

# Экранирование вертикального беспорядка в легированных полупроводниковых сверхрешетках

© И.П. Звягин, М.А. Ормонт

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (физический факультет),  
119899 Москва, Россия

(Получена 5 мая 1998 г. Принята к печати 4 июня 1998 г.)

Проведен расчет энергетического спектра электронов в легированных сверхрешетках с контролируемым беспорядком при учете кулоновских полей, возникающих за счет перераспределения электронов между квантовыми ямами. С помощью подхода, основанного на теории функционала плотности, и с использованием численного метода изучено влияние экранирования на вертикальный беспорядок, в частности на распределение уровней размерного квантования в таких структурах. Показано, что экранирование приводит к смещению максимума распределения и к существенному уменьшению его ширины; это может приводить к делокализации электронных состояний, определяющих вертикальную проводимость структуры.

## Введение

В последнее время возрос интерес к исследованию свойств вертикальной проводимости сверхрешеток (СР) с контролируемым беспорядком (КБ). СРКБ представляют собой структуры с квантовыми ямами, распределение уровней размерного квантования в которых можно задавать контролируемым образом путем управления толщинами слоев в процессе роста. Такие структуры на основе GaAs/GaAlAs экспериментально исследовались в ряде работ, преимущественно оптическими методами [1–3]. Они являются модельными квазиодномерными системами, позволяющими изучать влияние величины и типа беспорядка на энергетический спектр и кинетические свойства. В частности, для короткопериодных СР с небольшим числом ям оказалось возможным получить информацию о вертикальном (в направлении оси роста СР) транспорте возбуждаемых светом неравновесных носителей заряда [1]. В работе [4] были проведены прямые электрические измерения температурной зависимости вертикальной проводимости СРКБ, однородно по объему легированных Si, с числом ям порядка  $10^2$ , причем случайные флуктуации ширин ям обеспечивали гауссово распределение уровней размерного квантования. Результаты измерений [4] обнаружили ряд нетривиальных особенностей вертикальной проводимости при низких температурах; в частности, оказалось, что даже при большом беспорядке, когда задаваемая ширина случайного распределения уровней размерного квантования заметно превосходит ширину минизоны и естественно ожидать, что все состояния минизоны локализованы, вертикальная проводимость слабо зависит от температуры (квазиметаллическое поведение). Для объяснения указанной особенности поведения вертикальной проводимости в [4] было предположено, что она связана с влиянием кулоновских полей, обусловленных перераспределением электронов между ямами, на энергетический спектр легированной СР. В настоящей работе проведен расчет основного состояния легированных СРКБ при низких температурах и исследована зависимость его характеристик от параметров СР и от уровня легирования.

## Постановка задачи

Рассмотрим систему квантовых ям, разделенных барьерами постоянной ширины, с гауссовым распределением уровней размерного квантования, рассчитываемых в приближении изолированных ям. Все электроны с доноров внутри барьеров переходят в области квантовых ям, приводя к появлению электрических полей, смещающих уровни; это обуславливает необходимость самосогласованного решения задачи о вычислении электрических полей и распределения электронов по ямам СР. Мы ограничимся рассмотрением узких квантовых ям и случая слабого перекрытия волновых функций соседних ям; при этом можно ограничиться рассмотрением лишь нижней подзоны размерного квантования и приближенно считать заряд носителей в квантовой яме сосредоточенным в плоскости (эта модель аналогична модели заряженных слоев Висшера–Фаликова, использованной при рассмотрении экранирования за счет продольного перераспределения заряда в слоях [5]).

Коль скоро нас интересует область не слишком малых концентраций легирующей примеси, мы можем не учитывать обменно-корреляционных эффектов и ограничиться приближением Хартри (при малых концентрациях обменно-корреляционные эффекты могут быть существенными и приводить к образованию сверхструктур и перестройке энергетического спектра [4,6]). Для расчета спектра с учетом перераспределения электронов между квантовыми ямами удобно воспользоваться подходом, основанным на теории функционала плотности [7]. Именно, следуя [4,6], запишем энергию системы при  $T = 0$  К,  $E[n]$ , как функционал плотности  $n(z) = \sum_i \nu_i \delta(z - id)$ , где  $\nu_i$  — двумерная концентрация электронов в  $i$ -м слое,  $d$  — период СР (ограничивающий потенциал здесь учет при выборе базиса). Отметим, что в рассматриваемом случае функционал  $E[n]$  представляет собой просто функцию многих переменных  $\nu = \{\nu_i\}$ .

Имеем

$$E(\nu) = \sum_i E_i^{(0)} \nu_i + \sum_i (\nu_i^2 / 2\rho_0) + (1/2) \sum_{i,j} V_{ij} (\nu_i - \nu_0) (\nu_j - \nu_0), \quad (1)$$

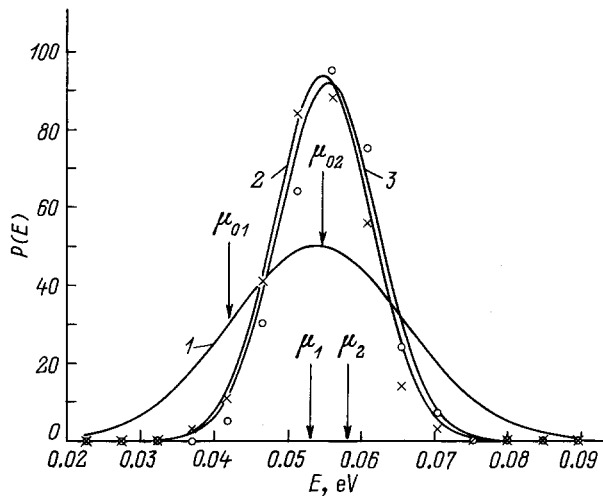
где  $E_i^{(0)}$  — энергетический уровень в  $i$ -й яме в отсутствие свободных электронов,  $\rho_0$  — двумерная плотность состояний в яме,  $V_{ij} = -2\pi e^2 d |i - j| / \epsilon$ ,  $\nu_0 = N_d d$  — средняя двумерная концентрация электронов в слое, а  $N_d$  — концентрация легирующей примеси. Минимизация  $E(\nu)$  при дополнительном условии  $\sum_i (\nu_i - \nu_0) = 0$  позволяет найти распределение электронов по квантовым ямам, отвечающее основному состоянию системы. Соответствующие условия минимума  $E(\nu)$  имеют вид

$$E_i^{(0)} + \nu_i / \rho_0 + \sum_j V_{ij} (\nu_j - \nu_0) + \mu = 0, \quad (2)$$

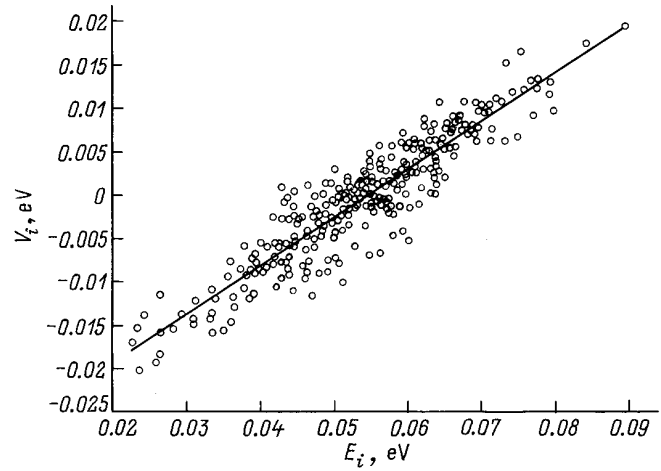
где  $\mu$  — множитель Лагранжа (химический потенциал системы), определяемый из условия  $\sum_i (\nu_i - \nu_0) = 0$ .

## Результаты расчета

Результаты численного решения системы уравнений (2) представлены на рис. 1, 2. Расчеты распределения перенормированных уровней  $E_i$ , вычисленных с учетом



**Рис. 1.** Функции распределения уровней размерного квантования в СРКБ, рассчитанные с учетом кулоновских полей, возникающих за счет пространственного перераспределения электронов 1 соответствует гауссовой затравочной функции распределения (3). 2 представляет собой гауссову аппроксимацию результатов расчета (светлые кружки) для концентрации легирующей примеси  $1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , 3 — то же для концентрации  $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  (результаты расчета представлены крестиками). Стрелками обозначены положения уровня Ферми  $\mu_1$  и  $\mu_2$ ; через  $\mu_{01}$  и  $\mu_{02}$  обозначены положения уровня Ферми, рассчитанные при указанных концентрациях без учета кулоновских полей, связанных с перераспределением зарядов.



**Рис. 2.** Зависимость сдвигов уровней размерного квантования, обусловленных перераспределением электронов, от энергий затравочных уровней  $E_i^{(0)}$  для гауссова распределения уровней при  $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Сплошная кривая соответствует линейной аппроксимации (4).

кулоновских полей, возникающих за счет перераспределения носителей между ямами, проводились для заданного затравочного гауссова распределения уровней размерного квантования.

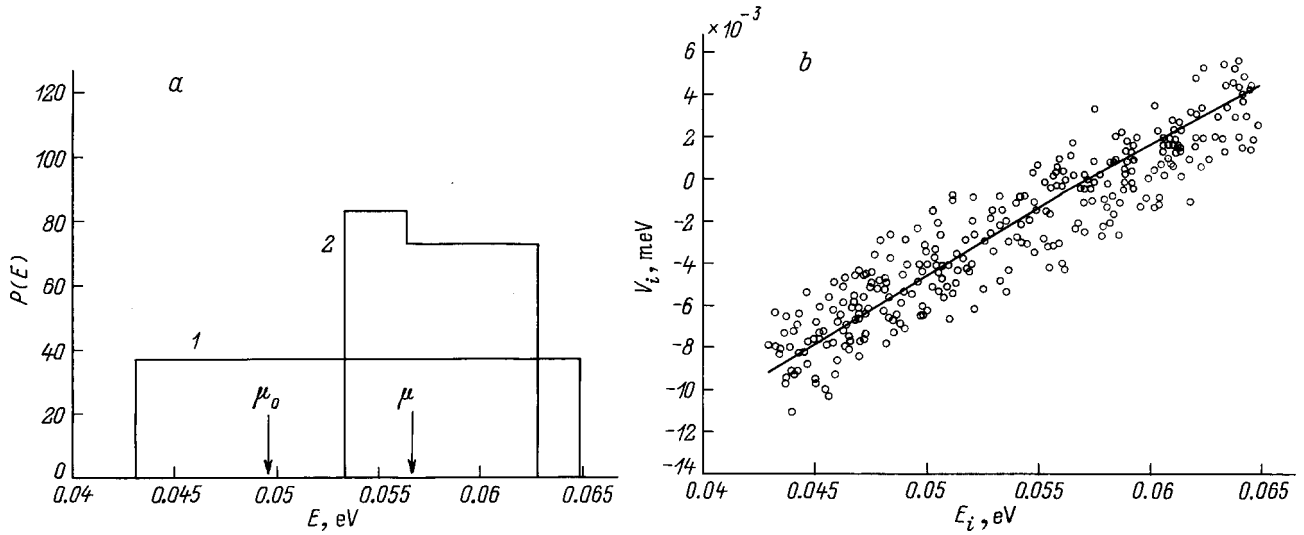
$$P(E_i^{(0)}) = (1/\sqrt{2\pi}w) \exp\{-(E_i^{(0)} - E_m)^2/2w^2\} \quad (3)$$

(рис. 1, кривая 1) при различных уровнях легирования; на рис. 1 представлены распределения уровней  $E_i$  для  $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$  (кривая 2) и  $N_d = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  (кривая 3). При расчетах были использованы следующие значения параметров:  $\rho_0 = 3 \cdot 10^{13} \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-3}$ ,  $w = 15 \text{ мэВ}$ ,  $\epsilon = 10$ ,  $d = 33 \text{ \AA}$ . Характер изменения спектра уровней размерного квантования нетрудно установить, рассматривая смещения уровней относительно их затравочных положений; смещение уровня в  $i$ -й яме  $E_i$  относительно затравочного уровня  $E_i - E_i^{(0)} = V_i$  определяется значением потенциальной энергии электрического поля  $V_i$  в месте расположения  $i$ -й ямы. Зависимость величин  $V_i$  от положения уровня  $E_i^{(0)}$ , соответствующая кривой 2 на рис. 1 ( $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ), показана на рис. 2. На рисунке явно проявляется тенденция, состоящая в том, что уровни размерного квантования смещаются по направлению к перенормированному уровню Ферми  $\mu$ . Зависимость  $V_i(E_i^{(0)})$  можно аппроксимировать выражением

$$E_i - E_i^{(0)} = A(E_i^{(0)} - \mu), \quad (4)$$

где  $A \approx 0.55$ . Если принять аппроксимацию (4) для "среднего" смещения затравочного уровня, то функция распределения перенормированных уровней также имеет гауссовский вид с полушириной  $w_1 = Aw$  и со сдвинутым максимумом  $E_m = E_m^{(0)} + A(E_m^{(0)} - \mu)$ .

Видно, что кулоновские эффекты приводят к существенному уменьшению ширины функции распределения



**Рис. 3.** Модификация функции распределения уровней размерного квантования  $P(E_i^{(0)}) = (1/2w)\Theta\{w - |E_i^{(0)} - E_0|\}$  за счет кулоновских полей, возникающих при перераспределении электронов между квантовыми ямами ( $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ,  $w = 22 \text{ мэВ}$ ). *a* — функция  $P(E_i^{(0)})$  (кривая 1) и функция распределения (кривая 2), получаемая из нее с использованием кусочно-линейной аппроксимации распределения сдвигов уровней размерного квантования (линия с изломом на рис. 3, *b*); *b* — зависимость сдвигов уровней размерного квантования от затравочных энергий уровней.

и к смещению уровня Ферми. Для того чтобы понять физические причины модификации энергетического спектра уровней размерного квантования, описываемой соотношением (4), напомним, что в СР с одной "дефектной" квантовой ямой с шириной, отличающейся от ширины "регулярных" ям СР, глубина уровня размерного квантования уменьшается в  $\beta = 1 + 4\pi e^2 \rho_0 d / \epsilon$  раз за счет вертикального экранирования, обусловленного перераспределением заряда между ямами. Для приведенных выше значений параметров имеем  $\beta \approx 1.9$ , т.е. средний наклон  $A$  в (4) практически совпадает с  $1/\beta$ . Разброс смещений уровней относительно линейной аппроксимации (4) обусловлен тем, что для любой из ям существенны флуктуации параметров ям ближайшего окружения. Эта интерпретация подтверждается расчетом перенормировки спектра уровней, проведенным для ансамбля СР, каждая из которых содержит лишь одну "дефектную" яму, с тем же распределением уровней, что и затравочное распределение  $P(E_i^{(0)})$ . Для такого ансамбля соотношение (4) выполняется точно, а случайный разброс смещений уровней отсутствует.

Отметим, что, строго говоря, картина смещения уровней, расположенных выше и ниже уровня Ферми, не симметрична относительно  $\mu$ , т.е. распределения смещений выше и ниже  $\mu$  аппроксимируются линейными функциями типа (4) с несколько отличающимися коэффициентами  $A$ . В силу сильной зависимости гауссовой функции распределения от энергии эта асимметрия слабо сказывается на виде перенормированной функции распределения. Асимметрия сдвигов становится, однако, очевидной для медленно изменяющейся функции распределения. На рис. 3, *a, b* показаны результаты расчетов для

затравочной функции распределения уровней, постоянной в некотором интервале энергий и равной нулю вне его,

$$P(E_i^{(0)}) = (1/2w)\Theta\{w - |E_i^{(0)} - E_0|\} \quad (5)$$

(эта функция изображается кривой 1 на рис. 3, *a*). Зависимость сдвигов уровней размерного квантования от затравочных энергий уровней для этого случая показана на рис. 3, *b*. Как в области  $E_i^{(0)} < \mu$ , так и в области  $E_i^{(0)} > \mu$  сдвиги уровней могут быть "в среднем" аппроксимированы линейными функциями типа (3) с наклонами  $A_1$  и  $A_2$  соответственно. При этом  $A_1 > A_2$ , т.е. наклон при  $E_i^{(0)} < \mu$  оказывается несколько большим, чем при  $E_i^{(0)} > \mu$ . По этой причине при энергиях, меньших  $\mu$ , возникает характерное возрастание функции распределения уровней (кривая 2 на рис. 3, *a*, получаемая с помощью кусочно-линейной аппроксимации распределения, представленного на рис. 3, *b*).

## Обсуждение результатов

Таким образом, легирование СРКБ приводит не только к простому смещению уровня Ферми, но и к существенному изменению положения уровней размерного квантования, соответствующих минимумам подзон в отдельных ямах. В результате уровни соседних ям сближаются, и это приводит, с одной стороны, к уменьшению беспорядка, определяемому фактором  $\beta$ , а с другой стороны, к возрастанию интегралов перекрытия волновых функций электронов соседних ям, т.е. эффективной ширины минизоны. Оба эти фактора и определяют тенденцию

к делокализации электронных состояний в направлении оси  $CP$ , проявляющуюся в измерениях вертикальной проводимости легированных  $CP$  с вертикальным беспорядком [5].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 97-02-17334) и Министерства образования (грант в области фундаментального естествознания 97-0-7.1-174).

## Список литературы

- [1] A. Chomette, B. Deveaud, A. Regreny, G. Bastard. Phys. Rev. Lett., **57**, 1464 (1986).
- [2] T. Yamamoto, M. Kasu, S. Noda, A. Sasaki. J. Appl. Phys., **68**, 5318 (1990).
- [3] E. Tuncel, L. Pavesi. Phil. Mag., **65**, 213 (1992).
- [4] G. Richter, W. Stolz, P. Thomas, S. Koch, K. Maschke, I.P. Zvyagin. Superlat. Microstr., **22**, No 4, 475 (1997).
- [5] P.B. Vischer, L.V. Falikov. Phys. Rev., B, **3**, 2541 (1971).
- [6] И.П. Звягин. ЖЭТФ, 1998 (в печати).
- [7] В. Кон, П. Вашишта. В сб.: *Теория неоднородного электронного газа*, под ред. С. Лундквиста и Н. Марча (М., Мир, 1987). с. 86.

*Редактор В.В. Чалдышев*

## Vertical screening in doped semiconductor superlattices with intentional disorder

I.P. Zvyagin, M.A. Ormont

M.V. Lomonosov Moscow State University,  
119899 Moscow, Russia

**Abstract** We calculate the energy spectrum of doped semiconductor superlattices with intentional disorder taking account of the Coulomb interaction stemming from redistribution of electrons over the quantum wells. Using the density functional theory, we study numerically the effect of screening on vertical disorder, in particular, on the distribution of size quantization levels in these structures. We show that screening gives rise to a shift of the maximum of the level distribution and appreciable decrease of its width; this can result in delocalizing electron states that determine vertical conductivity of the structure.