

МАКСИМАЛЬНАЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ПОДВИЖНОСТЬ ДВУМЕРНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С ШИРОКИМ СПЕЙСЕРНЫМ СЛОЕМ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ

Пикус Ф. Г.

Рассчитана подвижность двумерных электронов в канале гетероструктуры, ограниченная рассеянием на удаленных частично понижованных примесях, с учетом корреляции в пространственном распределении зарядов, вызванной их кулоновским взаимодействием. Показано, что такая корреляция существенно увеличивает подвижность двумерных электронов. Исследовано влияние экранирования кулоновского взаимодействия двумерным электронным газом на пространственное распределение зарядов на примесях. Результаты моделирования на ЭВМ сравниваются с выводами локальной теории.

Подвижность двумерного электронного газа (ДЭГ) при температурах порядка 1—2 К в высококачественных гетероструктурах определяется в основном рассеянием двумерных электронов на заряженных примесях [2-5]. При этом возможно рассеяние как на удаленных примесях, отделенных от двумерного электронного газа (ДЭГ) спейсерным слоем, так и на остаточных ионах, расположенных вблизи ДЭГ, например, в спейсерном слое. Однако в то время как концентрация примесей в нелегированных областях гетероструктуры может быть уменьшена по мере совершенствования технологии, удаленные примеси являются поставщиками электронов в двумерный канал и их количество не может быть существенно уменьшено. Поэтому при низких температурах максимально возможная подвижность двумерных электронов при заданных концентрации ДЭГ n_s и толщине спейсерного слоя S будет определяться рассеянием на удаленных заряженных примесях.

В дальнейшем мы будем рассматривать гетероструктуры $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ с широким спейсерным слоем, в которых наблюдалась наибольшая подвижность ДЭГ [6-9]. В этих структурах толщина спейсерного слоя больше среднего расстояния между заряженными примесями, поэтому рассеяние двумерных электронов происходит на крупномасштабных флуктуациях случайного потенциала, создаваемого этими примесями [1, 10, 11]. Размер этих флуктуаций порядка толщины спейсерного слоя.

В работах [1, 10, 12] было показано, что при расчете подвижности, ограниченной рассеянием на удаленных заряженных примесях, необходимо учитывать корреляцию в их пространственном распределении. Такая корреляция неизбежно возникает благодаря кулоновскому взаимодействию, если только часть примесей заряжена, а остальные нейтральны [1]. При этом электроны перемещаются по примесям таким образом, чтобы уменьшить полную электростатическую энергию, т. е. разместиться наиболее однородно. В результате флуктуации случайного потенциала оказываются меньше, а подвижность соответственно больше, чем в отсутствие корреляции.

В работах [1, 10] были предложены две модели корреляции в распределении заряженных примесей. В первой, равновесной модели предполагается, что электроны могут перемещаться с примеси на примесь при сколь угодно низких температурах, и при нулевой температуре система электронов на донорах ока-

ивается в своем основном состоянии, т. е. в термодинамическом равновесии. Альтернативная, неравновесная модель предполагает, что переходы электронов с примеси на примесь прекращаются при некоторой температуре «замораживания» T_0 , и распределение зарядов при более низких температурах представляет собой «моментальную» фотографию» распределения, существовавшего при $T = T_0$. В рамках этой модели при достаточно высокой температуре замораживания T_0 подвижность ДЭГ можно рассчитать аналитически [1, 10].

Для расчета подвижности в равновесной модели необходимо изучить флуктуации заряда в основном состоянии системы электронов, локализованных на донорах. В работе [1] эти флуктуации исследовались моделированием на ЭВМ и аналитически. Результаты этих аналитических вычислений использовались в [13, 14], где была рассчитана подвижность ДЭГ для гетероструктур, в которых все доноры находятся в одной плоскости — образуют δ -слой. В настоящей работе мы также будем рассматривать только такие гетероструктуры. Однако результаты моделирования [1] не могут быть непосредственно использованы для расчета подвижности, так как это моделирование не учитывало влияния экранирования электронами в канале кулоновского взаимодействия между заряженными донорами на распределение этих доноров в основном состоянии. Там же было предложено аналитическое приближение, учитывавшее экранирование, пригодное для гетероструктур с δ -слоем доноров, с использованием которого в [13, 14] была рассчитана подвижность. В данной работе мы опишем результаты моделирования на ЭВМ распределения зарядов в основном состоянии системы электронов на донорах с учетом экранирования кулоновского взаимодействия двумерными электронами и сравним подвижность, рассчитанную по результатам моделирования, с полученными аналитически в [13, 14].

Основное отличие моделирования данной работы от [1] заключается в следующем. В [1] энергия взаимодействия между заряженными донорами, расположенными в точках \mathbf{r} и \mathbf{r}' , где \mathbf{r} , \mathbf{r}' — двумерные радиусы-векторы в плоскости, параллельной ДЭГ, считалась чисто кулоновской:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{\kappa} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (1)$$

κ — диэлектрическая проницаемость. В данной работе учитывалось экранирование кулоновского взаимодействия, рассматривая ДЭГ, расположенный на расстоянии S от слоя доноров, как металлическую плоскость. При этом для энергии взаимодействия вместо (1) использовалось выражение

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{\kappa} \left\{ \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{[(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 + 4S^2]^{1/2}} \right\}. \quad (2)$$

Соответствующее изменение было внесено в программу моделирования, описанную в [1]. В результате расчета на ЭВМ находился коррелятор плотности заряда в слое доноров

$$D(\mathbf{q}) = \int d^2\mathbf{r} D(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (3)$$

$$D(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle c(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}') \rangle, \quad (4)$$

где $c(\mathbf{r})$ — отклонение поверхностной концентрации заряженных доноров от ее среднего значения.

Расчет подвижности по известному коррелятору $D(\mathbf{q})$ выполнялся аналогично [13, 14] по известным формулам [15]

$$\mu^{-1} = \frac{2\pi m^2 e^3}{\kappa^2 \hbar^2} \int \frac{\exp(-2qS)}{(q + \bar{q}_S)^2} D(q) F^2(q) (1 - \cos(\vartheta)) d\vartheta, \quad (5)$$

где

$$q = 2k_F \sin(\vartheta/2), \quad (6)$$

$k_F = \sqrt{2\pi n_s}$ — волновой вектор Ферми, $F(q)$ — формфактор,

$$F(q) = \int |\psi(z)|^2 e^{-qz} dz. \quad (7)$$

Здесь $\psi(z)$ — волновая функция двумерных электронов. При использовании вариационной функции [16]

$$\psi(z) = \left(\frac{b^3}{2}\right)^{1/2} z e^{-bz/2} \quad (8)$$

для формфактора получим

$$F(q) = \left(\frac{b}{b+q}\right)^3. \quad (9)$$

Характерный обратный размер волновой функции ДЭГ в перпендикулярном направлении равен [15]

$$b = \left\{ \frac{48\pi m e^2 \left(N_{\text{депл}} + \frac{11}{32} n_s \right)}{\kappa \hbar^2} \right\}^{1/3}, \quad (10)$$

где $N_{\text{депл}}$ — поверхностная плотность в обедненном слое GaAs.

В выражении (5) \tilde{q}_s — обратный радиус экранирования ДЭГ:

$$\tilde{q}_s = q_s P(q), \quad (11)$$

где $q_s = 2me^2/\kappa\hbar^2$. В отличие от [13, 14] при расчете линейного экранирования мы учли формфактор электрон-электронного взаимодействия [17]:

$$P(q) = \int |\psi(z)|^2 dz \int |\psi(z')|^2 dz' e^{-q|z-z'|}. \quad (12)$$

С использованием волновой функции (8) получаем

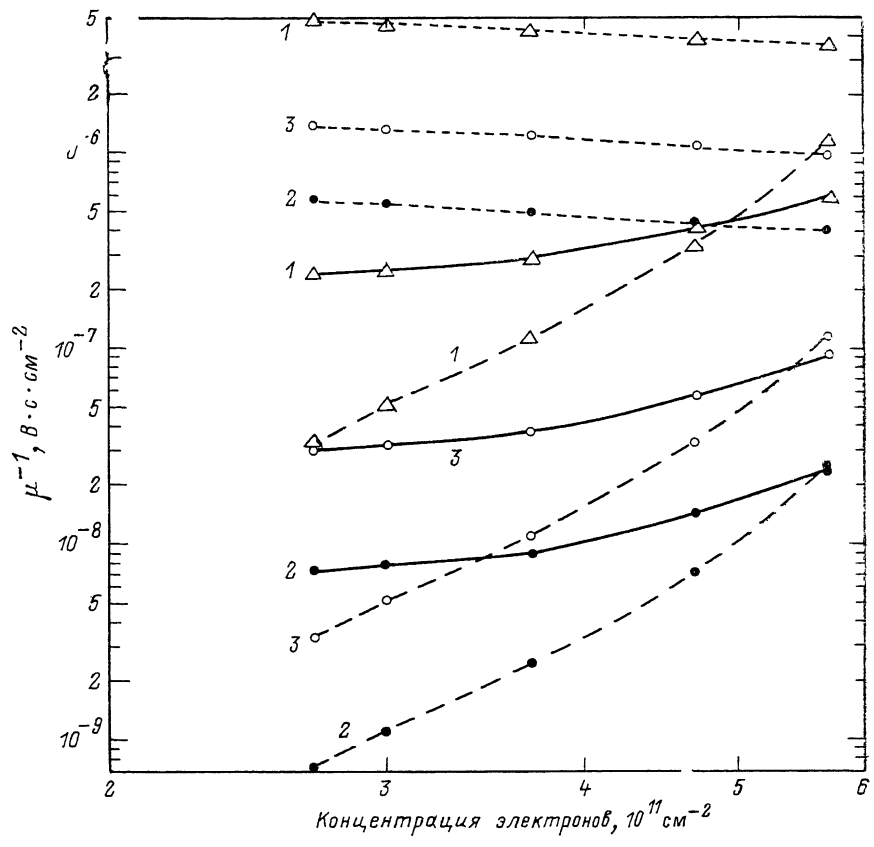
$$P(q) = \frac{8 + 9(b/q) + 3(b/q)^2}{8(1 + b/q)^3}. \quad (13)$$

При малых концентрациях двумерных электронов n_s расстояние, на котором ДЭГ экранирует внешний потенциал $2\pi/\tilde{q}_s$, оказывается меньше среднего расстояния между электронами $n_s^{-1/2}$, что противоречит физическому смыслу. Поэтому в нашем расчете \tilde{q}_s ограничивалась сверху величиной $2\pi n_s^{1/2} = \sqrt{2\pi} k_F$ [18].

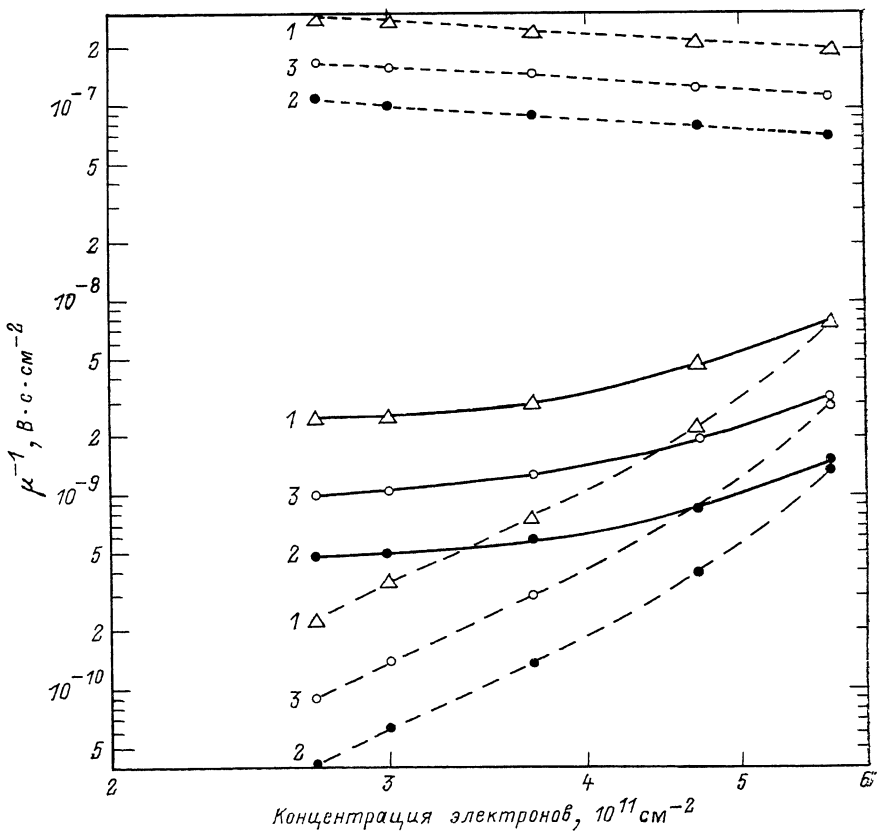
На рис. 1 показана зависимость обратной подвижности μ^{-1} от концентрации двумерных электронов n_s при концентрации доноров в δ -слое $N_d = 1.0 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, плотности заряда в обедненной области GaAs $N_{\text{депл}} = 3.0 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ и толщинах спейсерного слоя от 100 до 600 Å. Небольшое различие между подвижностью при отсутствии корреляции, т. е. при пуассоновом распределении заряженных примесей, представленной на рис. 1 и приведенной в [13, 14], связано с более точным учетом экранирования ДЭГ в данной работе, т. е. с отличием в определении \tilde{q}_s . Видно, что разница между предсказаниями аналитической теории, построенной в [1], и результатами моделирования наиболее существенна при малых плотностях ДЭГ n_s , где рассчитанная аналитически подвижность больше полученной моделированием примерно на порядок. Этого можно было ожидать, так как основной вклад в подвижность, согласно формуле (5), дают малые q , при которых поведение аналитического и рассчитанного на ЭВМ корреляторов существенно различается, особенно при малом отношении числа заполненных доноров к полному их числу n_s/N_d . Действительно, построенная в [1] теория дает для коррелятора выражение

$$D(q) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\kappa^2 q^2}{e^4} \left\{ \frac{dE_F}{dN_d} \right\}^2 \frac{N_d}{[1 - \exp(-2qS)]^2}, \quad (14)$$

а



б



где $E_F(N_d, c)$ — термодинамический потенциал двумерной системы, состоящей из частично нейтральных и частично ионизованных доноров, а c — поверхностная концентрация последних:

$$c = N_{\text{депл}} + n_s. \quad (15)$$

Зависимость $D(q)$ схематически показана на вставке к рис. 2, а. Если бы не было экранирования ДЭГ, т. е. при толщине спейсерного слоя $S \rightarrow \infty$, коррелятор (14) был бы пропорционален q^2 , в то время как моделирование [1] дает для величины $D(q)$ при малых q зависимость вида $D(q) \propto q^\nu$, где $\nu < 2$. Отклонение индекса ν от 2 связано с дальнедействующим характером кулоновского взаимодействия. Указанные зависимости сохраняются и при учете экранирования ДЭГ кулоновского взаимодействия заряженных доноров в области $S^{-1} \leq q < N_d^{1/2}$. На очень больших масштабах кулоновское взаимодействие заэкранировано и корреляции нет, поэтому при q , меньших некоторого $q^* \ll S^{-1}$, коррелятор $D(q) = D(q^*) = \text{const}$. Таким образом, моделирование показывает, что при $q^* \leq q < N_d^{1/2}$ флуктуации убывают существенно медленнее, чем это предсказывает теория [1]. В результате предельное значение коррелятора $D(q^*)$, определенное при моделировании, оказывается значительно больше, чем предел выражения (14), следующего из теории, которая соответственно завышает подвижность.

На рис. 1 можно заметить, что при малых толщинах спейсерного слоя ($S=100$ и 200 \AA) и больших концентрациях ДЭГ подвижность, рассчитанная согласно теории [1], оказывается меньше, чем найденная при компьютерном моделировании, что, казалось бы, противоречит сказанному выше. В действительности это отличие связано с тем, что выражение (14) для коррелятора справедливо только при достаточно малых значениях q , в то время как при больших q корреляция отсутствует [1] и

$$D(q) = c. \quad (16)$$

Поэтому в [13, 14] коррелятор $D(q)$ был ограничен сверху величиной c . Ясно, что такая процедура завышает коррелятор в области промежуточных q , в которой происходит переход с зависимости (14) на асимптотику (16). Моделирование на ЭВМ свободно от этого недостатка и дает для коррелятора правильные значения при любых q . Поэтому при тех значениях S и n_s , при которых основной вклад в интеграл (5) дает область $q \approx N_d^{1/2}$, подвижность, вычисленная аналитически, оказалась меньше, чем найденная в вычислительном эксперименте.

На рис. 2 построены аналитический и рассчитанный на ЭВМ корреляторы при отношении числа заряженных доноров к полному их числу $c/N_d = 0.3$ (а) и 0.5 (б) и толщине спейсерного слоя $S=100$ и 500 \AA . Видно, что при малых q определенный при моделировании коррелятор имеет более плавный выход на асимптотику (16), чем аналитический, а при больших q убывает существенно медленнее, особенно при малом c/N_d , хотя до области $q < q^*$, в которой $D(q) = \text{const}$, мы не смогли дойти на имевшемся в нашем распоряжении компьютере¹ (следует заметить, что основной вклад в подвижность дает область $q \propto S^{-1} \gg q^*$, поэтому результаты моделирования позволяют рассчитывать подвижность).

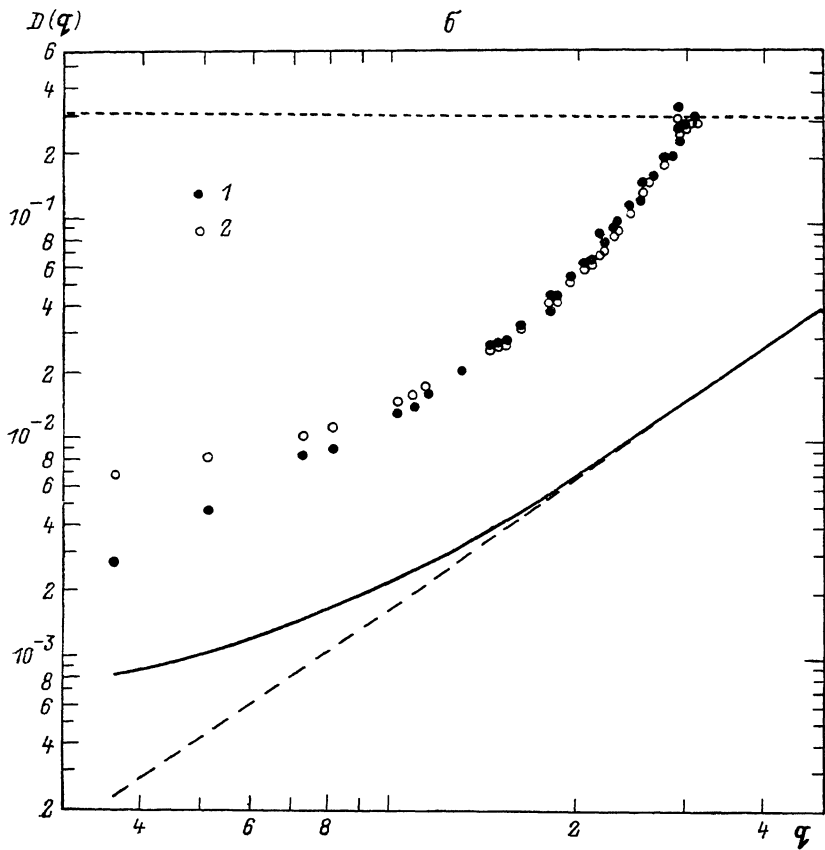
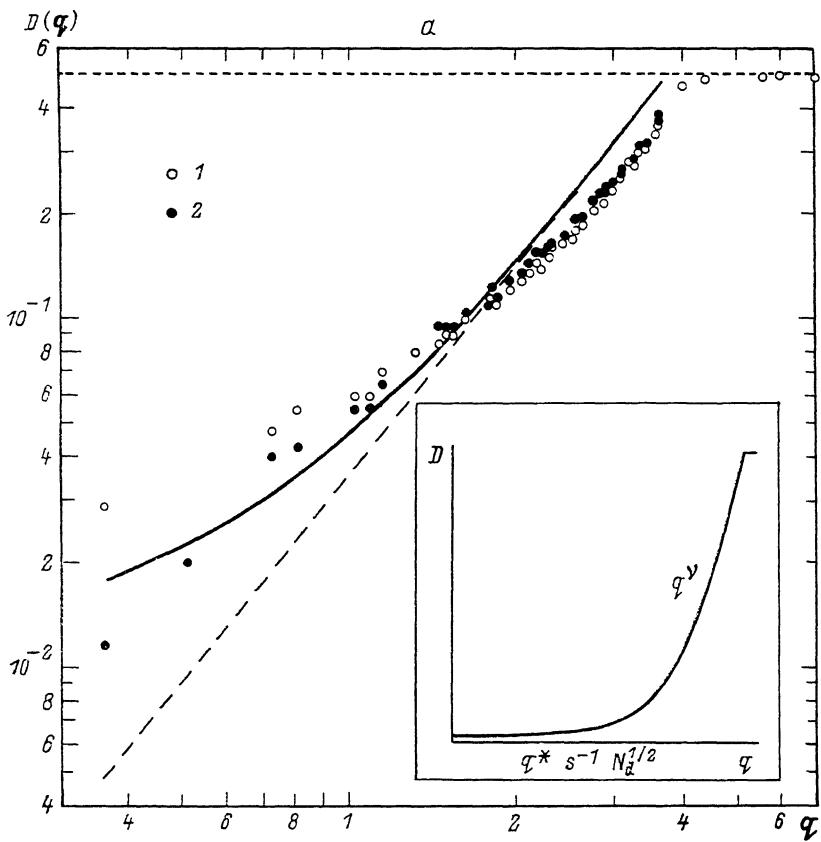
Таким образом, по результатам данной работы можно сделать следующие выводы.

1) Корреляция в распределении заряженных примесей, вызванная их кулоновским взаимодействием, существенно увеличивает подвижность двумерных электронов, ограниченную рассеянием на удаленных ионах.

¹ Мы использовали ЭВМ ЕС 1055M с быстроедействием 0.5 MFLOPS.

Рис. 1. Зависимость низкотемпературной обратной подвижности от концентрации ДЭГ.

Пунктирные линии — результаты расчета без учета корреляции, сплошные — подвижность, рассчитанная по результатам моделирования, штриховые — подвижность, рассчитанная аналитически согласно [1]. $S, \text{ \AA}$: а) 1 — 100, 2 — 200, 3 — 300, б) 1 — 400, 2 — 500, 3 — 600. $N_d = 1.0 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. $N_{\text{депл}} = 3.0 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$.



2) Экранирование кулоновского взаимодействия заряженных доноров двумерным электронным газом приводит к уменьшению корреляции и значительному возрастанию флуктуаций потенциала и, следовательно, уменьшает подвижность.

3) Дальнедействующий характер кулоновского взаимодействия обуславливает более медленное спадание флуктуаций потенциала, создаваемого заряженными примесями (на больших масштабах при малых q), чем это предсказывает теория, предложенная в [1], особенно при малой доле заряженных доноров. Область применимости этой теории, таким образом, ограничена большими концентрациями двумерных электронов.

Настоящая работа является продолжением работ [1, 13, 14], выполненных по инициативе и при участии А. Л. Эфроса. Автор благодарит А. Л. Эфроса за полезные советы при постановке задачи и обсуждении рукописи.

Список литературы

- [1] Пикус Ф. Г., Эфрос А. Л. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. В. 3. С. 985—995.
- [2] Walukiewicz W., Ruda H. E., Ladowski J., Gatos H. C. // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. N 8. P. 4571—4782.
- [3] Hirakawa K., Sakaki H. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 12. P. 8291—8301.
- [4] Gold A. // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 54. N 21. P. 2100—2102.
- [5] Stormer H. L., Pinczuk A., Gossard A. C., Wiegmann W. // Appl. Phys. Lett. 1981. V. 38. N 39. P. 691.
- [6] Pfeiffer L., West K. W., Stormer H. L., Baldwin K. M. // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 55. N 18. P. 1888—1890.
- [7] Ohno H., Luo J. K., Matsuzaki K., Hasegawa H. // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 54. N 1. P. 36—41.
- [8] Jiang C., Tsui D. C., Wiemann G. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 53. N 16. P. 1533—1535.
- [9] Schubert E. F., Pfeiffer L., West K. W., Isabelle A. // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 54. N 14. P. 1350—1352.
- [10] Efros A. L. // Sol. St. Commun. 1988. V. 65. N 11. P. 1281—1284.
- [11] van Hall P. J. // Superlat. a. Microstr. 1989. V. 6. N 2. P. 213—216.
- [12] Lassnig R. // Sol. St. Commun. 1988. V. 65. N 11. P. 765—768.
- [13] Пикус Ф. Г., Самсонидзе Г. Г., Эфрос А. Л. // ФТТ. 1990. Т. 32. В. 4. С. 1201—1207.
- [14] Efros A. L., Pikus F. G., Samsonidze G. G. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. N 12. P. 8295—8301.
- [15] Ando T., Fowler A. B., Stern F. // Rev. Mod. Phys. 1982. V. 54. N 2. P. 1—437.
- [16] Fang F. F., Howard W. E. // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 16. N 17. P. 797—803.
- [17] Stern F., Howard W. E. // Phys. Rev. B. 1967. V. 163. N 3. P. 816—835.
- [18] Аверкиев Н. С., Пикус Г. Е., Шматов М. Л. // ФТТ. 1988. Т. 30. В. 11. С. 3276—3285.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получена 14.12.1990
Принята к печати 20.12.1990

Рис. 2. Зависимость коррелятора $D(q)$ (в ед. N_d) от q (в ед. $N_d^{1/2}$) при $c/N_d=0.5$ (а) и 0.3 (б) и толщине спейсерного слоя $S=200$ (сплошные линии и точки 2), и 500 \AA (штриховые линии и точки 1).

Пунктирные линии — коррелятор плотности заряда, распределенного по Пуассону, сплошные и штриховые линии — результат аналитического расчета, 1, 2 — результат моделирования.