О смешанной проводимости, включающей квазиметаллическую проводимость по примесной зоне, в легированных полупроводниковых структурах

© Н.В. Агринская[¶], В.И. Козуб, Д.С. Полоскин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 6 августа 2009 г. Принята к печати 7 сентября 2009 г.)

Установлено существование смешанной проводимости в различных структурах GaAs/AlGaAs, возникающей в результате одновременного участия в проводимости разрешенных состояний валентной зоны и делокализованных примесных (акцепторных) состояний. Последние возникают в примесной зоне при большой концентрации примеси вследствие перехода Андерсона. Смешанная проводимость проявляется в наличии минимума в температурных зависимостях концентрации носителей, а также в заметном перегибе температурных зависимостей проводимости. Для расчетов использовались выражения для смешанной проводимости, полученные нами с учетом спектра примесных состояний в квантовых ямах (верхняя и нижняя примесные зоны Хаббарда), их степени заполнения, знаков проводящих носителей в валентной и примесной зонах. Основным использованным предположением являлась малость ширины примесных зон по сравнению с расстоянием до валентной зоны. Результаты расчетов обнаруживают хорошее согласие с экспериментом. Исходя из них были найдены энергии связи для верхней и нижней зон Хаббарда, концентрации акцепторов и степень компенсации. Показано, что широко используемые для расчета смешанной проводимости формулы в случае узких примесных зон требуют существенной корректировки.

1. Введение

Возможность металлической проводимости по примесной зоне, отщепленной от основной проводящей зоны, была продемонстрирована экспериметально для ряда полупроводников. В структурах с квантовыми ямами, учитывая двумерный характер проводимости, можно ожидать, что проводимость имеет выраженный слабо локализованный характер и с понижением температуры убывает по логарифмическому закону. При этом примесная зона может оставаться отщепленной от основной зоны даже при значительных концентрациях примеси [1]. В таких случаях влияние проводящей примесной зоны может сказываться даже при достаточно высоких температурах (T), при которых происходит заметная ионизация примесей. Проводимость в этом случае оказывается смешанной, равной сумме проводимостей носителей в примесной зоне и носителей в разрешенной зоне. Характерным признаком смешанной проводимости является наличие максимума в температурной зависимости коэффициента Холла (минимума холловской концентрации носителей). Этот вопрос обсуждался ранее для объемных полупроводников в работах [2,3], при этом в работе [3] примесные состояния предполагались двукратно вырожденными по спину, а знак проводящих носителей предполагался одинаковым в примесной и разрешенной зонах. Эти предположения могут быть справедливы, если в примесной зоне произошел переход Мотта, сопровождающийся полным перекрытием верхней и нижней зон Хаббарда. При этом примесная зона оказывается заполнена наполовину, а состояния двукратно вырождены. Однако в случае достаточно узких примесных зон (малая степень беспорядка, слабая компенсация, в частности в отсутствие намеренной компенсации) переход металл-диэлектрик может происходить чисто по сценарию Андерсона и не сопровождаться перекрытием нижней и верхней зон Хаббарда. В этом случае конечная проводимость в примесной зоне может быть реализована либо за счет компенсации (хотя бы фоновой), либо за счет частичной ионизации носителей из примесной зоны в разрешенную зону. В условиях высокой степени заполнения примесной зоны токоперенос может осуществляться носителями с другим знаком заряда, чем диктуемый легирующей примесью ("дырки" в примесной зоне). При этом проявления смешанной проводимости в эффекте Холла будут существенно отличаться от предсказываемых теорией, развитой в [3]. Для двумерных структур смешанная проводимость наблюдалась в работе [4], однако при интерпретации результатов использовались те же соображения, что и для объемных полупроводников.

Важно, однако, отметить, что энергетическая схема плотности состояний двумерных легированных структур отличается от таковой для трехмерных систем. В трехмерном случае в соответствии с теоретическими расчетами энергия связи двукратно заполненной мелкой примеси относительно дна зоны проводимости достаточно мала: для акцептора в состоянии A^+ энергия связи $E_{A^+} = 0.055E_{A^0}$ (E_{A^0} — энергия связи изолированной примеси). Таким образом, проводимость по верхней примесной зоне Хаббарда обычно предполагается неконкурентоспособной по сравнению с зонной проводимостью. Иная ситуация может быть реализована в двумерных системах с селективным легированием, где с помощью селективного легирования или с помощью смещения

[¶] E-mail: Nina.agrins@mail.ioffe.ru

Номер образца	Число ям	Ширина ям, нм	Концентрация примеси, см ⁻²	Концентрация носителей p , см ^{-2}	Подвижность, $c_M^2/(\mathbf{B}\cdot\mathbf{c})$	Проводимость, Ом ⁻¹
262	20	10	8 · 10 ¹¹ (ямы и барьеры)	$6\cdot 10^{11}$	200	$1 \cdot 10^{-5}$
185	10	15	9 · 10 ¹¹ (ямы и барьеры)	10 ¹²	250	$5 \cdot 10^{-5}$
264	20	10	1.8 · 10 ¹² (ямы)	$7\cdot 10^{11}$	100	$6\cdot 10^{-6}$
485	5	15	3 · 10 ¹² (ямы)	$3\cdot 10^{12}$	100	$1 \cdot 10^{-5}$

Параметры образцов

Примечание. Значения концентрации носителей, подвижности, проводимости приведены при T = 300 К.

на затворе можно контролируемым образом изменять концентрацию электронов в яме и таким способом менять соотношение между концентрациями акцепторных центров А⁺ и А⁰. В достаточно узких квантовых ямах (когда масштаб волновой функции сравнивается с размером ямы) энергии E_{A^+} и E_{A^0} возрастают с уменьшением ширины ямы. При этом ясно, что этот рост более существен для состояния A⁺, чем для A⁰, в связи со значительно большим радиусом локализации электрона. В случае предельно узкой квантовой ямы энергии Е_{А+} и Е_{А0} возрастают по сравнению с трехмерным случаем соответственно в 10 и в 4 раза. В ямах конечной ширины возможна ситуация, когда энерегия состояния A^+ понижена, а энергия состояния A^0 сохраняет свое прежнее значение, что также может приводить к уменьшению энергии Хаббарда. Это обстоятельство может облегчить наблюдение вклада от верхней хаббардовской зоны и существенным образом сказаться на физических свойствах систем.

В настоящей работе путем экспериментального исследования эффекта Холла и проводимости в легированных квантовых ямах GaAs/AlGaAs были исследованы различные проявления смешанной проводимости. Наша цель заключалась в оценке влияния квазиметаллической проводимости по примесной зоне на температурные зависимости проводимости и эффекта Холла в области достаточно высоких температур, когда существенную роль играет активация носителей в разрешенную зону.

2. Эксперимент

Эксперимент проводился для серии образцов модуляционно-легированных двумерных структур на основе GaAs. Исследуемые структуры были выращены на полуизолирующих подложках GaAs (100) методом молекулярно-пучковой эпитаксии в установке Riber 32P, оснащенной твердотельными источниками Ga, Al, As и Be. Рост проводился в условиях обогащения As при температуре подложки 580°С. Скорость роста составляла ~ 10 нм/мин. Структуры содержали несколько квантовых ям GaAs толщиной 10-15 нм, разделенных барьерами Al_{0 3}Ga_{0 7}As толщиной 25-100 нм. Перед первой и после последней квантовыми ямами были осаждены ограничивающие слои Al_{0.3}Ga_{0.7}As толщиной 100 нм. Эпитаксиальный рост был завершен осаждением покрывающего слоя GaAs толщиной 20 нм. Были исследованы два типа образцов. В образцах первого типа средняя область квантовых ям толщиной 5 нм легирована акцепторной примесью Ве (концентрация Ве от $5 \cdot 10^{17}$ до $1.5 \cdot 10^{18}$ см⁻³). В образцах второго типа с той же степенью легирования легировалась также область барьеров Al_{0.3}Ga_{0.7}As толщиной 5 нм, отстоящая от края барьера на 5 нм. Контакты к образцам выполнялись путем вжигания напыленного золота, содержащего 3% цинка, в течение 2 мин при температуpe 450°C.

Параметры указанных образцов приведены в таблице. Приблизительный ход плотности состояний $N(\varepsilon)$ для двух типов образцов показан на рис. 1, *а*, *b*. Показаны верхняя (A^+) и нижняя (A^0) зоны Хаббарда, положение уровня Ферми ε_F . На рис. 2–5 представлены температурные зависимости двумерной концентрации носителей *p* (полученной из эффекта Холла) и проводимости для упомянутых выше двух типов образцов. Видно, что во всех случаях наблюдается минимум в температурной зависимости концентрации и резкий перегиб в температурной зависимости проводимости в области температур T = 25-40 К. Такое поведение обычно связывается с проявлением смешанной проводимости.

3. Обсуждение

В предыдущей работе [1] нами было показано, что с ростом концентрации примеси в некомпенсированных структурах в центре примесной зоны происходит переход металл—изолятор андерсоновского типа. Это приводит к активационной зависимости проводимости при низких температурах. При достаточно высоких температурах уровень Ферми окажется в области делокализованных состояний, проводимость по примесной





Рис. 1. Ход плотности состояний $N(\varepsilon)$ для двух типов образцов: a — заполнена верхняя зона (A^+ -центры), b — заполнена нижняя зона (A^0 -центры). v — валентная зона.

зоне будет носить квазиметаллический характер и может конкурировать с зонной проводимостью.

Экспериментально переход WL-SL (слабая локализация-сильная локализация) в структурах GaAs/AlGaAs наблюдался при изменении концентрации носителей



Рис. 2. Температурные зависимости концентрации носителей для образцов с A^+ -центрами: точки — экспериментальные данные, полученные из эффекта Холла для образцов 185 и 262; кривые — расчет в соответствии с выражениями (1)–(3) для параметров $E_2 = 13 \text{ мэB}$, $E_1 = 30 \text{ мэB}$, $N_A = 8 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $N_D = 3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, b = 4 (образец 262) и $E_2 = 8 \text{ мэB}$, $E_1 = 30 \text{ мэB}$, $N_A = 9 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $N_D = 2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, b = 4 (образец 185).



Рис. 3. Температурные зависимости проводимости для образцов с A^+ -центрами: точки — экспериментальные данные, кривые — расчет в соответствии с выражениями (1)–(3) с теми же параметрами, что и на рис. 2. Величина подвижности в примесной зоне принята равной 100 см²/(B · c) и не зависящей от температуры.

с помощью модуляционного легирования [5]. Переход проявлялся как изменение температурной зависимости от активационной к более слабой логарифмической, которая следует из скейлинговой теории локализации. Переход должен происходить при концентрации примеси $N \gg N_c$, где N_c — критическая концентрация,



Рис. 4. Температурные зависимости концентрации носителей для образца 264 с A^0 -центрами: точки — экспериментальные данные, полученные из эффекта Холла; кривые — расчет в соответствии с выражением (4) для параметров $E_1 = 25$ мэВ, $N_A = 2 \cdot 10^{12}$ см⁻², $N_D = 4 \cdot 10^{11}$ см⁻², b = 13.



Рис. 5. Температурные зависимости концентрации носителей для образца 485 с A^0 -центрами: точки — экспериментальные данные, полученные из эффекта Холла; кривые — расчет в соответствии с выражением (4) (штриховая) и с выражением (5) (сплошная) для параметров $E_1 = 21 \text{ мэВ}$, $N_A = 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, $N_D = 1 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, b = 11.

определяемая выражением $N_c^{1/2} a \approx 0.15$. Поскольку радиус локализации a для зон A^+ и A^0 различен, следует ожидать, что переход к слабой локализации произойдет при меньшей концентрации примеси в A^+ -зоне. В нашей предыдущей работе [5] было показано, что переход к слабой локализации наблюдался на различных образцах с A^+ -центрами при $N \geq 3 \cdot 10^{17}$ см⁻³ и для случая A^0 -центров при $N \geq 2 \cdot 10^{18}$ см⁻³.

3.1. Результаты для образцов с легированными ямами и барьерами (знак носителей в примесной зоне такой же, как и в основной зоне)

При легировании в равной концентрации центра ям и барьеров начинает заполняться верхняя примесная зона Хаббарда, или A^+ -зона. Степень компенсации $K = N_D/N_A$ в этой зоне может быть большой, около 30–40%, поскольку не все носители из барьеров участвуют в двукратном заполнении примесных центров в яме. Для A^+ -зоны, поскольку K конечна, можно предположить, что общее число носителей, перераспределенных между примесной (концентрация p_2), и основной (концентрация p_1) зонами, является фиксированным.

В этом случае можно использовать общее выражение для смешанной проводимости, аналогичное выражению из статьи [3] в предположении $p_1 + p_2 = N_A - N_D$, где N_A — концентрация всех акцепторов, N_D — число однократно заполненных акцепторов A_0 в A^+ -зоне. Тогда можно получить выражение для измеряемой из эффекта Холла смешанной концентрации n_{cm} :

$$n_{cm} = \frac{(N_A - N_D - p_1 + bp_1)^2}{N_A - N_D - p_1 + b^2 p_1},$$
(1)

где $b = \mu_1/\mu_2$ — отношение подвижностей в основной и примесной зонах.

Соответственно для смешанной проводимости получаем

$$\sigma_{cm} = (p_1 b + N_A - N_D - p_1)\mu_1.$$
 (2)

Величину концентрации носителей в основной зоне p_1 получаем из положения уровня Ферми ε_F . Последний можно вычислить из уравнения нейтральности. Здесь считается, что при этих температурах ионизация может происходить как из верхней, так и из нижней зон Хаббарда. В предположении предельно узких зон имеем

$$N_D + N_\nu \exp(\varepsilon_F/kT) = \frac{N_A}{1 + \exp(\varepsilon_F + E_2)/kT} + \frac{N_A}{1 + \exp(\varepsilon_F + E_1)/kT}.$$
 (3)

Рассчитанные таким образом концентрации носителей в валентной зоне, $p_1 = N_v \exp(\varepsilon_F/kT)$, и в примесной зоне, $p_2 = N_A - N_D - p_1$, показаны на рис. 6. Видно, что полученные зависимости не имеют минимумов, характерных для смешанной проводимости. Далее, зная p_1 и p_2 , проводили расчет для смешанной концентрации носителей и проводимости по формулам (1), (2). Все эти расчеты справедливы в предположении, что ширина примесной зоны много меньше энергии ионизации однократно и двукратно заполненных состояний примеси — E_1 и E_2 соответственно. На рис. 2 представлены результаты расчета температурной зависимости смешанной концентрации носителей p, а также экспериментальные данные для структур с A^+ -центрами. Для структур с шириной ям 10 нм хорошее согласие с экс-



Рис. 6. Температурные зависимости концентрации носителей в валентной зоне $p_1 = N_{\nu} \exp(\varepsilon_F/kT)$ и в примесной зоне $p_2 = N_A - N_D - p_1$, рассчитанные с помощью уравнения (3) для образца 262 ($E_2 = 13$ мэВ, $E_1 = 30$ мэВ, $N_A = 8 \cdot 10^{11}$ см⁻², $N_D = 3 \cdot 10^{11}$ см⁻², b = 4).

периментом было получено для следующих параметров: энергия ионизации примеси $E_2 = 13$ мэВ, концентрация акцепторов $N_A = 8 \cdot 10^{11}$ см⁻², отношение подвижностей b = 4; эти данные согласуются с исходной степенью легирования данных образцов $6 \cdot 10^{11}$ см⁻². На этом же рисунке показаны расчетная и экспериментальная зависимости смешанной концентрации носителей для структур с A^+ -центрами и шириной ям 15 нм. Получены следующие параметры: $E_2 = 8$ мэВ, $N_A = 9 \cdot 10^{11}$ см⁻²; эти данные совпадают с исходной степенью легирования образцов $9 \cdot 10^{11}$ см⁻². Температурные зависимости проводимости (рис. 3) согласуются с расчетными несколько хуже, поскольку мы не учитываем температурный ход подвижности в примесной и разрешенной зонах, который нам не известен.

Проведенные эксперименты и анализ полученных данных позволяют считать, что при определенной концентрации акцепторов в A^+ -зоне происходит переход к металлической проводимости. При этом примесная зона остается отщепленной от валентной зоны, что является особенностью двумерных систем. Энергия связи A^+ -центров уменьшается с уменьшением ширины ямы, что наблюдалось ранее из экспериментов по фотолюминесценции и следует из теоретических расчетов [6,7].

Выражение для расчета смешанной проводимости и эффекта Холла, взятое из работы [3], в данном случае работает, поскольку число A_0 -центров в A^+ -зоне является конечным и составляет ~ 40%. Однако предположение о том, что число уровней в примесной зоне составляет $2N_A$ вследствие спинового вырождения, является неверным. Вместо этого мы в уравнении нейтральности учли возможность ионизации верхней и нижней зон Хаббарда.

3.2. Результаты для образцов с легированными ямами

При легировании только центральной части ям образуется заполненная примесная А⁰-зона, где степень компенсации достаточно мала и определяется наличием случайных примесей (концентрация < 10¹⁶ см⁻³). Делокализованные состояния появляются в этой зоне при концентрации $N > 10^{18} \,\mathrm{cm}^{-3}$ и, следовательно, степень компенсации очень мала: $N_D/N_A < 10^{-1}$. В этом случае для расчетов концентрации носителей в разрешенной зоне используется обычное выражение для слабо компенсированной примеси. При расчете смешанной концентрации из эффекта Холла р_т необходимо понимать, что в полностью заполненной дырками примесной зоне проводящими носителями могут быть как дырки, так и электроны (носители другого знака по сравнению с основными); их число равно $N_D + p_1$, так что выражение для смешанной концентрации изменится следующим образом:

$$p_m = \frac{(N_D + p_1 + bp_1)^2}{b^2 p_1 + N_D + p_1},$$
(4)

495

$$p_m^- = \left| \frac{(N_D + p_1 + bp_1)^2}{b^2 p_1 - N_D - p_1} \right|.$$
 (5)

Выражение (4) справедливо для носителей одного знака, выражение (5) — для носителей разных знаков. Отметим, что выражение (5) может расходиться (стремиться к бесконечности) при равной концентрации электронов и дырок, так что холловская концентрация носителей при некоторых температурах может быть больше, чем при комнатной температуре. На рис. 4,5 приводятся эксперимент и расчет температурной зависимости концентрации носителей и проводимости для различных структур с A⁰-центрами. Для образца 264 с шириной ям 10 нм кривая, полученная из расчета с помощью (4), хорошо описывает экспериментальные данные при следующих параметрах: энергия ионизации A^0 -центров $E_1 = 25$ мэВ, концентрация акцепторов $N_A = 2 \cdot 10^{12} \, \text{см}^{-2}$, отношение подвижностей b = 13(рис. 4); эти данные удовлетворительно согласуются с исходной степенью легирования образцов 9 · 10¹¹ см⁻². Для образца 485 с шириной ям 15 нм экспериментальные данные лучше описываются кривой, полученной из расчета с помощью (5) при следующих параметрах: энергия ионизации A^0 -центров $E_1 = 21$ мэВ, концентрация акцепторов $N_A = 3 \cdot 10^{12} \,\mathrm{cm}^{-2}$, отношение подвижностей b = 10 (рис. 5).

Отметим, что расходимость (5), связанная с появлением носителей другого знака, наблюдается чаще для образцов с широкими ямами (15 нм). При этом нижняя зона не перекрывается с верхней, поскольку энергия Хаббарда $U = E_1 - E_2$ велика (20 мэВ), и проводящими носителями являются электроны. Для образцов с узкими ямами (10 нм) энергия U уменьшается вследствие размерного квантования и составляет 16 мэВ. Здесь может происходить перекрытие хвостов плотности состояний верхней и нижней зон, при этом число появившихся A^+ -центров равно числу оставшихся пустыми A^- -центров (своеобразная самокомпенсация). Проводящими носителями могут быть дырки, переходящие с состояний A^0 на A^- .

Видно, что в образцах с заполненной нижней зоной Хаббарда смешанная проводимость наблюдается при бо́льших концентрациях примеси, чем для образцов с A^+ -зоной, поскольку состояния в нижней зоне оказываются более локализованными, и переход к делокализации происходит при большей концентрации. Наиболее сильно легированные образцы уже не обнаруживают характерного минимума в температурной зависимости проводимости, поскольку обе примесные зоны сливаются (переход Мотта) и перекрываются с разрешенной зоной.

4. Заключение

В работе показано наличие смешанной проводимости в различных структурах GaAs/AlGaAs, возникающей в результате одновременного участия в проводимости разрешенных состояний валентной зоны и делокализованных примесных состояний. Последние возникают в примесных зонах при большой концентрации примеси вследствие произошедшего там перехода Андерсона. Это проявляется в наличии минимума в температурных зависимостях концентрации носителей, а также в заметном перегибе температурных зависимостей проводимости.

Расчеты показали хорошее согласие с экспериментом, из них были найдены энергии связи для верхней и нижней зон Хаббарда, концентрации акцепторов и степень компенсации. Показано, что величина энергии связи двукратно заполненного акцептора зависит от ширины ямы и составляет 12 мэВ для образцов с ямами 10 нм и 8 мэВ для образцов с ямами 15 нм.

Расчеты проводились с использованием известных выражений для смешанной проводимости [3], однако эти выражения потребовали корректировки, поскольку спиновое вырождение (предполагавшееся в [3]) не имеет места в отсутствие перекрытия верхней и нижней зон Хаббарда. В наших расчетах мы исходили из предположения, что ширина примесной зоны заметно меньше, чем расстояние до валентной зоны. Указанное предположение особенно уместно для двумерных структур.

Важно отметить, что для более широких примесных зон существенную роль может играть энергетическая зависимость плотности состояний в зонах, которая не учитывалась в данной работе.

Авторы благодарны за поддержку фонду РФФИ (грант № 06-02-17068).

Список литературы

- H.B. Агринская, В.И. Козуб, Д.С. Полоскин. Письма ЖЭТФ, 85, 202 (2007).
- [2] D.A. Woodbury, J.S. Blakemore. Phys. Rev. B, 8, 3803 (1973).
- [3] О.В. Емельяненко, Т.С. Лагунова, Д.В. Наследов. ФТТ, 7, 1315 (1965).
- [4] H.G. Svavarsson, J.T. Gudmundsson, H.P. Gislason. Phys. Rev. B, 67, 205 213 (2003).
- [5] Н.В. Агринская, В.И. Козуб, Д.С. Полоскин, А.В. Черняев, Д.В. Шамшур. Письма ЖЭТФ, 80, 36 (2004).
- [6] Н.В. Агринская, Ю.Л. Иванов, П.В. Петров, В.М. Устинов. Sol. St. Commun., 126, 369 (2003).
- [7] Н.С. Аверкиев, А.Е. Жуков, Ю.Л. Ива́нов, П.В. Петров, К.С. Романов, А.А. Тонких, В.М. Устинов, Г.Э. Цырлин. ФТП, 38, 222 (2004).

Редактор Л.В. Шаронова

On the mixed conductivity including quasi-metal conductivity over the impurity band in doped semiconductor structures

N.V. Agrinskaya, V.I. Kozub, D.S. Poloskin

loffe Physicotechnical Institute Russian Academy of Sciences, 194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The paper reports an existence of mixed conductivity in different structures GaAs/AlGaAs resulting from combined contributions to the conductivity of the allowed states corresponding to the valence band and of the delocalized impurity (acceptor) states. The latter exists in the impurity bands at large impurity concentrations due to Anderson transition. The mixed conductivity manifests itself in a presence of temperature minimum of carrier concentration and also in significant inflection of conductivity temperature curves. We have used the expressions for the mixed conductivity obtained with an account of the character of the spectrum of the impurity states in quantum wells (including upper and lower Hubbard bands), of their occupation degree and of the signs of carriers in the valence and impurity bands. The basic assumption was that the width of the impurity band was smaller than the distance to the valence band. The results of the calculations demonstrate a good agreement with experiment. Basing on these calculations we have found the binding energies for the upper and lower Hubbard bands, acceptor concentration and degree of compensation. It is shown that widely used equation for the mixed conductivity needs a significant modification for the case of narrow impurity bands.