

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 621.315.592

**ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА КОНЦЕНТРАЦИОННУЮ ЩЕЛЬ
В ЛЕГИРОВАННЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ С КОНТРОЛИРУЕМЫМ
БЕСПОРЯДКОМ****И. П. Звягин, М. А. Ормонт***(кафедра полупроводников)*

Найдена температурная зависимость равновесного распределения электронной плотности, отвечающего основному состоянию электронного газа в легированных сверхрешетках с контролируемым беспорядком, создаваемым путем случайных вариаций толщин слоев в процессе роста. Изучен характер температурного изменения мягкой концентрационной щели, возникающей при низких температурах за счет обменного взаимодействия. Показано, что в типичных условиях концентрационная щель сохраняется при температурах $T \leq \nu_{cr}/k\rho_0$, где $\nu_{cr} \approx (C_x e^2 \rho_0 / 2\varepsilon)^2$ — характерная критическая концентрация, ρ_0 — двумерная плотность состояний в яме сверхрешетки, ε — диэлектрическая проницаемость, C_x — постоянная порядка единицы, а k — постоянная Больцмана.

Введение

Сверхрешетки с контролируемым беспорядком (СРКБ) представляют собой структуры с квантовыми ямами, случайное распределение уровней размерного квантования в которых можно задавать контролируемым образом в процессе роста. СРКБ можно рассматривать в качестве модельной системы, позволяющей исследовать влияние величины и типа беспорядка на энергетический спектр и кинетические свойства электронного газа в структурах пониженной размерности [1–4]. Результаты экспериментальных исследований СРКБ на основе GaAs/GaAlAs, легированных кремнием однородно по объему, с числом ям порядка 100, обнаружили ряд нетривиальных особенностей вертикальной (в направлении оси роста сверхрешетки) проводимости при низких температурах [5]. В частности, оказалось, что даже при большом вертикальном беспорядке, когда задаваемая ширина случайного распределения уровней размерного квантования (флуктуации ширин ям обеспечивали гауссово распределение уровней размерного квантования) заметно превосходит ширину минизоны и естественно ожидать, что все состояния минизоны локализованы, вертикальная проводимость слабо (неэкспоненциально) зависит от температуры. Для объяснения поведения вертикальной проводимости авторы работы [5] предположили, что эта его особенность связана с влиянием кулоновского взаимодействия электронов на энергетический спектр легированной сверхрешетки.

В работах [6, 7] были вычислены равновесное распределение заряда и энергетический спектр однородно легированных СРКБ с учетом кулоновских

полей, обусловленных перераспределением электронов между квантовыми ямами, в приближении Хартри. Было показано, что вертикальное экранирование приводит к существенному сужению функции распределения уровней размерного квантования в квантовых ямах, т.е. к подавлению беспорядка в положении дна нижней подзоны размерного квантования в различных ямах. В рассмотренном в работе [6] случае сильного легирования, когда все квантовые ямы заполнены электронами, подавление беспорядка в положении уровней размерного квантования определяется фактором $\beta = 1 + 4\pi e^2 \rho_0 d / \varepsilon$, где ε — диэлектрическая проницаемость, e — заряд электрона, ρ_0 — полная (для обоих направлений спина) двумерная плотность состояний в яме и d — средний период структуры [5]. Решение задачи основывалось на методе функционала плотности и осуществлялось в рамках стандартной линейной вариационной процедуры. Вместе с тем в общем случае при не слишком высоком уровне легирования, когда появляются незаполненные электронами квантовые ямы, вариационная задача становится нелинейной. Алгоритм решения этой задачи отличается от изложенного в работе [6] и основывается на последовательной минимизации функционала свободной энергии по концентрациям для каждой пары квантовых ям [7]. Результаты расчетов в приближении Хартри показывают, что подавление беспорядка в положении краев основных подзон размерного квантования происходит при энергиях, меньших перенормированного уровня химического потенциала. Известно, однако, что при не слишком больших концентрациях носителей заряда приближение Хартри может оказаться недостаточным

и следует учитывать обменный и корреляционный вклады в энергию системы. Соответствующие эффекты проявляются, например, при образовании электронных сверхструктур в упорядоченных сверхрешетках [8]. Исследование влияния обменного кулоновского взаимодействия на распределение равновесной электронной плотности, соответствующей основному состоянию в легированных композиционных СРКБ при нулевой температуре, было проведено в работе [9]. Было показано, что учет обменного взаимодействия приводит к появлению мягкой концентрационной щели, что соответствует увеличению беспорядка в положении эффективных одночастичных уровней размерного квантования (краевых низших подзон) и появлению плато на соответствующей им эффективной одночастичной плотности состояний. Проведенная оценка показала, что при значениях параметров, характерных для структур GaAs/AlGaAs, ширина ступеньки плотности состояний составляла около 1 мэВ. Известно, однако, что эффекты, связанные с обменным взаимодействием, проявляются при достаточно низких температурах; соответственно при повышении температуры происходит их существенное ослабление [10–12].

Цель настоящей работы состоит в исследовании температурного подавления концентрационной щели в СРКБ и обсуждении условий возможности ее экспериментального наблюдения.

Постановка задачи

Мы рассматриваем СРКБ, в которых положения затравочных уровней размерного квантования, рассчитываемых в приближении изолированных ям, флуктуируют за счет случайного контролируемого изменения ширины ям. Структуры GaAs/GaAlAs такого типа, однородно по объему легированные донорами (Si), исследовались экспериментально [2–5]. Поскольку электроны с доноров внутри барьеров переходят в области квантовых ям, в таких структурах неизбежно возникает внутреннее электрическое поле, приводящее к смещению уровней размерного квантования в ямах. Смещение уровней приводит к изменению заселенностей ям электронами, и это обуславливает необходимость самосогласованного решения задачи о вычислении электрических полей и распределения электронов по ямам сверхрешетки. Полагая для оценки ширину квантовой ямы равной $L = 60 \text{ \AA}$, получаем расстояние между краями первой и второй подзон размерного квантования равным $E_2 - E_1 = 150 \text{ мэВ}$. Поскольку характерные энергии (разброс уровней и ширина минизоны) обычно не превышают 30–40 мэВ, влиянием второй и более высоких подзон в рассматриваемых системах можно пренебречь. Будем считать, что квантовые ямы являются узкими; это позволяет приближенно считать заряд носителей в квантовой яме сосредоточенным в плоскости. Будем также считать барьеры в СРКБ достаточно широкими, так

что перекрытием волновых функций соседних ям можно пренебречь.

Для нахождения равновесного распределения заряда по ямам СРКБ с учетом кулоновского взаимодействия будем использовать метод функционала плотности, проводя, как и в [7, 9], прямую минимизацию свободной энергии системы, рассматриваемой как нелинейный функционал электронной плотности. Вообще говоря, наряду с обменным вкладом в энергию системы следует учитывать и корреляционные поправки к энергии. Однако для принятых значений параметров справедливы неравенства $\nu_i^{-1/2}, \nu_0^{-1/2} \gg d$, где ν_i — двумерная концентрация электронов в i -м слое, $\nu_0 = N_d d$ — средняя двумерная концентрация электронов в слое, N_d — концентрация легирующей примеси. В этих условиях при расчете равновесного распределения электронной плотности по ямам легированной СРКБ корреляционным вкладом в энергию можно пренебречь по сравнению с обменным (см., напр., [8, 13]).

В приближении узких ям для объемной концентрации электронов мы имеем $n(z) = \sum_i \nu_i \delta(z - z_i)$, где z — координата вдоль оси роста структуры, ν_i — двумерная концентрация электронов в i -м слое, $i = 1, 2, \dots, N$, N — полное число квантовых ям в структуре, z_i — положение i -й квантовой ямы. Будем использовать модель «желе», считая компенсирующий положительный заряд однородно распределенным по пространству. Запишем функционал свободной энергии $F[n]$ системы в виде

$$F = E_{\text{kin}} + E_H + E_x - kT \cdot S, \quad (1)$$

где E_{kin} — кинетическая энергия, E_H — энергия взаимодействия заряженных плоскостей, соответствующих квантовым ямам, друг с другом и с положительным фоном, E_x — обменная энергия, k — постоянная Больцмана, T — температура и S — энтропия системы невзаимодействующих электронов. Для энергии E_H имеем $E_H = (1/2) \sum_{i,j} V_{ij}(\nu_i - \nu_0)(\nu_j - \nu_0)$, где $V_{ij} = -2\pi e^2 |z_i - z_j|/\epsilon$, $|z_i - z_j| = d|i - j|$, $\nu_0 = N_d d$ — средняя двумерная концентрация электронов в слое, а N_d — объемная концентрация легирующей примеси (все энергии вычисляются в расчете на единицу площади структуры). Вклады от кинетической энергии, энтропии и обменного взаимодействия представляют собой суммы по номерам квантовых ям и по спином. При минимизации функционала свободной энергии системы при конечных температурах мы будем использовать полученные в работе [10] для широкого интервала концентраций и температур интерполяционные выражения для обменного, кинетического и энтропийного вкладов в свободную энергию двумерного электронного газа в квантовой яме. Соответственно выражение для обменной энергии имеет вид [10]

$$E_{x,i\sigma}(s, T) = -\frac{e^2}{\epsilon} (\rho_0 k T)^{3/2} C_x s^{3/2} G(s), \quad (2)$$

$$G(s) = \sqrt{\frac{\alpha(s + b_1 s^2) + b_2 s^3}{1 + (b_1 + \beta)s + b_1 \alpha s^2 + b_2 s(\kappa \ln(1 + s) + s^2)'}}$$

где $s = 2\nu_{i\sigma}/(\rho_0 kT)$ — безразмерная двумерная концентрация, $C_x = (32/9\pi)^{1/2} \approx 1.06$, $\alpha = 9\pi^3/512$, $\kappa = \pi^2/8$, $\beta = (4/\sqrt{3}) - 2$, $b_1 = 0.2685$ и $b_2 = 0.04547$.

Интерполяционное выражение для суммы кинетического и энтропийного вкладов имеет вид [10]

$$E_{\text{kin},i\sigma} - kT \cdot S_{i\sigma} = -\frac{1}{2}kT\rho_0 \int_0^\infty dE \times \\ \times \ln \left[1 + \exp\left(\frac{\mu_\sigma - E}{kT}\right) \right] + \mu_\sigma \nu_{i\sigma} + E_i^{(0)} \nu_{i\sigma} = \\ = \frac{\nu_{i\sigma}^2}{\rho_0} K(s) + E_i^{(0)} \nu_{i\sigma}, \quad (3)$$

$$K(s) = \\ = \frac{2}{s} \left[\ln(\exp(s) - 1) + \frac{1 + a_1 s + \gamma a_2 s^2}{1 + (a_1 + \delta)s + a_3 s^2 + a_2 s^3} \right] - 1,$$

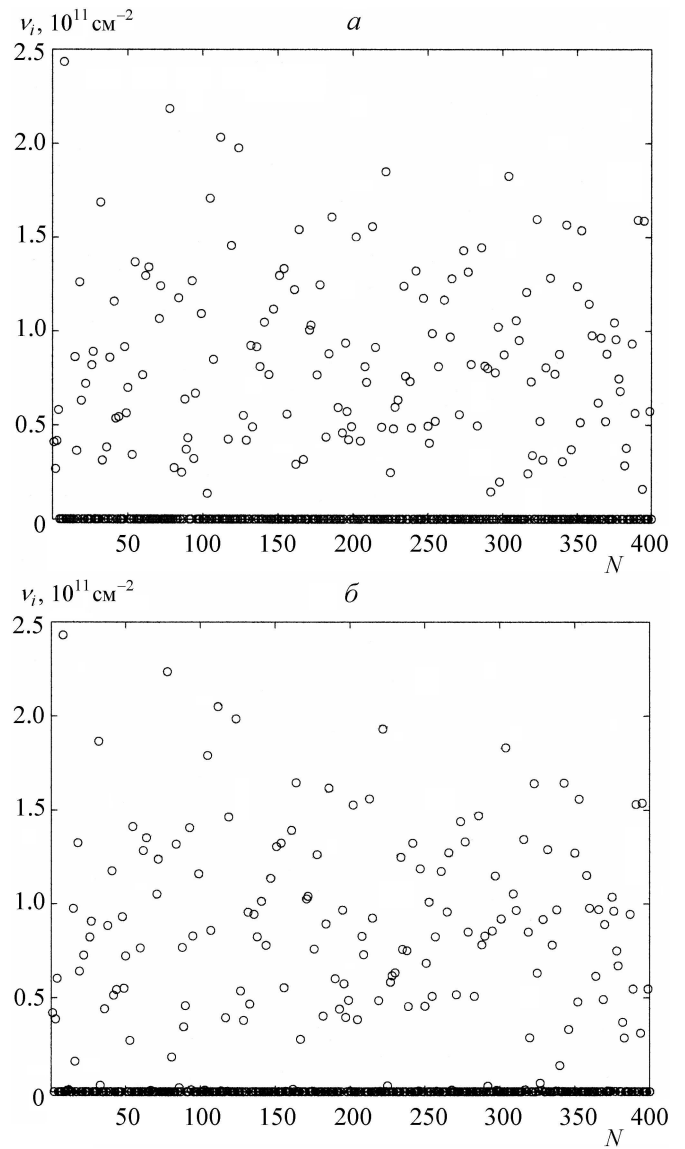
где $E_i^{(0)}$ — энергетический уровень (затравочная энергия) в i -й яме в отсутствие свободных электронов, отсчитанный от дна квантовой ямы, а параметры имеют следующие значения: $\gamma = \pi^2/6$, $\delta = 1/4$, $a_1 = 13.12$, $a_2 = 0.90$ и $a_3 = 4.75$. Выражения (2) и (3) обеспечивают требуемое поведение при больших и малых s и правильные предельные переходы $E_{x,i\sigma} \rightarrow -C_x e^2 \nu_{i\sigma}^{3/2}/\varepsilon$ и $E_{\text{kin},i\sigma} \rightarrow \nu_{i\sigma}^2/\rho_0$ при стремлении температуры к нулю. Соответственно химический потенциал μ_σ невзаимодействующих электронов со спином σ в выражении (3) отсчитывается от дна основной подзоны размерного квантования и связан с концентрацией ν_σ соотношением $\mu_\sigma = kT \ln(\exp(s) - 1)$.

Отметим, что в рассматриваемом приближении изолированных узких квантовых ям функционал свободной энергии $F[n]$ представляет собой просто функцию многих переменных $\nu = \{\nu_i\}$. Как и в работе [9], мы проводили численную минимизацию функционала свободной энергии относительно концентраций, последовательно выполняя минимизацию для каждой пары квантовых ям и повторяя эту процедуру до тех пор, пока свободная энергия системы не переставала изменяться. В результате мы находили значения концентраций электронов в квантовых ямах $\nu = \{\nu_i\}$, отвечающие минимуму свободной энергии системы. Независимость получаемых результатов от начального выбора распределения концентраций показывает, что получаемое распределение концентраций по квантовым ямам соответствует основному состоянию системы.

Результаты и обсуждение

Как известно, при малых концентрациях электронов в квантовых ямах при низких температурах основное состояние электронного газа является спиново-поляризованным [11]. При нулевой температуре спиново-поляризованное состояние двумерного электронного газа реализуется при концентрациях ν_i , меньших $\nu_p = 8(3 - 2\sqrt{2})(C_x e^2 \rho_0/\varepsilon)^2 \approx 2.9 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (см., напр., [8]). При концентрациях ν_i , больших ν_p , состояние газа в квантовой яме будет неполяризованным.

Расчеты распределения равновесной электронной плотности в СРКБ проводились с использованием значений параметров, характерных для экспериментально исследуемых структур GaAs/AlGaAs [2–5]: $\rho_0 = 3 \cdot 10^{13} \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-3}$, $\omega = 10 \text{ мэВ}$, $\varepsilon = 10$, $d = 33 \text{ \AA}$, $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$.



Распределение двумерных концентраций электронов по квантовым ямам при $T = 1 \text{ К}$ (а) и 10 К (б) (по оси абсцисс отложен номер квантовой ямы)

При рассматриваемых температурах эти значения соответствовали спиново-упорядоченному состоянию электронного газа в квантовых ямах СРКБ.

На рисунке приведены результаты вычислений равновесного распределения электронов по квантовым ямам легированной СРКБ. Из рисунка ясно видно, что квантовых ям с концентрациями ν_i , меньшими значений $\nu_{cr} \approx 3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, при $T = 0 \text{ К}$ нет, а при $T = 10 \text{ К}$ их число возрастает (напомним, что мягкая концентрационная щель является прямым следствием учета обменного взаимодействия [9]). Кроме того, видно, что концентрационная щель размывается при повышении температуры, причем размытие концентрационной щели начинается с ее низкоконцентрационного края.

Отметим, что ширину концентрационной щели Δ можно оценить, используя соотношение $\Delta = \nu_{cr}/\rho_0$, где $\nu_{cr} \approx (C_x e^2 \rho_0 / 2\epsilon)^2$ есть характерная критическая концентрация, при которой происходит существенное перераспределение носителей заряда между ямами сверхрешетки, обусловленное обменным взаимодействием [9]. Соответственно величина Δ дает оценку обменной энергии в рассматриваемой структуре (для принятых значений параметров $\Delta \approx 1 \text{ мэВ}$). Полученное в численных расчетах значение температуры (около 10 К), ниже которой концентрационная щель сохраняется, находится в разумном согласии со значением характерной температуры $T_0 = \Delta/k$.

Таким образом, проведенные расчеты показывают, что эффекты, обусловленные корреляционной

щелью в СРКБ, могут оказаться вполне заметными в интересной области низких температур.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 03-02-17378).

Литература

1. *Dow J.D., Ren S.Y., Hess K.* // Phys. Rev. 1982. **B25**. P. 6218.
2. *Chomette A., Deveaud B., Regreny A., Bastard G.* // Phys. Rev. Lett. 1986. **57**. P. 1464.
3. *Chomette A., Deveaud B., Emery J.Y., Regreny A.* // Solid State Commun. 1985. **54**. P. 75.
4. *Yamamoto T., Kasu M., Noda S., Sasaki A.* // J. Appl. Phys. 1990. **68**. P. 5318.
5. *Richter G., Stolz W., Thomas P., Koch S., Maschke K., Zvyagin I.P.* // Superlattices and Microstructures. 1997. **22**. P. 475.
6. *Звягин И.П., Ормонт М.А.* // ФТП. 1999. **33**. С. 79.
7. *Zvyagin I.P., Ormont M.A., Baranovskii S.D., Thomas P.* // Phys. Stat. Sol. 2002. **B230**. P. 193.
8. *Звягин И.П.* // ЖЭТФ 1998. **114**. С. 1089.
9. *Звягин И.П., Миронов А.Г., Ормонт М.А.* // ЖЭТФ 2003. **33**. С. 79.
10. *Миронов А.Г.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2001. № 5. С. 61 (Moscow University Phys. Bull. 2001. N 5. P. 73).
11. *Stoner E.C.* // Proc. Roy. Soc. 1938. **A165**. P. 372.
12. *Totsuji H., Tachibana H., Totsuji C., Nara S.* // Phys. Rev. 1995. **B51**. P. 11148.
13. *Isihara A.* Quantum Liquids. New York, 1995.

Поступила в редакцию
01.06.05