

Электростатическая модель изменения энергетической щели и формы линии фотолюминесценции 2D слоя GaAs/AlGaAs при высоком уровне возбуждения

© Н.А. Поклонский, А.И. Сягло

Белорусский государственный университет,
220050 Минск, Белоруссия

E-mail: Poklonski@phys.bsu.unibel.by

(Поступила в Редакцию 28 февраля 2000 г.)

В окончательной редакции 30 мая 2000 г.)

Развита электростатическая модель расчета сужения запрещенной зоны (щели) полупроводникового 2D слоя (квантовой ямы), вызванного кулоновским взаимодействием неравновесных носителей заряда. Рассматриваются только первые энергетические уровни размерного квантования для электронов и тяжелых дырок. Впервые при расчете обменной и корреляционной энергий учтены флуктуации потенциальной энергии носителей заряда вдоль 2D слоя, создаваемые самими электронами и дырками. Получено выражение для экранированного кулоновского потенциала вдоль 2D слоя, которое в приближении предельно узкой квантовой ямы переходит в известное. Дан расчет сужения энергетической щели и формы линии фотолюминесценции 2D слоя GaAs в матрице $Al_xGa_{1-x}As$ в зависимости от концентрации неравновесных электронов и дырок. Рассчитанные значения сужения запрещенной зоны согласуются с известными экспериментальными данными при высоком уровне фотовозбуждения квантовой ямы, когда электроны и дырки образуют 2D плазму.

Работа частично поддержана грантом БРФФИ № Ф97-246.

Обменное и корреляционное взаимодействия свободных носителей заряда уменьшают ширину запрещенной энергетической зоны E_g как у объемных (3D) кристаллических полупроводников, так и у двумерных (2D) слоев [1–5]. Например, уменьшение энергетической щели 2D слоя GaAs (толщина $L \approx 10$ nm, матрица $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$) с ростом концентрации неравновесных электронов n и дырок p от нуля до $n = p \approx 3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ составляет при $T \approx 4.2$ K примерно 60 meV [4,5]. Согласно [6], электроны и дырки при концентрации $n = p \approx 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ и выше в слое GaAs толщиной 30 nm образуют электронно-дырочную плазму и не связываются в экситоны.

В обзоре [1] сужение (ренормализация) зоны $\Delta E_g > 0$ квантово-размерного 2D слоя объясняется исключительно встречным сдвигом краев c - и v -зон в результате обменного взаимодействия носителей заряда. В модели [2] для расчета ΔE_g в 2D слое используется приближение случайных фаз волновых функций электронов и дырок с учетом взаимодействия их с фононами (в приближении Фрёлыха для 3D кристаллов). В работах [1,2] не учитываются флуктуации потенциальной энергии электронов и дырок вдоль 2D слоя, обусловленные их кулоновским взаимодействием между собой и с ионами примесей. Это усложняет анализ изменения энергетической щели E_g и спектрального распределения фотолюминесценции 2D слоя в зависимости от параметров материала слоя и матрицы, а также уровня фотовозбуждения.

Цель работы — расчет сужения зоны в фотовозбужденном 2D слое (квантовой яме) с учетом флуктуаций электростатического потенциала, создаваемых вдоль слоя электронно-дырочной плазмой, на основе модели [7,8] для легированного 3D кристалла.

1. Основные соотношения

Квантовые ямы GaAs в матрице $Al_xGa_{1-x}As$ обычно изготавливаются на кристаллографической плоскости (100). Определим 2D слой (квантовую яму) плоскостью XOY и перпендикулярной осью OZ ; площадь слоя — S , толщина — L .

Для оценки величин энергии электрона (дырки) на j -м квантово-размерном уровне E_{jn} (E_{jp}) можно использовать приближение бесконечно глубокой квантовой ямы [1,9]: $E_{jn(p)} = (\pi j \hbar)^2 / 2m_{n(p)}^{(z)} L^2$, где $m_{n(p)}^{(z)}$ — эффективная масса электрона (дырки), определяющая квантование энергии поперек 2D слоя; нижние индексы n и p относятся к электронам и дыркам соответственно.

При расчете E_{jn} и плотности состояний электронов используется масса $m_n^{(z)} = m_n^{(xy)} = 0.0665m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), как в 3D кристалле GaAs. Для расчета $E_{jph(l)}$ используются эффективные массы [1,9–11]: $m_{ph}^{(z)} = m_0 / (\gamma_1 - 2\gamma_2) = 0.4m_0$ для тяжелой дырки и $m_{pl}^{(z)} = m_0 / (\gamma_1 + 2\gamma_2) = 0.087m_0$ для легкой дырки, где $\gamma_1 = 6.98$, $\gamma_2 = 2.25$ — параметры Латтинжера [10]. Для расчета плотности состояний дырок 2D слоя в плоскости (100) используются $m_{ph}^{(xy)} = m_0 / (\gamma_1 + \gamma_2) = 0.11m_0$, $m_{pl}^{(xy)} = m_0 / (\gamma_1 - \gamma_2) = 0.21m_0$.

Поскольку $m_{pl}^{(z)} < m_{ph}^{(z)}$, то квантовый энергетический уровень легкой дырки E_{1pl} расположен глубже в v -зоне, чем уровень тяжелой дырки E_{1ph} . Поэтому E_g равна ширине энергетической щели между первыми квантовыми уровнями электронов и тяжелых дырок $E_g = E_{g0} + E_{1n} + E_{1ph}$, где E_{g0} — ширина запрещенной

зоны 3D кристалла. Зависимости $E_{1n(ph)}$ от толщины 2D слоя GaAs в матрице AlAs приведены в [12].

Для простоты расчетов далее рассматриваются только первые квантовые уровни ($j = 1$) для электронов и тяжелых дырок, образующих двумерную плазму. Поскольку далее в расчетах учитываются только тяжелые дырки, то вместо индекса ph будем писать просто p .

По модели [7,8] одночастичные энергии корреляционного $E^{(cor)}$ и обменного ($\overline{E_n^{(exc)}}$, $\overline{E_p^{(exc)}}$) взаимодействий между электронами (n) и тяжелыми дырками (ph) аддитивно входят в выражение для ренормализации энергетической щели ΔE_g квантовой ямы в виде

$$\Delta E_g = E_g - E'_g = E^{(cor)} + \overline{E_n^{(exc)}} + \overline{E_p^{(exc)}} > 0, \quad (1)$$

где E'_g — ширина запрещенной зоны 2D слоя при возбуждении электронно-дырочного газа, E_g — энергетическая щель 2D слоя при $n = p = 0$.

Рассмотрим высокий уровень фотовозбуждения 2D слоя, т.е. когда концентрацией ионов примесей в нем можно пренебречь по сравнению с концентрацией неравновесных электронов и дырок. Тогда уравнение электронной нейтральности имеет вид $n = p$. Учтем, что потенциальная энергия U как электрона, так и дырки флуктуирует вдоль 2D слоя из-за взаимодействия носителей заряда между собой. Тогда средняя двумерная концентрация делокализованных электронов n (дырок p) при конечной температуре есть (обобщая [1,4] на случай наличия флуктуаций электростатического потенциала [7,8])

$$\begin{aligned} n &= \frac{m_n^{(xy)}}{\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} G_n dU \int_U^{+\infty} f_n dE, \\ p &= \frac{m_p^{(xy)}}{\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} G_p dU \int_U^{+\infty} f_p dE, \end{aligned} \quad (2)$$

где $f_{n(p)}(E) = (1 + \exp((E - F_{n(p)})/k_B T))^{-1}$ — функция Ферми-Дирака для электронов (дырок), $E = (\hbar k)^2/2m_{n(p)}^{(xy)} + U$ — энергия электрона (тяжелой дырки) с квазиволновым вектором \mathbf{k} вдоль квантовой ямы; $F_{n(p)}$ — квазиуровень Ферми в $c(v)$ -зоне, $k_B T$ — тепловая энергия, $G_{n(p)}(U)$ — плотность распределения потенциальной энергии электрона (дырки).

Энергия и уровень Ферми $F_{n(p)}$ электрона (дырки) отсчитываются от первого квантового уровня электрона $E_{1n} = (\pi \hbar)^2/2m_n^{(z)} L^2$ (тяжелой дырки $E_{1p} = (\pi \hbar)^2/2m_p^{(z)} L^2$) в глубь зоны разрешенных энергий при отсутствии фотовозбуждения 2D слоя.

Полагаем, что плотность распределения значений потенциальной энергии U электрона (дырки) по 2D слою гауссова

$$G_{n(p)}(U) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}W} \exp\left(\frac{-U^2}{2W^2}\right), \quad (3)$$

где $W = W_n = W_p$ — среднеквадратичная флуктуация энергии.

Для $W \gg k_B T$ (формально при температуре $T \rightarrow 0$) из (2) с учетом (3) в приближении полного вырождения электронов на первом квантовом уровне в c -зоне (тяжелых дырок в v -зоне) имеем [13–15]

$$\begin{aligned} n = p &= \frac{m_{n(p)}^{(xy)}}{\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{F_{n(p)}} (F_{n(p)} - U) G_{n(p)} dU = \frac{m_{n(p)}^{(xy)}}{2\pi \hbar^2} \\ &\times \left\{ F_{n(p)} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{F_{n(p)}}{W\sqrt{2}}\right) \right] + \frac{2W}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{F_{n(p)}^2}{2W^2}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Для $W \ll k_B T$ (формально в отсутствие флуктуаций, $G_{n(p)} \rightarrow \delta(U)$) из (2) следует [16]

$$\begin{aligned} n = p &= \frac{m_{n(p)}^{(xy)}}{\pi \hbar^2} \int_0^{+\infty} f_{n(p)} dE \\ &= \frac{m_{n(p)}^{(xy)} k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp\left(\frac{F_{n(p)}}{k_B T}\right) \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Отметим, что при $T \rightarrow 0$ концентрация электронов (тяжелых дырок) на первом квантовом уровне примерно равна полной концентрации $n = p$, если усредненная по 2D слою максимальная кинетическая энергия электрона (дырки) $\overline{E_{n(p)}^{(kin)}}$ удовлетворяет условию

$$\begin{aligned} \overline{E_{n(p)}^{(kin)}} &= \int_{-\infty}^{F_{n(p)}} (F_{n(p)} - U) G_{n(p)} dU \\ &= \frac{\pi \hbar^2 n}{m_{n(p)}^{(xy)}} < \overline{E_{2n(p)}} - \overline{E_{1n(p)}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Разность между энергиями второго и первого квантовых уровней можно оценить по [1,9] как $\overline{E_{2n(p)}} - \overline{E_{1n(p)}} \approx 3(\pi \hbar)^2/2m_{n(p)}^{(z)} L^2$. Тогда из (6) следует, что можно ограничиться только первыми квантовыми уровнями в c - и v -зонах 2D слоя: $n < 3\pi/2L^2$; $p < 3\pi m_p^{(xy)}/2L^2 m_p^{(z)}$.

1) Модели распределения плотности заряда в двумерной электронно-дырочной плазме. При расчете среднеквадратичной флуктуации W электростатической потенциальной энергии электрона и дырки учтем, что они не связаны в экситоны, т.е. должны быть разнесены вдоль 2D слоя. Из квазиклассических оценок [17] следует, что расстояние от электрона (дырки) до ближайшего электрона или дырки приблизительно равно $2r_c = 2(\pi(n+p))^{-1/2}$ — диаметру 2D области, приходящейся на один электрон (дырку). Распределение плотности заряда каждого электрона (дырки) при расчете W примем в виде

$$\rho_{n(p)} = \rho_1 = \frac{\mp e}{\pi r_c^2 L} \theta(r_c - r), \quad (7)$$

где $\theta(r_c - r)$ — функция Хевисайда; $\theta(r_c - r) = 0$ при $r > r_c$; $\theta(r_c - r) = 1$ при $r \leq r_c$.

При расчете длины экранирования и корреляционной энергии $E^{(\text{cor})}$ по Дебаю–Хюккелю каждый электрон (дырка) представим в виде "нити" с равномерно распределенной поперек 2D слоя плотностью заряда. При большой концентрации фотовозбужденных носителей заряда ($r_c \ll L$) из (7) следует

$$\rho_{n(p)} = \rho_2 = \begin{cases} \mp(e/L)\delta(\mathbf{r}) & \text{при } -L/2 \leq z \leq L/2 \\ 0 & \text{при } z < -L/2; z > L/2, \end{cases} \quad (8)$$

где $\delta(\mathbf{r})$ — двумерная δ -функция.

При расчете обменного взаимодействия $\overline{E_{n(p)}^{(\text{exc})}}$ электронов (дырок) в 2D слое нельзя ограничиться заданием только плотности заряда. Необходимо использовать волновую функцию электрона (дырки) с квазиволновым вектором \mathbf{k} на первом квантовом уровне ($j = 1$). В приближении бесконечно глубокой квантовой ямы имеем [9]

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z) = \left(\frac{2}{LS}\right)^{1/2} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (9)$$

плотность распределения заряда $\rho_{n(p)} = \rho_3 = \mp e |\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z)|^2 = \mp (2e/LS) \cos^2(\pi z/L)$.

2) Среднеквадратичную флуктуацию потенциальной энергии электрона (дырки) $W = W_n = W_p$ вдоль квантовой ямы рассчитаем при учете чисто кулоновского взаимодействия только ближайших делокализованных зарядов (см. [7,8]). Распределение плотности заряда каждого электрона (дырки) представим в виде (7). Энергия кулоновского взаимодействия двух касающихся дисков (каждый радиусом r_c и толщиной $L \leq r_c$) с равномерно распределенным по объему зарядом $\pm e$ практически не отличается от энергии взаимодействия двух таких же по величине точечных зарядов, находящихся на расстоянии $2r_c = 2(\pi(n+p))^{-1/2} = 2(2\pi n)^{-1/2}$. Поэтому модуль энергии взаимодействия двух ближайших электронов (дырок) в 2D слое полагаем равным $|U_i| \approx e^2/(8\pi\epsilon_r\epsilon_0)$. При максимально плотной упаковке заряженных частиц вдоль 2D слоя у каждой из них находится шесть ближайших соседей в первом координационном круге. Так что в отсутствие корреляции между местоположением и знаком заряда частицы для $n = p$ имеем

$$W = \left(\sum_{i=1}^6 P_i U_i^2\right)^{1/2} \approx \sqrt{6} \frac{e^2}{8\pi\epsilon_r\epsilon_0} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} (3\pi n)^{1/2}, \quad (10)$$

где $P_i = 1$ — вероятность того, что ближайшим соседом выделенного электрона является электрон или дырка, $\sum_{i=1}^6 P_i U_i = 0$.

Отметим, что отношение модуля средней потенциальной энергии кулоновского взаимодействия двух частиц к средней кинетической энергии частицы по (6) в двумерной электронно-дырочной плазме равно $\gamma_{n(p)} = |U_i|/E_{n(p)}^{(\text{kin})} = (e^2 m_n^{(xy)}/4\pi\epsilon\hbar^2)(2\pi n)^{-1/2}$. В 2D

слое GaAs при $10^{11} \text{ cm}^{-2} < n = p < 3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ энергетический параметр неидеальности плазмы [18,19] изменяется от $\gamma_n = 1.3$ до 0.07 для электронов и от $\gamma_p = 2.1$ до 0.12 для тяжелых дырок. Так что с ростом уровня фотовозбуждения 2D слоя электронно-дырочная плазма становится более идеальной.

3) Рассмотрим экранирование кулоновского потенциала электрона (дырки) в фотовозбужденной плазме 2D слоя. Суммарный электростатический потенциал $\varphi(\mathbf{r}, z)$ заряда $\mp e$ с плотностью $\rho_{n(p)} = \rho_2$ по формуле (8) и экранирующего его облака с плотностью $\rho_s = e(p(\varphi) - n(\varphi))$ находим из линеаризованного уравнения Пуассона (в цилиндрической системе координат)

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = -\frac{(\rho_{n(p)} + \rho_s)}{\epsilon} \approx \begin{cases} \pm \frac{e}{\epsilon L} \delta(\mathbf{r}) + \frac{2\varphi(\mathbf{r}, z)}{L\lambda} & \text{при } -\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2}, \\ 0 & \text{при } z < -\frac{L}{2}, z > \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (11)$$

где $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$ — статическая диэлектрическая проницаемость кристаллической решетки 2D слоя, ϵ_0 — электрическая постоянная, $\rho_s(\mathbf{r}, z) = -2\epsilon\varphi(\mathbf{r}, z)/L\lambda$ — плотность заряда экранирующего облака,

$$\lambda^{-1} = \frac{e^2}{2\epsilon} \left(\frac{\partial n}{\partial F_n} + \frac{\partial p}{\partial F_p} \right) \quad (12)$$

— обратная длина экранирования в 2D слое [16,20,21].

Для низких температур ($k_B T \ll W$) из (12) с учетом (4) имеем [13–15]

$$\lambda^{-1} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\hbar^2} \left(m_n^{(xy)} \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{F_n}{W\sqrt{2}} \right) \right) + m_p^{(xy)} \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{F_p}{W\sqrt{2}} \right) \right) \right). \quad (13)$$

Для высоких температур ($k_B T \gg W$) из (12) с учетом (5) получаем [16,20]

$$\lambda^{-1} = \frac{e^2}{2\pi\epsilon\hbar^2} \left(\frac{m_n^{(xy)}}{1 + \exp(-F_n/k_B T)} + \frac{m_p^{(xy)}}{1 + \exp(-F_p/k_B T)} \right).$$

Потенциал $\varphi(\mathbf{r}, z)$, удовлетворяющий уравнению Пуассона (1), ищем в виде

$$\varphi(\mathbf{r}, z) = \frac{\mp e}{2\epsilon} \int \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \Phi(k, z) \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} = \frac{\mp e}{4\pi\epsilon} \int_0^\infty k J_0(kr) \Phi(k, z) dk, \quad (14)$$

где $J_0(kr) = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} \exp(ikr \cos \alpha) d\alpha$ — функция Бесселя нулевого порядка, $\Phi(k, z)$ — Фурье-образ потенциала $\varphi(\mathbf{r}, z)$.

Подстановка (14) в (11) дает для нахождения $\Phi(k, z)$ уравнения

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - \left(k^2 + \frac{2}{L\lambda}\right) \Phi = -\frac{2}{L} \quad \text{при} \quad -L/2 \leq z \leq L/2,$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - k^2 \Phi = 0 \quad \text{при} \quad z < -L/2, \quad z > L/2, \quad (15)$$

где учтено, что $\delta(\mathbf{r}) = \int \exp(i\mathbf{kr}) \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} = \int_0^\infty \frac{kJ_0(kr)dk}{2\pi}$.

При решении (15) учтем обращение $\varphi(\mathbf{r}, z)$ в нуль при $|z| \rightarrow \infty$, а также непрерывность потенциала $\varphi(\mathbf{r}, z)$ и электрической индукции при $r \neq 0$ и $z = \pm L/2$. Внутри 2D слоя (при $-L/2 \leq z \leq L/2$) проекция электрической индукции на ось OZ равна $-\varepsilon_r \varepsilon_0 \partial \varphi(\mathbf{r}, z) / \partial z$, вне слоя ($z < -L/2$; $z > L/2$) проекция индукции на ось OZ равна $-\varepsilon_{rm} \varepsilon_0 \partial \varphi(\mathbf{r}, z) / \partial z$, где $\varepsilon_{rm} \varepsilon_0$ — статическая диэлектрическая проницаемость матрицы. В результате на интервале $-L/2 \leq z \leq L/2$ имеем

$$\Phi(k, z) = \frac{2}{\tilde{k}^2 L} \left(1 - \frac{k \varepsilon_{rm} \operatorname{ch}(\tilde{k}z)}{\tilde{k} \varepsilon_r \operatorname{sh}(\tilde{k}L/2) + k \varepsilon_{rm} \operatorname{ch}(\tilde{k}L/2)} \right), \quad (16)$$

где $\tilde{k}^2 = k^2 + 2/L\lambda$.

Усредним плотность экранирующего заряда $\rho_s(\mathbf{r}, z)$ по толщине 2D слоя. Из соотношений (11), (14) и (16) получаем

$$\rho_s(\mathbf{r}) = -\frac{2\varepsilon}{L\lambda} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \varphi(\mathbf{r}, z) dz$$

$$= \frac{\pm e}{4\pi\varepsilon} \frac{2\varepsilon}{L\lambda} \int_0^\infty kJ_0(kr) \Phi(k) dk, \quad (17)$$

где

$$\Phi(k) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \Phi(k, z) dz$$

$$= \frac{2}{L\tilde{k}^2} \left(1 - \frac{2}{L\tilde{k}} \frac{k \varepsilon_{rm} \operatorname{sh}(\tilde{k}L/2)}{\tilde{k} \varepsilon_r \operatorname{sh}(\tilde{k}L/2) + k \varepsilon_{rm} \operatorname{ch}(\tilde{k}L/2)} \right),$$

полный экранирующий электрон (дырку) заряд в 2D слое равен:

$$2\pi L \int_0^\infty r \rho_s(r) dr = \pm e.$$

Усредненный по толщине 2D слоя экранированный потенциал электрона (дырки) есть

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \varphi(\mathbf{r}, z) dz$$

$$= -\frac{L\lambda}{2\varepsilon} \rho_s(\mathbf{r}) = \frac{\mp e}{4\pi\varepsilon r} \chi\left(\frac{r}{\lambda}; \frac{L}{\lambda}; \frac{\varepsilon_r}{\varepsilon_{rm}}\right),$$

где $\chi(r/\lambda, L/\lambda, \varepsilon_r/\varepsilon_{rm})$ — безразмерная функция экранирования кулоновского потенциала в плоскости слоя (квантовой ямы) определяется из (17).

Для предельно тонкого 2D слоя ($L \ll \lambda$) при равенстве диэлектрических проницаемостей слоя и матрицы ($\varepsilon_r = \varepsilon_{rm}$) функция экранирования принимает известный вид [16,20]

$$\lim_{L \ll \lambda} \chi(r/\lambda, L/\lambda) = \chi(r/\lambda) = \int_0^\infty \frac{tJ_0(t)}{t + r/\lambda} dt.$$

4) Энергия корреляционного взаимодействия по Дебаю–Хюккелю дырки и экранирующих ее электронов, согласно [7,8,14], равна $E^{(\text{cor})} = -(E_{pn} + E_{nn}) > 0$, где E_{pn} — энергия кулоновского взаимодействия дырки с экранирующим ее облаком электронов, E_{nn} — энергия взаимодействия электронов облака (с суммарным зарядом $-e$) между собой.

Модуль энергии чисто кулоновского взаимодействия двух электронов и/или дырок, находящихся на расстоянии r друг от друга и распределенных в 2D слое по аппроксимации (8), есть

$$|U(r)| = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon L^2} \int_{-L/2}^{L/2} dz \int_{-L/2}^{L/2} \frac{dz'}{\sqrt{r^2 + (z - z')^2}}$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon r} \xi(r, L), \quad (18)$$

где

$$\xi(r, L) = \frac{2r}{L} \left[\operatorname{Arsh}\left(\frac{L}{r}\right) + \frac{r}{L} \left(1 - \sqrt{\left(\frac{L}{r}\right)^2 + 1} \right) \right],$$

$$\lim_{r \gg L} \xi(r, L) = 1.$$

Тогда, следуя [7,8,14], с учетом взаимодействия носителей заряда по (18) имеем

$$E_{pn} = E_{np} = -\frac{e}{4\pi\varepsilon} L \int \frac{|\rho_s(\mathbf{r})| \xi(r, L)}{r} d^2\mathbf{r} < 0,$$

$$E_{nn} = E_{pp} = \frac{1}{8\pi\varepsilon} L^2 \int \rho_s(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r}$$

$$\times \int \frac{\rho_s(\mathbf{r}') \xi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, L)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^2\mathbf{r}' > 0, \quad (19)$$

где интегрирование проводится по всей площади S квантовой ямы (2D слоя), $\rho_s(\mathbf{r}) = -2\varepsilon\varphi(\mathbf{r})/L\lambda$ — плотность заряда, экранирующего "центральную" дырку (электрон) облака по (17); $\xi(r, L)$ определяется формулой (18).

Корреляционную энергию $E^{(\text{cor})}$ по формулам (19) для $0.03 < \lambda/L < 30$ (экспериментально актуальный интервал) можно аппроксимировать зависимостью

$$E^{(\text{cor})} = -(E_{pn} + E_{nn})$$

$$\approx 1.3 \cdot \ln\left(1 + 0.77\left(\frac{\lambda}{L}\right)^{0.74}\right) \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_r \varepsilon_0 \lambda}. \quad (20)$$

Поскольку длина экранирования λ по (12) не зависит от толщины 2D слоя L , то из (20) следует, что $E^{(\text{cor})}$ увеличивается при уменьшении L .

5) Вычислим энергии обменного взаимодействия между вырожденными электронами и дырками по отдельности для температуры $T \rightarrow 0$ с учетом флуктуаций электростатического потенциала вдоль 2D слоя.

Согласно [22,23], энергия обменного взаимодействия электрона (дырки) с волновым вектором \mathbf{k} с остальными электронами (дырками) 2D слоя на первом квантовом уровне есть

$$E_{n(p)}^{(\text{exc})}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} \int_{-L/2}^{L/2} dz' \int_{-L/2}^{L/2} dz \int d^2\mathbf{r} \int \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \\ \times \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}, z) \Psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}', z') \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}', z') \Psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}', z) d^2\mathbf{r}' \\ = \frac{e^2}{2\epsilon} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} \rightarrow \frac{e^2}{2\epsilon} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{k}' < k_{n(p)}} \frac{d^2\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|},$$

где волновая функция электрона (дырки) $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z)$ дается формулой (9),

$$k_{n(p)} = \left[2m_{n(p)}^{(\text{xy})} (F_{n(p)} - U) / \hbar^2 \right]^{1/2}$$

— двумерный квазиволновой вектор Ферми электрона (дырки) в области 2D слоя с потенциальной энергией U и максимальной кинетической энергией $F_{n(p)} - U$.

Среднюю по двумерному волновому вектору \mathbf{k} электрона (дырки) энергию обменного взаимодействия при $T \rightarrow 0$, приходящуюся на один электрон (дырку), можно по [22,23] привести к виду (ср. [24])

$$E_{n(p)}^{(\text{exc})} = \frac{1}{2} \frac{1}{\pi k_{n(p)}^2} \int_{\mathbf{k} < k_{n(p)}} E_{n(p)}^{(\text{exc})}(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k} = \frac{e^2}{2(2\pi)^3 \epsilon k_{n(p)}^2} \\ \times \int_{\mathbf{k} < k_{n(p)}} d^2\mathbf{k} \int_{\mathbf{k}' < k_{n(p)}} \frac{d^2\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|} \approx 0.42 \frac{e^2}{4\pi\epsilon} k_{n(p)}. \quad (21)$$

Усреднение (21) по 2D слою при $W \gg k_B T$ дает не зависящую от толщины слоя L среднюю энергию электрон-электронного (дырочно-дырочного) обменного взаимодействия в расчете на один носитель заряда

$$\overline{E_{n(p)}^{(\text{exc})}} = \int_{-\infty}^{+\infty} E_{n(p)}^{(\text{exc})} G_{n(p)} dU \approx 0.42 \frac{e^2 \sqrt{2m_{n(p)}^{(\text{xy})}}}{4\pi\epsilon \hbar} \\ \times \int_{-\infty}^{F_{n(p)}} (F_{n(p)} - U)^{1/2} G_{n(p)} dU > 0, \quad (22)$$

где квазиуровень Ферми $F_{n(p)}$ находится из (4) с учетом (3).

Таким образом, выражение (1) с учетом (20) и (22) определяет ренормализацию $\Delta E_g > 0$ энергетической щели 2D слоя при фотовозбуждении в нем электронно-дырочной плазмы.

6) Определим форму линии люминесценции при рекомбинации электронов с дырками в 2D слое в зависимости от их концентрации и температуры.

Поскольку неравновесные носители заряда сами и создают электростатический потенциальный рельеф вдоль 2D слоя, то "вертикальные" и "невертикальные" акты рекомбинации электрона с дыркой в пространстве энергия-координата (\mathbf{r} -пространстве) можно считать равновероятными. Этим обстоятельством предлагаемая модель отличается от модели межзонной рекомбинации с учетом флуктуационного потенциала ионов примесей в компенсированном 3D полупроводнике [25–27].

Вероятность рекомбинации в пространстве энергия-квазиимпульс (\mathbf{k} -пространстве) электрона с кинетической энергией $E_c - U_c$ и дырки с энергией $E_v - U_v$ обозначим P_{cv} . Рассмотрим два предельных случая: 1) разрешены переходы электрона из c - в v -зону без соблюдения правил отбора по квазиимпульсу, когда $P_{cv} = 1$ для всех $E_c - U_c$ и $E_v - U_v$; 2) разрешены только вертикальные переходы (квазиимпульсы электрона и дырки равны), когда

$$P_{cv} = \delta \left(m_n^{(\text{xy})} (E_c - U_c) - m_p^{(\text{xy})} (E_v - U_v) \right).$$

Без учета правил отбора по квазиволновому вектору электронов и дырок спектральное распределение интенсивности фотолюминесценции $I(\hbar\omega)$ с энергией фотонов $\hbar\omega$ описывается выражением

$$I(\hbar\omega) \propto \int_{-\infty}^{\infty} f_n(E_c) f_p(\hbar\omega - E'_g - E_c) dE_c \\ \times \int_{-\infty}^{E_c} G_n(U_c) dU_c \int_{-\infty}^{\hbar\omega - E'_g - E_c} G_p(U_v) dU_v, \quad (23)$$

где $E'_g = E_{g0} + E_{1n} + E_{1p} - \Delta E_g$ — ширина энергетической щели в фотовозбужденном 2D слое; квазиуровень Ферми $F_{n(p)}$ в функции $f_{n(p)}$ определяется из (2).

Отметим, что (23) конкретизирует известное [4,5] выражение для интенсивности $I(\hbar\omega)$ межзонного рекомбинационного излучения на случай наличия гауссовых флуктуаций потенциальной энергии электрона (дырки) вдоль 2D слоя. Фотолюминесценция без выполнения правил отбора по квазиволновому вектору и в отсутствие флуктуаций потенциальной энергии электронов и дырок вдоль 2D слоя (при $G_{n(p)} \rightarrow \delta(U)$) рассмотрена в [28].

При учете только вертикальных в \mathbf{k} -пространстве переходов электронов из c - в v -зону 2D слоя формула (23) приводится к виду

$$I(\hbar\omega) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} G_n(U_c) dU_c \int_{-\infty}^{\hbar\omega - E'_g - U_v} G_p(U_v) f_n(E_{cc}) f_p(E_{vv}) dU_v, \quad (24)$$

где полные энергии электрона E_{cc} и дырки E_{vv} с одинаковыми квазиволновыми векторами на первом квантовом

уровне в c - и v -зонах равны

$$E_{cc} = \frac{m_p^{(xy)}(\hbar\omega - E'_g - U_v) + m_n^{(xy)}U_c}{m_n^{(xy)} + m_p^{(xy)}},$$

$$E_{vv} = \frac{m_n^{(xy)}(\hbar\omega - E'_g - U_c) + m_p^{(xy)}U_v}{m_p^{(xy)} + m_n^{(xy)}}.$$

2. Сравнение расчетов с экспериментальными данными

Оценим вначале отношения между энергиями W , $E^{(\text{cor})}$, $\overline{E_{n(p)}^{(\text{exc})}}$, характеризующими по (10), (20) и (22) электронно-дырочную плазму в 2D слое GaAs ($L = 10 \text{ nm}$, $\varepsilon_r = 12.4$). Для такой квантовой ямы с ростом концентрации неравновесных носителей заряда от $n = p = 10^{11}$ до $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ отношение $(\overline{E_n^{(\text{exc})}} + \overline{E_p^{(\text{exc})}})/E^{(\text{cor})}$ увеличивается от 0.4 до 8, а $W/E^{(\text{cor})}$ — от 0.7 до 7.

На рис. 1 изображено сужение запрещенной энергетической зоны (щели) $\Delta E_g = E^{(\text{cor})} + \overline{E_n^{(\text{exc})}} + \overline{E_p^{(\text{exc})}} > 0$ квантовой ямы GaAs в матрице $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в зависимости от концентрации неравновесных электронов (дырок). Расчет $\Delta E_g = E_g - E'_g > 0$ проводился по (1) с учетом (20) и (22) для $L = 10$ (кривая 1) и 2 nm (кривые 2 и 3). При этом полагалось: $m_n^{(xy)} = 0.0665m_0$, $m_p^{(xy)} = m_p^{(xy)} = 0.11m_0$, $\varepsilon_r = \varepsilon_{rm} = 12.4$. Экспе-

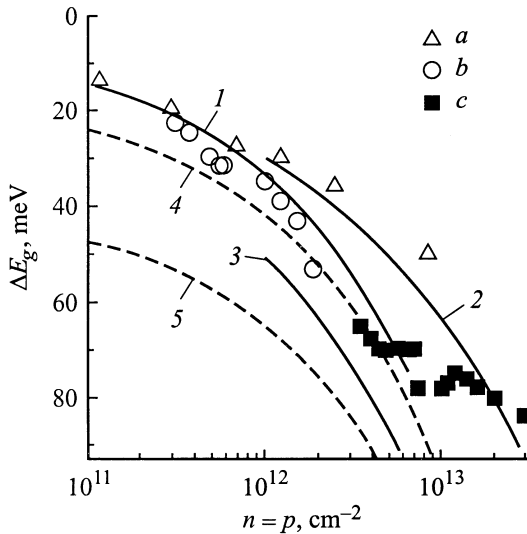


Рис. 1. Сужение зоны E_g квантовой ямы GaAs в матрице $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при $T = 4.2 \text{ K}$ в зависимости от концентрации неравновесных электронов (дырок). Экспериментальные точки: a, b — данные обзора [4] для $L = 10 \text{ nm}$; c — данные [5] для $x = 1$ и $L = 2.3 \text{ nm}$. Кривые — расчет ΔE_g по (1) с учетом (19) и (22) для $L = 10 \text{ nm}$ (кривая 1) и для $L = 2 \text{ nm}$ (кривые 2, 3). Кривые 1 и 3 — при расчете длины экранирования учитываются и электроны, и дырки ($n = p$); кривая 2 — только дырки ($n \ll p$). Кривые 4 и 5 соответствуют $L = 10$ и 2 nm без учета флуктуационного потенциала ($W \ll F_{n(p)}$).

риментальные данные a, b взяты из обзора [4], c — из [5]. Данные c для $L = 2.3 \text{ nm}$ соответствуют случаю, когда дно c -зоны матрицы $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, в которой находится 2D слой GaAs, расположено ниже дна c -зоны самого слоя [12]. Относительная диэлектрическая проницаемость 2D слоя GaAs при гелиевых температурах $\varepsilon_r = 12.4$, как у 3D кристалла [29], $\varepsilon_{rm} = 10.1$ для AlAs.

При увеличении концентрации неравновесных электронов и дырок от $n = p = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ до $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ длина экранирования λ по (13) уменьшается с 5.4 до 2 nm, так что условие применимости аппроксимации (20) корреляционной энергии $E^{(\text{cor})}$ выполняется для данных на рис. 1.

При слабом фотовозбуждении 2D слоев GaAs толщиной $L < 3 \text{ nm}$ наблюдаются не прямые электронно-дырочные излучательные переходы как в пространстве координат, так и в пространстве квазимпульсов (X -переходы). Однако при сильном возбуждении из-за сужения запрещенной зоны существенны и даже преобладают прямые Γ -переходы, типичные для более широких 2D слоев [12]. Ввиду того что электроны частично распределены за пределами 2D слоя GaAs, они слабее участвуют в экранировании электрон-дырочного взаимодействия, чем тяжелые дырки, расположенные в слое. Следовательно, электроны, находящиеся вне слоя, являются фоном, обеспечивающим электронейтральность системы и влияющим на величины среднеквадратичных флуктуаций $W_n = W_p$. Поэтому расчет ΔE_g проведен для двух предельных случаев: неравновесные электроны распределены за пределами 2D слоя (кривая 2 на рис. 1); неравновесные электроны находятся в 2D слое (кривая 3).

На рис. 1 приведены также значения ΔE_g (кривые 4, 5), рассчитанные в предположении отсутствия флуктуационного потенциала ($W \ll F_{n(p)}$) в двумерной вырожденной электронно-дырочной плазме ($k_B T \ll F_{n(p)}$). Для этого случая по формуле (13) длина экранирования электростатического поля в плоскости (100) "идеального" 2D слоя GaAs при $n = p$ есть

$$\lambda = \frac{2\pi\varepsilon_r\varepsilon_0\hbar^2}{e^2(m_n^{(xy)} + m_p^{(xy)})} = 1.85 \text{ nm}. \quad (25)$$

Тогда корреляционная энергия $E^{(\text{cor})}$ по (20) с учетом (25) не зависит от концентрации электронов и дырок.

При $W \ll F_{n(p)}$ из уравнения электронейтральности (4) находим уровень Ферми, $F_{n(p)} = \pi\hbar^2 n/m_n^{(xy)}$. Тогда по (22) с учетом $G_{n(p)} \rightarrow \delta(U)$ имеем одинаковую для вырожденных электронов и дырок обменную энергию

$$\overline{E_{n(p)}^{(\text{exc})}} \approx 0.42 \frac{e^2 \sqrt{2m_n^{(xy)} F_{n(p)}}}{4\pi\varepsilon\hbar} = 0.42 \frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \sqrt{2\pi n}, \quad (26)$$

приходящуюся на один электрон (дырку).

Заметим, что экспериментальные данные сужения зоны $\Delta E_g > 0$ из разных работ (см. обзор [4]) не вполне коррелируют друг с другом. По-видимому, это

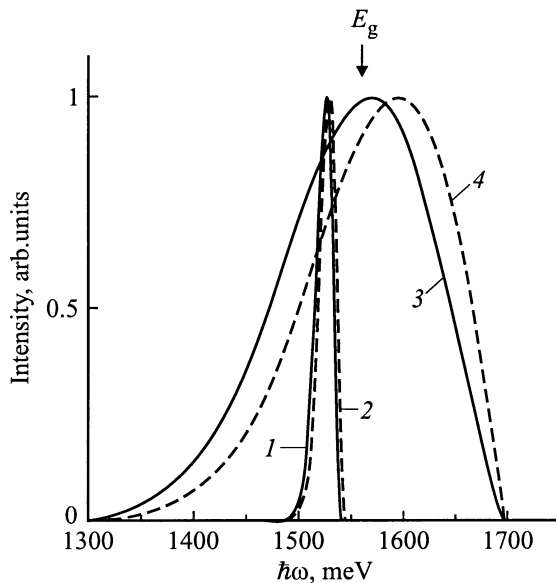


Рис. 2. Рассчитанные спектры люминесценции квантовой ямы GaAs толщиной $L = 10$ nm для $T = 4.2$ K и концентрацией неравновесных электронов и дырок $n = p = 10^{11}$ cm^{-2} (кривые 1, 2) и $3 \cdot 10^{12}$ cm^{-2} (3, 4). Кривые 1, 3 — расчет по формуле (24), 2, 4 — по (23).

обусловлено различными способами оценки в них концентрации неравновесных электронов и дырок в 2D слое. Однако ΔE_g по работам [4,5] увеличивается при уменьшении толщины L квантовой ямы (2D слоя). Это подтверждается и нашими расчетами (рис. 1).

На рис. 2 сплошными линиями (1, 3) изображены рассчитанные по (24) спектры фотолюминесценции квантовой ямы GaAs толщиной $L = 10$ nm в матрице AlAs для температуры $T = 4.2$ K и концентрацией $n = p = 10^{11}$ и $3 \cdot 10^{12}$ cm^{-2} . Для такой квантовой ямы, согласно [12], энергетическая щель в отсутствие фотовозбуждения $E_g = E_{g0} + E_{1n} + E_{1p} = 1564$ meV, где $E_{g0} = 1519$ meV, $E_{1n} = 38.2$ meV, $E_{1p} = 6.6$ meV; $\Delta E_g = 18.7$ meV для $n = p = 10^{11}$ cm^{-2} и $\Delta E_g = 43.1$ meV для $n = p = 3 \cdot 10^{12}$ cm^{-2} . Штриховыми линиями изображены спектры фотолюминесценции по формуле (23) без учета правил отбора по волновому вектору (кривые 2, 4). Видно, что различие между спектрами фотолюминесценции, рассчитанными по модели с учетом и без учета правил отбора по квазиимпульсу, значительно.

Итак, развита электростатическая модель расчета сужения запрещенной зоны $\Delta E_g > 0$ при сильном фотовозбуждении кристаллического 2D слоя. Впервые учтен флуктуационный электростатический потенциал вдоль 2D слоя, создаваемый фотовозбужденной электронно-дырочной плазмой. Рассчитаны обменная и корреляционная энергии взаимодействий электронов и дырок. С учетом только первых квантовых уровней в c - и v -зонах дан расчет формы линии фотолюминесценции 2D слоя GaAs в матрице AlGaAs. Рассчитанные значения сужения зоны согласуются с известными экспериментальными данными.

Благодарим Ф.Н. Боровика и Е.Ф. Кислякова за обсуждение работы.

Список литературы

- [1] S. Schmitt-Rink, D.S. Chemla, D.A.B. Miller. *Adv. Phys.* **38**, 2, 89 (1989).
- [2] S. Das Sarma, R. Jalabert, S.-R. Eric Yang. *Phys. Rev.* **B41**, 12, 8288 (1990).
- [3] Л.К. Кулик, А.И. Тартаковский, А.В. Ларионов, С.В. Боровицкая, В.Д. Кулаковский. *ЖЭТФ* **112**, 1(6), 353 (1997).
- [4] R. Cingolani, K. Ploog. *Adv. Phys.* **40**, 5, 535 (1991).
- [5] W. Langbein, S. Hallstein, H. Kalt, R. Notzel, K. Ploog. *Phys. Rev.* **B51**, 3, 1946 (1995).
- [6] О.В. Волков, Е.В. Житомирский, И.В. Кукушкин, В.Е. Бисты, К. фон Клитцинг, К. Эберл. *Письма в ЖЭТФ* **66**, 11, 730 (1997).
- [7] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло, Ф.Н. Боровик. *ФТП* **30**, 10, 1767 (1996).
- [8] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло. *ЖПС* **64**, 3, 367 (1997).
- [9] P.Y. Yu, M. Cardona. *Fundamentals of Semiconductors. Physics and materials properties*. Springer, Berlin et al. (1999). 620 p. Ch. 9.
- [10] И.А. Меркулов, А.В. Родина. *ФТП* **28**, 2, 321 (1994).
- [11] J.M. Luttinger. *Phys. Rev.* **42**, 4, 1030 (1956).
- [12] A. Franceschetti, A. Zunger. *Phys. Rev.* **B52**, 20, 14664 (1995).
- [13] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло. Труды 3-й конф. по лазерной физике и спектроскопии. Гродно, Минск (1997). Т. 1. С. 354.
- [14] N.A. Poklonski, A.I. Siaglo. In: *Physics, Chemistry and Application of Nanostructures* / Ed. by V.E. Borisenko et al. World Scientific, Singapore (1997). P. 125.
- [15] V.K. Kononenko, D.V. Ushakov. *Phys. Stat. Sol.* **B211**, 2, 743 (1999).
- [16] А.Я. Шик. *ФТП* **29**, 8, 1345 (1995).
- [17] В. Вайскопф. *УФН* **103**, 1, 155 (1971).
- [18] А.Б. Шмидт. *Статистическая термодинамика классической плазмы*. Энергоатомиздат, М. (1991). 119 с.
- [19] A. Ishihara. *Electron Liquids*. Springer, Berlin et al. (1998). 317 p.
- [20] Н.С. Рыгова. *Вестн. МГУ. Физика, астрономия* **3**, 30 (1967).
- [21] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем*. Мир, М. (1985). С. 28. [Пер. с англ.: Т. Ando, A. Fowler, F. Stern. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 2, 437 (1982)].
- [22] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. *Физика твердого тела*. Мир, М. (1979). Т. 1. С. 334. [Пер. с англ.: N.W. Ashcroft, N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Rinehart and Winston, N. Y., Holt (1976). V. 1].
- [23] О.В. Константинов, О.И. Оболенский, Б.В. Царенков. *ФТП* **31**, 5, 571 (1997).
- [24] А.В. Чаплик. *ЖЭТФ* **60**, 5, 1845 (1971).
- [25] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников*. Наука, М. (1990). 688 с. Гл. 19.
- [26] А.П. Леванюк, В.В. Осипов. *УФН* **133**, 3, 427 (1981).
- [27] Ю.Я. Ткач. *ЖЭТФ* **101**, 203 (1992).
- [28] А. Афоненко, В.К. Кононенко, И.С. Манак, В.А. Шевцов. *ФТП* **31**, 9, 1087 (1997).
- [29] *Semiconductors-Basic Data* / Ed. by O. Madelung. Springer, Berlin et al. (1996). 317 p.