E^* + \mu_1 \frac{n}{4}. \quad (34)$$

Критерием образования диэлектрической ЭДЖ может служить следующее условие

$$\frac{d}{dn} [E_{X\Phi}^D(n) + E_{\text{корр}}^D(n)]_{n=0} < 0, \quad (35)$$

где $E_{\text{корр}}^D(n)$ — корреляционная энергия.

Расчет корреляционной энергии диэлектрической ЭДЖ затруднен, так как в этом случае нет выделенного класса диаграмм. При малых плотностях можно ограничиться диаграммами второго порядка по взаимодействию. Причем для выполнения условий (35) необходимо, чтобы сумма диаграмм второго порядка (прямой и обменной) превосходила по модулю $n\mu_1/4$.

Несложный расчет показывает, что

$$|E_{\text{корр}}^{DII}(n)| = n\mu_2 = \frac{7 \cdot 2^{1/2}}{4\gamma^{2/2}} n. \quad (36)$$

Таким образом, можно утверждать, что при $\mu_1/4 > \mu_2$, т. е. при $\gamma > 18$ образования диэлектрической ЭДЖ не происходит.

- [1] *Esaki L.* In: Heterojunction and semiconductor superlattices. Ed. G. Allen, G. Bastard, N. Boccard, M. Lannoo, M. Voos, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York-London-Paris-Tokyo, 1986, p. 2-10.
- [2] *Petroff P. M., Gossard A. C., Logan R. A., Wiegmann W.* Appl. Phys. Lett., 1982, vol. 41, N 7, p. 635-638.
- [3] *Tsubaki K., Kobayashi N., Ando S., Sugimura A.* Surf. Sci., 1986, vol. 170, N1, p. 33-37.
- [4] *Stiles R.* Surf. Sci., 1978, vol. 3, N 5, p. 451-460.
- [5] *Reich R. K., Ferry D. K., Crandall R. O.* Phys. Rev. B, 1983, vol. 27, N 6, p. 3483-3493.
- [6] *Webb R. A., Towler D. K., Hartstein A., Wainer J. J.* Surf. Sci., 1986, vol. 170, N 1, p. 14-27.
- [7] *Webb R. A., Harstein A., Wainer J. J., Fowler A. B.* Phys. Rev. Lett., 1985, vol. 54, N 14, p. 1577-1580.
- [8] *Skocpol W. J., Jackel L. D., Howard R. E., Mankiewich P. M., Tennant D. M., White A. E., Dynes R. C.* Surf. Sci., 1986, vol. 170, N 1, p. 1-3.
- [9] *Богомолов В. Н.* УФН, 1978, т. 124, № 1, с. 171-182.
- [10] *Бабиченко В. С., Келдыш Л. В., Силин А. П.* ФТТ, 1980, т. 22, № 4, с. 1238-1240.
- [11] *Андрюшин Е. А., Келдыш Л. В., Санина В. А., Силин А. П.* ЖЭТФ, 1980, т. 79, № 4, с. 1509-1517.
- [12] *Андрюшин Е. А., Силин А. П.* ФНТ, 1977, т. 3, № 11, с. 1365-1394.
- [13] *Райс Т., Хенсел Дж., Филлипс Т., Томас Г.* Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках. М.: Мир, 1980. 349 с.
- [14] *Келдыш Л. В., Коалов А. Н.* ЖЭТФ, 1968, т. 54, № 3, с. 978-993.
- [15] *Келдыш Л. В., Силин А. П.* Краткие сообщения по физике ФИАН, 1975, № 8, с. 33-38.
- [16] *Силин А. П.* ФТТ, 1977, т. 19, № 1, с. 134-140.

Институт физики твердого тела АН СССР
Черноголовка
Московская область

Поступило в Редакцию
4 мая 1987 г.
Б окончательной редакции
11 сентября 1987 г.