

ВЕРТИКАЛЬНАЯ ПРЫЖКОВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ЧЕРЕЗ ВИРТУАЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ В СВЕРХРЕШЕТКАХ С КОНТРОЛИРУЕМЫМ БЕСПОРЯДКОМ

И.П.Звягин

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

119899 Москва, Россия

Поступила в редакцию 24 марта 1999 г.

После переработки 11 мая 1999 г.

Рассмотрен новый механизм вертикальной проводимости в сверхрешетках с контролируемым беспорядком. Показано, что низкотемпературная проводимость, обусловленная тунелированием с участием фононов между удаленными квантовыми ямами сверхрешетки, в основном определяется прыжковыми процессами с участием виртуальных промежуточных состояний; в стандартных условиях для этого механизма получена слабая температурная зависимость вертикальной проводимости. Найдена зависимость проводимости от амплитуды беспорядка, характерная для рассматриваемого механизма.

PACS: 72.80.Ng, 73.20.Dx

Сверхрешетки и структуры с множественными квантовыми ямами, в которые беспорядок искусственно вводился путем случайных контролируемых вариаций толщин ям в процессе роста, обсуждались в работе [1] и были экспериментально реализованы в работах [2, 3]. В таких структурах, называемых сверхрешетками с контролируемым беспорядком (СРКБ), вертикальный перенос (то есть перенос в направлении оси роста) исследовался оптическими методами, в частности, методами стационарной и пикосекундной люминесцентной спектроскопии, а также путем прямых измерений вертикальной проводимости [2–5]. Результаты измерений величины и температурной зависимости вертикальной подвижности электронов показывают, что даже в сверхрешетках (СР) без искусственно вводимого беспорядка вертикальный перенос при малом перекрытии волновых функций электронов соседних ям часто обусловлен электронными переходами с участием фононов [6, 7]. Введение искусственного беспорядка приводит к существенно более сильной локализации электронных состояний; характер этой локализации для короткопериодных СР GaAs/AlAs со случайными флуктуациями ширины квантовых ям и толщины барьеров от 1 до 3 монослоев был детально исследован в [8] в различных областях энергетического спектра GaAs/GaAlAs. Оказалось, что при не слишком больших энергиях длина затухания волновой функции меньше толщины монослоя, а проводимость обусловлена прыжками с участием фононов между состояниями, локализованными в направлении оси роста СРКБ [9]. В работе [5] исследовались СРКБ GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As с концентрацией легирующей примеси $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ с гауссовым распределением уровней при различных значениях среднего квадратичного разброса уровней (эту величину мы будем называть энергией беспорядка). При малых значениях энергии беспорядка температурный коэффициент вертикального сопротивления был положительным, что свидетельствует о том, что перенос можно описывать, рассматривая рассеяние блоховских электронов в минизоне на фононах. В структурах, для которых

энергия беспорядка превышает ширину минизоны в идеальной СР, температурный коэффициент вертикального сопротивления становился отрицательным, поскольку состояния электронов в СРКБ сильно локализованы в направлении оси роста z и механизм вертикальной проводимости является прыжковым при всех температурах. В то же время измерения [5] показывают, что даже в случае сильной локализации температурная зависимость вертикальной проводимости при низких температурах является не активационной, как можно было бы ожидать для прыжков по локализованным состояниям с существенно отличающимися энергиями, а слабой (имеет квазиметаллический характер).

В работах [5, 10] было показано, что ослабление температурной зависимости вертикальной прыжковой проводимости легированных СРКБ может быть обусловлено появлением кулоновских полей вследствие перераспределения электронов между ямами СР; это приводит к уменьшению энергии беспорядка. Учет этого обстоятельства, однако, недостаточен для объяснения квазиметаллического характера температурной зависимости проводимости, поскольку в структурах с большим беспорядком квазиметаллический характер проводимости сохраняется, несмотря на то, что перенормированная энергия беспорядка остается заметно большей ширины минизоны. Мы покажем, что ослабление температурной зависимости вертикальной проводимости может быть связано со специфическим прыжковым механизмом – туннелированием между удаленными ямами СРКБ через виртуальные состояния с участием фононов.

Решение задачи об электроне в слоистой структуре с идеально плоскими границами хорошо известно: состояния электрона характеризуются продольным (в направлении вдоль слоев) квазимпульсом k_{\parallel} и квантовыми числами λ , нумерующими решения одномерного уравнения Шредингера с потенциалом $V(z) = \sum_n V_i(z)$, описывающим модуляцию края зоны проводимости вдоль оси роста структуры z , где $V_i(z)$ – потенциал i -ой ямы (мы полагаем $V_i(z) = 0$ в области барьеров). Волновые функции электронов в состояниях $\{\lambda k_{\parallel}\}$ можно представить в факторизованном виде, $\psi_{\lambda k_{\parallel}} = AU_{\lambda}(z) \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\rho)$, где A – нормировочный множитель, ρ – радиус-вектор в плоскости ямы, $U_{\lambda}(z)$ – решения одномерной задачи, соответствующие уровням энергии ϵ_{λ} ; при этом энергии состояний $\{\lambda k_{\parallel}\}$ равны $E_{\lambda k_{\parallel}} = \epsilon_{\lambda} + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m$. Поскольку для реальных структур [5] разброс уровней и интеграл переноса малы по сравнению с расстоянием до второй подзоны, мы ограничиваемся рассмотрением лишь состояний λ , получающихся за счет гибридизации волновых функций основного состояния в каждой из ям. Волновые функции $U_{\lambda}(z)$ локализованы, и вертикальная проводимость СРКБ определяется электронными переходами между состояниями $\{\lambda k_{\parallel}\}$ с участием фононов. Как и в стандартной теории прыжковой проводимости по локализованным состояниям [11,12], задачу о вычислении вертикальной проводимости можно свести к вычислению сопротивления эквивалентной сетки Миллера – Абрахамса, узлы которой связаны друг с другом сопротивлениями

$$R_{\lambda\lambda'} = \left\{ (e^2/kT) \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}} \Gamma_{\lambda k_{\parallel}, \lambda' k'_{\parallel}} \right\}^{-1}, \quad (1)$$

где $\Gamma_{\lambda k_{\parallel}, \lambda' k'_{\parallel}} = W_{\lambda' k'_{\parallel}, \lambda k_{\parallel}} f_{\lambda k_{\parallel}} (1 - f_{\lambda' k'_{\parallel}})$ – темпы переходов из состояния $\{\lambda k_{\parallel}\}$ в состояние $\{\lambda' k'_{\parallel}\}$, $W_{\lambda' k'_{\parallel}, \lambda k_{\parallel}}$ – вероятности этих переходов, а $f_{\lambda k_{\parallel}}$ – равновесные

вероятности заполнения состояний $\{\lambda k_{\parallel}\}$. Отличие от стандартной задачи состоит здесь в том, что при расчете сопротивлений нужно суммировать по начальным и конечным состояниям, отличающимся значениями k_{\parallel} и k'_{\parallel} .

В легированных СРКБ при низких температурах состояния с энергиями $E_{\lambda k_{\parallel}} < \mu$, где μ – уровень Ферми, заполнены электронами. Переходы между такими состояниями с участием акустических фононов происходят в слое энергий шириной порядка kT вблизи уровня Ферми, и температурная зависимость темпов таких переходов является безактивационной. Переходы же между состояниями ям, по крайней мере в одной из которых дно низшей подзоны лежит выше уровня Ферми, приводят к активационной температурной зависимости сопротивления, определяемой выражением $R_{ij} = R_0 \exp\{(\max(\epsilon_{\lambda}, \epsilon'_{\lambda}) - \mu)/kT\}$, где предэкспоненциальный множитель R_0 экспоненциально зависит от перекрытия волновых функций, но слабо зависит от энергий уровней и от температуры.

В случае, когда расстояние от некоторого рассматриваемого уровня до соседних превышает интеграл переноса, соответствующее состояние остается негибридизованным; при этом уровень энергии ϵ_{λ} близок к уровню энергии основного состояния ϵ_i в соответствующей яме, а функция $U_{\lambda}(z)$ близка к волновой функции “атомного типа” $u_i(z)$, вычисленной в приближении изолированной i -ой ямы. В предельном случае большого разброса уровней и слабого перекрытия волновых функций соседних уровней сетка Миллера – Абрахамса состоит из сопротивлений R_{ij} , “включенных” между ямами i и j и выражающихся через темпы переходов между ямами. Если ограничиться приближением ближайших соседей, то в силу квазиодномерного характера рассматриваемой системы вертикальное сопротивление структуры определяется суммой последовательно включенных сопротивлений $R_{i,i+1}$. Разброс энергий ϵ_i приводит к экспоненциально большому разбросу сопротивлений $R_{i,i+1}$, так что полное сопротивление эквивалентной цепочки определяется небольшим числом “критических” сопротивлений (критических областей цепочки), примыкающих к ямам с наиболее высоко расположенными уровнями ϵ_i . Это и приводит к активационной температурной зависимости сопротивления с энергией активации, определяемой положением дна подзоны в критической яме относительно уровня Ферми.

Нетрудно показать, что активационная температурная зависимость вертикальной проводимости сохраняется и при конечных значениях интеграла переноса, сравнимых с амплитудой разброса уровней. Действительно, полное вертикальное сопротивление структуры определяется, по-прежнему, критическими ямами с наиболее высоко лежащими уровнями (то есть в высокоэнергетическом хвосте функции распределения). Заметим, что заметная гибридизация имеет место лишь для тех состояний, расстояние между уровнями которых не превышает энергии переноса (таким состояниям могут отвечать “кластерные” волновые функции, отвечающие гибридизации волновых функций $u_i(z)$ нескольких соседних ям); в то же время волновые функции состояний в критических ямах остаются негибридизованными.

Поскольку величина сопротивления, связанная с туннелированием в критическую яму, при понижении температуры экспоненциально возрастает, более выгодным становится процесс туннелирования (с участием фононов) между вторыми соседями, характеризуемый существенно меньшей энергией активации. Покажем, что проводимость, связанная с туннелированием между вторыми соседями в критических

областях, в основном определяется не обычными прыжками, а прыжковыми процессами с участием виртуальных промежуточных состояний.

В соответствии со сказанным выше, критическую область можно схематически представить в виде трехуровневой системы, изображенной на рисунке. На схеме уровень E_2 отвечает критической яме 2, а уровни E_1 и E_3 соответствуют соседним состояниям кластерного типа (на рисунке кластеры схематически представлены отдельными ямами). Для характерных значений параметров структур, исследованных экспериментально, оказывается, что наиболее вероятна ситуация, когда в соседних с критической ямах имеются кластерные уровни, расположенные ниже уровня Ферми, то есть $E_1, E_3 < \mu$. Нетрудно записать выражения для гибридных волновых функций трехъямной задачи; так, для функции состояния с наименьшей энергией E_1 имеем

$$U_1(z) = A_1 \{u_1(z) + c_{12}u_2(z) + c_{13}u_3(z)\}, \quad (2)$$

где A_1 – нормировочный множитель, $c_{mn} = t_{mn}/(E_m - E_n)$, $t_{mn} = \int dz u_m(z) \hat{V}_n(z) u_n(z)$ – интеграл переноса, $\hat{V}_n(z)$ – потенциал, создаваемый всеми ямами, кроме тех, которые принадлежат данному кластеру (мы считаем здесь перекрытие волновых функций слабым и опускаем все интегралы, кроме тех, которые содержат волновые функции ближайших соседей). В рамках рассматриваемой модели нетрудно записать и аналогичные выражения для функций $U_2(z)$ и $U_3(z)$.

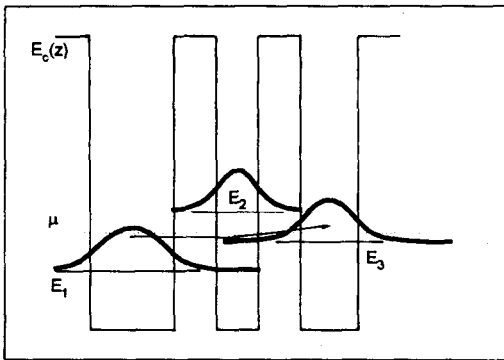
Вероятность переходов с участием фононов между состояниями 1 и 3 выражается через матричные элементы типа

$$\begin{aligned} I_{1\mathbf{k}_{\parallel}, 3\mathbf{k}'_{\parallel}} &= \int dz \int d\rho \exp\{i(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel})\rho\} U_1(z) H_{e,ph} U_3(z) = \\ &= A_1 A_3 \{c_{12} H_{23}^{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}} + c_{32} H_{12}^{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}} + c_{12} c_{32} H_{22}^{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}} + c_{13} H_{33}^{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}} + c_{31} H_{11}^{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}}\}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $H_{mn}^{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}} = \int dz \int d\rho \exp\{i(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel})\rho\} u_m(z) H_{e,ph} u_n(z)$, а $H_{e,ph}$ – гамильтониан электрон-фононного взаимодействия. Выражение (3) описывает амплитуду перехода между состояниями 1 и 3 в виде суммы вкладов каналов, отвечающих туннелированию между состояниями, локализованными вблизи различных ям через виртуальные состояния. Первые три слагаемых в (3) описывают переходы через виртуальные состояния ямы 2 (например, первое – бесфононный из состояния 1 в 2 и с участием фонона из состояния 2 в 3). Последние два слагаемых в (3) описывают переходы через виртуальное состояние ямы 1 или 3. В предположении о слабой зависимости длины затухания волновой функции в подбарьерной области от энергии основные экспоненциальные зависимости от температуры и от параметров структуры одинаковы для всех слагаемых в (3). Отметим, что в стандартном подходе к расчету вертикальной проводимости СР рассматриваемого типа [7, 9], как и в задачах о прыжковой проводимости одномерных систем (см., например, [13]), вероятность туннелирования с участием фононов между состояниями, локализованными около отдельных ям, рассчитывается без учета других ям, то есть без учета эффектов гибридизации. В рассматриваемой нами системе вероятность таких переходов из 1 в 3 оказывается намного меньшей, чем вероятности туннелирования через виртуальные состояния (3). Действительно, для непосредственного перехода из 1 в 3 матричный элемент содержит интеграл $\int dz u_1(z) H_{e,ph}^{\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{k}'_{\parallel}} u_3(z)$, пропорциональный $\exp\{-\alpha(2w + L)\}$, где α – обратная длина затухания волновой функции в подбарьерной области, w – толщина

барьера, а L – ширина критической ямы. В то же время, слагаемые в матричном элементе (3) пропорциональны $(t_{mn}^{(0)}/(E_m - E_n)) \exp(-2\alpha w)$, где $t_{12}^{(0)}$ – предэкспоненциальный множитель в выражении для интеграла переноса. Отношение вероятности перехода между удаленными ямами через виртуальные состояния к соответствующей вероятности, вычисленной без учета наличия промежуточных ям, есть величина порядка $(\bar{t}^{(0)}/\bar{E})^2 \exp(-2\alpha L) \ll 1$; здесь $\bar{t}^{(0)}$ – характерное значение предэкспоненциального множителя интеграла переноса (оно порядка $\sqrt{\hbar^2 \epsilon_1 / 2m^* L^2}$, где ϵ_1 – энергия низшего уровня в яме, m^* – эффективная масса [1]), а \bar{E} – энергия беспорядка. Полагая для оценки $\bar{t}^{(0)} = 30$ мэВ, $\bar{E} = 20$ мэВ и $\exp(-\alpha L) = 65$ (эти значения характерны для структур, исследовавшихся в [5]), получаем, что искомое отношение вероятностей порядка $2 \cdot 10^3$. Таким образом, при расчете вероятностей переходов между удаленными центрами учет наличия промежуточных виртуальных состояний обязателен. Этим рассматриваемая ситуация отличается от стандартной задачи о прыжковой проводимости для двух- и трехмерных систем точечных центров, для которых длина туннелирования для процесса типа (3) для типичной конфигурации центров оказывается существенно большей, чем расстояние между удаленными узлами.

Заметим, что, благодаря участию фононов, для рассматриваемой конфигурации оказываются возможными и дают основной вклад в сопротивление переходы между состояниями $\{1k_{\parallel}\}$ и $\{3k'_{\parallel}\}$ с близкими энергиями $E_{1k_{\parallel}}$ и $E_{3k'_{\parallel}}$, и в этом случае сопротивления критических областей слабо (неэкспоненциально) зависят от температуры. Используя (3), нетрудно оценить температуру T_1 , при которой происходит переход от активационной зависимости вертикальной проводимости к безактивационной. Она определяется из условия $(\bar{t} = \bar{t}^{(0)}/\bar{E})^2 = \exp\{-E_a/kT_1\}$, где $\bar{t} = \bar{t}^{(0)} \exp(-\alpha w)$, а E_a – энергия активации (она порядка \bar{E}). Полагая для оценки $E_a = 20$ мэВ и $\bar{E}/\bar{t} = 4$, мы находим $T_1 \approx 80$ К, что согласуется с результатами [5]. В соответствии со сказанным выше, вертикальное сопротивление структуры опре-



Критическая область СРКВ (схематически). Стрелками изображены переходы в окрестности уровня Ферми μ через виртуальное состояние в средней яме

деляется сопротивлением критической области, которое обратно пропорционально квадрату модуля матричного элемента (3). Согласно (3), при изменении энергии беспорядка вертикальное сопротивление СРКВ меняется пропорционально квадрату энергии беспорядка. Реально исследовавшиеся структуры с числом ям порядка 100 являются мезоскопическими, и величина критического сопротивления (как и полная

вертикальная проводимость) может существенно флуктуировать для разных реализаций. Методика, использованная в [5], позволяет, однако, исследовать скейлинг проводимости, изменяя амплитуду разброса уровней для одной и той же заданной реализации беспорядка.

Отметим, что рассмотренный механизм прыжковой проводимости с участием виртуальных промежуточных состояний может играть существенную роль и для гранулированных металлов. Как известно, применение теории прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка с учетом кулоновских эффектов к гранулированным металлам в диэлектрической области, где проводимость обусловлена туннелированием с участием фононов между металлическими зернами, позволяет описать температурную зависимость проводимости, обычно имеющую вид $\ln \sigma = \ln \sigma_0 - (T_{SE}/T)^{1/2}$, где σ_0 и T_{SE} – параметры. Одна из трудностей теории состоит, однако, в том, что для получения правильной величины проводимости длина затухания волновой функции, определяющая туннелирование между зернами, не являющимися ближайшими соседями, должна быть выбрана аномально большой (см., например, [14–16]). Причина этой трудности может быть связана с тем, что в теории не учитывались прыжки через промежуточные виртуальные состояния; вообще говоря, учет таких процессов приводит к существенному возрастанию вероятности туннелирования на удаленные зерна с участием фононов.

В заключение выражаю признательность М.Поллаку за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 97-02-17334), Минобразования (грант # 97-0-7.1-174) и программы "Университеты России – фундаментальные исследования".

-
1. J.D.Dow, S.Y.Ren, and K.Hess, *Phys. Rev.* **B25**, 6218 (1982).
 2. A.Chomette, B.Deveaud, A.Regreny et al., *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1464 (1986).
 3. T.Yamamoto, M.Kasu, S.Noda et al., *J. Appl. Phys.* **68**, 5318 (1990).
 4. M.Lee, S.A.Solin, and D.R.Hines, *Phys. Rev.* **B48**, 11921 (1993).
 5. G.Richter, W.Stolz, S.Koch et al., *Superlattices and Microstructures* **74**, 475 (1997).
 6. R.Tsu and G.Dohler, *Phys. Rev.* **B12**, 680 (1975).
 7. D.Caleski, J.F.Palmier, and A.Chomette, *J. Phys.* **C17**, 5017 (1984).
 8. K.A.Mäder, W.Lin-Wang, and A.Zunger, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2555 (1995).
 9. Lin-Wang Wang, A.Zunger, and K.A.Mäder, *Phys. Rev.* **B53**, 2010 (1996).
 10. И.П.Звягин, М.А.Ормонт, *ФТП* **33**, 79 (1999).
 11. Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос, *Электронные свойства легированных полупроводников*, М.: Наука, 1979.
 12. В.Л.Бонч-Бруевич, И.П.Звягин, Р.Кайпер и др., *Электронная теория неупорядоченных полупроводников*, М.: Наука, 1981.
 13. J.Kurkijärvi, *Phys. Rev.* **8**, 922 (1973).
 14. C.J.Adkins, *J. Phys.: Condensed Matter* **1**, 1253 (1989).
 15. M.Pollak and C.J.Adkins, *Phil. Mag.* **B65**, 855 (1992).
 16. C.J.Adkins, in: *Hopping and Related Phenomena, Proc. 6th Int. Conf.*, Eds. O.Millo and Z.Ovadyahu, Jerusalem: Racah Inst. Phys., The Hebrew Univ., 1995.