

## ЭФФЕКТ ИЗМЕНЕНИЯ ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ ПРИМЕСЕЙ ПРИ ПЕРЕДИСЛОКАЦИИ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В СИСТЕМЕ КВАНТОВЫХ ЯМ

*В.И.Белявский\**, *Ю.В.Копеев*, *Н.В.Корняков*<sup>†</sup>, *С.В.Шевцов\**

*Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН  
117924 Москва, Россия*

*\*Воронежский государственный педагогический университет  
394043 Воронеж, Россия*

*†Институт микроэлектроники РАН  
150051 Ярославль, Россия<sup>1)</sup>*

Поступила в редакцию 19 мая 1995 г.

Исследован эффект изменения энергии связи электронов на примесных атомах при передислокации волновой функции в системе квантовых ям во внешнем электрическом поле, продольном по отношению к оси роста гетероструктуры. Рассмотренный эффект приводит к существенному изменению концентрации свободных носителей заряда и тем самым к модуляции латеральной проводимости системы.

1. Передислокация электронных волновых функций [1], происходящая в системе квантовых ям под действием внешнего электрического или магнитного [2] полей, электромагнитного излучения [3] или температуры [4], может быть использована в качестве базисной концепции для построения нового класса быстродействующих квантовых приборов [5].

---

<sup>1)</sup>e-mail: imras@iman.yaroslavl.su

Одним из применений данной концепции является эффект модуляции латеральной (вдоль слоев) проводимости системы квантовых ям (КЯ) внешним электрическим полем, продольным по отношению к оси роста гетероструктуры (ГС). Вследствие передислокации во внешнем поле максимума модуля электронной волновой функции из КЯ с низкой подвижностью в яму с высокой подвижностью (соответствующие значения могут отличаться более чем на порядок величины) полная проводимость системы также увеличивается. Идея полевого транзистора с модулируемой подвижностью предлагалась ранее в классическом варианте Сакаки [6] и впоследствии была усовершенствована в [7] с учетом квантовых эффектов. Однако эта идея пока не нашла практического применения из-за малой величины модуляции проводимости системы.

В данной работе мы исследуем никем не упоминавшийся ранее эффект изменения энергии ионизации примесных атомов вследствие передислокации электронной волновой функции в системе КЯ. Кроме самостоятельного интереса, этот эффект привлекает также возможностью на несколько порядков повысить величину модуляции латеральной проводимости системы КЯ (используемой, например, в качестве канала полевого транзистора), благодаря изменению внешним электрическим полем не только подвижности, но и концентрации электронов.

2. Влияние передислокации электронной волновой функции на энергию ионизации примесного атома можно проследить в рамках метода эффективной массы. Уравнение Шредингера для огибающей  $\Phi(\mathbf{r}, z)$  электронной волновой функции имеет вид

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(z) - eFz + V(\mathbf{r}, z) \right\} \Phi(\mathbf{r}, z) = E\Phi(\mathbf{r}, z), \quad (1)$$

где  $e, m$  — заряд и эффективная масса электрона,  $U(z)$  — исходный потенциал ГС,  $V(\mathbf{r}, z)$  — потенциал, создаваемый примесным атомом,  $F$  — напряженность электрического поля. Ось  $z$  направлена вдоль оси роста ГС,  $\mathbf{r} = (x, y)$ . Эффективная масса электрона  $m$  предполагается изотропной, различия эффективных масс в материалах КЯ и барьеров, а также относительно слабая непараболичность зоны проводимости не существенны для рассматриваемых в задаче квазиимпульсов.

Огибающую волновой функции электрона, локализованного на примеси, удобно представить в виде разложения по системе собственных функций уравнения (1), не включающего потенциал примеси. Эти функции можно записать в виде

$$\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z; F) = S^{-1/2} \psi_n(z; F) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (2)$$

где  $S$  — нормировочная площадь (в плоскости  $xy$ ),  $\psi_n(z; F)$  — одномерная огибающая функция,  $n$  — номер подзоны размерного квантования,  $\mathbf{k}$  — квазиимпульс свободного движения в плоскости  $xy$ . При записи (2) мы учли, что для представляющих интерес относительно малых значений  $\mathbf{k}$  зависимостью огибающих от квазиимпульса можно пренебречь.

Электрическое поле, приложенное вдоль оси ГС, приводит к тому, что размерно-квантованные состояния электронов становятся квазистационарными. Для нижних подзон и относительно слабых полей характерные времена распада подобных состояний велики — оценка показывает, что такие состояния могут рассматриваться как стационарные, если

$$F \ll m^{1/2} E^{3/2} / \hbar e. \quad (3)$$

Здесь  $E$  — энергия электрона, отсчитанная от дна КЯ. В случае наноструктур  $F \ll 10^6$  В/см.

Рассмотрим случай сильно локализованного потенциала примеси, представив его в виде

$$V(\mathbf{r}, z) = -V_0 a^3 \delta(\mathbf{r}) \delta(z - z_0). \quad (4)$$

Здесь  $z_0$  — координата примесного атома,  $V_0$  — глубина потенциальной ямы, параметр решетки  $a$  включен в определение  $V(\mathbf{r}, z)$ , чтобы сохранить необходимую размерность. Потенциал (4) хорошо описывает характерные особенности глубоких уровней в полупроводниках. Отметим также, что дальнедействующая часть потенциала примеси в структурах с высоким уровнем легирования эффективно экранируется.

Уравнение Лифшица [8] для потенциала (4), определяющее энергию локализованного электронного состояния, можно представить в виде

$$\frac{V_0 a^3}{(2\pi)^2} \sum_n \left\{ |\psi_n(z_0; F)|^2 \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{E_n(\mathbf{k}) + E_{imp}} \right\} = 1. \quad (5)$$

Здесь  $E_{imp}$  — энергия связи электрона на примесном центре. Если учитывать только нижнюю подзону, то можно получить аналитическое выражение для энергии связи:

$$E_{imp}(F) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left[ \exp \left( \frac{2}{wa |\psi_1(z_0; F)|^2} \right) - 1 \right]^{-1}, \quad (6)$$

где безразмерный параметр  $w = ma^2 V_0 / \pi \hbar^2$  может рассматриваться как эффективная мощность потенциала примеси. Множитель  $|\psi_1(z_0; F)|^2$ , зависящий как от положения примеси в ГС, так и от электрического поля, приводит к сильной зависимости энергии связи от поля.

Мы ограничимся в дальнейшем рассмотрении системы двух КЯ, учитывая две нижние подзоны размерного квантования, поскольку в представляющих интерес наноструктурах с двумя КЯ более высокие подзоны зоны проводимости (если они вообще возникают) располагаются существенно выше первых двух. Расстояние же между первой и второй подзонами, вообще говоря, сравнимо с энергией связи электрона в примесном состоянии.

При передислокации волновой функции, соответствующей нижней подзоне, из одной КЯ в другую происходит также передислокация волновых функций других подзон, причем в силу сохранения ортогональности функций перераспределение плотности вероятности в этих подзонах происходит в противоположных направлениях. Так, при переходе первой огибающей из более широкой в более узкую КЯ вторая огибающая оказывается локализованной главным образом в более широкой КЯ. Разумеется, в этом случае вторая огибающая может более существенно влиять на величину энергии связи примесного состояния.

При учете двух или большего числа подзон простое аналитическое решение типа (6) для энергии связи получить не удастся, и необходимо численное решение уравнения (6). При этом следует определить величину параметра  $w$ , которую можно найти, если известно объемное значение энергии связи  $E_{imp}^{(3D)}$  для данной примеси. В этом случае уравнение (5) приводит к  $w = 1 / (1 - \xi \operatorname{arctg} \xi)$ , где  $\xi = (2ma^2 E_{imp}^{(3D)} / \pi^2 \hbar^2)^{1/2}$ . Калибровку параметра  $w$  можно произвести и по известному из эксперимента значению энергии связи примесного состояния в ГС с одной КЯ подходящей ширины.

3. Рассмотрим возможные проявления исследуемого эффекта. Латеральная проводимость системы квантовых ям

$$\sigma = -\frac{e^2}{2\pi\hbar^2} \sum_n \int E \tau_n(E) \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE \quad (7)$$

зависит от двух параметров: от времени релаксации  $\tau_n(E)$  и от энергии Ферми через квазифермиевскую функцию распределения электронов  $f(E)$ . Вызывая внешним полем передислокацию волновой функции из одной квантовой ямы в другую, мы имеем возможность влиять на оба эти параметра и тем самым управлять величиной проводимости системы.

Обратное время релаксации представляется в виде суммы обратных парциальных времен

$$\tau_n^{-1}(E) = \sum_m \tau_{nm}^{-1}(E) \quad (8)$$

и определяется процессами внутриводзонного ( $n = m$ ) и междозонного ( $n \neq m$ ) рассеяний. Процессы междозонного рассеяния являются доминирующими в относительно узком диапазоне электрических полей, когда в процессе передислокации обеспечивается максимальное перекрытие огибающих функций разных энергетических подзон.

В случае рассеяния на потенциале (4) получаем

$$\tau_{nm}^{-1}(E) = \frac{(V_0 a^2)^2}{\hbar} \int_0^\infty k dk \delta(E_n(k) - E_m(k)) \int_{-\infty}^\infty dz N(z) \psi_n^2(z) \psi_m^2(z), \quad (9)$$

где  $N(z)$  — распределение примеси в образце. Если легирована только одна КЯ, то при передислокации волновой функции под действием поля в другую КЯ величина последнего интеграла в правой части (9) уменьшается вследствие изменения степени перекрытия функций  $N(z)$  и  $\psi_n(z)$ . В результате возрастают время релаксации и проводимость системы. На этом принципе основана работа полевых транзисторов [6, 7]. Воздействуя при передислокации волновой функции на энергию ионизации примесей  $E_{imp}$ , мы управляем также положением квазиуровня Ферми и, следовательно, концентрацией носителей тока. Влияние этого фактора может значительно превышать влияние селективного рассеяния, а в совокупности с ним давать большую величину модуляции латеральной проводимости системы.

4. Чтобы проиллюстрировать приведенные выше соображения, мы провели численное решение уравнения Лифшица (5) для ряда конкретных структур типа  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , содержащих две, три и более КЯ. При этом огибающие функции и энергии подзон мы находили из уравнения Шредингера (1) при  $V(r, z) \equiv 0$ . Когда был необходим учет кулоновского взаимодействия [4], это делалось путем самосогласованного решения уравнения Пуассона.

Ниже приведены наиболее характерные результаты, полученные для структуры 9-7-7, где цифры указывают последовательно ширину первой КЯ, внутреннего барьера и второй КЯ в единицах межатомного расстояния (мы считали  $a = 5,665 \cdot 10^{-8}$  см). Глубина КЯ 0,3 эВ. Предполагалось, что примесь находится в центре более широкой КЯ. Исходные энергии ионизации донорных примесей, необходимые для определения параметра  $V_0$ , принимались равными 20 мэВ для примеси типа Si и 100 мэВ для более глубокой примеси Te в GaAs КЯ шириной 10 межатомных расстояний. Результаты расчета энергии связи как функции напряженности электрического поля  $F$  представлены

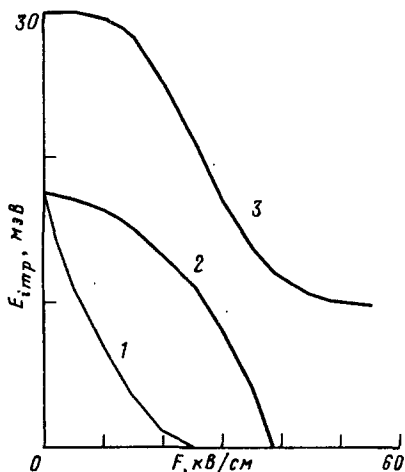


Рис.1. Зависимость энергии ионизации примесного атома Si в тестовой структуре с двумя КЯ от приложенного электрического поля. Кривая 1 отвечает случаю  $E_{imp}(0) < \Delta(0)$  при учете только одной нижней подзоны. Кривые 2 и 3 рассчитаны с учетом вкладов двух подзон размерного квантования при  $E_{imp}(0) < \Delta(0)$  и  $E_{imp}(0) > \Delta(0)$ , соответственно

на рис.1. При расчете учитывались две подзоны размерного квантования. Рассмотрены случаи, когда  $E_{imp} < \Delta$  (кривая 2) и  $E_{imp} > \Delta$  (кривая 3), где  $\Delta$  — расстояние между экстремумами подзон при  $F = 0$ . На этом же рисунке для сравнения представлена зависимость  $E_{imp}(z_0; F)$ , вычисленная с учетом лишь одной нижней подзоны (кривая 1). Подобное поведение энергии связи с ростом поля обнаруживают многие асимметричные наноструктуры как с двумя, так и с большим числом КЯ.

Зависимость от внешнего электрического поля поверхностной концентрации электронов (в логарифмическом масштабе) в различных КЯ двухъямной тестовой структуры с примесью Te, показана на рис.2, из которого следует, что при температуре 77 К (для которой выполнен расчет) изменение концентрации в результате передислокации волновых функций может составлять несколько порядков величины.

Латеральная проводимость двухъямной тестовой структуры вычислялась по формуле (7) с использованием найденных ранее огибающих волновых функций. Положение уровня Ферми определялось путем прямого подсчета числа частиц в системе при условии, что функция распределения электронов имеет фермиевский вид. Объемная концентрация донорной примеси в более широкой КЯ принималась равной  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Кроме того, предполагалось наличие в структуре однородно распределенных неконтролируемых акцепторных центров с объемной концентрацией  $10^{14} \text{ см}^{-3}$ . Зависимость латеральной проводимости тестовой структуры (в логарифмическом масштабе в относительных единицах) от приложенного электрического поля при легированной широкой КЯ мелкими донорными примесями Si или Te изображена на рис.3. Толстые кривые (1 и 2) — с учетом, тонкие (3 и 4) — без учета рассматриваемого эффекта изменения энергии ионизации примесных атомов во внешнем поле при передислокации волновой функции из КЯ с низкой подвижностью в КЯ с высокой подвижностью электронов.

Значительная величина модуляции латеральной проводимости системы КЯ во внешнем электрическом поле (по сравнению с результатами работ [6, 7]) позволяет использовать исследованный эффект для создания на его основе квантовых приборов нового поколения.

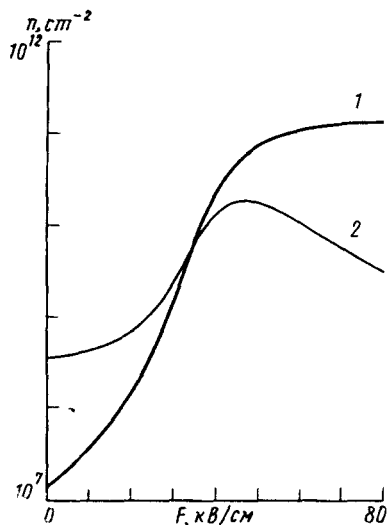


Рис.2. Поверхностные концентрации электронов (в логарифмическом масштабе) в разных КЯ двухъямной тестовой структуры, селективно легированной примесью Те, в зависимости от приложенного электрического поля при  $T = 77$  К: 1 — КЯ с низкой подвижностью, 2 — КЯ с высокой подвижностью

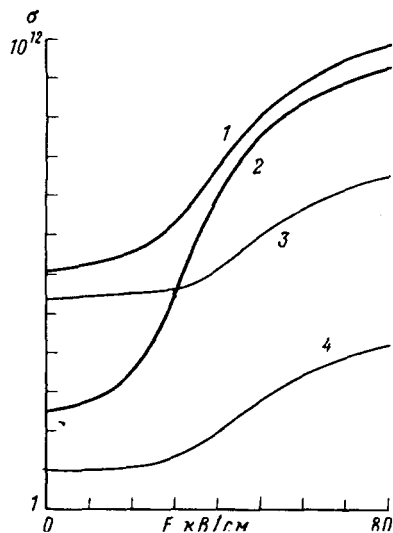


Рис.3. Латеральная проводимость тестовой структуры с двумя КЯ, одна из которых легирована, как функция приложенного электрического поля (в относительных единицах в логарифмическом масштабе). Кривые на графике соответствуют случаям: 1 — примесь Si при  $T = 10$  К, 2 — примесь Те при  $T = 77$  К. Кривые 3 и 4 — тоже, но без учета эффекта изменения энергии ионизации

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Российской МНТП "Физика твердотельных наноструктур" и ГНТП "Перспективные технологии и устройства микро- и нанoeлектроники".

1. G.Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, Halsted, New-York, 1988.
2. А.А.Горбачевич, В.В.Капаев, Ю.В.Копяев, Письма в ЖЭТФ **57**, 580 (1993).
3. Ю.В.Копяев, Н.В.Корняков, Международный симпозиум "Наноструктуры: физика и технология", С.-Петербург, 1994.
4. В.В.Капаев, Ю.В.Копяев, Н.В.Корняков, Письма в ЖЭТФ **58**, 901 (1993).
5. А.А. Gorbachevich, V.V.Kapayev, Yu.V.Kopyayev, and V.Ya.Kremlev, *Phys. Low-Dim. Struct.* **5**, 57 (1994).
6. H.Sakaki, *Jap. J. Appl. Phys.* **21**, L381 (1982).
7. V.Vinter and A.Tardella, *Appl. Phys. Lett.* **50**, 410 (1987).
8. И.М.Лифшиц, ЖЭТФ **17**, 1017 (1947).