

И. С. СТОЯНОВА

К ТЕОРИИ КОНДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗЫ НЕРАВНОВЕСНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ (II)

Рассмотрены свойства электронно-дырочной плазмы в собственном полупроводнике при больших концентрациях неравновесных носителей в ней, когда предполагается, что система находится в конденсированном состоянии. Используются результаты [1] для определения равновесной концентрации и энергии связи на системе электрон — дырка в конденсате. На примере электронно-дырочной плазмы в Ge приводятся численные значения названных величин и сравниваются результаты, полученные при различных аппроксимациях реальной ситуации.

Введение

Многоэкситонная проблема [2—12] возникла в последнее время, когда с помощью оптического возбуждения стало возможным осуществить в кристалле полупроводника возбужденные состояния и легко менять их плотность в широком интервале.

При низких температурах и высоких уровнях возбуждения в системе неравновесных носителей заряда в полупроводнике наблюдаются явления [3, 8], которые связываются с переходом системы в конденсированном (жидком) состоянии [2]. Для энергии связи электрона и дырки в жидком состоянии использовались выражения, основанные на простых моделях [4, 5]. В работах [9, 10] получено выражение для энергии связи и выполнены численные расчеты для Ge с учетом сложной зонной структуры.

В предыдущей работе [13] использован вариационный метод [1, 14] и определен одночастичный спектр системы с учетом взаимодействия. Приняв во внимание взаимодействие при вычислении одночастичного спектра, можно рассмотреть конденсированное состояние системы и вычислить свободную энергию этого состояния.

В настоящей работе использованы результаты [13] для свободной энергии конденсированной фазы и определена равновесная концентрация в ней. С другой стороны, можно написать выражение для свободной энергии экситонной фазы в модели Бозе-газа низкой плотности и, сравнивая оба выражения, установить, какое состояние более выгодно при тех или иных условиях опыта (температура T , средняя плотность n).

При вычислении энергии основного состояния электронно-дырочной плазмы существенным, на наш взгляд, оказывается учет пространствен-

ной неоднородности системы, что не принято во внимание в [9 и 10]. При больших передачах импульса $k > k_c$ (где $k_c = 2k_F$ — обратное расстояние между частицами) существенным является только электронно-дырочное взаимодействие. К этому взаимодействию можно прийти, исходя еще из следующих соображений. В пространственную неоднородность системы, состоящей из подвижных носителей двух знаков, мы можем ввести в гамильтониане H_0 член слэтеровского типа $\sim n^{1/3}$, учитывающий среднюю энергию, например, каждого электрона в поле дырок. Ввиду трудности последовательного микроскопического расчета этого слагаемого удобно ввести в теорию феноменологический параметр γ ; последний подбирается так, чтобы экспериментально полученное значение энергии связи между частицами в жидкости совпало с теоретическим.

В связи с этим можно сделать следующее замечание. Экспериментально определяемое значение энергии связи в капле в действительности несколько отличается от истинного. Это связано с тем, что в теории обычно не учитываются некоторые дополнительные эффекты, такие, как энергия поверхностного натяжения¹ и возможность существования «горячих» капель².

Для иллюстрации полученных результатов рассматривается электронно-дырочная жидкость в Ge и приводятся численные оценки для энергии связи в жидкой фазе. Исследуется вопрос об устойчивости жидкого состояния по отношению к фазе свободных экситонов. В случае, когда последнее является устойчивым, приводятся оценки для равновесной концентрации жидкой фазы, а также и для концентрации экситонов, при которой наступает переход в жидком состоянии.

Равновесная концентрация и энергия конденсированной фазы

Рассмотрим два предельных случая: 1) единица объема образца занята однородной экситонной фазой с концентрацией электронно-дырочных пар n_0 и 2) концентрация n_0 отвечает условию конденсации и вся система перешла в конденсированное состояние. В силу сохранения числа частиц в системе конденсированная фаза занимает часть $\lambda = \frac{n_0}{n}$ от общего объема. Тогда полная свободная энергия конденсированной фазы будет

$$F_{\text{конд}} = n_0 \varepsilon_B G(r_s), \quad (1)$$

где $\varepsilon_B = \frac{1}{2} \frac{e^4 m^*}{\varepsilon_0^2 \hbar^3}$ — энергия связи экситона и через $G(r_s)$ обозначена энергия, приходящаяся на пару частиц конденсата. Выражение для $G(r_s)$ согласно [13], (1.22) следующее³:

$$G(r_s) = \frac{2,2}{r_s^2} - \frac{1,2}{r_s} \left[\frac{3}{2} - 2\kappa \operatorname{arctg} \left(\frac{2}{\kappa} \right) + \frac{3}{4} \kappa^2 \ln \left(1 + \frac{4}{\kappa^2} \right) - \frac{\kappa^2}{4} + \frac{\kappa^4}{16} \ln \left(1 + \frac{4}{\kappa^2} \right) \right] + \frac{\gamma}{r_s}, \quad (2)$$

¹ Мы пользуемся моделью бесконечной однородной электрон-дырочной жидкости. Основанием для этого служит то, что капля по существу является макроскопическим образованием.

² Как известно [6], эффективная температура электронно-дырочных капель может заметно превосходить температуру решетки за счет рекомбинации носителей в капле и захвата свободных экситонов.

³ В дальнейшем формулы из [13] обозначены через (1, 2, ...).

где $\kappa = \frac{k_c}{k_F}$ — безразмерный параметр экранировки; $r_s = \frac{r_0}{a_B}$; $n^{-1} = \frac{4}{3} \pi r_0^3$; $a_B = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{m^* e^2}$ — боровский радиус экситона.

Последний член в (2) учитывает пространственную неоднородность системы; γ обычно вводится как феноменологический параметр. Простая оценка (например, вычисление средней потенциальной энергии электрона в поле дырок) дает $\gamma = 1,9$.

Если для константы экранировки использовать выражение, полученное в приближении Томаса — Ферми $\kappa = 0,8 \xi^{1/2} r_s^{1/2}$ (где параметр ξ представляет отношение полной массы к приведенной $\xi = M/m^*$; $M = m_e + m_h$, $m^{*-1} = m_e^{-1} + m_h^{-1}$), то из (2) получим

$$G(r_s) = \frac{2,2}{r_s^2} - \frac{1,2}{r_s} \left[\frac{3}{2} - 2 \sqrt{kr_s} \operatorname{arctg} \frac{2}{\sqrt{kr_s}} + \frac{3}{4} kr_s \ln \left(1 + \frac{4}{kr_s} \right) - \frac{kr_s}{4} + \frac{k^2 r_s^2}{16} \ln \left(1 + \frac{4}{kr_s} \right) \right] + \frac{\gamma}{r_s}, \quad (3)$$

где $k = 0,7 \xi$.

В исследуемой области концентраций, в которой кинетическая энергия и энергия взаимодействия носителей близки по величине, ни одно из известных выражений для константы экранировки неприменимо. Но можно утверждать, что во всяком случае длина экранирования не должна быть меньше среднего расстояния между частицами. Поэтому можно рассмотреть также простое приближение $k_0 \sim R_0^{-1} = \left(\frac{4}{3} \pi 2n \right)^{1/3}$, где R_0 — среднее расстояние между частицами. В этом случае

$$G(r_s) = \frac{2,2}{r_s^2} - \frac{2,9}{r_s}. \quad (4)$$

С точки зрения принятого в этой работе самосогласованного подхода константу экранировки надо вычислить с учетом перенормировки энергетического спектра. В приближении Томаса — Ферми это приводит к следующему выражению:

$$\kappa^2 = 4C \left\{ \left[2A_1 + \left(\frac{d\epsilon}{dt} \right)_{t=1} \right]^{-1} + \left[2A_2 + \left(\frac{d\epsilon}{dt} \right)_{t=1} \right]^{-1} \right\}. \quad (5)$$

Здесь использованы обозначения, принятые в [13]:

$$A_i = \frac{\hbar^2}{2m_i} k_F^2; \quad i = 1, 2; \quad t = \frac{k}{k_F}; \quad C = \frac{e^2 k_F}{\epsilon_0 \pi}.$$

Функция $\epsilon(t)$ дается выражением (1.14) из [13]. Обозначая $x = 4/\chi^2$, получим трансцендентное уравнение для константы экранировки:

$$x^3 \left[(2a_1 - 1)x + \left(1 + \frac{x}{2} \right) \ln(1+x) \right]^{-1} + x^2 \left[(2a_2 - 1)x + \left(1 + \frac{x}{2} \right) \ln(1+x) \right]^{-1}, \quad (6)$$

где

$$a_i = \frac{A_i}{C} = 3\eta_i r_s^{-1}; \quad \eta_i = \frac{m^*}{m_i} \quad (i = 1, 2).$$

Пусть $x = x_0$ есть решение уравнения (6). Тогда энергию связи можно определить по формуле

$$G(r_s, x_0) = \frac{2,2}{r_s^2} - \frac{3,7}{r_s} + \frac{1,2}{r_s} \left[\frac{4}{\sqrt{x_0}} \operatorname{arctg} \sqrt{x_0} - \frac{3}{x_0} \ln(1 + x_0) + \frac{1}{x_0} - \frac{1}{x_0^2} \ln(1 + x_0) \right]. \quad (7)$$

Равновесную концентрацию электронно-дырочной жидкости n_p определим из условия минимума свободной энергии (2):

$$\frac{dG}{dn} \Big|_{n=n_p} = 0. \quad (8)$$

Свободная энергия экситонной фазы и концентрация перехода в конденсированное состояние

Приведем еще выражение для свободной энергии экситонной фазы, вычисленной в простой модели невзаимодействующих экситонов малой плотности $n_0 a_B^3 \ll 1$; n_0 — концентрация экситонов:

$$F_{\text{экс}} = F_{\text{кин}} + F_{\text{вн}}, \quad (9)$$

где кинетическое слагаемое имеет вид

$$F_{\text{кин}} = -n_0 T \left\{ 1 + \frac{n_0}{2} \left(\frac{\pi}{MT} \right)^{3/2} + \ln \left[n_0 \left(\frac{2\pi}{MT} \right)^{3/2} \right] \right\}, \quad (10)$$

а свободная энергия, связанная с внутренним движением в экситоне, равна $F_{\text{вн}} = -n_0 \epsilon_B$. Эти выражения справедливы при выполнении следующих условий: для экситонов справедлива статистика Больцмана: $T > T_0$, где T_0 — температура вырождения и $T \ll \epsilon_B$. Последнее условие фактически выполняется, ибо мы рассматриваем область $T < T_{\text{кр}}$, а, как известно, $T_{\text{кр}} \sim 0,1 \epsilon_B$.

Плотность экситонного газа, при которой наступает конденсация, $n(T)$, можно оценить из условия $F_{\text{конд}} = F_{\text{экс}}$, которое определяет связь между параметрами перехода n и T :

$$3 \ln \frac{v}{u} = 1 + [1 + G(n_p)] \frac{11}{u^2}. \quad (11)$$

Здесь введены безразмерные параметры температуры и плотности

$$u = \sqrt{\frac{T}{\epsilon_B}}; \quad v = 2 \sqrt{\pi \xi} (n_0 a_B^3)^{1/2}.$$

Можно показать, что из условия применимости статистики Больцмана для газа экситонов следует $\omega = \frac{v}{n} \ll 1$, а если выполняется условие (1.24) из [13]:

$$G(n_p) < -1, \quad (12)$$

то существует решение уравнения (11), которое удовлетворяет всем принятым аппроксимациям. Условие (12) означает, что средняя энергия связи между частицами в жидкой фазе превосходит (по абсолютной величине) энергию связи экситона и, следовательно, устойчивым является жидкое состояние.

В явном виде связь между плотностью и температурой перехода имеет вид

$$n(T) = ge \left(\frac{TM}{3\pi\hbar^2} \right) \exp \left[\frac{1 + G(n_p)}{T} \varepsilon_B \right]. \quad (13)$$

Здесь g — фактор вырождения экситонного состояния ($g=1$).

В качестве примера рассмотрим электронно-дырочную жидкость в Ge. При этом приведем два случая.

Аппроксимация простой зонной структуры. Для эффективных масс (5) можно принять следующие значения: $m_e=0,1 m_0$, $m_h=0,3 m_0$, $\varepsilon_0=16$. Тогда $m^*=0,09 m_0$, что дает для энергии связи экситона $a_B \approx 5$ МэВ и для боровского радиуса экситона $a_B \approx 10^{-6}$ см.

Константа экранировки κ является решением уравнения (6). Численные расчеты выполнены на ЭВМ и приведены в табл. 1, из которой получаем $G_{\min} = -0,5$ при $n_p = 0,5 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$. Следовательно, жидкое состояние в этом случае неустойчиво.

Таблица 1

r_s^{-1}	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4	1,5
$x_0(r_s)$	0,4	0,4	0,5	0,7	0,8	0,9	1,0	1,2	1,3	1,5	1,6	1,7	1,9	2,0
$G(r_s, x_0)$	-0,3	-0,4	-0,4	-0,5	-0,4	-0,3	-0,2	-0,1	0,1	0,4	0,6	1,0	1,3	1,7

Для сравнения приведены также значения энергии связи, вычисленные в рамках рассмотренных выше простых аппроксимаций для константы экранировки κ . Для κ использовано выражение, полученное в приближении Томаса — Ферми, но без учета перенормировки энергетического спектра $\kappa = 1,8 r_s^{1/2}$. Минимальное значение получается при $n_p = 0,3 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$ и равно $G_{\min} = -0,5$. Кроме того, κ может иметь значение ($\kappa=0,7$), соответствующее значению R_0^{-1} . Тогда $G_{\min} = -0,9$ при $n_p = 0,7 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$. Видно, что и в этих случаях металлическое состояние неустойчиво.

Учет специфики зонной структуры. В модели изотропной электронно-дырочной жидкости заменим истинную зонную структуру четырьмя сферическими электронными подзонами с эффективными массами плотности состояний (8), $m_d \approx 0,2 m_0$. Простые оценочные формулы для приведенной эффективной массы электрона и дырки дают значение $m^* \approx 0,05 m_0$, которое определяет энергию связи экситона $\varepsilon_B \approx 2,7$ МэВ и $a_B \approx 1,6 \cdot 10^{-6}$ см.

В этом случае жидкая фаза уже устойчива по отношению к фазе свободных экситонов. Вместо (6) получаем следующее уравнение для κ :

$$t_0 x^2 \left[(2a_1 t_0 - 1) t_0^2 x + \left(1 + \frac{1}{2} t_0^2 x \right) \ln(1 + t_0^2 x) \right]^{-1} + x^2 \left[(2a_2 - 1) x + \left(1 + \frac{1}{2} x \right) \ln(1 + x) \right]^{-1} = 1. \quad (14)$$

Здесь $a_i = 3\eta_i t_i r_s^{-1}$ ($i = 1, 2$); $t_1 = t_0 = v^{-1/2}$; v — число минимумов зоны проводимости. Для Ge: $v = 4$, $a_1 \approx 0,3 r_s^{-1}$; $a_2 = 0,4 r_s^{-1}$.

Вместо (7) имеем

$$G(x_0, r_s) = \frac{0,5}{r_s^2} - \frac{3}{r_s} + \frac{2,4}{r_s \sqrt{x_0}} [t_0^3 \operatorname{arctg}(t_0 \sqrt{x_0}) + \operatorname{arctg} g \sqrt{x_0}] - \\ - \frac{1,8}{r_s x_0} [t_0^2 \ln(1 + t_0^2 x_0) + \ln(1 + x_0)] + \frac{0,8}{r_s x_0} - \\ - \frac{0,6}{r_s x_0^2} [\ln(1 + t_0^2 x_0) + \ln(1 + x_0)]. \quad (15)$$

Здесь x_0 есть решение уравнения (14).

Численные расчеты, выполненные на ЭВМ, приведены в табл. 2. В этом случае $G(n_p) = -1,8$, $n_p = 2,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Таблица 2

r_s^{-1}	0,5	0,7	0,9	1,1	1,3	1,5	1,7	1,9	2,1	2,3
$x_0(r_s)$	0,1	0,1	0,2	0,2	0,2	0,3	0,3	0,4	0,4	0,4
$G(r_s, x_0)$	-0,8	-1,0	-1,3	-1,5	-1,6	-1,7	-1,8	-1,8	-1,8	-1,7

Для сравнения приведем еще значения энергии связи и равновесной концентрации, полученные при использовании рассмотренных простых аппроксимаций для константы экранировки. 1) κ получено в приближении Томаса — Ферми без учета перенормировки энергетического спектра: $\kappa = 3,5r_s^{1/2}$. Значение $G_{\min} = 2,9$ получается при $n_p = 8 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. 2) Простая аппроксимация $\kappa = 0,7$ дает в этом случае $G_{\min} \approx 2$ и $n_p \approx 4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Итак, при учете специфики (анизотропии и многодолинности) зонной структуры и в рамках применяемого нами вариационного метода при самосогласованном определении радиуса экранировки в системе, жидкая фаза уже устойчива. Полагая, например, $T = 2,2 \text{ К}$, получим следующую оценку для плотности экситонной фазы, при которой экситонный газ переходит в жидкое состояние: $n_0 \approx 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

Полученные результаты согласуются как с теоретическими расчетами [9 и 10], так и с экспериментальными данными [3—7] (см. также [12]).

В заключение выражаю благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за предложенную тему и многочисленные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. М., 1965.
2. Келдыш Л. В. «Труды IX Международной конференции по физике полупроводников». Л., 1969; в сб.: «Экситоны в полупроводниках». М., 1971, стр. 3; «Успехи физических наук», **100**, 514, 1970.
3. Покровский Я. Е., Свистунова К. И. «Письма в ЖЭТФ», **9**, 435, 1969; «Физика и техника полупроводников», **4**, 491, 1970.
4. Каминский А. С., Покровский Я. Е., Алкеев Н. В. ЖЭТФ, **59**, 1937, 1970.
5. Багаев В. С., Галкина Т. И., Гоголин О. В., Келдыш Л. В. «Письма в ЖЭТФ», **10**, 309, 1969.
6. Вавилов В. С., Заяц В. А., Мурзин В. Н. «Письма в ЖЭТФ», **10**, 304, 1969; в сб.: «Экситоны в полупроводниках». М., 1971, стр. 32.

7. Багаев В. С., Галкина Т. И., Гоголин О. В. В сб.: «Экситоны в полупроводниках». М., 1971, стр. 19.
8. Аснин В. М., Рогачев А. А., Рывкин С. М. «Физика и техника полупроводников», 1, 1740, 1967.
9. Brinkman W. F., Rice T. M., Anderson P. W., Chui S. T. «Phys. Rev. Lett.», 28, 961, 1972.
10. Combescof M., Nozieres P. «J. Phys. C.», 5, 2369, 1972.
11. Eiichi Hanamura and Masahiro Juone, Proc. XI. Int. Conf. on the Phys. of semi-cond.; Techn. Rep. ISSR, A, No. 535, 1972 и No. 536, 1972.
12. Инсепов З. А., Норман Г. Э. ЖЭТФ, 62, 2290, 1972.
13. Стоянова И. С. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 16, № 3, 1975.
14. Бонч-Бруевич В. Л., Стоянова И. С. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астрон., 16, № 2, 1975.

Поступила в редакцию
13.6 1973 г.

Кафедра
физики полупроводников