

УДК 621.315.592

ОБ ОСЦИЛЛЯЦИИ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПРИ ЭКРАНИРОВАНИИ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НЕРАВНОВЕСНЫМИ НОСИТЕЛЯМИ ЗАРЯДА

А. М. Монахов, А. А. Рогачев

В приближении Хартри рассмотрена задача об экранировании внешнего электрического поля в полупроводниках при наличии в объеме полупроводника неравновесных носителей заряда. Показано, что в этих условиях плотность заряда и электростатический потенциал вблизи поверхности осциллируют с уменьшающейся амплитудой и возрастающим периодом.

В экспериментах [1-3] наблюдалась новая линия в спектре люминесценции полупроводника, находившегося во внешнем электрическом поле. Эта линия возникает в результате рекомбинации носителей, экранирующих внешнее электрическое поле (в дальнейшем для определенности — электронов), и неравновесных дырок, захваченных слоем электронов. Такие электроны и дырки образуют квазидвумерную систему с двумя или более чем с двумя чередующимися противоположно заряженными слоями. Качественно появление таких квазидвумерных электронно-дырочных (ЭД) слоев на поверхности полупроводника можно представить следующим образом. В полупроводнике, находящемся во внешнем электрическом поле, в условиях термодинамического равновесия при температуре, близкой к нулю, поверхностная плотность квазидвумерных электронов вблизи поверхности n_s определяется величиной внешнего электрического поля и положением уровня Ферми в объеме полупроводника. При освещении квазиуровень Ферми для электронов оказывается выше, чем в равновесии, и поверхностная плотность электронов оказывается равной $n_s + \Delta n_s$, где Δn_s — дополнительная плотность электронов, связанная с повышением квазиуровня Ферми. В результате в объеме полупроводника появляется электрическое поле, направленное противоположно по отношению к внешнему. В этом поле локализуются дырки. Дырки, в свою очередь, могут переэкранировать созданное дополнительными электронами поле, и, таким образом, возникает осциллирующий электростатический потенциал. Такие осцилляции быстро затухают в глубь образца.

Стабильность подобных ЭД систем была впервые доказана в работах [4, 5]. В работе [5] было проиллюстрировано возникновение осцилляций плотности заряда и потенциала. Так как рассматриваемые осцилляции потенциала существуют уже в приближении Хартри, в настоящей статье мы ограничиваемся лишь этим приближением. Учет обменных и корреляционных поправок значительно увеличивает глубину первых осцилляций, но ограничивает их общее число.

1. Нелинейное экранирование.

Качественное описание

Итак, рассмотрим полупроводник, в котором созданы неравновесные ЭД пары, помещенный во внешнее электрическое поле. Мы будем считать, что положение квазиуровня Ферми для электронов μ^- и дырок μ^+ задается

условиями в объеме полупроводника. В частности, когда неравновесные ЭД пары создаются внешним освещением, расстояния между квазиуровнями $\mu^- - \mu^+$ определяются интенсивностью падающего света. Для определения одночастичных уровней электронов и дырок и хода электростатического потенциала в приближении Хартри при нулевой температуре необходимо решить систему уравнений, состоящую из уравнений Шредингера для электронов и дырок и связывающего их уравнения Пуассона

$$\left. \begin{aligned} -\Psi_i'' + \Phi \Psi_i &= \varepsilon_i \Psi_i, \\ -\frac{1}{M} \Psi_j'' - \Phi \Psi_j &= \varepsilon_j \Psi_j, \\ -\Phi'' &= 8\pi \left(\sum_i n_i \Psi_i^2 - \sum_j p_j \Psi_j^2 \right); \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

$$\left. \begin{aligned} n_i &= g^- (\mu^- - \varepsilon_i), \\ p_j &= g^+ (\mu^+ - \varepsilon_j) \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

с граничными условиями

$$\left. \begin{aligned} \Psi_i(0) = \Psi_i(\infty) = \Psi_j(0) = \Psi_j(\infty) &= 0, \\ \int_0^\infty \Psi_i^2(z) dz = \int_0^\infty \Psi_j^2(z) dz &= 1, \\ \Phi'(0) = \mathcal{E} = 8\pi \left(\sum_i n_i - \sum_j p_j \right), \\ \Phi'(\infty) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Здесь индекс i нумерует электронные, а индекс j — дырочные состояния, ψ — волновые функции квантования в направлении z , перпендикулярном поверхности полупроводника, Φ — потенциальная энергия электрона, n_i — поверхностная плотность электронов в состоянии i , p_j — то же для дырок, $M = m_z^+ / m_z^-$ — отношение эффективных масс дырок и электронов в направлении z . Выбрана система единиц, в которой единица энергии и потенциала есть $e^4 m_z^- \kappa^{-2} \hbar^{-2} / 2$, единица длины — $\hbar^2 \kappa e^{-2} / m_z^-$, единица заряда — $e \kappa^{-1/2}$, κ — статическая диэлектрическая проницаемость, g^\pm — двумерная плотность состояний электронов (дырок), \mathcal{E} — напряженность внешнего электрического поля. Множитель 8π в уравнении Пуассона связан с выбранной системой единиц. Число заполненных состояний должно определяться в ходе решения самосогласованным образом.

Прежде чем переходить к обсуждению результатов численных расчетов для системы (1)–(3), проведем оценки, показывающие характерные черты ее решений, а именно, что потенциал Φ может иметь несколько минимумов и максимумов. Минимумы потенциала соответствуют одночастичным электронным состояниям, а максимумы — дырочным. Глобальный минимум (максимум) соответствует основному электронному (дырочному) состоянию, остальные — возбужденным состояниям. В этих оценках мы будем считать, что плотность заряда электронов, локализованных в первом минимуме потенциала, много больше плотности дырок, связанных первым максимумом и т. д., т. е. плотность в каждом последующем экстремуме много больше, чем в предыдущем. Тогда можно считать, что положение уровня энергии в предыдущем экстремуме не зависит от последующих. Это предположение означает, что если потенциал написать в виде суммы

$$\Phi = \sum_k \Phi_k, \quad -\Phi_i'' = 8\pi n_i \Psi_i^2, \quad \Phi_j'' = 8\pi p_j \Psi_j^2,$$

то соответствующие волновые функции ψ_k определяются из пары уравнений

$$\left. \begin{aligned} -\Psi_k'' \pm \Phi_k \Psi_k &= \varepsilon_k \Psi_k, \\ \mp \Phi_k'' &= 8\pi n_k \Psi_k^2 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

(«приближение независимых ям»).

В силу предположения о малости плотности частиц в других ямах плотность электронов у поверхности n_1 равна $\varepsilon/8\pi$. Положение квазиуровня Ферми в яме должно совпадать с его положением в объеме полупроводника. Однако при этом положение «хвоста» потенциала может не совпадать с дном зоны проводимости. Разность между значением потенциала на бесконечности и положением дна зоны проводимости V_c равна

$$\delta_1 \equiv \Phi_1(\infty) - V_c = \delta_0 - (V_c - \mu^-) - \left(\varepsilon_1 + \frac{n_1}{g^-}\right),$$

где $\delta_0 = \Phi_1(\infty) - \Phi_1(0)$ — положение уровня энергии относительно минимума потенциала, n_1 — двумерная плотность частиц в первой яме (рис. 1). Поскольку положение хвоста потенциала в глубине образца совпадает с дном зоны проводимости, наличие зазора $\delta_1 > 0$ означает, что полный потенциал загибается затем вниз, образуя яму для дырок. Плотность дырок в этой яме p_1 должна быть такой, чтобы $\Phi_2(\infty) - \Phi_2(0) = \delta_1$.

Для дырок необходимо также уравнять квазиуровни Ферми на поверхности и в объеме. В нашем приближении это приведет к сдвигу дырочной ямы (вниз на рис. 1) на величину

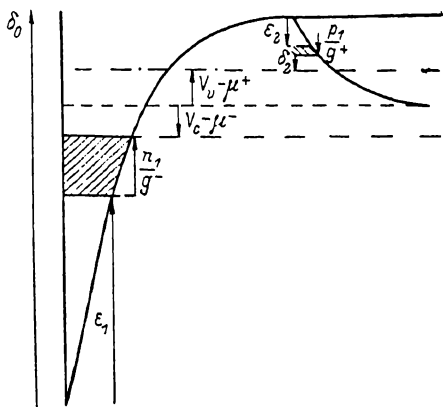


Рис. 1. Иллюстрация к расчету потенциала в приближении независимых ям.

Для наглядности потенциал Φ_2 сдвигнут относительно начала координат.

$$\delta_2 = \delta_1 - (V_c - \mu^+) - \left(\varepsilon_2 + \frac{p_1}{g^+}\right),$$

где V_c — положение дна валентной зоны. Величина δ_2 позволяет найти плотность электронов n_2 . Эта плотность будет соответствовать плотности заряда во второй электронной яме. Уровень энергии в этой яме соответствует первому возбужденному состоянию всей электронной системы, так как n_2 мало по сравнению с p_1 и n_1 , из чего следует, что потенциальные ямы разделены широкой стенкой, и волновая функция всей электронной системы есть суперпозиция волновых функций подсистем. Из-за быстрого затухания волновой функции, соответствующей первой яме, вклад в плотность заряда вносит лишь функция, соответствующая второй электронной яме.

Продолжая этот процесс, получим следующие соотношения:

$$\delta_0 = \Phi_1(\infty) - \Phi_1(0),$$

$$\delta_{2k-1} = \delta_{2k-2} - (V_c - \mu^-) - \left(\varepsilon_{2k-1} + \frac{n_k}{g^-}\right),$$

$$\delta_{2k} = \delta_{2k-1} - (V_c - \mu^+) - \left(\varepsilon_{2k} + \frac{p_k}{g^+}\right).$$

Для нахождения величин ε_k и δ_k воспользуемся автомодельностью уравнений Хартри, т. е. тем, что при преобразовании

$$\Psi = \sqrt{\alpha} \tilde{\Psi}, \quad \Phi = \alpha^2 \tilde{\Phi}, \quad \varepsilon = \alpha^2 \tilde{\varepsilon}, \quad n_k = \alpha^3 \tilde{n}_k, \quad z = \frac{z}{\alpha} \quad (5)$$

новые переменные также удовлетворяют уравнениям (4). Другими словами, если мы решим систему (4) при каком-нибудь $n_k \neq 0$, то все другие решения (4) можно получить с помощью преобразования (5). Пусть энер-

гия ε_0 и потенциал $\Phi_0(z)$ сосчитаны для внешнего поля $\mathcal{E}_0 = 8\pi n_0 = 1$. Тогда из (5) следует

$$\left. \begin{aligned} \delta_0 &= \sqrt[3]{\delta}, \quad \alpha_l = \sqrt{\frac{\delta_{l-1}}{\Phi_0(\infty) - \Phi_0(0)}}, \\ n_k &= \frac{\alpha_{2k-1}^3}{8\pi}, \quad p_k = \frac{\alpha_{2k}^3}{8\pi}, \\ \varepsilon_k &= \alpha_k^2 \varepsilon_0. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

При известных ε_0 и Φ_0 соотношения (4)–(6) позволяют найти ход потенциала $\Phi(z) = \sum_k \Phi_k(z)$. В случае, когда квазиуровни Ферми совпадают с краями зон, т. е. $V_c - \mu^- = V_v - \mu^+ = 0$, потенциал в нашем приближении осциллирует, причем число минимумов и максимумов бесконечно. Действительно, для малых δ_k из (5), (6) следует, что $\delta_{k+1} = \delta_k [1 - \varepsilon_0 / (\Phi_0(\infty) - \Phi_0(0))] + o(\delta_k)$, т. е. что суммарный потенциал осциллирует с уменьшающейся амплитудой и возрастающим периодом. Воспользовавшись для оценок вариационным решением [6] с пробной функцией $\Psi(z) = Az \exp(az/2)$, получим $\delta_{k+1} = \frac{9}{64} \delta_k + o(\delta_k)$.

В случае, когда $\mu^- - \mu^+$ меньше ширины запрещенной зоны, число колебаний потенциала и, следовательно, возбужденных состояний конечно, так как δ_k рано или поздно окажется отрицательным. Это означает, что потенциальная яма оказывается слишком мелкой и рассматриваемый механизм экранирования не применим для столь слабых полей. Можно было бы оценить число возбужденных состояний для различных $\mu^- - \mu^+$ и \mathcal{E} , однако эти оценки будут слишком грубыми. Кроме того, учет многочастичных эффектов, например, по методу функционала плотности [7] существенно углубит первые уровни, а учет возможности образования экситона в объеме обрежет потенциал в глубине образца. Однако общая картина поведения системы качественно не изменится, и по крайней мере первое возбужденное состояние для электронов может наблюдаться в реальных условиях.

2. Нелинейное экранирование. Численные расчеты

Предположим, что заполнены лишь основные состояния для электронов и дырок. Тогда система описывается уравнениями

$$\left. \begin{aligned} -\Psi_1'' + \Phi \Psi_1 &= \varepsilon_1 \Psi_1, \\ -\Psi_2'' - \Phi \Psi_2 &= \varepsilon_2 \Psi_2, \\ -\Phi'' &= 8\pi [(n_s + p) \Psi_1^2 - p \Psi_2^2] \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

с граничными условиями

$$\left. \begin{aligned} \Psi_1(0) = \Psi_1(\infty) = \Psi_2(0) = \Psi_2(\infty) &= 0, \\ \Phi'(0) &= 8\pi n_s, \\ \Phi'(\infty) &= 0, \\ \int_0^\infty \Psi_1^2(z) dz &= \int_0^\infty \Psi_2^2(z) dz = 1 \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

и условиями квазиравновесия

$$\left. \begin{aligned} n_s + p &= g^-(\mu^- - \varepsilon_1), \\ p &= g^+(\mu^+ - \varepsilon_2). \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Здесь для простоты считается $M=1$. В общем случае для произвольных \mathcal{E} , g и μ условия (9) неразрешимы, так как ε_1 и ε_2 являются функциями от n_s и p , n_s фиксировано, и в результате на одну переменную p

наложено два условия. Продемонстрируем, как учет возбужденных состояний помогает преодолеть эту трудность. Попробуем решить систему уравнений, близкую к (7), (8), с условиями (9). В качестве такой системы выберем систему (7), которую мы будем интегрировать на отрезке от $z=0$ до $z=L$. Граничные условия (8) заменятся на

$$\left. \begin{aligned} \Psi_1(0) = \Psi_1(L) = \Psi_2(0) = \Psi_2(L) = 0, \\ \Phi'(0) = 8\pi n_s, \\ \Phi(L) = 0, \\ \int_0^L \Psi_1^2(z) dz = \int_0^L \Psi_2^2(z) dz = 1. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Исходная система получается в пределе $L \rightarrow \infty$. Систему (7) с такими граничными условиями можно разрешить и при дополнительных условиях

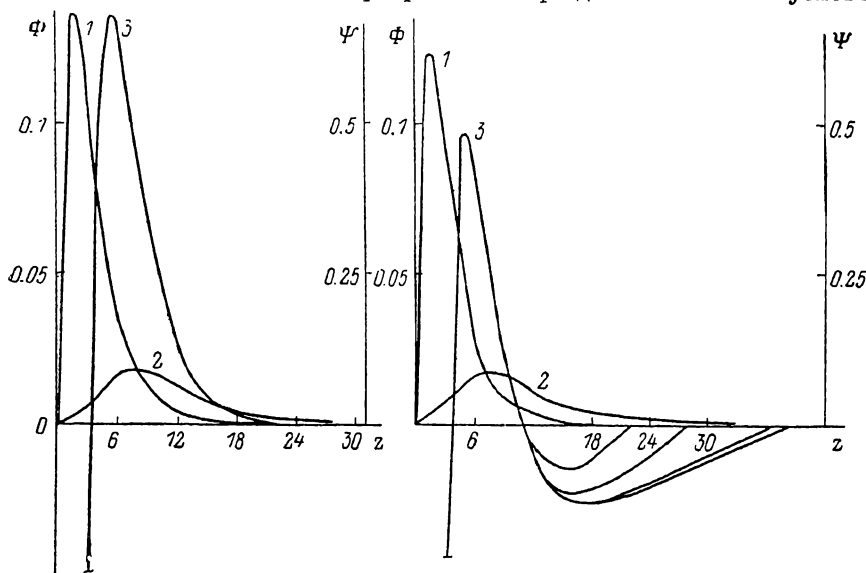


Рис. 2. Потенциал (3), волновые функции электронов (1) и дырок (2), полученные при численном решении системы (7) с граничными условиями (8) (а) и (10) (б).

$n_s=0.04$, $p=0.0023$. В случае а $\epsilon_1=-0.055$, $\epsilon_2=-0.035$. В случае б $\epsilon_1=-0.0912$, $\epsilon_2=-0.0009$. Волновые функции нормированы на число частиц на единице площади, умноженное на 8π .

(9). Это связано с тем, что система (7) имеет частное решение $\Psi_1=\Psi_2=0$, $\Phi = az + \beta$. Это означает, что для соблюдения условий (9) можно сдвинуть потенциал Φ так, чтобы получить необходимое ϵ_1 . Если L достаточно велико, то при больших z $\Psi_1 \approx \Psi_2 \approx 0$. В этой области можно заменить потенциал Φ на $az + \beta$, выбрав a и β так, чтобы $\Phi(L) = 0$. На рис. 2, б приведены решения системы уравнений (7) с условиями (9), (10) для различных L . На рис. 2, а приведено соответствующее решение для системы (7) с граничными условиями (8). Эти решения получены методом дифференцирования по параметру [8]. При решении системы задавались значения ϵ_1 и ϵ_2 . Граничные условия в точке $z=0$ считались функцией F начальных условий на правом конце $z=L$ и интегрировалась система уравнений

$$\sum_j \frac{dx_j}{d\tau} \frac{\partial F_i}{\partial x_j} = -F(x_0).$$

Здесь x_0 — начальное приближение для начальных условий на правом конце отрезка интегрирования. Интегрирование производится от точки $\tau=0$ до точки $\tau=1$. Значение x (1) оказывается начальным условием, при котором выполняются граничные условия (10). При сравнении

рис. 2, а и б видно, что рис. 2, б действительно получается из рис. 2, а сдвигом на величину ~ 0.3 . Полученные результаты можно интерпретировать следующим образом. По мере увеличения L появляется еще одна потенциальная яма для электронов в области больших z . Так как глубина ее почти не меняется с увеличением L , а ширина с увеличением L увеличивается, то при некотором L в ней появится свой уровень энергии, который в случае, приведенном на рис. 2, окажется первым возбужденным состоянием для всей электронной подсистемы. Если этот уровень окажется ниже μ^- , то он заполнится, электроны начнут экранировать поле, и $\Phi'(L)$ в случае заполнения такого возбужденного уровня окажется близким к нулю, начиная с некоторого L . Предположение о заполнении возбужденного уровня означает добавление еще одного уровня в систему (7) с соот-

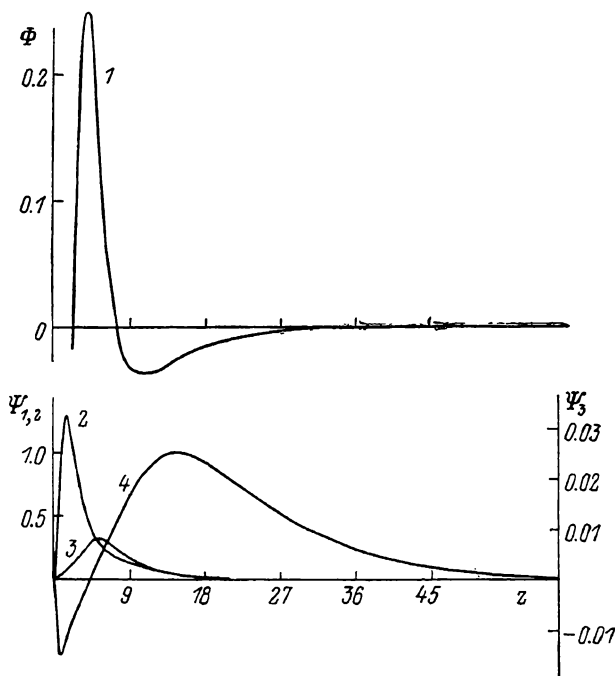


Рис. 3. Потенциал (1), волновые функции электронов (2, 4) и дырок (3) в случае заполнения второго электронного уровня.

$n_1=0.14$, $p_1=0.022$, $n_2=3.9 \cdot 10^{-4}$, $\epsilon_1=-0.06$, $\epsilon_2=-0.012$, $\epsilon_3=-8.6 \cdot 10^{-3}$, $\mu^-=-8.42 \cdot 10^{-3}$, двумерная плотность состояний электронов соответствует Si (111) и равна $g^-=2.65$, $\mu^+=-0.051$, $g^+=0.55$. Волновые функции нормированы так же, как на рис. 2.

ветствующими дополнениями условий (8) и (9). На рис. 3 приведено решение системы уравнений для случая, когда заполнено одно возбужденное состояние для электронов. Напряженность внешнего поля подобрана таким образом, что выполняется условие равенства квазиуровней Ферми в объеме и на поверхности, когда заполнены лишь два электронных уровня. Из рисунка видно, что потенциал и волновые функции ведут себя так, как ожидалось из простых оценок, приведенных в предыдущем разделе. Волновая функция возбужденного состояния действительно сосредоточена в основном в области больших z . Появление второго минимума потенциала может проявиться в экспериментах как «аномальное» увеличение подвижности и парамагнитной восприимчивости электронной системы.

3. Осцилляции потенциала, связанные с нелинейностью

Выше показано, как условие выравнивания квазиуровней Ферми на поверхности и в объеме приводит к немонотонному поведению потенциала. Возникает вопрос, всегда ли потенциал монотонен, если положение ква-

зиуровня не задается объемом. Такая ситуация возможна, например, в тонких образцах. В этом случае заданным оказывается не положение квазиуровней Ферми, а внешнее поле и число созданных на единице площади образца неравновесных ЭД пар. Если образец все-таки достаточно толстый, то система в приближении Хартри описывается уравнениями (7) с граничными условиями (8), но без дополнительных условий (9). Казалось бы, в этом случае потенциал Φ имеет лишь один минимум для электронов и один максимум для дырок. Однако нелинейность уравнений (7) приводит к тому, что если энергия ε_1 порядка ε_2 и близка к дну соответствующей зоны, то потенциал может иметь более чем один максимум, хотя волновые функции по-прежнему соответствуют основному состоянию. На рис. 4 приведены волновые функции $\Psi_{1,2}$ и график функции $\Phi^{1/5}$. Степень функции Φ , а не сама функция приведены для того, чтобы показать характер решения при больших z , когда $\Phi(z)$ настолько мал, что неразличим на рисунке. Появление приведенных на рисунке осцилляций связано с тем, что, хотя Ψ_1 и Ψ_2 по отдельности не имеют нулей, разность $(n_+ + p)\Psi_1^2 - p\Psi_2^2$ знакопеременна. В случае, когда $|\varepsilon_1| \gg \gg |\varepsilon_2|$, Ψ_1 быстро затухает, и при больших z оказывается, что

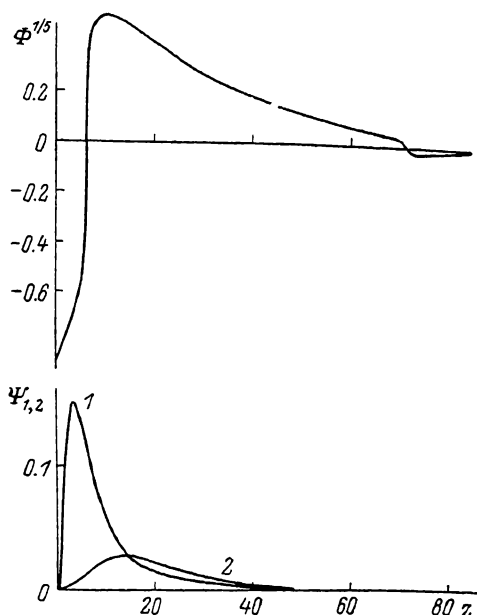


Рис. 4. Осцилляция потенциала при энергиях, близких к нулю.

$\varepsilon_1 = -0.0091$, $\varepsilon_2 = -0.0067$, $n_+ = 0.0051$, $p = 4.0 \cdot 10^{-4}$. Волновые функции нормированы так же, как на рис. 2.

$(n_+ + p)\Psi_1^2 - p\Psi_2^2 \approx -p\Psi_2^2$. В этом случае потенциал имеет один максимум. Если $\varepsilon_1 \approx \varepsilon_2$, то знак $(n_+ + p)\Psi_1^2 - p\Psi_2^2$ может меняться несколько раз. Однако если $|\varepsilon_1/\Phi(0)|$ велико, то волновые функции быстро затухают, что приводит к быстрому затуханию рассматриваемых осцилляций. Самый благоприятный случай наблюдения подобных осцилляций потенциала наступает, когда $\varepsilon_1 \approx \varepsilon_2 \approx \Phi(\infty)$. В работе [6] приведены численные расчеты и аналитические оценки для предельного случая $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$.

Таким образом, даже в случае, когда квазиуровни Ферми устанавливаются поверхностью образца, в силу нелинейного характера уравнений (7) возможно осциллирующее поведение потенциала и плотности заряда. Экспериментальное наблюдение таких осцилляций, однако, затруднено малой амплитудой и быстрым затуханием колебаний.

4. Обсуждение результатов

Приведенные расчеты показывают, что при экранировании постоянного внешнего электрического поля в полупроводниках в присутствии неравновесных носителей образуются два и более слоев с чередующимся знаком заряда. Два слоя образуются независимо от того, считаем ли мы, что в приповерхностной области существуют заданные условиями в объеме квазиуровни Ферми или что задано число неравновесных ЭД пар на единице поверхности образца. Вследствие выравнивания квазиуровней Ферми на поверхности и в объеме потенциал имеет в общем случае осциллирующий характер, причем с каждым новыми минимумом и максимумом связано следующее возбужденное состояние. При заданном числе

Частиц потенциал также может иметь осциллирующий ход, однако появление таких осцилляций происходит в условиях, когда энергии дна соответствующих поверхностных подзон близки к краю валентной зоны или зоны проводимости в объеме полупроводника. Кроме того, такие осцилляции имеют меньшую амплитуду, с различными минимумами и максимумами не связаны различные состояния носителей, что сильно затрудняет их наблюдение. Учет обменно-корреляционных поправок не должен качественно изменить картину в случае, когда задаются квазиуровни Ферми.

Авторы благодарят В. М. Аснина и Е. И. Левина за полезные обсуждения.

Л и т е р а т у р а

- [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. Письма в ЖЭТФ, 1984, т. 39, № 9, с. 432—436.
- [3] Аснин В. М., Рогачев А. А., Степанов В. И., Чурилов А. Б. Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 45, № 9, с. 436—439.
- [4] Алтухов П. Д., Монахов А. М., Рогачев А. А., Харциев В. Е. ФТТ, 1985, т. 27, № 2, с. 576—578.
- [5] Монахов А. М., Рогачев А. А. Письма в ЖТФ, 1987, т. 13, № 14, с. 858—862.
- [6] Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985. 415 с.
- [7] Теория неоднородного электронного газа / Под ред. Ö. Лундквист, Н. Марч. М.: Мир, 1987. 400 с.
- [8] На Ц. Вычислительные методы решения прикладных граничных задач. М.: Мир, 1982. 294 с.

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

Поступило в Редакцию
3 декабря 1987 г.