Письма в ЖЭТФ, том 60, вып.4, стр.267 - 271 © 1994г. 25 августа

ТЕРМОДИНАМИКА ЭЛЕКТРОН-ДЫРОЧНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ И ФОРМИРОВАНИЕ ЭКСИТОННОЙ ФАЗЫ В СЛОИСТЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ

Е.А.Жуковский, В.В.Тугушев

Российский научный центр "Курчатовский институт"
123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 июля 1994 г.

Рассмотрена термодинамика формирования экситонной фазы в слоистой полупроводниковой структуре с узкой запрещенной зоной для модели с сильной фиксацией фазы параметра порядка. Расчеты проведены в рамках самосогласованной флуктуационной теории для статических флуктуаций амплитуды параметра порядка. Показано, что температура перехода в экситонную фазу T_c, полученная с учетом флуктуационных эффектов, существенно ниже температуры T_c^0, рассчитанной в приближении среднего поля, причем фазовый переход в точке T_c является переходом первого рода. В квазидвумерной системе температура переохлаждения нормальной фазы $T'(T' < T_c)$ конечна, тогда как в чисто двумерной ситуации $T' = 0$; температура перегрева экситонной фазы $T'' > T_c$. В широком температурном интервале $T_c < T < T_c^0$ реализуется фаза с ближним порядком.

1. Термодинамика систем с электрон-дырочным спариванием хорошо разработана для модели "экситонного диэлектрика" с полуметаллическим спектром квазичастиц. Наличие малого параметра $(T_c/\epsilon_F) \sim \exp(-1/U) \ll 1$ при $U \ll 1$ (T_c – температура перехода, ϵ_F – энергия Ферми, U – константа взаимодействия) позволяет эффективно использовать в этой модели приближение среднего поля, аналогичное схеме БКШ в теории сверхпроводимости [1].

В случае полупроводникового спектра [2] в полной мере встает вопрос о построении термодинамики электрон-дырочных флуктуаций и об их влиянии на температуру и характер перехода в экситонную фазу. Приближение среднего поля, как легко убедиться, дает для T_c чисто символическую оценку: $T_c^0 \sim E_g/|\ln\Theta|$, $\Theta = (E_{ex}/E_g - 1) \sim (U/U_0 - 1)$, где E_g – ширина запрещенной зоны, E_{ex} – энергия связи в экситон. Условие экситонной неустойчивости $(\theta > 0)$ выполняется лишь при достаточно большой величине константы взаимодействия $U > U_0$, где U_0 – взаимодействие, при котором $E_g = E_{ex}$, в отличие от полуметаллической модели, где неустойчивость имеет место при сколь угодно малых U. Представляется, что термодинамика полупроводниковой модели должна быть близка к термодинамике модели Стонера, в которой определяющую роль играют флуктуации параметра порядка, а не температурные зависимости среднеполевых характеристик. Ниже речь пойдет о варианте "самосогласованной флуктуационной теории", где роль малого параметра играет непосредственно величина $\theta \ll 1$ (аналог схемы [3]). Эта теория предсказывает резкое уменьшение темперутуры перехода T_c по сравнению с приближением среднего поля (T_c^0), появление области ближнего порядка в широком интервале температур $T_c < T < T_c^0$, зависимость рода перехода от размерности системы, отсутствующую в приближении среднего поля.

2. Речь пойдет о модели узкозонного слоистого полупроводника с симметричным анизотропным спектром электронов и дырок:

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = \pm\left(\frac{E_g}{2} + \frac{\mathbf{k}_\parallel^2}{2m_\parallel} + \frac{\mathbf{k}_\perp^2}{2m_\perp}\right), \tag{1}$$

где $\mathbf{k}_{\parallel,\perp}$ – квазиимпульсы вдоль и поперек слоев, $m_{\parallel,\perp}$ – соответствующие эффективные массы; далее всюду, если это особо не оговаривается, расчеты проводятся в приближении $m_\parallel/m_\perp \ll 1$. Считается, что условие экситонной неустойчивости $\theta > 0$ выполняется, фаза параметра порядка жестко фиксирована (то есть взаимодействие с межзонным переходом квазичастиц не мало по сравнению с взаимодействием плотность–плотность [2]) и отсутствует мягкая (голдстоуновская) мода коллективных возбуждений. Рассматривается область температур $T \ll T_c^0$ и предполагается выполнение условия "слабой связи" $\Theta \ll 1$. Ограничиваясь статическим вариантом "самосогласованной флуктуационной теории" [4], запишем нормированный на плотность состояний термодинамический потенциал модели в виде:

$$\Omega = \sum_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}} \Delta_{-\mathbf{q}} + \beta \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}',\mathbf{q}''} \Delta_{\mathbf{q}} \Delta_{-\mathbf{q}'} \Delta_{\mathbf{q}''} \Delta_{\mathbf{q}'-\mathbf{q}-\mathbf{q}''}, \tag{2}$$

где $\Delta_{\mathbf{q}}$ – фурье-компонента параметра порядка, описывающего электрон-дырочное спаривание [1], $|\Delta_{\mathbf{q}}| \ll E_g$, коэффициенты $\alpha_{\mathbf{q}}$ и β не зависят от температуры при $T \ll T_c^0$. Особенность функционала (2) состоит в том, что $\alpha_{\mathbf{q}=0} < 0$, а $\beta > 0$; конкретно, в нашем случае

$$\alpha_{\mathbf{q}} = -\Theta + \gamma_\parallel \mathbf{q}_\parallel^2 + \gamma_\perp \mathbf{q}_\perp^2, \qquad \gamma_\parallel = \frac{1}{4m_\parallel E_g},$$
$$\gamma_\perp = \frac{1}{4m_\perp E_g}, \qquad \beta = \frac{1}{2E_g^2}. \tag{3}$$

Эта особенность определяет существенное отличие (2) от стандартного функционала Гинзбурга–Ландау для системы с фазовым переходом второго рода, где $\alpha_{\mathbf{q}=0}$ меняет знак в точке перехода.

Анализ функционала (2) проведем, следуя схеме [5]. Именно, выделяя среднюю компоненту $<\Delta>$, и полагая $\Delta(\vec{\rho}) = <\Delta> + \delta\Delta(\vec{\rho})$, где $\delta\Delta(\vec{\rho})$ – флуктуация параметра порядка в точке $\vec{\rho}$, построим гауссовский аппроксимирующий функционал:

$$\Omega_{app} = -\Theta <\Delta>^2 + \beta <\Delta>^4 + \sum_{\mathbf{q}} (\alpha_{\mathbf{q}} + 6\beta <\Delta>^2 + A)\delta\Delta_{\mathbf{q}}^2 + B\beta <\delta\Delta^2>^2. \tag{4}$$

Здесь A и B – коэффициенты, подлежащие определению, усреднение проводится по конфигурациям функционала (4). Из условий минимизации и выпуклости функционалов Ω и Ω_{app} получаем одно очевидное соотношение

$$A = (3 - B)\beta <\delta\Delta^2>. \tag{5}$$

Второе необходимое соотношение получается из уравнения самосогласования для статической компоненты обобщенной восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}}(T)$ [5]:

$$A = 6\beta <\delta\Delta^2> \left[1 + \frac{<\Delta>}{<\delta\Delta^2>} \frac{\partial <\delta\Delta^2>}{\partial <\Delta>}\right] \tag{6}$$

с использованием известного термодинамического выражения $<\delta\Delta^2>= T\sum_{\mathbf{q}}\chi_{\mathbf{q}}(T)$. Равновесные значения $<\Delta>$ и $<\delta\Delta^2>$ могут быть найдены из системы уравнений:

$$<\Delta>[-\Theta+2\beta<\Delta>^2+6\beta<\delta\Delta^2>]=0, \tag{7}$$

$$<\delta\Delta^2>=\frac{T}{2}\sum_{\mathbf{q}}[\alpha\mathbf{q}+6\beta<\Delta>^2+A]^{-1}, \tag{8}$$

где A дается формулой (6). Нелинейное дифференциальное уравнение (8), вообще говоря, может быть решено только численно. Тем не менее, ряд важных выводов можно сделать и без таких расчетов. Прежде всего проанализируем вопрос о существовании нормальной фазы, где $<\Delta>\equiv 0$, в чисто двумерной ситуации. Статическая обобщенная восприимчивость $\chi_0(T)$ в этом случае находится из уравнения.

$$\chi_0^{-1}=-2\Theta+\frac{T}{T_0}\ln\frac{\chi_0^{-1}+\zeta}{\chi_0^{-1}}, \qquad \zeta=\frac{2W}{E_g}, \tag{9}$$

$T_0=2\pi\gamma_{\|}/3\beta$, W – граничная энергия электрон-дырочных возбуждений (по порядку величины $W\sim E_g\Theta\ll E_g$ и не зависит от температуры в нашей задаче). При $T\ll W$, T_0 из (9) следует, что

$$\chi_0^{-1}(T)=\zeta\exp(-2\Theta T_0/T), \tag{10}$$

а в области "высоких" температур $(W\ll T\ll T_0)$

$$\chi_0^{-1}(T)=\left(\frac{T}{T_0}\zeta\right)^{1/2}. \tag{11}$$

Таким образом, нормальная фаза с $<\Delta>\equiv 0$ может существовать во всей области температур вплоть до $T=0$, и обратная восприимчивость χ_0^{-1} нигде не обращается в нуль. В случае квазидвумерной системы (когда масса $m_\perp$ не бесконечно велика) в области низких температур зависимость $\chi_0^{-1}(T)$ начинает отклоняться от (10), и χ_0^{-1} обращается в нуль при температуре T', становясь при $T<T'$ отрицательной. Таким образом, нормальная фаза может существовать лишь при $T>T'$. Качественная оценка дает $T'\sim\Theta T_0(\delta/\zeta)^{1/2}$ при $\delta=m_{\|}/m_\perp\ll\zeta\ll 1$.

В то же время, при $T=0$ основное состояние, как нетрудно убедиться из анализа функционала (3), характеризуется отличным от нуля $<\Delta>(T=0)=(\Theta/2\beta)^{1/2}$, то есть существует и выгодна экситонная фаза. В теории среднего поля зависимость $<\Delta>(T)$ монотонно падает и обращается в нуль при $T=T_c^0$, где одновременно меняет знак $\chi_0^{-1}(T)$. В нашем случае дело обстоит сложнее. Численное решение системы уравнений (5)–(7) для двумерного $(m_\perp\to\infty)$ и квазидвумерного $(m_{\|}/m_\perp\ll 1)$ случаев, проведенное в широком диапазоне параметров, качественно представлено на рис.1 и 2 (приведены зависимости $<\Delta>(T)$ и $<\delta\Delta^2>(T)$). Общие выводы, следующие из нашего расчета, состоят в следующем:

а) экситонная фаза существует ниже некоторой температуры T'', где решение $<\Delta>\neq 0$ возникает скачком, в интервале $0<T<T''$;

б) нормальная фаза существует выше температуры $T' < T''$, в чисто двумерном случае $T' \to 0$;

в) равенство термодинамических потенциалов обеих фаз достигается при температуре T_c, причем $T' < T_c < T''$; таким образом, T' и T'' суть температуры переохлаждения и перегрева, а T_c – температура перехода первого рода из нормальной фазы в экситонную.

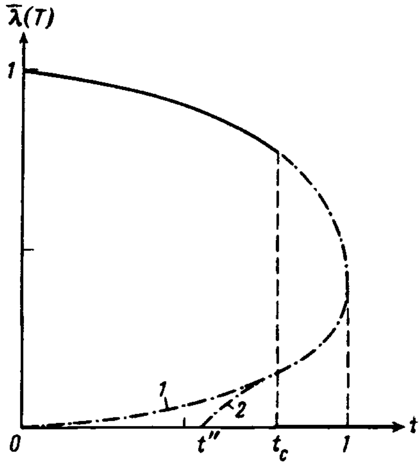

Рис.1

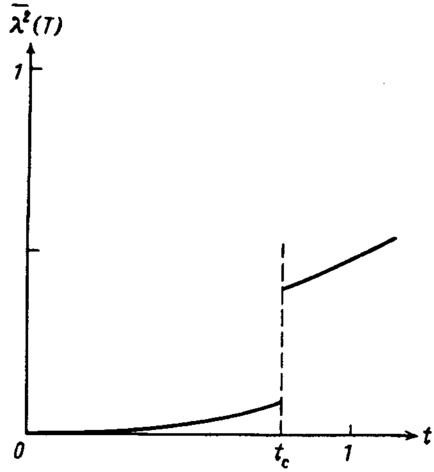

Рис.2

Рис1. Зависимость среднего значения $< \Delta > (T)$ от температуры: сплошная линия – устойчивая, штрих-пунктирная – метастабильная фазы (1 – двумерная, 2 – квазидвумерная; $t = T/T'$, $t_c = T_c/T'$, $t'' = T''/T'$, $\bar{\lambda}(T) = [< \Delta > (T)/ < \Delta > (0)]^2$)

Рис2. Зависимость среднеквадратичной флуктуации $< \delta\Delta^2 > (T)$ от температуры в двумерном случае для устойчивой фазы; $\bar{\lambda}(T) = < \delta\Delta^2(T)/(< \Delta > (0))^2$

По порядку величин T_c, $T'' \sim \Theta T_0 \sim \Theta E_g \ll T_c^0$, в области $T_c < T < T_c^0$ существует ближний порядок и температурная зависимость $\chi_0^{-1}(T)$ (или, что то же самое, $< \delta\Delta^2 > (T)$) описывается формулами типа (10), (11) со сменой экспоненциального характера на степенной.

Наконец, остановимся кратко на трехмерной ситуации ($m_{\parallel} = m_{\perp} = m$). Выражения коэффициентов α_{q} и β через микроскопические параметры здесь несколько иные, чем в (3), и мы их приводить не будем. Главный вывод, следующий из анализа соотношений (5) – (7), состоит в том, что переход в экситонную фазу является переходом второго рода при температуре $T_c = T' = T'' \sim \Theta^{1/2} T_0$, где одновременно обращается в нуль обратная восприимчивость $\chi_0^{-1}(T)$. В интервале температур $T_c < T < T_c^0$ существует ближний порядок, характеризующийся почти линейной по T зависимостью $\chi_0^{-1}(T)$.

Реальными системами, в которых экситонные эффекты, рассмотренные выше, могут играть существенную роль, представляются гетероструктуры и сверхрешетки на основе некоторых соединений A_3B_5 и узкозонных полупроводников типа A_4B_5. Действительно, в гетероструктуре типа GaSb-InAs-GaSb с широким слоем InAs, как известно [6], имеется перекрытие валентной зоны GaSb с зоной проводимости InAs, то есть в этом случае затравочный одноэлектронный спектр структуры является бесщелевым (полуметаллическим). Однако такое перекрытие может быть легко снято как за счет эффектов размерного квантования для слоев InAs с толщиной менее 85Å, так и за счет сдвига края зоны проводимости при легировании прослойки арсенида индия, например, алюминием. В интересующей нас ситуации ширина запрещенной зоны должна составлять меньше или порядка 0,01 эВ, что соответствует толщине прослоек InAs 75–85 Å. В условиях современной технологии молекулярно-лучевой эпитаксии необходимая подстройка ширины запрещенной зоны структуры достижима обоими способами (вариацией толщин слоев или их состава) как в случае систем на основе A_3B_5, так и на основе A_4B_6.

Возникновение экситонной фазы, как известно [1], ведет к перенормировке матричных элементов взаимодействия квазичастиц с внешними полями, что может проявляться, в частности, в появлении особенностей в оптических спектрах, времени спиновой релаксации и т.д. с изменением температуры (так называемые "эффекты когерентности", имеющие аналоги в сверхпроводимости). Помимо этого, в точке перехода в экситонную фазу следует ожидать появления выброса в температурной зависимости производной проводимости от температуры, так как в этой точке в случае перехода первого рода скачком увеличивается ширина запрещенной зоны в одночастичном спектре структуры.

Конденсация непрямых экситонов в структурах на основе GaAs/AlAs, согласно сообщению [7], была экспериментально обнаружена недавно по изменениям спектров фотолюминесценции в магнитном поле при низких температурах ($T < 4$ K).

В заключение благодарим за обсуждение работы Ю.В.Копаева, обратившего наше внимание на благоприятную ситуацию для формирования экситонной фазы в гетероструктурах и сверхрешетках на основе A_3B_5 и A_4B_6, а также И.В.Токатлы, за ознакомление с предварительными результатами рассмотрения термодинамики в модели без фиксации фазы.

Работа выполнена частично за счет гранта MC8000, выделенного Международным научным фондом.

---

1. Ю.В.Копаев, Труды ФИАН **86**, 3 (1975).
2. Р.Р.Гусейнов, А.В.Келдыш, ЖЭТФ **63**, 2255 (1972).
3. T.Morija amd A.Kawabata, J. Phys. Soc. Japan **34**, 639 (1973); **35**, 669 (1973).
4. K.K.Murata and S.Doniach, Phys. Rev. Lett. **29**, 285 (1972).
5. G.Lonzarich and L.Taillefer, J. Phys. C**18**, 4339 (1985).
6. G.Bastard, J.A.Brum, and R.Ferreira, Sol. St. Phys. **44**, 229 (1991).
7. L.V.Butov, A.Zener, G.Abstreiter et al., Abstracts of invited lectures and contributed papers of International Workshop on Advances in Mesoscopic Physics and Technology, June 13-17, 1994, Chernogolovka. Editor: S.I.Gubarev, p.10.