

Квантовое решение задачи аккумуляционного слоя n -InN

© А.А. Клочихин*[†], И.Ю. Страшкова*

* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

[†] Институт ядерной физики Российской академии наук,
188350 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 27 августа 2008 г. Принята к печати 6 октября 2008 г.)

Развита квантовая теория аккумуляционного слоя для n -типа кристаллов InN и кристаллов со сходными свойствами, в которой наряду с кулоновским вкладом учтено обменное электрон-электронное взаимодействие в рамках приближения локальной плотности Кона–Шэма. Применимость теории продемонстрирована на примере экспериментальных данных, опубликованных в литературе в последнее время. Разработанный подход обеспечивает наиболее надежную базу для определения параметров аккумуляционных слоев.

PACS: 71.20.Nr, 73.20.At, 73.20.Mf, 73.61.Ey

1. Введение

Интерес к проблеме аккумуляционного слоя вблизи поверхности полупроводника возник в связи с многочисленными данными, полученными недавно при исследовании пленок InN и твердых растворов InGaN [1–7]. Характерной чертой аккумуляционного слоя InN является высокая концентрация электронов, которая достигает величин [6–8], близких к 10^{21} см⁻³. Данные, полученные в экспериментах по фотоэмиссии с высоким разрешением по энергии и углу вылетевших электронов [9], показали, что электроны аккумуляционного слоя заселяют 2 локализованные вблизи поверхности двумерные зоны. Это означает, что для вычисления характеристик аккумуляционного слоя требуется квантовый подход.

Квантовое описание аккумуляционного слоя в приближении Хартри [10] показало, что нелинейное уравнение Шредингера имеет только два типа самосогласованных решений, содержащих одну или две двумерные зоны, причем решение, содержащее 2 зоны, энергетически более выгодно. Эти результаты согласуются с экспериментальными данными, однако остается вопрос о том, как повлияет учет обменного электрон-электронного взаимодействия на решение в приближении Хартри.

Этот вопрос возникает еще и потому, что в работах [11,12] с использованием различных подходов было показано, что учет обменного взаимодействия приводит к увеличению числа локализованных двумерных зон в аккумуляционном слое. Данный факт не существен в случаях, рассмотренных в работах [11,12], где предполагалось, что только наиболее глубокие состояния аккумуляционного слоя заполнены электронами, поскольку только заполненные состояния двумерных зон определяют конфигурацию потенциальной ямы. Однако в случае материала n -типа, например InN, все возможные состояния оказываются заполненными электронами и соответственно дают вклад в самосогласованную потенциальную энергию электрона в аккумуляционном слое. В этом случае нарушаются условия, которые необхо-

димы для самосогласования. Этот вопрос исследовался в работе [10] в рамках приближения Хартри, где было показано, что, допустив существование третьего состояния, мы приходим к выводу, что процедура самосогласования оказывается расходящейся по причине неограниченного увеличения ширины аккумуляционного слоя за счет возрастания числа двумерных зон.

В данной работе мы покажем, что проблема учета обменного электрон-электронного взаимодействия в аккумуляционном слое может быть решена в рамках приближения локальной плотности Кона–Шэма при учете пониженной размерности электронных состояний, что не было принято во внимание в работах [11,12].

2. Приближение локальной плотности Кона–Шэма

Для описания обменного взаимодействия мы используем потенциал Кона–Шэма в приближении локальной плотности, как и в работе [12]. Включение обменного потенциала в модель аккумуляционного слоя, рассмотренную ранее в работе [10], приводит к уравнению Хартри–Фока–Слэйтера [13]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi_n}{dz^2} + e[\Phi(z) + V_{\text{ex}}(z)]\psi_n(z) = \hbar\omega_n\psi_n(z). \quad (1)$$

Здесь n нумерует энергии и волновые функции двумерных зон, а электростатический потенциал Хартри $\Phi(z)$ выражается через плотность электронов $\delta n(z)$, компенсирующих поверхностный заряд Q_s ,

$$\Phi(z) = -\frac{2\pi e}{\epsilon} \int z' dz' \delta n(z + z'), \quad (2)$$

где

$$\int dz \delta n(z) = Q_s,$$

и ϵ есть электронная диэлектрическая проницаемость.

[†] E-mail: Albert.Klochikhin@mail.ioffe.ru

В пределе низких температур плотность электронов аккумуляционного слоя, заселяющих двумерные зоны, есть

$$\delta n(z) = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{2m^*}{\hbar^2} \sum_n \hbar\omega_n \psi_n^2(z), \quad (3)$$

где λ — перенормировка кулоновского взаимодействия, возникающая в процессе самосогласования [10]. Полученное выражение (3) представляет собой трехмерную плотность электронов, заселяющих двумерные зоны в аккумуляционном слое. Покажем теперь, что мы можем выразить потенциальную энергию обменного взаимодействия через функцию, имеющую смысл одномерной плотности.

Рассмотрим сначала подробнее ситуацию в однородном случае, предполагая цилиндрическую симметрию электронной плотности. Для этого выразим трехмерную плотность n через 2 параметра, имеющих смысл средних расстояний. Пусть среднее расстояние между электронами в плоскости есть R_s , а в направлении, перпендикулярном плоскости, — ξ_s . Тогда мы имеем

$$n = \frac{1}{\pi R_s^2 \xi_s}. \quad (4)$$

Таким образом, в отличие от трехмерной задачи, где среднее расстояние между частицами r_s связано с плотностью электронов соотношением $r_s = [3/4\pi n]^{1/3}$ и не зависит от направления, здесь мы имеем 2 не равных параметра $R_s \neq \xi_s$. При этом величина $1/(\pi R_s^2) = n\xi_s$ имеет смысл плотности электронов в плоскости, а $1/\xi_s$ — одномерной плотности в перпендикулярном направлении.

Применим теперь полученные соотношения к неоднородной трехмерной плотности аккумуляционного слоя, заменяя постоянную величину ξ_s на переменную $\xi(z)$:

$$\delta n(z) = \frac{1}{\pi R_s^2 \xi(z)}. \quad (5)$$

Плотность электронов в плоскости в данном случае получается усреднением по z ,

$$\frac{1}{\pi R_s^2} = \int dz \delta n(z) = Q_s, \quad (6)$$

и выражается таким образом через плотность поверхностного заряда

$$Q_s = \int dz \delta n(z),$$

оставаясь постоянной величиной.

Переменная одномерная плотность электронов, $1/\xi(z) = \delta \tilde{n}(z)$, получается с использованием соотношений (5) и (6) в виде

$$\delta \tilde{n}(z) = \delta n(z) \pi R_s^2 = \frac{\delta n(z)}{Q_s}. \quad (7)$$

Таким образом, в аккумуляционном слое одномерная плотность электронов, заселяющих двумерные зоны, дается выражением (7).

Функционал обменной энергии Кона–Шэма в приближении локальной плотности [14] и потенциальная энергия, равная вариационной производной от функционала энергии $\delta E_{\text{ex}}(n)/\delta n$, определяются обычно для размерности $D = 3$. Для того чтобы экстраполировать функционал на размерность $D = 1$, мы представим $E_{\text{ex}}(n)$ в виде

$$E_{\text{ex}}(n) = -\frac{D}{D+1} \left[\frac{3}{\pi} \right]^{1/3} \frac{e^2}{2} \int d^D r n(r)^{\frac{D+1}{D}}. \quad (8)$$

При $D = 3$ как функционал $E_{\text{ex}}(n)$, так и его вариационная производная совпадают с известными функциями [13,14]. В частности, потенциальная энергия обменного взаимодействия оказывается пропорциональной $n^{1/3}$. Именно такая зависимость потенциальной энергии от концентрации электронов была получена в работе [12]. Поскольку $n^{1/3} \propto |\psi(z)|^{2/3}$, потенциальная энергия оказывается недостаточно быстро убывающей функцией z , что приводит к неограниченному нарастанию числа состояний, которые необходимо включить в процедуру решения.

Подставляя далее в (8) $D = 1$ и одномерную плотность $\delta \tilde{n}(z)$ из (7), мы получаем функционал плотности обменной энергии в виде

$$E_{\text{ex}}(\delta \tilde{n}(z)) = -\frac{1}{2} \left[\frac{3}{\pi} \right]^{1/3} \frac{e^2}{2} \int dz [\delta \tilde{n}(z)]^2 \quad (9)$$

и потенциальную энергию

$$eV_{\text{ex}}(z) = \frac{\delta E_{\text{ex}}(\delta \tilde{n}(z))}{\delta [\delta \tilde{n}(z)]} = -\left[\frac{3}{\pi} \right]^{1/3} \frac{e^2}{2} \delta \tilde{n}(z). \quad (10)$$

Таким образом, в случае систем с неоднородностью в одном направлении приближение локальной плотности для обменной энергии приводит к потенциальной энергии, сильно зависящей от волновой функции как $\delta \tilde{n}(z) \propto |\psi(z)|^2$. Этот результат существенно отличается от слабой зависимости $n^{1/3} \propto |\psi(z)|^{2/3}$, полученной в работе [12]. Полученное нами выражение (10) обеспечивает сходимость процедуры самосогласования для двух типов решения, как в приближении Хартри [10].

Далее необходимо отметить то обстоятельство, что функционал плотности обменной энергии [14] был получен для свободных электронов и абсолютная величина (10) соответствует свободным электронам. Как было показано в [15], наблюдаемое в оптических экспериментах сужение запрещенной зоны с увеличением концентрации электронов, обусловленное обменным взаимодействием, существенно отличается от теоретической величины. Это прежде всего можно объяснить тем, что свойства электронов в твердом теле могут заметно отличаться от свойств свободных электронов, особенно при высоких концентрациях, что не учитывается в простом приближении эффективной массы [15]. В случае кристаллов InN сужение запрещенной зоны составляет величину порядка 20% от теоретического значения, что заметно меньше, чем в случае GaN и

особенно в GaAs. Этот факт, как и непараболичность дисперсии электронной зоны, указывает на значительное отступление от простого приближения эффективной массы в случае InN.

Для того чтобы учесть различия в теоретической и экспериментальной величинах обменной энергии, мы введем поправочный коэффициент α . В результате имеем окончательно

$$eV_{\text{ex}}(z) = - \left[\frac{3}{\pi} \right]^{1/3} \frac{\alpha e^2}{2} \delta \tilde{n}(z). \quad (11)$$

3. Сравнение с экспериментальными данными

Для того чтобы получить характеристики типичного аккумуляционного слоя InN, мы используем карту интенсивности фототока, представленную на рис. 3 из работы [9], которая дает информацию о дисперсии электронной зоны. Дисперсия зоны проводимости в параболическом приближении аппроксимируется эффективной массой $m^* = 0.15m_0$. Для учета непараболичности мы используем выражение

$$\epsilon(k) = \left\{ \sqrt{\frac{E_0 \hbar^2 k^2}{2m_\Gamma} + \frac{E_0^2}{4}} - \frac{E_0}{2} \right\},$$

что соответствует линейному возрастанию эффективной массы с увеличением кинетической энергии [10] $m^* = m_\Gamma(1 + E/E_0)$, где m_Γ — эффективная масса в Γ -точке ($m_\Gamma = 0.07m_0$) и E_0 — параметр непараболичности ($E_0 = 0.4$ эВ). Энергия Ферми для образца с концентрацией электронов $4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ с учетом непараболичности равна 0.330 эВ. Глубина локализации основного состояния двумерной зоны относительно дна зоны проводимости составляет $E_1 = -0.47$ эВ. Близкие значения параметров были получены ранее в [10] для образца с концентрацией электронов $6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [9].

Результаты самосогласованных вычислений электронных плотностей для двух двумерных зон и конфигурации потенциальных ям в параболическом и непараболическом приближениях представлены на рис. 1, $a-d$.

Электронные плотности на рис. 1, a, b имеют структурные особенности, обусловленные наличием двух двумерных зон. На рис. 1, c, d показаны соответствующие изгибы зоны проводимости и валентной зоны, величина вклада обменного взаимодействия и неоднородное сужение ширины запрещенной зоны за счет обменного электрон-электронного взаимодействия. Сужение запрещенной зоны вызвано тем, что кулоновский потенциал (2) дает одинаковые вклады как в изгиб зоны проводимости, так и в изгиб валентных зон, а вклад обменного потенциала (11) существует только для зоны проводимости.

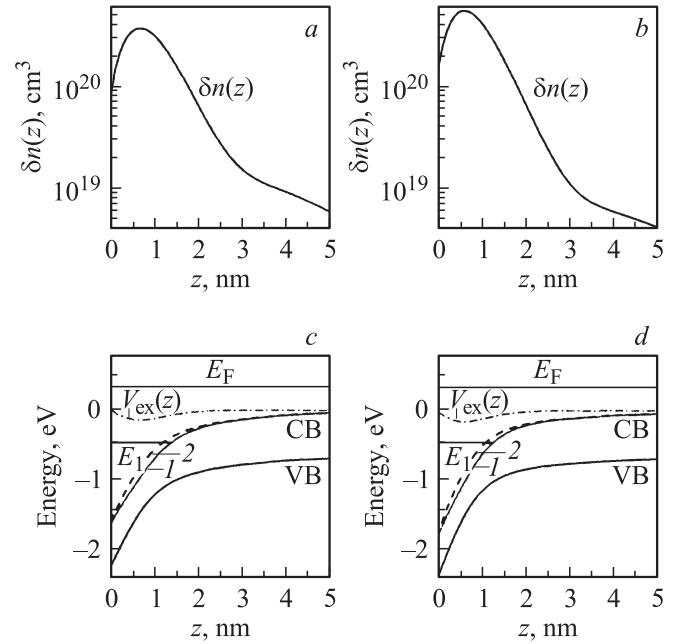


Рис. 1. Неоднородные плотности электронов в аккумуляционном слое $\delta n(z)$ в параболическом (a) и непараболическом (b) приближениях при $\epsilon = 7.16$. Высота барьера кристалл–вакуум взята равной 6 эВ. Плотности поверхностного заряда, 10^{13} см^{-2} : a — 5.20, b — 6.76. Изгибы зон проводимости и валентной в параболическом (c) и непараболическом (d) приближениях. $V_{\text{ex}}(z)$ — потенциальная энергия обменного взаимодействия при $\alpha = 0.18$. Разность между кривыми 1 и 2 дает неоднородное сужение запрещенной зоны, обусловленное обменным взаимодействием $V_{\text{ex}}(z)$. E_1 — основное состояние двумерных зон, представляющее собой квантовую границу электронных состояний в аккумуляционном слое. E_F — энергия Ферми, соответствующая концентрации электронов $4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

Представляется интересным сравнить характеристики аккумуляционного слоя, вычисленные с использованием экспериментальных данных [9], с данными других авторов, полученных на образцах InN, имеющих различное происхождение.

Вначале мы сравним вычисленные плотности электронов рис. 1, a, b с распределением плотности электронов, полученным из вольт-емкостных измерений работы [7] для двух различных образцов InN. На рис. 2 показано, что вычисленные и экспериментальные данные находятся в хорошем согласии.

Далее для сравнения мы используем зависимость концентрации электронов от толщины образца, которая была установлена в работе [1]. Авторы [1] связывали изменение холловских данных по концентрации с изменением толщины образца с различным вкладом аккумуляционного слоя на поверхности (и на интерфейсе) пленки InN в общее содержание электронов в образце. Модель, описывающая различные вклады в изменение концентрации электронов с толщиной образца, была рассмотрена в работе [16]. На рис. 3 представлена

зависимость средней концентрации электронов от толщины образца с использованием данных рис. 1, *b*. Для простоты мы рассмотрели единственный механизм такой зависимости, который связан с аккумуляционным слоем

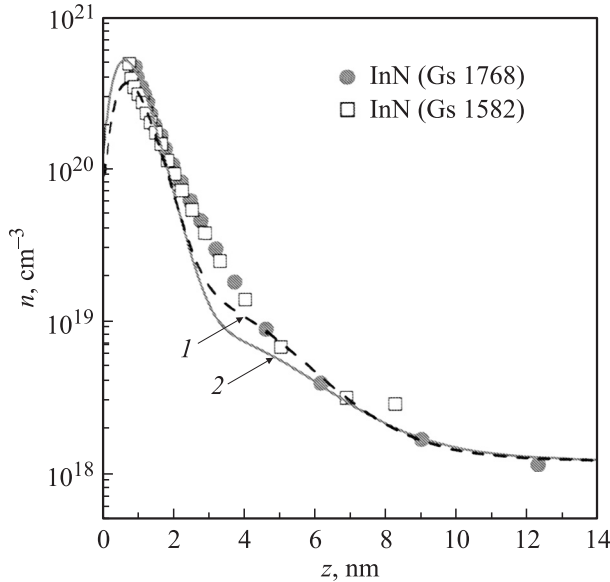


Рис. 2. Плотности электронов в аккумуляционном слое по данным вольт-емкостных измерений [7] для двух пленок InN (символы). Кривые 1 и 2 — полные плотности $n(z) = n_b + \delta n(z)$ для функций $\delta n(z)$ (рис. 1), вычисленных в параболическом (1) и непараболическом (2) приближениях; $n_b = 1.2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ — концентрация электронов в объеме.

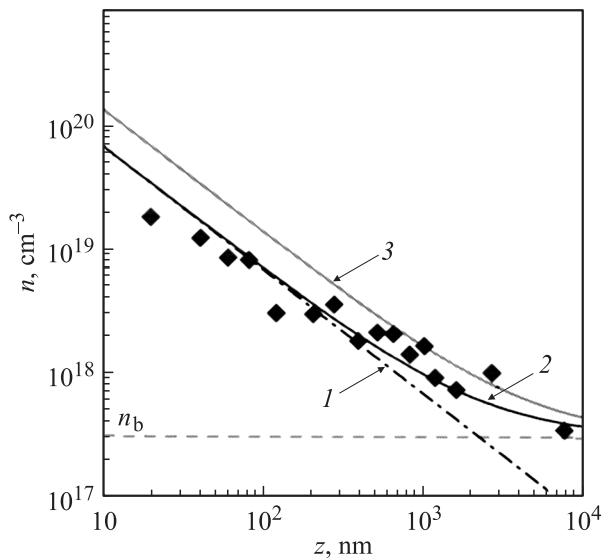


Рис. 3. Усредненные плотности электронов n_{av} в зависимости от толщины образца $T = z$, вычисленные по формулам $n_{av} = Q_s/T$ (кривая 1), $n_{av} = Q_s/T + n_b$ (кривая 2) и $n_{av} = 2Q_s/T + n_b$ (кривая 3), при объемной плотности $n_b = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ для плотности поверхностного заряда $\int dz \delta n(z) = Q_s = 6.76 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$, которой соответствует плотность электронов на рис. 1, *b*. Символы — данные холловских измерений из работы [17] для образцов InN разной толщины.

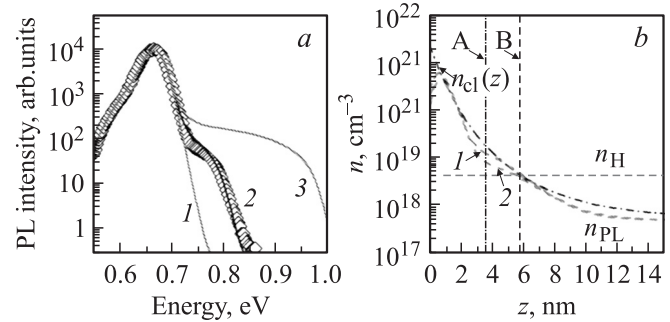


Рис. 4. Люминесценция образца InN с холловской концентрацией $n_H = 4.2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (а): 1 — вычисленный контур полосы люминесценции для однородного распределения электронов при концентрации $n_{PL} = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$; 2 и 3 — вычисленные контуры полосы люминесценции, когда вклад аккумуляционного слоя ограничен одной из вертикальных линий, показанных на рис. 4, *b*. Аппроксимация неоднородной плотности электронов $n_{cl}(z)$ в приближении Томаса–Ферми [8] (б): 1 и 2 — полные плотности электронов $n(z) = n_b + \delta n(z)$ для функций $\delta n(z)$, показанных на рис. 1 при $n_b = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Вертикальные линии (А и В) показывают границу между областями образца, принимающими (справа от вертикальных линий) и непринимающими (слева) участие в формировании полосы люминесценции.

на поверхности и с возможным влиянием двух аккумуляционных слоев на поверхности и на интерфейсе. На том же рисунке приведены данные холловских измерений концентрации [17] для серии образцов разной толщины, имеющих одинаковое происхождение. Можно отметить удовлетворительное согласие и в этом случае.

Как было показано в работе [8], в спектре межзонной рекомбинации в ряде образцов наблюдается высокоэнергетический хвост полосы люминесценции, который можно объяснить люминесценцией из области аккумуляционного слоя. Согласие с экспериментальным контуром полосы люминесценции было получено в [8] в рамках классической теории Томаса–Ферми при предположении, что в формирование полосы люминесценции дают вклад аккумуляционный слой (за исключением верхней части толщиной 5.7 нм) и объемная часть образца с концентрацией $n_0 = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ (кривая 2 на рис. 4). Как показано на рис. 4, в указанной области образца концентрация, полученная при использовании классической теории, и результаты вычислений, данные на рис. 1, *a, b*, хорошо согласуются. При этом можно заключить, что люминесценция из аккумуляционного слоя происходит за счет состояний второй более мелкой двумерной зоны, волновая функция которой проникает в объемную часть образца достаточно глубоко.

4. Заключение

В заключение отметим, что развитый в данной работе последовательный подход к задаче аккумуляционного слоя для полупроводников *n*-типа принимает во вни-

мание как кулоновское взаимодействие электронов с поверхностным зарядом и между собой, так и обменное электрон-электронное взаимодействие.

Авторы пользуются случаем поблагодарить В.Ю. Давыдова за постоянную помощь в работе и ценные замечания. Авторы также выражают свою благодарность проф. S. Gwo и проф. W. Walukiewicz за предоставленную возможность использовать их экспериментальные данные.

Эта работа осуществлялась при поддержке проектами РФФИ-НС (Тайвань) № 08-02-92003-ннс-а, РФФИ (№ 09-02-01280 и 06-02-16218), а также программ РАН („Спин-зависящие процессы в твердых телах и спинтронике“ и „Низкоэнергетические квантовые структуры“).

Список литературы

- [1] Hai Lu, W.J. Schaff, L.F. Eastman, C.E. Stutz. Appl. Phys. Lett., **82**, 1736 (2003).
- [2] I. Mahboob, T.D. Veal, C.F. McConville, H. Lu, W.J. Schaff. Phys. Rev. Lett., **92**, 036 804 (2004).
- [3] L.F.J. Piper, T.D. Veal, I. Mahboob, C.F. McConville, H. Lu, W.J. Schaff. Phys. Rev. B, **70**, 115 333 (2004).
- [4] I. Mahboob, T.D. Veal, L.F.J. Piper, C.F. McConville, Hai Lu, W.J. Schaff, J. Furthmüller, F. Bechstedt. Phys. Rev. B, **69**, 201 307 (2004).
- [5] T.D. Veal, L.F.J. Piper, M.R. Phillips, M.H. Zareic, Hai Lu, W.J. Schaff, C.F. McConville. Phys. Status Solidi A, **203**, 85 (2006).
- [6] S.X. Li, K.M. Yu, J. Wu, R.E. Jones, W. Walukiewicz, J.W. Ager III, W. Shan, E.E. Haller, H. Lu, W.J. Schaff. Phys. Rev. B, **71**, 161 201 (2005).
- [7] W. Walukiewicz, J.W. Ager III, K.M. Yu, Z. Liliental-Weber, J. Wu, S. X. Li, R.E. Jones, J.D. Denlinger. J. Phys. D: Appl. Phys., **39**, R83 (2006).
- [8] A.A. Klochikhin, V.Yu. Davydov, I.Yu. Strashkova, P.N. Brunkov, A.A. Gutkin, M.E. Rudinsky, H.-Y. Chen, S. Gwo. Phys. Status Solidi (RRL), **1**, 159 (2007).
- [9] Leyla Colakerol, T.D. Veal, Hae-Kyung Jeong, Lukasz Plucinski et al. Phys. Rev. Lett., **97**, 237 601 (2006).
- [10] A.A. Klochikhin, V.Yu. Davydov, I.Yu. Strashkova, S. Gwo. Phys. Rev. B, **76**, 235 325 (2007).
- [11] T. Ando. Phys. Rev. B, **13**, 3468 (1976).
- [12] Shuma Abe, Takeshi Inaoka, Masayuki Hasegawa. Phys. Rev. B, **66**, 205 309 (2002).
- [13] N.H. March. In: *Theory of the inhomogeneous electron gas*, ed. by S. Lundqvist, N.H. March (Plenum Press, N.Y.-London, 1983).
- [14] W. Kohn, L.J. Sham. Phys. Rev., **140**, A1133 (1965).
- [15] В.Ю. Давыдов, А.А. Клочихин. ФТП, **38**, 897 (2004). [Semiconductors, **38**, 861 (2004)].
- [16] V. Cimalla, V. Lebedev, F.M. Morales, R. Goldhahn, O. Ambacher. Appl. Phys. Lett., **89**, 172 109 (2006).
- [17] Hai Lu, William J. Schaff, Lester F. Eastman, J. Wu, Wladek Walukiewicz, David C. Look, Richard J. Molnar. Mater. Res. Soc. Symp. Proc., **743**, L4.10.1 (2003).

Редактор Т.А. Полянская

Quantum solution to the problem of n -InN accumulation layer

A.A. Klochikhin^{*+}, I.Yu. Strashkova^{*}

^{*} Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences, 194021 St. Petersburg, Russia

⁺ Institute for Nuclear Physics, Russian Academy of Sciences 188350 St. Petersburg, Russia

Abstract The exchange interaction in the Kohn–Sham local density approximation is considered in the planar accumulation layer problem of n -type InN. The applicability of the theory is demonstrated by using recent literature data. The approach developed provides more solid data on the accumulation layer parameters.