

# ВЛИЯНИЕ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В ЛЕГИРОВАННЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ С КОНТРОЛИРУЕМЫМ БЕСПОРЯДКОМ

*И. П. Звягин, А. Г. Миронов, М. А. Ормонт\**

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова  
119992, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 25 марта 2003 г.

Вычислено распределение электронной плотности в легированных сверхрешетках с контролируемым вертикальным беспорядком, обусловленным флуктуациями толщин слоев в направлении оси роста структуры, при учете обменного взаимодействия. Показано, что при низких температурах обменное взаимодействие приводит к возрастанию разброса уровней размерного квантования и к образованию мягкой щели в распределении концентраций по ямам сверхрешетки.

PACS: 71.23.-k, 73.23.-b

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Сверхрешетки с контролируемым беспорядком (СРКБ) представляют собой структуры с квантовыми ямами, распределение уровней размерного квантования в которых можно задавать контролируемым образом путем управления толщинами слоев в процессе роста. Создание таких структур открывает возможности изучения влияния величины и типа беспорядка на электронные состояния в них и на их кинетические свойства [1–4]. В настоящей работе рассматриваются легированные СРКБ. Результаты недавних исследований структур на основе GaAs/GaAlAs, однородно по объему легированных кремнием, обнаружили ряд нетривиальных особенностей вертикальной (в направлении оси роста сверхрешетки (СР)) проводимости при низких температурах [5]. В частности, оказалось, что даже при большом беспорядке, когда ширина случайного распределения уровней размерного квантования заметно превышает ширину минизоны в соответствующей упорядоченной СР и можно ожидать, что все состояния минизоны локализованы, вертикальная проводимость слабо (неэкспоненциально) зависит от температуры («квазиметаллическое» поведе-

ние). Для объяснения этой особенности поведения вертикальной проводимости в [5] было предположено, что она связана с кулоновским взаимодействием электронов. В работах [6, 7] были вычислены равновесное распределение заряда и электронный спектр СРКБ с учетом кулоновских полей, обусловленных перераспределением электронов между квантовыми ямами, в приближении Хартри (экранирование беспорядка). Было найдено, что экранирование беспорядка приводит к существенному сужению функции распределения уровней размерного квантования в ямах. В работе [6] был рассмотрен случай достаточно сильного легирования, когда все квантовые ямы структуры заполнены электронами; рассмотрение проводилось с помощью метода функционала плотности в рамках стандартной линейной вариационной процедуры. Однако, как было показано в [7], в общем случае (в частности, при не слишком сильном легировании) соответствующая вариационная задача является нелинейной. Алгоритм ее решения в приближении Хартри и соответствующие результаты численных расчетов приведены в работе [7]. Известно, однако, что в области не слишком больших концентраций это приближение может оказаться недостаточным, и в СР могут проявляться обменно-корреляционные эффекты, приводящие, напри-

\*E-mail: scon281@phys.msu.su

мер, к образованию электронных сверхструктур [8]. Цель настоящей работы и состоит в исследовании влияния обменного кулоновского взаимодействия на распределение электронной плотности в легированных композиционных СРКБ.

## 2. МЕТОД РАСЧЕТА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАРЯДА В СВЕРХРЕШЕТКАХ С КОНТРОЛИРУЕМЫМ БЕСПОРЯДКОМ

Мы рассматриваем СРКБ, однородно по объему легированную донорами. Как и в стандартной модели СРКБ [6, 7], будем считать, что квантовые ямы структуры разделены барьерами постоянной ширины, а положение уровней размерного квантования, рассчитываемых в приближении изолированных ям, флуктуирует за счет случайного контролируемого изменения ширины ям. Поскольку электроны с доноров внутри барьеров переходят в области квантовых ям, в таких структурах неизбежно возникает внутреннее электрическое поле, приводящее к смещению уровней размерного квантования в ямах. Смещение уровней приводит к изменению заселенностей ям электронами; это обуславливает необходимость самосогласованного решения задачи о вычислении электрических полей и распределении электронов по ямам СР. Как и в [6–8], будем считать, что квантовые ямы являются узкими; при этом можно ограничиться рассмотрением лишь нижней подзоны размерного квантования в каждой яме. Действительно, для сверхрешетки GaAs/GaAlAs при характерной ширине квантовой ямы  $L = 6$  нм, соответствующей максимуму распределения уровней размерного квантования, расстояние между краями первой и второй подзон составляет около 150 мэВ; с другой стороны, характерные энергии (разброс уровней и ширина минизоны соответствующей регулярной СР) обычно не превышают 30–40 мэВ. Кроме того, узость квантовых ям позволяет приближенно считать заряд носителей в квантовой яме сосредоточенным в плоскости (см. [6–8]); эта модель аналогична модели заряженных слоев Вишера–Фаликова, использованной при описании экранирования за счет перераспределения заряда в плоскостях слоев [9]. В этом приближении действие как внешнего поля, приложенного вдоль оси роста структуры, так и внутреннего поля, возникающего за счет перераспределения заряда между ямами СР, можно описать просто путем введения «классических» сдвигов уровней размерного квантования в ямах  $V_i$  [8]. Для решения задачи о нахождении равновесного распределения плотно-

сти заряда с учетом кулоновского взаимодействия удобно использовать метод функционала плотности (см. [6–8]). При расчете распределения электронов по ямам СРКБ мы проводили прямую минимизацию свободной энергии, рассматриваемой как нелинейный функционал электронной плотности с учетом как хартриевского, так и обменного вклада в энергию системы.

В приближении узких квантовых ям для концентрации электронов мы имеем

$$n(z) = \sum_i \nu_i \delta(z - z_i), \quad (1)$$

где  $z$  — координата вдоль оси роста структуры,  $\nu_i$  — двумерная концентрация электронов в  $i$ -м слое,  $\nu_i = \sum_{\sigma} \nu_{i\sigma}$ ,  $\sigma$  — проекция спина электрона,  $i = 1, 2, \dots, N$ ,  $N$  — полное число квантовых ям в структуре, а  $z_i$  — координата  $i$ -й квантовой ямы. Таким образом, рассматриваемый функционал определен на дискретном множестве  $\nu = \{\nu_i\}$  и представляет собой просто функцию многих переменных  $\nu_i$ . При  $T = 0$  энергию системы (на единицу площади) можно записать в виде [8]

$$E(\nu) = \sum_i E_i^{(0)} \nu_i + \sum_{i,\sigma} \frac{\nu_{i,\sigma}^2}{2\rho_0} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} (\nu_i - \nu_0) (\nu_j - \nu_0) - \sum_{i,\sigma} C_x \frac{e^2}{\varepsilon} \nu_{i,\sigma}^{3/2}, \quad (2)$$

где  $E_i^{(0)}$  — энергетический уровень в  $i$ -й яме в отсутствие свободных электронов (затравочная энергия),  $\rho_0 = m/(\pi\hbar^2)$  — двумерная плотность состояний в яме,  $V_{ij}$  — энергия взаимодействия между электронами, вычисленная в рамках классического приближения Хартри (с учетом энергии взаимодействия с однородным положительным фоном),  $V_{ij} = -2\pi e^2 |z_i - z_j|/\varepsilon$ ,  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость (для простоты считаем диэлектрические проницаемости в областях барьеров и ям равными),  $e$  — заряд электрона,  $\nu_0 = N_d d$  — средняя двумерная концентрация электронов в слое,  $d$  — средний период структуры,  $z_i = id$ ,  $N_d$  — объемная концентрация легирующей примеси, а  $C_x = (32/9\pi)^{1/2} \approx 1.06$ . Последнее слагаемое в правой части формулы (2) описывает обменный вклад в полную энергию системы.

Как известно [10], при не слишком больших концентрациях электронов в яме и при низких температурах основное состояние электронного газа является спиново-поляризованным (стонеровский ферромагнетизм двумерного электронного газа); спино-

во-упорядоченное состояние реализуется при концентрациях  $\nu_i$ , меньших критической концентрации  $\nu_p = 8(3 - 2\sqrt{2})(C_x e^2 \rho_0 / \varepsilon)^2$  (см., например, [8]). В СРКБ с неравномерным распределением электронов по ямам возможна ситуация, когда лишь в некоторых из ям электронный газ поляризован, тогда как в других (с большими концентрациями) — нет. Мы рассматриваем случай достаточно слабого легирования, когда во всех ямах СР состояние электронов спиново упорядочено. Распределение электронов по ямам определялось путем минимизации свободной энергии (2), рассматриваемой как нелинейный функционал электронной плотности. Изложим алгоритм минимизации. Пусть  $\nu = \{\nu_{i\uparrow}, \nu_{i\downarrow}\}$  — некоторое затравочное распределение концентраций электронов по квантовым ямам. Выберем пару ям  $a$  и  $b$  и запишем выражения для концентраций электронов в них в виде

$$\begin{aligned} \nu_{a\uparrow} &= \frac{\bar{\nu}_{ab}}{2}(1+u)(1+x_a), \\ \nu_{a\downarrow} &= \frac{\bar{\nu}_{ab}}{2}(1+u)(1-x_a), \\ \nu_{b\uparrow} &= \frac{\bar{\nu}_{ab}}{2}(1-u)(1+x_a), \\ \nu_{b\downarrow} &= \frac{\bar{\nu}_{ab}}{2}(1-u)(1-x_a). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $\bar{\nu}_{ab} = (\nu_a + \nu_b)/2$  — средняя заселенность ямы рассматриваемой пары,  $x_a = (\nu_{a\uparrow} - \nu_{a\downarrow})/\nu_a$  — степень поляризации электронного газа в яме  $a$ , а  $u = \nu_{ab} = (\nu_a - \nu_b)/2\bar{\nu}_{ab}$  — асимметрия заселенностей ям пары. Тогда выражение для свободной энергии (2) можно записать в виде

$$\begin{aligned} E &= (E_a^{(0)} + E_b^{(0)})\bar{\nu}_{ab} + (E_a^{(0)} - E_b^{(0)})\bar{\nu}_{ab}u + \\ &+ \frac{\bar{\nu}_{ab}^2}{4\rho_0} \{ (1+u)^2(1+x_a^2) + (1-u)^2(1+x_b^2) \} + \\ &+ V_{ab}(\bar{\nu}_{ab}(1+u) - \nu_0)(\bar{\nu}_{ab}(1-u) - \nu_0) + \\ &+ \sum_{j \neq b} V_{aj}(\bar{\nu}_{ab}(1+u) - \nu_0)(\nu_j - \nu_0) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \sum_{j \neq a} V_{bj}(\bar{\nu}_{ab}(1-u) - \nu_0)(\nu_j - \nu_0) - \\ &- C_x \frac{e^2}{\varepsilon} \bar{\nu}_{ab}^{3/2} \{ (1+u)^{3/2} \left( (1+x_a)^{3/2} + (1-x_a)^{3/2} \right) + \\ &+ (1-u)^{3/2} \left( (1+x_b)^{3/2} + (1-x_b)^{3/2} \right) \} + \tilde{E}_{ab}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\tilde{E}_{ab}$  — часть энергии, не содержащая концентраций  $\nu_a, \nu_b$ :

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{ab} &= \sum_{\substack{i \neq a, b \\ \sigma}} \frac{\nu_{i\sigma}^2}{2\rho_0} + \sum_{i \neq a, b} E_i^{(0)} \nu_i + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \neq a, b \\ j \neq a, b}} V_{ij}(\nu_i - \nu_0)(\nu_j - \nu_0) - \\ &- \sum_{i \neq a, b} C_x \frac{e^2}{\varepsilon} \left( \nu_{i\uparrow}^{3/2} + \nu_{i\downarrow}^{3/2} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Очевидно, что в силу положительности концентраций имеем  $-1 \leq x_a, x_b, u \leq 1$ . Минимизация энергии проводилась с учетом того, что при  $\nu_i < \nu_p$  электронный газ в яме  $i$  поляризован и  $x_i = 1$ , а при  $\nu_i > \nu_p$  концентрации электронов со спинами «вверх» и «вниз» одинаковы,  $\nu_{i\uparrow} = \nu_{i\downarrow}$  и  $x_i = 0$ . Минимум энергии как функции  $u$  может достигаться как во внутренних точках отрезка  $[-1, 1]$ , так и на его границах. Если точка экстремума функции  $E(u)$  лежит внутри отрезка  $[-1, 1]$ , то ее можно найти из условия

$$\begin{aligned} \frac{dE(u)}{du} &= (E_a^{(0)} - E_b^{(0)})\bar{\nu}_{ab} + \frac{\bar{\nu}_{ab}^2}{2\rho_0} \times \\ &\times \{ (1+u)(1+x_a^2) - (1-u)(1+x_b^2) \} - 2V_{ab}\bar{\nu}_{ab}^2 u - \\ &- \sum_{j \neq a, b} (V_{bj} - V_{aj})\bar{\nu}_{ab}(\nu_j - \nu_0) - \\ &- \frac{3}{2} C_x \frac{e^2}{\varepsilon} \bar{\nu}_{ab}^{3/2} \{ (1+u)^{1/2} \left( (1+x_a)^{3/2} + (1-x_a)^{3/2} \right) + \\ &+ (1-u)^{1/2} \left( (1+x_b)^{3/2} + (1-x_b)^{3/2} \right) \} = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

В отсутствие обмена значение  $u^{(0)}$ , отвечающее минимуму функции  $E(u)$  во внутренних точках отрезка  $[-1, 1]$ , равно

$$u^{(0)} = \frac{2}{\bar{\nu}_{ab}} \frac{\rho_0(E_b^{(0)} - E_a^{(0)}) + \rho_0 \sum_{j \neq a, b} (V_{bj} - V_{aj})(\nu_j - \nu_0) + (1/2)\bar{\nu}_{ab}(x_a^2 - x_b^2)}{2 + x_a^2 + x_b^2 - 4\rho_0 V_{ab}}. \quad (7)$$

Решение уравнения (6) при учете обмена мы искали методом последовательных приближений, выбирая значение (7) в качестве нулевого приближения. Соответственно, мы последовательно проводили минимизацию энергии системы для каждой пары ям, учитывая возможность как спиново-упорядоченных, так и неполяризованных состояний в ямах, т. е. для каждой пары ям  $(i, j)$  выполняли минимизацию полной энергии относительно концентраций  $\nu_{i\uparrow}, \nu_{i\downarrow}, \nu_{j\uparrow}, \nu_{j\downarrow}$ . Если итерационная процедура сходится к значению  $u$ , лежащему внутри отрезка  $[-1, 1]$ , то найденное значение  $u$  и отвечает экстремуму функции  $E(u)$ . Минимум энергии может достигаться и на границах указанного выше отрезка; в этом случае соответствующее значение  $u$  выбиралось равным тому граничному значению, которому отвечает минимальная энергия. Затем минимизация энергии проводилась относительно заселенностей ям следующей пары и т. д. (на каждом этапе полная энергия системы, вообще говоря, уменьшается). После перебора всех возможных пар квантовых ям процедура повторялась до тех пор, пока энергия системы не переставала изменяться. Независимость полученного распределения концентраций от начального приближения показывает, что найденное таким образом распределение отвечает основному состоянию системы.

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Расчеты распределений электронной плотности  $\nu = \{\nu_i\}$ , вычисленных с учетом кулоновских полей, возникающих за счет перераспределения носителей между ямами, проводились для заданного затравочного гауссова распределения уровней размерного квантования

$$P_0(E_i^{(0)}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}w} \exp\left\{-\frac{(E_i^{(0)} - E_m)^2}{2w^2}\right\}. \quad (8)$$

На рис. 1 приведены результаты расчетов двумерных концентраций электронов в квантовых ямах как без учета обменной энергии (рис. 1а, приближение Хартри), так и с ее учетом (рис. 1б, приближение Хартри–Фока). При расчетах были использованы следующие значения параметров:  $\rho_0 = 3 \cdot 10^{13} \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{см}^{-2}$ ,  $w = 10 \text{ мэВ}$ ,  $\varepsilon = 10$ ,  $d = 33 \text{ \AA}$ ,  $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Эти значения параметров соответствуют спиново-упорядоченному состоянию электронов во всех ямах СР, когда все концентрации  $\nu_i$  меньше критической  $\nu_p \approx 2.9 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ .

На рис. 1 видно, что учет обмена, с одной стороны, приводит к уменьшению числа заселенных электронами квантовых ям, а с другой — к увеличению двумерных концентраций электронов в заполненных квантовых ямах, уровни которых отвечают низкоэнергетическому хвосту распределения. В [6, 7] было показано, что учет кулоновского взаимодействия в приближении Хартри приводит к тому, что ступенька плотности состояний становится круче, т. е. имеет место сужение функции распределения уровней за счет вертикального экранирования, обусловленного перераспределением электронов между ямами СРКБ. Как известно [1], двумерная плотность состояний (в расчете на одну яму)  $\rho(E)$  связана с функцией распределения уровней  $P(E)$  соотношением

$$\rho(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^E P(E) dE, \quad (9)$$

т. е. величина плотности состояний определяет число уровней с энергиями, меньшими  $E$ . Полученные результаты расчета концентраций (рис. 1) можно интерпретировать на языке одночастичных энергий. Выражение для химического потенциала имеет вид

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial \nu_i} = \frac{\nu_i}{\rho_0} + E_i^{(0)} + \sum_i V_{ij}(\nu_j - \nu_0) - \frac{3}{2} C_x \left(\frac{e^2}{\varepsilon}\right) \nu_i^{1/2}. \quad (10)$$

Эффективные энергии уровней размерного квантования  $\tilde{E}_i$  (краев низших подзон) можно ввести с помощью соотношения  $\mu = \partial E / \partial \nu_i = \nu_i / \rho_0 + \tilde{E}_i$ . Соответственно, зависимость числа эффективных уровней с энергиями  $\tilde{E}_i$ , меньшими  $E$ , определяет эффективную плотность состояний системы  $\tilde{\rho}(E)$ . На рис. 2 представлены затравочная плотность состояний  $\rho_0(E)$ , вычисленная без учета кулоновского взаимодействия для распределения уровней (8) (кривая 1), плотность состояний  $\rho(E)$ , вычисленная в приближении Хартри (кривая 2), и эффективная плотность состояний системы  $\tilde{\rho}(E)$ , вычисленная с учетом обмена (кривая 3). Видно, что включение обмена приводит к некоторому уширению функции распределения уровней (ср. кривые 2 и 3 на рис. 2), т. е. к увеличению беспорядка.

Наряду с этим на рис. 1 видна еще одна важная особенность полученных распределений электронов по ямам СРКБ — обмен заметно уменьшает число ям с малыми концентрациями электронов (рис. 1), т. е. возникает мягкая щель в распределении концентраций по ямам СР, ширина которой для указанных выше значений параметров составляет около

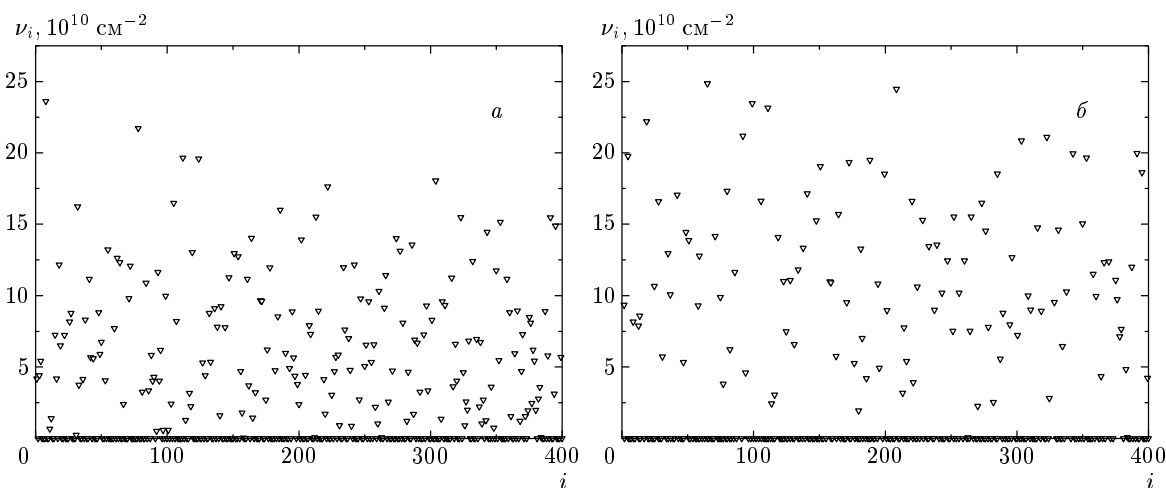


Рис. 1. Зависимость двумерных концентраций электронов в квантовых ямах от номера ямы: *a* — без учета обменного взаимодействия, *б* — с учетом обменного взаимодействия

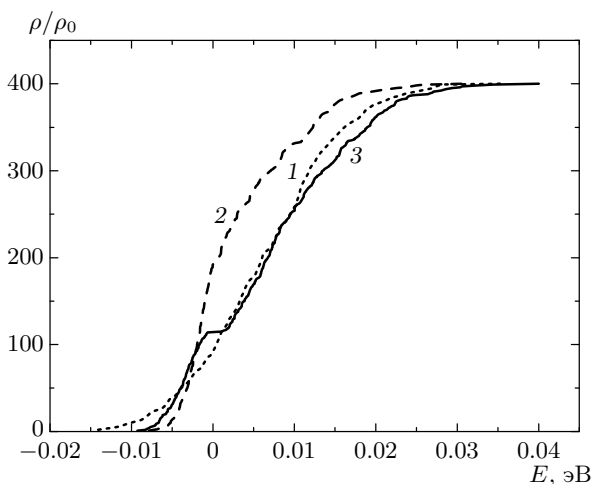


Рис. 2. Зависимость плотности состояний СРКБ от энергии (отсчитанной от химического потенциала). Кривая 1 — затравочная плотность состояний легированной СР, кривая 2 — плотность состояний в приближении Хартри, кривая 3 — плотность состояний с учетом обменного взаимодействия

$2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ . Наличие концентрационной щели отражается на плотности состояний в виде плато (кривая 3 на рис. 2); при этом, в соответствии с (9), появляется провал в распределении перенормированных уровней энергии. Для принятых значений параметров ширина ступеньки плотности состояний  $\Delta$  составляет около 1 мэВ.

Причина появления концентрационной щели связана с тем, что обмен приводит к жесткому ре-

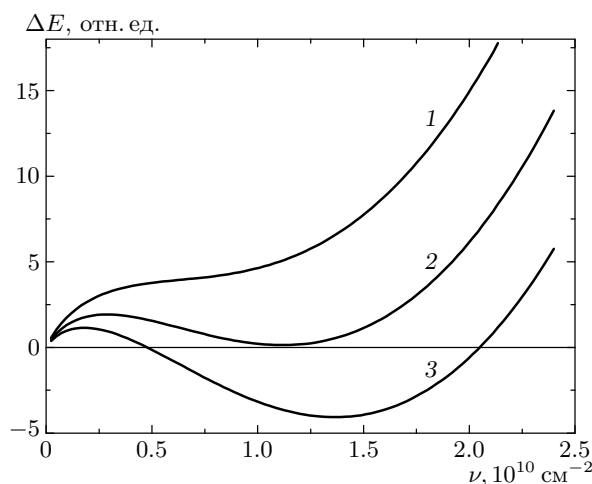


Рис. 3. Зависимость изменения энергии электронов  $\Delta E$  в асимметричной двойной квантовой яме от концентрации в верхней яме  $\nu$  для различных средних концентраций  $\nu_0$ ; кривая 1 соответствует малым  $\nu_0$ , когда верхняя яма пуста, кривая 2 — критической концентрации  $\nu_0$ , при которой начинает заполняться верхняя яма, а кривая 3 — концентрации  $\nu_0$ , превышающей критическую

жиму заполнения ям электронами при возрастании средней концентрации электронов в структуре. Ситуация напоминает ту, которая имеет место в отсутствие беспорядка при возникновении электронных сверхструктур в СР [8]. Особенности заполнения квантовых ям в СР с беспорядком можно проиллюстрировать, рассматривая сильно асимметрич-

ную двойную квантовую яму. Очевидно, что при малой средней концентрации  $\nu_0$  заполнена лишь нижняя квантовая яма (концентрация в ней равна  $2\nu_0$ ), а концентрация в верхней яме  $\nu = 0$ . Соответственно, энергия системы, рассматриваемая как функция концентрации в верхней яме, имеет лишь один минимум при  $\nu = 0$  (кривая 1 на рис. 3). При возрастании средней концентрации  $\nu_0$  начинает заполняться верхняя яма. При этом концентрация в верхней яме возрастает скачком, когда энергия появляющегося побочного минимума становится равной ее значению при  $\nu = 0$  (кривая 2). При больших средних концентрациях  $\nu_0$  побочный минимум становится основным (кривая 3), а затем и единственным. При выбранных значениях параметров минимальное значение концентрации  $\nu$ , отвечающее началу заполнения верхней ямы, составляет около  $1.2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ; это находится в разумном согласии с величиной концентрационной щели, получаемой при численных расчетах.

Отметим, что эффекты, связанные с обменным взаимодействием, могут проявляться лишь при достаточно низких температурах. Действительно, величина обменной энергии уменьшается при повышении температуры [11, 12]; наряду с этим, температурное уширение ступеньки распределения электронов по энергиям приводит к более однородному распределению электронов по ямам СР. Соответственно, при повышении температуры происходит существенное ослабление эффектов, связанных с обменным взаимодействием.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 03-02-17378), программы «Интегра-

ция» (проект И02908/1040) и программы «Университеты России».

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. D. Dow, Phys. Rev. B **25**, 6218 (1982).
2. A. Chomette, B. Deveaud, A. Regreny, and G. Bastard, Phys. Rev. Lett. **57**, 1464 (1986).
3. A. Chomette, B. Deveaud, J. Y. Emery, and A. Regreny, Sol. St. Comm. **54**, 75 (1985).
4. T. Yamamoto, M. Kasu, S. Noda, and A. Sasaki, J. Appl. Phys. **54**, 5318 (1990).
5. G. Richter, W. Stolz, P. Thomas, S. Koch, K. Maschke, and I. P. Zvyagin, Superlatt. Microstruct. **22**, 475 (1997).
6. И. П. Звягин, М. А. Ормонт, ФТП **33**, 79 (1999).
7. I. P. Zvyagin, M. A. Ormont, S. D. Baranovskii, and P. Thomas, Phys. Stat. Sol. (b) **230**, 193 (2002).
8. И. П. Звягин, ЖЭТФ **114**, 1089 (1998).
9. P. B. Visscher and L. M. Falikov, Phys. Rev. B **3**, 2541 (1971).
10. E. C. Stoner, Proc. Roy. Soc. A **165**, 372 (1938).
11. H. Totsuji, H. Tachibana, C. Totsuji, and S. Nara, Phys. Rev. B **51**, 11148 (1995).
12. А. Г. Миронов. Вестник МГУ, сер. 3, физика, астрон. **5**, 61 (2001).