

Многокомпонентная электронно-дырочная жидкость в Si/SiGe квантовых ямах

А. А. Васильченко¹⁾

Кубанский государственный университет, 350040 Краснодар, Россия

Поступила в редакцию 5 июня 2018 г.

После переработки 25 июня 2018 г.

Для вычисления энергии электронно-дырочной жидкости в квантовых ямах Si/Si_{1-x}Ge_x/Si используется теория функционала плотности. Численно решались три одномерных нелинейных уравнений Шредингера для электронов, легких и тяжелых дырок. Показано, что в мелких квантовых ямах (малые x) в электронно-дырочной жидкости существуют легкие и тяжелые дырки. С увеличением содержания Ge происходит переход в состояние с одним типом дырок, причем при этом равновесная плотность электронно-дырочных пар уменьшается более чем в два раза.

DOI: 10.1134/S0370274X18150079

Введение. Низкоразмерные системы, в частности, двумерные слои в полупроводниках, проявляют новые свойства по сравнению с трехмерными образцами тех же соединений, что объясняется пространственными ограничениями, усиливающими эффекты межчастичных взаимодействий. Одной из таких систем является квазидвумерная электронно-дырочная жидкость (ЭДЖ). Впервые возможность образования квазидвумерной ЭДЖ показана в работах [1, 2]. Недавно ЭДЖ обнаружена в квантовых ямах SiO₂/Si/SiO₂ [3, 4] и в гетероструктурах Si/Si_{1-x}Ge_x/Si [5–11].

Квантовые ямы Si/SiGe/Si представляют собой структуры второго рода, в которых слой SiGe формирует барьер для электронов и квантовую яму для дырок. Экспериментальные результаты указывают на модификацию свойств ЭДЖ в зависимости от содержания германия в слое SiGe. В частности, в работах [10, 11] экспериментально была обнаружена необычная структура в спектре излучения ЭДЖ в квантовых ямах SiGe/Si с малым содержанием германия (несколько процентов). Объяснить форму линии конденсированной фазы удалось в рамках представлений о многокомпонентной ЭДЖ, содержащей как тяжелые, так и легкие дырки. Отметим, что обнаруженная тонкая структура спектров излучения ЭДЖ исчезает по мере увеличения содержания германия в квантовой яме.

Целью настоящей работы является вычисление энергии квазидвумерной ЭДЖ в квантовых ямах SiGe/Si при наличии двух типов дырок. Для вычис-

ления энергии ЭДЖ используется теория функционала плотности.

Модель. Рассмотрим квазидвумерную ЭДЖ с электронами, легкими и тяжелыми дырками. Полную энергию для такой электронно-дырочной системы запишем в виде:

$$E_t[n_e, n_{hh}, n_{hl}] = T_e[n_e] + T_{hh}[n_{hh}] + T_{hl}[n_{hl}] + \frac{1}{2} \int V_c(z)(n_e(z) - n_h(z))dz + \int U_e(z)n_e(z)dz + \int U_{hh}(z)n_{hh}(z)dz + \int U_{hl}(z)n_{hl}(z)dz + E_{xc}[n_e, n_{hh}, n_{hl}], \quad (1)$$

где T_e , T_{hh} , T_{hl} – кинетические энергии электронов, тяжелых и легких дырок соответственно, $V_c(z)$ – кулоновский потенциал, E_{xc} – обменно-корреляционная энергия, $U_e(z)$, $U_{hh}(z)$, $U_{hl}(z)$ – внешние потенциалы для электронов, тяжелых и легких дырок соответственно, n_e , n_{hh} , n_{hl} – плотности электронов, тяжелых и легких дырок соответственно, $n_h = n_{hh} + n_{hl}$.

Используется экситонная система единиц: энергия измеряется в единицах $Ry_{ex} = e^2/2ka_{ex}$, а длина в единицах $a_{ex} = k\hbar^2/\mu e^2$, где μ – приведенная масса, k – диэлектрическая проницаемость. Значения $\mu = 0.126$ и $k = 11.5$ берутся как у кремния, при этом получается $a_{ex} \approx 5$ нм и $Ry_{ex} \approx 13$ мэВ.

Уравнения Кона–Шэма для квазидвумерных электронов, легких и тяжелых дырок запишутся в следующем виде [12, 13]

$$\left(-\frac{\mu}{m_{z,i}} \frac{d^2}{dz^2} + V_{\text{eff},i}(z) \right) \psi_{n,i}(z) = E_{n,i} \psi_{n,i}(z), \quad (2)$$

где $i = e, hh, hl$.

¹⁾e-mail: a_vas2002@mail.ru

Таким образом, проблема сводится к решению трех одномерных нелинейных уравнений Шредингера с потенциалами $V_{\text{eff},e}(z) = V_c(z) + V_{xc,e}(z) + U_e(z)$, $V_{\text{eff},hh}(z) = -V_c(z) + V_{xc,hh}(z) + U_{hh}(z)$ и $V_{\text{eff},hl}(z) = -V_c(z) + V_{xc,hl}(z) + U_{hl}(z)$, где $V_{xc}(z)$ – обменно-корреляционный потенциал, а электростатический потенциал получен из уравнения Пуассона:

$$V_c(z) = 8\pi \int_{-\infty}^z (z - z') [n_h(z') - n_e(z')] dz', \quad (3)$$

Внешние потенциалы для электронов и дырок задаются выражением:

$$U_i(z) = \begin{cases} \Delta_i, & |z| \leq d/2, \\ V_i, & |z| > d/2, \end{cases} \quad (4)$$

где d – ширина ямы (барьера).

Величина Δ_i введена для учета расщепления между легкими и тяжелыми дырками. Возьмем $\Delta_e = \Delta_{hh} = 0$, тогда энергия будет отсчитываться от ширины запрещенной зоны полупроводника, создающего квантовую яму (барьер). В дальнейшем рассматривается гетероструктура 2 рода, для которой $V_e < 0$, $V_{hh} > 0$ и $V_{hl} > 0$.

Когда заполнен только нижний уровень размерного квантования, плотности носителей задаются выражениями:

$$\begin{aligned} n_e(z) &= N_e \psi_{0,e}^2(z), \quad n_{hh}(z) = N_{hh} \psi_{0,hh}^2(z), \\ n_{hl}(z) &= N_{hl} \psi_{0,hl}^2(z), \end{aligned} \quad (5)$$

где N_e , N_{hh} , N_{hl} – двумерные плотности электронов, тяжелых и легких дырок соответственно.

В дальнейшем индекс “0” у переменных будем опускать.

Кинетическая энергия запишется в следующем виде:

$$T_i[n_i] = \frac{\pi\mu}{g_i m_{d,i}} N_i^2 + N_i \left(E_i - \int V_{\text{eff},i}(z) \psi_i^2(z) dz \right). \quad (6)$$

В выражении (6) первое слагаемое соответствует кинетической энергии носителей вдоль электронно-дырочного слоя, а второе – кинетической энергии поперек слоя.

Для обменно-корреляционной энергии используем следующее приближение [14]: $E_{xc}[n_e, n_{hh}, n_{hl}] = E_{xc}[n_e, n_h]$. Тогда в рамках приближения локальной плотности обменно-корреляционные потенциалы имеют вид:

$$V_{xc,e}(z) = \frac{d(n_e \cdot \varepsilon_{xc})}{dn_e}, \quad V_{xc,hh}(z) = \frac{d(n_h \cdot \varepsilon_{xc})}{dn_{hh}},$$

$$V_{xc,hl}(z) = \frac{d(n_h \cdot \varepsilon_{xc})}{dn_{hl}}. \quad (7)$$

Для обменно-корреляционной энергии используется выражение [15]:

$$\varepsilon_{xc} = \frac{1}{2} \frac{a + br_s}{c + dr_d + r_s^2}, \quad (8)$$

где $r_s = (3/(4\pi n_k))^{1/3}$, $a = -4.8316$, $b = -5.0879$, $c = 0.0152$, $d = 3.0426$, $k = e, h$.

Здесь рассматривается электронейтральная ЭДЖ, когда $N_e = N_{hh} + N_{hl} = N$. Энергию на одну электронно-дырочную пару будем отсчитывать от нижнего уровня энергии тяжелой дырки E_{hh} в пустой яме: $E_{eh} = -E_{hh} + E_t/N$.

Учитывая, что энергия Ферми носителей заряда с массой плотности состояний $m_{d,i} = (m_{x,i} m_{y,i})^{1/2}$ и числом эквивалентных долин g_i равна $E_{F,i} = 2\pi\mu N_i / g_i m_{d,i}$ имеем

$$E_{hh} + \frac{2\pi\mu N_{hh}}{g_{hh} m_{d,hh}} = E_{hl} + \frac{2\pi\mu N_{hl}}{g_{hl} m_{d,hl}}. \quad (9)$$

Из уравнения (9) при $g_i = 1$ для электронейтральной ЭДЖ получаем:

$$N_{hl} = N_e \frac{m_{d,hl}}{m_{d,hh} + m_{d,hl}} - \frac{m_{d,hh} m_{d,hl}}{m_{d,hh} + m_{d,hl}} \frac{E_{hl} - E_{hh}}{2\pi\mu}. \quad (10)$$

В случае, если из выражения (10) получается $N_{hl} < 0$, тогда необходимо брать $N_{hh} = N_e$ и $N_{hl} = 0$.

Результаты. Вычисления проводились для структуры Si/Si_xGe_{1-x}/Si. Для вычислений мы использовали следующие параметры [16–18]: $\Delta_{hl} = 16.6x$, $g_e = 4$, $g_{hh} = g_{hl} = 1$, $m_{z,e} = 0.198m_0$, $m_{d,e} = 0.44m_0$, $m_{z,hh} = 0.28m_0$, $m_{d,hh} = 0.2m_0$, $m_{z,hl} = 0.18m_0$, $m_{d,hl} = 0.25m_0$ (m_0 – масса свободного электрона), $V_e = -7.7x$, $V_{hh} = V_{hl} = 53.7x$.

Результаты численного решения уравнений Шредингера приведены на рис. 1. Видно, что волновые функции легких дырок и электронов перекрываются сильнее, чем тяжелых дырок и электронов. Поэтому наличие легких дырок в ЭДЖ приводит к понижению энергии из-за уменьшения кулоновской энергии. Неполное перекрытие волновых функций электронов и дырок приводит к образованию для электронов притягивающего кулоновского потенциала, который превосходит величину барьера для электронов. Из результатов, представленных на рис. 1, видно, что кулоновский потенциал в центре квантовой ямы имеет величину порядка $-0.6 Ry_{ex}$, а обменно-корреляционный потенциал около $-0.7 Ry_{ex}$. Для дырок внутри квантовой ямы

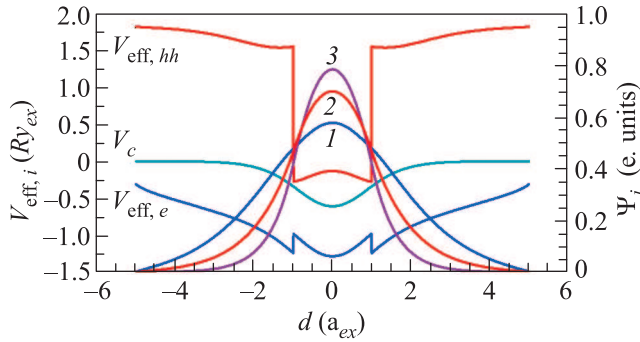


Рис. 1. (Цветной онлайн) Профили потенциалов и волновых функций электронов (1), тяжелых дырок (3) и легких дырок (2). $N = 0.29$, $N_{hl} = 0.082$, $x = 0.034$, $d = 2$

отталкивающий кулоновский потенциал компенсируется обменно-корреляционным потенциалом. В выбранной нами модели эффективные потенциалы легких и тяжелых дырок отличаются только внутри квантовой ямы на величину Δ_{hl} .

На рисунке 2 показана зависимость энергии электронно-дырочной пары от двумерной плотности пар для квантовой ямы с шириной $d = 2$ (10 нм). При $x = 0.03$ минимум энергии достигается при $N = 0.34$ и ЭДЖ является трехкомпонентной с плотностью легких дырок $N_{hl} = 0.12$. При увеличении концентрации германия появляются два минимума, в первом из них (при меньшем N) ЭДЖ содержит только тяжелые дырки, во втором – легкие и тяжелые дырки. При $x = 0.034$ оба минимума энергии почти равны. При дальнейшем увеличении x остается один минимум энергии (двухкомпонентная ЭДЖ) и равновесная плотность электронно-дырочных пар уменьшается. Переход в двухкомпонентное состояние связан не только с увеличением расщепления уровней энергии между легкими и тяжелыми дырками, но и с увеличением энергии легких дырок во внешнем потенциале. Отметим, что при $x = 0.03$ практически во всем диапазоне плотностей электронно-дырочных пар (рис. 2) присутствуют легкие дырки. При $x = 0.034$ и $x = 0.04$ легкие дырки с низкой плотностью начинают появляться вблизи первого минимума энергии и при $N = 0.3$ плотности легких дырок достигают значений $N_{hl} = 0.087$ (при $x = 0.034$) и $N_{hl} = 0.071$ (при $x = 0.04$).

Переход от трехкомпонентной к двухкомпонентной ЭДЖ при увеличении x происходит достаточно резко. Это наглядно продемонстрировано на рис. 3. Отметим, что при малых x плотности легких и тяжелых дырок близки друг к другу. При переходе от

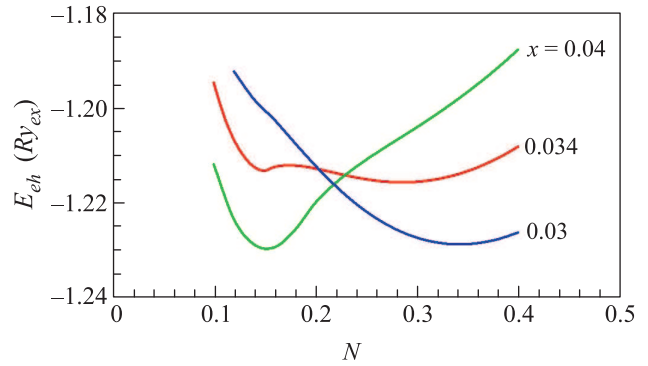


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности электронно-дырочных пар при $d = 2$

трехкомпонентной к двухкомпонентной ЭДЖ равновесная плотность электронно-дырочных пар уменьшается более чем в два раза.

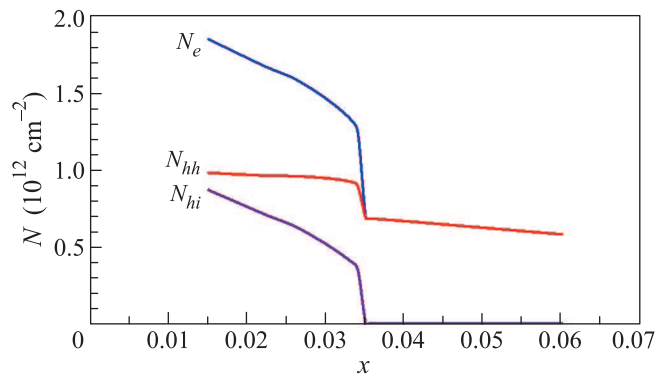


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости плотностей электронов, тяжелых и легких дырок от концентрации германия в слое SiGe при $d = 2$

Были проведены вычисления для структур с различными ширинами квантовых ям. Результаты вычислений приведены на рис. 4. Видно, что с уменьшением ширины квантовых ям переход к двухкомпонентной ЭДЖ происходит при большем значении концентрации германия. Причина такой зависимости от ширины квантовой ямы связана с более сильным влиянием внешнего потенциала на расстояние между уровнями энергии тяжелых и легких дырок при малых d в мелких квантовых ямах.

Учет в расчетах наличия в ЭДЖ легких и тяжелых дырок приводит к хорошему согласию с экспериментальными данными. Действительно, в работе [10] показано, что при $d = 5$ нм и $x < 0.05$ существует трехкомпонентная ЭДЖ, что неплохо согласуется с результатами расчетов. Экспериментальное значение равновесной плотности электронно-дырочных

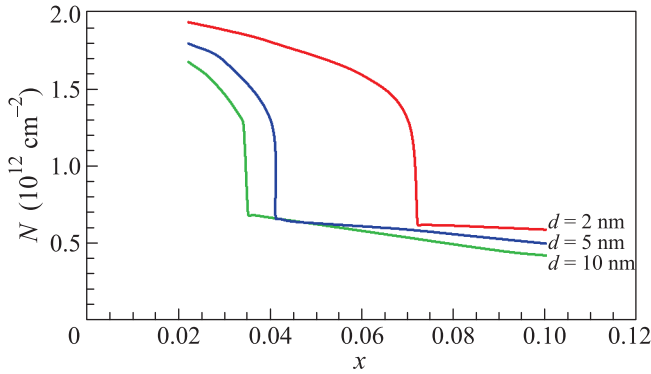


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость равновесной плотности электронно-дырочных пар от концентрации германия в слое SiGe

пар для трехкомпонентной ЭДЖ $N = 1.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ [10] при $d = 5 \text{ нм}$ хорошо согласуется с вычисленными значениями (рис. 4). В работе [6] показано, что в структуре с $d = 2 \text{ нм}$ и $x = 0.09$, по-видимому, образуется двухкомпонентная квазидвумерная ЭДЖ. Результаты вычислений для такой структуры (рис. 4) дают $N = 6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, что неплохо согласуется с экспериментом [6].

Заключение. Вычислена энергия ЭДЖ в гетероструктурах Si/SiGe/Si с различными ширинами ям (барьеров) и содержанием германия. Показано, что в мелких квантовых ямах (низкая концентрация германия) образуется трехкомпонентная ЭДЖ. С увеличением содержания германия происходит переход к двухкомпонентной ЭДЖ, причем равновесная плотность электронно-дырочных пар сильно уменьшается. Результаты вычислений согласуются с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и администрации Краснодарского края (проект # 16-42-230280).

1. П. Д. Алтухов, А. В. Иванов, Ю. Н. Ломасов, А. А. Рогачев, Письма в ЖЭТФ **38**, 5 (1983).
2. П. Д. Алтухов, А. В. Иванов, Ю. Н. Ломасов, А. А. Рогачев, Письма в ЖЭТФ **39**, 432 (1984).

3. N. Pauc, V. Calvo, J. Eymery, F. Fournel, and N. Magnea, Phys. Rev. Lett. **92**, 236802 (2004).
4. N. Pauc, V. Calvo, J. Eymery, F. Fournel, and N. Magnea, Phys. Rev. B **72**, 205324 (2005).
5. V. V. Zaitsev, V. S. Bagaev, T. M. Burbaev, V. S. Krivobok, A. V. Novikov, and E. E. Onishchenko, Physica E **40**, 117 (2008).
6. Т. М. Бурбаев, М. Н. Гордеев, Д. Н. Лобанов, А. В. Новиков, М. М. Рзаев, Н. Н. Сибельдин, М. Л. Скориков, В. А. Цветков, Д. В. Шепель, Письма в ЖЭТФ **92**, 341 (2010).
7. V. S. Bagaev, V. S. Krivobok, S. N. Nikolaev, A. V. Novikov, E. E. Onishchenko, and M. L. Skorikov, Phys. Rev. B **82**, 115313 (2010).
8. В. С. Багаев, В. С. Кривобок, С. Н. Николаев, Е. Е. Онищенко, М. Л. Скориков, А. В. Новиков, Д. Н. Лобанов, Письма в ЖЭТФ **94**, 63 (2011).
9. В. С. Багаев, В. С. Кривобок, С. Н. Николаев, Е. Е. Онищенко, А. А. Пручкина, Д. Ф. Аминев, М. Л. Скориков, Д. Н. Лобанов, А. В. Новиков, ЖЭТФ **144**, 1045 (2013).
10. С. Н. Николаев, В. С. Кривобок, В. С. Багаев, Е. Е. Онищенко, А. В. Новиков, М. В. Шалеев, Письма в ЖЭТФ **104**, 161 (2016).
11. S. N. Nikolaev, V. S. Bagaev, V. S. Krivobok, E. T. Davletov, A. S. Gulyashko, G. F. Kopytov, and A. A. Vasilchenko, V. Russ. Acad. Sci.: Phys. **82**, 427 (2018).
12. R. K. Kalia and P. Vashishta, Phys. Rev. B **17**, 2655 (1978).
13. В. Кон, П. Вашишта, Теория неоднородного электронного газа, под ред. С. Лундквиста и Н. Марча, Мир, М. (1987), с. 86.
14. G. Kirczenow and K. S. Singwi, Phys. Rev. B **20**, 4171 (1979).
15. P. Vashishta and R. K. Kalia, Phys. Rev. B **10**, 6492 (1982).
16. L. Yang, J. R. Watling, R. C. W. Wilkins, M. Borici, J. R. Barker, A. Asenov, and S. Roy, Semicond. Sci. Technol. **19**, 1174 (2004).
17. D. J. Robbins, L. T. Canham, S. J. Barnett, A. D. Pitt, and P. Calcott, J. Appl. Phys. **71**, 1407 (1992).
18. M. M. Rieger and P. Vogl, Phys. Rev. B **48**, 14276 (1993).