

СТРУКТУРА КВАЗИДВУМЕРНЫХ ПОДЗОН В КЕЙНОВСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

(НА ПРИМЕРЕ $Hg_{1-x}Cd_xTe$ РАЗНЫХ СОСТАВА И ЛЕГИРОВАНИЯ)

Раданцев В. Ф.

Экспериментально (из анализа магнитоосцилляций емкости) и теоретически (в квазиклассическом приближении) исследованы параметры заселенности и циклотронные массы в подзонах размерного квантования приповерхностных слоев $Hg_{1-x}Cd_xTe$ в зависимости от состава ($x=0.09 \div 0.3$), поверхностной плотности носителей, типа и уровня легирования. Адекватность квазиклассического описания подзон в кейновских полупроводниках объясняется многозонностью спектра и близостью приповерхностного потенциала к кулоновскому. Проводится аналогия между газом приповерхностных электронов рассматриваемой системы и ультрарелятивистским газом вакуумного конденсата электронов вблизи сверхзаряженных ядер. В рамках ультрарелятивистского подхода объяснена независимость параметров подзон от величины щели $\epsilon_g = \epsilon(\Gamma_0) - \epsilon(\Gamma_s) \geq 100$ мэВ [1-7].

Исследования двумерных электронов в приповерхностных слоях узкощелевых полупроводников (в основном $Hg_{1-x}Cd_xTe$) ограничиваются, как правило, материалами с положительной щелью $\epsilon_g = \epsilon(\Gamma_0) - \epsilon(\Gamma_s) \geq 100$ мэВ [1-7]. Между тем с точки зрения выявления специфических черт 2D-систем в таких материалах наиболее информативными представляются сравнительные исследования материалов с различными, в том числе отрицательными, ϵ_g . Некоторые предварительные результаты такого рода исследований в $Hg_{1-x}Cd_xTe$ были недавно сообщены в [7]. В настоящей работе в основном рассматриваются не затронутые в [7] вопросы, относящиеся к зависимостям параметров 2D-подзон в $Hg_{1-x}Cd_xTe$ ($x=0.09 \div 0.3$) от поверхностной плотности носителей, типа и уровня легирования.

Параметры легирования и величина энергетического зазора ϵ_g исследованных образцов (см. таблицу) определялись из температурных и магнитополевых зависимостей постоянной Холла и анализа магнитоосцилляций проводимости тунNELьных контактов $Pb-Al_2O_3-Hg_{1-x}Cd_xTe$. Параметры исследованных МОП структур, как и режимы измерения дифференциальной емкости, аналогичны описанным в [2]. Из периодов магнитоосцилляций емкости для каждого напряжения V_g на полевом электроде были определены поверхностные плотности носителей в 2D-подзонах n_i (i — номер подзоны), а из анализа температурных зависимостей амплитуд осцилляций — циклотронные эффективные массы m_{ci} , приведенные для некоторых образцов на рис. 1, 2, в зависимости от полной поверхностной плотности электронов n_s . Относительно представленных на рис. 2 зависимостей m_{ci} (n_s) нужно отметить, что значения циклотронных масс в основной подзоне, определенные в различных интервалах магнитных полей H и температур T , несколько различаются, а именно наблюдается увеличение m_{c0} с ростом H и уменьшением T . Приведенные значения m_{c0} получены усреднением по всем осцилляциям и температурным интервалам. Для возбужденных подзон вариации m_{ci} при изменении H и T практически не превышают погрешности измерений.

Из исследованных материалов только результаты для слабо легированного образца 3 могут быть сопоставлены с данными теоретических расчетов [8].

Для других образцов такие расчеты отсутствуют. В рамках экспериментальной работы, особенно с учетом широкого спектра исследованных материалов, проведение самосогласованных расчетов затруднено ввиду их громоздкости. Достаточно простые методы для описания подзон с кейновским законом дисперсии были предложены недавно в [4, 6]. Однако лежащая в их основе модель треугольного потенциала не может быть признана приемлемой, поскольку необходимость учета экранирования для возбужденных подзон очевидна.

Между тем именно многозонный характер спектра двумерных электронов позволяет достаточно просто учесть экранирование. Из-за заполнения возбужденных подзон и больших значений длины экранирования в узкощелевых полупроводниках потенциал в приповерхностном слое, за исключением небольшой пристеночной области вблизи границы раздела, не должен кардинальным образом отличаться от вычисленного в классическом приближении. Многозонность спектра позволяет сделать еще

№ образца	ϵ_g , мэВ	Тип проводимости	$ N_a - N_d \times 10^{-15}$, см $^{-3}$
1	230 \pm 10	p	0.7
2a	100 \pm 5	p	5
2b			
3a	80 \pm 5	n	0.4
3b			
4	80 \pm 5	p	170
5	70 \pm 5	n	0.09
6	50 \pm 5		0.03
7	10 \pm 10		0.5
8	-20 \pm 10	p	1
9a	-50 \pm 5	n	3.5
9b			
10	-70 \pm 5	n	50
11	-100 \pm 5	p	750

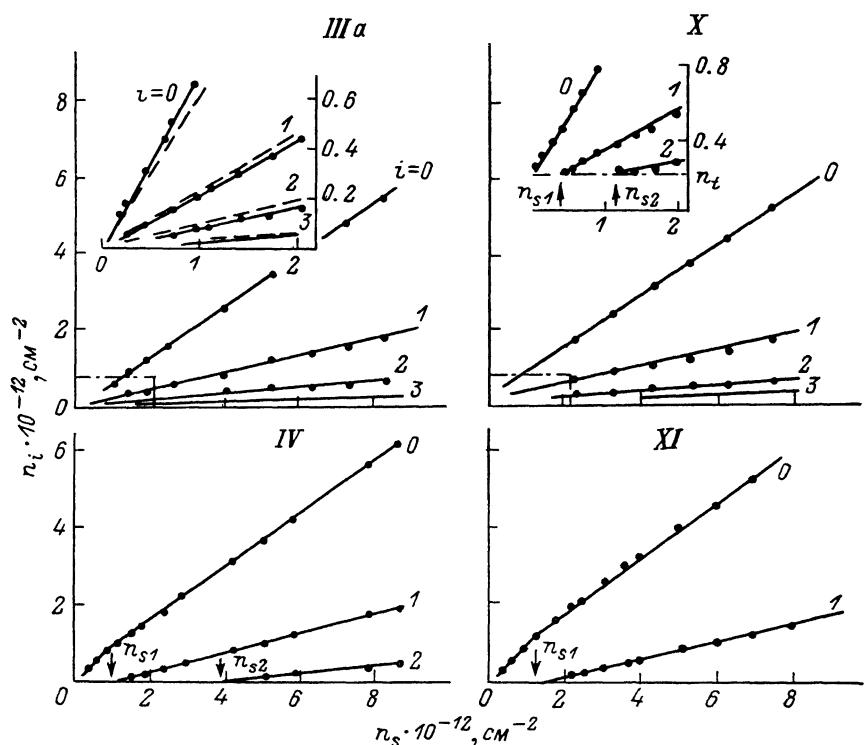


Рис. 1. Распределение носителей по подзонам в обогащенных и инверсионных слоях $Hg_{1-x}Cd_xTe$ с прямой и инверсной структурами зон.

Точки — эксперимент, сплошные линии — квазиклассический расчет, штриховые — самосогласованный расчет [6]. Римские цифры — номера образцов.

одно упрощающее предположение, а именно: движение электрона в перпендикулярном поверхности направлении по крайней мере для возбужденных подзон может быть проквантовано квазиклассически

$$\int_0^{\mu_i} p_z(z) dz = \int_{\mu_s}^{\mu_i} p_z(\mu) \left(\frac{d\mu}{dz} \right)^{-1} d\mu = \pi \hbar \left(i + \frac{3}{4} \right), \quad (1)$$

где $p_z = \sqrt{p^2 - p_z^2}$, p_i — двумерный квазимпульс для i -й подзоны, $\mu(z)$ — химический потенциал, $\mu_s = \mu(0)$. Используя закон дисперсии для зоны проводимости в форме, эквивалентной дисперсионному соотношению для релятивистского электрона, и учитывая, что потенциальная энергия $-eV(z) = \mu(z) - \mu_s$, для полной энергии электрона имеем

$$\epsilon(p) = \sqrt{p^2 s^2 + m_n^2 s^4} - m_n s^2 - \mu + \mu_s$$

(все энергии отчитываются от дна зоны проводимости), откуда

$$p_z(\mu) = \frac{\sqrt{f(\mu)}}{s}, \quad f(\mu) = (\epsilon_i - \mu_s + \mu)(\epsilon_i - \mu_s + \mu + 2m_n s^2) - p_i^2 s^2, \quad (2)$$

где $s = \sqrt{\epsilon_g / 2m_n} \sim 10^8$ см/с — межзонный матричный элемент оператора скорости, m_n — эффективная масса на дне зоны проводимости, $\chi \approx 19$ — диэлектрик

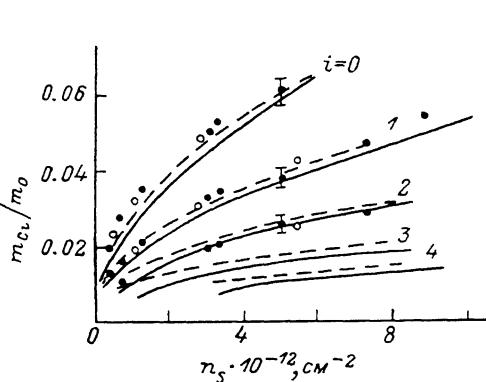


Рис. 2. Циклотронные массы в 2D-подзонах в зависимости от n_s для образцов 3а (светлые точки и штриховые линии) и 9а (черные точки и сплошные линии).

Линии — расчет, точки — эксперимент.

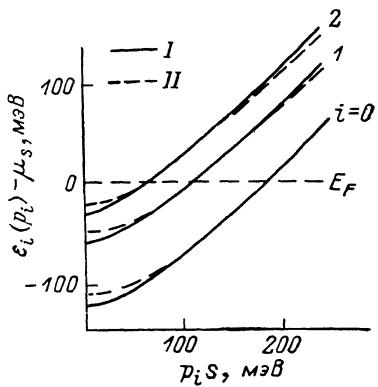


Рис. 3. Законы дисперсии в 2D-подзонах. $n_s = 2 \cdot 10^{12}$ см $^{-2}$, $\mu_b = 0$. ϵ_g , мэВ: I — 10, II — 100.

ческая проницаемость. Для актуальных в экспериментальном отношении температур $T < 50$ К, при которых возможно исследование магнитоосцилляционных эффектов, первый интеграл уравнения Пуассона $d\mu/dz$ для рассматриваемых здесь положительных изгибов зон $\mu_s > 0$, $\mu_s > \mu_b$ может быть вычислен в приближении Томаса—Ферми ($T=0$). В этом случае (1) приводится к виду

$$\int_{\mu_b}^{\mu_s} \sqrt{\frac{f(\mu)}{\Phi(\mu, \mu_b)}} d\mu = \beta \left(i + \frac{3}{4} \right), \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi(\mu, \mu_b) \approx & \int_{\mu_b}^{\mu} \{ [\mu(\mu + 2m_n s^2)]^{3/2} - [2m_p s^2 (\epsilon_g' - \mu)]^{3/2} \} d\mu + \\ & + \left\{ -[\mu_b(\mu_b + 2m_n s^2)]^{3/2} + \frac{N_a}{N_c} \right\} (\mu - \mu_b) - (\sqrt{\epsilon_d - \mu_b})^2 \frac{N_d}{N_c}, \end{aligned} \quad (3a)$$

$\alpha = e^2/\hbar s \chi$ — постоянная, эквивалентная постоянной тонкой структуры, $\mu_b = \mu(\infty)$, $N_c = (3\pi^2 \hbar^3 s^3)^{-1}$, m_p — эффективная масса состояний валентной зоны, N_a , N_d — концентрации акцепторов и доноров, ϵ_d — энергия донорных уровней, $\epsilon_g' = -\epsilon_g$ при $\epsilon_g > 0$ и $\epsilon_g' = 0$ при $\epsilon_g \leq 0$. Члены, содержащие отрицательное число под корнем в (3a), следует положить равными нулю. Безразмер-

ный параметр $\beta = \sqrt{8\pi\alpha/3}$ для всех материалов с кейновским законом дисперсии практически одинаков и близок к единице. При заданных μ_s и μ_b (3) определяет законы дисперсии в подзонах ϵ_i , (p_i) и тем самым позволяет вычислить все измеряемые экспериментально параметры: заселенности подзон $n_i = p_{Fi}^2/2\pi\hbar^2$ [p_{Fi} — фермиевский квазимпульс, определяемый из (3) при $\epsilon_i = \mu_s$], полную поверхностную плотность носителей $n_s = n_2 = \Sigma n_i$, стартовые концентрации n_{si} , циклотронные массы $p_i d p_i / d \epsilon_i |_{\epsilon_i = \mu_s}$, энергии связи и т. д.

Во всем исследованном диапазоне поверхностных плотностей носителей расчет заселенности подзон находится в хорошем согласии с экспериментальными данными как для материалов с положительной целью, так и бесщелевых (рис. 1, 2). Столь же хорошее согласие имеет место и для циклотронных масс в возбужденных подзонах (рис. 2). Для основной зоны отличия также практически не превышают экспериментальной точности, однако для всех образцов средние измеренные значения m_{c0} систематически (на $\sim 10\%$) выше расчетных. Отметим, что циклотронные массы, полученные недавно авторами [5] из измерений циклотронного резонанса при $n_s = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ для образца с параметрами, близкими к образцу 3а, в основной подзоне, на $\sim 10\%$ меньше определенных здесь, т. е. близки к расчетным (для возбужденных подзон данные [5] и настоящей работы совпадают). На рис. 1 также представлены результаты самосогласованных расчетов [8]. Различия в заселенностях подзон, рассчитанных двумя методами, вообще говоря, невелики (менее 10 %), хотя и превосходят ошибку измерения n_i . Расхождения в циклотронных массах, а для возбужденных подзон и в энергиях связи, рассчитанных в [8] и в настоящей работе, не превосходят типичных экспериментальных ошибок. Хорошее количественное согласие теории с экспериментом, равно как и с самосогласованным расчетом, подтверждает, что принятые упрощающие предположения неискажают сколь-либо существенно физической сущности рассматриваемой двумерной системы.

Сравнительный анализ данных, относящихся к материалам разного состава, приводит к выводу, что как экспериментальные, так и расчетные параметры 2D-подзон при $n_s \geq 10^{12} \text{ см}^{-2}$ от состава практически не зависят. Этот удивительный результат является следствием того, что уже при умеренных $n_s \sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$ приповерхностный изгиб зон $\mu_s - \mu_b \approx 250 \text{ мэВ}$, и для большей части приповерхностных электронов можно пренебречь энергией покоя $m_n s^2$ ($\mu_s \gg m_n s^2 = \epsilon_g/2$). Зоны проводимости в этом случае описываются дисперсионным соотношением нейтринного вида $\epsilon = ps$, одинаковым ввиду близости s для всех узкощелевых полупроводников. В таком псевдоультратрарелятивистском (УР) приближении (3) сводится (для простоты положено также $\mu_b = 0$) к уравнению

$$2 \int_{\mu_s - \epsilon_i + p_i s}^{\mu_s} d\mu \frac{\sqrt{(\epsilon_i - \mu_s + \mu)^2 - ps^2}}{\mu^2} = \beta \left(i + \frac{3}{4} \right), \quad (4)$$

которое фактически не содержит параметров материала (для всех материалов с хорошей точностью $\beta = 1$), т. е. определяет (при $\mu_s > \epsilon_g$) универсальную для всех кейновских полупроводников энергетическую структуру 2D-подзон. Отметим, что сильного неравенства $\mu_s > \epsilon_g$ не требуется, поскольку, как можно показать, поправка первого порядка к (4) по малому параметру $m_n s^2 / \mu_s$ равна нулю. Решения (4) для первых трех подзон при $n_s = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ представлены на рис. 3. Там же приведены определенные из точного уравнения (3) зависимости ϵ_i , (p_i) для материала с $\epsilon_g = 100 \text{ мэВ}$. Как видно из рисунка, при $p_i s > \epsilon_g$ (3) и (4) приводят к близким результатам. Законы дисперсии для всех подзон практически одинаковы (при $\mu_s > \epsilon_g$) и в области $p_i s > \epsilon_g$ близки к ультратрарелятивистским $\epsilon_i(p_i) = p_i s$.

Уравнение (4) сводится к довольно громоздкому трансцендентному уравнению для ϵ_i , (p_i), и мы ограничимся только наиболее важным с точки зрения со-поставления с экспериментом случаем $\epsilon_i = \mu_s$, когда (4) определяет заселенности подзон

$$\ln \left[\frac{1 + \sqrt{1 - k_i^2}}{k_i} \right] - \sqrt{1 - k_i^2} = \frac{\beta(i + 3/4)}{2}, \quad n_i = \frac{k_i^2 \mu_s^2}{2\pi\hbar^2 s^2}, \quad (5)$$

и случаем $p_i = 0$, когда (4) дает энергию связи $\mu_i = \mu_s - \varepsilon_i(0)$

$$\ln [\mu_i/\mu_s] + (\mu_s - \mu_i)/\mu_s = (-\beta/2)(i + 3/4). \quad (6)$$

В предположении $k_i^2, \mu_i/\mu_s \ll 1$, что неплохо выполняется даже для $i = 0$, (5), (6) приводят к аналитическим аппроксимациям для $\mu_i(\mu_s)$ и $n_i(\mu_s)$:

$$\mu_i = \mu_s a \exp(-\beta i/2), \quad (7a)$$

$$n_i = (2a^2 \mu_s^2 / \pi \hbar^2 s^2) \exp(-\beta i), \quad (7b)$$

где $a = \exp(-\frac{33}{8} - 1)$.

Отметим, что $n_s^{xx} = \sum n_i \approx 2a^2 b \mu_s^2 / \pi \hbar^2 s^2 (b = 1/(1 - \exp - \beta) = 1.582)$ отличается от значения n_s для классической (неквантованной) приповерхностной ямы $n_s^{xx} = \mu_s^2 / \pi \hbar^2 s^2 \sqrt{24\pi a}$. В УР приближении могут быть получены и приближенные аналитические выражения для m_{ci} и области локализации носителей в подзонах z_i :

$$m_{ci} = \frac{\hbar \delta_i \sqrt{2\pi n_i}}{s}, \quad \delta_i = \frac{(\pi/2) - \arcsin k_i}{\sqrt{1 - k_i^2}}, \quad (8a)$$

$$z_i = \sqrt{3b/a n_i}. \quad (8b)$$

В полном соответствии с экспериментом m_{ci} , согласно (8), при одинаковых n_i не зависят от номера подзоны. Наряду с независимостью параметров подзон

от ϵ_g в рамках УР приближения находит объяснение еще один экспериментальный результат общего характера: в соседних по номеру подзонах значения m_{ci} , n_{si} , $\alpha_i = dn_i/dn_s$ связаны одинаковым соотношением $\alpha_i/\alpha_{i+1} = n_{s,i+1}/n_{s,i} = (m_{ci}/m_{c,i+1})^2 \approx 2.7 \pm 0.3$ [см. (7)–(10)].

Если в инверсионных слоях широкозонных полупроводников, где в широкой области n_s реализуется случай электрического квантового предела, энергетиче-

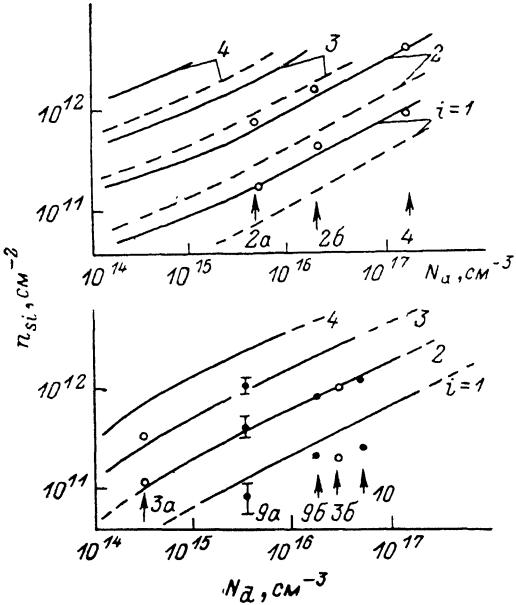


Рис. 4. Расчетные и экспериментальные (точки) стартовые концентрации n_{si} в зависимости от легирования.

ϵ_g , мэВ: сплошные линии и светлые точки — 100, штриховые линии и черные точки — —100. Цифры у стрелок — номера образцов.

ский спектр приповерхностных носителей инверсионного слоя при $n_s \gg N_{dep}$ ($N_{dep} = \sqrt{(-\epsilon_g - \mu_b)} N_a \chi / 2\pi e$ — поверхность заряда слоя обеднения) изменяется слабо с N_{dep} , то в узкощелевых достаточно небольшого заряда в области обеднения, чтобы существенно изменить заселенности возбужденных подзон вплоть до их опустошения. Это хорошо видно из представленных на рис. 4 зависимостей $n_{si}(N_a)$. Что касается зависимостей n_{si} от ϵ_g , то в материалах с $\epsilon_g > 0$ старты 2D-подзон с ростом ϵ_g приходятся на большие значения n_s , что отражает увеличение заряда в слое обеднения при увеличении ϵ_g' . Для материалов с инверсной структурой зон в полном соответствии с независимостью в них N_{dep} от состава ($\epsilon_g = 0$) n_{si} от ϵ_g практически не зависит.

В УР приближении влияние заряда слоя обеднения может быть приближенно учтено добавлением в знаменателе (4) члена $2\sqrt{-\mu_b N_a / N_c}$. Определяя из (4) при условии $\epsilon_i = \mu_s$, $p_i = 0$ величину приповерхностного изгиба зон μ_s , соответ-

ствующего старта i -й подзоны, используя выражение для $n_s^{\text{кв}}$ (μ_s) и условие $n_{s0}=0$ (при этом $n_s^{\text{кв}}=N_{d_{ep}}$), получаем

$$n_{si} \approx 4\sqrt{3}\sqrt{-\mu_b N_a/\hbar s} (\exp \beta i - 1) \exp 2. \quad (9)$$

Стартовые поверхностные плотности являются наиболее чувствительным к уровню легирования параметром и в обогащенных слоях, причем, как видно из рис. 4, квазиклассическая теория и в этом случае находится в хорошем согласии с экспериментом. Зависимость n_{si} от концентрации доноров непосредственно связана с особенностью узкощелевых полупроводников — малостью критической концентрации перехода Мотта, благодаря чему электронный газ в объеме при всех технологически достижимых уровнях легирования является вырожденным. При вырождении электронного газа в объеме двумерные подзоны при стартах заполняются скачком от $n_i=0$ до $n_i=n_f=(9\pi n_b^2/8)^{1/2}$ [2], т. е. n_{si} определяются значениями n_s , при которых $n_i=n_f$. Используя это условие, из (7б) получаем в УР приближении

$$n_{si} = \left(9\pi \frac{N_d^2}{8} \right)^{1/2} b \exp \beta i. \quad (10)$$

Согласно (10), n_{si} в обогащенных слоях не зависят от ϵ_g и одинаковы в полупроводниках и полуметаллах, что также согласуется с экспериментом (рис. 4). Именно это позволяет сравнивать расчетные зависимости n_{si} (N_d) с экспериментальными данными, относящимися к образцам разного состава.

В заключение остановимся на вопросе о перемешивании поверхностным потенциалом состояний двумерного слоя и объема. Низкочастотный характер вольтфарадных характеристик вплоть до частот $f \sim 20$ МГц в материалах с $\epsilon_g < 50$ мэВ при низких температурах ($T \sim 1.8$ К) указывает на заметное перекрытие волновых функций двумерных состояний и состояний объема. С другой стороны, все экспериментально измеренные параметры 2D-подзон в этих материалах, в том числе бесщелевых, не зависят от состава, близки к значениям для материалов с $\epsilon_g > 80$ мэВ, в которых смешивание несущественно, и находятся в хорошем согласии с теорией, не учитывающей резонансного характера состояний. Этот результат является сильным аргументом в пользу того, что перемешивание зон не приводит к заметной перестройке спектра 2D-подзон. В противоположность этому авторы [1], основываясь на оптических измерениях, пришли к заключению о различии межподзональных энергий в обогащенных слоях $Hg_{1-x}Cd_xTe$ разного состава и связали эти различия с изменением положения дна 2D-подзон за счет эффектов перемешивания в материалах с малыми ϵ_g . Однако, поскольку при $p_i=0$ уравнения для электронной и дырочной зон разделяются [9], перемешивание не может привести к изменению энергии дна 2D-подзон $\epsilon_i(0)$, как и законов дисперсии в подзонах при энергиях выше потолка валентной зоны. Если же перемешивание изменяет законы дисперсии в 2D-подзонах в интервале энергий $\epsilon_i(0) < \epsilon < \mu_s$, то это неизбежно должно сопровождаться перераспределением носителей между подзонами с изменением ϵ_g , что противоречит представленным здесь экспериментальным результатам.

Близость экспериментальных циклотронных масс в инверсионных слоях образцов разного состава и их близость к расчетным значениям (рис. 2) свидетельствует об отсутствии заметного влияния смешивания зон и на участковые в туннельном обмене состояния вблизи уровня Ферми. Это подтверждается и слабым размытием уровней Ландау за счет резонансных эффектов, на что указывает близость амплитуд магнитоосцилляций емкости и оцененных из магнитополевых зависимостей амплитуд температур Дингла в инверсионных и обогащенных слоях материалов с малыми ϵ_g . Относительно невысокая вероятность туннелирования при отсутствии барьера в бесщелевых материалах, по-видимому, связана в основном с тем, что уже при небольших поверхностных плотностях носителей $p_F \gg p_{Fb}$ (p_{Fb} — фермиевский квазимпульс дырок объема) и двухчастичный процесс рекомбинации электрона 2D-слоя и дырки объема невозможен из-за несохранения параллельной 2D-слою компоненты квазимпульса.

К сожалению, в теоретическом отношении проблема смешивания зон сколько-либо последовательно не изучена. В свете указанной выше аналогии с ультра-

релятивистским газом может оказаться полезным подход к исследуемой системе приповерхностных электронов в кейновских полупроводниках как к $(1+2)$ -мерному аналогу вакуумного конденсата электронов вблизи сверхзаряженных ядер [1⁰]. В последнем случае энергетический спектр и распределение электронной плотности в состояниях вакуумной оболочки практически не зависят от того, что такие состояния находятся в резонансе с состояниями нижнего континуума, равно как и от поляризации вакуума. Близость законов дисперсии в 2D-подзонах к ультрарелятивистскому $\epsilon_i = p_i s$ объясняет и обнаруженные ранее особенности спинового расщепления в магнитоосцилляциях емкости, в частности отсутствие расщепления при малых ϵ_g и больших n_s .

Л и т е р а т у р а

- [1] Scholz J., Koch F., Ziegler J., Maier H. — Surf. Sci., 1984, v. 142, N 3, p. 447—451.
- [2] Радацев В. Ф., Дерябина Т. И., Зверев Л. П., Кулаев Г. И., Хомутова Г. С. — ЖЭТФ, 1985, т. 88, в. 6, с. 2088—2107.
- [3] Zhao W., Koch F., Ziegler J., Maier H. — Phys. Rev. B, 1985, v. 31, N 4, p. 2416—2421.
- [4] Zawadzky W., Klahn S., Merkt U. — Phys. Rev. B, 1986, v. 33, N 10, p. 6916—6928.
- [5] Singleton J., Nicholas R. J., Nasir F. — Sol. St. Commun., 1986, v. 58, N 2, p. 833—838.
- [6] Merkt U., Oelting S. — Phys. Rev. B, 1987, v. 35, N 5, p. 2460—2462.
- [7] Радацев В. Ф. — Письма ЖЭТФ, 1987, т. 46, в. 4, с. 157—159.
- [8] Takada Y., Arai K., Uemura Y. — Lect. Not. Phys., 1982, v. 152, p. 101—112.
- [9] Stepniewski R. — J. Phys. C: Sol. St. Phys., 1984, v. 17, N 4, p. 1853—1856.
- [10] Мигдал А. Б. Фермионы и бозоны в сильных полях. М., 1978. 273 с.

Уральский государственный
университет им. А. М. Горького

Получена 27.01.1988
Принята к печати 14.04.1988