

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

PHYSICAL CHARACTERISTICS AND THEIR STUDY

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020. Т. 23, № 2 С. 142—150.

DOI: 10.17073/1609-3577-2020-2-142-150

УДК 621.315.592

Влияние самоорганизации поверхностного заряда на затворно–индуцированные электронную и дырочную двумерные системы

© 2020 г. В. А. Ткаченко^{1,2,§}, О. А. Ткаченко¹, Д. Г. Бакшеев², О. П. Сушков³

¹ *Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
просп. Академика Лаврентьева, д. 13, Новосибирск, 630090, Россия*

² *Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, д. 1, Новосибирск, 630090, Россия*

³ *School of Physics, University of New South Wales,
Sydney, 2052, Australia*

Аннотация. Предложена простая модель для описания самоорганизации локализованных зарядов и квантового рассеяния в нелегированных структурах GaAs/AlGaAs, в которых двумерный газ электронов, или дырок создается соответствующим напряжением на затворе. Сделано предположение, что в такой структуре «металл—диэлектрик—нелегированный полупроводник» доминирует рассеяние носителей на локализованных поверхностных зарядах, которые могут находиться в любой точке плоскости, имитирующей интерфейс между GaAs и диэлектриком. Предложенная модель рассматривает эти поверхностные заряды и соответствующие заряды изображения в металлическом затворе как замкнутую систему в термостате. Электростатическая самоорганизация для данной системы в состояниях термодинамического равновесия исследована численно с помощью алгоритма Метрополиса в широком диапазоне температур. Показано, что при $T > 100$ К простая формула, выведенная из теории двумерной однокомпонентной плазмы, дает почти такое же поведение структурного фактора при малых волновых числах, как алгоритм Метрополиса. Времена рассеяния затворно–индуцированных носителей описываются формулами, в которых структурный фактор характеризует замороженный беспорядок в данной системе. В этих формулах определяющим является поведение структурного фактора при малых волновых числах. Расчет по этим формулам при беспорядке, отвечающем бесконечной T , дал в два–три раза меньшие времена рассеяния, чем в соответствующих экспериментах. Показано, что теория согласуется с экспериментом при температуре замерзания беспорядка $T \approx 1000$ К в случае образца с двумерным электронным газом и $T \approx 700$ К для образца с двумерным дырочным газом. Найденные величины являются оценкой сверху температуры замерзания в изучаемых структурах, поскольку модель игнорирует другие источники беспорядка, кроме температуры.

Ключевые слова: нелегированные структуры, затворно–индуцированные двумерные системы, поверхностный заряд, температура замораживания беспорядка

Введение

Зарядка поверхностных и интерфейсных дефектов является одним из основных физических

явлений в полупроводниковой электронике [1—4]. Однако об этом явлении в нелегированных структурах GaAs/AlGaAs мало что известно. Недавно начато исследование таких структур с затворно–

Ткаченко Виталий Анатольевич^{1,2,§} — канд. физ.–мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail:vtkach@isp.nsc.ru, **Ткаченко Ольга Александровна**¹ — канд. физ.–мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail:otkach@isp.nsc.ru, **Бакшеев Дмитрий Георгиевич**² — канд. физ.–мат. наук, ассистент, e-mail:bd@mail.ru, **Сушков Олег Петрович**³ — доктор физ.–мат. наук, профессор, sushkov@unsw.edu.au

§ Автор для переписки

индуцированными двумерными квантовыми системами электронов, или дырок [5—12]. Ситуация с тонким подзатворным диэлектриком и не глубоким расположением затворно-индуцированных систем интересна для изучения роли поверхностных зарядов [11, 12], а также для создания квантовых систем с предельно малым латеральным характерным размером [13]. Цель работы — краткое описание предложенной авторами [14] простой модели влияния электростатической самоорганизации поверхностных зарядов на затворно-индуцированный двумерный газ (ДГ) электронов, или дырок.

Объект исследования и предлагаемая модель

В контрасте с обычным методом модуляционного легирования, ДГ в рассматриваемом случае

создается при низкой температуре под действием напряжения V_g между металлическими затвором и контактами к рабочему слою GaAs [5—11]. Заряд на поверхности защитного слоя GaAs возникает в равновесии при $V_g = 0$ и высокой температуре вместе с зарядом изображения в металле и установлением общего уровня Ферми E_F в структуре «металл—диэлектрик—нелегированный полупроводник» (рис. 1, а и б). Общий уровень Ферми закреплен состояниями дефектов возле центра запрещенной зоны на границах эпитаксиальной гетероструктуры с изолятором и полуизолирующей подложкой GaAs, что дает плоские зоны в полупроводнике. Толщина d подзатворного диэлектрика Al_2O_3 (20—30 нм) и разница работ выхода A_e из прилегающих к нему слоя GaAs и затвора Ti (рис. 1, б) определяют, согласно теореме Гаусса, концентрацию n_c отрицательных зарядов на по-

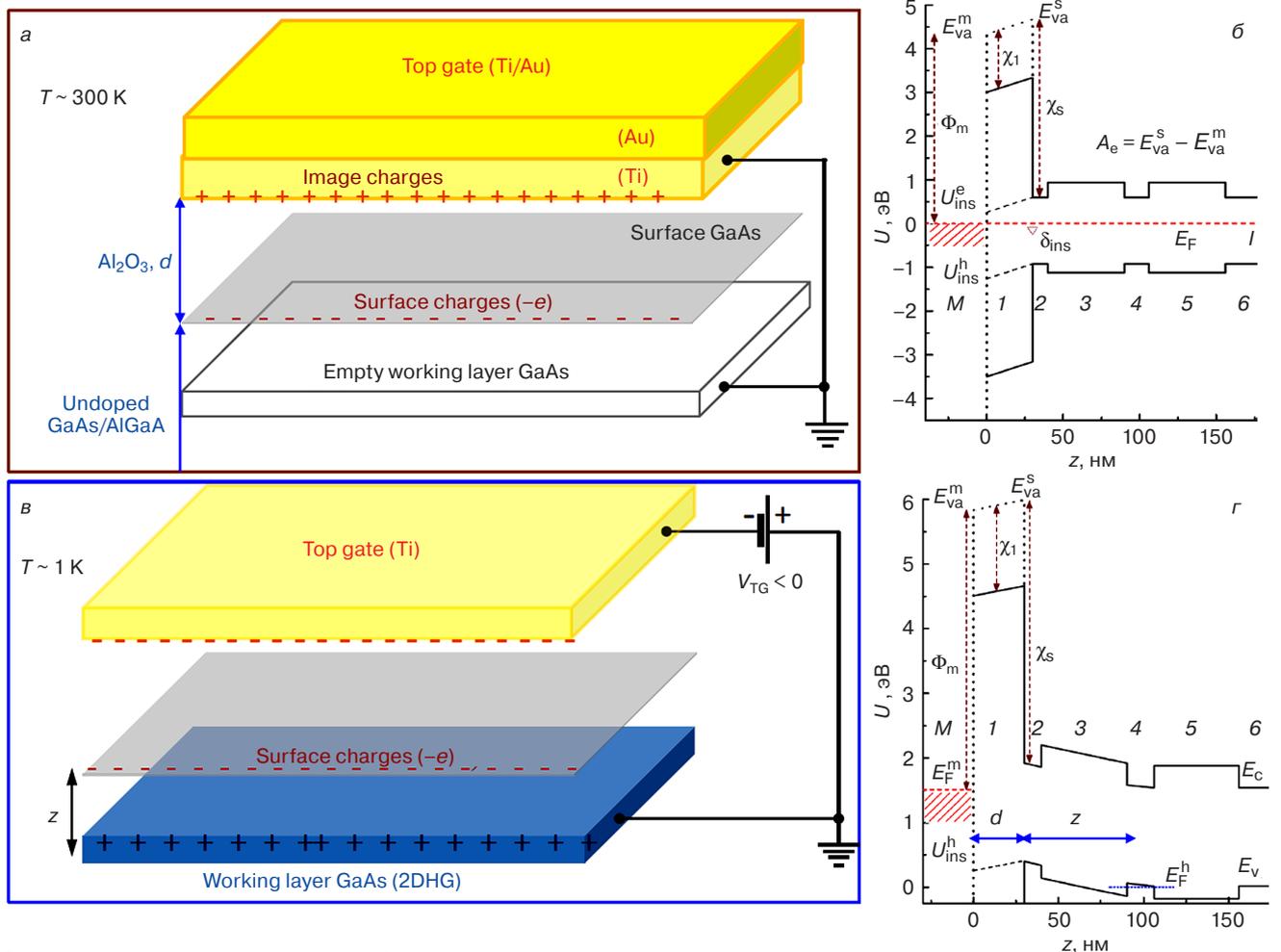


Рис. 1. Схематические изображения объекта изучения: а, б — структура металл—диэлектрик—нелегированный полупроводник и зонная диаграмма в термодинамическом равновесии соответственно (M — металл (Ti); 1 — Al_2O_3 ; 2, 4, 6 — GaAs; 3, 5 — AlGaAs; Φ_m — работа выхода из Ti; χ_1, χ_s — электронное сродство Al_2O_3 и GaAs. Рабочий слой 4 пуст); в, г — вариант рабочего режима, отвечающий дырочному ДГ ($T \sim 1$ K, $eV_{TG} < 0$ — разность уровней Ферми в рабочем слое и верхнем затворе)

Fig. 1. Schematic images of the object of study: (a, б) metal—dielectric—undoped semiconductor structure and band diagram in thermodynamic equilibrium: M — metal (Ti), (1) Al_2O_3 , (2, 4, 6) GaAs, (3, 5) AlGaAs, Φ_m is work function of Ti, (χ_1, χ_s) electron affinity of Al_2O_3 and GaAs, working layer 4 is empty. (B, г) — a variant of the operating mode corresponding to a 2DHG ($T \sim 1$ K, $eV_{TG} < 0$ is the difference of the Fermi levels in the working layer and the upper gate)

верхности защитного слоя GaAs и положительных на границе металла с диэлектриком:

$$n_{\sigma} = \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{ins}} \frac{A_e}{ed}. \quad (1)$$

Здесь ε_0 — диэлектрическая постоянная; $\varepsilon_{\text{ins}} \approx 8$ — диэлектрическая проницаемость Al_2O_3 ; $A_e \approx 0,3$ эВ; $e > 0$ — элементарный заряд. При охлаждении структуры с заземленным затвором до $T \sim 1$ К ее зонная диаграмма и величины A_e и n_{σ} остаются такими же, как в равновесии. Концентрация $n_{\sigma} \sim 5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ предполагается неизменной, даже в случае $V_g \neq 0$ и появления ДГ при низкой температуре (рис. 1, в и г). Зоны в этом случае перестают быть плоскими в слоях 2, 3, 4 (см. рис. 1, г).

Формула (1) дает среднюю по площади концентрацию зарядов, которые захвачены при $V_g = 0$ и достаточно большой температуре точечными дефектами (ловушками) на поверхности защитного слоя GaAs. При температурах ниже некоторой «температуры замерзания» распределение поверхностных зарядов уже не меняется. Эта температура обусловлена энергией выброса электрона на уровень протекания из глубоких ловушек, в которых оказались заряды. Однако в случае нелегированных структур она неизвестна. Замороженный беспорядок в расположении поверхностных зарядов и, следовательно, зарядов изображения в металле дает статические флуктуации электростатического потенциала, на которых при температурах ~ 1 К рассеиваются подвижные носители в ДГ, если ДГ размещен близко ($z = 30\div 60$ нм) под поверхностью [11, 12].

Мы моделируем этот беспорядок и вычисляем время рассеяния носителей в ДГ в рамках простой модели [14]. В ней пренебрегается различием энергии связи электрона с ловушками на поверхности GaAs (т. е. они считаются химически эквивалентными [4]). Учитывается, что концентрация точечных ловушек на поверхности GaAs очень велика ($\sim 10^{13} \text{ см}^{-2}$ [1, 4]) по сравнению с n_{σ} . Предполагается, что в термодинамическом равновесии процесс обмена электронами между соседними ловушками на поверхности гораздо интенсивнее, чем между поверхностью, затвором и объемом полупроводника. Для простоты считается, что точечные заряды могут оказаться в любой точке идеальной плоскости, имитирующей реальную границу GaAs/ Al_2O_3 .

Распределение по состояниям такой изолированной по числу частиц системы зарядов в термостате является каноническим распределением Гиббса, и система в термодинамическом равновесии сходна с двумерной однокомпонентной классической плазмой [15, 16]. В предложенной модели все факторы беспорядка, кроме равновесной температуры, выключены, а сам беспорядок и его влияние на время рассеяния в ДГ могут быть описаны аналитически.

Основные определения и конечные формулы модели

Распределение точечных поверхностных зарядов, задаваемое радиус-векторами $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ удобно характеризовать преобразованием Фурье:

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_i e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i}. \quad (2)$$

Пусть число зарядов N и площадь системы A стремятся к бесконечности, а беспорядок в $\rho_{\mathbf{q}}$ изотропен:

$$|\rho_{\mathbf{q}}|^2 = N n_{\sigma} (2\pi)^2 \delta(\mathbf{q}) + |\tilde{\rho}_{\mathbf{q}}|^2, \quad |\tilde{\rho}_{\mathbf{q}}|^2 = n_{\sigma} A \times F_{\mathbf{q}}. \quad (3)$$

Член с дельта-функцией при решении уравнения Пуассона дает постоянный потенциал, который отбрасываем. Важны лишь флуктуации потенциала, обусловленные изотропным структурным фактором $F_{\mathbf{q}}$. При независимых друг от друга полностью случайных \mathbf{r}_i имеем $F_{\mathbf{q}} = 1$, и формула (3) описывает белый шум.

Отличие $F_{\mathbf{q}}$ от 1 в результате кулоновского взаимодействия зарядов можно учесть в рамках теории двумерной слабонеидеальной однокомпонентной плазмы [15, 16]. Важным при рассмотрении любой такой плазмы является способ, которым обеспечивается электрическая нейтральность системы. Как правило, это делается формальным введением однородного нейтрализующего фонового заряда в тот же ультратонкий слой, который занимает однокомпонентная плазма [15—18]. Напротив, электронной нейтральность в изучаемой нами ситуации при нулевом затворном напряжении обеспечивается существованием заряда изображения в металле (Ti/Au) для каждого точечного заряда на поверхности полупроводника. Кроме n_{σ} , параметром теории является температура T . В адаптированной к данному случаю теории получилась следующая простая формула:

$$F_{\mathbf{q}} = \left[1 - \frac{\tilde{k}_T}{q + \tilde{k}_T} \right]. \quad (4)$$

Здесь $\tilde{k}_T = k_T C_d$, $k_T = \frac{2\pi e^2 n_{\sigma}}{\varepsilon T}$, $C_d = \frac{1 - \exp(-2qd)}{1 - \lambda \exp(-2qd)}$,

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2}, \quad \lambda = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, \quad \varepsilon_1 = \varepsilon_{\text{GaAs}}, \quad \varepsilon_2 = \varepsilon_{\text{ins}}. \text{ При вы-}$$

воде формулы (4) пренебрегали различием диэлектрических проницаемостей в слоях GaAs и AlGaAs, и, по аналогии с работой [20], были учтены заряды изображения в металлическом затворе.

Заметим, что для обычных структур, создаваемых методом удаленного легирования, давно разработана теория влияния ультратонких слоев заряженных примесей на низкотемпературные

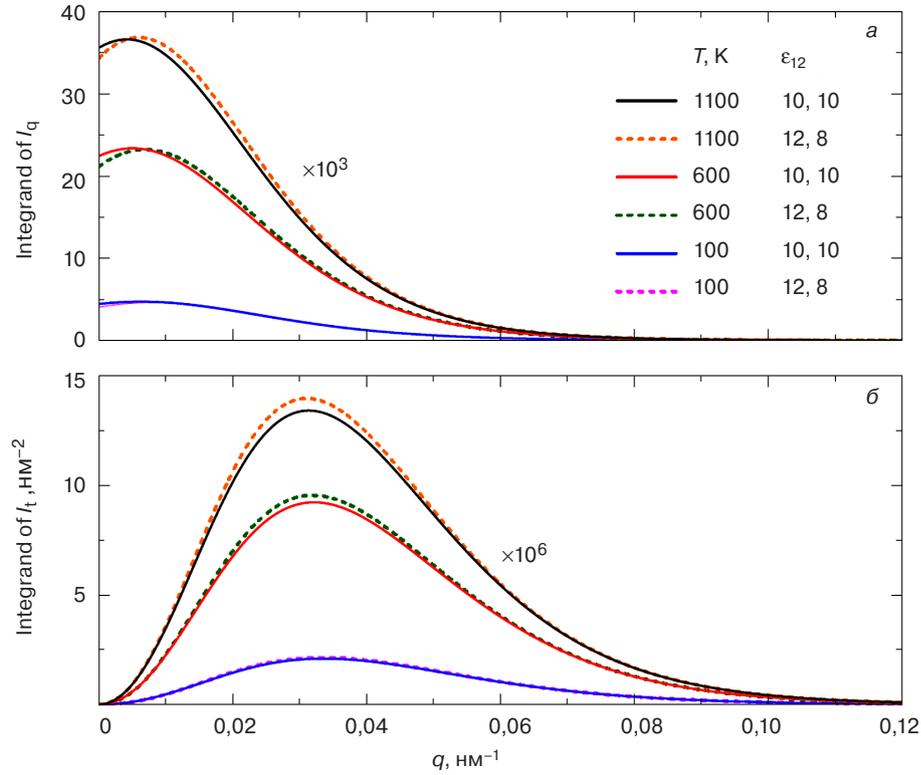


Рис. 2. Поведение подынтегральных выражений для τ_q (а) и τ_t (б) в формулах (5) для различных T и структуры с электронным ДГ, в которой $d = 25$ нм, $z = 45$ нм, $n_{\sigma} = 5 \cdot 10^{11} \text{см}^{-2}$

Fig. 2. The behavior of the integrands in formulas (5) for the indicated T and structure with a 2DEG in which $d = 25$ nm, $z = 45$ nm, $n_{\sigma} = 5 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$

характеристики высокоподвижных двумерных носителей [17—19]. В ее основе лежит знание изотропных F_q для распределения заряженных примесей в слое дельта-легирования. Для изученных нами нелегированных структур построена аналогичная теория, в которой, подобно работе [20], учтено присутствие металлического затвора. В построенной теории квантовое (τ_q) и транспортное (τ_t) время рассеяния носителей в ДГ можно выразить следующими формулами:

$$\tau_q^{-1} = \frac{\pi n_{\sigma}}{2m^*} I_q, \quad I_q = \frac{2}{p_F} \int_0^{\infty} \frac{F_q}{\left(\frac{q}{k} + D_z\right)^2} e^{-2qz} C_d^2 dq;$$

$$\tau_t^{-1} = \frac{\pi n_{\sigma}}{2m^*} I_t, \quad I_t = \frac{2}{p_F^3} \int_0^{\infty} \frac{F_q}{\left(\frac{q}{k} + D_z\right)^2} e^{-2qz} C_d^2 q^2 dq; \quad (5)$$

$$k = \frac{2m^* e^2}{\epsilon}, \quad D_z = 1 + e^{-2qz} \frac{\lambda - \exp(-2qd)}{1 - \lambda \exp(-2qd)}.$$

Здесь p_F — импульс Ферми в ДГ; F_q находим из формулы (3) для замороженных при некоторой неизвестной равновесной температуре распределений \mathbf{r}_i . Отметим, что формулы (5) являются следствием уравнения Пуассона с учетом затворного экранирования и самоэкранирования носителей в ДГ

в приближении Томаса—Ферми, а также следствием золотого правила Ферми с матричным элементом взаимодействия, найденным по невозмущенным волновым функциям движения носителей в ДГ.

На рис. 2 показан пример поведения подынтегральных выражений в формулах (5) для τ_q , τ_t с определением F_q в адаптированной теории однокомпонентной плазмы (4). Очевидно, что интегралы в формулах (5) достаточно вычислять на интервале $0 < q < 0,1 \text{ нм}^{-1}$, и вместо диэлектрических проницаемостей Al_2O_3 и GaAs можно использовать среднее значение.

Расчеты алгоритмом Метрополиса

Для систем с фиксированным числом взаимодействующих частиц в термостате давно существует универсальный, эффективный и мощный вариант метода Монте-Карло — алгоритм Метрополиса [21—24], позволяющий численно решать одну из основных задач статистической физики. Алгоритм находит положение максимума распределения внутренней энергии $W(E)$ системы при заданной температуре, т. е. наиболее вероятное значение E , а также соответствующие распределения взаимодействующих частиц \mathbf{r}_i . Заметим, что данный алгоритм делает это по данным о \mathbf{r}_i и внутренней энергии системы, т. е. не требует расчетов энтропии и свободной энергии изученной системы. Вы-

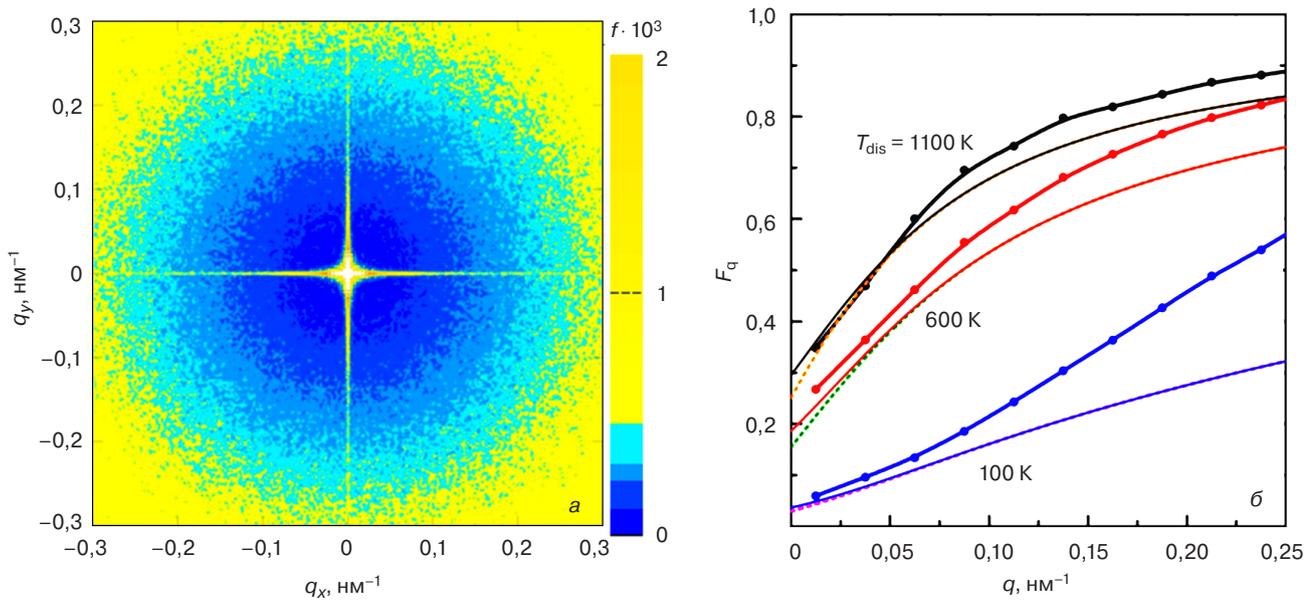


Рис. 3. Пример усредненного распределения $|\rho_q|^2$ в случае $n_\sigma = 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ в равновесном состоянии с температурой $T = 100 \text{ К}$ при расчете методом Монте-Карло (а) и зависимость изотропного структурного фактора F_q для той же n_σ и указанных T (б). Толстые сплошные линии получены методом Монте-Карло. Тонкие сплошные и пунктирные линии – по теории однокомпонентной плазмы

Fig. 3. (a) example of the averaged distribution $|\rho_q|^2$ in the case of $n_\sigma = 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ in an equilibrium state with a temperature $T = 100 \text{ К}$ Monte Carlo calculation, (б) dependence of the isotropic structural factor F_q for the same n_σ and indicated T . Thick solid lines were obtained by the Monte Carlo method. Thin solid and dotted lines are calculated according to the theory of a one-component plasma

численный алгоритм отношение вероятностей пребывания системы в двух разных состояниях отвечает каноническому распределению Гиббса [24]. Расчеты этим алгоритмом были основными при численном моделировании двумерной однокомпонентной плазмы [16]. В оригинальном варианте алгоритмом моделировались системы достаточно тяжелых частиц, и при расчете E пренебрегалось вкладом кинетической энергии [21, 22]. В нашем случае этим вкладом тоже можно пренебречь, поскольку рассматриваются локализованные заряды, которые длительно находятся в предположительно эквивалентных химических ловушках и лишь в относительно редких событиях перескока меняют свои координаты. В предложенной простой модели системы точечных поверхностных зарядов q_0 , лежащих в идеальной плоскости и имеющих изображения в металле, равновесные состояния существуют при сколь угодно низких T .

Мы находили такие состояния численно алгоритмом Метрополиса, в том числе наблюдали формирование двумерного вигнеровского кристалла и его плавление при $T > 1 \text{ К}$ [16]. Обнаружено, что при $T > 5 \text{ К}$ структурный фактор F_q зависит только от модуля q волнового вектора \mathbf{q} . Расчеты проводились для прямоугольной области площадью $A > 2 \times 2 \text{ мкм}^2$ с числом точечных зарядов $N = n_\sigma A$ до 60000 ($n_\sigma \sim 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$).

С учетом зарядов изображения в затворе полная энергия системы сводится к сумме по-

парных взаимодействий вертикальных диполей длины $2d$:

$$U_{ij} = \frac{1}{2} \frac{q_0^2}{2\pi\epsilon\epsilon_0} \left[r_{ij}^{-1} - (r_{ij}^2 + 4d^2)^{-\frac{1}{2}} \right],$$

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij}. \tag{6}$$

Множитель $1/2$ в U_{ij} учитывает отличие заряда изображения от реального заряда. Область расчетов замыкалась в тор, и для расчета U_{ij} брались наименьшие расстояния r_{ij} на торе. Кинетической энергией зарядов пренебрегалось. Для каждого заряда q_i задавалось смещение в произвольном направлении на некоторое случайное расстояние, не больше среднего между зарядами, и после этого энергия всей системы пересчитывалась. Если энергия уменьшалась $\Delta E < 0$, то новое положение заряда q_i принималось, а при $\Delta E \geq 0$ новое положение принималось, только если $e^{-\frac{\Delta E}{T}} \geq r$, где r — случайное число от 0 до 1.

Итерации продолжаются и после выхода на «постоянное» E . Из-за конечного числа N относительная ширина $\delta E/E$ распределения внутренней энергии системы не является бесконечно малой: $\delta E/E \sim 1/N^{1/2} \sim 0,01$. Для каждого E , флуктуирующего вблизи наиболее вероятного значения, находятся распределения \mathbf{r}_i , вычисляются ρ_q , $|\rho_q|^2$ по форму-

лам (2) и (3). Затем находится среднее распределение $|\rho_q|^2$ по многим таким итерациям. Тем самым имитируется $|\rho_q|^2$ для гораздо большей системы, чем пробная площадка. Пример усредненного распределения $|\rho_q|^2$ показан на рис. 3, а. Белый крест с уширением в центре связан с конечным размером области счета на плоскости (x, y) . Из рис. 3 видно, что вне этого креста структурный фактор не имеет угловой зависимости. Соответствующей обработкой распределения $|\rho_q|^2$ найдена зависимость структурного фактора от модуля волнового числа F_q (рис. 3, б). На рис. 3 видно, что зависимости $F(q)$ при $q < 0,1 \text{ нм}^{-1}$ в диапазоне температур $100 \text{ К} \leq T \leq 1100 \text{ К}$ получились близкими в аналитическом расчете по формуле (4) и в моделировании по Монте–Карло. Существенное понижение $F(q)$ по сравнению со случаем белого шума $F_q = 1$ наглядно показывает электростатическую самоорганизацию поверхностного заряда в предложенной простой модели.

Результат сравнения расчетов с экспериментом

Сотрудники университета Южного Уэльса (Австралия) (*University of New South Wales, Australia*) экспериментально изучили структуры с затворно-индуцированным ДГ электронов ($d = 25 \text{ нм}$, $z = 45 \text{ нм}$) и дырок ($d = 20 \text{ нм}$, $z = 68 \text{ нм}$). Мы сравнили вычисленное по формулам (4) и (5), а также экспериментальное время рассеяния τ_q и τ_t для этих образцов. Экспериментальное время рассеяния (время жизни) находили известным способом [25—28]. Транспортное время рассеяния τ_t в эксперименте определялось по подвижности носителей μ , а квантовое время τ_q находилось по измеренным магнитополевым зависимостям амплитуды осцилляций Шубникова—де Гааза. Параметром в этих случаях была измеренная плотность затворно-индуцированного ДГ, т. е. импульс Ферми в формулах (5). Исходные данные и детали их обработки для получения экспериментальных τ_q будут опубликованы отдельно. Здесь сообщается основной результат с точки зрения моделирования. При характерных плотностях электронного ($n_e \sim 1,4 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$) и дырочного ($n_h \sim 0,6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$) ДГ измеренные τ_t оказались в два–три раза выше вычисленных в предположении полного беспорядка в распределении поверхностных зарядов ($F_q = 1$), что соответствует бесконечной температуре T в данной модели. Квантовое время рассеяния τ_q в экспериментах тоже оказалось больше вычисленного в предположении $F_q = 1$. Понижение теоретических значений времени рассеяния τ_{theor} по сравнению с экспериментальными τ_{exp} невозможно ликвидировать естественным допущением, что в эксперименте присутствуют неучтенные теорией механизмы рассеяния, характеризующиеся временем τ_0 . Действительно, учет этих

механизмов в теории еще сильнее понизил бы вычисленные времена ($\tau_{\text{new}} < \tau_{\text{theor}} < \tau_{\text{exp}}$) в согласии с обычным правилом:

$$\frac{1}{\tau_{\text{new}}} = \frac{1}{\tau_{\text{theor}}} + \frac{1}{\tau_0}. \quad (7)$$

Напротив, из формул (5) ясно, что самоорганизация поверхностных зарядов, понижая $F(q)$ (см. рис. 3, б), увеличивает время рассеяния носителей в ДГ по сравнению со случаем $F_q = 1$. При $F_q \neq 1$ в формулах (4) и (5) имеется лишь один свободный параметр – температура T замерзания распределения r_i . Ограничение единственным свободным параметром удобно для нахождения замороженного $F(q)$ из подгонки модели под эксперимент при характерной плотности ДГ. В результате этой подгонки найдена температура замерзания беспорядка $T \approx 1000 \text{ К}$ в случае образца с двумерным электронным газом и $T \approx 700 \text{ К}$ для образца с двумерным дырочным газом. Успешность подгонки служит свидетельством самоорганизации поверхностного заряда в изученных структурах. Поскольку в простой модели мы пренебрегли всеми факторами беспорядка, кроме температуры, в термодинамическом равновесии, найденные значения T являются оценкой сверху для реальной температуры замораживания беспорядка, которая для систем этого типа неизвестна. Тем не менее, беспорядок в r_i , отвечающий найденным T , вероятно, близок к тому, который был в реальности заморожен. Отметим также, что найденные в модели значения температуры замораживания локализованных зарядов почти в два выше, чем реальные температуры, при которых выполняются постростовые операции по нанесению диэлектрика и затвора [5—12].

Заключение

Рассмотрена самоорганизация локализованных зарядов на границе подзатворного диэлектрика с нелегированной полупроводниковой гетероструктурой, содержащей затворно-индуцированный двумерный газ электронов или дырок. В предложенных аналитических формулах и расчетах методом Монте–Карло использован лишь один свободный параметр — температура замораживания беспорядка в координатах точечных зарядов на идеальной плоскости. Эта температура найдена сравнением вычисленных и измеренных транспортного и квантового времени рассеяния двумерных носителей.

Библиографический список

1. Cowley A. M., Sze S. M. Surface states and barrier height of metal–semiconductor systems // *J. Appl. Phys.* 1965. V. 36, Iss. 10. P. 3212—3220. DOI: 10.1063/1.1702952
2. Sze S. M. *Physics of semiconductor devices*. New York: John Wiley, 1981. 868 p.
3. Spicer W. E., Lindau I., Skeath P., Su C. Y. Unified defect model and beyond // *J. Vac. Sci. Technol.* 1980. V. 17, Iss. 5. P. 1019—1027. DOI: 10.1116/1.570583

4. Darling R. B. Defect–state occupation, Fermi–level pinning, and illumination effects on free semiconductor surfaces // *Phys. Rev. B*. 1991. V. 43, Iss. 5. P. 4071–4083. DOI: 10.1103/PhysRevB.43.4071
5. Harrell R. H., Pyshkin K. S., Simmons M. Y., Ritchie D. A., Ford C. J. B., Jones G. A. C., Pepper M. Fabrication of high–quality one– and two–dimensional electron gases in undoped GaAs/AlGaAs heterostructures // *Appl. Phys. Lett.* 1999. V. 74, Iss. 16. P. 2328–2330. DOI: 10.1063/1.123840
6. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Baksheyev D. G., Pyshkin K. S., Harrell R. H., Linfield E. H., Ritchie D. A., Ford C. J. B. Electrostatic potential and quantum transport in a one–dimensional channel of an induced two–dimensional electron gas // *J. Appl. Phys.* 2001. V. 89, Iss. 9. P. 4993–5000. DOI: 10.1063/1.1352024
7. Chen J. C. H., Wang D. Q., Klochan O., Micolich A. P., Das Gupta K., Sfigakis F., Ritchie D. A., Reuter D., Wieck A. D., Hamilton A. R. Fabrication and characterization of ambipolar devices on an undoped AlGaAs/GaAs heterostructure // *Appl. Phys. Lett.* 2012. V. 100, Iss. 5. P. 052101. DOI: 10.1063/1.3673837
8. Chen J. C. H., Klochan O., Micolich A. P., Das Gupta K., Sfigakis F., Ritchie D. A., Trunov K., Reuter D., Wieck A. D., Hamilton A. R. Fabrication and characterisation of gallium arsenide ambipolar quantum point contacts // *Appl. Phys. Lett.* 2015. V. 106, Iss. 18. P. 183504. DOI: 10.1063/1.4918934
9. Taneja D., Sfigakis F., Croxall A. F., Das Gupta K., Narayan V., Waldie J., Farrer I., Ritchie D. A. N–type ohmic contacts to undoped GaAs/AlGaAs quantum wells using only front–sided processing: application to ambipolar FETs // *Semicond. Sci. Technol.* 2016. V. 31, Iss. 6. P. 065013. DOI: 10.1088/0268–1242/31/6/065013
10. Miserev D. S., Srinivasan A., Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Farrer I., Ritchie D. A., Hamilton A. R., Sushkov O. P. Mechanisms for strong anisotropy of In–plane g–factors in hole based quantum point contacts // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 119, Iss. 11. P. 116803. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.116803
11. Mak W. Y., Das Gupta K., Beere H. E., Farrer I., Sfigakis F., Ritchie D. A. Distinguishing impurity concentrations in GaAs and AlGaAs using very shallow undoped heterostructures // *Appl. Phys. Lett.* 2010. V. 97, Iss. 24. P. 242107. DOI: 10.1063/1.3522651
12. Wang D. Q., Chen J. C. H., Klochan O., Das Gupta K., Reuter D., Wieck A. D., Ritchie D. A., Hamilton A. R. Influence of surface states on quantum and transport lifetimes in high–quality undoped heterostructures // *Phys. Rev. B*. 2013. V. 87, Iss. 19. P. 195313. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.195313
13. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Terekhov I. S., Sushkov O. P. Effects of Coulomb screening and disorder on an artificial graphene based on nanopatterned semiconductor // *2D Mater.* 2015. V. 2, N 1. P. 014010. DOI: 10.1088/2053–1583/2/1/014010
14. Ткаченко О. А., Бакшеев Д. Г., Ткаченко В. А., Сушков О. П. Моделирование самоорганизации локализованных зарядов на границе полупроводника с подзатворным диэлектриком // Труды Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» (АПВПМ–2019). Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2019. С. 515–521. DOI: 10.24411/9999–016A–2019–10082
15. Fetter A. L. Electrodynamics and thermodynamics of a classical electron surface layer // *Phys. Rev. B*. 1974. V. 10, Iss. 9. P. 3739–3745. DOI: 10.1103/PhysRevB.10.3739
16. Gann R. C., Chakravarty S., Chester G. V. Monte Carlo simulation of the classical two–dimensional one–component plasma // *Phys. Rev. B*. 1979. V. 20, Iss. 1. P. 326–344. DOI: 10.1103/PhysRevB.20.326
17. Efros A. L., Pikus F. G., Samsonidze G. G. Maximum low–temperature mobility of two–dimensional electrons in heterojunctions with a thick spacer layer // *Phys. Rev. B*. 1990. V. 41, Iss. 12. P. 8295–8301. DOI: 10.1103/PhysRevB.41.8295
18. Das Sarma S., Hwang E. H., Kodyalam S., Pfeiffer L. N., West K. W. Transport in two–dimensional modulation–doped semiconductor structures // *Phys. Rev. B*. 2015. V. 91, Iss. 20. P. 205304. DOI: 10.1103/PhysRevB.91.205304
19. Das Sarma S., Stern F. Single–particle relaxation time versus scattering time in an impure electron gas // *Phys. Rev. B*. 1985. V. 32, Iss. 12. P. 8442–8444. DOI: 10.1103/PhysRevB.32.8442
20. Chaplik A. V. Possible crystallization of charge carriers in low–density inversion layers // *J. Experimental and Theoretical Physics*. 1972. V. 62, N 2. P. 395–398. URL: http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/e_035_02_0395.pdf
21. Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E. Equation of state calculations by fast computing machines // *J. Chem. Phys.* 1953. V. 21, Iss. 6. P. 1087. DOI: 10.1063/1.1699114
22. Rosenbluth M. N., Rosenbluth A. W. Further results on Monte Carlo equations of state // *J. Chem. Phys.* 1954. V. 22, Iss. 5. P. 881. DOI: 10.1063/1.1740207
23. Chib S., Greenberg E. Understanding the Metropolis–Hastings algorithm // *The American Statistician*. 1995. V. 49, N 4. P. 327–335. DOI: 10.2307/2684568
24. Коткин Г. Л. Лекции по статистической физике: учебник. М.; Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2006. 190 с.
25. Harrang J. P., Higgins R. J., Goodall R. K., Jay P. R., Laviron M., Delescluse P. Quantum and classical mobility determination of the dominant scattering mechanism in the two–dimensional electron gas of an AlGaAs/GaAs heterojunction // *Phys. Rev. B*. 1985. V. 32, Iss. 12. P. 8126–8135. DOI: 10.1103/PhysRevB.32.8126
26. Mani R. G., Anderson J. R. Study of the single–particle and transport lifetimes in GaAs/Al_xGa_{1–x}As // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37, Iss. 8. P. 4299–4302. DOI: 10.1103/PhysRevB.37.4299
27. Coleridge P. T., Stoner R., Fletcher R. Low–field transport coefficients in GaAs/Ga_{1–x}Al_xAs heterostructures // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 39. P. 1120–1124. DOI: 10.1103/PhysRevB.39.1120
28. Bystrov S. D., Kreshchuk A. M., Tuan L., Novikov S. V., Polyanskaya T. A., Savelev I. G., Shik A. Y. Shubnikov–de Hass oscillations in a nonuniform 2D electron–gas // *Semiconductors*. 1994. V. 28, Iss. 1. P. 55–58.

Работа поддержана грантом 19–72–30023 Российского научного фонда. Расчеты выполнялись с использованием вычислительных ресурсов МСЦ РАН в рамках Государственного задания 0306–2019–0011. Мы благодарны сотрудникам университета Нового Южного Уэльса (Австралия) А. Р. Hamilton, О. Klochan и D. Q. Wang за возможность сравнения расчетов и теории с экспериментальными данными.

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

The effect of surface charge self-organization on gate-induced electron and hole two-dimensional systemsV. A. Tkachenko^{1,2,§}, O. A. Tkachenko¹, D. G. Baksheev², O. P. Sushkov³¹ *Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences, Akad. Lavrent'eva Ave., 13, Novosibirsk, 630090, Russia*² *Novosibirsk State University, Pirogova Str., 1, Novosibirsk, 630090, Russia*³ *University of New South Wales, Sydney, 2052, Australia*

Abstract. A model is proposed for describing the self-organization of localized charges and quantum scattering in undoped GaAs/AlGaAs structures in which a two-dimensional gas of electrons or holes is created by the corresponding gate voltage. We assume that in such a metal-dielectric-undoped semiconductor structure carrier scattering on surface charges localized at the interface between GaAs and the dielectric dominates. Proposed model considers these charges and the corresponding image charges in the metal gate as a closed system in a thermostat. The electrostatic self-organization for this system in thermodynamic equilibrium is studied numerically using the Metropolis algorithm in a wide temperature range. It is shown that, at $T > 100$ K, a simple formula derived from the theory of two-dimensional one-component plasma gives almost the same behavior of the structural factor at low wave numbers as the Monte Carlo calculation. The scattering times of gate-induced carriers are described by formulas in which the structural factor characterizes the frozen disorder in the given system. In these formulas, the behavior of the structural factor at small wave numbers is decisive. A calculation using these formulas with disorder corresponding to infinite T gives two to three times shorter scattering times than in the corresponding experiments. We found that the theory is consistent with experiment at a freezing point of disorder $T \approx 1000$ K for a sample with a two-dimensional electron gas and $T \approx 700$ K for a sample with a two-dimensional hole gas. The found values are an upper estimate of the freezing temperature in the studied structures, since the model ignores sources of disorder other than temperature.

Keywords: undoped structures, gate-induced two-dimensional systems, surface charge, disorder freezing temperature

References

1. Cowley A. M., Sze S. M. Surface states and barrier height of metal-semiconductor systems. *J. Appl. Phys.*, 1965, vol. 36, no. 10, pp. 3212–3220. DOI: 10.1063/1.1702952
2. Sze S. M. *Physics of semiconductor devices*. New York: John Wiley, 1981, 868 p.
3. Spicer W. E., Lindau I., Skeath P., Su C. Y. Unified defect model and beyond. *J. Vac. Sci. Technol.*, 1980, vol. 17, no. 5, pp. 1019–1027. DOI: 10.1116/1.570583
4. Darling R. B. Defect-state occupation, Fermi-level pinning, and illumination effects on free semiconductor surfaces. *Phys. Rev. B*, 1991, vol. 43, no. 5, pp. 4071–4083. DOI: 10.1103/PhysRevB.43.4071
5. Harrell R. H., Pyshkin K. S., Simmons M. Y., Ritchie D. A., Ford C. J. B., Jones G. A. C., Pepper M. Fabrication of high-quality one- and two-dimensional electron gases in undoped GaAs/AlGaAs heterostructures. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, vol. 74, no. 16, pp. 2328–2330. DOI: 10.1063/1.123840
6. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Baksheev D. G., Pyshkin K. S., Harrell R. H., Linfield E. H., Ritchie D. A., Ford C. J. B. Electrostatic potential and quantum transport in a one-dimensional channel of an induced two-dimensional electron gas. *J. Appl. Phys.*, 2001, vol. 89, no. 9, pp. 4993–5000. DOI: 10.1063/1.1352024
7. Chen J. C. H., Wang D. Q., Klochan O., Micolich A. P., Das Gupta K., Sfigakis F., Ritchie D. A., Reuter D., Wieck A. D., Hamilton A. R. Fabrication and characterization of ambipolar devices on

an undoped AlGaAs/GaAs heterostructure. *Appl. Phys. Lett.*, 2012, vol. 100, no. 5, p. 052101. DOI: 10.1063/1.3673837

8. Chen J. C. H., Klochan O., Micolich A. P., Das Gupta K., Sfigakis F., Ritchie D. A., Trunov K., Reuter D., Wieck A. D., Hamilton A. R. Fabrication and characterisation of gallium arsenide ambipolar quantum point contacts. *Appl. Phys. Lett.*, 2015, vol. 106, no. 18, p. 183504. DOI: 10.1063/1.4918934

9. Taneja D., Sfigakis F., Croxall A. F., Das Gupta K., Narayan V., Waldie J., Farrer I., Ritchie D. A. N-type ohmic contacts to undoped GaAs/AlGaAs quantum wells using only front-sided processing: application to ambipolar FETs. *Semicond. Sci. Technol.*, 2016, vol. 31, no. 6, p. 065013. DOI: 10.1088/0268-1242/31/6/065013

10. Miserev D. S., Srinivasan A., Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Farrer I., Ritchie D. A., Hamilton A. R., Sushkov O. P. Mechanisms for strong anisotropy of In-plane g-factors in hole based quantum point contacts. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, vol. 119, no. 11, p. 116803. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.116803

11. Mak W. Y., Das Gupta K., Beere H. E., Farrer I., Sfigakis F., Ritchie D. A. Distinguishing impurity concentrations in GaAs and AlGaAs using very shallow undoped heterostructures. *Appl. Phys. Lett.*, 2010, vol. 97, no. 24, p. 242107. DOI: 10.1063/1.3522651

12. Wang D. Q., Chen J. C. H., Klochan O., Das Gupta K., Reuter D., Wieck A. D., Ritchie D. A., Hamilton A. R. Influence of surface states on quantum and transport lifetimes in high-quality undoped heterostructures. *Phys. Rev. B*, 2013, vol. 87, no. 19, p. 195313. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.195313

13. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Terekhov I. S., Sushkov O. P. Effects of Coulomb screening and disorder on an artificial graphene based on nanopatterned semiconductor. *2D Mater.*, 2015, vol. 2, no. 1, p. 014010. DOI: 10.1088/2053-1583/2/1/014010

14. Tkachenko O. A., Baksheev D. G., Tkachenko V. A., Sushkov O. P. Modeling of localized charges self-organization at the boundary of a semiconductor with a gate dielectric. *Proceedings of the International Conference "Advanced Mathematics, Computa-*

Information about authors:

Vitaly A. Tkachenko^{1,2,§}: Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Scientist (vtkach@isp.nsc.ru); **Olga A. Tkachenko**¹: Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Scientist (otkach@isp.nsc.ru); **Dmitry G. Baksheev**²: Cand. Sci. (Phys.–Math.), Assistant Lecturer (bd@mail.ru); **Oleg P. Sushkov**³: Dr. Sci. (Phys.–Math.), Full Professor (sushkov@unsw.edu.au)

§ Corresponding author

tions and Applications 2019" (AMCA-2019). Novosibirsk: NSU, 2019, pp. 515—521 (In Russ.). DOI: 10.24411/9999-016A-2019-10082

15. Fetter A. L. Electrodynamics and thermodynamics of a classical electron surface layer. *Phys. Rev. B*, 1974, vol. 10, no. 9, pp. 3739—3745. DOI: 10.1103/PhysRevB.10.3739

16. Gann R. C., Chakravarty S., Chester G. V. Monte Carlo simulation of the classical two-dimensional one-component plasma. *Phys. Rev. B*, 1979, vol. 20, no. 1, pp. 326—344. DOI: 10.1103/PhysRevB.20.326

17. Efros A. L., Pikus F. G., Samsonidze G. G. Maximum low-temperature mobility of two-dimensional electrons in heterojunctions with a thick spacer layer. *Phys. Rev. B*, 1990, vol. 41, no. 12, pp. 8295—8301. DOI: 10.1103/PhysRevB.41.8295

18. Das Sarma S., Hwang E. H., Kodyalam S., Pfeiffer L. N., West K. W. Transport in two-dimensional modulation-doped semiconductor structures. *Phys. Rev. B*, 2015, vol. 91, no. 20, p. 205304. DOI: 10.1103/PhysRevB.91.205304

19. Das Sarma S., Stern F. Single-particle relaxation time versus scattering time in an impure electron gas. *Phys. Rev. B*, 1985, vol. 32, no. 12, pp. 8442—8444. DOI: 10.1103/PhysRevB.32.8442

20. Chaplik A. V. Possible crystallization of charge carriers in low-density inversion layers. *J. Experimental and Theoretical Physics*, 1972, vol. 62, no. 2, pp. 395—398. URL: http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/e_035_02_0395.pdf

21. Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 1953, vol. 21, no. 6, p. 1087. DOI: 10.1063/1.1699114

22. Rosenbluth M. N., Rosenbluth A. W. Further results on Monte Carlo equations of state. *J. Chem. Phys.*, 1954, vol. 22, no. 5, p. 881. DOI: 10.1063/1.1740207

23. Chib S., Greenberg E. Understanding the Metropolis-Hastings algorithm. *The American Statistician*, 1995, vol. 49, no. 4, pp. 327—335. DOI: 10.2307/2684568

24. Kotkin G. L. Lectures on statistical physics. Moscow; Izhevsk: Regul'yarnaya i khaoticheskaya dinamika, 2006, 190 p. (In Russ.)

25. Harrang J. P., Higgins R. J., Goodall R. K., Jay P. R., Lavi-ron M., Delescluse P. Quantum and classical mobility determination of the dominant scattering mechanism in the two-dimensional electron gas of an AlGaAs/GaAs heterojunction. *Phys. Rev. B*, 1985, vol. 32, no. 12, pp. 8126—8135. DOI: 10.1103/PhysRevB.32.8126

26. Mani R. G., Anderson J. R. Study of the single-particle and transport lifetimes in GaAs/Al_xGa_{1-x}As. *Phys. Rev. B*, 1988, vol. 37, no. 8, pp. 4299—4302. DOI: 10.1103/PhysRevB.37.4299

27. Coleridge P. T., Stoner R., Fletcher R. Low-field transport coefficients in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs heterostructures. *Phys. Rev. B*, 1989, vol. 39, pp. 1120—1124. DOI: 10.1103/PhysRevB.39.1120

28. Bystrov S. D., Kreshchuk A. M., Tuan L., Novikov S. V., Polyanskaya T. A., Savelev I. G., Shik A. Y. Shubnikov-de Hass oscillations in a nonuniform 2D electron-gas. *Semiconductors*, 1994, vol. 28, no. 1, pp. 55—58.

Acknowledgements.

This work was supported by Grant No. 19-72-30023 of the Russian Research Foundation. The calculations were carried out using computing resources of the Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences under State Assignment No. 0306-2019-0011. We are grateful to colleagues A.R. Hamilton, O. Klochan and D.Q. Wang from the University of New South Wales, Australia, for the opportunity to compare calculations and theory with experimental data.

Received December 26, 2019