

Электрон-фононное взаимодействие и подвижность электронов в квантово-размерных структурах II типа PbTe / PbS

© В.В. Бондаренко*, В.В. Забудский*, Ф.Ф. Сизов

Институт физики Национальной академии наук Украины,
252028 Киев, Украина

*Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины,
252028 Киев, Украина

(Получена 24 июля 1997 г. Принята к печати 17 ноября 1997 г.)

Для низкоразмерных структур — многократных квантовых ям PbTe / PbS, которые относятся к структурам II типа, рассчитаны подвижности электронов в слоях PbTe с учетом рассеяния электронов на продольных полярных оптических колебаниях решетки. Сравнение со значениями подвижностей электронов, полученными из исследований зависимостей коэффициента Холла и магнетосопротивления в нелегированных многократных квантовых ямах PbTe / PbS от величины напряженности магнитного поля, показало хорошее соответствие расчетных и экспериментальных результатов для этих структур.

Введение

В нелегированных узкощелевых объемных полупроводниках $A^{IV}B^{VI}$ и их твердых растворах основными механизмами рассеяния, ограничивающими подвижность носителей в практически важном диапазоне температур 77–300 К, являются [1,2]: 1) рассеяние на продольных полярных оптических (LO) фононах, 2) рассеяние на деформационном потенциале акустических фононов, 3) рассеяние на неупорядоченности сплавного потенциала. Среди данных механизмов доминирующими для данной группы полупроводников является взаимодействие электронов с продольными полярными оптическими фононами ($\hbar\omega_{LO} \approx 160$ К [3]), которое может быть точно рассчитано без использования подгоночных параметров. Этот тип рассеяния определяет предельные подвижности электронов и дырок в нелегированных узкощелевых полупроводниках $A^{IV}B^{VI}$ в области температур $T \geq 70$ К.

В низкотемпературных структурах размерное квантование влияет как на энергетический спектр носителей заряда, так и на спектр мод оптических колебаний решетки. Поэтому в настоящей работе для структур с пониженной размерностью — многократных квантовых ям (МКЯ) PbTe / PbS — рассматривалось рассеяние на оптических колебаниях решетки в предположении, что данный механизм рассеяния носителей заряда, как и в объемных узкощелевых полупроводниках $A^{IV}B^{VI}$, является основным в определении предельных значений подвижностей электронов при температуре $T > 70$ К.

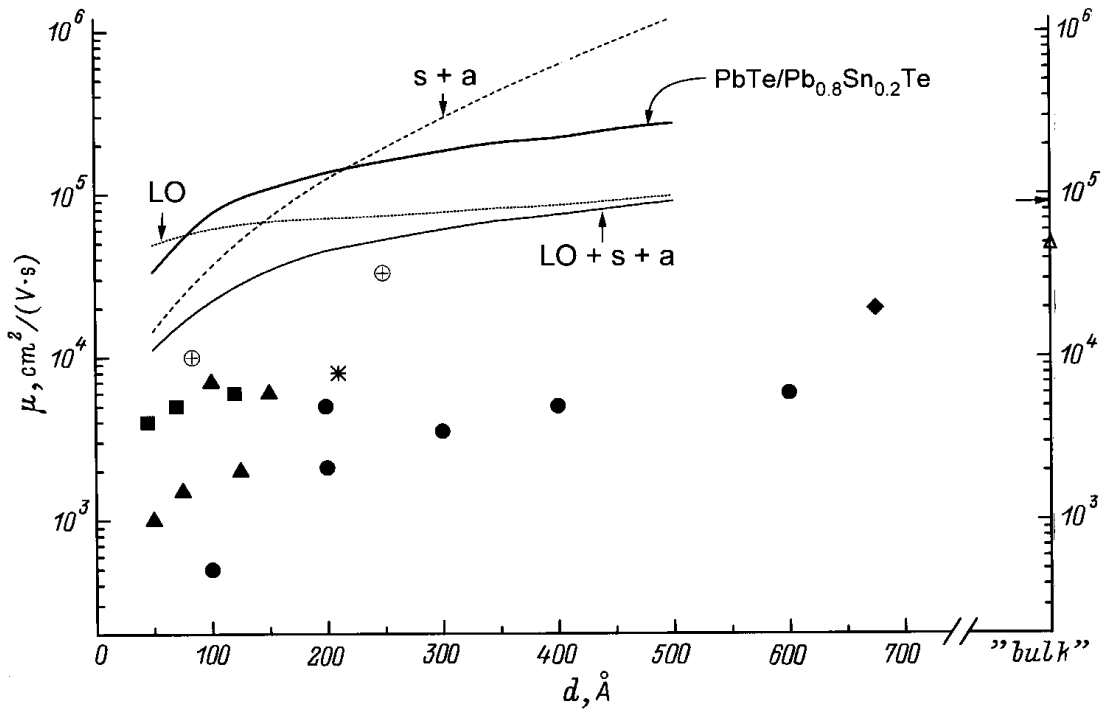
1. Теория

Оптические колебания в квантовых ямах PbTe / PbS рассматривались в рамках модели диэлектрического континуума (МДК) [4]. В соответствии с МДК оптические фононы в низкоразмерных структурах распадаются на ограниченные LO -, TO -моды и поверхностно-подобные (интерфейсные) IF -моды, причем ограниченные TO -моды не вносят вклад в рассеяние носителей

заряда. Поля поляризации ограниченных LO -мод образуются как объемными зарядами, так и зарядами на границах слоев, а поля поляризации IF -мод (симметричных " s " и антисимметричных " a ") создаются только поверхностными волнами зарядов на границах раздела слоев. Поэтому в низкоразмерных структурах уменьшение толщины d слоев, составляющих низкоразмерную структуру, будет приводить к увеличению влияния IF -мод на перенос носителей заряда по сравнению с ограниченными LO -модами. В случае доминирования IF -мод это вызывает уменьшение подвижностей носителей заряда в отдельных слоях многослойной квантово-размерной структуры, тогда как при доминировании ограниченных LO -мод подвижность возрастает с уменьшением d . Поэтому определение относительных вкладов ограниченных LO -мод и IF -мод является важным как для интерпретации экспериментальных результатов, так и для проектирования приборов с использованием низкоразмерных структур.

В связи с большими значениями статических диэлектрических проницаемостей ϵ_s в соединениях $A^{IV}B^{VI}$ (например, в PbTe $\epsilon_s > 400$ при $T = 300$ К и увеличивается с уменьшением температуры из-за размягчения поперечной оптической моды) влияние IF -мод является эффективным в данных соединениях. Оно должно приводить к заметному изменению значений подвижностей носителей заряда по сравнению с подвижностью в объемных кристаллах, особенно в тонких слоях таких структур.

Ранее взаимодействие электронов с оптическими фононами в квантовой яме PbSnTe и трехслойной структуре PbTe / PbSnTe / PbTe с учетом непараболичности зонного спектра, но в приближении бесконечно высоких барьеров, было рассмотрено в [5,6]. В настоящей работе энергетический спектр носителей тока в многократных квантовых ямах PbTe / PbS рассмотрен (см., например, [7]) в рамках двузонной модели Кейна с учетом непараболичности зонного спектра и конечной высоты барьеров при учете заселенности носителями двух 1-х подзон. В этой системе разрыв зон (валентных) при $T = 77$ К составля-



Рассчитанные для рассеяния на различных фоновых модах ($LO+s+a$, LO , $s+a$) и экспериментальные (\oplus) данные по подвижности электронов для многократных ям PbTe/PbS в зависимости от их периода при $T = 77$ К. Также приведены экспериментальные данные для сверхрешеток PbTe/EuTe (\blacktriangle) [14] и PbTe/Pb_{0.8}Sn_{0.2}Te (\blacksquare), квантовых ям PbTe/Pb_{0.87}Sn_{0.13}Te (\blacklozenge) [15] и PbTe/Pb_{0.8}Sn_{0.2}Te ($*$, \bullet) [5,16]. Верхняя сплошная кривая относится к расчетам подвижности электронов в квантовых ямах PbTe/Pb_{0.8}Sn_{0.2}Te на ($LO+s+a$)-модах. Значком Δ на правой вертикальной оси рисунка показаны экспериментальные значения подвижности электронов в совершенных монокристаллах и "толстых" ($d \geq 3$ мкм) эпитаксиальных слоях PbTe с концентрацией электронов порядка 10^{17} см⁻³, при которых наблюдаются наибольшие значения подвижности электронов; там же показаны стрелкой предельные расчетные значения подвижности электронов в монокристаллах PbTe, выполненные в рамках двузонной непараболической модели Кейна, при учете рассеяния носителей тока только на продольных оптических фононах.

ет величину $\Delta E_v = 0.32 \pm 0.05$ эВ, а расстояние между краями зон проводимости PbTe и PbS $\Delta E_c \approx 0.4$ эВ [7]. В связи с тем что край зоны проводимости PbTe находится ниже края зоны проводимости и ниже края валентной зоны PbS при рассматриваемых здесь толщинах слоев $d > 60$ Å, структуры PbTe/PbS являются структурами II типа. Как было показано, эти структуры имеют полуметаллический характер проводимости при толщинах слоев $d \geq 60$ Å [7]. Продольный транспорт осуществляется электронами в слоях PbTe и дырками в слоях PbS. При этом подвижность электронов в слоях PbTe в несколько раз превышает подвижность дырок в PbS.

Используя правило Ферми в применении к рассматриваемым структурам, можно получить [5] выражение для частот рассеяния электрона при эмиссии (-) и адсорбции (+) одного фонона:

$$W(i, f) = \sum_{\alpha} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{H}_{\alpha} | i \rangle|^2 \delta(-\varepsilon_f + \varepsilon_i \pm \hbar\omega), \quad (1)$$

где ε_f , ε_i — полные энергии электрона в конечном и начальном состояниях. Гамильтониан электрон-фононного

взаимодействия имеет вид

$$\hat{H}_{\alpha} = \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} \sum_{q_z} e^{i\mathbf{q}_{\parallel}} \rho \Gamma_j(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z, z) \times [\hat{a}_j(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z) + \hat{a}_j^{\dagger}(-\mathbf{q}_{\parallel}, -q_z)], \quad (2)$$

где $\Gamma_{\alpha}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z, z)$ — функции связи, которая описывает взаимодействие электрона с α -модой оптических колебаний решетки, вид которой для различных фоновых мод представлен в работе [4].

Так как электрон-фононное взаимодействие является неупругим процессом, для вычисления значений подвижности носителей использовался вариационный метод [8], который для квазидвумерных структур впервые был применен в работах [5,6]. Результаты расчетов для случая многократных квантовых ям PbTe/PbS показаны на рисунке. Из представленных на нем результатов видно, что при переходе от объемных образцов к короткопериодным многократным квантовым ямам и сверхрешеткам становится важным учет рассеяния электронов на IF -фононах.

2. Эксперимент и его сравнение с расчетами

При численных расчетах подвижности электронов при $T = 77$ К использованы следующие параметры материалов и их зонной структуры: ширина запрещенной зоны $E_g(\text{PbTe}) = 0.21$ эВ, $E_g(\text{PbS}) = 0.31$ эВ; статическая диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_s(\text{PbTe}) = 650$, $\varepsilon_s(\text{PbS}) = 195$; динамическая диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_\infty(\text{PbTe}) = 37$, $\varepsilon_\infty(\text{PbS}) = 19$; энергия продольных оптических фононов $\hbar\omega_l(\text{PbTe}) = 14.1$ мэВ, $\hbar\omega_l(\text{PbS}) = 26.3$ мэВ; энергия поперечных оптических фононов $\hbar\omega_t(\text{PbTe}) = 3.4$ мэВ, $\hbar\omega_t(\text{PbS}) = 8.2$ мэВ. Здесь приведены экспериментальные данные [3,9] и в некоторых случаях использованы соотношения Лиддана–Сакса–Теллера: $\varepsilon_s/\varepsilon_\infty = (\omega_l\omega_t)^2$.

Для получения экспериментальных значений подвижности использовались структуры II типа PbTe/PbS, выращенные методом горячей стенки на диэлектрических подложках KCl (100) с буферными слоями PbTe или PbS толщиной порядка 10^2 – 10^3 нм. Толщины слоев PbTe и PbS в многократных квантовых ямах PbTe/PbS изменялись от 60 до 500 Å [10]. Обнаруженные аномально сильные зависимости коэффициента Холла для таких структур даже в слабых магнитных полях свидетельствуют о наличии 2 типов носителей разного знака и позволяют с использованием модели многослойной проводимости определить концентрации и подвижности электронов в слоях PbTe и дырок в слоях PbS [11].

Существующее значительное различие в постоянных решеток PbTe и PbS ($a_0 = 6.46$ и 5.94 Å соответственно) в квантово-размерных структурах PbTe/PbS приводит к возникновению значительного количества дислокаций несоответствия на границах раздела. Однако в работе [12] было показано, что в системе PbTe/PbS переходный слой, в котором сосредоточены дислокации несоответствия между слоями, не превышает $10 \div 20$ Å, а сами слои являются механически ненапряженными [12], что позволяет надеяться на высокие значения подвижностей в них. Кроме того, температура получения многократных квантовых ям методом "горячей стенки" [10] не превышала $T = 350^\circ\text{C}$ для предотвращения смешивания компонент на границах раздела, так как в системе PbTe/PbS при температурах $T < 400^\circ\text{C}$ смешивание компонент не происходит [13]. Присутствие большого количества дислокаций несоответствия на границах раздела также препятствует перемешиванию компонент в системе PbTe/PbS [12].

В связи с относительно большими значениями высот барьеров между отдельными слоями квантово-размерных структур PbTe/PbS проникновение волновых функций в соседние слои мало [7] и огибающие волновые функции локализованы в соответствующих слоях. Поэтому для рассматриваемых объектов достаточно хорошо применимо приближение многократных квантовых ям, практически не взаимодействующих между собой при толщинах слоев $d \geq 60$ Å.

Как видно из рисунка, экспериментальные результаты и теоретические расчеты подвижностей электронов удовлетворительно согласуются для структур PbTe/PbS. Хорошее согласие подтверждает предположение о том, что подвижности слоев квантово-размерных структур PbTe/PbS действительно могут быть высокими, что обусловлено: наличием дислокаций несоответствия лишь на границах раздела слоев, присутствием резкой металлургической границы из-за отсутствия перемешивания составляющих структуру PbTe/PbS компонент и локализацией огибающих волновых функций в соответствующих слоях из-за незначительной высоты энергетических барьеров ($\Delta E \geq 0.4$ эВ).

Расчеты подвижности, выполненные в подобном приближении для случая квантовых ям PbTe/Pb_{0.2}Sn_{0.8}Te с потенциальными барьерами конечной высоты ($\Delta E_c = 60$ мэВ) и также представленные на рисунке, приводят к значениям подвижностей носителей заряда порядка $3 \cdot 10^4$ – 10^5 см²/(В · с) для толщин слоев $50 \div 600$ Å. Эти величины выше наблюдающихся экспериментально значений подвижности электронов в квантовых ямах PbTe/Pb_{0.2}Sn_{0.8}Te и других соединений A^{IV}B^{VI}, что говорит о необходимости учета других механизмов рассеяния, из которых, по-видимому, наиболее заметным может быть рассеяние на нерегулярностях границы раздела, так как в других структурах A^{IV}B^{VI}, в отличие от структур PbS/PbTe, интердиффузия компонент на границах раздела является существенной. Экспериментальные значения подвижностей носителей заряда в других низкоразмерных структурах A^{IV}B^{VI} (см. рисунок), как правило, в 3–5 раз ниже наблюдаемых в объемных кристаллах этих материалов.

В заключение отметим, что рассеяние на продольных оптических фононах является основным механизмом рассеяния в многократных квантовых ямах PbTe/PbS при $T \geq 70$ К. При ширинах квантовых ям $d < 150$ Å рассеяние на IF-модах доминирует как в PbTe/PbS, так и в структурах PbTe/Pb_{0.2}Sn_{0.8}Te, что вызывает уменьшение подвижности с уменьшением толщины слоев d .

Список литературы

- [1] Ф.Ф. Сизов, Г.В. Лашкарев, М.В. Радченко, В.Б. Орлецкий, Е.Т. Григорович. ФТП, **10**, 1801 (1976).
- [2] В.В. Бондаренко, В.А. Шендеровский, В.В. Тетеркин. УФЖ, **36**, 344 (1991).
- [3] А.В. Любченко, Е.А. Сальков, Ф.Ф. Сизов. *Физические основы полупроводниковой инфракрасной фотозлектроники* (Киев, Наук. думка, 1984).
- [4] L. Wedler, R. Haupt. Phys. St. Sol. (b), **43**, 487 (1987).
- [5] V.V. Bondarenko, F.F. Sizov. Phys. Low-Dim. Structur., **8/9**, 123 (1995).
- [6] В.В. Бондаренко, Ф.Ф. Сизов. Неорг. матер., **33**, 224 (1997).
- [7] F.F. Sizov, V.V. Zabudsky, J.V. Gumenjuk–Sichevskaya. Phys. Low-Dim. Structur., **3**, 81 (1996).
- [8] П.Н. Горлей, В.А. Шендеровский. *Вариационный метод в кинетической теории* (Киев, Наук. думка, 1992).

- [9] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца* (М., Наука, 1968).
- [10] V.V. Golovin, J.V. Gumenjuk-Sichevskaya, J. Kulumbetov, F.F. Sizov, V.V. Tetyorkin, V.V. Zabudsky. *Phys. Low-Dim. Structur.*, **6**, 19 (1994).
- [11] V.V. Zabudsky, F.F. Sizov, V.V. Tetyorkin. *Model. and Simul. Mater. Sci. Eng.*, **3**, 575 (1995).
- [12] С.С. Борисова, И.Ф. Михайлов, Л.С. Палатник, А.Ю. Сипатов. *Кристаллография*, **34**, 716 (1989).
- [13] А.Х. Абрикосов, Л.Е. Шелимова. *Полупроводниковые материалы на основе соединений $A^{IV}B^{VI}$* (М., Наука, 1970).
- [14] F. Ishida, S. Matsuura, H. Fujiyasu, H. Ebe, K. Shinohara. *Superlat. Microstruct.*, **2**, 575 (1986).
- [15] G. Bauer. *Surf. Sci.*, **168**, 462 (1986).
- [16] S.V. Plyatsko, Yu.S. Gromovoj, G.E. Kostyunin, F.F. Sizov, V.P. Klad'ko. *Thin Sol. Films*, **218**, 151 (1992).

Редактор Т.Е. Полянская

Electron-phonon interaction and electron mobility in PbTe/PbS quantum-dimensional structures of the II type

V.V. Bondarenko, V.V. Zabudsky*, F.F. Sizova*

Institute of Physics,
National Academy of Sciences of the Ukraine,
252028 Kiev, the Ukraine

*Institute of Semiconductor Physics,
National Academy of Sciences of the Ukraine,
252028 Kiev, the Ukraine