

ВЛИЯНИЕ ЕСТЕСТВЕННОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ ОТ ПОВЕРХНОСТИ С ВЫСОКИМИ ИНДЕКСАМИ НА СПЕКТР 2D-ЭЛЕКТРОНОВ В МНОГОДОЛИННОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

В.А.Волков, В.Б.Сандомирский

Рассмотрено влияние поверхности кремния с высокими индексами на спектр двумерного (2D) электронного газа в инверсионном приповерхностном слое. Одновременный учет сверхпериода в естественной поверхностной решетке и многодолинности позволяет количественно объяснить эксперимент и предсказать новые эффекты.

Последнее десятилетие интенсивно развиваются исследования свойств 2D электронного газа в инверсионных слоях, образующихся на поверхности полупроводников при сильном загибе зон [1, 2].

В [3] был предложен способ создания поверхностной сверхрешетки (СР) с помощью скола кристалла по плоскости с высокими индексами Миллера. В спектре 2D электронного газа около поверхности такая СР должна привести к появлению минищелей. Одновременно и независимо эта идея была реализована [4] в инверсионном слое n -типа на (118) Si.

К настоящему времени уже исследованы поверхности Si (118) [4], (115) [5], (2, 2, 23) [5], (119) [6]. Наблюдаемые особенности связывались с существованием щели в 2D электронном спектре, которая проявлялась при прохождении через нее уровня Ферми E_F . В [4, 5] появление щели объяснялось наличием поверхностной СР. Однако кристаллографический период СР A и экспериментальный $L = \pi/k_F$ (k_F – фермиевский импульс, при котором E_F пересекает середину щели) сильно различаются (2-й и 3-й столбец таблицы).

Поверхность Si	$A, \text{Å}$	$L_{\text{эксп}}, \text{Å}$	$L_{\text{теор}}, \text{Å}$
(1 1 5)	10	~ 70	66
(1 1 8)	31	101 – 107	104
(1 1 9)	18	110 – 120	116
(2 2 23)	89	~ 200	223

В связи с этим в [6] был предложен иной механизм образования щели, не связанный с СР. Критическое обсуждение теории [6] дано ниже.

Целью работы является краткое изложение результатов последовательной теории СР в многодолинном полупроводнике. СР с периодом A , являющимся для определенности одним из векторов решетки, должна вызывать минищели, положение которых в приближении слабой связи определяется условием $k_m = \pi m / A$ (m — целое число), причем квазиволновой вектор k_m должен измеряться от центра зоны Бриллюэна, а не от центра долины, как считается в обычном варианте метода эффективной массы [4, 5]. Поэтому наблюдаемый период π / k_F (k_F измеряется от центра долины) отнюдь не должен совпадать с истинным.

Рассмотрим кристалл, ограниченный атомной плоскостью. Он имеет $2D$ симметрию, определяемую симметрией поверхностной решетки. Это существенно сказывается на спектре состояний, локализованных вблизи поверхности. Для $(11n)\text{Si}$ $2D$ решетка Бравэ является простой прямоугольной для четных n и центрированной прямоугольной для нечетных n . Поэтому $2D$ зоны Бриллюэна для этих двух случаев заметно отличаются по размерам. Основное состояние в инверсионном слое на $(11n)\text{Si}$ при $n \gg 1$ происходит от двух эллипсоидов, центрированных в точках $\pm K_0 [001]$ в $3D$ зоне Бриллюэна. Соответствующие изоэнергетические эллипсы на рисунке не приведены для наглядности к 1-й $2D$ зоне Бриллюэна, $\theta = \arcsin \sqrt{2/(2+n^2)}$ — угол между (001) и $(11n)$. Центры эллипсов попадают во 2-ю (четные n) или в 1-ю (нечетные n) $2D$ зону Бриллюэна. В спектре электронов возникают разрывы, когда ферми-эллипс касается границ m -й $2D$ зоны Бриллюэна. Соответствующие значения k_F для четных и нечетных n определяются формулами

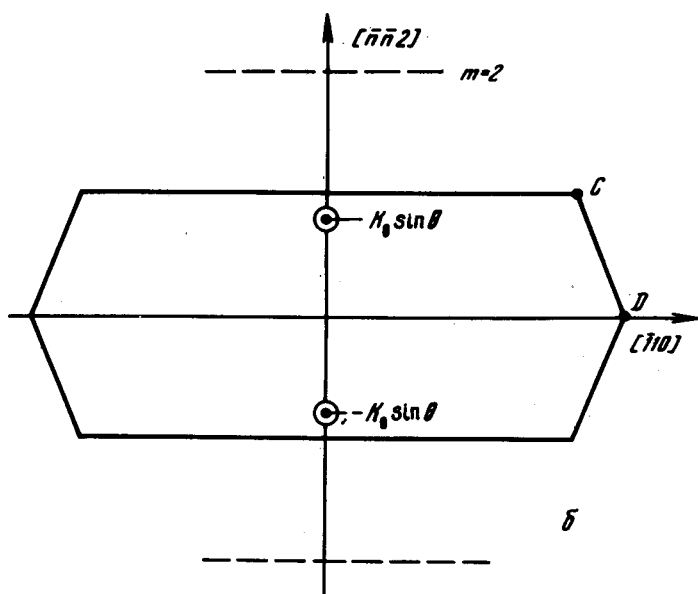
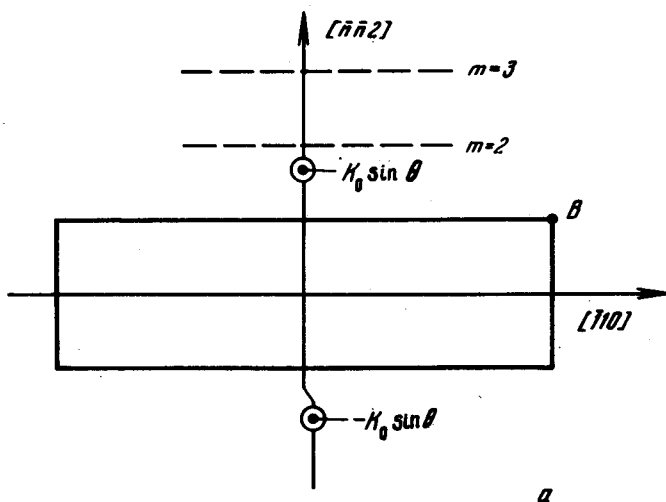
$$k_F^{(m)}(\text{чет}) = \left| \frac{\pi m \sin \theta}{a} - K_0 \sin \theta \right|, \quad k_F^{(m)}(\text{нечет}) = \left| \frac{2\pi m \sin \theta}{a} - K_0 \sin \theta \right|, \quad (1)$$

a — постоянная ГЦК решетки (для Si $a = 5,43 \text{Å}$).

Сравнение с опытом удобно провести для псевдопериода $L^{(m)} = \pi / k_F^{(m)}$. В Si ($K_0 = 0,85 \cdot 2\pi/a$) нижним по энергии щелям отвечают $L^{(2)}(\text{чет})$ и $L^{(1)}(\text{нечет})$, что хорошо согласуется с опытом (см. таблицу).

Аналогично можно рассмотреть поверхность $(2, 2, 23)\text{Si}$, для которой $2D$ зона Бриллюэна является прямоугольником с длинным ребром $2\pi\sqrt{2}/a$ вдоль $[\bar{1} 1 0]$ и коротким ребром $\pi \sin \theta / a$ вдоль $[2\bar{3} 2\bar{3} 4]$, при-

чем $\theta = 7^\circ$. Центры эллипсов попадают в 3-ю $2D$ зону Бриллюэна. Разрывам в спектре соответствуют псевдопериоды $L^{(m)} = 2a / (\sin \theta | m - 3, 4 |)$.



Первая $2D$ зона Бриллюэна для $(11n)\text{Si}$: a — n — четное, b — n — нечетное. Пунктиром намечены границы следующих зон Бриллюэна.

$$\text{зна. } B = \frac{\pi}{a} (\sqrt{2}, \sin \theta); C = \frac{\pi}{a} (\sqrt{2}, 2\sin \theta); D = \left(\frac{\pi \sqrt{2}(n^2 + 3)}{a(n^2 + 2)}, 0 \right)$$

На опыте удалось зарегистрировать пока по одной щели для каждой из поверхностей, указанных в таблице. Оценим концентрации $N^{(m)}$, требующиеся для достижения E_F следующих по энергии щелей. Для $(118)\text{Si}$

следующую щель с $L^{(1)}(\text{чет}) = 45 \text{ \AA}$ можно достичь при $N^{(1)}(\text{чет}) = 1,6 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$, что вполне реально. Для (2, 2, 23)Si нижней является щель с $m = 3$ ($L^{(3)} = 223 \text{ \AA}$, $N^{(3)} = 6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$), по мере увеличения N должны достигаться щели с $m = 4$ ($L^{(4)} = 149 \text{ \AA}$, $N^{(4)} = 1,4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$) и $m = 2$ ($L^{(2)} = 74 \text{ \AA}$, $N^{(2)} = 6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$). Отметим также, что из (1) следует возможность определения K_0 по измерениям $L^{(m)}$.

Из приведенных оценок ясно, почему эффекты СР не наблюдались в инверсионных слоях p -типа на (115) и (118)Si [4]. Поскольку экстремум валентной зоны находится в центре зоны Бриллюэна ($K_0 = 0$), должен был наблюдаться истинный период A , которому отвечают слишком большие N . Однако уже для (2, 2, 23)Si $A = 89 \text{ \AA}$ и эффекты СР должны наблюдаться при реальных N .

Существует и иное объяснение появлению щели в спектре. В [6] замечено, что закон дисперсии электронов в инверсионном слое n -типа на (11 n)Si при $n \gg 1$ можно представить в виде двух близко расположенных парабол. Междолинное взаимодействие расщепляет параболы в точке их пересечения и создает щель с псевдопериодом $L = a/0,3 \sin \theta$. Формально положение этой щели совпадает с нижними щелями, получаемыми из (1) для (11 n)Si. Хорошее согласие модели [6] с экспериментом для $n = 5, 8, 9$ является, по нашему мнению, случайным. Например, если бы выполнялось $K_0 < 0,75 \cdot 2\pi/a$, то указанного согласия для четных n уже не было бы (нижней являлась бы щель с $L^{(1)}(\text{чет})$, не описываемая [6]). Кроме того, для (2, 2, 23)Si теория [6] дает $L = 149 \text{ \AA}$. Это значение хуже согласуется с опытом, чем наше (см. таблицу), и отвечает в наших обозначениях более высокоэнергетичной щели с $L^{(4)}$. Поскольку в [6] не учтена реальная 2D симметрия поверхности Si, то для инверсионных слоев p -типа эта модель вообще не приводит к разрывам в спектре. Поэтому мы считаем теорию [6] непоследовательной. Разумеется, решающее слово остается за опытом.

Развитый подход применим и к другим аналогичным ситуациям: искусственные СР в многодолинных полупроводниках, магнитные поверхностные уровни, поверхностные фононы, плазмоны и т.д.

Мы благодарим В.А.Петрова за полезные обсуждения.

Институт радиотехники
и электроники

Поступила в редакцию
28 апреля 1978 г.

Литература

- [1] Proc. of the Int. Conf. on Electr. Prop. of Quasi - 2D Systems, in Surf. Sci., **58**, №1, 1976.
- [2] 2 Int. Conf. on Electr. Prop. of 2D Systems, Berchtesgaden, September 1977, Würzburg, 1977.
- [3] В.А.Петров. VI Всесоюзное совещание по физике поверхностных явлений в полупроводниках, Киев, ноябрь 1977, тезисы докладов, "Наукова думка", Киев, 1977, ч. 2, стр. 80; ФТП, **12**, 380, 1978.
- [4] T.Cole, A.A.Lakhani, P.J.Stiles. Phys. Rev. Lett., **38**, 722, 1977.

- [5] A.A.Lakhani, T.Cole, P.J.Stiles. 2 Int. Conf. on Electr. Prop. of
2D Systems, Berchtesgaden, September 1977, Würzburg, 1977, p.2, 428.
- [6] L.J.Sham, S.J.Allen, Jr., A.Kamgar, D.C.Tsui. Phys. Rev. Lett., **40**,
472, 1978.
-