

## КУЛОНОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СИСТЕМАХ КВАНТОВЫХ ЯМ

В.В.Капаев, Ю.В.Конаев, Н.В.Корняков\*

Физический институт им. П.Н.Леведеза РАН  
117924 Москва, Россия

\*Институт микроэлектроники РАН  
150051 Ярославль, Россия

Поступила в редакцию 9 ноября 1993 г.

Изучается влияние кулоновского взаимодействия электронов на положение энергетических уровней и характер локализации волновой функции в системах нескольких квантовых ям. Если расстояние между экстремумами двух нижних подзон энергетического спектра меньше критической величины, характеризующей силу взаимодействия, то в системе развивается неустойчивость кулоновской природы, приводящая к электронному фазовому переходу.

1. Перспективы создания принципиально новых полупроводниковых приборов на основе гетероструктур, содержащих несколько квантовых ям (КЯ), требуют понимания физических процессов, протекающих в таких системах. В большинстве случаев адекватное описание может быть получено [1,2] в рамках метода огибающих для волновой функции, когда слоистая гетероструктура моделируется путем задания потенциальной энергии электронов в виде одномерного одночастичного потенциала. Преимущество этого метода по сравнению, например, с расчетами по методу сильной связи состоит в правильном учете через эмпирические параметры типа ширины запрещенной зоны исходных свойств полупроводниковых материалов. Вместе с тем, для получения удовлетворительных результатов при расчетах энергетического спектра и волновых функций обязательным является учет кулоновского взаимодействия носителей заряда. Поскольку все описанные ниже эффекты могут быть получены уже в приближении Хартри, то обменным взаимодействием, не меняющим картины качественно, в дальнейшем мы будем пренебрегать.

2. Волновая функция электрона в системе КЯ для метода огибающих

$$\Psi(x, r) = S^{-1/2} \sum_j \psi_j(x) \exp(ikr), \quad (1)$$

где  $S$  – нормировочная площадь,  $j$  – номер подзоны поперечного движения (по отношению к оси КЯ), характеризуемого квазиимпульсом  $k$ ; спин электронов во внимание не принимаем. Ось  $x$  направлена вдоль оси структуры,  $r = (y, z)$ .

Продольная компонента  $\psi_j(x)$  волновой функции (1) удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_j(x) - \left[ \epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - U_0(x) + e\phi(x) \right] \psi_j(x) = 0, \quad (2)$$

где  $m, e$  – эффективная масса и заряд электрона,  $U_0(x)$  – исходный потенциал гетероструктуры. Электростатический потенциал  $\phi(x)$  определяется из уравнения

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = \frac{4\pi e}{\kappa} (n(x) - N^+(x)), \quad (3)$$

$\kappa$  – диэлектрическая проницаемость,  $N^+(x)$  – концентрация ионизованных доноров. Для простоты будем рассматривать случай, когда температура  $T$ , измеряемая в энергетических единицах, находится в диапазоне  $E_{imp} \ll T \ll \delta$

( $E_{imp}$  – энергия ионизации атомов примеси,  $\delta$  – расстояние между экстремумами двух нижних электронных подзон; для примесей типа Si в GaAs при ширине КЯ менее 10 нм указанное условие выполняется в широком диапазоне температур вплоть до комнатной). При этом все доноры являются ионизованными, и их концентрация совпадает с концентрацией легирующей примеси  $N^+(x) = N(x)$ . Кроме того, все электроны находятся в нижней подзоне энергетического спектра и концентрация электронов  $n(x)$  задается выражением

$$n(x) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^2} \int f_j(k) d^2k |\psi_j(x)|^2, \quad (4)$$

$f_j(k)$  – функция распределения электронов в  $j$ -подзоне системы КЯ.

Разложим искомые волновые функции  $\psi_j(x)$  по набору функции  $\psi_j^{(0)}(x)$ , удовлетворяющих уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_j^{(0)}(x) - [\epsilon_j^{(0)} - U_0(x)] \psi_j^{(0)}(x) = 0. \quad (5)$$

и учтем в разложении только два нижних состояния  $\psi_1^{(0)}(x)$ ,  $\psi_2^{(0)}(x)$ , играющих главную роль в формировании состояний с нарушенной симметрией. Это можно сделать, если расстояние до других подзон энергетического спектра превышает величину  $\delta$ , чего всегда можно добиться выбором параметров КЯ. Тогда

$$\psi_1(x) = u\psi_1^{(0)}(x) + v\psi_2^{(0)}(x), \quad (6)$$

$$\psi_2(x) = u\psi_2^{(0)}(x) - v\psi_1^{(0)}(x), \quad (7)$$

$$u^2 + v^2 = 1. \quad (8)$$

В результате получим систему уравнений для определения коэффициентов  $u$  и  $v$ :

$$\left( \epsilon - \epsilon_1^{(0)} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \sigma_1 \right) u - \gamma v = 0, \quad (9)$$

$$\left( \epsilon - \epsilon_2^{(0)} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \sigma_2 \right) v - \gamma u = 0, \quad (10)$$

где

$$\sigma_i = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_i^{(0)}(x))^* e\phi(x) \psi_i^{(0)}(x) dx, \quad (11)$$

$$\gamma_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_i^{(0)}(x))^* e\phi(x) \psi_j^{(0)}(x) dx = \gamma_{ji} \equiv \gamma. \quad (12)$$

Возьмем для примера систему двух одинаковых КЯ и продемонстрируем некоторые свойства получающихся решений. Рассмотрим характерный случай, когда КЯ однородно легированы донорной примесью, то есть  $N(x) = N_0$  – внутри,  $N(x) = 0$  – вне КЯ. Для исследования условий возникновения в системе состояний с нарушенной симметрией (относительно зеркального отражения) заменим распределение заряда в каждой из КЯ и внутри разделительного барьера постоянными величинами, равными соответствующим средним значениям, а зарядом во внешних барьерах пренебрежем. Тогда непосредственным

интегрированием уравнения (3) можно вычислить распределение электростатического потенциала в системе

$$\phi(x) = uv\phi_0(x), \quad (13)$$

$$\phi_0(x) = \begin{cases} \pm 2\pi N_0(e/\kappa)((x - a/2 - d)^2 - (a + d)d/2), & x \in A, B \\ 2\pi N_0(e/\kappa)xd, & x \in C \end{cases}, \quad (14)$$

где  $A, B$  и  $C$  обозначают соответственно КЯ ( $a$  – ширина одной КЯ) и область разделительного барьера ( $d$  – толщина барьера). Поскольку потенциал (14) меняет знак при операции зеркального отражения в плоскости  $x = 0$ , проходящей через середину центрального барьера, то в уравнениях (9), (10) недиагональные матричные элементы  $\gamma$  отличны от нуля и, в соответствии с (13), пропорциональны  $uv$ . С учетом этого система уравнений (9), (10) имеет нетривиальные решения для параметра  $v$  при

$$\epsilon = \epsilon_0 + (\sigma_1 + \sigma_2 \pm \gamma_0)/2, \quad (15)$$

$$\gamma_0 > \delta + \sigma_1 - \sigma_2, \quad (16)$$

где

$$\gamma_0 = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1^{(0)}(x))^* e\phi_0(x) \psi_2^{(0)}(x) dx, \quad (17)$$

и мы выразили собственные значения  $\epsilon_{1,2}^{(0)}$  для задачи с двухъямным потенциалом через исходное расстояние между уровнями  $\delta$  (зависящее [3] только от параметров разделительного барьера) и энергию уровня в отдельной яме  $\epsilon_0$ :

$$\epsilon_{1,2}^{(0)} = \epsilon_0 \pm \delta/2. \quad (18)$$

Таким образом, если перенормированное диагональным кулоновским взаимодействием расстояние между экстремумами электронных подзон  $\delta$  меньше величины недиагонального взаимодействия, характеризуемого параметром  $\gamma_0$ , то существует два типа решений для волновой функции основного состояния – сохраняющее исходную симметрию структуры и не сохраняющее ее (будем называть их, соответственно, симметричным и несимметричным). Сравнивая (15) с затравочным спектром (18), видим, что при

$$\gamma_0 > \delta + \sigma_1 + \sigma_2 \quad (19)$$

несимметричное состояние оказывается энергетически более выгодным, то есть система оказывается неустойчивой относительно нарушения симметрии. Поскольку в плоскости квантовых ям структура имеет макроскопические размеры и в формировании асимметричного состояния участвует макроскопическое число электронов, то это обстоятельство можно рассматривать как существование в системе электронного фазового перехода кулоновской природы.

3. Выводы, сделанные на основе аналитического расчета, можно распространить на системы с большим количеством КЯ, что подтверждают результаты численного моделирования. Уравнения Шредингера и Пуассона (ШП) для системы КЯ решались итерационным методом. При этом изучалось положение дискретных энергетических уровней, вид и особенности локализации волновых функций, распределение электронной плотности и самосогласованного кулоновского потенциала в зависимости от температуры, уровня легирования и характера распределения легирующей примеси. Моделировались системы двух, трех и более КЯ. Были исследованы случаи однородного легирования всей

гетероструктуры, легированных барьеров, легированных КЯ. Диапазон температуры распространялся от нуля до температур, существенно превышающих комнатные. Во всех случаях наблюдалось качественное соответствие аналитических и численных результатов. Для демонстрации изменений, происходящих в системе при электронном фазовом переходе, в качестве тестовой возьмем структуру из трех однородно легированных КЯ, обладающую симметрией относительно отражения в плоскости, перпендикулярной оси КЯ. Ширина КЯ и разделяющих их барьеров – 5 нм, высота барьеров – 0,1 эВ.

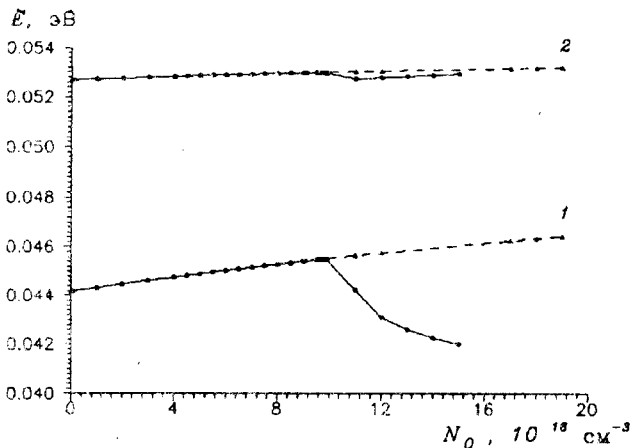


Рис.1. Энергия для подзоны как функция уровня легирования  $N_0$  для двух первых подзон (1 –  $\epsilon_1$ , 2 –  $\epsilon_2$ ) энергетического спектра трехъямной тестовой структуры при  $T = 10$  К. Пунктиром показаны соответствующие зависимости для неустойчивой симметричной прафазы выше точки фазового перехода

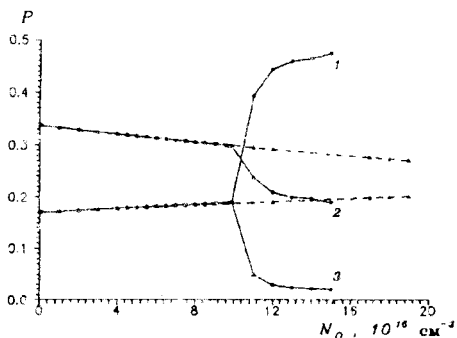


Рис.2.

Рис.2. Относительная вероятность заполнения квантовых ям  $P$  как функция уровня легирования  $N_0$  для трехъямной тестовой структуры (1, 3 – боковые ямы, 2 – центральная) при  $T = 10$  К. Пунктиром показаны соответствующие зависимости для неустойчивой симметричной прафазы выше точки фазового перехода

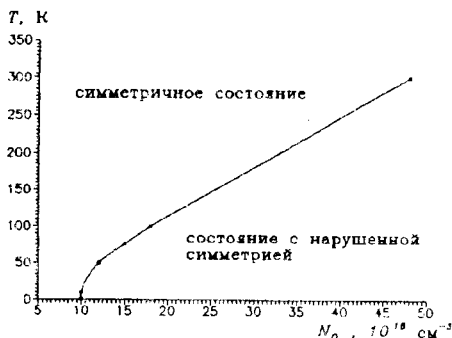


Рис.3.

Рис.3. "Фазовая диаграмма" для тестовой структуры из трех квантовых ям на плоскости температура-легирование

Аномалии, рассматриваемые нами как признаки электронного фазового перехода, возникают как по температуре, так и по уровню легирования. При низком уровне легирования (достаточно высокой температуре) существует единственное решение для волновых функций и самосогласованного потенциала, симметрия которых совпадает с симметрией исходной структуры. При увеличении концентрации примеси (понижении температуры) наблюдается тенденция к сближению энергий двух нижних состояний и к выравниванию вероятностей

заполнения КЯ. Рис.1 и 2 демонстрируют зависимость энергий экстремумов первых двух подзон (энергия отсчитывается от дна КЯ) и вероятностей  $P$  заполнения КЯ от уровня легирования  $N_0$  для тестовой структуры при  $T = 10$  К. При концентрации примеси выше критической  $N_0 > N_c$  (в данном случае  $N_c = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ), кроме симметричного решения (пунктирная линия), возникнут два вырожденных по энергии решения, не сохраняющих симметрию системы, но зеркально отраженных по отношению друг к другу. Схожие эффекты имеют место при изменении температуры. На рис.3 представлена фазовая диаграмма для тестовой структуры на плоскости легирование-температура.

Существенным признаком возникновения кулоновской неустойчивости является изменение характера итерационного процесса численного решения системы уравнений ШП. В точке фазового перехода итерационный процесс утрачивает сходимость, становясь осциллирующим. В том, что эти осцилляции имеют физическую причину, можно убедиться, решая систему уравнений (9), (10) по теории возмущений. С увеличением номера итерации  $n$  коэффициенты  $v$  ведут себя следующим образом:

$$v^{(n+1)} = -v^{(n)}\gamma_0/(\delta + \sigma_1 + \sigma_2), \quad (20)$$

то есть члены ряда теории возмущений нарастают, меняя знак на каждой последующей итерации. Для получения устойчивых решений необходим корректный учет недиагональных членов в (9), (10).

Физической причиной, вызывающей неустойчивость и дальнейшую перестройку волновых функций и энергетического спектра системы, является кулоновское притяжение ионизованных доноров, находящихся в боковых КЯ, и электронов, заполняющих нижнюю подзону и поэтому распределенных для рассматриваемой структуры почти поровну между тремя КЯ. Электронная плотность для следующей подзоны локализована главным образом в боковых ямах, поэтому проигрыш в энергии от возбуждения электрона из нижней подзоны может быть компенсирован энергией кулоновского притяжения положительных и отрицательных зарядов.

В заключение отметим, что при введении в расчет спина электронов нами были получены также дополнительные магнитные решения. Однако, поскольку эти решения близки по энергии с рассмотренными выше несимметричными бесспиновыми состояниями, то вопрос о возможности реализации магнитного упорядочения в системе КЯ может быть решен только с учетом обменного взаимодействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 93-02-2361 и 93-02-2363).

- 
1. G.Bastard. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Halstd, New York, 1988.
  2. А.А.Горбачевич, В.В.Капаев, Ю.В.Копаев, Письма в ЖЭТФ **57**, 565 (1993).
  3. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.