

Ф И З И К А

УДК 538.915

doi: 10.31429/vestnik-15-3-87-91

КУЛОНОВСКИЕ КОРРЕЛЯЦИИ В ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНОЙ
ПЛАЗМЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ В ПЛАНАРНОМ
ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ ГЕТЕРОСЛОЕ

Кургачёв А. Ю., Лигачёв Д. В., Рудоман Н. Р., Тумаев Е. Н.

COULOMB CORRELATIONS IN AN ELECTRON-HOLE SEMICONDUCTOR PLASMA
IN THE VICINITY OF A QUANTUM DOT

A. Y. Kurgachev, D. V. Ligachev, N. R. Rudoman, E. N. Tumayev

Kuban State University, Krasnodar, Russia
e-mail: tumayev@phys.kubsu.ru

Abstract. An exciton is a bound state of an electron and an electron hole which are attracted to each other by the electrostatic Coulomb force. It is an electrically neutral quasiparticle that exists in insulators, semiconductors and in some liquids. The exciton is regarded as an elementary excitation of condensed matter that can transport energy without transporting net electric charge. An exciton can form when a photon is absorbed by a semiconductor. Coulomb correlations in an electron-hole plasma of semiconductor heterostructures are considered. One-dimensional parabolic potential modeling a heterolayer is taken. The Coulomb interaction of an electron and a hole in an exciton was considered as a perturbation. The wave functions of the electron-hole pair for the ground s state are obtained and with their help the exciton binding energy is calculated as a function of the thickness of the heterolayer. Calculations have been made for the ground state of the exciton corresponding to the s-state of the orbital motion of the electron and hole and to zero vibronic numbers.

Keywords: heterolayer, electron-hole pair, parabolic potential, exciton wave function, exciton binding energy, perturbation theory, vibro.

Исследование туннельных характеристик взаимодействующих примесных комплексов или связанных квантовых точек в присутствии кулоновских корреляций локализованных электронов является одной из наиболее актуальных проблем физики наноструктур. Интерес к таким структурам обусловлен их привлекательностью. Создание современных устройств нанoeлектроники требует как технологических разработок, так и фундаментальных физических исследований. Такие явления включают в себя не только многочастичные кулоновские и электрон-фононные корреляции, но и модификацию локальной электронной структуры вблизи локализованных состояний.

Основной целью работы является исследование электронно-дырочных кулоновских корреляций в двумерном электронно-дырочном слое. Рассмотрим двумерную гетероструктуру $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ [1], состоящую из двух пространственно разделенных слоев, один из которых содержит электроны, а другой — дырки. Такая модель рассматривалась в [2], где было проведено ее численное исследование в приближении, в котором электронный и дырочный слои моделируются прямоугольными потенциальными ямами конечной глубины. Аналогичные вычисления были проделаны также в рамках работ [3, 4]. Кулоновские корреляции в электронно-дырочной плазме изучались в [5]. Уравнение Шредингера, описывающее поведение электронно-дырочной

Кургачёв Алексей Юрьевич, аспирант кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: l-e-x-o@yandex.ru.

Лигачёв Дмитрий Владимирович, аспирант кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: ligach23@mail.ru.

Рудоман Нэлл Радиковна, аспирант кафедры физики и информационных систем Кубанского государственного университета; e-mail: rudnel@ftf.kubsu.ru.

Тумаев Евгений Николаевич, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета; e-mail: tumayev@phys.kubsu.ru.

Работа выполнена в рамках гранта № 16-42-230280 «Теоретическое и экспериментальное исследование коллективных явлений в электронно-дырочных системах в полупроводниковых наноструктурах».

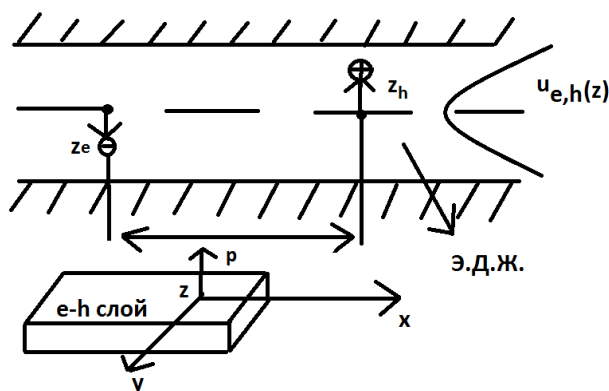


Рис. 1. Схематическое изображение гетерослоя и параболического потенциала

пары (экситона) в этой модели, имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_\rho} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_{ez}} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + U_e(z_e) - \frac{\hbar^2}{2m_{hz}} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + U_h(z_h) - \frac{e^2}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \right] \times \psi(\rho, z_e, z_h) = E \psi(\rho, z_e, z_h), \quad (1)$$

где m_ρ — эффективная радиальная масса электронно-дырочной пары (экситона), m_{ez} — эффективная осевая масса электрона, m_{hz} — эффективная осевая масса дырки, ρ — проекция расстояния между электроном и дыркой на плоскость, перпендикулярную оси O_z , z_e, z_h — вертикальные координаты электрона и дырки, ψ — волновая функция, E — энергия системы, $-\frac{e^2}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}$ — потенциальная энергия кулоновского взаимодействия электрона и дырки. Потенциалы, выражения $U_e(z_e)$ и $U_h(z_h)$ для гетерослоя, описанного в [1], имеют вид

$$U(z) = \begin{cases} U_0, & |z| > h/2; \\ 0, & |z| \leq h/2, \end{cases} \quad (2)$$

где h — толщина гетерослоя. Волновая функция, описывающая электронно-дырочную пару $\psi(\rho, z_e, z_h)$, считается зависящей только от координат ρ, z_e, z_h . Зависимостью волновой функции от азимутального угла φ пренебрегаем, т.е. исследуем s-состояние экситона. В этом случае рассматривается энергия его основного состояния, т.е. вклад в энергию орбитального движения квазичастиц не учитывается.

Роль потенциалов $U_e(z_e)$ и $U_h(z_h)$ в описании электронно-дырочного слоя заключается

в удержании квазичастиц. За счет потенциальной энергии электронно-дырочного взаимодействия $-\frac{e^2}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}$ возникают пространственные корреляции расположений электронов и дырок как в плоскости O_{xy} , так и вдоль оси O_z .

Схематическое изображение гетерослоя с указанием осей координат приведено на рис. 1, где также представлен график параболического потенциала, с помощью которого в настоящей статье моделируется гетерослой.

Изменение потенциалов $U_e(z_e)$ и $U_h(z_h)$, связанное с тетрагональным искажением кристаллической решетки гетероструктуры, игнорируется.

Показанная на рис. 1 парабола моделирует гетероструктуру в направлении оси O_z , при этом предполагается, что характерный размер параболы одинаков для электронов и дырок и равен толщине гетерослоя h . Поперечное сечение параболы имеет форму окружности.

Для описания эффектов электронно-дырочной корреляции будем использовать уравнение Шредингера (1). Для аналитического исследования предлагается использовать теорию возмущений. Основанием для ее использования является выбор потенциала гетерослоя в виде параболы, которая неограниченно возрастает при удалении срединной плоскости гетерослоя

$$U(z) = \frac{m\omega^2 z^2}{2}, \quad (3)$$

где m — масса квазичастицы, ω — частота колебаний, z — вертикальная координата квазичастицы.

В нулевом приближении вместо уравнения (1) будем рассматривать следующее урав-

нение:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_\rho} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_{ez}} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + U_e(z_e) - \frac{\hbar^2}{2m_{hz}} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + U_h(z_h) \right] \psi(\rho, z_e, z_h) = E \psi(\rho, z_e, z_h). \quad (4)$$

Ищем решение уравнения (4) методом разделения переменных, для чего полагаем:

$$\psi(\rho, z_e, z_h) = \psi_1(\rho) \psi_2(z_e) \psi_3(z_h). \quad (5)$$

Подставив явный вид потенциалов удерживающего гетерослоя, и воспользовавшись представлением (5), после деления на волновые функции $\psi_1 \psi_2 \psi_3$ получим

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m_\rho} \frac{1}{\psi_1} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \psi_1}{\partial \rho} \right) - \\ & -\frac{\hbar^2}{2m_{ez}} \frac{1}{\psi_2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z_e^2} + \frac{m_e \omega_e^2 z_e^2}{2} - \\ & -\frac{\hbar^2}{2m_{hz}} \frac{1}{\psi_3} \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial z_h^2} + \frac{m_h \omega_h^2 z_h^2}{2} = E. \end{aligned} \quad (6)$$

Уравнение (6) распадается на три уравнения:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\rho} \frac{1}{\psi_1} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \psi_1}{\partial \rho} \right) = E_1 \psi_1, \quad (7)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{ez}} \frac{1}{\psi_2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z_e^2} + \frac{m_e \omega_e^2 z_e^2}{2} = E_2 \psi_2, \quad (8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{hz}} \frac{1}{\psi_3} \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial z_h^2} + \frac{m_h \omega_h^2 z_h^2}{2} = E_3 \psi_3, \quad (9)$$

где уравнение (7) описывает радиальное движение экситона в плоскости O_{xy} , уравнение (8) — движение электронов вдоль оси z , (9) — движение дырки вдоль оси z . При этом должен соблюдаться баланс энергий

$$E = E_1 + E_2 + E_3, \quad (10)$$

Оператор Лапласа является определенно-отрицательным, поэтому дифференциальные операторы уравнений (7)–(10) определенно-положительные. Осцилляторные потенциалы также положительны, поэтому как полная энергия экситона E , так и ее части E_1 , E_2 , E_3 , отвечающие определенным видам движений тоже положительны. Поэтому энергию E_1 можно представить в виде

$$\frac{2m_\rho E_1}{\hbar^2} = k^2, \quad (11)$$

где k — волновое число.

Для решения уравнения (7) вводим новую безразмерную координату $\zeta = k\rho$. Тогда уравнение приводится к следующему виду:

$$\psi_1'' + \frac{1}{\zeta} \psi_1' + \psi_1 = 0. \quad (12)$$

Всюду регулярное решение уравнения (12) пропорционально функции Бесселя $J_0(k\rho)$. Электронно-дырочная пара совершает в плоскости (x, y) инфинитное движение, следовательно, квадрат модуля волновой функции нормируется на δ -функцию, энергия E_1 положительна и пробегает непрерывный ряд значений. Поэтому волновое число k характеризует движение экситона в плоскости O_{xy} . Величина энергии

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\rho}.$$

Движение электрона и дырки вдоль оси z описывается осцилляторными волновыми функциями $\psi_2(z_e)$ и $\psi_3(z_h)$, нормированными в силу финитного характера движения по оси z на единицу. Значения энергий E_2 , E_3 даются хорошо известными выражениями: $E_2 = \hbar\omega_e(n_2 + \frac{1}{2})$; $E_3 = \hbar\omega_h(n_3 + \frac{1}{2})$.

Распределение вероятности расстояния между электроном и дыркой в экситоне, представленное с помощью безразмерной координаты ξ при различных значениях k в интервале $k\hbar = 0, 1, \dots, 1$, показано на рис. 2.

Вклад в полную энергию электронно-дырочной системы, дает в первом порядке теории возмущений сумма энергий E_1 , E_2 , E_3 . Энергия электронно-дырочного взаимодействия в экситоне E_4 рассчитывается по следующей формуле:

$$E_4 = \langle \psi | V | \psi \rangle, \quad (13)$$

где ψ — волновая функция экситона в нулевом приближении (5), $V(\rho, z_e, z_h)$ — потенциал электронно-дырочного взаимодействия

$$V(\rho, z_e, z_h) = -\frac{e^2}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}}, \quad (14)$$

Для вычисления (13) запишем его с использованием найденных волновых функций

$$\begin{aligned} E_4 = & \iiint \psi_1^*(\rho) \psi_2^*(z_e) \psi_3^*(z_h) - \\ & - \frac{e^2}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \psi_1(\rho) \psi_2(z_e) \psi_3(z_h) \times \\ & \times 2\pi \rho d\rho dz_e dz_h, \end{aligned} \quad (15)$$

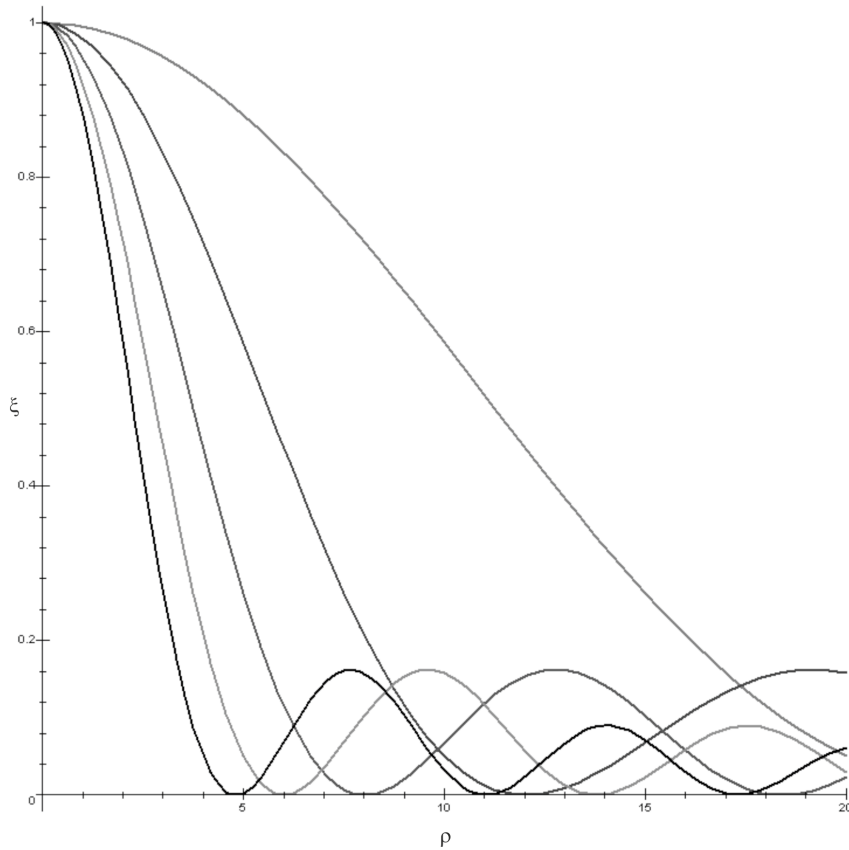


Рис. 2. Распределение вероятности обнаружения электрона и дырки на расстоянии ρ как функция безразмерной координаты ξ

Поскольку электроны и дырки локализованы в слое гетероструктуры, можно рассмотреть приближение, при котором $z_e - z_h \approx a$, где a — среднее расстояние между электроном и дыркой в экситоне, приблизительно равная толщине слоя.

В таком приближении, учитывая, что волновые функции $\psi_2(z_e)$ и $\psi_3(z_h)$ нормированы на единицу, выражение (15) для энергии электронно-дырочного взаимодействия упрощается и принимает вид

$$E_4 = \frac{2\pi}{N} \int_0^\infty \frac{\rho J_0^2(k\rho) d\rho}{\sqrt{\rho^2 + h^2}}, \quad (16)$$

где N — нормировочный интеграл, равный

$$N = 2\pi \int_0^\infty \rho J_0^2(k\rho) d\rho.$$

Соотношение (16) описывает энергию связи экситона как функцию толщины гетерослоя.

График зависимостей энергий связи экситона от толщины гетерослоя показан на рис. 3.

Таким образом, в настоящей работе:

- 1) сформулирована модель экситона, в слое гетероструктуры;
- 2) приведено уравнение Шредингера, описывающее динамику экситона;

Литература

1. *Ненашев А.В.* Моделирование электронной структуры квантовых точек Ge в Si. Автореф. дис.: канд. физ-мат наук. Новосибирск, 2004. 21 с.
2. *Penn C., Schaffler F., Bauer G.* Application of numerical exciton-wave-function calculations to the question of band alignment in $\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x$ quantum wells // *Phys. Rev. B.* 1998. Vol. 59. P. 13314. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.13314
3. *Caruthers E., Lin-Chung P.J.* Pseudopotential calculation for (GaAs)-(AlAs) and related monolayer heterostructures // *Phys. Rev. B.* 1978. Vol. 17. Iss. 6. C. 2705–2732. DOI: 10.1103/PhysRevB.17.2705
4. *Brent R.P.* Algorithms for minimization without derivatives. Courier Dover Publication, 1973.

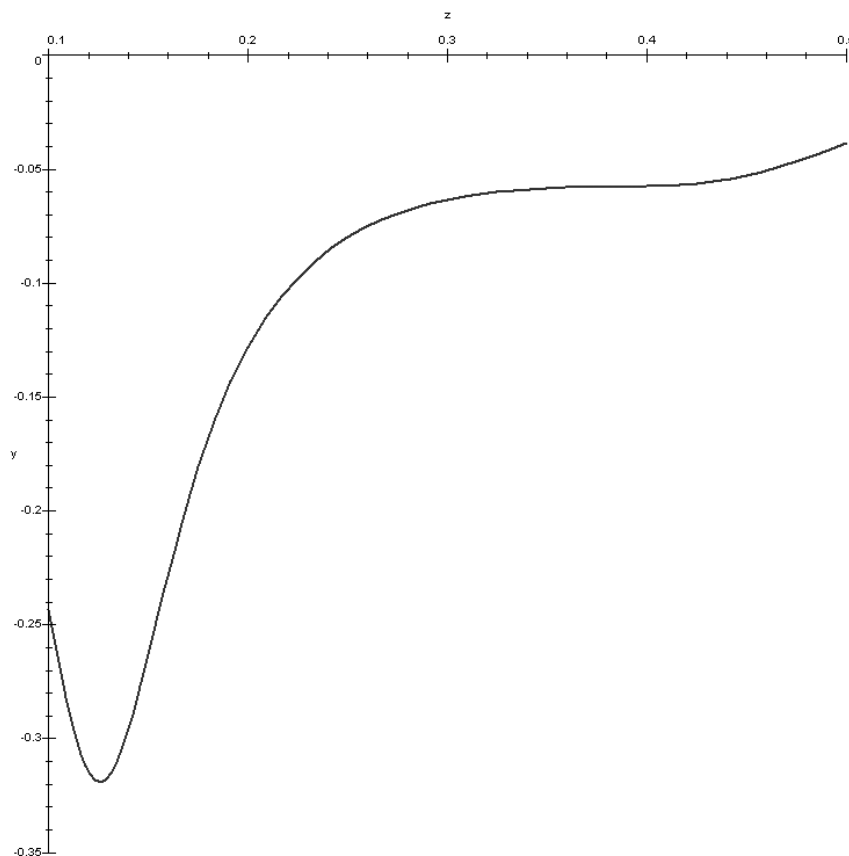


Рис. 3. Зависимость энергии связи экситона от толщины электронно-дырочного слоя в единицу Хартри

5. Бабиченко В.С., Полищук И.Я. Кулоновские корреляции и электронно-дырочная жидкость в двойных квантовых ямах // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97. Вып. 11. С. 726–731. DOI: 10.7868/S0370274X13110052

References

1. Nenashev A.V. *Modeling of the quantum dots electronic structure GE in Si*. Abstr dis. cand. of phys.-math. sc. Novosibirsk, 2004.
2. Penn C., Schaffler F., Bauer G. Application of numerical exciton-wave-function calculations to the question of band alignment in $\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x$ quantum wells. *Phys. Rev. B.*, 1998, vol. 59, pp. 13314. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.13314
3. Caruthers E., Lin-Chung P.J. Pseudopotential calculation for (GaAs)–(AlAs) and related monolayer heterostructures. *Phys. Rev. B.*, 1978, vol. 17, iss. 6, pp. 2705–2732. DOI: 10.1103/PhysRevB.17.2705
4. Brent R.P. *Algorithms for minimization without derivatives*. Courier Dover Publication, 1973.
5. Babichenko V.S., Polishchuk I.Ya. Coulomb correlations and electron-hole fluid in double quantum wells. *JETP Letters*, 2013, vol. 97, iss. 11, pp. 726–731. DOI: 10.7868/S0370274X13110052