

537.311.33

**ПОВЕРХНОСТЬ С ВЫСОКИМИ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИМИ ИНДЕКСАМИ — СВЕРХРЕШЕТКА ДЛЯ ДВУМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ*****В. А. Волков, В. А. Петров, В. Б. Сандожирский*****СОДЕРЖАНИЕ**

1. Введение . . . . .	423
2. Основные сведения о двумерном электронном газе в инверсионных слоях на (001)Si . . . . .	424
3. Введение в теорию ориентационных сверхрешеток . . . . .	425
4. Экспериментальные данные для инверсионных слоев на поверхностях кремния с высокими индексами Миллера . . . . .	430
а) Статическая электропроводность (430). б) Явления в сильных магнитных полях (431). в) Оптические свойства в инфракрасной области (434).	
5. Величина минищелей. Обсуждение результатов . . . . .	436
6. Заключение . . . . .	438
7. Дополнение . . . . .	438
Цитированная литература . . . . .	439

**1. ВВЕДЕНИЕ**

В последнее время интенсивно развиваются начатые более десяти лет назад исследования свойств двумерного (2D) электронного и дырочного газов в инверсионных слоях (ИС), возникающих при сильном загибе зон у поверхности полупроводников. Свидетельство этому — международные конференции, состоявшиеся в США (1975 г.)<sup>1</sup> и ФРГ (1977 г.)<sup>2</sup>. Третья конференция по этой тематике состоялась в Японии в 1979 г.

Как правило, такие исследования проводятся в структурах металл — диэлектрик — полупроводник. Возможность сильного, — на два-три порядка, — изменения поверхностной концентрации носителей в ИС без изменения остальных характеристик материала открывает уникальные возможности для экспериментального изучения влияния на энергетический спектр таких явлений, как многочастичные взаимодействия, андерсоновская и вигнеровская локализации и др.

В 1977 г. возникло новое направление исследований — изучение ИС на поверхностях кремния с высокими индексами Миллера. В работе<sup>3</sup> при исследовании таких ИС были обнаружены аномалии гальваномагнитных характеристик, которые трактовались как проявление эффектов поверхностной сверхрешетки (СР) неизвестной природы. Независимо и одновременно одним из авторов было предсказано<sup>4</sup>, что длинные кристаллографические периоды, существующие на поверхностях с высокими индексами, должны приводить к возникновению СР эффектов в электронном спектре ИС. Первые попытки количественного объяснения экспериментальных результатов были предприняты сначала в<sup>5</sup>, а затем в<sup>6,7</sup>. СР, обусловленные такой ориентацией ИС, будем, следуя<sup>4</sup>, называть ориентационными.

В отличие от обычных (искусственных) СР, состоящих из тонких слоев периодически изменяющегося состава<sup>8</sup>, в данном случае появляется возможность управления уровнем Ферми и параметрами спектра в одном образце.

Этой развивающейся области и посвящена статья. Основной упор делается на изложение экспериментальных фактов, и в меньшей степени на состояние теории, далеко не законченной к настоящему времени. Учетные работы, опубликованные до 1 июля 1979 г.

## 2. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О ДВУМЕРНОМ ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ В ИНВЕРСИОННЫХ СЛОЯХ НА (001) Si

Экспериментальные исследования ориентационных СР ведутся в ИС п-типа (п-ИС) на поверхностях, близких к (001) Si. Поэтому рассмотрим сначала основные свойства п-ИС на (001) Si.

Для изучения таких ИС создается структура, показанная на рис. 1, а. Она состоит из металлического электрода (затвора), отделенного слоем окисла  $\text{SiO}_2$  толщиной  $1000 \text{ \AA}$  от массивного кремния р-типа. Между затвором и объемом полупроводника подается напряжение  $V_g$ . При поляриности

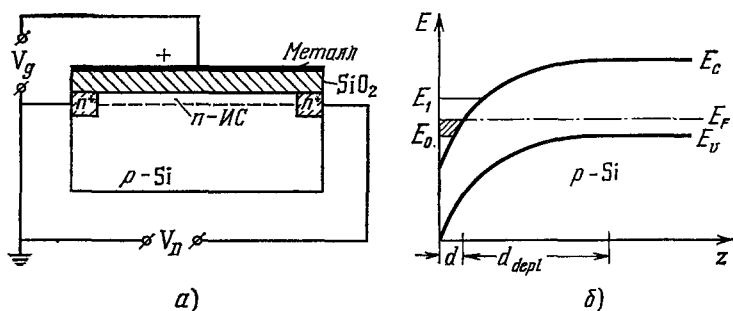


Рис. 1. Структура металл — диэлектрик — полупроводник (а) и зонная схема у поверхности полупроводника (б).

$V_g$  — потенциал затвора относительно полупроводника,  $V_D$  — тянущее напряжение,  $d$  — толщина ИС,  $d_{\text{depl}}$  — толщина обедненного слоя,  $E_c$  —  $E_v$  — ширина запрещенной зоны Si.

$V_g$ , указанной на рис. 1, и загибе зон, превышающем ширину запрещенной зоны кремния, на поверхности полупроводника образуется тонкий проводящий слой, п-ИС (рис. 1, б). Толщина этого слоя  $d \sim 50 \text{ \AA}$ , толщина слоя объемного заряда (обедненный слой), отделяющего ИС от объема,  $d_{\text{depl}} \sim 1 \text{ мкм}$ . Наличие высокоомного обедненного слоя позволяет электрически развязать поверхностную и объемную проводящие области. Для измерения проводимости ИС служат два омических  $p^+$ -контакта, между которыми приложено тянущее напряжение  $V_D$ . Поверхностная концентрация электронов в ИС ( $n_s$ ) изменяется с помощью  $V_g$ :

$$n_s = \frac{C}{|e|} (V_g - V_t), \quad (1)$$

где  $C$  — емкость слоя  $\text{SiO}_2$ ,  $e$  — заряд электрона,  $V_t$  — пороговое напряжение инверсии (экспериментально  $V_t$  определяют по началу резкого возрастания подвижности в эффекте поля при 77 К). В п-ИС на поверхности кремния  $n_s$  можно изменять от  $10^{10}$  до  $10^{13} \text{ см}^{-2}$ .

Электроны в ИС движутся в потенциальном желобе, образованном электростатическим потенциалом объемного заряда, с одной стороны, и потенциальным барьером на границе Si —  $\text{SiO}_2$ , с другой, рис. 1, б.

В структурах высокого качества рассеяние электронов на границе Si — SiO<sub>2</sub> мало — типичные значения подвижности в n-ИС на кремнии  $\mu \sim 10^3 - 10^4$  см<sup>2</sup> В<sup>-1</sup> с<sup>-1</sup> при гелиевых температурах.

В этом случае электронный спектр ИС из-за квантования поперечной компоненты квазимульса состоит из набора 2D-подзон — их называют электрическими подзонами — и в простейшем случае имеет вид

$$\mathcal{E}_{iv}(k_x, k_y) = E_i + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{K}_0^{(i)})^2}{2m_{\parallel}^*}; \quad (2)$$

здесь ось  $z$  направлена по нормали к ИС;  $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$  — волновой вектор в плоскости ИС;  $E_i$  — положение дна  $i$ -й электрической подзоны;  $v$  — номер долины, центрированной в одной из точек  $\mathbf{K}_0 = 0,85 \cdot 2\pi/a$  (001) в зоне проводимости,  $a = 5,43$  Å — постоянная решетка Si;  $\mathbf{K}_0^{(i)}$  — проекция  $\mathbf{K}_0$  на плоскость ИС;  $m_{\parallel}^*$  — эффективная масса в плоскости ИС, зависящая от его ориентации (для n-ИС на (001) Si  $m_{\parallel}^* = 0,19m_0$ ,  $m_0$  — масса свободного электрона),  $\hbar$  — постоянная Планка.

Изоэнергетическая поверхность в зоне проводимости Si состоит из шести эллипсоидов вращения, вытянутых вдоль кубических осей. Основная электрическая подзона  $\mathcal{E}_{0v}$  в приближении эффективной массы двукратно вырождена по номеру долины ( $v = 1, 2$ ) и формируется из двух эллипсоидов, соответствующих наибольшей эффективной массе вдоль нормали к ИС. Для нее  $\mathbf{K}_0^{(1)} = 0$ , а изоэнергетические контуры — окружности. Типичный энергетический зазор между основной и первой возбужденной подзонами составляет несколько десятков миллиэлектронвольт. Поэтому при гелиевых температурах, при которых, как правило, проводятся измерения, заселена только основная подзона. Электроны в ней образуют вырожденный 2D (точнее, квази-2D) газ.

Плотность состояний на единицу площади  $D(E)$  в этом случае не зависит от энергии и равна

$$D_0 = \frac{g_s g_v m_{\parallel}^*}{2\pi \hbar^2}, \quad (3)$$

где  $g_s, g_v$  — кратности спинного и долинного вырождения соответственно. Для n-ИС на (001) Si  $g_s = g_v = 2$  и  $D_0 = 1,6 \cdot 10^{11}$  см<sup>-2</sup> мЭВ<sup>-1</sup>.

Уровень Ферми  $E_F$  и фермиевское волновое число  $k_F$  в вырожденном газе с плотностью состояний (3) следующим образом связаны с  $n_s$ :

$$n_s = D_0 E_F = \frac{k_F^2 g_s g_v}{4\pi}. \quad (4)$$

Изложенные представления о 2D электронном газе в основном согласуются с экспериментом.

Более подробное изложение состояния теоретических и экспериментальных исследований ИС можно найти в обзоре<sup>9</sup> и трудах конференций<sup>1,2</sup>.

### 3. ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ ОРИЕНТАЦИОННЫХ СВЕРХРЕШЕТОК

К настоящему времени нет исчерпывающей теории электронного спектра в ИС на поверхностях с высокими индексами, которая единым образом объясняла бы всю совокупность экспериментальных данных. Тем не менее, ряд основных особенностей спектра можно определить, исходя только из наличия в системе 2D-трансляционной симметрии<sup>4,7,10</sup>. Заметим, что существуют и иные подходы к решению этой задачи, основанные на других предположениях<sup>5,6</sup>. Они будут обсуждены ниже.

Волновая функция электрона в ИС захватывает много атомных слоев ( $d \gg a$ ; см. предыдущую главу). Как показали электронно-микроскопические исследования<sup>11</sup>, для (119) Si — SiO<sub>2</sub>, кристаллическая решетка в области ИС такая же, как и в объеме, если не считать одного-двух, возможно, нарушенных атомных слоев вблизи границы Si — SiO<sub>2</sub>. Примем поэтому<sup>4</sup>, что трансляционная симметрия электронной системы определяется 2D-симметрией одной из атомных плоскостей бесконечного кристалла, параллельной поверхности.

Из рис. 2 видно, что в ИС на поверхности кристалла с высокими индексами Миллера появляется длинный кристаллографический период  $A$  (сверхпериод) для трансляций вдоль поверхности. Величина  $A$  определяется конкретной ориентацией поверхности, типом кристаллической

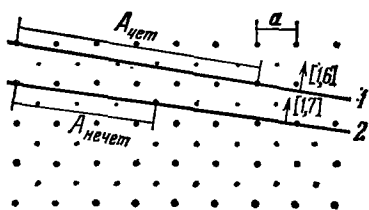


Рис. 2. Сечение кристаллической решетки плоскостью, параллельной ИС, на примере центрированной квадратной решетки для двух разных ориентаций поверхности.

$A$  — длинный кристаллографический период вдоль ИС.

подрешеток, сдвинутых одна относительно другой на  $1/4$  пространственной диагонали куба. 2D-решетка Бравэ в этом случае является простой прямоугольной для четных  $n$  и центрированной прямоугольной для нечетных  $n$ . Построим 2D-зону Бриллюэна для этих двух случаев. Ее размер вдоль оси  $k_x$  определяется выражением  $Q_{\min}(\text{чет}) = (2\pi/a) \sin \theta$ ;  $Q_{\min}(\text{нечет}) = (4\pi/a) \sin \theta$  соответственно, что при  $n \gg 1$  ( $\theta \ll 1$ ) значительно меньше обычных размеров 3D-зоны Бриллюэна. В координатном пространстве можно ввести сверхпериод  $A_{\text{чет}} \equiv 2\pi/Q_{\min}(\text{чет}) = a/\sin \theta$  для четных  $n$  и  $A_{\text{нечет}} \equiv 2\pi/Q_{\min}(\text{нечет}) = a/2 \sin \theta$  для нечетных  $n$ , причем ось  $x$  служит осью двумерной ориентационной СР. Для  $n$ , отличающихся на единицу, сверхпериоды существенно различаются по величине, что проиллюстрировано на рис. 2 (случай 1 и 2) на простом примере.

Аналогично можно получить, что для (2, 2, 23) Si  $Q_{\min} = 2\pi/A = (\pi/a) \sin \theta$  ( $\theta \approx 7^\circ$ ,  $\varphi = 45^\circ$ ), а для (0, 3, 17) Si  $Q_{\min} = 2\pi/A = (4\pi/3a) \sin \theta$  ( $\theta \approx 10^\circ$ ,  $\varphi = 90^\circ$ ). Полученные выражения для  $Q_{\min}$  понадобятся для сравнения с экспериментом.

Рассмотрим теперь особенности электронного спектра при наличии ориентационной СР.

Хорошо известно, что даже слабый потенциал СР радикально изменяет электронный спектр, смешивая состояния с волновыми векторами  $\mathbf{k}$ , отличающимися на один из векторов обратной решетки, в данном случае на  $Q$ , кратный  $Q_{\min}$ . Для электрона в ИС, имеющего невозмущенный 2D-закон дисперсии (2), (вообще говоря,  $m_{\parallel}^*$  в (2) зависит от  $\theta$  и  $\varphi$ , но при  $\theta \ll 1$  можно считать, что  $m_{\parallel}^* \approx 0,19m_0$ ), слабый потенциал одномерной ориентационной СР приводит к образованию минищелей (МЩ), положе-

решетки и обуславливает появление некоторого потенциала СР. Влияние такой ориентационной СР на электронный спектр ИС будет тем существеннее, чем тоньше ИС (меньше  $d/a$ ), т. е. чем больше  $V_g$  и  $n_g$ . Очевидно, что в «массивном» пределе ( $d/a \rightarrow \infty$ ) это влияние пренебрежимо мало.

Определим симметрию одной из атомных плоскостей ( $lmn$ ) Si;  $l, m, n$  — целые числа. Она отклонена от (001) Si на полярный угол  $\theta = \arccos(n/\sqrt{m^2 + n^2 + l^2})$  и азимутальный угол  $\varphi = \arccos(l/\sqrt{m^2 + l^2})$ . Оси  $x, y, z$  направим вдоль  $[ln, mn, -l^2 - m^2]$ ,  $[-m, l, 0]$ ,  $[l, m, n]$  соответственно. В качестве примера рассмотрим ориентацию (11 $n$ ) Si. Решетка кремния состоит из двух гранецентрированных кубических

ние которых в  $k_{||}$ -пространстве определяется из условия

$$\mathcal{E}_{iv}(k_x, k_y) = \mathcal{E}_{i'v'}(k_x + Q, k_y). \quad (5)$$

Разрешенные 2D-зоны будем, следуя общепринятой терминологии<sup>8</sup>, называть минизонами. Тип МЩ определяется набором индексов в (5). К настоящему времени экспериментально обнаружены только МЩ, образованные гибридизацией состояний из основной электрической подзоны ( $i = i' = 0$ ). Именно такие МЩ мы и будем рассматривать, опуская в дальнейшем индексы подзон  $i, i'$ . Более общий случай рассмотрен в<sup>10</sup>.

Гибридизация состояний одной долины ( $v = v'$ ) приводит к появлению «внутридолинных» МЩ, которые могут существовать как в однодолинных, так и в многодолинных полупроводниках.

Особенностью многодолинного полупроводника является возможность появления «междолинных» МЩ (кроме внутридолинных), которые обусловлены смешиванием состояний из разных долин ( $v \neq v'$ ).

Решая совместно (5) и (2), определим положение в  $k_{||}$ -пространстве внутридолинных МЩ:

$$k_x \pm K_0 \sin \theta = \frac{\pi m}{A}, \quad m = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6)$$

и междолинных МЩ:

$$k_x = \frac{\pi m}{A}, \quad m = 0, \pm 1, \dots \quad (7)$$

( $k_x$  определено в схеме расширенных зон).

Заметим, что одна из междолинных МЩ обусловлена вектором  $Q = 0$  ( $m = 0$  в условии (7)).

В каждой точке, определяемой условиями (6), (7), невозмущенный спектр двукратно вырожден. Потенциал СР снимает это вырождение, приводя к образованию минизонного спектра. Величину МЩ  $\Delta_{vv'}(Q)$  можно вычислить, определив сначала вид эффективного потенциала СР (см. последнюю главу).

Закон дисперсии электрона вблизи каждой МЩ можно найти, считая ее малой, в первом порядке вырожденной теории возмущений:

$$\tilde{\mathcal{E}} = \frac{\mathcal{E}_v(k_x, k_y) + \mathcal{E}_{v'}(k_x + Q, k_y)}{2} \pm \sqrt{\left[ \frac{\mathcal{E}_v(k_x, k_y) - \mathcal{E}_{v'}(k_x + Q, k_y)}{2} \right]^2 + \left| \frac{\Delta_{vv'}(Q)}{2} \right|^2}. \quad (8)$$

Как следует из (8) и (2), эффективная масса на дне второй минизоны (знак «+» в (8)) пропорциональна величине первой МЩ и значительно меньше эффективной массы на дне первой минизоны, равной  $m_{||}^*$ .

Полученный закон дисперсии показан на рис. 3, а (однодолинный случай) и рис. 4, а (двухдолинный случай применительно к n-ИС на (11n) Si,  $n$  — нечетное число). Соответствующие изоэнергетические контуры приведены на рис. 3, б, 4, б. Отметим, что в работе<sup>6</sup>, откуда взят рис. 4, а, использован подход<sup>5</sup>,<sup>6</sup>, согласно которому  $Q_{\min} = (4\pi/a) \sin \theta$ . Согласно излагаемым представлениям это справедливо для (11n) Si,  $n$  — нечетное число.

В однодолинном случае при малых  $n_s$ , когда начинает заполняться первая минизона ( $E_F = E_1$ ), ферми-«поверхность» близка к окружности (штриховая линия на рис. 3, б). Когда  $E_F$  находится внутри МЩ, замкнутая ферми-«поверхность» превращается в открытую. При дальнейшем увеличении  $n_s$   $E_F$  попадает во 2-ю минизону ( $E_F = E_2$ ), что приводит к появлению новых полостей ферми-«поверхности» типа «линза».

Многодолинный случай — именно он реализуется на опыте — отличается от предыдущего тем, что при попадании  $E_F$  во 2-ю минизону (выше щели 1, но ниже щели 2 на рис. 4, а) вместо открытой ферми-поверхности

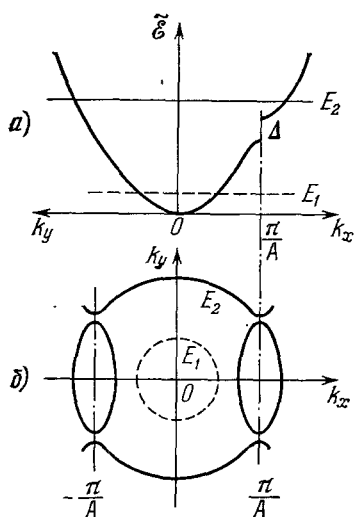


Рис. 3. Закон дисперсии (а) и изоэнергетические контуры (б) для  $\tilde{\epsilon} = E_1$  (штриховая линия) и  $\tilde{\epsilon} = E_2$  (сплошная линия) в случае 2D-электрона при наличии 1DCP.

$A$  — период СР, однодолинный случай.

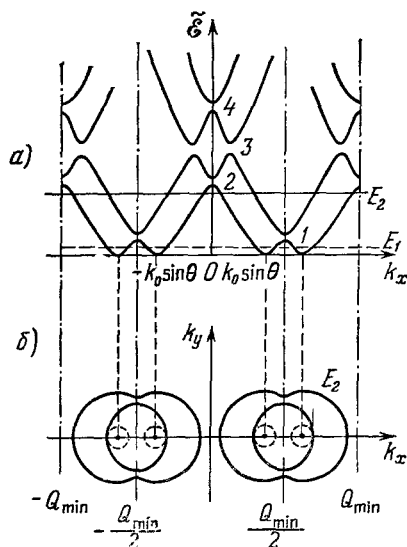


Рис. 4. Закон дисперсии (а) и изоэнергетические контуры (б) в схеме расширенных зон для  $n$ -ИС на  $(11n)$  Si.

$n$  — нечетное число;  $Q_{\min} = (4\pi/a) \sin \theta$  — обратный вектор СР; долины центрированы в точках  $k_x = \pm K_0 \sin \theta$ , 1, 2, 4 — междолинные щели, 3 — внутридолинная щель.

образуется замкнутая поверхность типа «собачья кость» (см. рис. 4, б). Открытая поверхность в этом случае возникает при достижении уровнем Ферми следующей МЩ.

Каждая МЩ приводит к появлению логарифмической расходимости плотности состояний  $D(E)$  при энергиях, близких к нижнему краю МЩ (рис. 5). Этот результат можно получить из формулы

$$D(E) = \frac{g_s g_v}{(2\pi\hbar)^2} \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{g_s g_v}{2\pi\hbar^2} m_c(E), \quad (9)$$

где  $S(E)$  площадь, ограниченная контуром  $\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}_{\parallel}) = E$ ,  $m_c(E) = (1/2\pi) \partial S / \partial E$  — квазиклассическая циклотронная масса (если изоэнергетическая поверхность много связная, то в (9) следует провести суммирование по всем контурам  $\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}_{\parallel}) = E$ ). Для этого нужно учесть, что  $m_c(E)$  логарифмически расходится при приближении к нижнему краю МЩ, энергия которого является седловой точкой закона дисперсии (8) <sup>12</sup>.

Внутри МЩ  $D(E)$  отлична от нуля из-за одномерности СР. Скачок  $D(E)$  на верхнем краю МЩ связан с появлением вклада от второй 2D-минизоны.

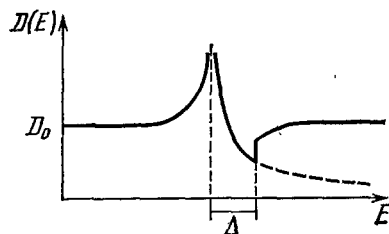


Рис. 5. Плотность состояний в 2D-электронном газе при наличии 1DCP.

$D_0$  — невозмущенная плотность состояний;  $\Delta$  — величина нижней минизоны.

Особенности  $D(E)$  в реальной системе будут размываться из-за рассеяния. Тем не менее, когда величина размытия меньше  $\Delta$ , следует ожидать появления особенностей в поведении кинетических коэффициентов при прохождении  $E_F$  через МЩ. Для того чтобы связать между собой критические значения уровня Ферми  $E_{F0}$ , концентрации  $n_{s0}$  и фермиевского волнового числа  $k_{F0}$ , соответствующие этим особенностям, можно воспользоваться соотношениями (4), которые приближенно верны и в нашем случае, если  $\Delta/E_{F0} \ll 1$ .

Для сравнения с опытом удобно ввести «псевдопериод»  $CP$ , определив его следующим образом:

$$L_{\text{эсп}} \equiv \frac{\pi}{k_{F0}} = \sqrt{\frac{\pi g_s g_v}{4n_{s0}}}. \quad (10)$$

Каждой МЩ при данном  $A$  отвечает свое значение псевдопериода  $L$ . Подчеркнем, что  $L$  совпадает с истинным периодом  $A$  только для нижней внутримолиновой МЩ. Для междолиновых МЩ  $L \neq A$ , так как  $k_{F0}$  в выражении (10) отсчитывается от центра долины (ср. с (7), где  $k_x$  отсчитывается от центра 2D-зоны Бриллюэна).

Наиболее полные экспериментальные данные имеются для нижней МЩ. Для  $n$ -ИС на (11n) Si из-за особенностей зоны проводимости кремния ( $|K_0| = 0,85 \pi/a$ ) эта МЩ является междолиновой и расположена при

Таблица

$A$  — кристаллографический период,  $L$  — псевдопериод для нижней минищели,

$$L_{\text{эсп}} = \sqrt{\frac{\pi}{n_{s0}}}, \quad L_{\text{теор}} = \max |2\pi/(Q - 2K_0 \sin \theta)|^{-1}$$

Поверхность Si	$A, \text{\AA}$	$L_{\text{эсп}}, \text{\AA}$	$L_{\text{теор}}, \text{\AA}$
(115)	10	$\sim 70^{13}$	66
(118)	31	$101-107^3$	104
(119)	18	$110-120^5$	116
(2, 2, 23)	89	$\sim 200^{13}$	223

$k_x = \pm(2\pi/a) \sin \theta$ , что соответствует  $k_{F0} = 0,15 (2\pi/a) \sin \theta$ . В таблице приведены теоретические <sup>7</sup> и экспериментальные значения  $L$  для нескольких ориентаций ИС.

Подчеркнем, что для вычисления  $Q_{\min}$ , а следовательно, и  $L_{\text{теор}}$ , необходимо задание всех индексов поверхности, вблизи которой создан ИС. Поэтому в таблице не указаны данные для поверхностей, миллеровские индексы которых неизвестны. Это касается работы <sup>6</sup>, в которой для исследованных поверхностей сообщаются только значения  $\theta$ .

В работах <sup>5,6</sup> развит другой подход к определению положения МЩ в  $k_{\parallel}$ -пространстве. Предполагалось, что поверхностный вектор обратной решетки (обратный вектор сверхрешетки в нашей терминологии) можно получить проектированием объемного вектора  $(4\pi/a) [001]$  на плоскость ИС. В результате  $Q_{\min} = (4\pi/a) \sin \theta$  не зависит от полного набора индексов поверхности. Такая процедура дает правильное положение ряда МЩ в  $k_{\parallel}$ -пространстве, в частности, вычисленные таким образом значения  $L_{\text{теор}}$  для нижней МЩ на поверхностях (115) Si, (118) Si и (119) Si (но не (2, 2, 23) Si) совпадают с указанными в таблице. Критическое обсуждение этого подхода будет дано в гл. 5.

#### 4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ НА ПОВЕРХНОСТЯХ КРЕМНИЯ С ВЫСОКИМИ ИНДЕКСАМИ МИЛЛЕРА

К настоящему времени МЩ обнаружены в  $n$ -ИС на поверхностях, близких к (001) Si, при  $\theta$  от 1 до 16°;  $\varphi = 45^\circ, 90^\circ$ .

Измерено низкотемпературное поведение статической проводимости<sup>3, 6</sup>, осцилляций Шубникова — де Гааза<sup>3, 13, 14, 17</sup>, инфракрасного (ИК) поглощения<sup>5, 15, 17</sup>, фотопроводимости<sup>16</sup>, излучения горячих электронов<sup>15</sup> и циклотронного резонанса<sup>15</sup> при изменении  $n_s$ .

Минищель, обнаруженная в первой экспериментальной работе<sup>3</sup>, оказалась, как было выяснено в дальнейшем<sup>5</sup>, междолинной. Внутридолинные МЩ были измерены в работе<sup>6</sup>.

##### а) Статическая электропроводность

На рис. 6 приведены типичные зависимости проводимости вдоль,  $\sigma_{||}$ , и поперек,  $\sigma_{\perp}$ , СР от концентрации электронов в ИС на примере (118) Si ( $\theta = 10^\circ$ ,  $\varphi = 45^\circ$ ). На фоне монотонного роста  $\sigma$  ( $n_s$ ) в области  $3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$  наблюдалась структура, которая объясняется прохождением  $E_F$  через нижнюю МЩ. Эта структура определяется главным образом немонотонностью  $D(E_F)$  (см. рис. 5), что приводит к особенностям в рассеянии электронов:

$$\sigma(n_s) \sim \tau(E_F) \sim \frac{1}{D(E_F)}$$

— время релаксации по импульсу). Поэтому на краях МЩ, где  $D(E)$  максимальна,  $\sigma$  ( $n_s$ ) имеет провалы. Отличия формы структуры  $\sigma_{||}(n_s)$  и  $\sigma_{\perp}(n_s)$ , а также их абсолютных значений связаны с тем, что из-за брэгговских отражений скорость электронов вдоль СР меньше, чем скорость в перпендикулярном направлении.

При температуре  $T = 77 \text{ K}$  структура  $\sigma$  ( $n_s$ ) исчезает. Это объясняется тепловым размытием уровня Ферми, так как длина свободного пробега ( $\sim 1500 \text{ \AA}$ ) слабо зависит от  $T$ .

Из положения структуры  $\sigma$  ( $n_s$ ) можно определить псевдопериод  $L_{\text{эксп}}$  по формуле (10) (см. таблицу). Единственная МЩ, обнаруженная для (118) Si (см. рис. 6) является нижней междолинной МЩ. Вышележащие щели для (118) Si не наблюдались, так как для их достижения уровнем Ферми требуется слишком большие значения  $n_s$  ( $\geq 1,6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  по оценкам<sup>7</sup>).

Часть из этих щелей была обнаружена на образцах с меньшими  $\theta$  ( $\theta = 8,9^\circ; 5,6^\circ; 2,9^\circ; 1,9^\circ; 1,1^\circ$ ). Ориентация поверхностей определялась из рентгеновских измерений с ошибкой, меньшей  $0,2^\circ$ . При столь малых  $\theta$  особенности на кривых  $\sigma$  ( $n_s$ ) были слабыми, поэтому измерялись зависимости  $d\sigma(n_s)/dn_s$ ,  $d^2\sigma(n_s)/dn_s^2$ . Кроме нижней междолинной МЩ (щель 1 на рис. 4, а) при увеличении  $n_s$  были обнаружены две следующие по энергии междолинные МЩ ( $k_{F0} = 0,85 (2\pi/a) \sin \theta$  и  $k_{F0} = 1,15 (2\pi/a) \sin \theta$ ), которым на рис. 4, а соответствуют щели 2 и 4, а также нижняя внутридолинная МЩ ( $k_{F0} = \frac{2\pi}{a} \sin \theta$  — щель 3 на рис. 4, а).

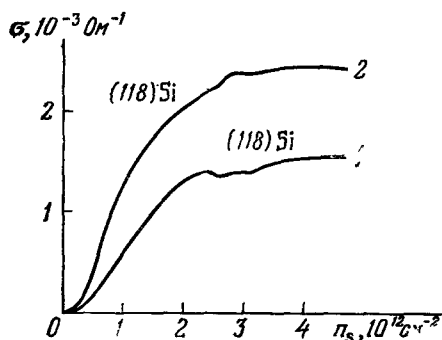


Рис. 6. Проводимость  $n$ -ИС на (118) Si.  $T = 1,7 \text{ K}$ . 1 — Проводимость вдоль [882] (ось СР); 2 — проводимость вдоль [110].



Данные по положению двух МЩ представлены на рис. 7. Согласно подходу <sup>5, 6</sup> это две нижние междолинные МЩ. В целом теория <sup>5, 6</sup> неплохо согласуется с опытом.

Из ширины структуры  $\sigma(n_s)$  определялась величина МЩ. Например, для (118) Si нижняя междолинная МЩ составляла  $\Delta = 4 \pm 1$  мэВ при  $n_s \approx 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ , а для (115) Si  $\Delta \approx 18$  мэВ при  $n_s \approx 7,5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ .

#### б) Явления в сильных магнитных полях

Важную информацию о спектре электронов в ИС дает эффект Шубникова — де Гааза. Особенностью ИС является то, что шубниковские осцилляции проводимости можно наблюдать не только при изменении магнитного поля  $H$  ( $n_s = \text{const}$ ), как в 3D-случае, но и при изменении  $n_s$  ( $H = \text{const}$ ). В последнем случае  $E_F$  пересекает уровни Ландау, что приводит к осцилляциям проводимости с периодом

$$\Delta n_s = \frac{|e| g_s g_v H_z}{2\pi \hbar}, \quad (11)$$

где  $H_z$  — перпендикулярная к поверхности компонента  $\mathbf{H}$ . Независимость  $\Delta n_s$  от эффективной массы

$\frac{d\sigma}{dV_g}$ , произв. ед.

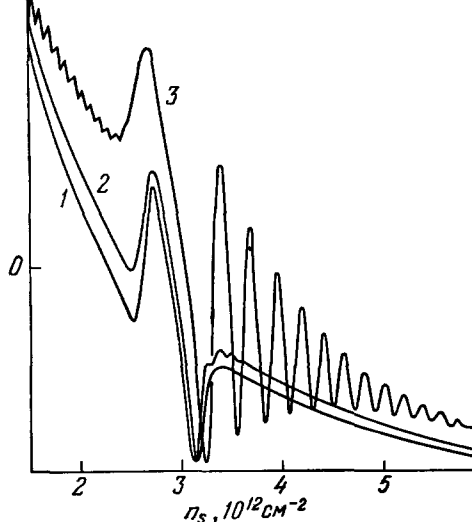


Рис. 8. Шубниковские осцилляции проводимости для n-ИС на (118) Si.

$T = 1,5 \text{ К}$ ; 1 —  $H = 0$ ; 2 —  $H = 0,3 \text{ Тл}$ ; 3 —  $H = 0,8 \text{ Тл}$ .<sup>3</sup>

на осцилляции от электронов во 2-й минизоне. Последнее трактовалось как магнитный пробой.

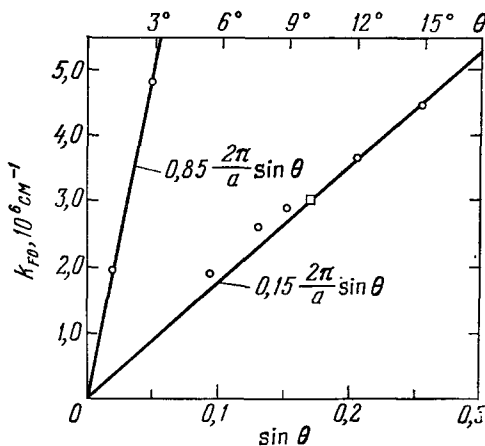


Рис. 7. Угловая зависимость фермиевского волнового числа, при котором  $E_F$  достигает двух МЩ, обнаруженных в <sup>6</sup>.

Сплошные линии — теория <sup>5</sup>.

является специфическим свойством 2D-системы <sup>9</sup>.

На рис. 8 приведена зависимость  $d\sigma(n_s)/dn_s$  для  $\mathbf{H}$ , перпендикулярных к поверхности, в случае (118) Si. В некваंटующих полях,  $0 \leq H \leq 0,3 \text{ Тл}$  ( $\omega_c \tau < 1$ ,  $\omega_c = |e| \hbar / m_c c$  — циклотронная частота), осцилляций нет. В умеренных полях,  $0,3 \text{ Тл} < H < 0,7 \text{ Тл}$  появлялись осцилляции от электронов во второй минизоне ( $n_s > 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ), в то время для электронов в первой минизоне они отсутствовали (для них  $\omega_c \tau < 1$ ).

При  $H \geq 0,7 \text{ Тл}$  появлялись и осцилляции от электронов в первой минизоне ( $n_s < 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ). При дальнейшем увеличении  $H$  они охватывали область все больших  $n_s$  и при  $H > 0,9 \text{ Тл}$  накладывались

Увеличение периода осцилляций от электронов во 2-й минизоне (см. рис. 8) связано просто с тем, что по оси абсцисс откладывалась полная концентрация электронов  $n_s$ , которая при заполнении 2-й минизоны распределяется между обеими минизонами.

Зная период (11) и число осцилляций, можно определить концентрацию электронов в каждой минизоне. На рис. 9, взятом из <sup>13</sup>, построена зависимость концентрации электронов во 2-й минизоне  $n_{s2}$  от полной концентрации  $n_s$  для нескольких ориентаций. Следует отметить, что значения  $n_{s2}$  на этом рисунке завышены в два раза. Действительно, для междолинной МЩ кратность долинного вырождения вто-

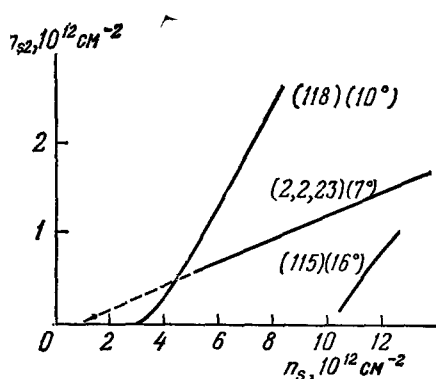


Рис. 9. Населенность второй минизоны  $n_{s2}$  как функция полной концентрации электронов в п-ИС на Si для нескольких ориентаций <sup>13</sup>.

В скобках указаны значения  $\theta$ .

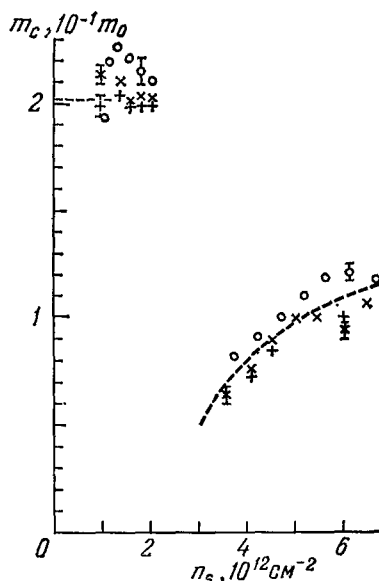


Рис. 10. Шубниковская эффективная масса в п-ИС на (118) Si <sup>3</sup>.

рой минизоны равна 1, а не 2, как считалось авторами работ <sup>3</sup>, <sup>13</sup>, исходящими из однодолинной модели.

Эффективная масса на уровне Ферми определялась из температурного затухания осцилляций (рис. 10) в 1-й минизоне  $m^* = 0,2m_0$ , как и для (001) Si; во 2-й минизоне она значительно меньше и сильно непараболична. Уже из сопоставления рис. 5 и 10 (с учетом (9)) видно, что эксперимент качественно согласуется с теорией. Для количественного согласия необходимо предположить, что  $\Delta$  в формуле (8) существенно увеличивается с ростом  $n_s$  и  $\theta$ . Так, для (118) Si при возрастании  $n_s$  в интервале  $(3-6) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$   $\Delta$  увеличивается от  $4 \pm 1 \text{ мэВ}$  до  $8 \pm 3 \text{ мэВ}$ .

Для (2, 2, 23) Si определить  $\Delta$  не удастся, так как ни структура в  $\sigma(n_s)$ , ни осцилляции от электронов, находящихся вблизи дна 2-й минизоны, не видны. Это, видимо, связано с размытием из-за рассеяния МЩ при малых  $n_s$ . Тем не менее осцилляции появляются при больших  $n_s$ , и из экстраполяции соответствующей кривой на рис. 9 в область малых  $n_s$  можно получить величину псевдопериода (см. таблицу).

Дополнительную информацию о  $\Delta$  можно получить из магнитного пробоя. При  $n_s$ , отвечающих началу заполнения 2-й минизоны, в не очень сильных полях  $H$  виден эффект Шубникова — де Гааза от электронов во 2-й минизоне с большим периодом по обратному магнитному полю (рис. 11). В сильных полях,  $H \geq H_0$  ( $H_0 \sim 1,2 \text{ Тл}$  для (118) Si;  $H_0 \sim 8 \text{ Тл}$

для (115) Si), магнитный пробой восстанавливает те орбиты, которые имел электрон в отсутствие МЩ, что видно на рис. 11 по появлению малого периода. Из условия магнитного пробоя ( $H_0 \sim \Delta^2$ ) можно получить, что  $\Delta(115)/\Delta(118) \approx 2,5$ , в то время как это отношение, определенное из периода шубниковских осцилляций  $\Delta n_s$ , равно 5. Одна из возможных причин такого расхождения обсуждена в следующей главе. Для (2, 2, 23) Si пробой виден при всех  $n_s$  и  $H$ , при которых наблюдался эффект Шубникова — де Гааза, что указывает на малую величину  $\Delta$ . Для второй МЩ (щель 2 на рис. 4, а) грубая оценка из данных по магнитному пробую дает  $\Delta \sim 10$  мэВ ( $n_s \approx 8 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>,  $\theta = 2,9^\circ$ ) и  $\Delta \sim 3$  мэВ ( $n_s \approx 1,7 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>,  $\theta = 1,1^\circ$ ).

В очень сильных полях (до 20 Тл), параллельных ИС, квантования Ландау не происходит, а минизоны просто расщепляются по спину. Это проявляется в расщеплении пиков в зависимостях  $d\sigma(n_s)/dn_s$ <sup>14</sup>. Отсюда можно определить, что при  $E_F$ , находящемся внутри МЩ,  $\Delta(115)/\Delta(118) \approx 2,5$ . Это согласуется с данными по магнитному пробую.

Имеются краткие сообщения об измерениях циклотронного резонанса в ИС на (118)Si<sup>13</sup>. Когда  $E_F$  находился ниже МЩ, наблюдался циклотронный резонанс от электронов в 1-й минизоне ( $m_c \approx 0,2m_0$ ). При увеличении  $n_s$  в циклотронном поглощении проявлялся вклад от электронов во 2-й

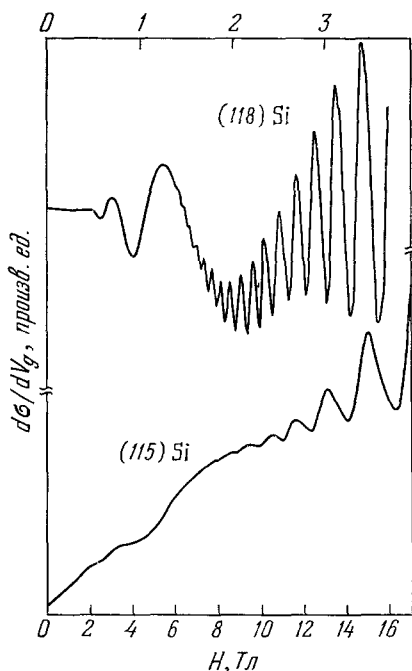


Рис. 11. Влияние магнитного пробоя на эффект Шубникова — де Гааза<sup>14</sup>.

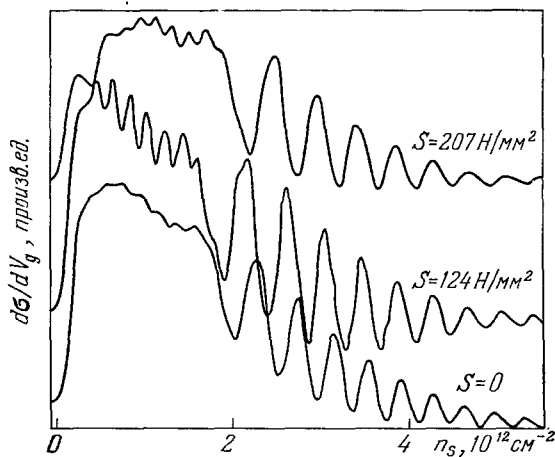


Рис. 12. Шубниковские осцилляции проводимости в п-ИС на (1,1,10) Si под давлением  $S$  (сжатие).  $H = 3$  Тл;  $T = 1,2$  К; ток параллелен оси СР;  $S$  направлено под углом  $45^\circ$  к току в плоскости (1,1,10)<sup>17</sup>.

минизоне с меньшей циклотронной массой. Для наблюдения циклотронного резонанса от двух типов орбит («линза» и «собачья кость» на

рис. 4, б) необходимо, чтобы  $H_z$  было не очень слабым, чтобы выполнялось условие  $\omega_c \tau > 1$ , но и не очень сильным, чтобы отсутствовал магнитный пробой. В имеющихся работах <sup>13, 5</sup> эти условия, видимо, не выполнены.

Недавно <sup>17</sup> была обнаружена аномальная зависимость амплитуды и периода шубниковских осцилляций для (1, 1, 10) Si от одноосного сжатия  $S$  (рис. 12). При увеличении  $S$  амплитуда осцилляций сначала растет, а затем падает, в то время как для (001) Si амплитуда монотонно убывает с ростом  $S$ . При растяжении эффект отсутствовал. В работе <sup>17</sup> сделан вывод о том, что подобная аномалия связана с зависимостью структуры минизонного спектра от величины и знака деформации.

#### (в) Оптические свойства в инфракрасной области

Прямым доказательством существования МЩ являются результаты опытов по поглощению электромагнитного излучения в ИК-диапазоне <sup>5, 15, 17, 19</sup>. Определенная отсюда высокочастотная проводимость  $\sigma(\omega)$  при фиксированном значении  $n_s$  показана на рис. 13. Когда электрический

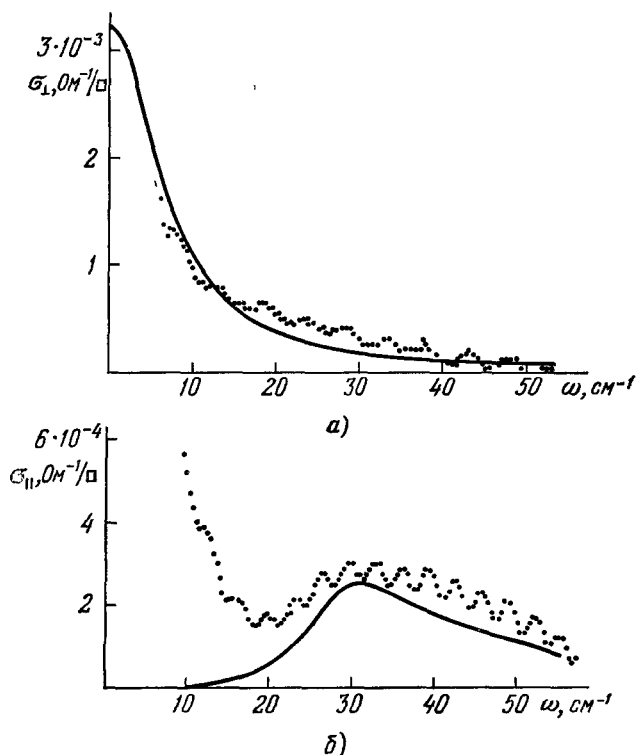


Рис. 13. Высокочастотная проводимость n-ИС на (119) Si <sup>5</sup>.  
 $T = 1,2$  К; а)  $E_{\omega} \perp$  оси СР; б)  $E_{\omega} \parallel$  оси СР. Теория <sup>5</sup> — сплошная линия ( $n_s = 2,79 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup>;  
 $\Delta = 3,4$  мэВ;  $\tau = 0,83 \cdot 10^{-12}$  с).

вектор  $E_{\omega}$  падающей волны направлен перпендикулярно к оси СР, экспериментальная кривая лишь слабо отклоняется от обычного закона Друде (осцилляции обусловлены интерференционными эффектами). При поляризации излучения вдоль оси СР наблюдается пик поглощения в  $\sigma_{\parallel}(\omega)$ , который связывался с переходами через нижнюю междолинную МЩ. Его положение и интенсивность зависят от  $n_s$ .

Псевдоперпод СР определялся из положения структуры статической проводимости  $\sigma(n_s)$ , время релаксации  $\tau$  из абсолютного значения  $\sigma(n_s)$ . Поэтому, считая  $\Delta$  подгоночным параметром, можно из сравнения теоретической и экспериментальной кривых  $\sigma_{||}(\omega)$  извлечь зависимость  $\Delta(n_s)$  (рис. 14). Определенная таким образом величина МЩ растет почти линейно с ростом  $n_s$ .

Другой способ исследования ИК поглощения в ИС основан на возможности измерения его зависимости от  $n_s$  при  $\omega = \text{const}$  (рис. 15). Пик на кривой 1 (для ИС с  $\theta \approx 10^\circ$ ,  $\varphi = 45^\circ$ ) отсутствовал при поляризации излучения, перпендикулярной к оси СР, и сдвигался в область больших  $n_s$  при увеличении  $\omega$ . Величина МЩ, определенная из этих измерений, согласуется для (118) Si с данными по статической проводимости.

Для образцов с ориентацией (0, 3, 17) Si ( $\theta \approx 10^\circ$ ,  $\varphi = 90^\circ$ ), кривая 2, пик отсутствовал при обеих поляризациях  $E_\omega$ , несмотря на то, что ИС, представленные на кривых 1 и 2, имели одинаковую подвижность и угол  $\theta$ . Тем не менее, неболь-

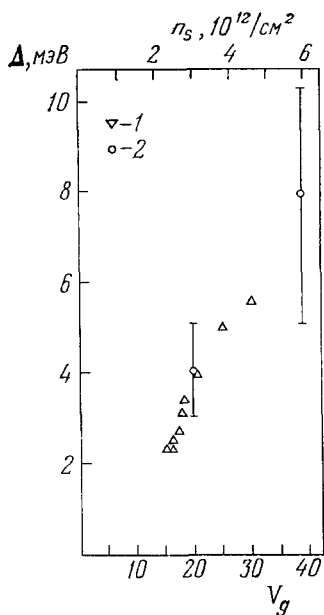


Рис. 14. Зависимость величины нижней междолинной МЩ от  $n_s$  (или  $V_g$ , В).  
1 — ИК поглощение для (119) Si; 2 — данные по эффекту Шубникова — де Газа для (118) Si.

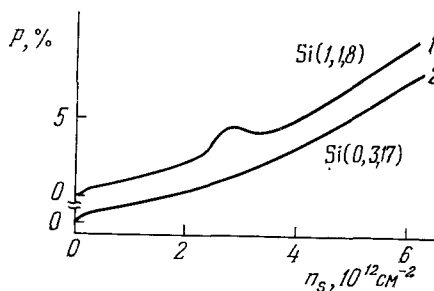


Рис. 15. Относительное изменение ИК поглощения, поляризованного вдоль оси СР, как функция  $n_s$ , для двух ориентаций ИС.  
1 —  $\theta \approx 10^\circ$ ,  $\varphi = 45^\circ$ ; 2 —  $\theta \approx 10^\circ$ ,  $\varphi = 90^\circ$ ,  
 $T = 1,5$  К,  $\hbar\omega = 3,68$  мэВ<sup>17</sup>.

шая анизотропия производной поглощения для параллельной и перпендикулярной к оси СР поляризаций указывает на наличие малой МЩ, видимо, не превышающей 1 мэВ. Отсюда можно сделать вывод о том, что  $\Delta$  зависит не только от  $\theta$ , но и от  $\varphi$ .

Кроме пика в  $\sigma(\omega)$ , обусловленного переходами через МЩ, для (119) Si ( $\theta \approx 9^\circ$ ,  $\varphi = 45^\circ$ ) наблюдался дополнительный широкий пик при больших частотах ( $\sim 120$  см<sup>-1</sup>)<sup>19</sup>. Он отсутствовал при поляризации, перпендикулярной к оси СР, его амплитуда росла линейно с ростом  $n_s$ , а положение не зависело от  $n_s$ . Авторы работы<sup>19</sup> обращают внимание на то, что в области частот, отвечающих этому пику, лежит максимум плотности состояний для ТА-фононов. Было предположено, что из-за особенностей электрон-фононного взаимодействия в СР ТА-фононы могут стать оптически активными.

В фотоотклике<sup>6,16</sup> МЩ проявляются еще более заметно, чем в статической проводимости или поглощении. На зависимости фотосопротивления от  $n_s$  (рис. 16) появляется пик (4-й на рис. 16, б), когда  $E_F$  достигает нижней МЩ. Его положение не зависит от  $\hbar\omega$ . Остальные пики есть как

для (119) Si, так и для (001) Si, причем 1-й пик на рис. 16, б обусловлен эффектами разогрева, а 2-й, 3-й и 5-й соответствуют переходам между основной и тремя возбужденными электрическими подзонами.

Излучательная рекомбинация горячих электронов при переходах через нижнюю МЩ была обнаружена в структуре металл (Ti) — слой  $\text{SiO}_2$  толщиной 1400 Å — (119) Si<sup>18</sup>. Электроны разогревались импульсами

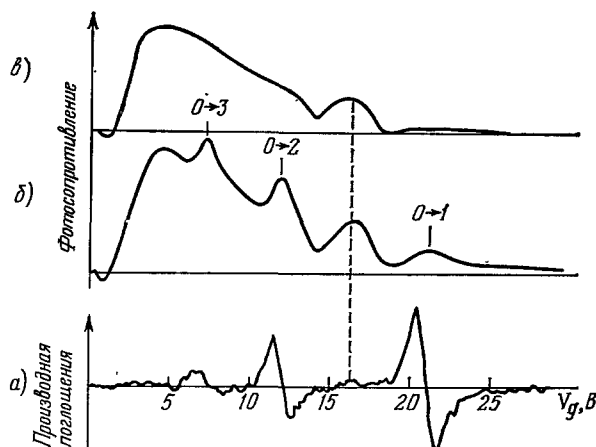


Рис. 16. Фотоотклик п-ИС на (119) Si как функция  $n_s$ .

$n_s = 1,49 \cdot 10^{11} (V_g - V_t) \text{ см}^{-2}$ ;  $V_t = 0,3 \text{ В}$ ;  $0 \rightarrow 1$ ;  $0 \rightarrow 2$ ;  $0 \rightarrow 3$  — вклад межподзонных переходов; пунктиром выделен пик, связанный с переходами через минищель. а)  $\hbar\omega = 33,06 \text{ мэВ}$ ; б)  $\hbar\omega = 33,06 \text{ мэВ}$ ,  $F_D = 300 \text{ мВ} \cdot \text{см}^{-1}$ ; в)  $\hbar\omega = 2,50 \text{ мэВ}$ ,  $F_D = 350 \text{ мВ} \cdot \text{см}^{-1}$ <sup>18</sup>.

тянущего электрического поля  $F_D$ , приложенного вдоль ИС, и излучали свет с энергией кванта  $\hbar\omega \approx \Delta$ . Мощность излучения при  $\hbar\omega = 4,4 \text{ мэВ}$  (на такую частоту был настроен приемник) и  $F_D = 12 \text{ В/см}$  составляла  $10^{-9} \text{ Вт}$  с площади  $2,5 \times 2,5 \text{ мм}^2$  при ширине линии  $\sim 1 \text{ мэВ}$ . Оценки показывают, что увеличением  $F_D$  (для этого необходимо увеличить толщину  $\text{SiO}_2$ , которая определяет максимальное значение  $F_D$ ), а также площади структуры можно довести излучаемую мощность до  $10^{-6} \text{ Вт}$ ; энергию кванта можно изменять в пределах 1–20 мэВ. Результаты этой работы представляют практический интерес.

## 5. ВЕЛИЧИНА МИНИЩЕЛЕЙ. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Положение МЩ в  $k_{||}$ -пространстве, в основном хорошо описывается существующими теориями (см. таблицу и рис. 7). Этого нельзя, однако, сказать о результатах, касающихся величины МЩ.

Разными авторами была установлена феноменологическая зависимость величины нижней МЩ от  $n_s$  и  $\theta$ :

$$\Delta = (B + C \sin^2 \theta) n_s, \quad (12)$$

причем, по данным<sup>18</sup>,  $B = 1,1 \cdot 10^{-12} \text{ мэВ} \cdot \text{см}^{-2}$ ,  $C = 17 \cdot 10^{-12} \text{ мэВ} \cdot \text{см}^2$  (ИК излучение горячих электронов для  $\theta = 6^\circ, 9^\circ$ ;  $\varphi = 45^\circ$ ), а по данным<sup>15, 17</sup>  $B = (1,1 \pm 0,1) \cdot 10^{-12} \text{ мэВ} \cdot \text{см}^{-2}$ ,  $C \leq 10 \cdot 10^{-12} \text{ мэВ} \cdot \text{см}^2$  (ИК поглощение для  $\theta = 6^\circ, 8^\circ, 10^\circ$ ;  $\varphi = 45^\circ$ ).

Эти данные не отражают сильной зависимости  $\Delta$  от азимутального угла<sup>17</sup>: при  $\varphi = 90^\circ$  и  $\theta = 10^\circ \Delta \leq 1 \text{ мэВ}$  в области реальных  $n_s$ . Кроме того, величина  $\Delta$  зависит от типа эксперимента, из обработки которого она извлекалась. Так, ее величины, полученные из магнитного пробоя, с одной

стороны, и статической проводимости или ИК поглощения, с другой, существенно отличаются между собой (см. предыдущую гл. 4).

Существует несколько попыток расчета величины МЩ.

Теория междолинного расщепления за счет рассеяния на поверхности, развитая в работе <sup>20</sup> для (001) Si, была обобщена для вычисления нижней междолинной МЩ <sup>5</sup>. Эта МЩ согласно <sup>5</sup> всегда образуется в точке  $|k_x| = (2\pi/a) \sin \theta$ . Результат дается формулой (12), однако, значения констант  $B$  и  $C$  оказались значительно меньше экспериментальных.

В работе <sup>21</sup> вычислены величины нескольких нижних МЩ для n-ИС на поверхности Si произвольной ориентации для следующего гамильтониана метода эффективной массы в схеме расширенных зон (атомные единицы):

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{h}_{11} & \hat{h}_{12} \\ \hat{h}_{12}^* & \hat{h}_{22} \end{pmatrix} + V(z), \quad (13)$$

$$\left. \begin{aligned} \hat{h}_{11} &= (\hat{k}_3 - K_0)^2 + M(\hat{k}_1^2 + \hat{k}_2^2), \\ \hat{h}_{22} &= (\hat{k}_3 + K_0)^2 + M(\hat{k}_1^2 + \hat{k}_2^2), \\ \hat{h}_{12} &= \frac{1}{2} E_\Gamma + i(\Sigma e_{12} + N \hat{k}_1 \hat{k}_2) \exp\left(i \frac{4\pi}{a} x_3\right); \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

здесь  $V(z)$  — самосогласованный потенциал ИС, определенный согласно <sup>9</sup>; оси  $(x_1, x_2, x_3)$ , а также  $(k_1, k_2, k_3)$  направлены по кубическим осям [100], [010] и [001] соответственно; главные оси ИС  $(x, y, z)$  определены в главе «Введение в теорию ориентационных сверхрешеток»; константы  $K_0, M, E_\Gamma, N$  — параметры массивного кремния,  $\Sigma$  — деформационный потенциал;  $e_{12}$  — возможная деформация в плоскости  $(x_1, x_2)$ .

$\hat{k}p$ -матрица в (13) описывает закон дисперсии в зоне проводимости кремния вдоль направления, близкого к [001], в частности, две долины с центрами в точках  $k_3 = \pm K_0, k_1 = k_2 = 0$ . В электрическом поле ИС долины взаимодействуют между собой за счет туннелирования в  $\mathbf{k}$ -пространстве. Этот механизм междолинного взаимодействия назван «электрическим пробоем» (по аналогии с магнитным пробоем). Он проявляется, когда междолинный матричный элемент оператора  $\hat{h}_{12}$  отличен от нуля, причем первое слагаемое в  $\hat{h}_{12}$  обеспечивает «пробой» через точку  $\Gamma$  в 3D-зоне Бриллюэна кремния, второе — через точку  $X$ . Перейдем в (13), (14) к осям  $x, y, z$ , связанным с ИС. Видно, что  $\hat{H}$  инвариантен по отношению к трансляции в  $\mathbf{k}_\parallel$ -пространстве на вектор, кратный  $\frac{4\pi}{a} \sin \theta$ , вдоль оси  $k_x$ . Это эквивалентно существованию некоторой одномерной СР с периодом  $A = a/2 \sin \theta$ . Поэтому положение МЩ в  $\mathbf{k}_\parallel$ -пространстве, определенное согласно <sup>21</sup>, совпадает с результатами <sup>5, 6</sup>.

Считая  $\hat{h}_{12}$  возмущением, можно получить выражения для величин МЩ  $\Delta$ . В работах <sup>21, 22</sup> показано, что величины  $\Delta$  зависят от  $\theta, \varphi, n_s$ , а также от  $k_y$  и давления. Для двух нижних МЩ — они являются междолинными (1 и 2 на рис. 4, а) и обусловлены «пробоем» через  $X$  и  $\Gamma$  — имеем в первом порядке по  $\hat{h}_{12}$  в единицах  $10^{-12}$  мэВ·см<sup>-2</sup> ( $k_y = e_{xy} = 0$ ):

$$\Delta_X(k_y = 0) = |17,9\alpha \sin 2\varphi \cdot \sin \theta \operatorname{tg} \theta| n_s^*, \quad (15)$$

$$\Delta_\Gamma(k_y = 0) = 0,367\alpha (1 + 4,46 \sin^2 \theta)^2 |\cos \theta|^{-3} n_s^*, \quad (16)$$

где  $n_s^*$  близко к  $n_s$  в условиях существующего эксперимента, коэффициент  $\alpha \approx 0,4$  <sup>21</sup>. Вышележащие МЩ как междолинные, так и внутримолекулярные, обусловлены интерференцией « $X$ -пробоя» и « $\Gamma$ -пробоя». Они появляются при учете высших порядков теории возмущений по  $\hat{h}_{12}$ .

Теория <sup>21</sup> предсказывает сильную азимутальную зависимость величин всех МЩ, кроме второй ( $\Delta_T$ ), за счет множителя  $\sin 2\varphi$  в (15). Величина всех МЩ, кроме  $\Delta_T$ , зависит также от величины и знака деформации. Кроме того, из-за зависимости  $\Delta(k_y)$  значения  $\Delta$ , определенные из магнитного пробоя и оптического поглощения должны заметно различаться. Перечисленные выводы из работы <sup>21</sup> качественно согласуются с опытом <sup>3, 17</sup>.

Однако численные значения величин МЩ оказываются, как правило, значительно меньше экспериментальных.

По нашему мнению, непоследовательность подходов, развитых в <sup>5</sup> (см. также <sup>6, 21</sup>) состоит в том, что в них не отражена реальная 2D-симметрия системы. Фактически постулировалось, что минимальный поверхностный вектор обратной решетки всегда равен  $(4\pi/a) \sin \theta$ . На самом деле, как показано в главе «Введение в теорию ориентационных сверхрешеток», это справедливо только для  $(11n)$  Si при нечетных  $n$ . В общем случае вектор  $(4\pi/a) \sin \theta$  является одним из векторов обратной решетки, но не обязательно наименьшим. Поэтому, следуя цитированным работам, нельзя получить, например, положение всех МЩ при произвольной ориентации ИС. Это касается, в частности, нижней МЩ для  $(2,2, 23)$  Si (если следовать <sup>5</sup>, то  $L_{\text{теор}} = 149 \text{ \AA}$ , что хуже согласуется с опытом, чем  $L_{\text{теор}} = 223 \text{ \AA}$  <sup>7</sup>).

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, факт существования МЩ для  $n$ -ИС на поверхностях Si с высокими индексами Миллера можно считать твердо установленным. Положение МЩ в  $k_{||}$ -пространстве количественно описывается имеющимися теориями. В то же время вычисления величины МЩ дают существенно заниженные значения. Поэтому остается актуальной задача построения последовательной теории ориентационной СР.

Для окончательного выяснения природы эффективного потенциала такой СР желательно расширение круга экспериментальных исследований (другие ориентации и материалы, в том числе однодолинные полупроводники).

Можно надеяться, что подобные эффекты будут наблюдаться и в других системах, например, в 2D-электронном газе на плоскости спайности бикристаллов Ge <sup>23</sup>.

Возможность управления параметрами СР является важной с прикладной точки зрения. Укажем в связи с этим на работу <sup>18</sup> (см. главу «Экспериментальные данные»).

В заключение выражаем благодарность А. А. Суханову и Е. В. Ченскому, а также Б. М. Вулу и Э. П. Заварицкой за полезные обсуждения.

## ДОПОЛНЕНИЕ

Приведем сводку новых результатов, опубликованных после того как обзор был написан. Они докладывались на XIV Международной конференции по физике полупроводников (Англия, 1978 г.) и на III Международной конференции по электронным свойствам 2D систем (Япония, 1979 г.).

Тщательные измерения ИК-поглощения в  $n$ -ИС на  $(11n)$ Si и  $(01n)$ Si при нескольких фиксированных частотах <sup>24</sup> обнаружили нелинейную зависимость измеряемой величины нижней МЩ  $\Delta_{\text{эксп}}(n_s)$ . Это можно объяснить, предположив, что величина истинной МЩ (см. (8)) линейна по  $n_s$ , но существенно зависит от  $k_y$ . Поэтому вместо (12) предложена следующая эмпирическая формула для нижней МЩ

$$\Delta(\theta, \varphi, n_s, k_y) = (A_1 + B_1 f(\theta, \varphi) + C_1 k_y^2) n_s, \quad (17)$$



где  $A_1 \simeq 0,3 \cdot 10^{-12}$  мэВ·см<sup>2</sup>;  $B_1 = 45 \cdot 10^{-12}$  мэВ·см<sup>2</sup>;  $C_1 = (0,09/\pi) \cdot 10^{24}$  мэВ·см<sup>4</sup>;  $f(\theta, \varphi) \simeq \sin^2 \theta$  при  $\theta \lesssim 8^\circ$ ;  $f(\theta, \varphi) \sim \sin 2\varphi$ . Следует отметить качественно новое поведение  $\Delta(\theta)$  при больших  $\theta$ : при  $\theta > 8^\circ$   $f(\theta)$  выходит на плато, что не описывается теорией. Зависимость  $\Delta(k_y, \theta)$  отличается от предсказанной в работах <sup>21,22</sup>. Кроме того, при  $\theta = 0$ ,  $k_y = 0$  значение, даваемое (17), в отличие от (12), хорошо согласуется с экспериментальными данными по междолинному расщеплению в *n*-ИС на (001) Si.

Впервые количественно определены величины высоколежащих МЩ по ИК-поглощению <sup>25</sup> и ИК-излучению горячих электронов <sup>26</sup>. В спектре излучательной рекомбинации горячих электронов обнаружены пики (до четырех пиков на образцах с  $\theta \sim 1^\circ$ ), обусловленные переходами через минищели  $\Delta_i$  (индекс  $i = 1, 2, 3, 4$  нумерует МЩ в порядке возрастания их энергии; см. рис. 4). Показано <sup>26</sup>, что  $\Delta_2(n_s)$  изменяется в пределах 3,0—4,7 мэВ при возрастании  $n_s$  от  $2,5 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup> до  $6,9 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>;  $\Delta_3 = 2,3$ —3,2 мэВ при  $n_s = (3,9$ — $6,9) \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>;  $\Delta_4 \sim 2,3$  мэВ при  $n_s = 6,9 \cdot 10^{12}$  см<sup>-2</sup>. Эти значения более чем на порядок превышают теоретические <sup>21</sup>.

Измерена внутриподзонная ИК фотопроводимость в *n*-ИС на (118) Si в квантовых магнитных полях <sup>27</sup>. Обнаружены осцилляции Шубниковского типа с четким проявлением магнитного пробоя через нижнюю МЩ. В экспериментах по циклотронному резонансу на (119) Si <sup>27</sup> обнаружены особенности (сдвиг, уширение и усложнение формы линии при увеличении  $n_s$ ), однозначная интерпретация которых отсутствует.

Некоторые авторы <sup>28,29</sup> отмечают зависимость отдельных результатов от технологических условий получения образцов. Это прежде всего касается зависимости  $\Delta_1(\varphi)$  при фиксированном значении  $\theta$ . Так, при  $\theta = 10^\circ$   $\Delta_1(\varphi = 0^\circ) \ll \Delta_1(\varphi = 45^\circ)$  согласно <sup>17,24</sup>; согласно <sup>28</sup>  $\Delta_1(\varphi = 0^\circ) \approx \Delta_1(\varphi = 45^\circ)$ ; согласно <sup>29</sup>  $\Delta_1(\varphi = 0^\circ) = 0,5 \Delta_1(\varphi = 45^\circ)$ . На нескольких (но не всех) образцах с  $\theta \sim 1^\circ$  при измерении эффекта Шубникова — де Гааза обнаружена новая щель <sup>28</sup>, положение которой в *k*ll-пространстве не описывается теорией <sup>5,6,21</sup>.

Во всех работах подчеркивается сильное расхождение между теорией и экспериментом по величине щелей. В качестве возможной причины этого называют наличие деформаций на границе Si — SiO<sub>2</sub>, величина которых может зависеть от технологии <sup>29</sup>. Учет обменно-корреляционного взаимодействия также может увеличить теоретические значения  $\Delta$ .

Интересна работа <sup>30</sup>, в которой методом дифракции медленных электронов на атомарно-чистых поверхностях Si, срезанных под малыми углами к (001) Si, обнаружены и исследованы упорядоченные ступеньки, которые не исчезают даже при нагреве до 1100 °С и при адсорбции водорода и кислорода. Геометрические размеры ступенек согласуются с ожидавшимися для идеальной высокоиндексной поверхности. Такой периодический рельеф, как указано в <sup>4,13</sup>, может служить одной из причин возникновения СР, если он не исчезает в процессе приготовления структуры металл — диэлектрик — полупроводник.

Институт радиотехники и электроники  
АН СССР

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Proc. of Intern. Conference on Electronic Properties of Quasi-2D Systems. Providence, USA, 1975; Surf. Sci., 1976, v. 58, p. 1.
2. Proc. of 2nd Intern. Conference on Electronic Properties of 2D Systems. Berchtesgaden, West Germany, 1977; Surf. Sci., 1978, v. 73, p. 1.
3. Cole T., Lakhani A. A., Stiles P. J. — Phys. Rev. Lett., 1977, v. 38, p. 722.
4. Петров В. А. — В кн. VI Всесоюзное совещание по физике поверхностных явлений в полупроводниках. Киев, ноябрь 1977 г.; Тезисы докладов. — Киев: Наукова думка, 1977, Ч. 2, с. 80; ФТП, 1978, т. 12, с. 380.
5. Sham L. J., Allen S. J., Jr., Kamgar A., Tsui D. C. — Phys. Rev. Lett., 1978, v. 40, p. 472.
6. Tsui D. C., Sturge M. D., Kamgar A., Allen S. J., Jr. — Ibid., p. 1667.
7. Волков В. А., Сандомирский В. Б. — Письма ЖЭТФ, 1978, т. 27, с. 688.
8. Esaki L., Chang L. L. — Thin Sol. Films, 1976, v. 36, p. 285.
9. Stern F. — In: Surface Science: Recent Progress and Perspectives. — Cleveland: CRC Press, 1974; перевод: Новое в исследовании поверхности твердого тела. — М.: Мир, 1977. — Вып. 2, с. 280.
10. Volkov V. A., Sandomirskii V. B. — Phys. State Sol. Ser. b, 1979, v. 94, p. 349.
11. Krivanek O. L., Sheng T. T., Tsui D. C. — Appl. Phys. Lett., 1978, v. 32, p. 437.

12. Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И.— Электронная теория металлов.— М.: Наука, 1971.— С. 52.
13. Lakhani A. A., Cole T., Stiles P. J.— *Surf. Sci.*, 1978, v. 73, p. 223.
14. Stiles P. J., Cole T., Lakhani A. A.— *J. Vac. Sci. and Technol.*, 1977, v. 14, p. 969.
15. Cole T., Kotthaus J. P., Theis T. N., Stiles P. J.— *Surf. Sci.*, 1978, v. 73, p. 238.
16. Kamgar A., Sturge M. D., Tsui D. C.— *Ibid.*, p. 166.
17. Sesselmann W., Cole T., Kotthaus J. P., Kellerer R., Gesch H., Eisele J., Dorda G.— In: Abstracts 14th Intern. Conference Physics of Semiconductors. Edinburgh, 1978.— P. 299; Preprint.
18. Tsui D. C., Gornik E.— *Appl. Phys. Lett.*, 1978, v. 32, p. 365.
19. Tsui D. C., Allen S. J., Jr., Logan R. A., Kamgar A., Copper-smith S. N.— *Surf. Sci.*, 1978, v. 73, p. 419.
20. Sham L. J., Nakayama M.— *Ibid.*, p. 272.
21. Ohkawa F. J.— *J. Phys. Soc. Japan*, 1979, v. 46, p. 855.
22. Ohkawa F. J.— *Ibid.*, 1978, v. 45, p. 1427.
23. Бул Б. М., Заварицкая Э. П.— *ЖЭТФ*, 1979, т. 76, с. 1089.
24. Sesselman W., Kotthaus J. P.— *Sol. State Comm.*, 1979, v. 31, p. 193.
25. Tsui D. C., Kamgar A., Sturge M. D.— *Phys. Semicond. (Inst. Phys. Conf. Ser., Lnd)*, 1979, No. 43, p. 1335.
26. Gornik E., Schawarz R., Lindemann G., Tsui D. C.— In: Yamada Conference II on Electronic Properties of 2-D Systems (III Intern. Conf.). September 1979. Lake Yamanaka, Hotel Mt. Fuji, Japan.— Collection of Papers, p. 914.
27. Okamoto H., Muro K., Narita S., Kawaji S.— *Ibid.*, p. 707.
28. Stiles P. J.— *Phys. Semicond. (Inst. Phys. Conf. Ser., Lnd.)*, 1979, No. 43, p. 41.
29. Ando T.— Цитир. в <sup>28</sup> сб.— P. 607.
30. Kaplan R.— *Phys. Semicond. (Inst. Phys. Conf. Ser., Lnd.)*, 1979, No. 43, p. 1351.