

Подвижность двумерных электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов

© В.М. Михеев

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

E-mail: mikheev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 21 декабря 2006 г.)

Модель твердых сфер прилагается к описанию корреляционных эффектов в подвижности двумерных электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов. Теория разработана для случая частично ионизованных примесных центров, когда корреляции в распределении примесных ионов ослаблены вследствие дефицита свободных мест для примесных дырок. Вычисления выполнены для случая гетероструктур с широким спейсером, когда преобладает рассеяние электронов на малые углы.

PACS: 72.10-d, 73.40-c

При низких температурах подвижность электронов в гетероструктурах с селективным легированием определяется рассеянием электронов на „хвостах“ кулоновского потенциала примесных ионов, отделенных от квантовой ямы спейсером. В частично ионизованных системах примесных центров, расположенных хаотически, кулоновское взаимодействие приводит к перераспределению электронов по примесным центрам, в результате которого возникают корреляции в пространственном распределении примесных ионов. Предшествующие теоретические исследования [1–4] показывают, что пространственные корреляции примесных ионов, уменьшая примесное рассеяние, могут увеличить подвижность двумерных электронов в десятки раз. В известных нам работах расчеты подвижности двумерных электронов на коррелированном распределении примесных ионов производились исключительно численными методами. При этом в результатах численных расчетов [1–4] отсутствуют температурные зависимости электронной подвижности, хотя в экспериментах наблюдаются аномалии в температурном ходе электросопротивления. Поэтому в настоящее время существует потребность в простых модельных описаниях, позволяющих записать результаты расчетов в виде аналитических выражений.

В настоящей работе использовалась модель твердых шаров. Системы, состоящие из твердых шаров, являются простейшими системами, в которых имеются пространственные корреляции (в расположении шаров). К настоящему времени эти системы хорошо изучены и широко применяются для моделирования пространственных корреляций в жидкостях и расплавах [5]. Впервые эту модель успешно применили для описания пространственных корреляций примесных ионов железа и связанной с этими корреляциями аномалии подвижности электронов в объемных полупроводниках HgSe:Fe в работе [7]. В работах [7–10] нами на основе выражения для конфигурационной энтропии системы твердых шаров была разработана теория, описывающая пространственные корреляции в системе примесных ионов. Результаты

этой теории [10] положены нами в основу описания аномалий подвижности двумерных электронов в слоистых структурах. Используя парную корреляционную функцию, описывающую распределение твердых шаров, мы изучили аномалии концентрационной и температурной зависимости подвижности двумерных электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов. При моделировании системы примесных ионов системой твердых шаров диаметр твердого шара отождествляется с минимальным расстоянием в системе ионов r_c , а концентрация твердых шаров — с концентрацией ионов n_d^+ . Степень корреляции в системе ионов можно менять, варьируя внешний параметр n_d^+/n_d (n_d — концентрация примеси в легированном слое). Для определенности рассматривались структуры, в которых примесные центры расположены хаотически. В полностью ионизованной системе таких примесных центров ($n_d^+/n_d = 1$) примесные ионы также имеют хаотическое расположение. Концентрация электронов в двумерном слое зависит от степени легирования образца. Меняя напряжение на затворе можно уменьшить равновесное значение электронной концентрации в проводящем слое. При этом установится новое равновесное значение концентрации нейтральных примесных центров — свободных мест для примесных дырок. Число свободных мест для примесных дырок увеличится. Кулоновское отталкивание приведет к перераспределению примесных дырок между примесными центрами. Возникшее при этом распределение примесных ионов окажется пространственно коррелированным. В условиях дефицита свободных мест для примесных дырок (нейтральные примесные центры) степень порядка в распределении примесных ионов обусловлена наличием свободных мест для примесных дырок и фактически не зависит от деталей взаимодействия, приводящего к отталкиванию между дырками. Исходя из этих эвристических соображений, мы использовали для описания пространственных корреляций в системе примесных ионов парную корреляционную функцию системы твердых шаров.

1. Аномалии концентрационной зависимости подвижности двумерных электронов при температуре абсолютного нуля

В этом разделе вычисляется подвижность двумерных электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов, распределенных в слое, отделенном от квантовой ямы спейсером. Ширина легированного слоя — W_d , ширина спейсера — W . Двумерные электроны занимают слой, расположенный перпендикулярно оси z . Рассматривается случай электрического квантового предела, когда $2D$ -электроны описываются волновой функцией

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z) = \left(\frac{b^3}{2\Omega}\right)^{1/2} z e^{-bz/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}.$$

Поскольку цель нашей работы состоит в изучении влияния корреляций в распределении рассеивателей на электронную подвижность, для самой подвижности мы использовали простые формулы, впервые полученные Стерном и подробно описанные в обзоре Андо и Стерна [11]. При получении этих формул сечение рассеяния электронов на примесных ионах вычислялось в борновском приближении, а экранирование примесного потенциала $2D$ -электронами учитывалось в приближении Томаса–Ферми. В этих приближениях, согласно [11], подвижность электронов при рассеянии на примесных центрах μ может быть представлена в виде

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

где

$$q = 2k \sin \theta/2,$$

$$\frac{1}{\tau^0(\theta)} = \frac{2\pi m e^4}{\hbar^3 \kappa} \frac{P_0^2(q)}{D^2(q)} e^{-2qW} \int_0^{W_d} n_d^+(-z - W) e^{-2qz} dz.$$

Здесь m , e — масса и заряд электрона, $\tau^0(\theta)$ — время релаксации при рассеянии электрона на хаотическом распределении примесных центров, n_d^+ — объемная плотность примесных ионов, $S(q)$ — структурный фактор,

$$P_0(q) = b^3 (b + q)^{-3},$$

$$D(q) = q + q_s P_{av}(q) + q_s \delta P_0^2(q),$$

$$P_{av}(q) = (8b^3 + 9b^2q + 3bq^2)(b + q)^{-3}/8,$$

$$\delta = \frac{\kappa_{sc} - \kappa_{ins}}{\kappa_{sc} - \kappa_{ins}} = \frac{\kappa_{sc} - \kappa_{ins}}{2\kappa}.$$

Эффективный параметр экранирования $q_s = \frac{2me^2}{\kappa_{sc}\hbar^2}$, характерный размер волновой функции электрона в пер-

пендикулярном проводящему слою направлении

$$b = \left[\frac{48\pi m e^2}{\kappa_{sc} \hbar^2} (N_{\text{depl}} + N_s) \right]^{1/3},$$

$$N_{\text{depl}} = (n_A^- - n_d^+) d_{\text{depl}},$$

N_{depl} — поверхностная плотность неподвижных зарядов в обедненном слое, d_{depl} — толщина обедненного слоя, n_A^- , n_d^+ — объемные плотности ионизированных акцепторов и доноров, N_s — поверхностная плотность $2D$ -электронов, κ_{sc} , κ_{ins} — диэлектрические проницаемости проводящего слоя и изолятора. В рассматриваемом случае вырожденного электронного газа $k_F = (2\pi N_s)^{1/2}$. Формулы для подвижности $2D$ -электронов (1) широко используются при учете влияния корреляций в распределении примесных ионов на электронную подвижность [1–4].

Структурный фактор $S(\mathbf{q})$ нормирован на единицу:

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N_d^+} \left\langle \sum_{i,j} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \right\rangle, \quad (2)$$

где N_d^+ — полное число примесных ионов в слое, вектор $\mathbf{r} = \{x_i, y_i, 0\}$ характеризует положение i -го иона на плоскости. При расчетах мы пренебрегли толщиной легированного слоя W_d , считая, что $W_d \ll W$.

Конфигурационное усреднение в формуле (2) производится с помощью двухчастичной корреляционной функции $g_{12}(r')$ [5]

$$S(\mathbf{q}) = 1 + n_d^+ \int d\mathbf{r}' g_{12}(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}'}. \quad (3)$$

Мы считаем, что радиус корреляции r_c (минимальное расстояние между примесными ионами) меньше толщины легированного слоя W_d , и рассматриваем коррелированное распределение примесных ионов в объеме легированного слоя ($\mathbf{r}' = \{\mathbf{r}, z\}$). Таким образом, наши расчеты справедливы при выполнении условия

$$r_c < W_d < W.$$

В предельном случае хаотического распределения примесных ионов корреляционная функция $g_{12}(r') = 0$, а структурный фактор $S(\mathbf{q}) = 1$. Будем считать распределение примесных ионов в слое однородным и изотропным. В этом случае интеграл по углам в формуле (3) легко вычисляется

$$S(q) = 1 + 2\pi n_d^+ \int r dr J_0(qr) \int dz g_{12}(\sqrt{r^2 + z^2}). \quad (4)$$

Здесь $J_0(z)$ — функция Бесселя нулевого порядка. Таким образом, при рассеянии двумерного электронного газа на трехмерном распределении примесных ионов структурный фактор выражается через Фурье-образ трехмерной корреляционной функции, проинтегрированной по

оси z ,

$$\begin{aligned} S(q) &= 1 + n_d^+ \tilde{g}_{12}(q), \\ \tilde{g}_{12}(r) &= \int dz g_{12} \left(\sqrt{z^2 + r^2} \right), \\ \mathbf{q} &= \{q_x, q_y\}. \end{aligned} \quad (5)$$

При изучении корреляций вместо полной корреляционной функции $g_{12}(\mathbf{r})$ удобно ввести прямую корреляционную функцию $C_{12}(\mathbf{r})$. В однородном и изотропном случае Фурье-образы этих функций связаны простым соотношением, которое, собственно, и является определением прямой корреляционной функции [5]

$$g_{12}(q) = C_{12}(q) / (1 - n_d^+ C_{12}(q)). \quad (6)$$

В изучаемом случае, когда двумерный электронный газ рассеивается на трехмерном распределении ионов, из формул (5) и (6) следует

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{12}(q) &= \tilde{C}_{12}(q) / (1 - n_d^+ \tilde{C}_{12}(q)), \\ \tilde{C}_{12}(r) &= \int dz C_{12} \left(\sqrt{r^2 + z^2} \right), \\ S(q) &= 1 / (1 - n_d^+ \tilde{C}_{12}(q)). \end{aligned} \quad (1)$$

В формулах (7) фигурирует прямая корреляционная функция для системы твердых шаров. Напомним, что в принятой нами модели радиус твердого шара отождествляется с минимальным расстоянием между примесными ионами r_c , а концентрация примесных ионов n_d^+ отождествляется с концентрацией шаров. Степень порядка в системе ионов характеризуется коэффициентом упаковки $\eta = \frac{\pi}{6} n_d^+ r_c^3$. Задача о вычислении прямой корреляционной функции системы твердых шаров представляет сложную математическую проблему и имеет аналитические решения лишь в случае достаточно малой концентрации шаров, когда $\eta \ll 1$. Поэтому в наших расчетах мы используем полуэмпирическую формулу Перкуса–Йевики, которая дает аналитическое выражение для прямой корреляционной функции [5]

$$\begin{aligned} C_{12}(x) &= \left\{ -\frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4} + \frac{6\eta(1+\frac{1}{2}\eta)^2}{(1-\eta)^4} x \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \frac{\eta(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4} x^3 \right\}, \quad 0 < x < 1, \quad C_{12}(x) = 0, \quad 1 < x, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$x = \frac{r'}{r_c}, \quad r' = \sqrt{r^2 + z^2}.$$

Формула (8) хорошо апробирована многочисленными приложениями при описании корреляций в жидкостях и расплавах в широком интервале изменения коэффициента упаковки $0 < \eta < 0.45$.

Структурный фактор $S(q)$ содержит всю необходимую информацию, учитывающую влияние корреляций в расположении рассеивателей на подвижность электронов (1). Используя формулы (7) и (8), вычислим Фурье-образ прямой функции $\tilde{C}_{12}(q)$, а вместе с ним и структурный фактор $S(q)$

$$S(q) = 1 / (1 - n_d^+ \tilde{C}_{12}(q)),$$

$$\begin{aligned} n_d^+ \tilde{C}_{12}(q) &= 24\eta \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{q^2 r_c^2}{2} \right) \frac{1}{3 \cdot 5 \cdot 7 \dots (2k+1)k!} \\ &\quad \times \left\{ \frac{A}{2k+3} + \frac{B}{2k+4} + \frac{C}{2k+6} \right\}, \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} A &= -\frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4}, \quad B = \frac{6\eta(1+\frac{1}{2}\eta)^2}{(1-\eta)^4}, \\ C &= -\frac{1}{2} \eta \frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4}. \end{aligned}$$

При получении формулы (9) мы использовали представление функции Бесселя

$$J_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{z^2}{4} \right)^k / (k!)^2.$$

Здесь $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ — вектор рассеяния двумерных электронов. Таким образом, согласно (9), для вычисления структурного фактора в модели твердых шаров необходимо знать лишь два параметра: концентрацию шаров n_d^+ и диаметр шара r_c . Иными словами, при $T = 0$ К структурный фактор зависит от вектора рассеяния q , концентрации примесных ионов n_d^+ и коэффициента упаковки η , который в принятой модели задает степень порядка в пространственном расположении примесных ионов.

В случае ионизованной плазмы, когда положение иона в объеме произвольно, степень порядка в системе зависит лишь от плотности плазмы и потенциала взаимодействия между ионами. В рассматриваемой нами системе частично ионизованных примесных центров минимальное расстояние между примесными дырками, определяющее степень порядка в системе, зависит также и от концентрации свободных мест $n_d - n_d^+$. Действительно, лишь при наличии нейтральных доноров (свободных мест для примесных дырок) примесные дырки могут перераспределиться по примесным центрам. Мы считаем, что примесные центры распределены хаотически. Поэтому в системе полностью ионизованных примесных центров ($n_d^+ / n_d = 1$) в случае, когда на каждом примесном центре находится примесная дырка, радиус корреляции $r_c = 0$, несмотря на взаимодействие между ионами и при любой плотности ионов. Оставим в стороне эвристические процедуры, которые приводят к оценкам r_c в реальных системах, и ограничимся более простой задачей, которая допускает аналитические

решения, а именно вычислим не истинное, а лишь максимально возможное значение параметра r_c , допустимое при фиксированном значении параметра n_d^+/n_d , который однозначно определяет дефицит свободных мест для примесных дырок. Эта задача значительно проще, чем исходная, и решить ее в рамках принятой нами модели твердых сфер можно исходя из общих принципов статистической механики.

Отождествим конфигурационную энтропию системы примесных ионов с конфигурационной энтропией системы твердых шаров $S(\eta)$ (n_d^+ — концентрация шаров, r_c — диаметр шара). В этой модели W_{tot} — вероятность найти систему примесных ионов в состоянии, в котором минимальное расстояние между ионами равно r_c ,

$$W_{\text{tot}}(\eta) = \exp S(\eta)/k_B.$$

Напомним, что конфигурационная энтропия системы твердых шаров зависит лишь от коэффициента упаковки η . Пусть $S_0(\eta)$ — конфигурационная энтропия, приходящаяся на один ион. Тогда $W(\eta)$ — вероятность найти примесный центр на расстоянии от ближайшего иона, большем r_c ,

$$W(\eta) = \exp S_0(\eta)/k_B.$$

Основное уравнение теории для нахождения диаметра твердой сферы примет вид [10]

$$n_d^+ = n_d \exp S_0(\eta)/k_B, \quad (10)$$

где

$$S_0(\eta) = k_B \left[\ln(1 - \eta) + \frac{3}{2} \frac{\eta(\eta - 2)}{(1 - \eta)^2} \right].$$

Формула для конфигурационной энтропии $S_0(\eta)$ получена в приближении Перкуса–Йефика из выражения для изотермической сжимаемости [10]. Уравнение (10) позволяет найти наибольшее значение коэффициента упаковки η , совместное с геометрией системы. Еще раз подчеркнем, что в то время как истинное значение параметра упаковки зависит от плотности примесных ионов и потенциала взаимодействия между ионами, гипотетически возможное значение η задается единственным параметром n_d^+/n_d .

Теоретическая кривая 1, представляющая решение уравнения (10), изображена на рис. 1. Здесь η — допустимое значение коэффициента упаковки при заданном значении параметра n_d/n_d^+ . Напомним, что этот параметр характеризует дефицит свободных мест для примесных дырок в системе примесных центров. В широком интервале изменения параметра n_d/n_d^+ , который соответствует интервалу изменения коэффициента упаковки $0 < \eta < 0.45$, погрешность при вычислении энтропии S_0 по формуле (10) составляет несколько процентов по сравнению с результатами вириальных разложений [10].

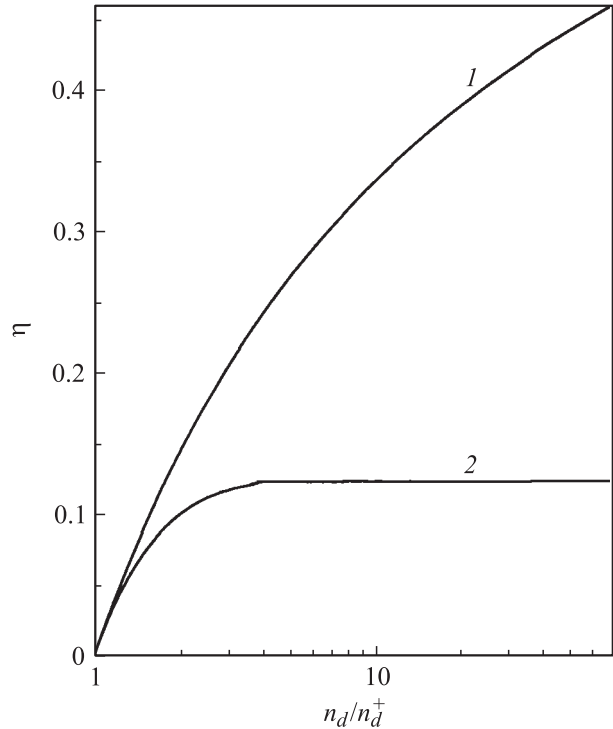


Рис. 1. Зависимость коэффициента упаковки η от степени ионизации системы примесных центров n_d/n_d^+ . Кривая 1 определяет максимально возможное значение η , допустимое при наличии свободных мест для дырок, число которых определяется параметром n^+/n_d^+ ; кривая 2 ($\eta \rightarrow 0.125$ при $n_d/n_d^+ \rightarrow \infty$) постулирована в работе [6].

Истинное (реальное) значение коэффициента упаковки, в отличие от его максимально возможного значения (вычисленного из уравнения (10)), определяется плотностью примесных ионов и потенциалом взаимодействия. В случае когда примесные центры полностью ионизованы ($n_d/n_d^+ = 1$), $\eta = 0$. С ростом параметра n_d/n_d^+ число свободных мест растет и перераспределение примесных дырок приводит к росту параметра η . При этом реальная кривая $\eta(n_d/n_d^+)$ совпадает с теоретической кривой 1. При дальнейшем росте числа свободных мест, когда дефицит свободных мест становится несущественным, реальная кривая сходит с теоретической кривой и выходит на насыщение при достижении равновесного значения параметра η , которое определяется плотностью системы и видом потенциала взаимодействия между ионами. В рамках предлагаемой теории невозможно оценить равновесное значение параметра η . Однако в условиях дефицита свободных мест можно отождествить значения коэффициента упаковки на начальном участке теоретической кривой 1 (рис. 1) с их истинными значениями.

Впервые, насколько нам известно, модель твердых шаров к вычислению корреляций в системе частично ионизованных примесных центров железа в системах HgSeFe применили в работе [6]. Авторы этой работы постулиро-

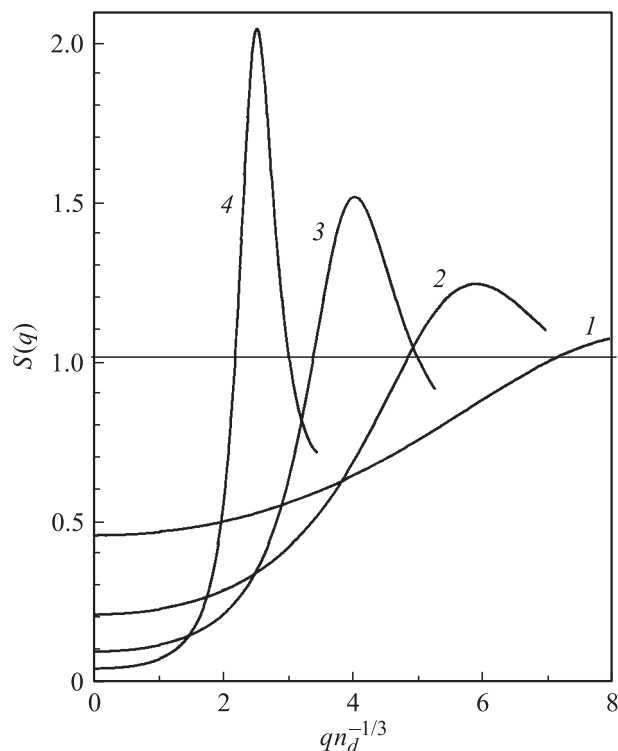


Рис. 2. Зависимость структурного фактора $S(q)$ от вектора рассеяния q ($n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ — концентрация доноров). Кривые 1–4 соответствуют $\eta = 0.1$ –0.4.

вали уравнение для определения коэффициента упаковки в системе частично ионизованных примесных центров. При этом равновесное значение коэффициента упаковки положили равным значению $\eta = 0.125$. Решение этого уравнения представлено кривой 2 на рис. 1. С нашей точки зрения подобный подход, основанный на соображениях здравого смысла, отражает суть дела на качественном уровне и может быть использован для оценок, хотя и не может быть обоснован теоретически. В нашей работе предлагается иной подход к описанию корреляций в системе частично ионизованных примесей, опирающийся на общие физические принципы, хотя и имеющий более узкую область применимости. В частности, в рамках нашей теории невозможны оценки равновесного значения коэффициента упаковки η , который достигается при достаточно больших значениях параметра n_d/n_d^+ , когда в наличии избыточное число свободных мест для примесных дырок.

На рис. 2 представлены зависимости структурного фактора $S(q)$ от безразмерного параметра $qn_d^{-1/3}$, вычисленного по формулам (9) при различных значениях коэффициента упаковки η . Кривые 1–4 соответствуют значениям $\eta = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ и вычислены при фиксированном значении $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Эти осциллирующие кривые имеют типичный вид, характерный для структурного фактора. Хаотическому распределению примесных ионов соответствует значение структурного фактора

$S(q) = 1$. Из рис. 2 следует, что при наличии порядка в распределении рассеивателей, которое мы количественно описываем параметром η , интерференционные эффекты приводят к уменьшению сечения рассеяния в области малых значений q (длина волны электрона больше длины корреляции r_c). С ростом q структурный фактор увеличивает свое значение и испытывает осцилляции, обусловленные рассеянием на коррелированном распределении примесных ионов. В области осцилляционных пиков (длина волны электрона меньше длины корреляции r_c), где $S(q) > 1$, интерференционные эффекты приводят к anomalously большому сечению рассеяния двумерных электронов на примесных ионах. В этих областях значение электронной подвижности оказывается меньшим, чем в случае хаотического распределения примесных ионов. С ростом коэффициента упаковки η (что соответствует росту корреляционной длины) растет амплитуда осцилляционных пиков, а сами пики сдвигаются в область меньших значений q . В области малых значений q ($qn_d^{-1/3} < 1$) изменение структурного фактора с ростом q составляет несколько процентов, и этим изменением можно пренебречь при вычислении подвижности. Положим в формуле для подвижности (1) $S(q) = S(0)$. В этом приближении влияние корреляций в расположении примесных ионов на подвижность определяется исключительно значением структурного фактора и не зависит от прочих деталей, существенных при вычислении подвижности

$$\mu^{\text{non}}/\mu^{\text{corr}} = S(0). \quad (11)$$

В формуле (11) μ^{non} — подвижность электронов при рассеянии на хаотическом распределении примесных ионов, а μ^{corr} — при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов. В системах с широким спейсером, где основной вклад в сечение рассеяния вносят процессы с относительно небольшими углами рассеяния, такими что $q < 1/W$, границы применимости формулы (11) определяются неравенством

$$n_d^{-1/3} < W. \quad (12)$$

На рис. 3 изображена расчетная зависимость относительной подвижности от относительной концентрации донорных ионов. Начальный участок расчетной кривой на рис. 3 аппроксимируется линейной зависимостью

$$\frac{\mu^{\text{corr}}}{\mu^{\text{non}}} = 2 \frac{n_d}{n_d^+} - 1. \quad (13)$$

Полученная в рамках нашей модели формула (13) описывает влияние корреляций в распределении примесных ионов на электронную подвижность для систем с широким спейсером в пределе низких температур ($T = 0$). Согласно расчетам, в интервале изменения главного параметра теории $1 < n_d/n_d^+ < 3$ ($0 < \eta < 0.2$)

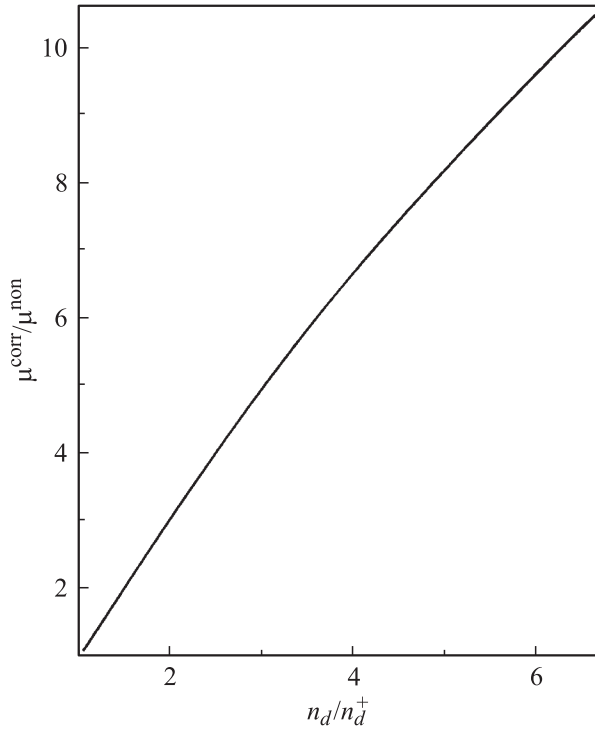


Рис. 3. Зависимость относительной электронной подвижности $\mu^{\text{corr}}/\mu^{\text{non}}$ от обратной концентрации примесных ионов при $T = 0$ К. μ^{corr} — подвижность электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов, μ^{non} — при рассеянии на хаотическом распределении примесных ионов.

погрешность линейной аппроксимации составляет не более 1%.

В нашей модели электроны примесной зоны находятся на диэлектрической стороне перехода Мотта. Это обстоятельство накладывает на концентрацию доноров ограничение сверху: $n_d < n_c$ (n_c — критическая концентрация доноров, при которой происходит переход металл–диэлектрик). При изучении пространственных корреляций примесных ионов в гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, легированных кремнием, это обстоятельство малосущественно, поскольку легирование этих материалов кремнием приводит к образованию так называемых DX-центров, обладающих глубокими энергетическими уровнями (соответствующие ссылки см. в [12]). Высокий уровень легирования, достижимый на диэлектрической стороне перехода Мотта ($n_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$), обеспечивает высокую плотность примесных ионов в этих системах. Согласно численным расчетам [1–4], корреляции в столь плотной системе ионов приводят к увеличению подвижности электронов в десятки раз. Однако в случае легирования системы мелкими донорами это условие накладывает существенные ограничения на концентрации примесных центров сверху: $n_d a_B^3 < 0.026$ (a_B — радиус боровской орбиты). К примеру, в GaAs ($\kappa = 15$, $m/m_0 = 0.07$) это условие приводит к неравенству $n_d < 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

2. Аномалии температурной зависимости электронной подвижности при низких температурах

При конечных температурах тепловое движение электронов в примесной зоне размывает корреляции. Для того чтобы учесть влияние теплового движения на корреляции в расположении примесных электронов, необходимо заменить выражение для структурного фактора (9) его термодинамическим средним. Формально наша задача сводится к вычислению термодинамического среднего структурного фактора $\langle S(q, n_d^+, r_c) \rangle_T$. Структурный фактор усредняется по всем значениям параметра r_c , которые может принимать этот параметр при заданной концентрации доноров n_d и концентрации примесных ионов n_d^+ . В низкотемпературном пределе $T \rightarrow 0$ перераспределение электронов между примесными центрами приводит к установлению значения параметра $r_c = r_c^0$, которое определяется формулами (10). С ростом температуры растет вероятность для примесных дырок сближаться на расстояния, меньшие r_c^0 . Вероятность обнаружить систему примесных ионов в конфигурации с заданным значением параметра r_c из интервала значений $0 < r_c < r_c^0$ дается выражением [13]

$$\exp[-\Delta E + T\Delta S - P\Delta V],$$

где ΔE , ΔS , ΔV — изменение внутренней энергии, конфигурационной энтропии, объема системы при изменении термодинамического параметра от нуля до заданного значения r_c . Факторизация этого выражения приводит к формуле для термодинамического среднего произвольной функции $F(r_c)$ [10]

$$\langle F(r_c) \rangle_T = \int_0^{r_c^0} F(r_c) W(r_c) dr_c / \int_0^{r_c^0} W(r_c) dr_c,$$

$$W(r_c) = \exp \left[\frac{S_0(r_c)}{k_B} - \frac{\varepsilon_c(r_c)}{k_B T} \right]. \quad (14)$$

Здесь $S_0(r_c)$ — конфигурационная энтропия системы примесных ионов, приходящаяся на ион, а $\varepsilon_c(r_c)$ — энергия корреляции системы примесных ионов, приходящаяся на ион. В модели твердых шаров конфигурационная энтропия вычисляется по формуле (10). Энергию корреляции можно вычислить по формуле [7]

$$\varepsilon_c(r_c) = \frac{n_d^+}{2} \int dr' V(r') g_{12}(r'). \quad (15)$$

Напомним, что корреляционная функция определена таким образом, что в случаях хаотического распределения примесных центров $g_{12}(r') = 0$. Потенциал $V(r')$ описывает кулоновское взаимодействие между примесными ионами легированного слоя вблизи проводящего слоя (слоя заполненного двумерными электронами). Для того

чтобы избежать громоздких выкладок, ограничимся рассмотрением простого случая, когда толщина легированного слоя много меньше толщины спейсера ($W_d \ll W$). При выполнении этого условия можно считать, что примесные ионы распределены по плоскости $\{x, y\}$, и описать взаимодействие между примесными ионами двумерным потенциалом [11]

$$V(r) = \frac{e^2}{\kappa} \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{\sqrt{r^2 + w^2}} \right]. \quad (16)$$

Энергию корреляции $\varepsilon_c(r_c)$ удобно вычислять в Фурье-представлении

$$\varepsilon_c(r_c) = \frac{1}{4\pi} \int dq q V_q (S_q - 1). \quad (17)$$

В формуле (17) структурный фактор S_q определяется формулами (10), а Фурье-образ потенциала взаимодействия примесных ионов V_q имеет вид

$$V_q = \frac{2\pi e^2}{\kappa q} (1 - e^{-wq}). \quad (18)$$

При вычислении энергии корреляции $\varepsilon_c(r_c)$ по формуле (17) необходимо учитывать зависимость структурного фактора от волнового числа вектора q . На рис. 4 представлена зависимость структурного фактора S_q от волнового числа q , рассчитанная по формулам (10) при значении коэффициента упаковки $\eta = 0.2$. При больших значениях q структурный фактор представляет осциллирующую функцию, асимптотически приближающуюся к значению $S_q = 1$ с ростом q . При этом подинтегральное выражение в формуле (17) стремится к нулю. Частая „гребенка“ острых пиков при больших значениях q вносит пренебрежимо малый вклад в данный интеграл. Поэтому мы обрезаем интеграл на верхнем пределе, интегрируя лишь в том интервале изменения q , на котором S_q испытывает пару осцилляций. Ошибка при вычислении $\varepsilon_c(r_c)$ в этом приближении составляет около 1%.

На рис. 5 представлены результаты наших расчетов энергии корреляции ε_c по формуле (17). Серия кривых 1–5 представляет зависимости $\varepsilon_c(\eta)$ в системе примесных ионов с концентрацией доноров $n_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при нескольких значениях ширины спейсера. Все расчетные кривые $\varepsilon_c(\eta)$ имеют минимум при значении коэффициента упаковки $\eta = 0.18$, которое соответствует значению основного параметра теории $n_d/n_d^+ = 2.5$. Наличие минимума имеет простое объяснение. Возвращая часть электронов проводимости обратно на примесные центры (это можно сделать, увеличивая напряжение на затворе), мы уменьшаем дефицит свободных мест, что приводит к усилению корреляций в системе примесных ионов. При этом коэффициент упаковки увеличивается. Соответственно энергия корреляции возрастает по модулю (нисходящий участок кривой $\varepsilon_c(\eta)$). Однако с ростом концентрации нейтральных доноров уменьшается

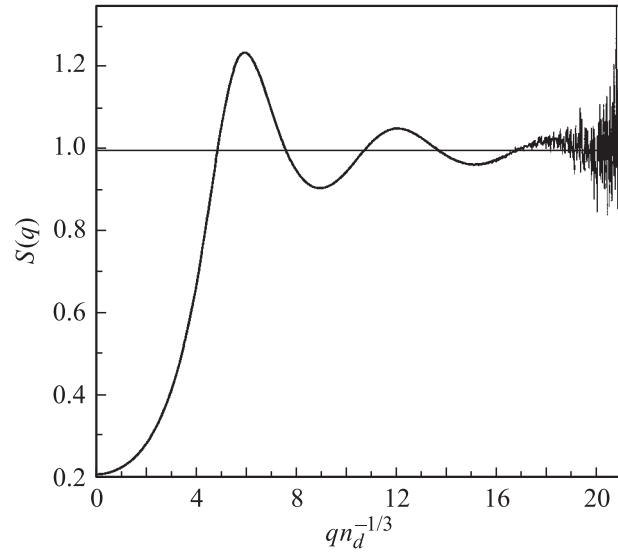


Рис. 4. Зависимость структурного фактора $S(q)$ от вектора рассеяния q ($n_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ — концентрация доноров) при $\eta = 0.2$.

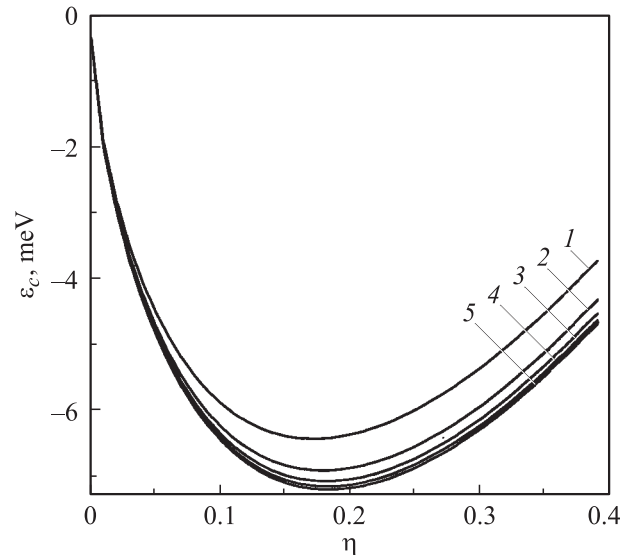


Рис. 5. Зависимость энергии корреляции, приходящейся на один ион (ε_c), от коэффициента упаковки η . Серия кривых 1–5 соответствует значениям ширины спейсера $W = 215, 430, 645, 860, 1075 \text{ \AA}$ при $n_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

плотность в системе примесных ионов, что приводит к ослаблению взаимодействия между ионами. Наличие этих двух факторов и конкуренция между ними приводят к минимуму на кривой $\varepsilon_c(\eta)$. Экспериментальное изучение корреляций в системе примесных ионов имеет смысл проводить при значении основного параметра n_d/n_d^+ , соответствующем минимуму кривой $\varepsilon_c(\eta)$. В этом случае корреляции наиболее ярко выражены.

Энергия взаимодействия между примесными ионами, а следовательно, и энергия корреляции в системе при-

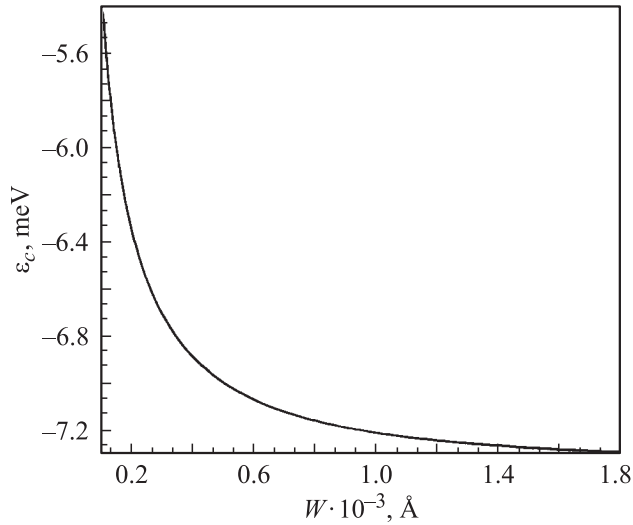


Рис. 6. Зависимость энергии корреляции ϵ_c от ширины спейсера W ($n_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $\eta = 0.18$).

месных ионов зависят от уровня легирования. Численные расчеты, выполненные по формуле (17), приводят к следующему результату:

$$\epsilon_c(n_d) = an_d^{1/3} + b. \quad (19)$$

При $\eta = 0.18$ и $W = 645 \text{ \AA}$ постоянные $a = -1.6 \cdot 10^{-5} \text{ meV} \cdot \text{cm}$ и $b = 0.343 \text{ meV}$. Согласно формуле (19), при изменении уровня легирования в пределах $10^{15} < n_d < 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ энергия корреляции изменяется в пределах от -1.25 до -15.6 meV . При усреднении структурного фактора интегрирование производится с множителем, содержащим в экспоненте энергию корреляции (14). Поэтому температурная зависимость структурного фактора $\langle S(q, n_d^+, r_c) \rangle_T$, а вместе с ней и температурная зависимость подвижности двумерных электронов тем резче, чем больше энергия корреляции в системе примесных ионов. Отсюда следует, что при изучении корреляционных эффектов желательно выбирать образцы с высоким уровнем легирования, в которых достаточно велика плотность в системе примесных ионов.

Энергия взаимодействия примесных ионов вблизи проводящего слоя (16) тем больше, чем больше расстояние от этого слоя. Поэтому энергия корреляции в системе ионов возрастает при переходе на рис. 5 от кривой 1 ($W = 215 \text{ \AA}$) к кривой 5 ($W = 1075 \text{ \AA}$). Расчетная зависимость энергии корреляции от ширины спейсера при фиксированном значении коэффициента упаковки $\eta = 0.18$ и концентрации доноров $n_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ представлена на рис. 6. Как следует из расчетов, приведенных на рис. 6, изменение энергии корреляции при изменении ширины спейсера составляет несколько процентов, если последняя достаточно велика. Поэтому в наших расчетах можно пренебречь зависимостью энергии корреляции от ширины спейсера.

В системах с широким спейсером, для которых справедлива формула (11), температурные зависимости электросопротивления двумерных электронов определяются термодинамическим средним структурного фактора, вычисленного в пределе малых углов рассеяния $q = 0$

$$\rho^{\text{corr}}/\rho^{\text{non}} = \langle S(\eta, 0) \rangle. \quad (20)$$

На рис. 7 представлены температурные зависимости электросопротивления электронов, вычисленные по формуле (20) при концентрации доноров $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, ширине спейсера $W = 300 \text{ \AA}$ для значений коэффициента упаковки $\eta = 0.05$ ($n_d/n_d^+ = 1.2$); $\eta = 0.1$ ($n_d/n_d^+ = 1.6$); $\eta = 0.15$ ($n_d/n_d^+ = 2.1$); $\eta = 0.2$ ($n_d/n_d^+ = 2.9$). На рис. 7 отчетливо прослеживается линейный вид этих зависимостей. Численные расчеты показывают, что температурные зависимости электросопротивления $\rho^{\text{corr}}/\rho^{\text{non}}$ в интервале температур от 0 до 50 К могут быть представлены линейной функцией температуры (при линейной аппроксимации допущенная погрешность не превышает 1%)

$$\rho^{\text{corr}}/\rho^{\text{non}} = C(\eta)T + S(\eta, 0), \quad (21)$$

где $S(\eta, 0)$ — значение структурного фактора при $q = 0$, вычисленное при нулевой температуре. Скорость изменения электросопротивления при изменении температуры $C(\eta)$ представлена на рис. 8 при концентрации доноров $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ и ширине спейсера $W = 300 \text{ \AA}$. Эта функция имеет вид

$$C(\eta)10^3 = 1330\eta^3 - 560\eta^2 + 93\eta. \quad (22)$$

Из формул (21) и (22) следует, что в случае достаточно высокой концентрации доноров $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

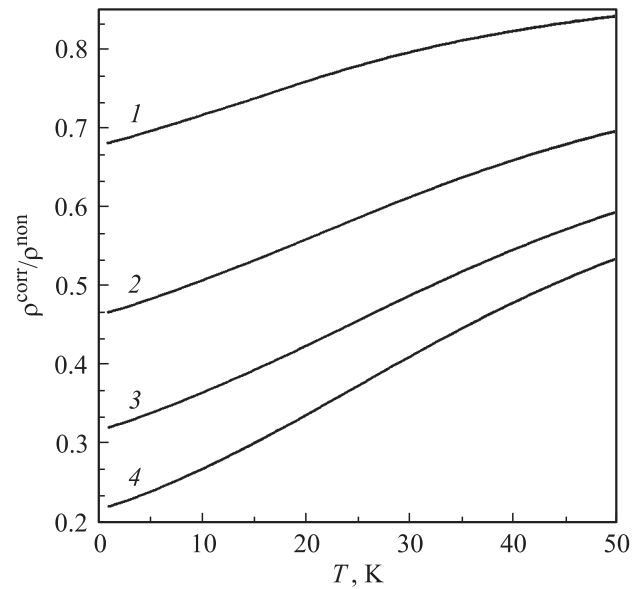


Рис. 7. Зависимость электросопротивления $\rho^{\text{corr}}/\rho^{\text{non}}$ от температуры ($n_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $W = 300 \text{ \AA}$). Кривые 1–4 соответствуют значениям коэффициента упаковки $\eta = 0.05, 0.1, 0.15, 2$.

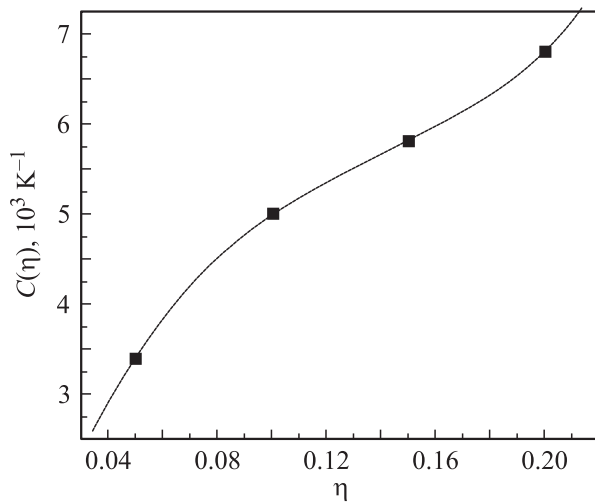


Рис. 8. Зависимость температурного коэффициента электросопротивления $C(\eta) = \frac{d}{dT} \rho^{\text{corr}} / \rho^{\text{non}}$ от коэффициента упаковки η ($n_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $W = 300 \text{ \AA}$).

даже при относительно небольших значениях параметра $n_d/n_d^+ = 3$ электросопротивление уменьшается вдвое на интервале изменения температуры от 0 до 50 К. В сильно вырожденном электронном газе, когда температура Ферми достаточно велика, подобные аномалии могут наблюдаться в экспериментах. Для двумерных электронов энергия Ферми $\epsilon_F = \pi \hbar^2 N_s / m$ [11]. Если принять для оценок, что поверхностная плотность двумерных электронов $N_s = n_d^+ W_d$, то при $W_d = 100 \text{ \AA}$, $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ и массе электрона $m/m_0 = 0.07$ температура Ферми $T_F = 110 \text{ K}$. В столь сильно вырожденном газе двумерных электронов при низких температурах, в случае когда рассеяние электронов на акустических фоновых пренебрежимо мало, единственным фактором, приводящим к уменьшению электросопротивления с ростом температуры, являются корреляции в расположении рассеивателей. Принято считать [12], что при легировании AlGaAs кремнием атомы кремния садятся на дефекты, образуя глубокие примесные центры. Приведенные нами оценки справедливы именно в этом случае глубоких примесных центров, когда при концентрациях доноров $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ критическая концентрация доноров, соответствующая переходу Мотта, еще не достигнута.

При легировании GaAs мелкими донорами переход Мотта происходит при критической концентрации доноров $n_d = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. При концентрации доноров, меньшей, чем критическая, температура Ферми в системе двумерных электронов составляет несколько градусов. В невырожденном электронном газе слабые температурные зависимости электросопротивления двумерных электронов, связанные с корреляциями в расположении примесных ионов, будут незаметны. Поэтому в случае мелких доноров температурные аномалии электронной подвижности могут проявиться лишь при достаточно низких температурах (ниже гелиевых).

В настоящей работе мы исходили из предположения, что распределение примесных ионов при низких температурах является равновесным, т.е. считали, что при низких температурах примесные центры могут свободно обмениваться электронами, что и приводит к установлению равновесного распределения. При низких температурах равновесное распределение может также установиться благодаря туннельным переходам электронов через барьер, отделяющий легированный слой от проводящего. Во многих случаях равновесное распределение примесных дырок устанавливается лишь при достаточно высоких температурах (порядка 100 К). При понижении температуры образца это равновесное распределение фиксируется („замораживается“). При гелиевых температурах это „замороженное“ распределение примесных ионов соответствует некоему метастабильному состоянию примесных электронов. В этом случае корреляции в распределении примесных ионов, установившиеся при столь высоких температурах, оказываются ослабленными тепловым движением электронов. При этом аномальный рост подвижности при уменьшении концентрации электронов проводимости выражен значительно слабее, чем при температуре абсолютного нуля. Расчетные зависимости сопротивления $\rho^{\text{corr}} / \rho^{\text{non}}$ от концентрации примесных ионов при температуре 100 К представлены на рис. 9 (кривая 1). Вычисления проведены для сильно легированного образца с концентрацией доноров $n_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Из рис. 9 видно, что даже при столь высокой степени легирования вклад в электросопротивление от рассеяния электронов на распределении примесных ионов, „замороженном“ при 100 К, незначи-

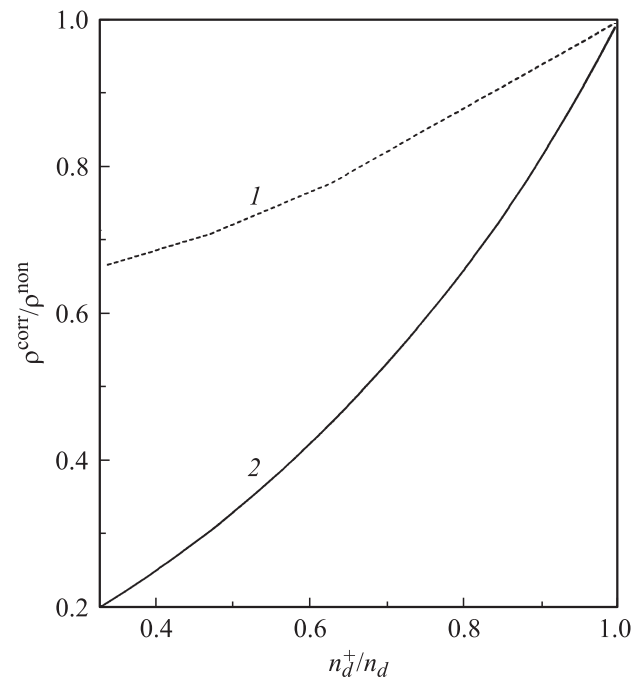


Рис. 9. Зависимость электросопротивления $\rho^{\text{corr}} / \rho^{\text{non}}$ от концентрации примесных ионов ($n_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $W = 300 \text{ \AA}$). $T = 100 \text{ K}$ (1) и 0 K (2).

тельно отличается от вклада рассеяния на хаотическом распределении примесных ионов. Изменение электросопротивления электронов, обусловленное корреляциями в распределении примесных ионов, в этом случае составляет десятки процентов. В то же время при рассеянии электронов на равновесном распределении примесных ионов (кривая 2 на рис. 9) корреляции в расположении примесных ионов уменьшают электросопротивление электронов в 5 раз при изменении концентрации электронов в проводящем слое в 3 раза.

Итак, упрощенное описание низкотемпературного рассеяния двумерных электронов на коррелированном распределении примесных ионов в модели твердых сфер приводит к следующим выводам. В гетеросистемах со слабым рассеянием электронов на примесных ионах (широкий спейсер) корреляционные эффекты электронной подвижности описываются термодинамическим средним структурного фактора в пределе малых углов рассеяния. Рост корреляций в системе примесных ионов при уменьшении концентрации электронов в проводящем слое приводит к существенному увеличению электронной подвижности. Энергия корреляции в распределении примесных ионов зависит от степени легирования и меняется в пределах от -1.25 до -15.6 meV при изменении концентрации доноров в интервале $10^{15} < n_d < 10^{18}$ cm $^{-3}$. При легировании глубокими примесными центрами ($n_d \sim 10^{18}$ cm $^{-3}$) „размытие“ коррелированного распределения примесных ионов тепловым движением электронов приводит к увеличению электросопротивления электронов в несколько раз при изменении температуры в интервале $0 < T < 50$ К. При легировании мелкими примесными центрами ($n_d \sim 10^{16}$ cm $^{-3}$) в случае, когда температура Ферми составляет несколько градусов, корреляция в распределении примесных ионов приводит к зависимости электросопротивления от концентрации электронов проводимости, но не оказывает существенного влияния на температурные зависимости электросопротивления.

Список литературы

- [1] F. Stern. Appl. Phys. Lett. **43**, 974 (1983); T. Saku, Y. Horikoshi, Y. Tokura. Jap. J. Appl. Phys. **35**, 34 (1996).
- [2] S. Das Sarma, F. Stern. Phys. Rev. B **32**, 8442 (1985).
- [3] A.L. Efros, F.G. Pikus, G.G. Samsonidze. Phys. Rev. B **41**, 8295 (1990).
- [4] T. Kawamura, S. Das Sarma. Solid State Commun. **100**, 411 (1996).
- [5] Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Наука, М. (1978). Т. 1. 405 с.; Е.И. Харьков, В.И. Лысов, В.Е. Федоров. Физика жидких металлов. Киев (1979). 247 с.
- [6] Z. Wilamowski, K. Swatek, T. Dietl, J. Kossut. Solid State Commun. **74**, 833 (1990).
- [7] В.М. Михеев. ФТТ **41**, 1994 (1999).
- [8] В.М. Михеев. ФТТ **43**, 414 (2001).
- [9] В.М. Михеев. ФТТ **43**, 1785 (2001).
- [10] В.М. Михеев. ФТТ **47**, 1056 (2005).
- [11] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. Электронные свойства двумерных систем. Мир, М. (1985). 415 с.; F. Stern, W. Howard. Phys. Rev. **163**, 816 (1967).
- [12] DX centers and other metastable defects in semiconductors. Int. symp. Mauterdorf, Austria (1991). Semicond. Sci. Technol. **6**, 10 В (1991).
- [13] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1976). Ч. 1. 584 с.