

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПОДВИЖНОСТИ ДВУМЕРНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА, ОГРАНИЧЕННОЙ ПРИМЕСНЫМ РАССЕЙАНИЕМ, В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С ШИРОКИМ СПЕЙСЕРНЫМ СЛОЕМ

Пикус Ф. Г., Голант Г. В.

Рассчитана температурная зависимость подвижности двумерных электронов в канале гетероструктуры, ограниченной рассеянием на удаленных частично ионизованных примесях, с учетом корреляции в пространственном распределении зарядов, вызванной их кулоновским взаимодействием. Показано, что такая корреляция, существенно увеличивающая подвижность двумерных электронов, при повышении температуры разрушается, что приводит к резкому падению подвижности. Проведено компьютерное моделирование термодинамически равновесного состояния электронов на донорах при конечной температуре. Уменьшение подвижности с ростом температуры, вызванное понижением корреляции, оказалось значительно больше, чем снижение подвижности, связанное с изменением функции распределения двумерных электронов и уменьшением экранирования ими рассеивающего потенциала.

Подвижность двумерного электронного газа (ДЭГ) при температурах порядка $1 \div 2$ К в высококачественных гетероструктурах определяется в основном рассеянием двумерных электронов на заряженных примесях [1-8]. Как было показано в работах [9-12], примесное рассеяние определяет максимально возможную подвижность при низких температурах. При высоких температурах определяющую роль играет фононное рассеяние. Подвижность двумерных электронов при рассеянии на фононах рассчитывалась во многих работах [1]. Из этих расчетов следует, что фононное рассеяние в гетероструктурах GaAs/AlGaAs сравнивается с примесным при температурах $10 \div 30$ К. При более низких температурах подвижность в значительной мере определяется как примесями, так и фононами, при температурах ниже $1 \div 2$ К фононное рассеяние можно не учитывать. Таким образом, существует достаточно широкая область температур, в которой существенно рассеяние на заряженных примесях. Поэтому вопрос о том, как зависит подвижность, определяемая примесным рассеянием, от температуры, представляет как теоретический, так и практический интерес. Есть две основные причины, приводящие к зависимости подвижности от температуры при рассеянии на примесях. Во-первых, при изменении температуры изменяются функция распределения электронов и радиус экранирования. Этот эффект исследовался в работах [13-15]. Было показано, что он приводит к линейной зависимости подвижности от температуры вида

$$\mu(T) = \mu_0 \left[1 - \alpha \frac{T}{\varepsilon_F} - O(T^2/l) \right]. \quad (1)$$

Коэффициент α вычислялся как аналитически [13, 14], так и путем расчетов на ЭВМ [15]. Обнаружено, что он слабо (и немонотонно) зависит от концентрации электронов. Для рассеяния на удаленных примесях $\alpha \sim 10^{-2} \div 10^{-1}$ в зависимости от толщины спейсерного слоя. Во-вторых, величина рассеивающего потенциала, создаваемого заряженными примесями, также может зависеть от температуры. В работах [9, 16, 17] 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 [9]. 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. При конечной температуре возможны переходы электронов между донорами в AlGaAs. Если в распределении зарядов на донорах существует некоторая корреляция, то тепловое движение будет ее изменять, что приведет к изменению подвижности. В этой работе мы будем изучать только второй эффект, т. е. зависимость коррелятора пространственного распределения заряженных примесей от температуры.

В работе [19] были предложены две модели корреляции в распределении заряженных примесей. В первой (равновесной) модели предполагалось, что электроны могут перемещаться с примеси на примесь при сколь угодно низких температурах, а при нулевой температуре система электронов на донорах окажется в своем основном состоянии, т. е. в термодинамическом равновесии. В альтернативной (неравновесной) модели предполагалось, что переходы электронов с примеси на примесь прекращаются и распределение электронов по донорам «замерзает» при температуре T_0 , при которой оно было равновесным. 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 [9, 18]. Результаты этой работы относятся к промежуточному случаю между равновесной и неравновесной моделями. Дело в том, что в неравновесной модели, в том виде, в каком она была предложена в [9], предполагалось, что температура T_0 много больше характерной энергии кулоновского взаимодействия заряженных доноров. Это позволило рассматривать электроны на донорах в момент замерзания как слабо неидеальную плазму. Ясно, что в обратном случае, когда температура T_0 много меньше кулоновской энергии, применима равновесная модель, поскольку отклонение от основного состояния при низкой температуре T_0 малό.

В этой работе мы рассмотрим промежуточный случай, когда температура замерзания T_0 сравнима с характерной энергией кулоновского взаимодействия заряженных доноров, т. е. систему электронов на донорах, находящуюся в термодинамическом равновесии при данной T . Очевидно, что полученные результаты при высоких температурах должны совпадать с результатами неравновесной модели, если в них вместо температуры замерзания T_0 подставить T . При низких температурах система будет приближаться к основному состоянию, поскольку мы предположили, что при температуре T имеется равновесие, поэтому результаты при $T \rightarrow 0$ должны совпадать с результатами равновесной модели.

Поскольку при конечной температуре электроны все время переходят с донора на донор, для определения коррелятора пространственного распределения заряда при заданной температуре необходимо вычислять среднее по времени значение коррелятора. Для моделирования теплового движения электронов по донорам нужно дополнить программу, описанную в [9], блоком температурного моделирования.

Моделирование начиналось с получения псевдоосновного состояния. Для этого использовалась программа, описанная в [9]. Как и в предыдущих расчетах, применялись квазипериодические граничные условия. После получения псевдоосновного состояния проводилось моделирование временной эволюции системы электронов на донорах при заданной конечной температуре [18]. Для этого случайно выбиралась пара доноров i и j , один из которых был заполнен,

а другой пуст, т. е. такая пара, в которой возможен прыжок электрона с первого донора на второй. Затем вычислялось изменение полной энергии системы в результате такого прыжка:

$$\Delta_{ij} = \varepsilon_i - \varepsilon_j \frac{e^2}{\kappa r_{ij}^2}. \quad (2)$$

Если Δ_{ij} отрицательна, т. е. прыжок приводит к уменьшению полной энергии, то он совершается всегда. Если же Δ_{ij} положительна, то такой прыжок происходит с вероятностью $\exp(-\Delta_{ij}/T)$. Для того чтобы осуществить прыжок с такой вероятностью, использовался метод Неймана, состоящий в следующем: датчиком случайных чисел генерировалось число, равномерно распределенное в интервале от 0 до 1. Если это число оказывалось меньше заданной вероятности, то прыжок выполнялся, в противном случае прыжок в выбранной паре доноров не выполнялся. Этот процесс повторялся для новых, случайно выбираемых пар доноров. После выполнения определенного числа прыжков рассчитывались характеристики системы, о которых будет сказано далее, в данный момент модельного времени, измеряемого числом прыжков. Для усреднения по времени находились средние значения полученных через равные промежутки модельного времени характеристик.

Для экономии времени вычислений таблица пар доноров составлялась заранее, причем в нее заносились только такие пары, расстояние между донорами в которых не превышало заданной величины R . Моделирование проводилось с несколькими значениями R , после чего определялось значение R^* , при котором результаты перестают зависеть от R . Это значение считалось «бесконечно большим», и дальнейшее моделирование выполнялось при $R=R^*$. В согласии с работой [18] значение R^* оказалось равным $2.5 \div 3$.

В результате расчета на ЭВМ вычислялись функция распределения $f(z)$ заряженных доноров по координате z и среднее значение $\langle z \rangle$, а также коррелятор пространственного распределения плотности заряда в слое примесей

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

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

где $c(\mathbf{r})$ — отклонение поверхностной концентрации заряженных доноров от ее среднего значения. Все величины усреднялись по времени по формуле

$$\langle F \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F(t_i), \quad (5)$$

где F — усредняемая величина, t_i — моменты времени, в которые производится вычисление значений величины F , N — их число. В промежутке между двумя моментами времени t_i и t_{i+1} происходили переходы электронов по донорам. Интервал времени, по которому выполнялось усреднение, выбирался таким, чтобы его дальнейшее увеличение не приводило к существенному изменению среднего значения. После этого полученные в данной реализации случайных координат доноров средние по времени значения коррелятора усреднялись по реализациям. Оба усреднения необходимы именно потому, что мы изучаем случай промежуточных температур: при высоких температурах зависимость результатов от реализации случайных координат доноров невелика, но при низких температурах, когда электроны практически не переходят между донорами, необходимо усреднять по реализациям.

Моделирование производилось на ЭВМ ЕС 1055M с быстродействием около 0.5 MFLOPS. Максимальный использованный массив был $R^2=1000$, при этом

требовалось около 2 М оперативной памяти. Все описанные далее вычисления потребовали около 200 ч процессорного времени.

В дальнейшем мы будем рассматривать модуляционно легированные гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ с широким спейсерным слоем, отделяющим легированную область твердого раствора от двумерного канала, в которых наблюдалась наибольшая подвижность ДЭГ [5-8]. В таких гетероструктурах возможно либо объемное легирование, когда легируется весь AlGaAs , кроме спейсерного слоя, или δ -легирование, при котором все доноры расположены в тонком слое. В этой работе рассмотрены только δ -слой доноров.

Для оценки влияния корреляции мы вычислим также подвижность без учета корреляции, т. е. случаи, когда заряженные примеси распределены по Пуассону. Результаты моделирования будем сравнивать с результатами расчета в рамках неравновесной модели при той же температуре. Очевидно, что, поскольку неравновесная модель справедлива в пределе высоких температур, когда температура много больше энергии кулоновского взаимодействия заряженных доноров, расчет в рамках этой модели и моделирование при таких температурах должны давать одинаковые результаты.

Расчет подвижности по известному коррелятору $D(\mathbf{q})$ выполнялся аналогично расчету, приведенному в [10-12], по известным формулам [19]

$$\mu^{-1} = \frac{2\pi m^2 e^3}{x^2 \hbar^2} \int \frac{\exp(-2qs)}{(q + \tilde{q}_s)^2} D(q) F^2(q) [1 - \cos(\vartheta)] d\vartheta, \quad (6)$$

где

$$q = 2k_F \sin(\vartheta/2), \quad (7)$$

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

$$F(q) = \int |\psi(z)|^2 e^{-qz} dz. \quad (8)$$

Здесь $\psi(z)$ — волновая функция двумерных электронов. При использовании вариационной функции [20]

$$\psi(z) = \left(\frac{b^3}{2}\right)^{1/2} z e^{-bz/2} \quad (9)$$

для формфактора получим

$$F(q) = \left(\frac{b}{b+q}\right)^3. \quad (10)$$

Характерный обратный размер волновой функции ДЭГ в перпендикулярном направлении равен [19]

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

где N_{depl} — поверхностная плотность зарядов в обедненном слое GaAs .

В выражении (6) \tilde{q}_s — обратный радиус экранирования ДЭГ:

$$\tilde{q}_s = q_s P(q), \quad (12)$$

где $q_s = 2me^2/x\hbar^2$, рассчитанный с учетом формфактора электрон-электронного взаимодействия [21]:

$$P_q = \int |\psi(z)|^2 dz \int |\psi(z')|^2 dz' e^{-q|z-z'|}. \quad (13)$$

С использованием волновой функции (9) получаем [22]

$$P(q) = \frac{8 + 9(b/q) + 3(b/q)^2}{8(1 + b/q)^3}. \quad (14)$$

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 ограничивался сверху величиной $2\pi n_s^{1/2} = \sqrt{2\pi k_F}$ [23].

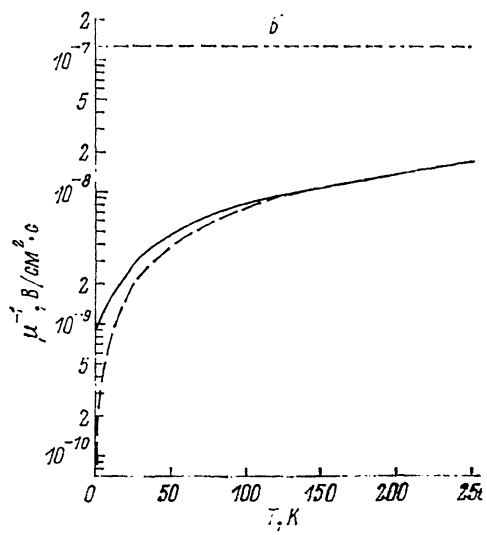
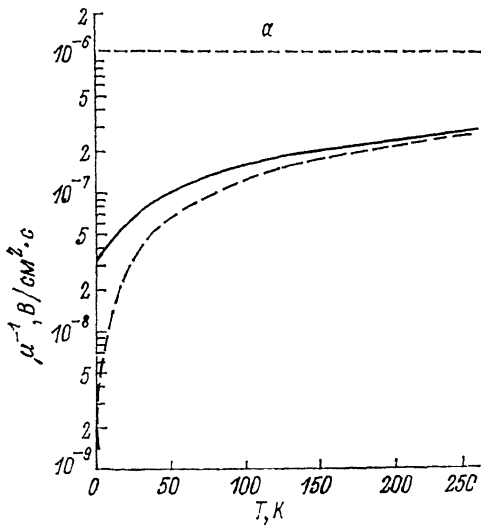
Результаты расчета подвижности представлены на рисунке для концентрации доноров в δ -слое $N_d = 1.0 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, концентрации электронов в ДЭГ $n_s = 5.0 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, плотности заряда в обедненном слое GaAs $N_{\text{деп}} = 3.0 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ и различных значений толщины спейсерного слоя z . Поскольку эта модель предполагает, что распределение электронов по донорам является равновесным при заданной температуре — температуре замораживания, то для сопоставления результатов моделирования и расчетов в неравновесной модели следует положить температуру замораживания равной температуре, при которой проводилось моделирование. Из рисунка, a, b видно, что при высоких температурах обе подвижности совпадают. При понижении температуры подвижность, рассчитанная в неравновесной модели, растет быстрее, поскольку в этой модели не учитываются флуктуации заряда, вызванные неоднородностью распределения доноров, которые при низких температурах становятся преобладающими и определяют подвижность. При низких температурах подвижность, определенная в результате моделирования, совпадает с подвижностью, рассчитанной в [10, 11], при нулевой температуре. Эффект корреляции составляет несколько порядков при низких температурах. Это вызвано тем, что при таких температурах тепловое движение электронов уменьшается и распределение заряда становится однородным на больших масштабах благодаря кулоновскому отталкиванию. Эффект увеличивается с ростом толщины спейсерного слоя, поскольку становятся важными крупномасштабные гармоники случайного потенциала.

Изложенные результаты справедливы только для δ -легированных слоев. В случае легированных слоев большой толщины флуктуации координат примесей в перпендикулярном к ДЭГ направлении, как было показано в [9], значительно уменьшают подвижность.

Представляет интерес сравнить изменение подвижности, вызванное уменьшением корреляции в расположении заряженных примесей, с температурной зависимостью (1), рассчитанной в работах [13–15]. Как было сказано выше, коэффициент α линейной зависимости подвижности от отношения температуры к энергии Ферми ДЭГ обычно порядка $\sim 10^{-2} \div 10^{-1}$. При толщине спейсера 300 \AA и концентрации ДЭГ $4 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ $\alpha = 3.9 \cdot 10^{-2}$. Для сравнения определим коэффициент β температурной зависимости подвижности, показанной на рисунке, a , считая зависимость подвижности от температуры вблизи $T=0$ приближенно линейной:

$$\mu(T) = \mu_0 \left[1 - \beta \frac{T}{\varepsilon_F} \right]. \quad (15)$$

Получим $\beta = 3.5 \gg \alpha$. Аналогичная ситуация имеет место и при других значениях толщины спейсерного слоя и концентрации ДЭГ. Столь сильная зависимость подвижности от температуры в наших расчетах связана с тем, что корреляция в распределении заряженных доноров, существующая при низких температурах, приводит к значительному увеличению подвижности; как было показано в [10–12], это увеличение может составлять 1–2 порядка. Температура разрушает корреляцию, и даже небольшое уменьшение корреляции приводит к резкому падению подвижности.



Зависимость обратной подвижности от температуры.

$N_d = 1.0 \cdot 10^{12}$, $N_s = 5.0 \cdot 10^{11}$, $N_{\text{деп}} = 3.0 \cdot 10^{10}$ см⁻². Сплошные линии — подвижность, рассчитанная с учетом корреляции в пространственном распределении заряженных доноров по результатам моделирования, штриховые — подвижность, рассчитанная в неравновесной модели, пунктирные линии — подвижность, рассчитанная без учета корреляции. Толщина спейсерного слоя, Å: а — 200, б — 500.

В заключение сформулируем основные результаты этой работы. Проведено моделирование термодинамически равновесного состояния электронов на донорах при конечной температуре; рассчитана подвижность, обусловленная рассеянием на заряженных донорах, с учетом корреляции в пространственном распределении зарядов на донорах, вызванной их кулоновским взаимодействием. Результаты, полученные для низких температур, совпадают с результатами, полученными в равновесной модели [10, 11]. Результаты расчетов для высоких температур хорошо описываются неравновесной моделью. Показано, что повышение температуры приводит к уменьшению корреляции в расположении заряженных примесей и резкому падению подвижности. Изменение подвижности с ростом температуры, вызванное понижением корреляции, оказалось значительно больше, чем рассчитанное в работах [13–15] снижение подвижности, связанное с изменением экранирования.

Настоящая работа является продолжением работ [9–11], выполненных по инициативе и при участии А. Л. Эфроса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Walukiewicz W., Ruda H. E., Ladowski J., Gatos H. C. // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. N 8. P. 4571–4782.
- [2] Hirakawa K., Sakaki H. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 12. P. 8291–8301.
- [3] Gold A. // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 54. N 21. P. 2100–2102.
- [4] Stormer H. L., Pinczuk A., Gossard A. C., Wiegmann W. // Appl. Phys. Lett. 1981. V. 38. N 39. P. 691–693.
- [5] Pfeiffer L., West K. W., Stormer H. L., Baldwin K. W. // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 55. N 18. P. 1888–1890.
- [6] Ohno H., Luo J. K., Matsuzaki K., Hasegawa H. // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 54. N 1. P. 36–41.
- [7] Jiang C., Tsui D. C., Wiemann G. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 53. N 16. P. 1533–1535.
- [8] Schubert E. F., Pfeiffer L., West K. W., Isabelle A. // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 54. N 14. P. 1350–1352.
- [9] Пикус Ф. Г., Эфрос А. Л. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. В. 3. С. 985–995.
- [10] Пикус Ф. Г., Самсоидзе Г. Г., Эфрос А. Л. // ФТТ. 1990. Т. 32. В. 4. С. 1201–1207.

- [11] Efros A. L., Pikus F. G., Samsonidze G. G. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. N 12. P. 8295—8301.
- [12] Пикус Ф. Г. // ФТП. 1991. Т. 25. В. 4. С. 729—735.
- [13] Gold A., Dolgoplov V. T. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 2. P. 1076—1079.
- [14] Gold A. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. N 12. P. 8537—8540.
- [15] Matsuoka T., Kobayashi E., Taniguchi K., Hamaguchi C., Sasa S. // Japan. J. Appl. Phys. Pt 1. 1990. V. 29. N 10. P. 2017—2025.
- [16] Efros A. L. // Sol. St. Commun. 1988. V. 65. N 11. P. 1281—1284.
- [17] Lassnig R. // Sol. St. Commun. 1988. V. 65. N 11. P. 765—768.
- [18] Левин Е. И., Нгуен В. Л., Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. // ЖЭТФ. 1987. Т. 92. С. 1499—1511.
- [19] Ando T., Fowler A. B., Stern F. // Rev. Mod. Phys. 1982. V. 54. N 2. P. 1—437.
- [20] Fang F. F., Haward W. E. // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 16. N 17. P. 797—780.
- [21] Stern F., Howard W. E. // Phys. Rev. B. 1967. V. 163. N 3. P. 816—835.
- [22] Gold A. // J. Phys. 1987. V. 48. P. 255—258.
- [23] 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 РАН
Санкт-Петербург

Получена 30.05.1991
Принята к печати 28.06.1991