

©1995 г.

U⁻-ЦЕНТРЫ В СЕЛЕКТИВНО ЛЕГИРОВАННЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

С.Г.Дмитриев, Б.К.Медведев, В.Г.Можеров, О.Г.Шагимуратов

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
141120, Фрязино, Россия
(Получена 7 июня 1994 г. Принята к печати 26 августа 1994 г.)

Проведен теоретический анализ распределения потенциала в селективно легированной гетероструктуре с двухзарядными центрами с отрицательной корреляционной энергией — так называемыми U⁻-центрами. Приведены результаты расчетов концентрации электронов в двумерном канале n_s для типичных значений параметров. Проанализированы температурная стабилизация n_s при n_s ~ 10¹² см⁻² и ограничения на достижимые значения n_s.

В селективно легированных гетероструктурах (ГС) носители заряда, образующие двумерный электронный газ (ДЭГ), появляются за счет ионизации доноров в широкозонном материале. Наиболее популярными для исследований являются структуры Al_xGa_{1-x}As-GaAs, в которых роль широкозонного материала играет Al_xGa_{1-x}As. Атомы примеси в этом соединении (например, Si и Te) обладают рядом необычных свойств (создают так называемые DX-центры), что стимулировало их интенсивные исследования [1]. В последнее время были выдвинуты аргументы в пользу того, что эти примесные атомы являются многозарядными центрами с отрицательной корреляционной энергией (U⁻-центры) [2]. Они могут находиться в трех зарядовых состояниях — нейтральном, положительно и отрицательно заряженных, причем отрицательно заряженный центр образуется при захвате электрона нейтральным центром и характеризуется значительно большей энергией связи электрона ε₁, чем энергия ионизации центра ε₀. Так, например, для атомов Si в Al_xGa_{1-x}As ε₀ ~ 10 мэВ, а ε₁ ≳ 50 мэВ при x ≳ 0.25 [2]. Поэтому представляет интерес расчет характеристик ГС, легированных примесями такого типа. Цель настоящей работы — нахождение достаточно простого и эффективного описания равновесных параметров селективно легированных ГС с однородным легированием (см. рис. 1) атомами примеси с отрицательной корреляционной энергией.

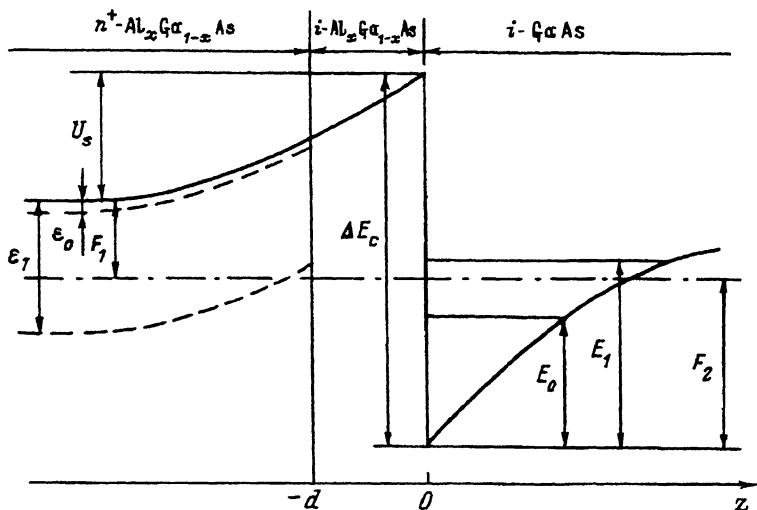


Рис. 1. Энергетическая диаграмма гетероструктуры с селективным легированием.

Для определения абсолютного значения положения уровня Ферми F_1 относительно дна зоны проводимости в объеме $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, легированного донорами в концентрации N_d , воспользуемся известными соотношениями [3], которые следуют из распределения Гиббса для многозарядных центров и связывают концентрации нейтральных (N^0), положительно (N^+) и отрицательно заряженных центров (N^-) соответственно,

$$\frac{N^0}{N^+} = \frac{g^0}{g^+} \exp\left(\frac{\varepsilon_0 - F_1}{kT}\right), \quad \frac{N^-}{N^0} = \frac{g^-}{g^0} \exp\left(\frac{\varepsilon_1 - F_1}{kT}\right), \quad (1)$$

$$N_d = N^0 + N^+ + N^-, \quad (2)$$

и уравнением электронейтральности

$$n_0 + N^- = N^+, \quad (3)$$

где $n_0 = N_c \exp(-F_1/kT)$ — концентрация электронов в зоне проводимости, N_c — соответствующая плотность состояний; g^0, g^+, g^- — кратности вырождения рассматриваемых зарядовых состояний (индексы соответствуют заряду центра); k — постоянная Больцмана, T — температура. Решая систему уравнений (1)–(3), получим следующее уравнение для определения F_1 :

$$\delta t(1 + \alpha t + \beta t^2) = 1 - \beta t^2, \quad (4)$$

$$t = \exp\left(-\frac{F_1}{kT}\right), \quad \delta = \frac{N_c}{N_d}, \quad \alpha = \frac{g^0}{g^+} \exp\left(\frac{\varepsilon_0}{kT}\right), \quad \beta = \frac{g^-}{g^+} \exp\left(\frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1}{kT}\right).$$

Нетрудно показать, что решение уравнения (4) t_0 лежит в пределах $t_1 < t_0 < t_2$, где $t_1 = \beta^{-1/2}$ и $t_2 = \delta^{-1}$, которые определяют два различных режима в зависимости от величины параметра

$$\xi = \delta \beta^{-1/2} = \frac{N_c}{N_d} \left(\frac{g^+}{g^-}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1}{kT}\right).$$

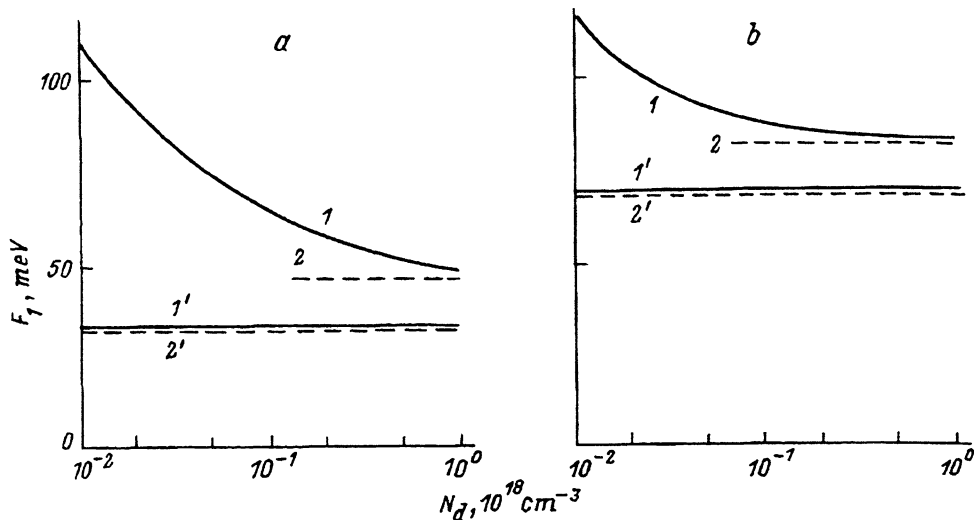


Рис. 2. Энергия Ферми в объеме $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}:\text{Si}$ в зависимости от концентрации легирующей примеси. x : $a - 0.25$, $b - 0.3$. 1, 1' — результат решения уравнения (4); 2, 2' — зависимость, полученная по формуле (5). T, K : 1, 2 — 300; 1', 2' — 77.

Если $\xi \ll 1$, то $t_0 \approx t_1$; в этом случае

$$F_1 \approx \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{g^-}{g^+} \right) \quad (5)$$

не зависит от N_d . Другой случай, когда $\xi \gtrsim 1$ соответствует почти полной ионизации доноров, тогда $t_0 \approx t_2$, а $n_0 \approx N_d$. Оценки показывают, что в актуальном диапазоне параметров — $\varepsilon_1 \gtrsim 50 \text{ мэВ}$ ($x \gtrsim 0.25$) и $N_d \gtrsim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ — реализуется первый режим. При этом

$$n_0 \approx \frac{g^+}{g^-} N_c \exp \left(-\frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1}{2kT} \right), \quad (6)$$

$$N_0 \approx \frac{N_d}{2} \frac{g^0}{(g^+g^-)^{1/2}} \exp \left(\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_1}{2kT} \right)$$

(N^0 представляет концентрацию незаполненных ловушек). На рис. 2 приведены зависимости $F_1(N_d)$, полученные в результате численного решения уравнения (4).

Рассмотрим ГС, изображенную на рис. 1, с промежуточным нелегированным слоем $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (спейсером) толщиной d . Как известно, концентрацию электронов в ДЭГ можно найти из условия постоянства уровня Ферми в структуре, которое можно представить в виде

$$U_s + F_1 + F_2 = \Delta E_c, \quad (7)$$

где U_s — поверхностный изгиб зон в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, ΔE_c — разрыв зоны проводимости, а F_2 — положение уровня Ферми в двумерном канале.

С учетом заполнения двух нижних подзон размерного квантования с энергиями E_0 и E_1 , F_2 находится из уравнения [4]

$$n_s = DkT \ln \left\{ \left[1 + \exp \left(\frac{F_2 - E_0}{kT} \right) \right] \left[1 + \exp \left(\frac{F_2 - E_1}{kT} \right) \right] \right\}, \quad (8)$$

где n_s — поверхностная плотность электронов, D — двумерная плотность состояний в GaAs, а E_0 и E_1 связаны с n_s известным соотношением [4] (F_2 , E_0 и E_1 отсчитываются от края зоны проводимости GaAs на гетерогранице)

$$E_0 = \beta_0(n_s [\text{см}^{-2}]/10^{12}), \quad E_1 = \beta_1(n_s [\text{см}^{-2}]/10^{12}),$$

где с учетом экспериментальных данных $\beta_0 \approx 116 \text{ мэВ}$, $\beta_1 \approx 149 \text{ мэВ}$ [5].

Для определения U_s рассмотрим уравнение Пуассона в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$:

$$\frac{d^2 U}{dz^2} = -\frac{4\pi}{\kappa_1} q [N^+(z) - N^-(z) - n(z)], \quad (9)$$

где U — потенциал, q — элементарный заряд, κ_1 — диэлектрическая проницаемость, z — координата по нормали к плоскости гетерограницы. Для удобства введем безразмерные переменные y и v : $y = z/L_D$, $L_D = (\kappa_1 \varphi_T / 4\pi q N_d)^{1/2}$; $v = -U/\varphi_T$, $\varphi_T = kT/q$. Тогда (9) будет иметь следующий вид:

$$\frac{d^2 v}{dy^2} = \left[1 - e^{-v} \left(\zeta + \frac{2\vartheta e^{-v} + \theta}{1 + \theta e^{-v} + \vartheta e^{-2v}} \right) \right], \quad z < -d; \quad (10)$$

$$\frac{d^2 v}{dy^2} = -\zeta e^{-v}, \quad -d < z < 0; \quad (11)$$

$$\zeta = n_0/N_d, \quad \theta = \alpha \exp(-F_1/kT), \quad \vartheta = \beta \exp(-2F_1/kT).$$

Из (10) и (11) легко найти (интегрируя левую и правую части (10) по dv и непосредственно решая уравнение (11)) интересующую нас связь между v и $\mathcal{E} = dv/dy$ на обеих границах спейсера в широкозонном материале:

$$\frac{1}{2} \mathcal{E}_s^2 = v_i + \zeta (e^{-v_i} - 1) + \ln \left(\frac{1 + \theta e^{-v_i} + \vartheta e^{-2v_i}}{1 + \theta + \vartheta} \right), \quad (12)$$

$$\frac{1}{2} \mathcal{E}_i^2 = \frac{1}{2} \mathcal{E}_s^2 + \zeta (e^{-v_i} - e^{-v_s}), \quad (13)$$

$$\Delta v = \mathcal{E}_i \frac{d}{L_D} (1 - \gamma)^{1/2} + 2 \ln \left[\frac{1 + (1 + \gamma_1)^{1/2}}{1 + (1 + \gamma_1 e^{-\Delta v})^{1/2}} \right], \quad (14)$$

$$\Delta v = v_s - v_i, \quad \gamma = 2\zeta e^{-v_i} / \mathcal{E}_i^2, \quad \gamma_1 = \gamma / (1 - \gamma).$$

Здесь индекс s относится к гетерогранице ($z = 0$), i — к границе легированного и нелегированного $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($z = -d$).

Последнее необходимое для расчетов соотношение между n_s и \mathcal{E}_s , следующее из теоремы Гаусса и связи напряженности электрических полей на гетерогранице, запишем в виде

$$n_s = \frac{\varkappa_1 \mathcal{E}_s \varphi T}{4\pi q L_D}. \quad (15)$$

Для определения n_s нужно решить систему уравнений (4), (8), (12)–(15) с учетом (7).

Во многих случаях эти уравнения заметно упрощаются: действительно, параметр ζe^{-v_i} обычно мал, так как $\zeta \ll 1$, а также $e^{-v_i} \ll \ll e^{-v_i} \ll 1$, и потенциал в спейсере линейно зависит от координаты. Поэтому вместо (12)–(14) можно получить более простое выражение —

$$v_s = \frac{1}{2} \mathcal{E}_s^2 + \mathcal{E}_s \frac{d}{L_D} + \ln(1 + \theta + \vartheta), \quad (16)$$

или в размерных единицах —

$$U_s = \frac{4\pi}{\varkappa_1} q^2 n_s \left(\frac{1}{2} \frac{n_s}{N_d} + d \right) + kT \ln(1 + \theta + \vartheta). \quad (17)$$

Для F_1 воспользуемся выражением (5), а F_2 представим в виде

$$F_2 = F_2^0 - \Delta F, \quad (18)$$

$$F_2^0 = E_0 + n_s/D. \quad (19)$$

F_2^0 получено из (8) в приближении низких температур, когда $\exp[(F_2 - E_0)/kT] \gg 1$. Подставляя полученные выражения с учетом (15) в (7), получим

$$\frac{4\pi}{\varkappa_1} q^2 n_s \left(\frac{1}{2} \frac{n_s}{N_d} + d \right) + E_0 + \frac{n_s}{D} = \Delta E_c - \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1}{2} + G, \quad (20)$$

$$G = \Delta F - kT \ln[(1 + \theta + \vartheta)(g^-/g^+)^{1/2}]. \quad (21)$$

В актуальном диапазоне параметров — $n_s \gtrsim 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $N_d \sim \sim 10^{17} \div 10^{18} \text{ см}^{-3}$ — величина G в правой части (20) относительно мала, и в этой ситуации следует ожидать слабой температурной зависимости n_s . Это связано с двумя причинами: с одной стороны — с частичной компенсацией температурных зависимостей F_1 и F_2 , с другой — с очень сильной зависимостью $v_s(n_s)$ при $n_s \gtrsim 10^{12} \text{ см}^{-2}$, так что даже небольшое изменение n_s способно привести к выполнению соотношения (7). Действительно, при указанных параметрах $\theta \ll \vartheta \approx 1$. Используя значения $g^+ = 1$, $g^0 = 2$, $g^- = 4$, предложенные в [2], имеем следующее выражение для G :

$$G = \Delta F - kT 2 \ln 2.$$

Как можно показать, в рассматриваемом случае $\Delta F \lesssim kT$, и так как в (20) вся зависимость от T содержится в G , даже при комнатной температуре анализируемые поправки относительно малы. Кроме того сильная зависимость $v_s(n_s)$,

$$v_s = \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \left[75 \left(\frac{n_s}{10^{12}} \right)^2 \left(\frac{10^{18}}{N_d} \right) + 1.5d \left(\frac{n_s}{10^{12}} \right) \right],$$

(где κ_2 — диэлектрическая проницаемость GaAs, n_s входит в см^{-2} , N_d — в см^{-3} , d — в Å) накладывает ограничение на максимально достижимые значения n_s . Уже простые оценки показывают, что в рассматриваемых условиях $n_s \lesssim 1.5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Заметим, что выражение, аналогичное (20), тоже со слабой температурной зависимостью, может быть получено и в случае обычной примеси.

Для определения n_s можно получить еще более простое уравнение, полагая $G = 0$ и раскладывая $n_s^{2/3}$ по степеням $(n_s - n_s^*)$ в окрестности некоторого значения n_s^* . Например, при $n_s^* = 10^{12} \text{ см}^{-2}$ имеем

$$75 \left(\frac{\kappa_2}{\kappa_1} \right) \left(\frac{n_s}{10^{12}} \right)^2 \left(\frac{10^{18}}{N_d} \right) + 1.5 \left(\frac{\kappa_2}{\kappa_1} \right) \left(\frac{n_s}{10^{12}} \right) d + 38n_s + 116 \left[\frac{1}{6} + \left(\frac{n_s}{10^{12}} \right) - \frac{1}{6} \left(\frac{n_s}{10^{12}} \right)^2 \right] = \left(\Delta E_c - \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1}{2} \right) \quad (22)$$

(энергия измеряется в мэВ).

Результаты расчетов по формуле (22) приведены на рис. 3. Там же представлены результаты точных расчетов, из которых видно,

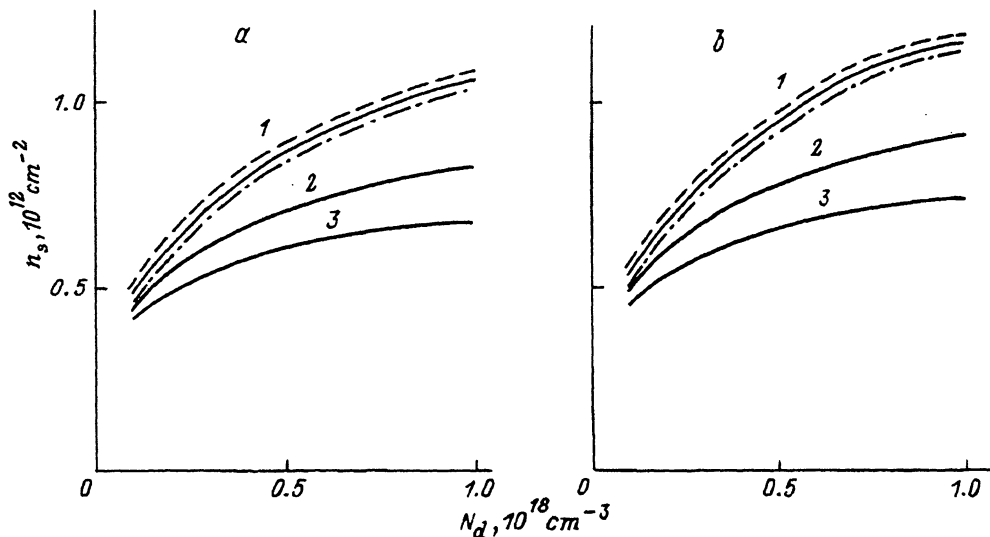


Рис. 3. Концентрация электронов в канале гетероструктуры в зависимости от степени легирования $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. x : a — 0.25, b — 0.3. d , Å : 1 — 0, 2 — 50, 3 — 100. Сплошные линии — расчет при $T = 300 \text{ К}$, штриховая — при $T = 77 \text{ К}$, штрихпунктирная — расчет по формуле (22).

что (22) является достаточно хорошим приближением. При вычислениях использовались следующие численные значения параметров: $m_1 = 0.071m_0$ — эффективная масса электрона в зоне проводимости GaAs [6] (m_0 — масса электрона), $D = m_1/\pi\hbar^2 = 2.83 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \text{ эВ}^{-1}$; $\varepsilon_1 = 2(0.7x - 0.15) \text{ эВ}$ [2]; $m_2 = (0.067 + 0.083x)m_0$ — эффективная масса плотности состояний электрона в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\kappa_1 = 13.18 - 3.12x$, $\varepsilon_0 = (5.2 + 7.9x + 7.1x^2) \text{ мэВ}$, $\Delta E_c = (1.1x) \text{ эВ}$ [7] (в этой работе обсуждаются и другие значения величины ΔE_c). Отметим, что вычисленное по формуле (6) с учетом предлагаемых параметров значение $n_0 \sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при $N_d \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$ согласуется с имеющимися экспериментальными данными (см., например, [8]). Величина n_0 может сильно изменяться с подсветкой до величин $\sim N_d$ и в этом случае характеризуется, как известно, сравнительно большим временем релаксации. Кроме того, в реальных условиях на концентрацию электронов может, очевидно, оказывать влияние наличие других примесей.

В заключение отметим, что в работе проведен анализ параметров селективно легированных гетероструктур с U^- -центрами в качестве легирующей примеси. Показано, что при $n_s \sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$ концентрация слабо зависит от температуры. Предложены относительно простые уравнения для определения n_s (см. формулы (20), (22) и соответствующий анализ). Концентрация отрицательно заряженных ловушек в объеме $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ N^- определяется значением параметра $\xi = (N_c/N_d)(g^+/g^-)^{1/2} \exp[-(\varepsilon_0 + \varepsilon_1)/kT]$ и становится заметной в реальной ситуации, когда $\xi \ll 1$, при этом $N^- \approx N_d/2$.

Список литературы

- [1] P.M. Mooney. J. Appl. Phys., **67**, R1 (1990).
- [2] D.J. Chadi, K.J. Chang. Phys. Rev. B, **39**, 1063 (1989).
- [3] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., 1990).
- [4] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., 1985).
- [5] D. Delagebeaudeuf, N.T. Ling. IEEE Trans. Electron. Dev., **ED-29**, 955 (1982).
- [6] W. Zawadzki, C. Chaubet, D. Dur, W. Кнар, A. Raymond. Semicond. Sci. Technol., **9**, 320 (1994).
- [7] S. Adachi. J. Appl. Phys., **58**, R1 (1985).
- [8] A. Baraldi, C. Chezzi, A. Parisini, A. Bosacchi, S. Franchi. Semicond. Sci. Technol., **6**, B27 (1991).

Редактор Л.В. Шаронова

U^- -centers in selectively doped heterostructures

S.G.Dmitriev, B.K.Medvedev, V.G.Mokerov, O.G.Shagimuratov

Institute of Radio Engineering and Electronics, Russian Academy of Sciences, 141120 Fryazino, Russia