Влияние электрического поля на напряженное состояние гетероструктуры

© Р.М. Пелещак, Б.А. Лукиянец*, Г.Г. Зегря+

Дрогобычский государственный педагогический университет им. Ив. Франко,
293720 Дрогобыч, Украина
* Государственный университет "Львівська політехника",
79013 Львов, Украина
+ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 21 марта 2000 г. Принята к печати 27 марта 2000 г.)

В рамках электронно-деформационной модели рассмотрен механизм возникновения электронно-деформационного диполя на механически напряженной гетерогранице. На примере гетероструктуры ZnSe/ZnS показано, что при наложении внешнего электрического поля ~ 120 кВ/см по нормали к плоскости ее гетерограницы решетка ZnSe (ZnS) претерпевает дополнительную деформацию сжатия $\sim 4\%$ ($\sim 3\%$), а при противоположном направлении поля — деформацию растяжения $\sim 5\%$ ($\sim 5\%$).

1. Введение

Современная технология (в частности, молекулярно-лучевая эпитаксия [1]) позволяет получать гетероструктуры с рассогласованными параметрами контактирующих решеток (например, ZnS/ZnSe [2]), или, в общем случае, их кристаллографических характеристик. Несоответствие решеток порождает деформацию в окрестности гетероконтакта. Характер и степень такой деформации можно регулировать толщиной наращиваемого слоя [3]. Цель настоящей работы — показать, что этого можно добиться также наложением внешнего электрического поля. При этом мы будем пользоваться самосогласованной моделью, учитывающей взаимодействие механической деформации с электронной подсистемой кристаллической структуры, развитой в работе [4]. Направленное регулирование механически напряженного состояния гетероструктуры с помощью внешнего электрического поля позволяет непрерывно перестраивать в определенном диапазоне ее физические характеристики. Это в ряде случаев должно привести к качественно новым результатам.

Далее в рамках модели [4] будет рассмотрен механизм образования "электронно-деформационного диполя" (ЭДД) на напряженной гетерогранице, рассчитан его дипольный момент, проанализировано влияние внешнего электрического поля через ЭДД на напряженное состояние гетерограницы, приведена численная оценка такого влияния на примере гетероструктуры ZnS/ZnSe.

Заметим, что решение данной задачи может быть реализовано несколькими способами. Один из них — рассматривать *ab initio* гетероструктуру во внешнем электрическом поле. Тогда в гамильтониане задачи появится слагаемое, которое в узельном представлении имеет вид $\sum\limits_{mn} e\mathbf{E}\mathbf{r}_{mn}c_m^+c_n$ ($\mathbf{E}$ — напряженность электрического поля). Такое слагаемое не повлияет на уравнение, описывающее условие механического равновесия (см. далее), но самосогласованное нахождение электронного коррелятора $\langle c_{\mathbf{k}}^+c_{\mathbf{k}'}\rangle$ [4], а в конечном счете и параметр деформации будут функцией электрического поля.

Другой способ, использованный далее, — решение задачи в два этапа. На первом этапе рассматриваются электронно-деформационные эффекты в гетероструктуре в отсутствие внешнего электрического поля, в частности образование дипольного момента. Эффекты поля рассматриваются лишь на втором этапе.

Понятно, что оба подхода должны приводить к одним и тем же окончательным результатам. Однако второй использованный нами способ позволяет глубже понять физический механизм рассматриваемой задачи.

2. Электронно-деформационный диполь напряженной гетерограницы

В отличие от пограничных диполей, природа которых связана с состояниями в запрещенной зоне, возникшими из-за разрыва зон контактирующих гетерообластей [5], ЭДД возникает на напряженной гетерогранице из-за рассогласования постоянных решеток a_β. Здесь $\beta = 1, 2$, где индекс "1" соответствует области $L_w \le x \le 0$ узкощелевого кристалла (в случае гетероструктуры ZnS/ZnSe это ZnSe с шириной запрещенной зоны $\Delta E_{\mathrm{ZnSe}} = 2.822$ эВ), а "2" — области $0 \le x \le L_w$ материала с широкой запрещенной зоной (ZnS с $\Delta E_{\mathrm{ZnS}} = 3.840$ эВ). Далее мы будем полагать $L_w \to \infty$.

Первопричина ЭДД — локальное перераспределение носителей на напряженной гетерогранице вследствие электронно-деформационного взаимодействия [4], а именно, возникновение области с избытком электронов (в ZnSe в окрестности $x = 0^-$) и их недостатком (в ZnS в окрестности $x = 0^+$, рис. 1). Таким образом, на напряженной гетерогранице (плоскость $x = 0$, см. рис. 1) образуется ЭДД, момент которого $\mathbf{P}$ перпендикулярен к

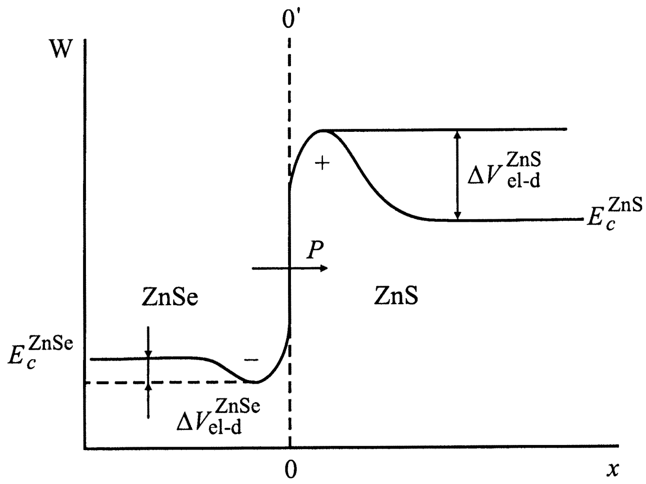

Рис. 1. Энергетическая диаграмма механически напряженной гетерограницы ZnSe/ZnS с учетом электронно-деформационного взаимодействия. P — дипольный момент, $\Delta V_{\text{el-d}}(x)$ — локальное изменение высоты потенциального барьера или дна потенциальной ямы из-за электронно-деформационного взаимодействия.

плоскости гетероконтакта. Его величина равна [6]

$$P = -es \int_{-\infty}^{\infty} x\Delta n(x), \tag{1}$$

где $s = L_y L_z$ — площадь гетерограницы, $\Delta n(x)$ — изменение электронной плотности из-за электронно-деформационного взаимодействия.

Рассматриваемая задача может быть описана гамильтонианом, который в узельном представлении в рамках однозонной модели имеем вид

$$\hat{H} = \sum_{i\sigma} \left[W_i + a_{ci}\varepsilon(\mathbf{r}_i)\right] c_{i\sigma}^{+} c_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} \lambda_{ij}^0 c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i K_i \Omega_0 \varepsilon^2(\mathbf{r}_i) + \hat{H}_{\text{Coul}}, \tag{2}$$

где $c_{i\sigma}^{+}, c_{i\sigma}$ — ферми-операторы (σ — спиновый индекс), W_i — положение электронного уровня на узле с радиусом-вектором $\mathbf{R}_i$, а $a_{ci}\varepsilon(\mathbf{r}_i)$ — его смещение из-за электронно-деформационного взаимодействия (a_{ci} — константа гидростатического деформационного потенциала, равная $a_1(a_2)$ для узлов в областях 1 (2);

$$\varepsilon(\mathbf{r}_i) = \frac{\Omega(\mathbf{r}_i) - \Omega_0}{\Omega_0}$$

– относительное изменение объема элементарной ячейки Ω_0); λ_{ij}^0 — интеграл электронного перемешивания между узлами $\mathbf{R}_i$ и $\mathbf{R}_j$ без учета деформации; $\mathbf{K}_i$ — решеточная упругая жесткость; $\hat{H}_{\text{Coul}}$ — электронное кулоновское взаимодействие.

Для нахождения электронной плотности $\Delta n(x)$ требуется самосогласованное решение системы следующих уравнений [4]:

– стационарного уравнения Шредингера в механически напряженной системе

$$\left[\nabla^2 - \frac{a_c}{\alpha}\varepsilon(\mathbf{r}) + \frac{e}{\alpha}\varphi(\mathbf{r})\right]\Psi_n(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\alpha}\left[E_n - (W - \Delta_\lambda)\right]\Psi_n(\mathbf{r}), \tag{3}$$

где Δ_λ — ширина зоны, $\alpha = \hbar^2/2m^*$;

– условия механического равновесия

$$\left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \varepsilon(\mathbf{r})} \right\rangle = \sigma_{\text{mech}} V, \tag{4}$$

V — объем кристалла;

– уравнения, определяющего положение химического потенциала,

$$\bar{n} = \frac{\Omega_0}{V} \int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad 0 \le n \le 2; \tag{5}$$

– уравнения, определяющего концентрацию носителей $n(r)$,

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{+} c_{\mathbf{k}'\sigma} \rangle \exp[-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{r}], \tag{6}$$

где $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{+} c_{\mathbf{k}'\sigma} \rangle$ — фурье-трансформанта коррелятора $\langle c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma} \rangle$;

– уравнения Пуассона, определяющего электростатический потенциал $\varphi(\mathbf{r})$, вызванный перераспределением электронной плотности $\Delta n(x)$.

В результате

$$\Delta n(x) = R[e\varphi(x) - V_{\text{mech}}], \tag{7}$$

где

$$R = \left(\frac{3}{8\pi^4}\right)^{1/3} \frac{1}{\alpha} \frac{\bar{n}_0^{1/3}\sqrt{1 + q\bar{n}_0^{1/3}}}{1 - \frac{3}{2}q\bar{n}_0^{1/3}\sqrt{1 + q\bar{n}_0^{1/3}}} \tag{8}$$

с

$$q = \frac{a_c^2}{(3\pi^2)^{2/3}\alpha K}, \tag{9}$$

$\bar{n}_0$ — средняя концентрация носителей, а

$$V_{\text{mech}} = a_c \varepsilon_{\text{mech}} \tag{10}$$

— потенциальная энергия электронов, обусловленная механическим искажением решетки из-за рассогласования параметров решеток a_1 и a_2 в плоскости гетерограницы (для ZnSe/ZnS $(b_1 - b_2)/b_1 \approx 4\%$ [3]).

Выше, в уравнениях (3)–(10), следует учесть опущенный индекс $\beta = 1, 2$ в зависимости от рассматриваемой области гетероструктуры. В соотношении (8) $\bar{n}_{0\beta}$ — средняя концентрация носителей в β-м материале. С учетом индекса β параметр механической деформации в области β, $\varepsilon_{\beta\text{mech}}$, определяется следующим выражением:

$$\varepsilon_{\text{mech}}(\mathbf{E}) = \text{Sp}\hat{\varepsilon}_{\text{mech}} = \frac{1}{a}\left[2a_{\parallel}(\mathbf{E}) + a_{\perp\beta}(\mathbf{E})\right] - 3, \quad (11)$$

где

$$a_{\parallel}(\mathbf{E}) = \frac{a_1G_1 + a_2G_2}{G_1 + G_2} \quad (12)$$

— параметр решетки в плоскости механически напряженной гетерограницы при наложении электрического поля $\mathbf{E}$ перпендикулярно к ней (G_β — модуль сдвига области β);

$$a_{\beta\perp}(\mathbf{E}) = a_\beta\left[1 - D_\beta\left(\frac{a_{\parallel}(\mathbf{E})}{a_\beta} - 1\right)\right], \quad (13)$$

где D_β — коэффициент, определяемый отношением упругих постоянных и зависящий от кристаллографической ориентации. Для ориентации (100) $D_\beta = 2c_{12}^{\beta}/c_{11}^{\beta}$ [3], где c_{11}^{β}, c_{12}^{β} — упругие константы.

Из соотношения (1) следует, что дипольный момент P пропорционален площади контактирующих областей. Такой вывод, аналогичный выводу о пропорциональности дипольного момента длине прямолинейной дислокации [7], и есть проявление того, что зарядовое перераспределение не зависит от координат плоскости контакта. Подобный вывод содержится в выражении для свободной энергии упругого поля, созданного дислокацией [8].

Потенциал поля $\varphi_\beta(x)$, возникающего вследствие локального перераспределения носителей в окрестности механически напряженной гетерограницы [4], может быть определен из решения уравнений Пуассона для 1-й и 2-й областей гетероструктуры:

$$\frac{d^2\varphi_\beta}{dx^2} - \lambda_\beta^2\varphi_\beta = -\frac{\lambda^2}{e}\Delta V_{\beta\text{mech}}. \quad (14)$$

За начало отсчета потенциалов $\varphi_\beta(x)$ выбрано дно проводимости 1-го материала. В соотношении (14)

$$\lambda_\beta^2 = \frac{e^2R_\beta}{\varepsilon_\beta\varepsilon_0},$$

где ε_β — статическая диэлектрическая проницаемость β-го материала (например, ZnSe), а ε_0 — диэлектрическая постоянная.

Решения (14) с учетом конечности потенциала $\varphi_\beta(x)$ при $x \to \pm\infty$ равны

$$\varphi_1(x) = A\exp(\lambda_1 x) + \frac{V_{1\text{mech}}}{e}, \quad (15)$$

$$\varphi_2(x) = B\exp(-\lambda_2 x) + \frac{V_{2\text{mech}}}{e}. \quad (16)$$

Коэффициенты A и B в этих уравнениях определяются из условий непрерывности потенциалов $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$ на напряженной гетерогранице, т.е. при $x = 0$, и нормальной составляющей вектора электрического смещения $D^{in}(x)$ и $D^{jn}(x)$ при $x = 0$:

$$A = -\frac{V_{1\text{mech}} - V_{2\text{mech}}}{e}\frac{1}{1 + \sqrt{\frac{R_1\varepsilon_1}{R_2\varepsilon_2}}}, \quad (17)$$

$$B = \frac{V_{1\text{mech}} - V_{2\text{mech}}}{e}\frac{1}{1 + \sqrt{\frac{R_2\varepsilon_2}{R_1\varepsilon_1}}}. \quad (18)$$

Подставляя (7) в (1) с учетом (15), (16), получим явное выражение для дипольного момента P, возникающего на напряженной гетерогранице вследствие электронно-деформационного взаимодействия:

$$P = \frac{(V_{1\text{mech}} - V_{2\text{mech}})s\varepsilon_0}{|e|}\left(\frac{\varepsilon_1}{1 + \sqrt{\frac{R_1\varepsilon_1}{R_2\varepsilon_2}}} + \frac{\varepsilon_2}{1 + \sqrt{\frac{R_2\varepsilon_2}{R_1\varepsilon_1}}}\right). \quad (19)$$

В случае ненапряженной гетерограницы $V_{\beta\text{mech}} = 0$ и, как следует из (19), дипольный момент P равен нулю.

3. Изменение напряженного состояния гетерограницы ZnSe / ZnS посредством действия внешнего электрического поля

Естественно предположить, что наличие дипольного момента P (19) в гетероструктуре с напряженной гетерограницей может быть использовано для изменения ее механически напряженного состояния внешним электрическим полем $\mathbf{E}$ (см. рис. 1). При этом ЭДД во внешнем электрическом поле приобретает потенциальную энергию

$$\Delta W_p = \mathbf{PE}. \quad (20)$$

В частности, в нашей задаче геометрия электрического поля такова, что $|\cos\alpha| = 1$, α — угол между векторами $\mathbf{P}$ и $\mathbf{E}$ (на рис. 2 $\alpha = 0$ для кривых *1b*, *2b* и $\alpha = \pi$ для кривых *1b, 2b*). Эта энергия идет на изменение упругой энергии 1-го и 2-го материалов:

$$|\mathbf{PE}| = \frac{k}{2}\left[\Delta a_{i\perp}(\mathbf{E}) + \Delta a_{j\perp}(\mathbf{E})\right]^2, \quad (21)$$

где $k = k_1k_2/(k_1 + k_2)$ — коэффициент жесткости напряженной гетероструктуры ($k_\beta = E_\beta s/a_{\perp}^{\beta}(0)$ — коэффициент жесткости, а E_β — модуль Юнга β-го материала); $\Delta a_{\beta\perp}(\mathbf{E})$ — изменение параметра решетки β-го материала в направлении, перпендикулярном к плоскости механически напряженной гетерограницы, вследствие взаимодействия внешнего электрического поля с полем локального перераспределения носителей в окрестности гетерограницы; $a_{\beta\perp}(0)$ — параметр решетки β-го материала вдоль оси $0x$ в отсутствие внешнего электрического поля.

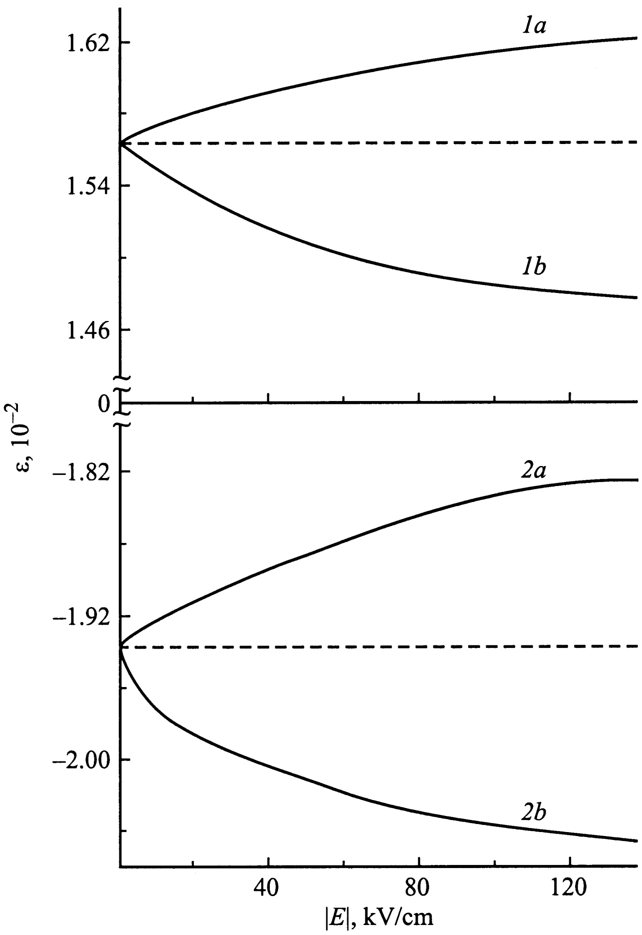

Рис. 2. Зависимость параметра деформации $\varepsilon_\beta(\mathbf{E})$ от величины внешнего электрического поля $\mathbf{E}$ для решеток: *1a*, *1b* — ZnS, *2a*, *2b* — ZnSe; зависимости *1a*, *2a* соответствуют случаю $E \parallel P$ $(\alpha = 0)$, *1b*, *2b* — случаю антипараллельного направления E и P $(\alpha = \pi)$.

Уравнение (19) совместно с уравнением

$$k_1\Delta a_{1\perp}(\mathbf{E}) = k_2\Delta a_{2\perp}(\mathbf{E}), \tag{22}$$

описывающим механическое равновесие на гетерогранице, образуют систему уравнений, решением которой является

$$\Delta a_{1\perp}(\mathbf{E}) = \pm\sqrt{\frac{2a_{1\perp}(0)|\mathbf{PE}|}{sE_1\left(1+\frac{a_{2\perp}(0)E_1}{a_{1\perp}(0)E_2}\right)}}. \tag{23}$$

Здесь знак "+" ("–") соответствует дополнительной деформации растяжения (сжатия), возникающей вследствие наложения на гетероструктуру электрического поля $\mathbf{E} = (-E_x, 0, 0)$ $(\mathbf{E} = (E_x, 0, 0))$ (см. рис. 1). Тогда выражение для параметра деформации $\varepsilon_\beta(\mathbf{E})$ в зависимости от поля $\mathbf{E}$ с учетом (11), (13), (23) равно

$$\varepsilon_\beta(\mathbf{E}) = 2\left(1+\frac{1}{D_\beta}\right)+\frac{1}{a_\beta}\left(1-\frac{2}{D_\beta}\right) \times \big(a_{\beta\perp}(0)+\Delta a_{\beta\perp}(\mathbf{E})\big). \tag{24}$$

Таким образом, приложенное электрическое поле изменяет локальное перераспределение электронной плотности на величину $\delta n(\mathbf{E}) = \Delta n(\mathbf{E}) - \Delta n(0)$, а это в свою очередь влечет за собой изменение "электронной составляющей деформации" $\Delta V_{\beta\text{el-d}}(\mathbf{E}) = -\frac{|a_{\beta c}|}{K_\beta}\Delta n(\mathbf{E})$ [4]. В зависимости от знака $\Delta n(\mathbf{E})$ деформация решеток ZnSe и ZnS может быть либо деформацией растяжения $(\Delta n(\mathbf{E}) < 0)$, либо деформацией сжатия (при $\Delta n(\mathbf{E}) > 0$).

Для иллюстрации выводов предлагаемой модели проследим влияние внешнего электрического поля $\mathbf{E}$ на характер и степень деформации решеток гетероструктуры ZnSe / ZnS со следующими параметрами:
$E_i = 0.282$ эВ/Å^3, $E_j = 0.347$ эВ/Å^3,
$a_i = 5.6687$ Å, $a_j = 5.4093$ Å,
$a_{ic} = -3.65$ эВ, $a_{jc} = -2.78$ эВ,
$D_{i001} = 1.206$, $D_{j001} = 1.248$,
$G_{i001} = 0.9044$ эВ/Å^3, $G_{j001} = 1.1269$ эВ/Å^3 [3,5],
$\bar{n}_{i0} = 10^{18}$ см$^{-3}$, $\bar{n}_{j0} = 10^{16}$ см$^{-3}$,
$m_{ic} = 0.17m_0$, $m_{jc} = 0.25m_0$, $\varepsilon_i = 8.1$, $\varepsilon_j = 8.3$.

На рис. 2 приведены рассчитанные зависимости $\varepsilon_\beta(\mathbf{E})$ для двух случаев: a — электрическое поле направлено перпендикулярно к плоскости гетерограницы от ZnSe к ZnS и b — с противоположно направленным электрическим полем.

Как следует из рис. 2, с увеличением электрического поля решетки ZnS и ZnSe претерпевают либо дополнительную деформацию растяжения (кривые *1a*, *2a*), либо сжатия (кривые *1b*, *2b*) в зависимости от направления электрического поля. В частности, при значении электрического поля $E = 120$ кВ/см кристаллическая решетка ZnSe претерпевает дополнительную деформацию растяжения на величину $\sim$ 4% или сжатия на $\sim$ 5%, а решетка ZnS соответственно на $\sim$ 3 и $\sim$ 5%. Представленные кривые $\varepsilon_\beta(\mathbf{E})$ показывают, что решетка ZnSe более чувствительна к деформации, чем ZnS. Это объясняется тем, что податливость решетки ZnSe выше, чем решетки ZnS.

Эффект усиления (ослабления) напряженного состояния гетероструктуры ZnSe / ZnS электрическим полем, по-видимому, может быть использован при наращивании слоев гетероструктуры с несогласованными параметрами решеток.

Список литературы

[1] Б.А. Джойс. *Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры* (М., Мир, 1989).
[2] М.С. Бродин, В.В. Тищенко, Н.В. Боднарь, А.В. Коваленко, А.Ю. Мекекечко. УФЖ, **37**, 1802 (1992).
[3] G. Chris, Van de Walle. Phys. Rev. B, **39**, 1871 (1989).
[4] И.В. Стасюк, Р.М. Пелещак. УФЖ, **36**, 1744 (1991).
[5] Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн. *Поверхности и границы раздела полупроводников* (М., Мир, 1990) с. 425.
[6] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Электродинамика сплошных сред* (М., Наука, 1982) с. 35.
[7] Р.М. Пелещак, Б.А. Лукиянец. Письма ЖТФ, **24** (2), 37 (1998).

[8] А.М. Косевич. *Основы механики кристаллической решетки* (М., Наука, 1972).

Редактор Т.А. Полянская

Influence of electric field on stressed state of heterostructure

R.M. Peleshchak, B.A. Lukiyanets*, G.G. Zegrya+

Drohobych State Pedagogical University,
293720 Drohobych, Ukraine
* State University "Lvivska Politekhnika",
79013 Lviv, Ukraine
+ Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Within the framework of an electron-deformation model the mechanism of the electron-deformation dipole occurence at a stressed heterointerface is considered. It is shown that the electric field $\sim$ 120 kV/cm, when applied along the normal to ZnSe/ZnS interface, leads to additional $\sim$ 4%($\sim$ 3%) ZnSe (ZnS) lattice compression strain and to $\sim$ 5% ($\sim$ 5%) lattice tensile strain under the opposite direction of the electric field.