

03,08

Температурные особенности электросопротивления 2D-электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов в тонких легированных слоях

© В.М. Михеев

Институт физики металлов УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

E-mail: mikheev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 12 апреля 2011 г.)

В модели жестких сфер на плоскости рассмотрены пространственные корреляции примесных ионов в тонких легированных слоях при конечных температурах. Показано, что в системах с отдельным легированием корреляции в расположении примесных ионов ослаблены тепловым движением электронов при достаточно низких температурах (ниже гелиевых). Изучены температурные зависимости электрического сопротивления вырожденных 2D-электронов в гетероструктурах с отдельным легированием на примере $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Работа выполнена по плану РАН (шифр „Электрон“ № гр. 01.2.006 13395).

1. Введение

В системе частично ионизированных примесных центров корреляции в расположении примесных ионов в состоянии термодинамического равновесия зависят от степени ионизации примесных центров и температуры системы. В гетероструктурах с отдельным легированием степень ионизации примесных центров в легированном слое можно менять, изменяя концентрацию электронов в проводящем слое. Экспериментально эти корреляции могут проявиться в электронной подвижности при рассеянии электронов на примесных ионах. Теоретически концентрационные зависимости подвижности 2D-электронов изучались с применением численных методов в работах [1–4]. В наших работах корреляционные эффекты и их влияние на электронную подвижность изучаются аналитическими методами в модели жестких сфер. В этой модели объемная концентрация примесных ионов n_d отождествляется с концентрацией жестких сфер, а минимальное расстояние между ионами r_c — с диаметром жесткой сферы. В рамках принятой модели при изучении пространственных корреляций в легированных слоях необходимо выделить и рассмотреть два случая.

В работах [5,6] изучались пространственные корреляции примесных ионов в достаточно широких легированных слоях, для которых ширина слоя W_d больше корреляционной длины r_c ($r_c < W_d$). Вычисления производились в рамках стандартной модели жестких сфер, распределенных в объеме. В принятой модели жестких сфер корреляции в системе примесных ионов описываются коэффициенты упаковки $\eta = \frac{\pi}{6} n_d^+ r_c^3$. При уменьшении концентрации электронов проводимости в квантовой яме электроны переходят на примесные центры в легированном слое, при этом корреляции в распределении примесных ионов возрастают. Соответ-

ственно подвижность 2D-электронов при рассеянии на ионизированных примесях также возрастает.

В работе [7] рассматривались гетероструктуры с тонким легированным слоем ($W_d < r_c$) в предельном случае низких температур ($T = 0$). Для этого случая нами был развит вариант модели жестких сфер, центры которых лежат на плоскости. При этом корреляции в распределении примесных ионов описываются коэффициентом упаковки $\eta^s = \frac{\pi}{6} N_d^+ r_c^2$, где N_d^+ — поверхностная плотность примесных ионов.

В нашей модели при $T = 0$ реализуется состояние, в котором примесные ионы расположены как можно дальше друг от друга. При этом минимальное расстояние между ионами r_c зависит лишь от значений концентраций N_d и N_d^+ . При конечных температурах система примесных ионов в состоянии термодинамического равновесия „размазана“ по состояниям со всеми возможными значениями параметра r_c . Поэтому в случае конечных температур эффекты, связанные с корреляциями в расположении примесных ионов, будут ослаблены. Тем не менее, согласно нашим расчетам, температурные зависимости вырожденных 2D-электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов могут быть весьма существенны. Данная работа посвящена изучению влияния температуры на подвижность вырожденных 2D-электронов в гетероструктурах с отдельным легированием на примере $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

2. Подвижность 2D-электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов

Подвижность вырожденных 2D-электронов при рассеянии на заряженных примесных центрах вычисляется в приближении времени релаксации по простым

формулам, впервые полученным Стерном и подробно описанным в обзоре Андо и Стерна [8]:

$$\mu^{-1} = \frac{m}{e} \int_0^{2\pi} d\theta (1 - \cos\theta) \frac{1}{\tau^0(\theta)} S(q)$$

$$(q = 2k \sin \theta/2)$$

$$\frac{1}{\tau^0(0)} = \frac{2\pi m e^4}{\hbar^2 \bar{\kappa}^2} \frac{P_0^2(q)}{D^2(q)} e^{-2qW} \int_0^{W_d} n_d^+(-z - W) e^{-2qz} dz.$$

(1)

Здесь m , e — масса и заряд электрона, $\tau^0(\theta)$ — время релаксации импульса электрона при рассеянии на хаотическом распределении примесных центров, n_d^+ — объемная плотность примесных ионов, $S(q)$ — структурный фактор. Формула (1) отличается от формулы Стерна наличием структурного фактора. В случае хаотического распределения примесных ионов [8] структурный фактор $S(q) = 1$.

$$P_0(q) = b^3 (b + q)^{-3}$$

$$D(q) = q + q_s P_{av}(q) + q_s \delta P_0^2(q)$$

$$P_{av}(q) = (8b^3 + 9b^2q + 3bq^2)(b + q)^{-3}/8$$

$$\delta = \frac{\kappa_{sc} - \kappa_{ins}}{\kappa_{sc} - \kappa_{ins}} = \frac{\kappa_{sc} - \kappa_{ins}}{2\bar{\kappa}}. \quad (2)$$

Эффективный параметр экранирования $q_s = \frac{2me^2}{\kappa_{sc}\hbar^2}$, характерный размер волновой функции электрона в перпендикулярном направлении к проводящему слою b^{-1} :

$$b = \left[\frac{48\pi m e^2}{\kappa_{sc}} \left(N_{depl} + \frac{11}{32} N_s \right) \right]^{1/3}, \quad (3)$$

где N_{depl} — поверхностная плотность неподвижных зарядов в обедненном слое, N_s — поверхностная плотность 2D-электронов, κ_{sc} , κ_{ins} — диэлектрические проницаемости проводящего слоя и изолятора. В рассматриваемом случае вырожденного электронного газа $k_F = (2\pi N_s)^{1/2}$. Формулы для подвижности 2D-электронов (1) широко используются при учете влияния корреляций в распределении примесных ионов на электронную подвижность [1–4].

Корреляции в распределении примесных ионов учтены в формуле (1) для подвижности электронов через структурный фактор

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N_{tot}^+} \left\langle \sum_{i,j} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \right\rangle.$$

Здесь N_{tot}^+ — полное число примесных ионов в слое, вектор $\mathbf{r}_i = \{x_i, y_i, 0\}$ характеризует положение i -того иона на плоскости, вектор рассеяния электрона $\mathbf{q} = \{q_x, q_y, 0\}$. Конфигурационное среднее от суммы можно вычислить с помощью корреляционной функции.

В случае распределения шаров на плоскости [7]

$$S(q) = 1 + N_d^+ \int d\mathbf{r} g(r^* e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}),$$

$$g(r^*) = \tilde{g}(r^*) - 1,$$

$$\tilde{g}(r^*) =$$

$$= \begin{cases} 0, & r^* < 1, \\ 1 + \eta^s \left[6 - \frac{12}{\pi} \arcsin \frac{r^*}{2} - \frac{3}{\pi} \sqrt{4r^{*2} - r^{*4}} \right], & 1 < r^* < 2, \\ 1, & 2 < r^*, \end{cases} \quad (4)$$

где $\eta^s = \frac{\pi}{6} N_d^+ r_c^2$, $r^* = r/r_c$.

В работе [7] мы вычислили парную корреляционную функцию для распределения жестких сфер на плоскости $\tilde{g}(r^*)$, используя вириальные разложения, справедливые в случае объемных распределений шаров [9]. В этом формализме члены разложения нулевого порядка содержат группы шаров по два, а члены разложения первого порядка — группы шаров по три. Таким образом, центры шаров, принадлежащих этим группам, всегда лежат в одной плоскости. Следовательно, вириальное разложение до членов первого порядка включительно дает универсальное выражение для парной корреляционной функции. Это выражение пригодно для описания коррелированных распределений как в объеме, так и на плоскости. Поэтому при модельном описании корреляций в системе ионов мы ограничились членами вириального разложения до первого порядка включительно.

Приближенные вычисления, произведенные по формулам (4), приводят к следующему аналитическому выражению для структурного фактора [7]:

$$S(q) = 1 + S_1(q) + S_2(q),$$

$$S(0) = 1 - 6\eta^s + 14.7\eta^{s2},$$

$$S_1(q) = -12\eta^s \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{q^2 r_c^2}{4} \right)^k \frac{1}{(k!)^2}$$

$$\times \left[\frac{1}{2(k+1)} + \frac{a\eta^s}{2(k+2)} + \frac{b\eta^s}{2k+3} + \frac{c\eta^s}{2(k+1)} \right],$$

$$S_2(q) = 12\eta^s \sum_{k=0}^{\infty} (-q^2 r_c^2) \frac{1}{(k!)^2} \left[\frac{8a\eta^s}{k+2} + \frac{8b\eta^s}{2k+3} + \frac{2c\eta^s}{k+1} \right],$$

$$a = 1.13; \quad b = -5.83; \quad c = 7.06. \quad (5)$$

Постоянные a , b , c появились в результате приближения корреляционной функции полиномами.

Согласно [7], уравнение для определения коэффициента упаковки шаров, распределенных на плоскости, имеет вид

$$N_d^+ = N_d \exp S_0(\eta^s)/k_B,$$

$$S_0 = -\frac{\partial F}{\partial T} = -[3\eta^s + 4\eta^{s2}]k_B,$$

$$\eta^s = \frac{\pi}{6} N_d^+ r_c^2, \quad (6)$$

где S_0 — конфигурационный вклад в энтропию системы примесных ионов, рассчитанный на один ион,

N_d^+ , N_d — поверхностные плотности ионизированных доноров и доноров, распределенных в тонком легированном слое.

3. Пространственные корреляции примесных ионов в тонком легированном слое при конечных температурах

При конечных температурах тепловое движение электронов в примесной зоне „размывает“ корреляции. Для того чтобы учесть влияние теплового движения на корреляции в расположении примесных электронов, необходимо заменить выражение для структурного фактора (5) его термодинамическим средним. Формально наша задача сводится к вычислению термодинамического среднего структурного фактора $\langle S(q, n_d^+, r_c) \rangle_T$. Структурный фактор усредняется по всем значениям, которые может принимать параметр r_c при заданной концентрации доноров N_d и концентрации примесных ионов N_d^+ . В низкотемпературном пределе ($T = 0$) перераспределение электронов между примесными центрами приводит к установлению значения параметра $r_c = r_c^0$, которое определяется формулами (6). С ростом температуры растет вероятность сближения примесных дырок на расстояния, меньшие r_c^0 . Вероятность обнаружения системы примесных ионов в конфигурации с заданным значением параметра r_c из интервала значений $0 < r_c < r_c^0$ дается выражением [10]

$$\exp[-\Delta E + T\Delta S - P\Delta V]/k_B T,$$

где ΔE , ΔS , ΔV — изменение внутренней энергии, конфигурационной энтропии, объема системы при изменении термодинамического параметра от нуля до заданного значения r_c . Факторизация этого выражения приводит к формуле для термодинамического среднего произвольной функции $F(r_c)$ [11]

$$\langle F(r_c) \rangle_T = \int_0^{r_c^0} F(r_c) W(r_c) dr_c / \int_0^{r_c^0} W(r_c) dr_c$$

$$W(r_c) = \exp \left[\frac{S_0(r_c)}{k_B} - \frac{\varepsilon_c(r_c)}{k_B T} \right]. \quad (7)$$

Здесь $S_0(r_c)$ — конфигурационная энтропия системы примесных ионов, приходящаяся на ион, а $\varepsilon_c(r_c)$ — энергия корреляции системы примесных ионов, приходящаяся на ион. В модели твердых шаров конфигурационная энтропия вычисляется по формуле (6). Энергию корреляции для объемного распределения примесных ионов можно вычислить по стандартной формуле [9]

$$\varepsilon_c(r_c) = \frac{n_d^+}{2} \int dr' V(r') g_{12}(r'). \quad (8)$$

Здесь $\mathbf{r}' = \{\mathbf{r}, z\}$. Напомним, что парная корреляционная функция, входящая под интеграл в формуле (8), опреде-

лена таким образом, что в случае хаотического распределения примесных центров $g_{12}(r') = 0$.

Вычисление корреляционной функции $g(r)$ произведено нами в модели жестких сфер. Очевидно, что при вычислении энергии корреляции необходим более точный учет взаимодействия между ионами. В нашем случае гетероструктуры с раздельным легированием выбранный нами модельный потенциал $V(r')$ описывает кулоновское взаимодействие между примесными ионами легированного слоя вблизи проводящего (слоя, заполненного двумерными электронами).

Для того чтобы избежать громоздких выкладок, в предыдущей работе [5] мы ограничились рассмотрением простого случая, когда толщина легированного слоя много меньше толщины спейсера

$$W_d \ll W.$$

При выполнении этого условия можно считать, что примесные ионы распределены по плоскости $\{x, y\}$, и описать взаимодействие между примесными ионами двумерным потенциалом

$$V(r) = \frac{e^2}{\kappa} \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{\sqrt{r^2 + 4w^2}} \right]. \quad (9)$$

Энергию корреляции $\varepsilon_c(r_c)$ удобно вычислять в Фурье-представлении

$$\varepsilon_c(r_c) = \frac{1}{4} \int dq q V_q (S_q - 1). \quad (10)$$

В (10) структурный фактор S_q определяется формулами (5), а Фурье-образ потенциала взаимодействия примесных ионов $V(r)$ имеет вид

$$V_q = \frac{2\pi e^2}{\kappa q} (1 - e^{-2wq}). \quad (11)$$

Формулы (5), (10), (11) позволяют вычислить энергию корреляции примесных ионов в тонком легированном слое ($W_d < r_c$), но при этом накладывается дополнительное ограничение на ширину спейсера ($W_d < W$). В работе [5] мы вычислили энергию корреляции по формулам (10), (11), считая, что примесные ионы распределены по плоскости (x, y) . Принятое в работе [5] приближение в случае узкого спейсера ($W < W_d$) приводит к большой погрешности, которая может составить десятки процентов. Поэтому в данной работе мы отступили от этого приближения и учли толщину легированного слоя W_d . При учете толщины легированного слоя, уточненное таким образом выражение для энергии взаимодействия примесных ионов примет вид

$$V(r) = \frac{e^3}{\kappa} \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{\sqrt{r^2 + 4(W+z)^2}} \right]. \quad (12)$$

В Фурье-представлении

$$V_q = \frac{2\pi e^2}{\kappa q} \left[1 - \frac{1}{2W_d q} e^{-2wq} (1 - e^{-2W_d q}) \right]. \quad (13)$$

При низких температурах роль фононов в рассеянии электронов пренебрежимо мала. В этих условиях температурная зависимость электронной подвижности всецело определяется структурным фактором

$$\mu(T)^{-1} = \frac{m}{e} \int_0^{2\pi} d\theta (1 - \cos \theta) \frac{1}{\tau^0(\theta)} \langle S(q) \rangle_T \quad (14)$$

$$(q = 2k \sin \theta/2).$$

Здесь $\langle S(q) \rangle_T$ — термодинамическое среднее структурного фактора, вычисленное по формуле (7).

4. Аномалии температурной зависимости электронной подвижности при низких температурах

В нашей теории концентрация электронов в квантовой яме и концентрация примесных ионов связаны простейшим соотношением [3]

$$N_d^+ = N_{\text{depl}} + N_s. \quad (15)$$

В случае тонкого легированного слоя, когда $W_d < r_d$, при вычислении интеграла $\int_0^{W_d} n_d^+(-z - W) e^{-2qz} dz$ в формуле (1) мы положили $n_d^+(z) = \text{const}$. Для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ масса электрона $m = 0.07m_0$; диэлектрическая проницаемость $\bar{\kappa} = 12.55$; $\delta = \frac{\kappa_{\text{sc}} - \kappa_{\text{ins}}}{\bar{\kappa}} = 0$.

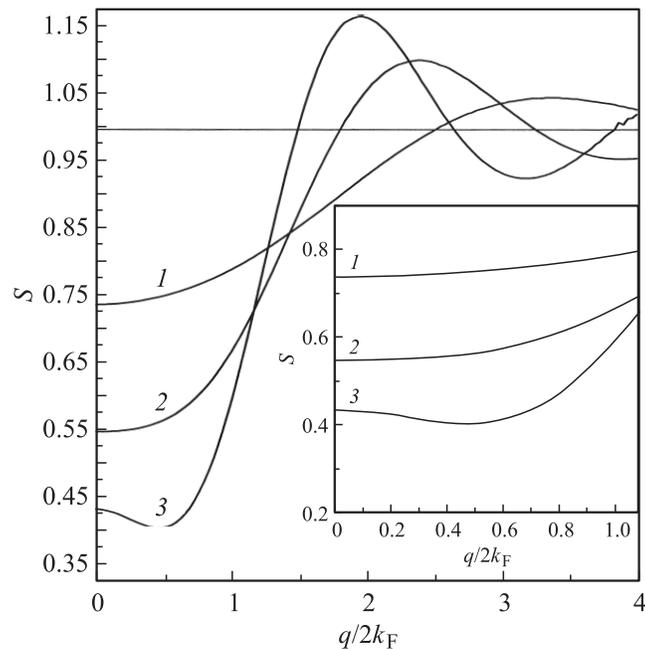


Рис. 1. Структурный фактор электронов при рассеянии на электронах, распределенных на плоскости [7]. Кривые 1, 2, 3 соответствуют значениям коэффициента упаковки $\eta = 0.05, 0.1, 0.15$.

Согласно расчетам, произведенным в работе [7] (рис. 1), структурный фактор $S(q)$ чрезвычайно слабо изменяется в интервале значений $0 < q < 2k_F$. Поэтому при интегрировании по углам в формуле (14) мы пренебрежем зависимостью структурного фактора от вектора рассеяния и заменим $S(q, \eta, T) = \langle S(q, \eta) \rangle_T$ на $S(0, \eta, T) = \langle S(0, \eta) \rangle_T$. В этом приближении подвижность 2D-электронов следует рассчитывать по формуле

$$\mu(T)^{-1} = \frac{m}{e} \langle S(0) \rangle_T \int_0^{2\pi} d\theta (1 - \cos \theta) \frac{1}{\tau^0(\theta)} \quad (16)$$

$$(q = 2k \sin \theta/2).$$

Согласно формуле (16), отношение сопротивления 2D-электронов при рассеянии на коррелированном распределении примесных ионов $\rho^{\text{corr}}(T)$ к удельному сопротивлению 2D-электронов при рассеянии на хаотическом распределении примесных ионов $\rho^{\text{non}}(T)$ равно $S(0, T)$ — структурному фактору, вычисленному в точке $q = 0$,

$$\frac{\rho^{\text{corr}}(T)}{\rho^{\text{non}}(T)} = \langle S(0) \rangle_T = S(0, T).$$

Электросопротивление вырожденных 2D-электронов при низких температурах, при которых можно пренебречь рассеянием на фононах, зависит от температуры только через температурную зависимость структурного фактора. Поэтому при рассеянии на хаотическом распределении примесных ионов, когда $S = 1$, удельное сопротивление электронов не зависит от температуры: $\rho^{\text{non}}(T) = \text{const}$. В этом случае справедливо соотношение

$$\frac{\rho^{\text{corr}}(T)}{\rho^{\text{corr}}(T_0)} = \frac{S(0, T)}{S(0, T_0)}. \quad (17)$$

Полученная нами формула (17) является основной в наших расчетах, поскольку связывает отношение экспериментально наблюдаемых величин с отношением структурных факторов. Если измеряется температурная зависимость электросопротивления, то T_0 — произвольно выбранное значение температуры из заданного интервала температур, в котором производятся измерения. Формулы (5)–(7), (10), (13), (17) позволяют учесть влияние теплового движения электронов на корреляции в системе примесных ионов и вычислить температурные зависимости электросопротивления 2D вырожденных электронов. Численный анализ проводится на примере систем с теми же параметрами, что и в случае $T = 0$ [7]. Результаты расчетов представлены на графиках.

На рис. 2 представлена зависимость энергии корреляции в системе примесных ионов ε_c от коэффициента упаковки η , вычисленная по формулам (5), (6), (10), (13). Вычисления проведены для гетероструктуры с параметрами концентрации доноров $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 10^{-7} \text{ cm}$, концентрация

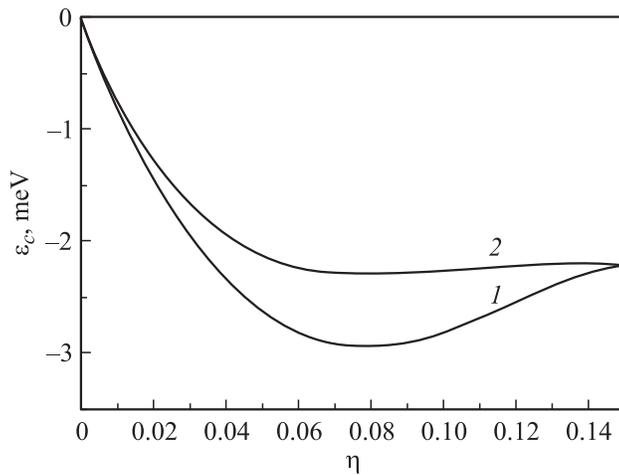


Рис. 2. Зависимость энергии корреляции ε_c от коэффициента упаковки η . Кривая 1 — изменение энергии корреляции при переходе электронов из проводящего слоя гетероструктуры в легированный слой. Кривая 2 — энергия корреляции неравновесного состояния системы примесных ионов при фиксированном значении концентрации электронов в проводящем слое. Концентрация доноров $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 10^{-7} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 100 \text{ \AA}$.

зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 100 \text{ \AA}$. В модели жестких сфер коррелированное состояние системы примесных ионов задается двумя параметрами: диаметром жесткой сферы r_c и концентрацией жестких сфер N_d^+ . Поэтому коррелированное состояние системы примесных ионов в модели жестких сфер задается любой парой независимых величин, которые являются функциями пары параметров r_c и N_d^+ . В расчетах, результаты которых представлены на рис. 2, коррелированное состояние в системе примесных ионов задается двумя независимыми параметрами: коэффициентом упаковки η и концентрацией примесных ионов N_d^+ .

В нашей модели при $T = 0$ в равновесном состоянии примесные ионы максимально удалены друг от друга. На рис. 2 кривая 1 представляет равновесные состояния системы примесных ионов, которые возникают при перемещении электронов из квантовой ямы в легированный слой, что и приводит к уменьшению концентрации донорных ионов N_d^+ (коэффициент упаковки и концентрация донорных ионов связаны между собой уравнениями (6)). Согласно нашим расчетам, энергия корреляции, взятая по модулю, $|\varepsilon_c|$ сначала возрастает с ростом η , затем проходит через максимум и начинает убывать. Этот типичный ход кривой 1 связан с тем, что, согласно формуле (10), энергия корреляции зависит от произведения двух величин, одна из которых связана со структурным фактором $(S_q - 1)$, а вторая — представляет собой Фурье-образ энергии взаимодействия примесных ионов V_q . Скорость роста первого множителя, взятого по модулю, замедляется с ростом η (см. графики

на рис. 1), а второй множитель V_q убывает, поскольку с уменьшением концентрации примесных ионов уменьшается энергия взаимодействия между ионами. Игра этих двух факторов приводит к немонотонному ходу кривой $\varepsilon_c(\eta)$.

В работе [7] представлены концентрационные зависимости электропроводности 2D-электронов на примере $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ в предельном случае $T = 0$. Рассмотрим температурные зависимости электросопротивления 2D-электронов для тех же систем в частном случае, когда фиксирована концентрация электронов в квантовой яме при значении, соответствующем значению коэффициента упаковки $\eta = 0.15$. Для подобных расчетов необходимо использовать функции $\varepsilon_c(\eta)$, полученные по образцу кривой 2 (рис. 2), которая вычислена при фиксированном значении концентрации примесных ионов. Крайняя точка на кривой 2, соответствующая значению коэффициента упаковки $\eta = 0.15$, отвечает равновесному состоянию системы примесных центров с концентрациями $N_d = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $N_d^+ = 5.8 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ при $T = 0$. Все прочие состояния, соответствующие значениям $0 < \eta < 0.15$, вычислены при фиксированном значении $N_d^+ = 5.8 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Любое из этих состояний реализуется при конечных температурах с вероятностью $W(r_c)$ (7). В равновесном состоянии при конечных температурах система примесных ионов „размазана“ по неравновесным состояниям, которые представлены точками на кривой 2 (рис. 2). Заметим, что кривая 2 лежит выше, чем кривая 1, поскольку точкам кривой 2 отвечают состояния с меньшими значениями N_d^+ и, следовательно, с меньшими энергиями взаимодействия между примесными ионами.

На рис. 3 и 4 представлены значения структурного фактора в точке $q = 0$ при конечных темпера-

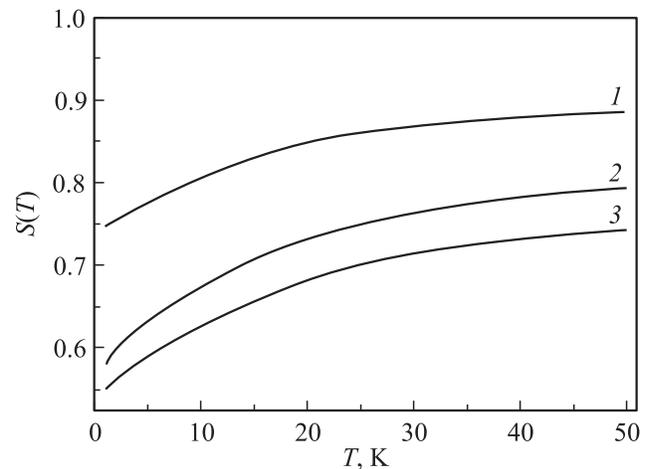


Рис. 3. Зависимость структурного фактора при $q = 0$ $S(T) = \langle S(0, n_d^+, r_c) \rangle_T$ от температуры. Кривая 1 — $\eta = 0.05$, кривая 2 — $\eta = 0.1$, кривая 3 — $\eta = 0.15$. Концентрация доноров $n_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 10^{-6} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 500 \text{ \AA}$.

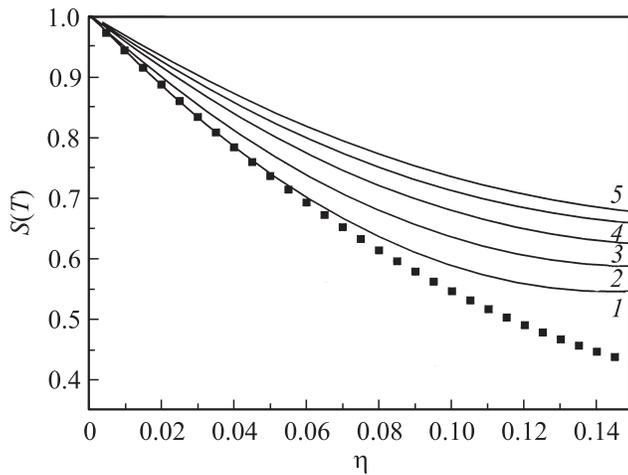


Рис. 4. Зависимость структурного фактора в точке $q = 0$ $S(T) = \langle S(0, n_d^+, r_c) \rangle_T$ от коэффициента упаковки η при фиксированной температуре. Сплошные линии соответствуют значению температуры: 1 — $T = 1$ К; 2 — $T = 5$ К; 3 — $T = 10$ К; 4 — $T = 15$ К; 5 — $T = 20$ К. Квадраты соответствуют предельному случаю $T = 0$. Концентрация доноров $n_d = 10^6 \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 10^{-6} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 500 \text{ \AA}$.

турах $\langle S(0) \rangle_T = S(T)$. Вычисления проведены для гетероструктуры со следующими параметрами: концентрация доноров $n_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 10^{-6} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 500 \text{ \AA}$. На рис. 3 изображены температурные зависимости $S(T)$ при фиксированных значениях коэффициента упаковки: $\eta = 0.05$ (кривая 1), $\eta = 0.1$ (кривая 2), $\eta = 0.15$ (кривая 3). Ход расчетных кривых легко понять из простых рассуждений (см. рис. 2). При $T = 0$ система ионов находится в состоянии с фиксированным значением коэффициента упаковки. С ростом температуры система „размазывается“ по состояниям со значениями коэффициента упаковки, меньшими этого фиксированного значения. При этом степень порядка в системе ионов уменьшается, а значение структурного фактора возрастает (при хаотическом распределении примесных ионов $S = 1$). Фактически при температуре $T > \Delta \varepsilon_c$ система ионов окажется равномерно „размазанной“ по соответствующему интервалу состояний $\Delta \eta$. При температуре $T > \varepsilon_c$ система ионов окажется более или менее равномерно „размазана“ по всем возможным состояниям системы. При таких температурах величина $S(T)$ достигает значения, близкого к своему максимальному, и фактически перестанет меняться при дальнейшем увеличении температуры. Изменения структурного фактора при нагревании системы примесных ионов невелики. Согласно нашим расчетам, представленным на рис. 3, эти изменения составляют 20% при фиксированном значении $\eta = 0.05$ и 40% — при фиксированном значении $\eta = 0.15$. Вероятность найти систему ионов в

заданном состоянии $W(r_c) = \exp \left[\frac{S_0(r_c)}{k_B} - \frac{\varepsilon_c(r_c)}{k_B T} \right]$ зависит от свободной энергии системы. Однако, поскольку конфигурационная энтропия системы очень слабо меняется при изменении параметра η по сравнению с изменением энергии корреляции, то для интерпретации результатов вычислений достаточно анализа кривых $\varepsilon_c(\eta)$.

На рис. 4 сплошными линиями представлены результаты расчетов структурного фактора при конечных температурах. Значения структурного фактора в предельной точке $T = 0$ изображены квадратами. Заметим, что уже при температурах $T = 1$ К значения структурного фактора существенно отличаются от их значений в предельной точке $T = 0$. В точке $\eta = 0.15$ при $T = 1$ К значения структурного фактора разнятся на 25% от его значения при $T = 0$, а при температуре $T = 20$ К различие составляет 60%. Таким образом, в гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ корреляции в расположении примесных ионов сильно „замываются“ тепловым движением электронов уже при очень низких температурах. При этом, согласно рис. 4, температурные аномалии в подвижности вырожденных 2D-электронов, связанные с корреляциями, на экспериментах могут достигать вполне ощутимых, но не очень больших величин (порядка нескольких десятков процентов). Эти особенности температурных аномалий подвижности электронов находят свое обоснование в анализе кривой $\varepsilon_c(\eta)$ на рис. 2, каждая точка которой соответствует одному из возможных состояний системы примесных ионов. При этом крайняя правая точка на кривой 2 соответствует состоянию, в котором примесные ионы максимально удалены друг от друга. Существенно, что в достаточно широком интервале значений $0.05 < \eta < 0.15$ энергия корреляции чрезвычайно слабо зависит от коэффициента упаковки. Действительно, в указанном интервале значений η с уменьшением расстояния между примесными ионами уменьшает свое значение величина $(S_q - 1)$ и увеличивает свое значение величина V_q , так что их произведение, входящее в выражение (10) для энергии корреляции, фактически остается постоянным при изменении параметра η . Именно в силу этого корреляции в расположении примесных ионов будут сильно „замыты“ тепловым движением электронов при температурах ниже гелиевых.

На рис. 5–10 приведены результаты расчетов для электросопротивления вырожденных 2D-электронов $\rho(T)/\rho(T = 1 \text{ K})$. Расчеты производились для гетероструктур с теми же параметрами, что в работе [7]. При этом параметры выбирались таким образом, чтобы в равновесном состоянии при $T = 0$ коэффициент упаковки имел значение $\eta = 0.15$.

4.1. Высокие концентрации доноров ($n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). На рис. 5 и 6 приведены результаты расчетов для гетероструктуры с узким спейсерным слоем $W = 100 \text{ \AA}$. Ширина легированного слоя $W_d = 10^{-7} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^9 \text{ cm}^{-2}$. На рис. 5 изображена зависимость

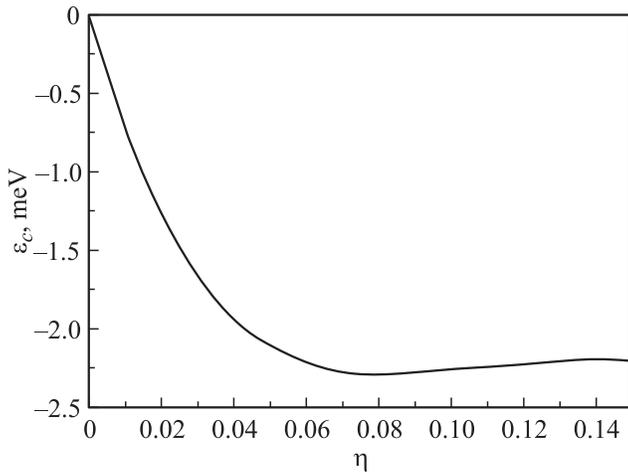


Рис. 5. ε_c — энергия корреляции неравновесного состояния системы примесных ионов при фиксированном значении концентрации электронов в проводящем слое. Значение коэффициента упаковки $\eta = 0.15$ соответствует равновесному состоянию системы ионов при $T = 0$ К. Концентрация доноров $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 10^{-7} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^9 \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 100 \text{ \AA}$.

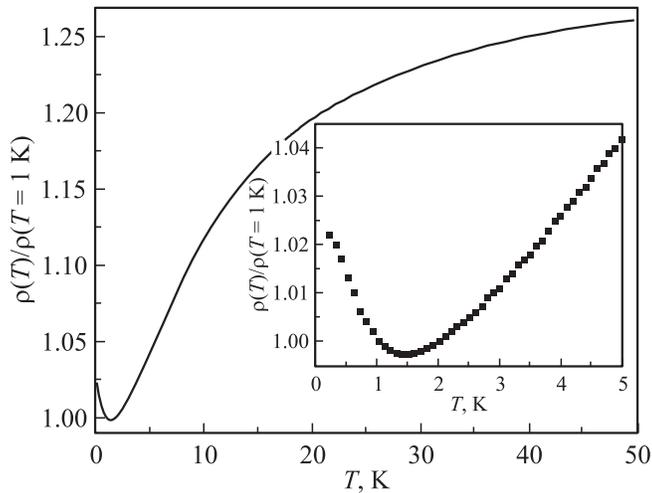


Рис. 6. Температурная зависимость относительного электросопротивления 2D-электронов $\rho(T)/\rho(T = 1 \text{ K})$. Концентрация доноров $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 10^{-7} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^9 \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 100 \text{ \AA}$.

энергии корреляции от коэффициента упаковки $\varepsilon_c(\eta)$, вычисленная по формуле (10). Точка этой кривой описывает неравновесные состояния, по которым „размазана“ система примесных ионов при конечных температурах. Ход кривой $\varepsilon_c(\eta)$ позволяет понять температурную зависимость электросопротивления электронов, изображенную на рис. 6. Действительно, согласно нашим расчетам, сопротивление $\rho(T)/\rho(T = 1 \text{ K})$ увеличивается с ростом температуры T от 0.2 до 50 К примерно на 20%.

Относительно большой рост сопротивления происходит в интервале низких температур $T < |\varepsilon_c(\eta)|$, когда система ионов размазывается по состояниям $0 < \eta < 0.15$. При относительно высоких температурах $|\varepsilon_c(\eta)| < T$, когда система ионов в основном уже размазана по неравновесным состояниям, электросопротивление медленно меняется с температурой. В нашем случае $\max |\varepsilon_c(\eta)| \simeq 2.3 \text{ meV}$, что соответствует граничному значению температуры $T = 27 \text{ K}$.

При низких температурах (см. вставку на рис. 6) электросопротивление электронов немонотонно меняется с изменением температуры, достигая минимума при температуре $T = 1.5 \text{ K}$. При этом глубина максимума составляет несколько процентов. Эта особенность в поведении электросопротивления связана с немонотонностью хода кривой $\varepsilon_c(\eta)$, которая достигает минимального значения при $\eta = 0.08$ и незначительно возрастает в интервале значений $0.08 < \eta < 0.15$. Таким образом, при очень низких температурах система ионов „размазана“ по состояниям вблизи значения $\eta = 0.08$ и с ростом температуры начинает „размазываться“ по состояниям, лежащим в интервале более высоких значений $0.08 < \eta < 0.15$, что и приводит к уменьшению электросопротивления электронов с ростом температуры.

На рис. 7 и 8 приведены результаты расчетов для гетероструктуры с широким спейсерным слоем $W = 500 \text{ \AA}$. Вблизи проводящего слоя энергия взаимодействия примесных ионов (12) зависит от параметра r_c/W , с помощью которого можно оценить отношения расстояния между ионами к расстоянию от иона до проводящего слоя. С увеличением r_c увеличивается влияние проводящего слоя на взаимодействие между ионами. В случае

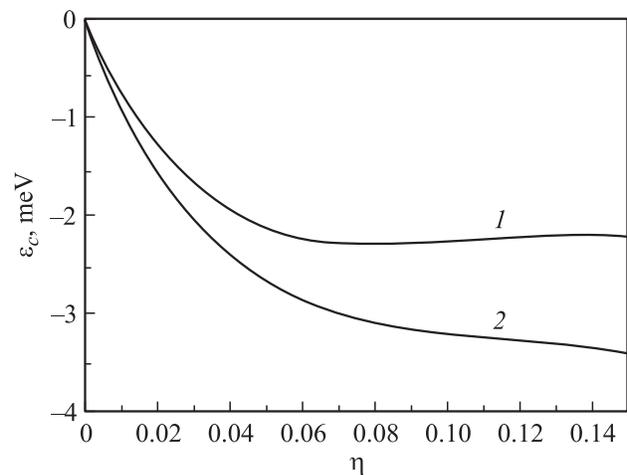


Рис. 7. ε_c — энергия корреляции неравновесного состояния системы примесных ионов при фиксированном значении концентрации электронов в проводящем слое. Значение коэффициента упаковки $\eta = 0.15$ соответствует равновесному состоянию системы ионов при $T = 0$ К. Концентрация доноров $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 10^{-7} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^9 \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 100 \text{ \AA}$ (1), ширина спейсера $W = 500 \text{ \AA}$ (2).

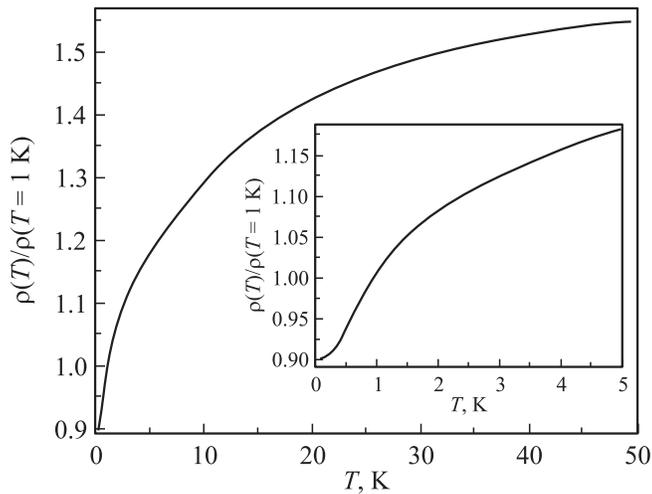


Рис. 8. Температурная зависимость относительного электросопротивления 2D-электронов $\rho(T)/\rho(T = 1 \text{ K})$. Концентрация доноров $n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 10^{-7} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^9 \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 500 \text{ \AA}$.

узкого спейсерного слоя $W = 100 \text{ \AA}$ с увеличением коэффициента упаковки η , а следовательно, и с увеличением минимального расстояния между ионами r_c уменьшается энергия взаимодействия между ионами, что и приводит к немонотонному ходу кривой $\varepsilon_c(\eta)$ (кривая 1 на рис. 2). В случае широкого спейсерного слоя $W = 500 \text{ \AA}$ влияние проводящего слоя на взаимодействие между ионами несущественно и $\varepsilon_c(\eta)$ (кривая 2 на рис. 7) монотонно убывает во всем интервале изменения η . Поэтому в случае широкого спейсерного слоя (рис. 8) электросопротивление электронов монотонно возрастает во всем интервале изменения температур $0.2 < TK < 50$. Относительное изменение электросопротивления в этом интервале температур составляет около 50%.

4.2. Низкие концентрации доноров ($n_d = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). На рис. 9 и 10 приведены результаты расчетов для гетероструктур с узким спейсером $W = 100 \text{ \AA}$ (кривая 1) и широким спейсером $W = 500 \text{ \AA}$ (кривая 2). Ширина легированного слоя $W_d = 2.5 \cdot 10^{-6} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^9 \text{ cm}^{-2}$. В случае низких концентраций доноров вырождение электронного газа снимается уже при низких температурах. Поэтому в наших расчетах мы ограничились интервалом температур $0 < T < 5 \text{ K}$. Действительно, для 2D-электронов ($k_F = (2\pi N_s)^{1/2}$) параметр, характеризующий вырождение электронного газа, имеет вид

$$\frac{k_B T}{\varepsilon_F} = \frac{T(\text{K})}{4 \cdot 10^{-10} N_s},$$

где N_s — концентрация электронов в квантовой яме. Согласно уравнению (15), при $N_d^+ = 1.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, что соответствует значению $\eta = 0.15$, $N_s \approx 1.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$.

Поэтому даже в случае низких концентраций доноров при столь низких температурах можно применить формулы для подвижности вырожденных электронов (1)–(3).

На рис. 9 представлены расчеты энергии корреляции в случае низких концентраций доноров в легированном слое ($n_d = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Сравнение с результатами расчетов для высоких концентраций доноров

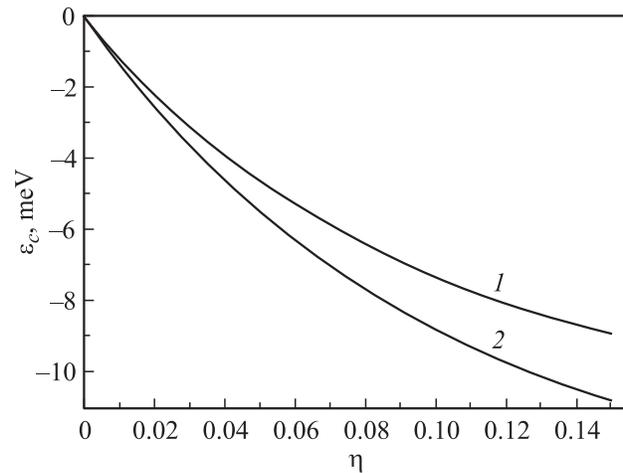


Рис. 9. ε_c — энергия корреляции неравновесного состояния системы примесных ионов при фиксированном значении концентрации электронов в проводящем слое. Значение коэффициента упаковки $\eta = 0.15$ соответствует равновесному состоянию системы ионов при $T = 0 \text{ K}$. Концентрация доноров $n_d = 210^{16} \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 2.5 \cdot 10^{-6} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^9 \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 100 \text{ \AA}$ (1), ширина спейсера $W = 500 \text{ \AA}$ (2).

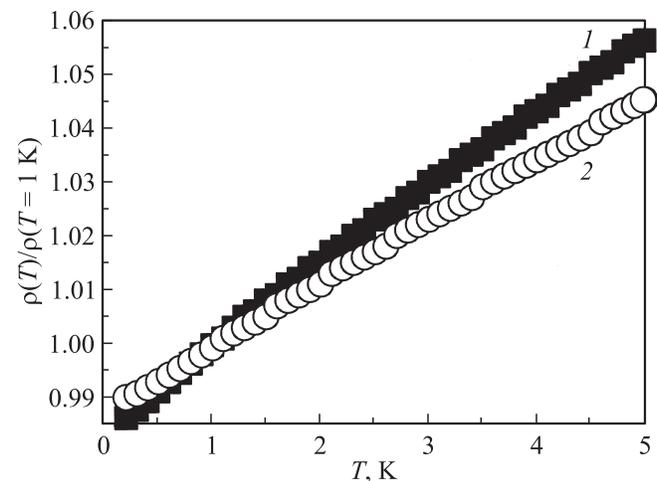


Рис. 10. Температурная зависимость относительного электросопротивления 2D-электронов $\rho(T)/\rho(T = 1 \text{ K})$. Концентрация доноров $n_d = 210^{16} \text{ cm}^{-3}$, ширина легированного слоя $W_d = 2.5 \cdot 10^{-6} \text{ cm}$, концентрация зарядов в обедненном слое $N_{\text{depl}} = 10^9 \text{ cm}^{-2}$, ширина спейсера $W = 100 \text{ \AA}$ (1), ширина спейсера $W = 500 \text{ \AA}$ (2).

($n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), представленных на рис. 7, позволяет выявить особенности этих кривых. Действительно, в отличие от случая высоких концентраций, при низких концентрациях доноров кривые $\varepsilon_c(\eta)$ имеют монотонный ход как в случае узкого спейсера ($W = 100 \text{ \AA}$), так и в случае широкого спейсера ($W = 500 \text{ \AA}$). Это связано с тем, что в случае низких концентраций доноров мы взяли для расчетов широкие легированные слои $W_d = 250 \text{ \AA}$, в которых расстояние от примесного иона до проводящей полосы в несколько раз больше, чем в расчетах, представленных на рис. 7. Поэтому в случае низких концентраций примесных ионов в широких легированных слоях (рис. 9) влияние проводящей полосы на энергию корреляции незначительно, а на кривых $\varepsilon_c(\eta)$ отсутствуют плоские участки.

Более крутой ход кривой $\varepsilon_c(\eta)$ в случае низких концентраций примесных ионов приводит к слабому размытию корреляций тепловым движением электронов. Действительно, для того чтобы более или менее равномерно размазать систему примесных ионов по всем доступным состояниям (рис. 9), температура системы должна быть достаточно высока $100 \text{ K} < T$. В то время как в случае высоких концентраций примесных ионов (рис. 7) достаточно более низких температур $40 \text{ K} < T$. Поэтому изменение электросопротивления с температурой значительно слабее в случае низких концентраций доноров — всего 5–6% в интервале температур $0 \text{ K} < T < 5 \text{ K}$ (рис. 10) по сравнению с изменением на 20% при высоких концентрациях доноров (рис. 8). Ход кривой $\varepsilon_c(\eta)$ — круче в случае большего расстояния примесных ионов от проводящего слоя (см. рис. 9, кривая 2). Соответственно, в этом случае слабее изменение электросопротивления с температурой (рис. 10, кривая 2).

5. Заключение

Низкотемпературные зависимости подвижности вырожденных электронов при расстоянии на примесных ионах связаны исключительно с корреляциями в расположении примесных ионов. В предельном случае $T = 0$ структурный фактор S_q вычислен в предположении, что корреляции в основном определяются силами отталкивания между примесными ионами (модель жестких сфер на плоскости), а примесные ионы в состоянии равновесия находятся на максимальном удалении друг от друга. При конечных температурах в состоянии термодинамического равновесия примесные ионы могут находиться на любом расстоянии друг от друга. Поэтому в равновесном состоянии при конечных температурах структурный фактор S_q в формуле для подвижности электронов необходимо заменить его термодинамическим средним $\langle S_q \rangle_T$. При вычислении термодинамического среднего необходимо моделировать взаимодействие между примесными ионами. Мы описываем это

взаимодействие, как взаимодействие кулоновских центров вблизи проводящей полосы.

В этих предположениях, согласно нашим расчетам, электросопротивление вырожденных 2D-электронов монотонно возрастает с ростом температуры в интервале $4 < T < 5 \text{ K}$. Рост электросопротивления с ростом температуры составляет 20–50% в зависимости от параметров, характеризующих распределение доноров в легированном слое. В интервале температур ниже гелиевой, в случае высоких концентраций доноров ($n_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) наши расчеты демонстрируют немонотонный ход температурной зависимости электросопротивления. Эти аномалии в зависимости $\rho(T)$ объясняются влиянием проводящей полосы на взаимодействие между примесными ионами в легированном слое.

Список литературы

- [1] F. Stern. Appl. Phys. Lett. **43**, 974 (1983); T. Saku, Y. Horikoshi, Y. Tokura. Jpn. J. Appl. Phys. **35**, 34 (1996).
- [2] S. Das Sarma, F. Stern. Phys. Rev. B **32**, 8442 (1985).
- [3] A.L. Efros, F.G. Pikus, G.G. Samsonidze. Phys. Rev. B **41**, 8295 (1990).
- [4] T. Kawamura, S. Das Sarma. Solid State Commun. **100**, 411 (1996).
- [5] В.М. Михеев. ФТТ **49**, 1770 (2007).
- [6] В.М. Михеев. ФТТ **50**, 1877 (2008).
- [7] В.М. Михеев. ФТТ **53**, 807 (2011).
- [8] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. Электронные свойства двумерных систем. Мир, М. (1985). 415 с.; F. Stern, W. Howard. Phys. Rev. **163**, 816 (1967).
- [9] Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Наука, М. (1978). Т. 1. 405 с.; Е.И. Харьков, В.И. Лысов, В.Е. Федоров. Физика жидких металлов. Вища шк., Киев (1979). 247 с.
- [10] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1976). Ч. 1. 584 с.
- [11] В.М. Михеев. ФТТ **47**, 1056 (2005).