

Концентрационные максимумы подвижности 2D-электронов при рассеянии на скоррелированных примесных ионах в тонких легированных слоях

В.М. Михеев

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов
им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, 620219, Россия*

E-mail: mikheev@imp.uran.ru

Статья поступила в редакцию 15 июня 2018 г., после переработки 13 июля 2018 г.,
опубликована онлайн 26 ноября 2018 г.

На примере гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ теоретически изучены концентрационные зависимости подвижности 2D-электронов при рассеянии на равновесном коррелированном распределении примесных ионов при фиксированных температурах. Показано, что в случае значительных корреляций в расположении примесных ионов наличие эффекта «инверсии электронной проводимости» приводит к локальным максимумам электронной подвижности.

Ключевые слова: дефекты, дислокации, физика прочности.

1. Введение

В гетероструктурах типа $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ при низких температурах подвижность 2D-электронов в основном связана с рассеянием на примесных ионах в легированном слое. При этом легко реализуется ситуация, в которой система примесных центров в легированном слое частично ионизована. В случае частичной ионизации распределение примесных ионов коррелировано, и рассеяние электронов происходит на пространственно коррелированном распределении примесных ионов.

Теоретически концентрационные зависимости подвижности 2D-электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов изучались с применением численных методов в работах [1–4]. В настоящее время интерес к подобного рода работам проявился в связи с задачами получения рекордных подвижностей электронов в легированных гетероструктурах типа $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Эта тема подробно освещается в работе [5].

В наших работах [6–10] корреляционные эффекты и их влияние на электронную подвижность изучаются аналитическими методами в модели жестких сфер. В этой модели объемная концентрация примесных ионов n_d^+ отождествляется с концентрацией жестких сфер, а минимальное расстояние между ионами r_c отождествляется с диаметром жесткой сферы.

Вклад корреляций в рассеяние электронов описывается структурным фактором, зависимость которого от вектора рассеяния представляет собой чередующуюся систему минимумов и максимумов [11] (типичный вид структурного фактора представлен на рис. 1). Согласно работе [11], в случае вырожденных электронов основной вклад в рассеяние электронов вносит область первого минимума структурного фактора. С ростом корреляций структурный фактор убывает в области минимума, что приводит к увеличению подвижности электронов. При конечных температурах (ограничим наше рассмотрение достаточно узким интервалом изменения температур, в котором можно пренебречь рассеянием электронов на акустических фононах) вырождение электронов частично снимается и доля электронов, рассеяние которых приходится на область первого максимума структурного фактора, возрастает. В этом случае влияние корреляций в распределении примесных ионов на подвижность проявляется более сложным образом. С ростом корреляций убывает структурный фактор в области первого минимума, но при этом возрастает структурный фактор в области первого максимума. Таким образом, с ростом корреляций относительный вклад в рассеяние электронов от области минимума структурного фактора убывает. С дальнейшим ростом корреляций относительный вклад в рассеяние электронов от области минимума струк-

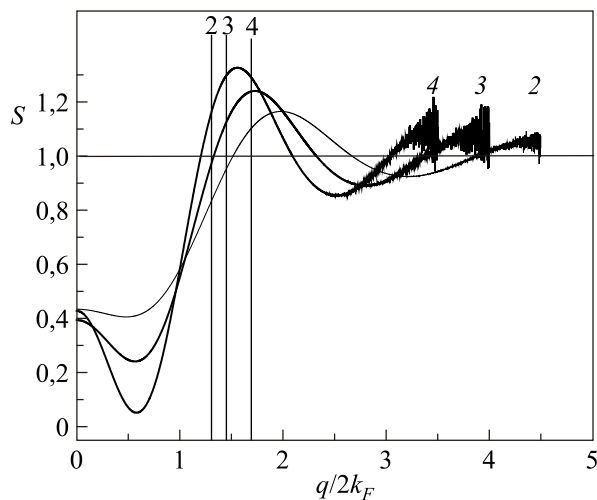


Рис. 1. Зависимость структурного фактора S от относительного значения вектора рассеяния электронов $q/2k_F$ [1]: 2 — $\eta^s = 0,15$ ($N_s = 2,4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$); 3 — $\eta^s = 0,2$ ($N_s = 1,85 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$); 4 — $\eta^s = 0,25$ ($N_s = 1,35 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$). Здесь $1/2k_F W$ — граничное значение величины $q/2k_F$, выделенное вертикалями 2, 3, 4 для значения $W = 100 \text{ \AA}$.

турного фактора сравнивается с вкладом в рассеяние электронов соседнего максимума, а затем начинает убывать. При столь сильных корреляциях главный вклад в рассеяние электронов связан с первым максимумом структурного фактора. Поскольку величина первого максимума структурного фактора растет с ростом корреляций, подвижность электронов убывает в указанной области корреляций. Поэтому с ростом корреляций в распределении рассеивателей подвижность электронов проходит через максимум. Выдвинутые нами предположения легли в основу расчетов, результаты которых и составляют содержание предлагаемой статьи. Нет никаких принципиальных соображений, которые бы запрещали возможность реализации предлагаемого эффекта, хотя и очевидно, что наличие и величина этого эффекта зависит от выбора структуры и условий, при которых наблюдается подвижность 2D-электронов в этой структуре. В предлагаемой работе на примере гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ определена область изменения параметров системы, в которой может наблюдаться этот эффект, и теоретически изучены различные аспекты этого явления.

В основу работы положена расчетная схема, приведенная в работах автора [11,12], в которых на примере температурной зависимости подвижности 2D-электронов продемонстрировано влияние первого максимума структурного фактора на подвижность электронов. С ростом температуры снимается вырождение электронного газа. Увеличивается концентрация электронов, энергия которых превышает энергию Ферми. Для электронов с такими энергиями основной вклад в рассеяние вносит область значений q , в которую попа-

дают как первый минимум, так и первый максимум структурного фактора. В такой ситуации влияние первого максимума структурного фактора на подвижность электронов изучалось в [11,12] при рассмотрении семейства расчетных кривых, описывающих температурную зависимость подвижности 2D-электронов [11]. Параметром, задающим это семейство, являлся коэффициент упаковки, описывающий степень упорядочения в системе примесных ионов. В работах [11,12] было показано, что влияние первого максимума структурного фактора на электронную подвижность приводит к пересечению температурных кривых. Мы назвали это явление пересечения кривых эффектом «инверсии электронной подвижности». В предлагаемой статье рассматриваем влияние первого максимума структурного фактора на зависимость электронной подвижности от коэффициента упаковки при фиксированной температуре. Как следует из наших расчетов, область «инверсии электронной подвижности» соответствует максимумам на кривых, изображающих зависимость подвижности электронов от концентрации ионизированных примесных центров.

2. Методика расчета подвижности 2D-электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов

Содержание настоящей работы составляют расчеты подвижности 2D-электронов в частном случае гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ с δ -слоем, легированным мелкими донорами. Параметры системы те же, что и в работах [11,12]: объемная плотность доноров $n_d = 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 2,5 \cdot 10^{-6} \text{ см}$, поверхностная плотность неподвижных зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$, ширина спейсерного слоя $W = 100 \text{ \AA}$.

Корреляции в расположении примесных ионов описываются в модели жестких сфер. В этой модели диаметр жесткой сферы r_c отождествляется с минимальным расстоянием между примесными ионами, а концентрация жестких сфер отождествляется с концентрацией примесных ионов N_d^+ .

Рассмотрим простую модель гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, в рамках которой концентрация электронов в квантовой яме и концентрация примесных ионов связаны соотношением

$$N_d^+ = N_{\text{depl}} + N_s,$$

где N_{depl} — поверхностная плотность электронов в обедненном слое, N_s — поверхностная плотность электронов в квантовой яме. В наших расчетах N_{depl} — параметр теории.

Подвижность 2D-электронов при рассеянии на заряженных примесных центрах, распределенных в плоско-

сти, вычисляется в приближении времени релаксации в простейшем варианте, изложенном в монографии [13]:

$$\mu(\varepsilon)^{-1} = \frac{m}{e} \int_0^{2\pi} d\theta (1 - \cos \theta) \frac{1}{\tau^0(\theta)} S(q) \quad (1)$$

$$(q = 2k \sin \theta/2).$$

Здесь m , e – масса и заряд электрона, $\tau^0(\theta)$ — время релаксации импульса электрона при рассеянии на хаотическом распределении примесных центров, $S(q)$ — структурный фактор. Формула для подвижности электронов (1) отличается от соответствующей формулы из [13] лишь наличием структурного фактора $S(q)$, описывающего корреляции в распределении примесных ионов.

В случае невырожденного электронного газа время релаксации $\tau(\varepsilon)$ необходимо заменить его термодинамическим средним:

$$\langle \mu \rangle = \frac{e}{m} \langle \tau \rangle, \quad (2)$$

где осреднение проводится с функцией Ферми. В случае вырожденного электронного газа $\langle \mu \rangle = \mu(\varepsilon_F)$, где ε_F — энергия Ферми. Для $2D$ -электронов в случае вырожденного электронного газа $k_F = (2\pi N_s)^{1/2}$.

Корреляции в распределении примесных ионов учтены в формуле (1) для подвижности электронов через структурный фактор:

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N_{\text{tot}}^+} \left\langle \sum_{i,j} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \right\rangle.$$

Здесь N_{tot}^+ — полное число примесных ионов в слое, вектор $\mathbf{r}_i = \{x_i, y_i, 0\}$ характеризует положение i -го иона на плоскости, вектор рассеяния электрона $\mathbf{q} = \{q_x, q_y, 0\}$. Поскольку все вычисления выполнены для изотропного случая, в котором структурный фактор зависит от модуля вектора рассеяния, для структурного фактора везде используется обозначение $S(q)$. Конфигурационное среднее от суммы вычислено в модели жестких сфер, распределенных на плоскости, в работе [8].

Рассмотрим гетероструктуры с тонким легированным слоем, ширина которого меньше диаметра жесткой сферы ($W_d < r_c$). Для этого случая нами развит вариант модели жестких сфер, центры которых лежат на плоскости, а корреляции в распределении примесных ионов описываются коэффициентом упаковки

$$\eta^s = \frac{\pi}{6} N_d^+ r_c^2.$$

Согласно теории, развитой в работе [8], уравнение для определения коэффициента упаковки шаров, распределенных на плоскости, имеет вид

$$N_d^+ = N_d \exp S_0(\eta^s)/k_B, \quad (3)$$

$$S_0 = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\left[3\eta^s + 4\eta^{s2}\right]k_B,$$

где S_0 — конфигурационный вклад в энтропию системы примесных ионов, рассчитанный на один ион, F — свободная энергия системы, N_d — поверхностная плотность всех доноров, распределенных в тонком легированном слое. Формула (3) устанавливает однозначное соответствие между коэффициентом упаковки η^s , который является мерой беспорядка в системе примесных ионов, и относительной концентрацией примесных ионов в легированном слое N_d^+/N_d . Таким образом, концентрационные зависимости электронной подвижности отражают влияние корреляций в распределении примесных ионов на подвижность электронов.

В принятой модели коррелированное состояние в системе примесных ионов задается двумя параметрами: диаметром жесткой сферы и концентрацией жестких сфер или двумя независимыми функциями этих параметров. В качестве таких независимых параметров выбрали поверхностную плотность примесных ионов N_d^+ и коэффициент упаковки η^s . Чтобы подчеркнуть этот факт, используем более детальное обозначение для электронной подвижности:

$$\langle \mu \rangle \equiv \langle \mu(\eta^s, N_d^+) \rangle.$$

В полученном выражении необходимо произвести термодинамическое осреднение по распределению примесных ионов.

Термодинамическое среднее произвольной функции $F(r_c)$ от параметра вычисляется по формуле [14]

$$\overline{F(r_c)}_T = \int_0^{r_c^0} F(r_c) W(r_c) dr_c \bigg/ \int_0^{r_c^0} W(r_c) dr_c, \quad (4)$$

$$W(r_c) = \exp \left[\frac{S_0(r_c)}{k_B} - \frac{\varepsilon_c(r_c)}{k_B T} \right].$$

Здесь $S_0(r_c)$ и $\varepsilon_c(r_c)$ — соответственно конфигурационная энтропия и энергия корреляции системы примесных ионов, приходящиеся на ион. В модели твердых шаров конфигурационная энтропия вычисляется по формуле (3).

Таким образом, при низких температурах, когда роль фононов в рассеянии электронов пренебрежимо мала, температурная зависимость обратной подвижности невырожденных $2D$ -электронов $\mu(T)^{-1}$ определяется выражением

$$\mu(T)^{-1} = \left\langle \mu \left(\overline{\eta^s}, N_d^+ \right) \right\rangle^{-1}, \quad (5)$$

где $\langle \mu \rangle$ — термодинамическое среднее электронной подвижности, вычисленное с помощью распределения Ферми (2), $\overline{\eta_T^s}$ — термодинамическое среднее коэффициента упаковки, вычисленное по состояниям в системе примесных ионов с помощью формулы (4). Напомним, что полное описание расчетной схемы для вычисления подвижности электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов приведено в работе [11].

3. Прохождение примесной подвижности 2D-электронов через максимум с ростом корреляций в расположении примесных ионов

Покажем, что возможность и условия наблюдения максимумов электронной подвижности в основном совпадают с условиями наблюдения «эффекта инверсии электронной подвижности» в [11,12] (исследована гетероструктура $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ с теми же параметрами, что в [11,12]). Напомним, что для $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ масса электрона $m = 0,07 m_0$; диэлектрическая проницаемость $\bar{\kappa} = 12,55$; $\delta = \kappa_{sc} - \kappa_{ins}/\bar{\kappa} = 0$.

На рис. 1 представлены зависимости структурного фактора от вектора рассеяния, полученные в [12]. Кривые 2, 3, 4 соответствуют значениям коэффициента упаковки η^s , равным 0,15; 0,20; 0,25. При достаточно низких температурах вектор рассеяния меняется в пределах $0 < q < 2k_F$. При этом в интервале изменения параметра $q/2k_F$ основной вклад в рассеяние электронов вносит область первого минимума структурного фактора. С ростом температуры увеличивается концентрация электронов с энергиями, большими энергии Ферми. При этом в рассеяние электронов возрастает вклад области первого максимума структурного фактора. Поскольку обратная подвижность электронов пропорциональна экспоненциальному множителю $\exp(-Wq)$ [13], интервал изменения вектора рассеяния, вносящий основной вклад в сечение рассеяния, ограничен сверху граничным значением параметра $q/2k_F, 1/2k_F W$. За пределами этого интервала вклад рассеяния электронов в сечение рассеяния экспоненциально мал. На рис. 1 граничные значения параметра пронумерованы цифрами 2, 3, 4. Как следует из рис. 1, при достаточно высоких температурах в случае выбранного $W = 100 \text{ \AA}$, вклад в рассеяние электронов области первого максимума структурного фактора может быть достаточно большим.

На рис. 2 [12] показаны температурные зависимости обратной подвижности электронов, особенности которых иллюстрируют зависимости для структурных факторов, представленные на рис. 1. В области низких температур основной вклад в рассеяние электронов вносит область минимума структурного фактора. Поэтому при низких температурах подвижность электронов растет с ростом корреляций в расположении при-

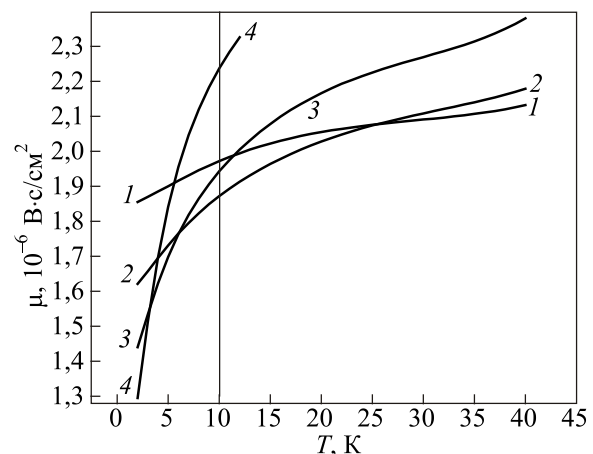


Рис. 2. Зависимость обратной подвижности 2D-электронов $\mu(T)^{-1}$ от температуры [1] в случаях: $\eta^s = 0,1$ (1); $\eta^s = 0,15$ (2); $\eta^s = 0,2$ (3); $\eta^s = 0,25$ (4). Ширина спейсера $W = 100 \text{ \AA}$, $N_{\text{depl}} = 10^9 \text{ см}^{-2}$.

месных ионов (что соответствует росту коэффициента упаковки). В области высоких температур, когда основной вклад в рассеяние электронов вносит область первого максимума структурного фактора, подвижность электронов падает с ростом корреляций в расположении примесных ионов. В результате семейство кривых $\mu(T)^{-1}$ имеет точки пересечения. В работе [11] этот эффект назван эффектом «инверсии электронной подвижности». Вертикальная прямая на рис. 2, пересекаясь с кривыми $\mu(T)^{-1}$, выделяет значения обратной подвижности электронов при температуре $T = 10 \text{ К}$. Рассмотрим изменение обратной подвижности электронов с ростом корреляций в распределении примесных ионов при фиксированном значении температуры $T = 10 \text{ К}$. При переходе от кривой 1 к кривой 2 обратная подвижность уменьшается, а при переходе от 2 к 3 и далее от кривой 3 к 4 обратная подвижность увеличивается. Таким образом, обратная подвижность электронов проходит через минимум с ростом корреляций в расположении примесных ионов (соответственно подвижность электронов проходит через максимум).

На рис. 3–4 представлены результаты расчетов зависимости обратной подвижности электронов $\mu(T)^{-1}$ от относительной концентрации ионизированных доноров N_d^+/N_d . Подробное описание расчетной схемы приведено в [11,12]. Согласно формулам (3), относительная концентрация ионизированных доноров связана с коэффициентом упаковки простым соотношением:

$$N_d^+/N_d = \exp\left[-\left(3\eta^s + 4\eta^{s^2}\right)\right], \quad (6)$$

поэтому зависимость электронной подвижности от относительной концентрации примесных ионов фактически соответствует зависимости подвижности от степени корреляции в расположении примесных ионов.

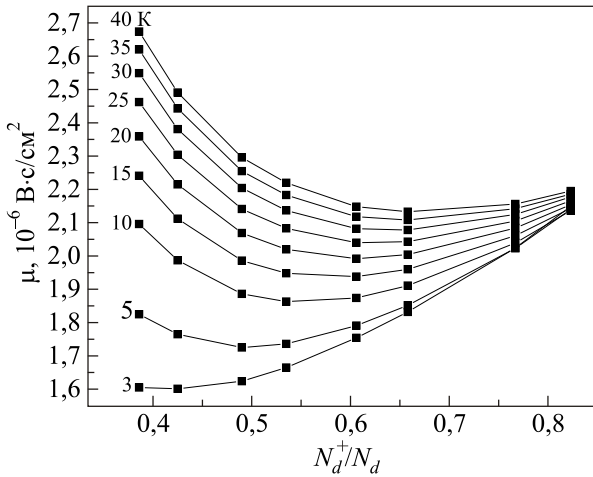


Рис. 3. Зависимость обратной подвижности 2D-электронов $\mu(T)^{-1}$ от относительной концентрации ионизированных доноров N_d^+/N_d в случае $N_{\text{depl}} = 5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$.

На рис. 3 изображено семейство кривых $\mu(T)^{-1}$, вычисленных при различных значениях температуры: от 3 К (кривая 1) до 40 К (кривая 9). Квадраты на кривых — расчетные точки. С уменьшением параметра N_d^+/N_d , согласно формуле (6), растет коэффициент упаковки η^s , что соответствует росту корреляций в распределении примесных ионов. С ростом корреляций, согласно рис. 1, углубляется первый минимум структурного фактора S , что приводит к увеличению подвижности электронов. В случае слабых корреляций вклад первого максимума структурного фактора мал и подвижность электронов с ростом корреляций растет во всем рассматриваемом интервале температур. С ростом корреляций в распределении примесных ионов относительный вклад в рассеяние в области первого максимума структурного фактора увеличивается, что приводит к замедлению роста подвижности. Этот эффект тем больше, чем больше размытие ступеньки Ферми электронов, поскольку в случае вырожденного распределения электронов интервал изменения вектора

рассеяния электронов \mathbf{q} примерно совпадает с областью, в которой расположен первый минимум структурного фактора S (см. рис. 1). С ростом температуры увеличивается размытие ступеньки Ферми и с 5 К начинается интенсивное уменьшение подвижности электронов с дальнейшим ростом корреляций в расположении примесных ионов. Таким образом, подвижность электронов проходит через максимум с ростом корреляций.

Для наглядности на рис. 4 показан ход электронной подвижности при температурах 5, 10 и 30 К. При достаточно низких температурах ($T = 5 \text{ К}$) основной вклад в рассеяние электронов вносит область первого минимума структурного фактора. При столь низких температурах подвижность увеличивается с ростом корреляций в распределении примесных ионов практически во всей области изменения коэффициента упаковки (рис. 4(a)). Тепловое размытие ступеньки Ферми увеличивает влияние первого максимума структурного фактора на рассеяние электронов. Так что при температуре 10 К имеется ярко выраженный максимум подвижности электронов. При 30 К в основной области изменения коэффициента упаковки главную роль в рассеянии электронов играет область первого максимума структурного фактора. Поэтому при этих относительно высоких температурах подвижность электронов падает с ростом корреляций в распределении примесных ионов. Величина пика электронной подвижности, согласно нашим расчетам, составляет 10–15% от фона.

4. Заключение

При рассеянии вырожденных 2D-электронов на коррелированном распределении примесных ионов эволюция структурного фактора $S(q)$ приводит к росту электронной подвижности с ростом корреляций в расположении примесных ионов. В этом случае рост подвижности электронов ограничивается внешними факторами.

В случае невырожденного электронного газа рост корреляций в распределении примесных ионов сам

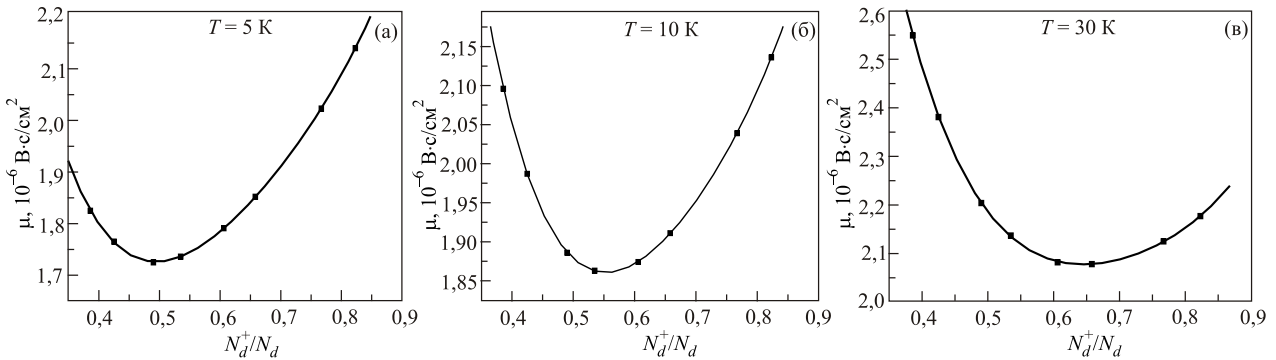


Рис. 4. Зависимость обратной подвижности 2D-электронов $\mu(T)^{-1}$ от относительной концентрации ионизированных доноров N_d^+/N_d в случае $N_{\text{depl}} = 5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$ (фрагменты графиков рис. 3).

приводит к ограничению растущей подвижности. При этом возможны ситуации, в которых подвижность электронов имеет хорошо выраженные максимумы.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (шифр «Электрон», Г.р. № АААА-А18-118020190098-5).

1. F. Stern, *Appl. Phys. Lett.* **43**, 974 (1983); T. Saku, Y. Horikoshi, and Y. Tokura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **35**, 34 (1996).
2. S. Das Sarma and F. Stern, *Phys. Rev. B* **32**, 8442 (1985).
3. A.L. Efros, F.G. Pikus, and G.G. Samsonidze, *Phys. Rev. B* **41**, 8295 (1990).
4. T. Kawamura and S. Das Sarma, *Solid State Commun.* **100**, 411 (1996).
5. S. Das Sarma, E.H. Hwang, S. Kodiyalam, L.N. Pfeiffer, and K.W. West, *Phys. Rev. B* **91**, 205304 (2015).
6. В.М. Михеев, *ФТТ* **49**, 1770 (2007).
7. В.М. Михеев, *ФТТ* **50**, 1877 (2008).
8. В.М. Михеев, *ФТТ* **53**, 807 (2011).
9. В.М. Михеев, *ФТТ* **53**, 2102 (2011).
10. В.М. Михеев, *ФТТ* **54**, 1366 (2012).
11. В.М. Михеев, *ФТТ* **55**, 507 (2013).
12. В.М. Михеев, *ФТТ* **56**, 529 (2014).
13. Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем*, Мир, Москва (1985); F. Stern and W. Howard, *Phys. Rev.* **163**, 816 (1967).
14. В.М. Михеев, *ФТТ* **47**, 6, 1056 (2005).

Концентраційні максимуми рухливості 2D-електронів при розсіянні на корельованих домішкових іонах в тонких легованих шарах

В.М. Міхеєв

На прикладі гетероструктури $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ теоретично вивчено концентраційні залежності рухливості 2D-електронів при розсіянні на рівноважному корельованому розподілі домішкових іонів при фіксованих температурах. Показано, що у випадку значних кореляцій в розташуванні домішкових іонів наявність ефекту «інверсії електронної провідності» призводить до локальних максимумів електронної рухливості.

Ключові слова: дефекти, дислокації, фізика міцності.

Concentration maxima of the mobility of 2D electrons scattered by correlated impurity ions in thin doped layers

V.M. Mikheev

Using the example of the $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ heterostructure, the concentration dependences of the mobility of 2D electrons upon scattering by an equilibrium correlated distribution of impurity ions at fixed temperatures are theoretically studied. It is shown that, in the case of significant correlations in the arrangement of impurity ions, the presence of the effect of “electron conduction inversion” leads to local maxima of the electron mobility.

Keywords: defects, dislocations, strength physics.