

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНАЯ ЖИДКОСТЬ
В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Л. В. Келдыш, А. П. Силин

УДК 537.311.33

Показано, что учет когерентного спаривания электронов и дырок в полупроводниках с изотропными и невырожденными зонами приводит к образованию диэлектрической электронно-дырочной жидкости, стабильной относительно распада на свободные экситоны или биекситоны.

В работе /1/ было высказано предположение о возможности существования в полупроводниках диэлектрической электронно-дырочной жидкости за счет когерентного спаривания электронов и дырок. Цель настоящей работы заключается в расчете энергии основного состояния диэлектрической электронно-дырочной жидкости и спектра элементарных возбуждений квазичастиц. О возможности двух фазовых переходов в системе электронов и дырок: диэлектрический экситонный газ - диэлектрическая электронно-дырочная жидкость - металлическая электронно-дырочная жидкость было указано в работе /2/, исходя из аналогии со случаем ртути /3/.

Недостатком теоретических работ, посвященных вычислению энергии основного состояния электронно-дырочной жидкости в полупроводниках (см. обзор /4/), является использование в качестве нулевого приближения свободного электронно-дырочного газа, энергия которого при стремящейся к нулю плотности не переходит в энергию связи экситона, а стремится к нулю. Это свидетельствует о том, что электронно-дырочные корреляции плохо учтены. Кроме того заметим, что все известные расчеты /4/ для случая изотропных и невырожденных зон показывают, что в таких полупроводниках электронно-дырочная жидкость менее энергетически выгодна, чем газ свободных экситонов.

Известно /5/, что в изотропном случае металлическое состояние неустойчиво из-за электронно-дырочных корреляций и щель на поверхности Ферми в пределе стремящейся к нулю плотности

должна переходить в энергию связи экситона. В работе /6/ была сделана попытка оценки электронно-дырочных корреляций, исходя из металлического состояния и ввода металлическую экранировку, что также является плохим нулевым приближением.

С другой стороны, можно обобщить приближение Хартри-Фока как для больших металлических плотностей /5/, так и для предельно малых плотностей /7/, когда описывается бозе-конденсированное состояние экситонов, используя каноническое преобразование /7/ для построения нулевого приближения системы электронов и дырок, взаимодействующих по закону Кулона. (Учет спина электронов и дырок не изменяет основных выражений работы /7/ и сводится к замене в них плотности n на $n/2$.)

Гамильтониан системы, после канонического преобразования

$$S = \exp \left\{ \sum_{\vec{p}} \varphi_{\vec{p}} (a_{\vec{p}\sigma}^+ b_{-\vec{p}\pm\sigma}^+ - b_{-\vec{p}\pm\sigma} a_{\vec{p}\sigma}) \right\} \quad (I)$$

(здесь $a_{\vec{p}\sigma}^+$, $b_{\vec{p}\sigma}^+$ - операторы рождения электронов и дырок с квазиимпульсом \vec{p} и проекцией спина σ , $\varphi_{\vec{p}}$ должна быть определена из условий минимальности энергии и устойчивости основного состояния системы, $\pm\sigma$ означает триплетное или синглетное спаривание электрона и дырки в экситон, энергия при этом не зависит от суммарного спина экситона), имеет вид

$$s\hat{H}s^+ = 2U\{\varphi_{\vec{p}}\} + \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (2)$$

где

$$\frac{2U\{\varphi_{\vec{p}}\}}{n} + 2\mu_0 = \frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} \frac{5}{p_0^5} \int_0^{\infty} \frac{dp p^4}{1+z^2(p)} - \frac{3}{9} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \frac{2}{p_0} \times \\ \times \iint \frac{dpdq \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right| pq [z(p)z(q) + 1]}{[1+z^2(p)][1+z^2(q)]}. \quad (3)$$

Здесь использована система единиц $e^2/\epsilon_0 = m = \hbar = 1$, ϵ_0 - статическая диэлектрическая проницаемость, m - приведенная масса электро-

на и дырки, $r_s = (3/4\pi n)^{1/3}$, $z(p) = \text{ctg} \varphi_{\vec{p}}$, $p_c = \left[3 \int_0^{\infty} \frac{dp p^2}{1+z^2(p)} \right]^{1/3}$.

N_0 и N_1 - операторы, содержащие парные и четверные комбинации фермионских операторов квазичастиц; определяются формулами (21) и (22) работы /7/. Преобразованная плотность n электронов и дырок имеет следующий вид

$$\langle \hat{n} \hat{n} S^+ \rangle = \sum_{\vec{p}\sigma} \langle \hat{a}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}\sigma} S^+ \rangle = \sum_{\vec{p}\sigma} \langle \hat{b}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{b}_{\vec{p}\sigma} S^+ \rangle = n, \quad (4)$$

где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по основному состоянию. Химический потенциал когерентного состояния экситонов в самосогласованном приближении μ_0 определяется минимизацией числового функционала $U\{\varphi_{\vec{p}}\}$ (3) с условием нормировки (4). Заметим, что обычное хартри-фоковское выражение /4,6/ (множитель 2 вызван отличием в системе единиц)

$$2\mu_{HF} = \frac{3}{5} \left(\frac{9\mathcal{K}}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} - \frac{3}{\mathcal{K}} \left(\frac{9\mathcal{K}}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \quad (5)$$

получается при выборе

$$\frac{1}{1 + z^2(p)} = \theta(1 - p), \quad z(p) = \begin{cases} 0, & p < 1 \\ \infty, & p > 1. \end{cases} \quad (6)$$

При минимизации (3) использовались различные пробные функции и оказалось, что при $r_s > 1$ лучшие результаты дает пробная функция

$$z(p) = A(1 + p^2)^2 + B, \quad (7)$$

где A, B - вариационные параметры. Результаты численных расчетов приведены на рис.1. Заметим, что полученное значение химического потенциала лежит ниже (при $n \neq 0$), чем полученное по теории возмущений для $n \ll 1$ /7,8/

$$2\tilde{\mu}_0 = - \left(1 - \frac{13\mathcal{K}}{6} n \right), \quad (8)$$

и ниже, чем обычное хартри-фоковское выражение (5).

Энергия преобразованных квазичастиц $E(q)$ определяется следующим выражением /7/:

$$\tilde{\epsilon}(p) = \frac{\epsilon(p)}{\tilde{\epsilon}_F} = \frac{1}{z^2(p) + 1} \times$$

$$\times \left\{ [z^2(p) - 1] \left(p^2 - \frac{2\mu_0}{\tilde{\epsilon}_F^2} \right) - \frac{4}{\tilde{\epsilon}_F p} \int_0^{\infty} \frac{dq q \ln \left| \frac{p+q}{p-q} \right| [z^2(p) - 1 - 2z(p)z(q)]}{z^2(q) + 1} \right\} \quad (9)$$

где $p = q/\tilde{\epsilon}_F$, $\tilde{\epsilon}_F = (3\pi^2 n)^{1/3}/p_0$, $\tilde{\epsilon}_F = p_F^2/4$. При вычислении $\tilde{\epsilon}(p)$ использовались значения μ_0 и вариационных параметров, полученные при минимизации (3). Численные расчеты показывают, что в спектре элементарных возбуждений имеется щель, убывающая с ростом плотности.

При вычислении корреляционных поправок, связанных с многократным рождением и уничтожением электронно-дырочных пар, используется приближение, аналогичное использованному в работе /9/, которое сводится при малых передаваемых импульсах k ($x = k/\tilde{\epsilon}_F \ll 1$) к приближению случайных фаз

$$I_{RPA}(x) = -x^2 L_1, \quad L_1 = \frac{16\tilde{\epsilon}_F^4 A^2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dp p^4 (1+p^4)}{[1+z^2(p)]^2} -$$

$$- \frac{3}{16\pi} \tilde{\epsilon}_F^2 \int_0^{\infty} dy \ln \left\{ 1 + \frac{1024A^2}{3\pi \tilde{\epsilon}_F} \int_0^{\infty} \frac{dp p^4 (1+p^4)}{[1+z^2(p)]^2} \frac{\tilde{\epsilon}(p)}{y^2 + [2\tilde{\epsilon}(p)]^2} \right\} \quad (10)$$

и при больших передаваемых импульсах k ($x \gg 1$) - к вычислению суммы диаграмм второго порядка

$$I_{II}(x) = -\frac{L_2}{x}, \quad L_2 = \frac{8}{\pi^2}, \quad (11)$$

интерполяции между ними, при которой используется гармоническое сшивание

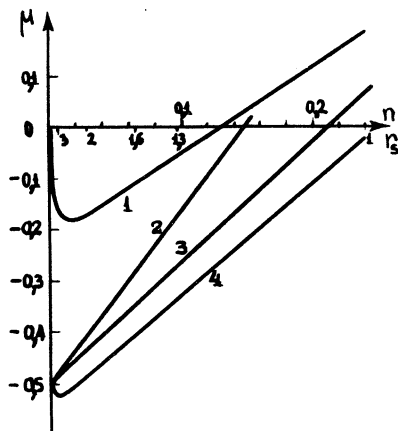
$$I(x) = \frac{I_{RPA}(x)I_{II}(x)}{I_{RPA}(x) + I_{II}(x)} = -\frac{L_1 L_2 x^2}{L_2 + L_1 x^6} = \begin{cases} I_{RPA}(x), & x \ll 1 \\ I_{II}(x), & x \gg 1, \end{cases} \quad (12)$$

и дальнейшему интегрированию по передаваемому импульсу

$$\Delta\mu = \int_0^{\infty} dx I(x) = -\frac{\pi}{6} \sqrt{I_1 I_2} = -\frac{\sqrt{2I_1}}{3} \quad (I3)$$

Численные оценки показывают (см. рис. I.), что

$$\bar{\mu} = \mu_0 + \Delta\mu \quad (I4)$$



Р и с. I. Зависимость химического потенциала экситонов от плотности. 1-3 - химический потенциал экситонов в самосогласованном приближении: 1 - $\mu_{\text{нр}}$ (5); 2 - $\bar{\mu}_0$ (8); 3 - μ_0 (3) с пробной функцией (6); 4 - химический потенциал экситонов с учетом корреляционных поправок $\bar{\mu}$ (I4)

лежит ниже, чем $E_x = -1/2$ (E_x - энергия связи экситона) при $r_s \geq 2,7$. Энергия связи диэлектрической электронно-дырочной жидкости будет равна $0,068E_x$, что соответствует равносному $r_s = 4$. Таким образом диэлектрическая электронно-дырочная жидкость будет более энергетически выгодна, чем газ свободных биекситонов (энергия связи биекситона относительно экситонного газа равна $0,029E_x / 10$).

Авторы благодарны В. А. Володину за большую помощь в проведении численных расчетов.

Поступила в редакцию
10 июня 1975 г.

Л и т е р а т у р а

1. Л. В. Келдыш, в сб. "Экситоны в полупроводниках", "Наука", М., 1971 г., стр. 5.
2. Т. М. Rice. Proc. XII Int. Conf. Phys. Semicond., 1974, Stuttgart, p. 23.
3. Я. Б. Зельдович, Л. Д. Ландау. ЖЭТФ, 14, 32 (1944).
4. P. Vashishta, P. Bhattacharyya, K. S. Singwi. Nuovo Cimento, 23B, 172 (1974).
5. Л. В. Келдыш, Д. В. Копаев. ФТТ, 6, 2791 (1964).
6. W. F. Brinkman, T. M. Rice. Phys. Rev., E7, 1508 (1973).
7. Л. В. Келдыш, А. Н. Козлов. ЖЭТФ, 54, 978 (1968).
8. D. Halperin, T. M. Rice. Sol. St. Phys. 21, 115 (1968).
9. M. Combescot, P. Nozieres. J. Phys. C, 5, 2369 (1972).
10. W. F. Brinkman, T. M. Rice, B. Bell. Phys. Rev., E8, 1570 (1973).