

Энергетический спектр GaAs (δ -Sn)-структуры на вицинальной грани

© В.И. Кадушкин, Е.Л. Шангина*, Ф.М. Цаххаев

Рязанский государственный педагогический университет,
390000 Рязань, Россия

*Научно-исследовательский технологический институт,
390011 Рязань, Россия

(Поступила в Редакцию 25 ноября 1996 г.)

Выполнен расчет потенциального профиля, уровней энергии и соответствующих им волновых функций электронов в структуре с дельта-легированием оловом вицинальной грани арсенида галлия GaAs (0.3° , δ -Sn). Вычисленные значения концентраций электронов в подзонах хорошо согласуются с величинами, полученными из анализа осцилляций Шубникова–де Гааза и спектров фотолюминесценции структуры. На основании рассчитанной зонной диаграммы впервые наблюдавшиеся в спектре фотолюминесценции GaAs (0.3° , δ -Sn)-структуры линии идентифицированы как связанные с переходами электронов на уровнях размерного квантования в δ -слое Sn.

Одним из методов синтеза полупроводниковых структур со встроенным потенциалом сверхрешетки в латеральной плоскости (LSSL-структуры) является субмонослойное осаждение легирующей примеси, обладающей высокой диффузионной подвижностью, на вицинальной грани полупроводниковой матрицы. В [1] сообщалось о синтезе и свойствах LSSL-структуры, полученной методом дельта-легирования оловом вицинальной грани арсенида галлия (GaAs (0.3° , δ -Sn)- или vic(δ -Sn)-структура). Общий вид структуры представлен на рис. 1. В процессе роста структуры проявился эффект сегрегации атомов олова к торцам ступеней вицинальной грани (направление $[110]$) и соответственно обеднения легирующей примесью плато террас. Модуляция распределения атомов олова в дельта-плоскости легирования обуславливает модуляцию потенциального рельефа в области δ -слоя Sn с периодом 530 \AA в $[\bar{1}10]$ -направлении, соответствующим расстоянию между торцами ступеней вицинальной грани [2].

Исследованиями электрофизических свойств GaAs (0.3° , δ -Sn)-структуры установлена сильная анизотропия вольт-амперных характеристик, температурных зависимостей проводимости, эффекта Холла, осцилляций Шубникова–де Гааза и эффекта отрицательного магнитосопротивления по направлениям $[110]$ (pa) и $[\bar{1}10]$ (pe) [1–5], что обусловлено эффективной сегрегацией атомов олова к торцам ступеней вицинальной грани.

Нами выполнены расчеты потенциального профиля, уровней энергии и соответствующих им волновых функций электронов в GaAs (0.3° , δ -Sn)-структуре с учетом реального текстурированного распределения атомов олова в дельта-плоскости легирования. Расчет основан на самосогласованном решении уравнений Шредингера и Пуассона с учетом многочастичных эффектов. Исходным представлением для расчетов энергетического спектра было проявление двух электронных компонентов в осцилляциях Шубникова–де Гааза vic(δ -Sn)-структуры.

Используя соотношение

$$N = \frac{1.5(1/B_N) - 0.5(1/B_{N+1})}{\Delta(1/B)}, \quad (1)$$

следующее из условия резонанса

$$\hbar\omega(N + 1/2) = E_F, \quad (2)$$

где N — номер уровня Ландау, $\Delta(1/B)$ — период осцилляций, B_N — положение экстремума, ω — циклотронная частота, E_F — энергия Ферми, мы выполнили идентификацию осцилляций Шубникова–де Гааза из [1]. Результаты графического анализа представлены на рис. 2.

Для pa -разориентированного образца (зависимости I и 2 на рис. 2) видны осцилляции двух электронных компонентов, т.е. в этом случае заполнены два уровня размерного квантования. На первом уровне $2D$ -электроны характеризуются следующими параметрами: $\Delta(1/B)_1 = 0.034 \text{ T}^{-1}$, $n_{s1} = 1.41 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ и

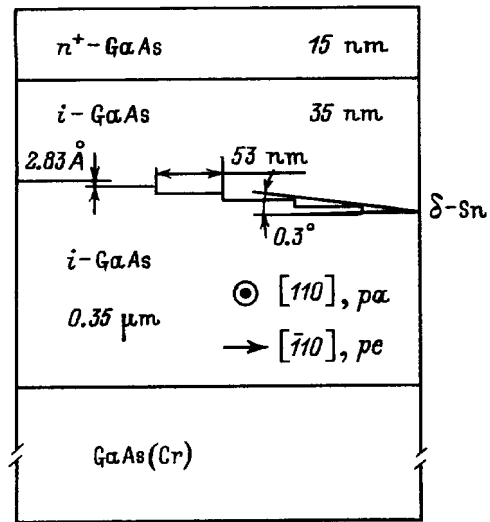


Рис. 1. Общий вид структуры с δ -Sn-слоем на вицинальной грани i -GaAs матрицы при разориентации подложки на 0.3° от (001) - к (110) -плоскости и с эквидистантной системой монослоевых ступеней с шагом 530 \AA .

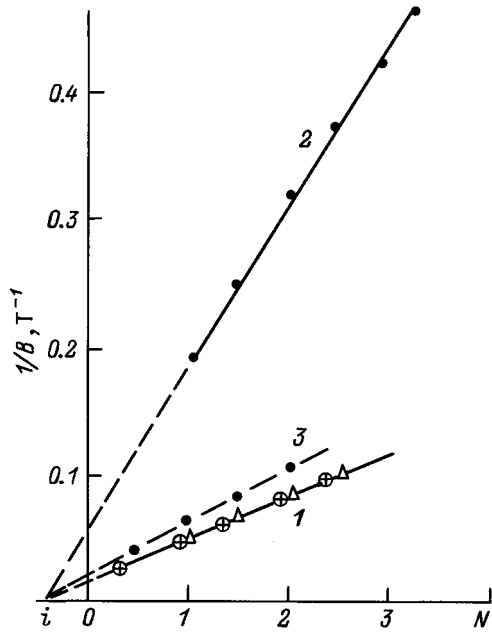


Рис. 2. Всерная диаграмма, иллюстрирующая наличие двух подзон размерного квантования электронов в $\text{vic}(\delta\text{-Sn})$ -структуре с $n_{s1} = 1.41 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ и $n_{s2} = 0.38 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ с одинаковой фазой $\varphi = -0.3\pi$. 1, 2 — pa -, 3 — pe -образцы $\text{vic}(\delta\text{-Sn})$ -структуры.

$E_{F1} = 50 \text{ meV}$; для второго уровня $\Delta(1/B)_2 = 0.125 \text{ T}^{-1}$, $n_{s2} = 0.38 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ и $E_{F2} = 14 \text{ meV}$. Здесь E_{F1} и E_{F2} имеют смысл энергий, отсчитанных от дна соответствующей подзоны размерного квантования E_1 и E_2 .

Для pa -ориентированного образца той же структуры (зависимость 3 на рис. 2) наблюдались осцилляции лишь по первой подзоне размерного квантования ($\Delta(1/B)_1 = 0.040 \text{ T}^{-1}$, $n_{s1} = 1.20 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ и $E_{F1} = 43 \text{ meV}$).

Расчет потенциального профиля $E_c(x, z)$, уровней энергии и соответствующих им волновых функций электронов в $\text{vic}(\delta\text{-Sn})$ -структуре проводился для $T = 4.2 \text{ K}$, параметра разрыва зон $\Delta E_c/\Delta E_g = 0.6$ (см. [6,7] и ссылки) в предположении квадратичного закона дисперсии. Толщина легированного Sn слоя в направлении оси роста структуры $[001]$ принималась равной $3a_0/2$ ($a_0 = 5.66 \text{ \AA}$ — постоянная решетки GaAs). Распределение легирующей примеси в $[\bar{1}10]$ -направлении аппроксимировалось в расчете гауссовым законом распределения $N_D(x) \sim \exp\left(-\frac{(x-d/2)^2}{2\sigma^2}\right)$, где $d = 530 \text{ \AA}$ — ширина ступени вицинальной грани, σ — среднее квадратичное отклонение распределения. Величина σ подбиралась в расчете таким образом, чтобы обеспечить максимально возможную модуляцию потенциального рельефа, при которой еще не наблюдается образования квазиодномерных проводящих каналов.

Для нахождения $E_c(x, z)$ использовался двухстадийный метод расчета: 1) самосогласованным решением уравнений Шредингера и Пуассона в цилиндрических координатах с учетом гауссовского распределения легирующей примеси в σ -плоскости и условия электронейтральности структуры при усреднении по $[110]$ -направлению концентраций электронов n_{s1} и n_{s2} из анализа осцилляций Шубникова–де Гааза вычислен потенциальный профиль $E_c(x)|_{z=0}$ в δ -плоскости легирования по $[110]$ -направлению; 2) на основании полученных значений $E_c(x)|_{x=0}$ самосогласованно решались одномерные уравнения Шредингера и Пуассона в различных точках оси x (направление $[\bar{1}10]$)

натах с учетом гауссовского распределения легирующей примеси в σ -плоскости и условия электронейтральности структуры при усреднении по $[110]$ -направлению концентраций электронов n_{s1} и n_{s2} из анализа осцилляций Шубникова–де Гааза вычислен потенциальный профиль $E_c(x)|_{z=0}$ в δ -плоскости легирования по $[110]$ -направлению; 2) на основании полученных значений $E_c(x)|_{x=0}$ самосогласованно решались одномерные уравнения Шредингера и Пуассона в различных точках оси x (направление $[\bar{1}10]$)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + E_c(z) + V_{xc}(z) \right] \xi_{sn}(z) = E_n \xi_{sn}(z), \quad (3)$$

$$\frac{d^2 E_c(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} [N_D^+(z) - N_A^-(z) - n(z)], \quad (4)$$

где E_n и ξ_{sn} — уровни энергии и соответствующие им волновые функции в квантовой яме профиля $E_c(z)$, $V_{xc}(z)$ — локальный обменно-корреляционный потенциал, $N_D^+(z)$, $N_A^-(z)$, $n(z)$ — концентрации ионизованных доноров, ионизованных акцепторов и электронов соответственно.

В результате двухстадийной процедуры вычислены потенциальный профиль $E_c(x, z)$, уровни энергии и соответствующие им волновые функции электронов в $\text{vic}(\delta\text{-Sn})$ -структуре. В потенциальной яме $\delta\text{-Sn}$ -слоя локализованы два уровня размерного квантования электронов (рис. 3). В расчете использовано значение среднее квадратичное отклонения $\sigma = 210 \text{ \AA}$, при этом концентрация легирующей примеси изменяется в направлении $[\bar{1}10]$ от $N^{\text{max}} = 2.1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ на торцах ступеней террас до $N^{\text{min}} = 1.8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ в центре ступеней. Соответственно в пределах $n_{s1} = (1.26-1.43) \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n_{s2} = (3.9-4.5) \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ изменяется концен-

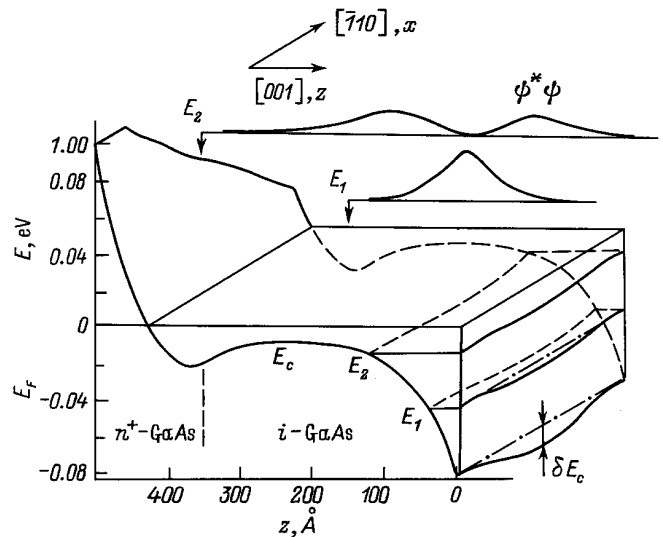


Рис. 3. Зонная диаграмма GaAs (0.3° , $\delta\text{-Sn}$)-структуры. Видна модуляция дна зоны проводимости $E_c(x, z)$ и уровней размерного квантования $E_{1,2}(x)$ в направлении $[\bar{1}10]$ относительно уровня Ферми $E_F = \text{const}$ в плоскости $\delta\text{-Sn}$ -слоя.

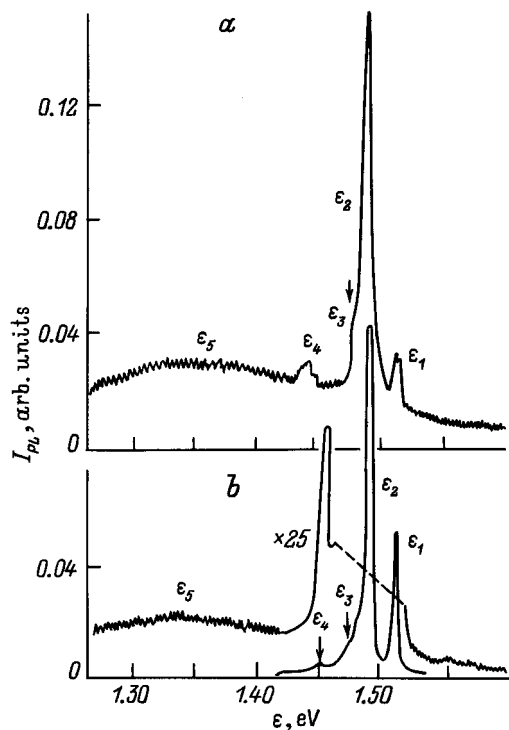


Рис. 4. Спектры низкотемпературной фотолюминесценции. *a* — vic(δ -Sn)-структура, *b* — sing(δ -Sn)-структура. Температура опыта $T = 4.2$ K.

трация электронов на уровнях размерного квантования δ -Sn-слоя; глубина модуляции потенциально-го рельефа в $[\bar{1}10]$ -направлении составляет 10 meV. Расчетные значения $n_{s1} = (1.26-1.43) \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n_{s2} = (3.9-4.5) \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ хорошо совпадают со средними значениями концентраций электронов, полученными анализом осцилляций Шубникова-де Гааза: $\bar{n}_{s1} = 1.41 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\bar{n}_{s2} = 3.8 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, что свидетельствует об адекватности расчетной модели реальным физическим условиям в vic(δ -Sn)-структуре.

На основании расчета энергетического спектра электронов идентифицирована природа линий ε_3 и ε_4 , наблюдавшихся в спектрах фотолюминесценции vic(δ -Sn)-структуры и контрольной GaAs (0° , δ -Sn)- или sing(δ -Sn)-структуры на сингулярной грани арсенида галлия [7], представленных на рис. 4. По нашим оценкам, линии ε_3 и ε_4 обусловлены переходами электронов (e, C°) с уровней размерного квантования в δ -Sn-слое. Это подтверждается хорошим совпадением найденных из спектров фотолюминесценции ($|E_1 - E_1|_{\text{PL}}^{\text{exp}} = 33 \text{ meV}$), из осцилляций Шубникова-де Гааза ($|E_2 - E_1|_{\text{SdH}}^{\text{exp}} = 36 \text{ meV}$) и расчетной ($|E_2 - E_1|^{\text{calc}} = 33 \text{ meV}$) величин разности энергий уровней размерного квантования электронов в δ -Sn-слое.

Таким образом, впервые выполнен расчет потенциального профиля $E_c(x, z)$, уровней энергии и соответствующих им волновых функций электронов в GaAs (0.3° , δ -Sn)-структуре по $[100]$ - и $[\bar{1}10]$ -направлениям

с учетом профилированного распределения олова в дельта-плоскости легирования (см., например, обзор [8]). На основании рассчитанного энергетического спектра электронов идентифицированы впервые наблюдавшиеся в спектре фотолюминесценции GaAs (0.3° , δ -Sn)-структуры линии как связанные с переходами электронов с уровней размерного квантования в δ -Sn-слое. Адекватность предложенной расчетной модели физическим процессам в реальной структуре подтверждается хорошим согласием расчетных и найденных экспериментально анализом осцилляций Шубникова-де Гааза и спектров фотолюминесценции структуры параметров $2D$ -электронов на уровнях размерного квантования в δ -Sn-слое.

Тщательный анализ экспериментов, выполненных в [1–5], не обнаружил признаков, присущих электронам в квазиодномерных каналах, а именно: низкотемпературных флуктуаций поперечного магнитосопротивления $\rho_{xx}(B)$, характерного излома на квадратичной зависимости $\rho_{xx}(B)$ при совпадении магнитной длины $l = \sqrt{\hbar/eB}$ с поперечным размером квазиодномерного канала и коротковолнового сдвига спектра фотолюминесценции структуры с $1D$ -электронами по отношению к спектру структуры с $2D$ -электронами [9–12]. Анализ гальвано-магнитных и оптических эффектов в vic(δ -Sn)-структуре на основании предложенной модели указывает на связь аномалий в температурной и магнитополевой зависимостях проводимости $\Delta\sigma^{pa,pe}(\ln T)$, $\Delta\sigma_{xx}^{pa,pe}(B)$ с неоднородностью распределения легирующей примеси по плато и ступеням террас вицинальной грани. Так, например, разница величин времени сбоя фазы волновой функции электронов $\tau_\phi^{pa} > \tau_\phi^{pe}$, "гигантский" эффект отрицательного магнитосопротивления $\Delta\sigma_{xx}(B)$ и температурного изменения проводимости $\Delta\sigma(T)$ в *pe*-образцах vic(δ -Sn)-структуры обусловлены модуляцией потенциального рельефа, повышением вероятности рассеяния и как следствие увеличения степени локализации электронов в $[\bar{1}10]$ -ориентированных образцах (по отношению к образцам ориентации $[110]$). Аномалии квантового эффекта Холла в vic(δ -Sn)-структуре объяснены наличием шунтирующей проводимости по n^+ -GaAs-слою, имеющему общие электронные состояния с δ -Sn-слоем структуры (рис. 3).

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы МНТП РФ "Физика твердотельных наноструктур" (проекты № 2/014 и 2/016-2) и гранта INTAS N 93-2492-ext в рамках исследовательской программы Международного центра фундаментальной физики в Москве.

Список литературы

- [1] А. де Виссер, В.И. Кадушкин, В.А. Кульбачинский, В.Г. Кытин, А.П. Сеничкин, Е.Л. Шангина. Письма в ЖЭТФ **59**, 340 (1994).
- [2] V.I. Kadushkin, V.A. Kulbachinskii, A.P. Senichkin, A.S. Bugaev, V.G. Kytin, E.L. Shangina, A. de Vesser. Phys. Low-Dim. Struct., *1*, 53 (1994).

- [3] В.И. Кадушкин, В.А. Кульбачинский, Е.В. Богданов, А.П. Сеничкин. *ФТП* **28**, 11, 1889 (1994).
- [4] V.A. Kulbachinski, N.B. Brandt, V.I. Kadushkin, A.P. Senichkin, E.L. Shangina. *Phys. Low-Dim. Struct.*, **12**, 237 (1995).
- [5] В.А. Кульбачинский, В.Г. Кытин, В.И. Кадушкин, А.П. Сеничкин. *ФТТ* **37**, 9, 2693 (1995).
- [6] В.И. Кадушкин, Е.Л. Шангина. *ФТП* **29**, 5–6, 1051 (1995).
- [7] В.И. Кадушкин, Е.Л. Шангина. *ФТП* **30**, 9, 1676 (1996).
- [8] А.Я. Шик. *ФТП* **26**, 7, 1161 (1992).
- [9] H. Hiramoto, K. Hirakawa, T. Ikoma. *J. Vac. Sci. Technol.* **6**, 1014 (1988).
- [10] R.P. Teylor, P.C. Main, L. Eaves, S.P. Beaumont, J. McJuture, S. Thoms, C.D.W. Wilkinson. *Surf. Sci.* **228**, 296 (1990).
- [11] H. Temkin, G.J. Dolan, M.B. Panish, S.N.G. Chu. *Appl. Phys. Lett.* **50**, 413 (1987).
- [12] J.S. Weiner, G. Danan, A. Pinczuk, J. Valladares, L.N. Pfeiffer, K. West. *Surf. Sci.* **228**, 412 (1990).