

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВЕРХСТРУКТУРЫ В ЛЕГИРОВАННЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ

И. П. Звягин*

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119899, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16 декабря 1997 г.

С использованием подхода, основанного на теории функционала плотности, показано, что в легированных композиционных сверхрешетках при низких температурах и при не слишком больших концентрациях примеси обменно-корреляционный вклад в энергию системы может превысить сумму вклада кинетической энергии и хартриевского вклада, связанного с перераспределением носителей между ямами. В результате основное состояние системы может отвечать неоднородному распределению электронов между ямами. Найдены условия устойчивости однородного состояния относительно малых и конечных флуктуаций плотности и построена фазовая диаграмма. Обсуждается нелинейная теория неоднородного состояния.

1. ВВЕДЕНИЕ

Прямые измерения температурной зависимости проводимости однородно легированных кремнием сверхрешеток GaAs/GaAlAs в направлении оси их роста обнаружили ряд неожиданных особенностей [1]. В частности, в структурах без искусственно вводимого беспорядка, но со сравнительно низким уровнем легирования при повышении температуры наблюдался переход от квазиметаллической к активационной проводимости с энергией активации порядка или даже большей ширины минизоны. В [1] было высказано предположение, что эта аномалия, не находящая объяснения в рамках стандартной теории, может быть обусловлена эффектами кулоновского взаимодействия.

Хорошо известно, что в квазинизкоразмерных структурах роль кулоновского взаимодействия (в частности, обменного и корреляционного вкладов в энергию системы) особенно важна; эти вклады, по-видимому, ответственны за наблюдаемое сужение запрещенной зоны при больших концентрациях носителей заряда в квантовых ямах. В работе [1] отмечалось, что обменно-корреляционные эффекты могут приводить к возникновению неоднородных (вдоль оси роста сверхрешетки) распределений электронной плотности, которые и могут быть ответственными за наблюдаемые аномалии проводимости легированных сверхрешеток.

Тот факт, что при учете взаимодействия между электронами основное состояние системы может стать неоднородным (вигнеровская кристаллизация [2]), широко обсуждался в литературе. Однако количественные расчеты порога вигнеровской кристаллизации затруднены из-за малости разностей энергий, играющих существенную роль, и приводят к значениям пороговой плотности, существенно различающимся между собой. Так, численные оценки методом Монте-Карло дали для радиуса сферы Вигнера, измеренного в единицах боровского радиуса $a_0 = \epsilon \hbar^2 / m e^2$, для трехмерных систем значение

* E-mail: zvyagin@sc.phys.msu.su

$r_s^{(3)} = 100 \pm 20$ ($r_s^{(3)} = (4\pi n_0^{(3)}/3)^{-1/3}/a_0$, $n_0^{(3)}$ — средняя объемная концентрация электронов, ϵ — диэлектрическая проницаемость среды), а для двумерных систем — значение $r_s \simeq 26$, где $r_s = (\pi\nu_0)^{-1/2}/a_0$, ν_0 — средняя двумерная концентрация [3, 4]. В последние годы для описания вигнеровской кристаллизации использовалась теория функционала плотности [5, 6], ранее успешно применявшаяся при рассмотрении кристаллизации простых жидкостей. В частности, модификация теории функционала плотности [6] позволила получить пороговые значения параметра r_s , неплохо согласующиеся с результатами численных расчетов.

Экспериментальные наблюдения вигнеровской кристаллизации также сильно затруднены в силу жесткости условий ее возникновения. В трехмерных системах вигнеровская кристаллизация, по-видимому, не наблюдалась; экспериментально наблюдалась кристаллизация в двумерной системе электронов над поверхностью жидкого гелия [7, 8].

В квазидвумерных системах появляются новые возможности спонтанного нарушения симметрии, связанного с возникновением неоднородных (вдоль оси роста сверхрешетки) распределений электронной плотности, обусловленных особенностями электронного спектра носителей заряда в условиях квантового ограничения [1, 9]. В работе [9] был рассмотрен специальный механизм возникновения состояния с неоднородным распределением носителей между квантовыми ямами в сверхрешетках за счет делокализации носителей во второй подзоне размерного квантования в сверхрешетках со специально выбранным профилем потенциала.

Ниже мы покажем, что для возникновения неоднородных распределений электронов (электронной сверхструктуры) в легированных композиционных сверхрешетках, вообще говоря, не требуется специального вида потенциала; это может происходить за счет другого механизма при учете обменно-корреляционных эффектов для квазидвумерных электронов в ямах сверхрешеток даже в случае, когда существенна лишь нижняя подзона размерного квантования. Мы увидим, что в рассматриваемом случае условия возникновения электронной сверхструктуры являются менее жесткими, чем условия вигнеровской кристаллизации, и могут реализоваться в обычных легированных сверхрешетках.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Мы исследуем возможность спонтанного нарушения симметрии в системе взаимодействующих электронов в легированных композиционных сверхрешетках (отметим, что проведенное рассмотрение можно перенести и на сверхрешетку легирования, состоящую из периодически повторяющихся $p-n$ -переходов).

Удобно использовать подход, основанный на теории функционала плотности. Рассмотрим электроны в однородно легированной композиционной сверхрешетке, описываемой гамильтонианом

$$H = T + V_{ee} + V_{ei} + V_{conf} + V_{ext}, \quad (1)$$

где T — оператор кинетической энергии, V_{ee} оператор электрон-электронного взаимодействия, V_{ei} — оператор взаимодействия электронов с положительно заряженными ионами, V_{conf} — оператор взаимодействия электронов с ограничивающим потенциалом сверхрешетки, определяющим пространственное изменение дна зоны проводимости, а V_{ext} — оператор взаимодействия электронов с внешним электрическим полем.

Теория функционала плотности основана на теореме Хохенберга–Кона, утверждающей, что для системы взаимодействующих частиц во внешнем поле соответствующий термодинамический потенциал (например, свободная энергия) выражается через универсальный функционал одночастичной плотности, не зависящий от потенциала внешнего поля, и достигает минимального значения, отвечающего основному состоянию, для равновесного распределения плотности $n(\mathbf{r})$ [10, 11]. В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением основного состояния системы при $T = 0$; при этом мы должны рассматривать экстремальные свойства энергии системы $E[n]$. В общем случае выражение для энергии $E[n]$, рассматриваемой как функционал плотности, можно записать в виде

$$E[n] = T[n] + E_H[n] + E_{xc}[n] + E_{conf}[n] + E_{ext}[n], \quad (2)$$

где $T[n]$ — кинетическая энергия для системы невзаимодействующих электронов, $E_H[n]$ — энергия взаимодействия между электронами, вычисленная в рамках классического приближения Хартри, куда включается также энергия взаимодействия с положительным фоном, компенсирующая энергию взаимодействия со средним отрицательным зарядом электронов, $E_{conf}[n]$ — энергия взаимодействия с ограничивающим потенциалом, $E_{ext}[n]$ — энергия взаимодействия с внешними полями, а оставшаяся часть энергии обычно обозначается $E_{xc}[n]$ и называется обменно-корреляционным вкладом (заметим, что все энергии берутся на единицу площади структуры). Основная трудность теории функционала плотности связана с тем, что точный вид функционала $E_{xc}[n]$ неизвестен, и для его получения приходится использовать различные приближения, например приближение локальной плотности, основанное на градиентном разложении энергии [10–12].

Важная особенность рассматриваемой системы состоит в том, что потенциал V_{conf} не является слабым — он в основном формирует электронные состояния в сверхрешетке. Мы рассмотрим случай, когда ямы являются достаточно узкими, так что заселенностью всех подзон, кроме низшей, можно пренебречь, а перекрытие волновых функций электронов соседних ям достаточно мало. При этом оказывается возможным использовать подход типа метода сильной связи и сформулировать задачу в терминах электронных состояний, локализованных в отдельных квантовых ямах. В этом приближении слагаемое $E_{conf}[n]$ учитывается уже при самом выборе базиса. Пренебрегая эффектами перекрытия электронных волновых функций соседних ям (соответствующие условия обсуждаются в разд. 6), мы можем рассматривать концентрацию электронов как функцию дискретного аргумента на множестве точек i , отвечающих отдельным ямам, а энергию (2) как функционал, заданный на множестве $\{\rho, i\}$, где ρ — непрерывно меняющийся радиус-вектор в плоскости ямы, а i — дискретный номер ямы. Поскольку функционал (2) известен, задача о нахождении распределения электронной плотности сводится к его минимизации.

3. ЭНЕРГИЯ КАК ФУНКЦИОНАЛ ПЛОТНОСТИ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ В СВЕРХРЕШЕТКЕ

Наша цель состоит в исследовании возможности спонтанного нарушения симметрии системы, связанного с возникновением таких неоднородных распределений, которым отвечают разные средние концентрации электронов в различных ямах. Поскольку, как будет видно из дальнейшего, условия возникновения таких состояний являются

более слабыми, чем условия возникновения непрерывных неоднородных распределений типа двумерного вигнеровского кристалла, мы ограничимся рассмотрением таких неоднородных состояний, для которых распределение электронной плотности в плоскости ямы остается однородным. Иначе говоря, в дальнейшем мы будем считать, что пространственное распределение электронной плотности не зависит от ρ , т.е. функция плотности задана на дискретном множестве точек, отвечающих квантовым ямам сверхрешетки. Для простоты рассмотрим случай, когда плотность заряда электронов сосредоточена в узких слоях, пересекающих ось z , параллельную оси сверхрешетки, в окрестностях точек $z_i = id$, где i — номер ямы, а d — период сверхрешетки. Соответственно, можно приближенно положить

$$n(\mathbf{r}) = \sum_n \nu_i \delta(z - z_i),$$

где ν_i — двумерная концентрация электронов в i -ой яме, так что пространственное распределение электронной плотности определяется совокупностью концентраций в ямах $\nu = \{\nu_i\}$, а функционал плотности представляет собой просто функцию многих переменных $\{\nu_i\}$.

Запишем выражения для отдельных вкладов в энергию (2) в рассматриваемом приближении. Очевидно, что кинетическая энергия аддитивна,

$$T[\nu] = \sum_i T^{(2)}(\nu_i), \quad (3)$$

где $T^{(2)}(\nu_i)$ — кинетическая энергия квазидвумерного электронного газа в i -ой яме. Ограничиваясь случаем, когда существенна лишь одна нижняя подзона размерного квантования, при малой туннельной прозрачности барьеров имеем

$$T^{(2)}(\nu_i) = \nu_i^2 / 2\rho_0, \quad (4)$$

где ρ_0 — двумерная плотность состояний в квантовой яме. Хартриевский вклад $E_H[\nu]$ для узких квантовых ям можно записать в виде

$$E_H[\nu] = \sum_{i,j} V_{ij} \nu_i \nu_j - \sum_i \nu_i N_d V^*, \quad (5)$$

где V_{ij} — потенциал кулоновского взаимодействия между зарядами ям i и j , V^* — проинтегрированный по всему объему потенциал кулоновского взаимодействия, а N_d — концентрация положительно заряженных легирующих примесей. Как известно, последнее слагаемое в (5) точно компенсирует взаимодействие со средним отрицательным зарядом подвижных носителей. Для простоты мы будем использовать модель «желе», считая компенсирующий положительный заряд однородно размазанным по пространству. В этом случае хартриевский вклад можно записать в виде

$$E_H[\nu] = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} V_{ij} (\nu_i - \nu_0)(\nu_j - \nu_0), \quad (5a)$$

где

$$V_{ij} = -(2\pi e^2 / \epsilon) |z_i - z_j|, \quad (6)$$

ϵ — диэлектрическая проницаемость, а z_i и z_j — координаты ям i и j . При однородном распределении носителей по ямам концентрация электронов ν_0 , приходящихся в среднем на единицу площади каждой ямы, связана с объемной концентрацией примеси N_d соотношением $\nu_0 = N_d d$.

Обсудим отдельно обменный и корреляционный вклады в энергию $E_{xc}[\nu]$. Обменный вклад $E_x[\nu]$ в случае слабого перекрытия волновых функций соседних ям является аддитивным, т. е. можно написать

$$E_x[\nu] = \sum_i E_x^{(2)}(\nu_i), \quad (7)$$

где $E_x^{(2)}(\nu_i)$ — обменная энергия двумерного электронного газа в i -ой квантовой яме; имеем [13, 14]

$$E_x^{(2)}(\nu_i) = -C_x (e^2/\epsilon) \nu_i^{3/2}, \quad (8)$$

где $C_x \simeq 0.81$, причем нетрудно учесть поправки, связанные с конечностью ширины ямы, а также при $T \neq 0$ — и температурные поправки [15].

Корреляционный вклад $E_c[\nu]$ связан с не зависящим от спина электронов сильным уменьшением на малых расстояниях парной корреляционной функции при учете кулоновских корреляций (образование кулоновской дырки). Ясно, что корреляционный вклад $E_c[\nu]$ также аддитивен, поскольку радиус кулоновской дырки не превышает расстояния между соседними ямами:

$$E_c[\nu] = \sum_i E_c^{(2)}(\nu_i), \quad (9)$$

где $E_c^{(2)}(\nu_i)$ — корреляционная энергия двумерного электронного газа с плотностью ν_i . С учетом вклада кольцевых диаграмм для $E_c^{(2)}(\nu)$ при $\nu < 2a_0^{-2}$ получаем [13]

$$E_c^{(2)}(\nu) = \left(\frac{e^2}{2\epsilon a_0^3} \right) \left\{ -1.29(\nu a_0^2)^{4/3} + 1.20(\nu a_0^2)^{3/2} - 0.14(\nu a_0^2)^{5/3} + O \left((\nu a_0^2)^2 \ln \frac{1}{\nu a_0^2} \right) \right\}. \quad (10)$$

Отметим, однако, что аддитивность нарушается, когда радиус кулоновской дырки становится больше, чем расстояние между ямами. При условии, что радиус кулоновской дырки велик по сравнению с периодом сверхрешетки (т. е. при $\nu_0^{-1/2} \gg d$), при расчете перераспределения электронов между ямами корреляционный вклад играет несущественную роль по сравнению с обменным. Соответственно, представляя обменно-корреляционный вклад в виде

$$E_{xc}[\nu] = \sum_i E_{xc}^{(2)}(\nu_i)$$

и полагая $E_{xc}^{(2)}(\nu) \simeq E_x^{(2)}(\nu)$, получаем оценку снизу для абсолютной величины обменно-корреляционного вклада. Более точную оценку можно получить, полагая $E_{xc}^{(2)}(\nu) \simeq E_x^{(2)}(\nu) + \lambda E_c^{(2)}(\nu)$, где $0 < \lambda < 1$. Дополнительный учет корреляционного вклада приводит лишь к некоторому (несущественному при $\nu_0^{1/2} d \ll 1$) ослаблению условий возникновения электронной сверхструктуры; соответственно, для конкретных оценок мы будем использовать приближение $E_{xc}^{(2)}(\nu) \simeq E_x^{(2)}(\nu)$.

Наконец, при наличии внешнего поля потенциал взаимодействия с ним в рассматриваемом приближении имеет вид

$$E_{ext}[\nu] = \sum_i V_i^{(ext)} \nu_i, \quad (11)$$

где $V_i^{(ext)}$ — значение потенциальной энергии взаимодействия электрона с внешним полем (которую мы предполагаем зависящей только от z) при $z = z_i$.

4. УСТОЙЧИВОСТЬ ОДНОРОДНОГО СОСТОЯНИЯ ОТНОСИТЕЛЬНО МАЛЫХ ВАРИАЦИЙ ПЛОТНОСТИ

Как известно, вигнеровская кристаллизация в однородном электронном газе происходит через спиново-поляризованное состояние, отвечающее ферромагнитному упорядочению спинов стонеровского типа [4, 5]. Анализ условий возникновения зонного ферромагнетизма в двумерных слоях при уменьшении плотности, аналогичный проведенному в [16], можно провести на основе приведенных выше выражений для функционала энергии. Концентрации электронов со спинами, направленными вверх и вниз, можно представить в виде $\nu_\uparrow = (\nu/2)(1+x)$ и $\nu_\downarrow = (\nu/2)(1-x)$, где ν — двумерная концентрация в слое, а $|x| \leq 1$. Соответственно, из (4) и (8) для разности энергий поляризованного и неполяризованного состояний электронного газа в отдельном слое получаем

$$\Delta_{sp} E(x) = \frac{\nu^2}{4\rho_0} x^2 - C_x \frac{e^2 \nu^{3/2}}{2\sqrt{2}\epsilon} \left\{ (1+x)^{3/2} + (1-x)^{3/2} - 2 \right\}. \quad (12)$$

Видно, что наряду с экстремумом при $x = 0$ при достаточно малых ν ($\sqrt{\nu} < 2\sqrt{2} \times (3/2) C_x e^2 \rho_0 / \epsilon$) функция $\Delta_{sp} E(x)$ имеет относительный минимум при $|x| = 1$; при

$$\sqrt{\nu} < \frac{2\sqrt{2} (\sqrt{2} - 1) C_x e^2 \rho_0}{\epsilon} \quad (13)$$

значение $\Delta_{sp} E(1)$ становится отрицательным, т. е. основное состояние отвечает полностью поляризованному состоянию двумерного электронного газа в слое. Наконец, при $\sqrt{\nu} < (3\sqrt{2}/2) C_x e^2 \rho_0 / \epsilon$ происходит потеря устойчивости неполяризованного состояния относительно малых флуктуаций поляризации.

В области ферромагнитного упорядочения спинов в отдельных ямах рассматриваемая квазиодномерная система аналогична одномерной цепочке одноэлектронных атомов со слабо перекрывающимися волновыми функциями ближайших соседей. В случае однородного легирования учет конечности интегралов перекрытия волновых функций электронов соседних ям (межслоевого обмена) приводит к заключению, что спиново-упорядоченное состояние электронов в сверхрешетке отвечает ферромагнитному упорядочению спиновых поляризаций соседних ям. Отметим, что отличие рассматриваемой системы от цепочки одноэлектронных атомов состоит в том, что аналог энергии Хаббарда (изменение энергии кулоновского взаимодействия при добавлении одного электрона в квантовую яму) обращается в нуль. Соответственно, обращается в нуль и хаббардовская щель.

Покажем теперь, что спиново-упорядоченное состояние с однородным распределением электронов между слоями оказывается неустойчивым относительно пространственных вариаций электронной плотности в некоторой подобласти области концентраций, определяемой неравенством (13). Рассмотрим условия, при которых переход из спиново-упорядоченного состояния в неоднородное состояние с различными концентрациями электронов в различных ямах оказывается энергетически выгодным. С этой целью исследуем разложение функционала $E[\nu]$ по $\delta\nu_i = \{\nu_i - \nu_0\}$ в отсутствие внешнего поля (при $V_i^{(ext)} = 0$) вблизи однородного состояния $\nu_i = \nu_0$, которое всегда соответствует экстремуму $E[\nu]$. С точностью до слагаемых второго порядка по $\delta\nu$ имеем

$$\Delta E[\nu] = \sum_i \left(\frac{1}{\rho_0} - C_x \frac{3e^2}{4\epsilon\sqrt{\nu_0}} \right) \delta\nu_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (j \neq i)}} V_{ij} \delta\nu_i \delta\nu_j. \quad (14)$$

Обозначим через N полное число ям в сверхрешетке и введем нормальные координаты, положив

$$\delta\nu_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k [Q_k \exp(ikz_i) + Q_k^* \exp(-ikz_i)], \quad (15)$$

где суммирование проводится по волновым числам k ; в случае периодических граничных условий для $\delta\nu_i$ величина k принимает значения $k = (2\pi/Nd)n$ в пределах первой зоны Бриллюэна $-\pi/d < k \leq \pi/d$, так что целые числа n лежат в области $-N/2 < n \leq N/2$. Подставляя (15) в разложение энергии (14), находим

$$\Delta E[\nu] = \frac{1}{2} \sum_k \left[\frac{1}{\rho_0} - \frac{3C_x e^2}{4\epsilon\sqrt{\nu_0}} + V(k) \right] |Q_k|^2. \quad (16)$$

Здесь

$$V(k) = \sum_i V(z_i) \exp(-ikz_i), \quad (17)$$

и мы учли тот факт, что величины $V_{ij} = V(z_i - z_j)$ зависят только от разности координат $z_i - z_j$; функции $V(k)$ периодичны с периодом одномерной обратной решетки $b = 2\pi/d$.

Из (17) видно, что однородное состояние системы устойчиво относительно малых возмущений, лишь если все коэффициенты

$$W(k) = \frac{1}{\rho_0} - \frac{3C_x e^2}{4\epsilon\sqrt{\nu_0}} + V(k)$$

положительны. Обращение в нуль или отрицательность одного из коэффициентов при некотором k_0 означает неустойчивость относительно волны с волновым числом k_0 . Для нашей системы функцию $V(k)$ нетрудно вычислить явно; имеем

$$W(k) = \frac{1}{\rho_0} + \frac{e^2 d}{\epsilon \sin^2(kd/2)} - \frac{3C_x e^2}{4\epsilon\sqrt{\nu_0}}. \quad (18)$$

Видно, что минимальное значение функции $W(k)$ достигается при $k = k_0 = \pi/d$, т. е. на границе зоны Бриллюэна. При

$$\frac{1}{\rho_0} + \frac{2\pi e^2 d}{\epsilon} - \frac{3C_x e^2}{4\epsilon\sqrt{\nu_0}} < 0 \quad (19)$$

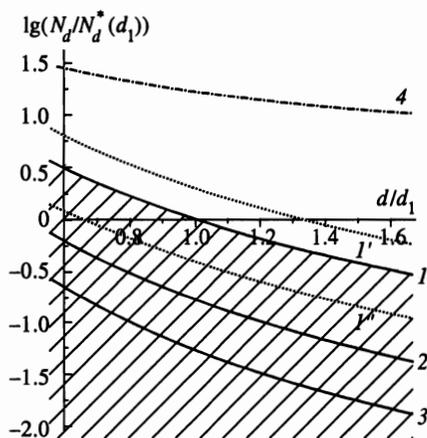


Рис. 1. Область существования электронной сверхструктуры (заштрихована). Кривые 1–3 ограничивают области, отвечающие существованию основного состояния с периодами $2d$, $3d$ и $4d$ соответственно. Пунктирная кривая $1'$ является границей области неустойчивости однородного распределения электронов по ямам сверхрешетки, а кривая $1''$ ограничивает область существования метастабильного неоднородного состояния. Кривая 4 ограничивает область, в которой спиново-упорядоченное состояние является основным

однородное распределение электронов по ямам становится неустойчивым, причем вначале наступает неустойчивость относительно малых гармонических вариаций концентрации с $k = k_0$, т.е. с длиной волны равной удвоенному периоду сверхрешетки.

Условие (19) можно записать в виде

$$N_d < N_{d1}^*, \quad (20)$$

где

$$N_{d1}^* = \frac{A_1}{d(d + d^*)^2}, \quad A_1 = \left(\frac{3C_x}{8\pi} \right)^2, \quad d^* = \frac{\varepsilon}{2\pi e^2 \rho_0}.$$

Граница области неустойчивости однородного спиново-упорядоченного состояния относительно малых пространственных флуктуаций схематически показана на фазовой диаграмме (N_d, d) на рис. 1 пунктирной линией $1'$. Штрихпунктирная кривая 4 на рис. 1 ограничивает область, в которой спиново-упорядоченное состояние является основным.

Таким образом, как следует из (13), (19), при понижении концентрации возникновение электронной сверхструктуры происходит через спиново-упорядоченное состояние. Это связано с тем, что кулоновское взаимодействие зарядов различных слоев, описываемое положительным слагаемым $E_H[\nu]$, препятствует переходу в состояние с неоднородным распределением электронов по ямам; кроме того, при образовании спиново-упорядоченного состояния в слое двумерная концентрация вдвое меньше суммарной концентрации при переходе всех электронов в одну из двух соседних ям.

5. ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СВЕРХСТРУКТУРЫ

Мы можем исследовать неоднородное основное состояние системы, находя минимум функционала $E[\nu]$ в отсутствие внешнего поля при дополнительном условии

$$\sum_i \nu_i = N_d L,$$

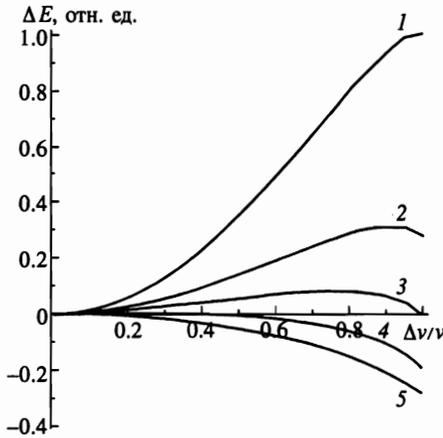


Рис. 2. Зависимость энергии неоднородного состояния от $\Delta\nu/\nu_0$ при различных значениях параметра $\nu_0 = N_d d$ (схематически). Параметр ν_0 уменьшается при возрастании номера кривой

где L — размер системы в направлении оси сверхрешетки. В предыдущем разделе было показано, что в точке потери устойчивости «наиболее опасными» являются возмущения электронной плотности, отвечающие удвоению периода сверхрешетки. Соответственно, для иллюстрации рассмотрим вначале в рамках нелинейной теории неоднородные состояния с удвоенным периодом. Обозначим концентрации электронов в четных и нечетных ямах через $\nu_{1,2} = \nu_0 \pm \Delta\nu$ соответственно. Вводя обозначение $u = \Delta\nu/\nu_0$, мы можем записать выражение для изменения энергии (в расчете на один период сверхрешетки) относительно ее значения, отвечающего однородному распределению электронов по ямам, в виде

$$\Delta E(u) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} + \frac{2\pi e^2 d}{\epsilon} \right) \nu_0^2 u^2 - C_x \frac{e^2 \nu_0^{3/2}}{2\epsilon} \left\{ (1+u)^{3/2} + (1-u)^{3/2} - 2 \right\}. \quad (21)$$

Очевидно, что однородное решение $u = 0$ уравнения $d\Delta E(u)/du = 0$ существует при всех значениях ν_0 , однако при выполнении условия (19) оно становится неустойчивым относительно малых вариаций плотности. Зависимости $\Delta E(u)$ изображены на рис. 2 для различных ν_0 . Видно, что при малых концентрациях ν_0 минимум энергии отвечает значениям $u = \Delta\nu/\nu_0 = \pm 1$, т. е. такому распределению носителей по ямам, при котором носители полностью переходят в четные (нечетные) ямы. Область концентраций, отвечающая возможности существования неоднородного состояния, устойчивого относительно малых возмущений, определяется условием

$$\left. \frac{d\Delta E(u)}{du} \right|_{u=1} < 0. \quad (22)$$

Это условие можно записать в виде

$$\frac{1}{\rho_0} + \frac{2\pi e^2 d}{\epsilon} - \frac{3C_x (\sqrt{2}-1)}{4} \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\nu_0}} < 0$$

или

$$N_d < N_{d2}^*, \quad (23)$$

где

$$N_{d2}^* = \frac{A_2}{d(d+d^*)^2}, \quad A_2 = 2 \left(\frac{3C_x}{8\pi} \right)^2.$$

Область устойчивого «в малом» неоднородного состояния ограничена на рис. 1 пунктирной кривой I'' .

Энергия неоднородного распределения становится меньше, чем энергия однородного распределения, при $\Delta E(u)|_{u=1} < 0$; это условие можно представить как

$$N_d < N_{d3}^*, \quad (24)$$

где

$$N_{d3}^* = \frac{A_3}{d(d+d^*)^2}, \quad A_3 = \frac{(3-2\sqrt{2})C_x^2}{\pi^2}.$$

Условие (24) определяет область концентраций легирующей примеси, при которых основное состояние системы является пространственно-неоднородным, — возникает электронная сверхструктура с удвоенным периодом сверхрешетки; эта область (заштрихованная на рис. 1) ограничена кривой I . Важно отметить, что условия (21), (23) и (24) не совпадают. В области

$$N_{d1}^* < N_d < N_{d3}^* \quad (25)$$

однородное состояние устойчиво относительно бесконечно малых, но неустойчиво относительно конечных флуктуаций. В области концентраций

$$N_{d3}^* < N_d < N_{d2}^*$$

неоднородное состояние устойчиво относительно малых возмущений, но является метастабильным.

Обратимся теперь к более общему случаю и предположим, что образуется периодическая сверхструктура с периодом, в s раз превышающим период сверхрешетки, причем из $(n-1)$ -ой ямы электроны полностью переходят в s -ую яму, так что $\nu_1 = s\nu_0$ и $\nu_i = 0$ при $i = 2, \dots, s$. Тогда для изменения энергии (в расчете на один период сверхрешетки) относительно ее значения, отвечающего однородному состоянию, можно написать

$$\Delta E(s) = \frac{\pi e^2 d}{2\epsilon} \nu_0^{3/2} \left\{ \left[(s-1)d^* + \frac{s^2-1}{3}d \right] \nu_0^{1/2} - \frac{C_x}{\pi} (s^{1/2} - 1) \right\}. \quad (26)$$

Видно, что при $N_d < N_d^{(s)}$, где

$$N_d^{(s)} = \left\{ s+1 - 2s^{1/2} \right\} \frac{C_x}{\pi} \frac{A^{(s)}}{d [(s-1)d^* + (s^2-1)d/3]^2},$$

а $A^{(s)} = (s+1 - 2s^{1/2})(C_x/\pi)^2$, основное состояние отвечает периоду $s_{\min}d$, где s_{\min} — значение s , которому отвечает минимум энергии (26). Таким образом, при малых концентрациях возможно образование неоднородных состояний с периодами, превышающими удвоенный период сверхрешетки. Области, в которых период основного состояния становится равным $3d$ и $4d$, ограничены на рис. 1 кривыми 2 и 3. Отметим, однако, что в силу уменьшения выигрыша энергии $\Delta E(s)$ при уменьшении ν_0 такие состояния менее устойчивы, чем неоднородные состояния с удвоенным периодом, возникающие при промежуточных концентрациях.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Таким образом, в сверхрешетках с достаточно малым периодом при понижении концентрации носителей заряда может возникать неоднородное (вдоль оси сверхрешетки) распределение электронов по ямам — электронная сверхструктура. Отметим, что рассмотренный нами механизм спонтанного нарушения симметрии вдоль оси сверхрешетки отличается от механизма вигнеровской кристаллизации. Хотя формально рассмотрение сводится к одномерной задаче, неоднородность структуры весьма существенна — возникновение неоднородности обусловлено эффектами обмена и корреляции в квазидвумерных квантовых ямах. Существенное ослабление условий спонтанного нарушения симметрии связано со следующими причинами. Как известно, приближение локальной плотности дает значительно меньшие значения порогового значения критической концентрации, чем более строгий подход, например с применением численных методов [3]. Это связано с важной ролью поправок в градиентном разложении функционала плотности. Понижение критической концентрации в рассматриваемой нами системе по сравнению с однородным электронным газом обусловлено именно тем, что интегралы перекрытия, играющие роль аналогичную роли градиентных поправок, малы. Вообще говоря, их нетрудно учесть явно; это приводит лишь к появлению соответствующего слагаемого в условиях, определяющих области существования и устойчивости сверхструктуры. Заметим, что интегралы перекрытия зависят от положения уровней в ямах, уменьшаясь при возникновении неоднородных состояний, приводящих к сдвигам уровней за счет кулоновских полей, связанных с перераспределением носителей между ямами.

Переход в неоднородное состояние сопровождается сдвигами подзон размерного квантования в соседних ямах. Соответственно, может возникать щель в спектре элементарных возбуждений, связанных с электронными переходами между соседними ямами; именно такие возбуждения определяют вертикальную проводимость (проводимость вдоль оси роста) сверхрешетки при конечных температурах.

Нетрудно оценить концентрацию легирующей примеси, при которой можно ожидать образования электронной сверхструктуры. Полагая для оценки $\rho_0 = 3 \times 10^{13} \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-2}$, $\varepsilon = 12.7$ и $d = 9 \text{ нм}$, находим $d^* \approx 4.7 \text{ нм}$ и $N_{d1}^* \approx 8.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ (это соответствует средней двумерной концентрации $\nu_0 \approx 7 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$). Согласно сказанному выше, учет корреляционного вклада приводит к некоторому увеличению постоянной C_{xc} и, следовательно, критических концентраций N_{di}^* . Приведенная оценка указывает на возможность существования неоднородного основного состояния электронной системы в условиях, значительно менее жестких, чем условия образования вигнеровского кристалла (при указанных выше значениях параметров значению $r_s \approx 26$ [4] соответствует критическая концентрация $\nu_0 \approx 3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$ для вигнеровской кристаллизации в двумерном слое). С другой стороны, из приведенной оценки вытекает, что образования электронной сверхструктуры (и связанного с этим появления щели в спектре электронных возбуждений) можно ожидать именно в той области концентраций легирующей примеси, в которой наблюдались аномалии вертикальной проводимости сверхрешетки [1].

Выражаю благодарность А. Г. Миронову за полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 97-02-17334) и INTAS (грант 94-4435).

Литература

1. G. Richter, W. Stolz, P. Thomas, S. Koch, K. Maschke, and I. P. Zvyagin, *Superlattices and Microstructures* **22**, 475 (1997).
2. E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **46**, 1002 (1934).
3. D. M. Ceperley and B. J. Adler, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 567 (1980).
4. D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **18**, 3126 (1978).
5. G. Senatore and N. H. March, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 445 (1994).
6. G. Senatore and G. Pastore, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 303 (1990).
7. C. C. Grimes and G. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 795 (1979).
8. Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн, *Электронные свойства двумерных систем*, Мир, Москва (1985). (T. Ando, A. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1 (1982).)
9. V. V. Tugushev and E. A. Zhukovskii, *Solid State Commun.* **96**, 203 (1995).
10. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
11. В. Кон, П. Вашишта, в сб. *Теория неоднородного электронного газа*, под ред. С. Лундквиста и Н. Марча, Мир, Москва (1987), с. 86. (W. Kohn and P. Vashishta, in *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*, ed. by S. Lundquist and N. H. March, Plenum, New York (1983), p. 79.)
12. W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, 1133 (1965).
13. A. Isihara, *Quantum Liquids*, Springer, New York (1995).
14. W. Koch and H. Haug, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, 2nd ed., World Scientific, Singapore (1993).
15. H. Totsuji, H. Tachibana, C. Totsuji, and S. Nara, *Phys. Rev. B* **51**, 11148 (1995).
16. M. Shimizu, *Proc. Roy. Soc.* **84**, 397 (1964).