

УДК.621.315.592

## Влияние примесей с переменной валентностью на явления переноса в квантовой яме

© И.И. Ляпилин

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

(Получена 9 апреля 1996 г. Принята к печати 5 октября 1996 г.)

В рамках модели сильных кулоновских корреляций исследуются кинетические явления в квантовой яме, содержащей примеси с переменной валентностью. Показано, что с увеличением содержания железа в квантовой яме кулоновские корреляции возрастают и приводят к упорядочению в системе примесей. В результате этого следует ожидать ослабления рассеяния  $2d$  электронов на них, что должно приводить к значительному увеличению подвижности  $2d$  электронов.

### Введение

В последние годы большой интерес вызвала группа разбавленных магнитных полупроводников (РМП), в которых магнитным ионом является железо —  $A_{1-x}Fe_xB$ . Многочисленные эксперименты, проведенные к настоящему времени, показали, что большинство физических свойств РМП определяется положением состояний  $Fe^{2+}$  относительно дна зоны проводимости [1]. Ионы  $Fe^{2+}$  являются нейтральными донорами, уровни которых расположены в зоне проводимости на расстоянии 210 мэВ от ее дна. При малом содержании железа все ионы  $Fe^{2+}$  автоионизируются, превращаясь в ионы  $Fe^{3+}$ . Такой процесс идет до тех пор, пока энергия Ферми не достигнет донорного уровня. При дальнейшем увеличении содержания железа только часть доноров оказывается ионизованной. В этом случае в РМП реализуется смешанная система  $3d^5$ - и  $3d^6$ -состояний Fe. Проведенный нами анализ как подвижности электронов проводимости, так и термомагнитных явлений показал, что при достаточно высоком содержании железа в РМП кулоновское отталкивание между заряженными донорами  $Fe^{3+}$  приводит к существенной корреляции в их расположении. В первую очередь это сказывается на зависимости времени релаксации электронов проводимости  $\tau$  от энергии  $\varepsilon$  [2]. Именно такое поведение  $\tau(\varepsilon)$  в окрестности энергии Ферми решающим образом проявляется на концентрационной зависимости термомагнитных эффектов, приводя к смене знаков эффектов Нернста–Эттинсгаузена [3] и немонотонной зависимости подвижности от содержания ионов железа в РМП [2]. Кроме того, как было показано в [4], в системе со смешанной валентностью реализуется новый неупругий механизм рассеяния электронов проводимости, связанный с перезарядкой ионов железа  $Fe^{2+}$  и  $Fe^{3+}$  в акте рассеяния.

Возможность реализации квантовой ямы (КЯ), содержащей двумерные носители заряда и примеси с переменной валентностью, была впервые рассмотрена в работе [5]. Примером такой структуры является, например,  $Hg_{1-y}Cd_ySe/Hg_{1-x}Fe_xSe/Hg_{1-y}Cd_ySe$  при соответствующем выборе композиционного параметра  $y$ . Экспериментально такие структуры могут быть получены с исполь-

зованием техники молекулярно-лучевой эпитаксии. Так, уже в работе [6] сообщалось о выращивании двумерных систем на основе  $HgSe:Fe$ . Анализ экспериментальных данных показал, что в таких двумерных системах кулоновские корреляции в системе примесей со смешанной валентностью весьма сильны.

Здесь мы в рамках модели [2] рассмотрим явления переноса в КЯ содержащей примеси Fe. Изучим зависимость концентрации электронов проводимости как от ширины КЯ, так и величины легирования. Рассмотрим влияние примесей со смешанной валентностью на релаксацию импульса  $2d$ -электронов.

### Уравнение электронейтральности; стабилизация концентрации электронов проводимости

Рассмотрим КЯ шириной  $W_z$ , которую для простоты будем считать бесконечно глубокой. В этом случае волновые функции двумерных электронов имеют обычный вид:

$$\Psi_\nu(\mathbf{R}_j, z_j) = \Psi_{kL}(\mathbf{R}_j, z_j) = \frac{1}{(L_x L_y)^{1/2}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_j) \phi_L(z_j). \quad (1)$$

Здесь  $\phi_L(z)$  — огибающая волновая функция:

$$\phi_L(z_j) = (2W_z)^{1/2} \sin(Lz/W_z + L\pi/2); \quad z \in [-W_z/2; W_z/2],$$

$$\mathbf{R} = (x, y); \quad \nu = k, L \quad L = 1, 2, 3. \quad (2)$$

$L$  — характеризует номер размерно-квантованного уровня, который может быть реализован в КЯ.

Закон дисперсии  $2d$  электронов проводимости будем полагать квадратичным и изотропным:

$$\varepsilon_\nu = \varepsilon_{kL} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_L, \quad E_L = E_0 L^2, \quad E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mW_z^2}, \quad (3)$$

где  $E_L$  — энергия размерно-квантованного уровня,  $m$  — эффективная масса электрона. (Учет конечной глубины

КЯ, как и эффекта непараболичности зоны проводимости, не приводит к качественным изменениям в расчете).

Для анализа изменения кинетических коэффициентов, как функции концентрации примесей железа, необходимо определить энергию Ферми из уравнения электронейтральности. Так как концентрация  $2d$  электронов проводимости в рассматриваемой нами ситуации определяется концентрацией доноров ( $\text{Fe}^{3+}$ ), расположенных в КЯ, очевидно, что уравнение электронейтральности имеет следующий вид:

$$N_e = W_z N(\text{Fe}^{3+}) = W_z [N(\text{Fe}) - N(\text{Fe}^{2+})]. \quad (4)$$

где концентрация электронов проводимости

$$N_e = \frac{1}{L_x L_y} \int_0^\infty \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (5)$$

Здесь  $\rho(\varepsilon)$  — плотность состояний в зоне проводимости,  $f(\varepsilon)$  — функция распределения Ферми. Чтобы рассчитать концентрацию занятых электронами (нейтральных) доноров

$$N(\text{Fe}^{2+}) = \int_0^\infty \rho_{\text{Fe}}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (6)$$

необходимо знать плотность состояний  $\rho_{\text{Fe}}(\varepsilon)$ . Для основного состояния доноров железа можно принять [7]

$$\rho_{\text{Fe}}(\varepsilon) = N_{\text{Fe}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\text{Fe}}). \quad (7)$$

Для достаточно больших концентраций  $N_{\text{Fe}}$ , присутствующих в КЯ, выражение (7) является грубым приближением, поскольку оно не учитывает как естественное, так и концентрационное уширение уровня. Однако следует заметить, что вычисления, в которых использовалось постоянное значение  $\rho_{\text{Fe}}(\varepsilon)$ , в интервале конечной ширины, практически приводят к тем же результатам, что и выражение (7).

Рассчитанные из уравнения электронейтральности зависимости энергии Ферми  $E_F$  и концентрации электронов проводимости  $N_e$  (рис. 1), как и в случае объемных кристаллов, показывают стабилизацию уровня Ферми и концентрации электронов проводимости в окрестности резонансного донорного уровня. Однако в отличие от объемных кристаллов, где стабилизации  $E_F$  и  $N_e$  имеют место при концентрации ионов железа  $N(\text{Fe}) = 4.5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , в двумерных структурах ситуация существенно иная. Стабилизации наступают, когда уровень Ферми достигнет донорного уровня железа, но концентрация электронов проводимости, при которой это произойдет, зависит в значительной мере от ширины КЯ, иными словами, от положения размерно-квантованного уровня (или уровней) относительно резонансного донорного уровня железа. Если в КЯ реализуется один размерно-квантованный уровень энергии, то концентрация электронов проводимости, при которой будет

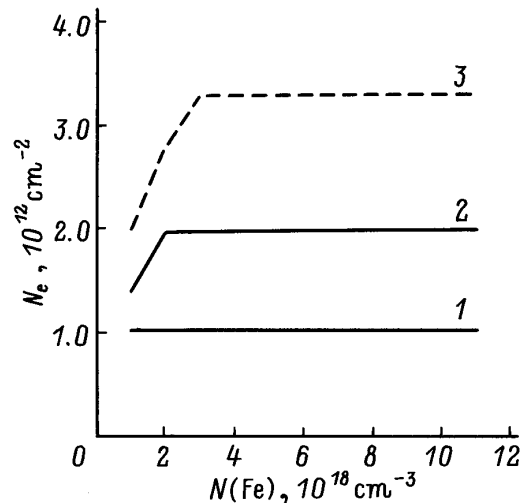


Рис. 1. Зависимость концентрации  $2d$  электронов от содержания железа в КЯ различной ширины  $W, \text{Å}$ : 1 — 50, 2 — 70, 3 — 90.

происходить стабилизация уровня Ферми, определяется выражением

$$N_e = [E_d - E_0] \frac{m}{\pi \hbar^2}. \quad (8)$$

Поскольку пространственные корреляции в системе ионов  $\text{Fe}^{3+}$  тем сильнее, чем больше концентрация нейтральных центров  $\text{Fe}^{2+}$ , т. е. чем больше свободных мест для перераспределения электронов в системе со смешанной валентностью, очевидно, что на степень корреляции, а значит, и на релаксацию импульса  $2d$  электронов должна в значительной мере влиять и ширина КЯ.

## 1. Время релаксации электронов при учете корреляций

Будем рассматривать систему ионов железа  $\text{Fe}^{3+}-\text{Fe}^{2+}$  в КЯ как бинарный сплав, состоящий из заряженных  $\text{Fe}^{3+}$  и нейтральных  $\text{Fe}^{2+}$  центров. Далее мы ограничимся рассмотрением рассеяния электронов только на коррелированно расположенных парах ионов  $\text{Fe}^{3+}-\text{Fe}^{3+}$ , которое представляет наибольший интерес.

Степень пространственных корреляций в системе заряженных ионов железа определяется структурным фактором  $S(\mathbf{q})$ , который зависит от концентрации железа и температуры. Структурный фактор выражается через парную корреляционную функцию  $g(r)$  для ионов  $\text{Fe}^{3+}$  следующим образом [3]:

$$S(q) = 1 + 4\pi N(\text{Fe}^{3+}) \int_0^\infty [g(r) - 1] \frac{r \sin(qr)}{q} dr. \quad (9)$$

Для определения структурного фактора в области сильных кулоновских корреляций необходимо решить нелинейное интегральное уравнение для парной функции

$g(r)$ . Такая задача была решена в приближении Перкуса–Йевики для модельной системы твердых сфер [8]. Расчеты термодинамических и кинетических характеристик сильно коррелированных систем, таких как жидкие металлы и сплавы, выполненные в этом приближении, хорошо согласуются с результатами, полученными методом Монте-Карло. Анализ концентрационной зависимости подвижности показал [2], что имеется полная аналогия между корреляционными свойствами ионов в жидкости и корреляционными свойствами заряженных доноров в HgSe:Fe. Структура и свойства жидкостей определяются при этом в основном отталкивающей частью потенциала ион-ионного взаимодействия [7], который с хорошей точностью может быть аппроксимирован потенциалом твердых сфер.

Выражая структурный фактор  $S(q)$  через фурье-образ прямой корреляционной функции  $C(q)$ , имеем

$$S(q) = \{1 - N(\text{Fe}^{3+})C(q)\}^{-1}, \quad (10)$$

где

$$C(q) = \frac{4\pi d^3}{u^3} \left\{ \left[ \alpha + 2\beta + 4\gamma - \frac{24\gamma}{u^2} \right] \sin u + \left[ \frac{2}{u}(\beta + 6\gamma) - (\alpha + \beta + \gamma)u - \frac{24\gamma}{u^3} \right] \cos u + \frac{24\gamma}{u^3} - \frac{2\beta}{u} \right\}, \quad u = dq, \quad (11)$$

а

$$\alpha = \frac{(1 + 2\eta)^2}{(1 - \eta)^4}, \quad \beta = \frac{6\eta(1 + 0.5\eta)}{(1 - \eta)^4}, \quad \gamma = 0.5\alpha\eta. \quad (12)$$

Здесь  $\eta$  — параметр упаковки, определяющий степень корреляции в расположении твердых сфер

$$\eta = \pi d^3 N(\text{Fe}^{3+})/6.$$

При  $T = 0$  параметр упаковки определяется уравнением, справедливым для случая сильной корреляции ионов  $\text{Fe}^{3+}$  [2]:

$$\eta[N(\text{Fe}^{3+})] = \eta_L \left[ 1 - \exp \left[ \frac{\eta N(\text{Fe})}{\eta_L N(\text{Fe}^{3+})} \right] \right]. \quad (13)$$

Для сильно коррелированной жидкости  $\eta_L = 0.45$ . Неравенство  $\eta \ll 1$  будет соответствовать слабо коррелированному газу, а при  $\eta \rightarrow 0$  совокупность центров рассеяния целиком разупорядочена — при этом  $S(q) = 1$ .

Для вычисления частоты релаксации электронов проводимости  $\tau^{-1}$  при рассеянии их на заряженных коррелированных центрах удобно использовать формализм Кубо–Мори [9] в рамках которого имеем

$$\tau^{-1} = (\mathbf{J}, \mathbf{J}^+)_0^{-1} (\mathbf{J}_V \mathbf{J}_V^+)^{\omega=0}. \quad (14)$$

Здесь  $\mathbf{J}$  — двумерные операторы потока заряда  $2d$  электронов:

$$\mathbf{J} = \sum_k e(\hbar k/m) a_k^+ a_k, \quad \mathbf{J}_V = \frac{1}{i\hbar} [J, H_{eV}], \quad (15)$$

$H_{eV}$  — гамильтониан взаимодействия  $2d$  электронов с трехмерными примесями

$$H_{eV} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u(\mathbf{k}'/\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}},$$

$$u(\mathbf{k}'/\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}'|e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}|\mathbf{k}) \rho_{-\mathbf{q}}. \quad (16)$$

Здесь  $G_{\mathbf{q}}$  — фурье-образ рассеивающего потенциала  $U(\mathbf{r})$ ,  $(A, B)$  — корреляционные функции

$$(A, B(t))^\omega = \int_{-\infty}^0 dt e^{t(\varepsilon - i\omega)} (A, B(t)), \quad \varepsilon \rightarrow +0,$$

$$(A, B(t)) = \int_0^1 d\lambda \langle (A, B(t + i\hbar\beta\lambda)) \rangle_0, \quad \beta^{-1} = T; \quad (17)$$

$T$  — температура, выраженная в энергетических единицах. Индекс 0 у корреляционной функции означает, что она вычисляется в нулевом приближении по взаимодействию с рассеивателями. Вычисляя коммутатор и корреляционные функции, представим выражение для частоты релаксации в следующем виде:

$$\tau^{-1} = \frac{\hbar}{(L_x, L_y)} \frac{N(\text{Fe}^{3+})}{mN_e T} \sum_{\mathbf{q}} q_x^2 S(q) G_{\mathbf{q}}^2 \sum_{\nu\nu'} |\langle \nu' | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \nu \rangle|^2 \times f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) [1 - f(\varepsilon_{\mathbf{k}})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (18)$$

Представляя матричный элемент, входящий в выражение (18), в виде

$$\langle \nu' | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \nu \rangle = \langle \mathbf{k}' | e^{i\mathbf{q}_\perp \mathbf{r}_\perp} | \mathbf{k} \rangle \langle L' | e^{i q_z z} | L \rangle; \quad q_\perp = (q_x, q_y).$$

Далее согласно [10],

$$A_L = \sum_{q_z} |\langle L' | e^{i q_z z} | L \rangle|^2 = L_z \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^4 L(z) dz = 3/2. \quad (19)$$

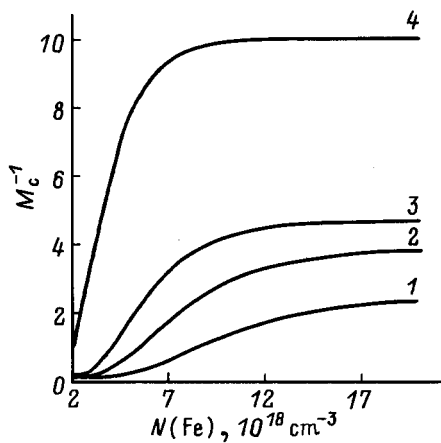
Перейдем от (18) от суммирования по  $q$  и  $k$  к интегрированию, и, учитывая, что в рассматриваемой нами ситуации электронный газ является сильно вырожденным, после несложных вычислений получаем

$$\tau^{-1} = \frac{8\pi N(\text{Fe}^{3+}) W_z m e^4}{\hbar^3 k_F b^2 \chi^2} M_c,$$

$$M_c = \int_0^1 dx \frac{x^2 S(2k_F x)}{\left(x^2 + \frac{Q_s}{2k_F}\right)^2 [1 - x^2]^{1/2}};$$

$$Q_s = \frac{1}{b r_s}, \quad b = 1 + \frac{5W_z}{4\pi^2 r_s}. \quad (20)$$

Здесь  $\tau_s = a_B/2$  — радиус экранирования ( $a_B$  — боровский радиус),  $\chi$  — диэлектрическая постоянная среды.



**Рис. 2.** Зависимость величины  $M_c^{-1}$  ( $\mu \sim M_c^{-1}$ ) от содержания железа в КЯ различной ширины  $W$ , Å: 1 — 90, 2 — 70, 3 — 65, 4 — 55.

Полученное выражение позволяет проанализировать роль и влияние кулоновских корреляций в системе заряженных центров на релаксацию импульса, а следовательно, и на подвижность двумерных носителей заряда.

Результаты численного анализа величины  $M_c \sim \mu^{-1}$  представлены на рис. 2. Как следует из приведенных вычислений, влияние кулоновских корреляций в системе заряженных доноров проявляется сильнее в более узких КЯ. Этот эффект обусловлен тем, что в более узких КЯ размерно-квантованный уровень энергии располагается ближе к донорному уровню железа. Поэтому уровень Ферми, определяемый концентрацией  $2d$  электронов, раньше достигает своего предельного значения ( $E_d = E_F$ ) при увеличении содержания атомов железа в КЯ. Распределение заряженных доноров является при этом хаотическим. При дальнейшем увеличении содержания атомов железа, когда в примесной системе появляются нейтральные атомы железа  $Fe^{2+}$ , начинают проявляться эффекты, обусловленные корреляционным взаимодействием в системе примесей, результатом действия которых является возникновение упорядочения заряженных примесных центров. Появление такого упорядочения приводит к существенному ослаблению рассеяния в системе заряженных ионов железа. Естественно полагать, что этот эффект должен приводить к увеличению подвижности  $2d$  электронов в КЯ. Возрастание подвижности будет иметь место до тех пор пока упорядоченные в примесной системе не достигнет своей предельной величины, которая определяется параметром порядка. Параметр упаковки  $\eta$  в пределе  $N(Fe) \gg N[(Fe^{3+})]$  достигает своего предельного значения  $\eta = 0.45$ . При этом система ионов  $Fe^{3+}$  при большом содержании железа в области низких температур становится подобна жидкости. Рассеяние  $2d$  электронов на коррелированной системе примесей перестает при этом зависеть от содержания железа в КЯ, а подвижность должна достигать своего предельного значения.

Наконец, представляется определенно интересным рассмотреть зависимость времени релаксации от энергии в окрестности уровня Ферми. Знание таких зависимостей оказывается полезным при изучении термомагнитных эффектов в рассматриваемых нами системах. Действительно, термомагнитные эффекты оказываются весьма чувствительными к изменению механизма рассеяния электронов. При этом по знаку эффекта (например, Нернста–Эттингаузена) можно определить доминирующий в данных условиях механизм рассеяния [11].

Расчеты зависимости времени релаксации для систем с различным содержанием железа, а следовательно, и с различной степенью упорядочения в системе заряженных примесных центров показали, что кулоновские корреляции сильно сказываются на зависимости времени релаксации от энергии. В области слабых кулоновских корреляций производная от времени релаксации по энергии оказывается положительной и меняет свой знак при переходе в область сильных корреляций. Такое поведение времени релаксации в окрестности энергии Ферми должно сказаться и на концентрационной зависимости термомагнитных коэффициентов. Более подробно этот эффект мы надеемся рассмотреть в последующих работах.

Итак, анализ времени релаксации двумерных электронов в КЯ, содержащих примеси с переменной валентностью, показал, что наличие сильных кулоновских корреляций в системе примесей со смешанной валентностью, как и в объемных кристаллах, должно приводить к значительному ослаблению рассеяния электронов на них. Этот эффект приводит к увеличению подвижности электронов проводимости в КЯ. Реализующаяся в области сильных кулоновских корреляций зависимость времени релаксации от энергии при низких температурах должна проявляться в необычных зависимостях термомагнитных коэффициентов в зависимости от содержания атомов железа в КЯ.

Работа выполнена при финансовой поддержке ИНТАС (грант 93-3657).

## Список литературы

- [1] C. Skierbisszewski, Z. Wilamowski, J. Kossut. *Semicond. Sci. Technol.*, **8**, S22, (1993).
- [2] И.Г. Куллев, И.И. Ляпилин, И.М. Цидильковский. *ЖЭТФ*, **102**, 1652 (1992).
- [3] И.Г. Куллев, И.И. Ляпилин, А.Т. Лончаков, И.М. Цидильковский. *ЖЭТФ*, **103**, 1447 (1993).
- [4] И.Г. Куллев, И.И. Ляпилин, А.Т. Лончаков, И.М. Цидильковский. *ЖЭТФ*, **106**, 1205 (1994).
- [5] M. von Ortenberg, O. Portugal, W. Dobrowolski, A. Mycielski, R. Galazka, F. Herlach. *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, **21**, 5392 (1988).
- [6] Th. Widmer, D. Shikora, G. Hendorfer, S. Luther, W. Jantsch, K. Lischka, M.v. Ortenberg. *II–VI Compounds and Semimagnetic Semiconductors. 14 Int. Workshop on Semimagnetic Semiconductors (Linz, Austria, 1994)* p. 395.
- [7] F.S. Pool, J. Kossut, U. Debska, R. Reifengerger. *Phys. Rev. B*, **35**, 3900 (1987–1).

- [8] Дж. Займан. *Модели беспорядка* (М., Мир, 1982).  
[9] R. Kubo, J. Miyake, H. Haschitsume. *Sol. St. Phys.*, **17**, 269 (1965).  
[10] K. Vijay, Arora, G. Fawry, Awad. *Phys. Rev. B*, **23**, 5570 (1981).  
[11] И.М. Цидильковский. *Терромагнитные явления в полупроводниках* (М., Наука, 1960).

*Редактор В.В. Чалдышев*

**Influence of impurities with variable valency on transport phenomena in a quantum well**

I.I. Lyapilin

Institute of Metal Physics,  
Ural Branch of Russian Academy of Sciences  
620219 Ekaterinburg, Russia