

Влияние эффектов размерного квантования на эффективную массу основных носителей заряда в светодиодных гетероструктурах со множественными квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

Е.Р. Бурмистров,^{1,*} Л.П. Авакянц^{1,†}

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 07.04.2024; после доработки 18.04.2024; подписана в печать 24.04.2024)

Путем численного самосогласованного решения системы уравнений Шредингера и электро-нейтральности Пуассона рассчитаны зонные диаграммы светодиодных гетероструктур со множественными квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Изучено влияние электрон-фононного взаимодействия, непараболичности закона дисперсии и гибридизации волновой функции на значения эффективной массы основных носителей заряда в квантовых ямах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Длинноволновое смещение 2Д-плазмонных резонансов связывается с температурной перенормировкой эффективной массы двумерных носителей. Для описания температурной зависимости эффективной массы вводится функция смещения 2Д-плазмонной резонансной частоты.

PACS: 78.47.+p, 71.22.+i, 72.90.+y УДК: 538.9

Ключевые слова: гетероструктуры, эффективная масса, закон дисперсии, температурная перенормировка, длинноволновое смещение.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.79.2440401](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.79.2440401)

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время интенсивно изучается плазмонное детектирование терагерцевого излучения ($\sim 10^{12}$ Гц) в низкоразмерных электронных системах [1, 2]. Поскольку длина волны двумерного (2Д)-плазмона на три порядка меньше, чем длина волны терагерцевого излучения, необходимо использовать структуру, связывающую электрическое поле терагерцевого излучения с электрическим полем 2Д-плазмона. В работе [3] в качестве такой структуры используется решетчатый затвор, выращенный на поверхности гетероструктуры $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ методом электронно-лучевой литографии. Генерация плазмонных осцилляций осуществляется под действием падающего на гетероструктуру $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ терагерцевого излучения. Электрическое поле плазмона локализуется под металлическими полосами решетчатого затвора, а сам плазмон возбуждается в режиме «сильной связи» [3].

Гетероструктуры $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ с решетчатым затвором демонстрируют резонансное поведение под действием падающего терагерцевого излучения, связанное с возбуждением в активной области поверхностных плазмонных волн. Авторами работы [4] установлено, что с ростом температуры эффективная масса основных носителей заряда в КЯ $\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ увеличивается от значения $0.22m_0$ при $T = 80$ К до $0.34m_0$ при $T = 280$ К.

В работе [4] гетероструктуры со множественными квантовыми ямами (МКЯ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaIn}$ используются в качестве источников терагерцевого излучения. Показано, что гетероструктуры со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaIn}$ преобразуют фемтосекундные лазерные ИК-импульсы в терагерцевые электромагнитные волны.

Циклотронный резонанс является одним из немногих прямых методов определения эффективной массы основных носителей зарядов в твердых телах [5, 6]. В гетероструктурах с МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaIn}$ ее значение зависит от мольной доли In (x_{In}) в материале $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Параметр x_{In} неодинаков для разных производителей образцов, а между тем именно мольная доля In определяет как ширину запрещенной зоны КЯ, так и эффективную массу носителей заряда в ней. При мольной доле In равной 10% эффективная масса носителей заряда в КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaIn}$ составляет $0.22m_0$ [7, 8].

При взаимодействии ближнего ИК-излучения (800 нм) с гетероструктурами $\text{InGaIn}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ движение носителей заряда в КЯ характеризуется большой эффективной массой [4]. При температуре, равной 90 К, ее среднее значение составляет $0.42m_0$. Такой результат может быть обусловлен электрон-фононным рассеянием, неоднородным распределением концентрации In в слое $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ или эффектами поляризации на гетерогранице.

Температурная перенормировка эффективной массы в гетероструктурах $\text{InGaIn}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ в полной мере не изучена на сегодняшний день. Данный эффект нельзя объяснить переходом от примесной к собственной проводимости, в результа-

* E-mail: eugeni.conovaloff@yandex.ru

† E-mail: avakyants@genphys.phys.msu.su

те которого увеличивается концентрация основных носителей заряда в КЯ. Измерения показали, что в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ значение холловской концентрации в диапазоне температур от 90 до 170 К остается постоянным [4].

Основной целью данной работы является изучение влияния электрон-фононного взаимодействия, гибридизации волновой функции и непараболичности закона дисперсии на эффективную массу основных носителей заряда в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

1. МЕХАНИЗМ ГЕНЕРАЦИИ ТЕРАГЕРЦЕВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Настоящая работа основана на результатах ранее проведенных исследований по взаимодействию ближнего ИК-излучения с гетероструктурами $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ [4]. В работе [4] в качестве источника излучения применяется Ti:сапфировый лазер, настроенный на длину волны 800 нм, со средней выходной мощностью 57 мВт и с частотой следования импульсов 60 МГц. Гетероструктуры со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ используются для преобразования фемтосекундных лазерных импульсов в терагерцевые электромагнитные волны. Мощность терагерцевого излучения в случае гетероструктур с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ составила 3 мВт и 8 мкВт.

Механизм генерации терагерцевого излучения заключается в следующем. Поскольку Ti:сапфировый лазер настроен на длину волны 800 нм, используемый квант света имеет энергию 1.55 эВ. Ширина запрещенной зоны в области КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ равна 2.6 эВ. В результате двухфотонного поглощения лазерных импульсов длительностью 130 фс в КЯ возникают пространственно разделенные электроны и дырки. Под действием встроенного электрического поля электрон-дырочная пара становится поляризованной [4]. Это ведет к генерации переменного во времени дипольного момента $\mathbf{P}(t)$ в системе, который, в свою очередь, приводит к излучению терагерцевых электромагнитных волн [4].

Полярность генерируемых диполей противоположна полярности встроенного в гетероструктурах $\text{InGaIn}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ электрического поля. Электромагнитное терагерцевое излучение возникает в результате сверхбыстрой динамики электрической поляризации, в ходе которой фотовозбужденные электрон-дырочные пары частично экранируют встроенное электрическое поле. Полное его экранирование приводит к уменьшению механических тангенциальных напряжений между слоями $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и GaN. Это, в свою очередь, ведет к выравниванию потенциального рельефа активной области (состояние плоских зон). Данный процесс можно рассматривать как «обратный» пьезоэлектрический эффект. Уменьшение напряженности встроенного электрического поля сопровождается

снижением деформации кристаллической решетки. С ростом температуры эффективная масса основных носителей заряда в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ увеличивается от значения $0.42m_0$ при $T = 90$ К до $0.56m_0$ при $T = 170$ К.

2. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

2.1. Эффект гибридизации волновой функции

Ширина запрещенной зоны нелегированного нитрида галлия GaN при комнатной температуре составляет $E_g^{\text{GaN}} = 3.4$ эВ [9, 10]. Ширина запрещенной зоны тройного соединения $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ зависит от значения параметра x_{In} и может быть рассчитана по следующей эмпирической формуле [9, 10]: $E_g^{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = 0.675x_{\text{In}} + 3.44(1 - x_{\text{In}}) - 1.3(1 - x_{\text{In}})x_{\text{In}}$. В исследованных гетероструктурах содержание In составляет $x_{\text{In}} = 23\%$. Поэтому ширина запрещенной зоны в области КЯ равна $E_g^{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = 2.6$ эВ.

В серийном производстве готовых светодиодных устройств на основе МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ используется рост вдоль полярного направления [0001] гексагонального GaN. В результате пьезоэлектрической и спонтанной поляризации на гетерогранице формируются встроенные электрические поля с напряженностью порядка единиц МВ/см. Величину пьезоэлектрической поляризации, вызванной расгласованием постоянных кристаллических решеток $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и GaN, можно оценить по следующей формуле:

$$P_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{pz} = 2\varepsilon(e_{31} - e_{33}(C_{11}/C_{33})), \quad (1)$$

где

$$\varepsilon = \frac{a^{\text{GaN}} - x_{\text{In}}a^{\text{InN}} - (1 - x_{\text{In}})a^{\text{GaN}}}{x_{\text{In}}a^{\text{InN}} + (1 - x_{\text{In}})a^{\text{GaN}}}. \quad (2)$$

Формулы (1) и (2) содержат компоненты пьезоэлектрического тензора e_{33}, e_{31} , константы упругой деформации C_{11}, C_{33} и постоянные кристаллических решеток GaN и InN.

Для учета влияния встроенных пьезоэлектрических полей на форму волновых функций и положение энергетических уровней в КЯ в настоящей работе производилось численное самосогласованное решение системы уравнений Пуассона для электростатического потенциала $\varphi(z)$ и Шредингера в приближении эффективной массы в форме БенДаниэла-Дюка [11]:

$$\varepsilon_0 \frac{d}{dz} \left[\varepsilon(z) \frac{d\varphi(z)}{dz} \right] = -\rho(z) + \frac{dP_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{pz}(z)}{dz}, \quad (3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \psi_i(z) \right] - e\varphi(z)\psi_i(z) + \Delta E_C(z)\psi_i(z) = E_i\psi_i(z), \quad (4)$$

где $\varepsilon(z)$ — зависящая от координаты диэлектрическая проницаемость, $\rho(z)$ — распределение электронной плотности в плоскости КЯ, $m^*(z)$ — эффективная масса основных носителей заряда, E_i — энергия i -го энергетического уровня с волновой функцией $\psi_i(z)$ в КЯ, $\Delta E_C(z)$ — разрыв зоны проводимости на гетерогранице.

Волновые функции $\psi_i(z)$ в уравнении (4) удовлетворяют граничным условиям:

$$\begin{cases} \psi_{GaN}(z=0-) = \psi_{InGaN}(z=0+), \\ \psi_{InGaN}(z=L_a-) = \psi_{GaN}(z=L_a+), \\ \left. \frac{1}{m_{GaN}^*(z)} \frac{d\psi_{GaN}(z)}{dz} \right|_{z=0-} = \left. \frac{1}{m_{InGaN}^*(z)} \frac{d\psi_{InGaN}(z)}{dz} \right|_{z=0+}, \\ \left. \frac{1}{m_{InGaN}^*(z)} \frac{d\psi_{InGaN}(z)}{dz} \right|_{z=L_a-} = \left. \frac{1}{m_{GaN}^*(z)} \frac{d\psi_{GaN}(z)}{dz} \right|_{z=L_a+} \end{cases} \quad (5)$$

и условию нормировки

$$\int_0^{L_a} |\psi_i(z)|^2 dz = 1, \quad (6)$$

где L_a — ширина КЯ.

В процессе решения уравнения Пуассона (3) использовались следующие граничные условия для электростатического потенциала $\varphi(z)$:

$$\begin{cases} \varphi(0) = \varphi(L_a) = \varphi_b, \\ \left. \varepsilon_{GaN} \frac{\partial \varphi_{GaN}(z)}{\partial z} \right|_{z=0-} = \left. \varepsilon_{InGaN} \frac{\partial \varphi_{InGaN}(z)}{\partial z} \right|_{z=0+}, \\ \left. \varepsilon_{InGaN} \frac{\partial \varphi_{InGaN}(z)}{\partial z} \right|_{z=L_a-} = \left. \varepsilon_{GaN} \frac{\partial \varphi_{GaN}(z)}{\partial z} \right|_{z=L_a+} \end{cases} \quad (7)$$

где φ_b — встроенный электростатический потенциал на гетерогранице, ε_{GaN} , ε_{InGaN} — диэлектрические проницаемости области барьера и КЯ. Концентрация основных носителей заряда в КЯ $\rho(z)$ рассчитывалась через локальную плотность состояний

$$\rho(z) = \frac{m^*(z)k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_i \ln(1 + \exp(\frac{E_F - E_i}{k_B T})) |\psi_i(z)|^2, \quad (8)$$

где k_B — постоянная Больцмана, T — температура, E_F — квазиуровень Ферми. В формуле (8) суммирование проводится по всем подзонам размерного квантования в КЯ.

Система уравнений (3)–(4) не решается аналитически. Для ее решения использовался блочно-итерационный алгоритм, включающий в себя самосогласованное решение двух дифференциальных уравнений (3) и (4). С его помощью удалось определить потенциальный рельеф одиночной КЯ, форму волновых функций и положение энергетических уровней с учетом влияния встроенных пьезоэлектрических полей. Уравнение Шредингера решалось методом «step-by-step» [12, 13]. Для решения уравнения Пуассона использовался метод Ньютона [14]. Процесс нахождения самосогласованного решения методом итераций состоял из пяти этапов:

1. Выбор начального приближения для $\varphi(z)$.
2. Решение уравнения Шредингера.

3. Расчет концентрации носителей заряда $\rho(z)$.
4. Решение уравнения Пуассона. Получение потенциала для следующей итерации решения уравнения Шредингера.
5. Проверка критерия сходимости.

Алгоритм, в состав которого входит итерационный цикл, был написан в интегрированной среде разработки PyCharm на языке Python 3.12.0. Окончание итерационного цикла выполнялось при условии достижения максимальной поправки к электростатическому потенциалу $\varphi(z)$, не превышающей 10^{-6} В.

Активная область исследуемых гетероструктур состоит из нескольких периодов $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. При толщине барьеров более 35\AA размытие квантово-размерных энергетических уровней в КЯ составляет менее 1.5 мэВ. Встроенные электрические поля приводят к искривлению потенциального рельефа одиночной КЯ. Методом фототоковой спектроскопии (PSC) установлено, что в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ напряженность встроенных электрических полей достигает 3 МВ/см [4]. Все это позволило в качестве начального приближения для самосогласованного расчета использовать результаты (энергии и волновые функции), полученные аналитически для одиночной треугольной КЯ.

При переходе через гетерограницу значения эффективной массы, диэлектрической проницаемости и электростатического потенциала домножались на сглаживающую функцию. Это было сделано для обеспечения соответствия используемой модели физическим процессам в исследуемых гетероструктурах. Математически резкий переход не представляет физического интереса. Вычисления были проведены для концентрации основных носителей заряда $N_{2DEG} = 2.2 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при $T = 300 \text{ К}$.

Влияние эффекта гибридизации на эффективную массу основных носителей зарядов КЯ можно оценить, рассчитав приведенную эффективную массу, которая выражается через эффективные массы основных носителей заряда в КЯ и в барьере GaN [15]:

$$\frac{1}{m_i^*} = \frac{1}{m_{InGaN}^*} [1 - P_{GaN}(E_i)] + \frac{1}{m_{GaN}^*} P_{GaN}(E_i), \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} P_{GaN} &= \int_{-L_b}^0 dx |\psi_{GaN}(x)|^2, \\ P_{InGaN} &= \int_0^{L_a} dx |\psi_{InGaN}|^2, \\ P_{gen} &= P_{GaN} / (P_{GaN} + P_{InGaN}). \end{aligned} \quad (10)$$

$P_{GaN}(E_1)$, $P_{InGaN}(E_1)$ — вероятность обнаружения основных носителей заряда на возбужденном энергетическом уровне в области барьера и КЯ.

Для расчета вероятностей использовались волновые функции в приближении треугольной КЯ:

$$\begin{aligned} \psi_{GaN}(z) &= C_1 \exp(k_{GaN}z), \quad x < 0, \\ \psi_{InGaN}(z) &= (z+a)C_2 \exp(-bz/2), \quad x \geq 0 \end{aligned} \quad (11)$$

с граничными условиями (5) и условием нормировки

$$\int_{-L_b}^0 |\psi_{GaN}(z)|^2 dz + \int_0^{L_a} |\psi_{InGaN}(z)|^2 dz = 1, \quad (12)$$

где $\psi_{GaN}(z)$, $\psi_{InGaN}(z)$ — волновые функции основных носителей заряда в области барьера и КЯ, L_a, L_b — ширина $In_xGa_{1-x}N$ и GaN, C_1, C_2, a — константы, $k_{GaN} = \sqrt{2m_{GaN}^*U_0/\hbar^2}$, U_0 — высота потенциального барьера. Значения $U_0, m_{GaN}^*, m_{InGaN}^*$ подбирались с целью соответствия ψ_{GaN} и ψ_{InGaN} с формой волновых функций, полученных в результате самосогласованного решения системы уравнений Шредингера и Пуассона.

С использованием условия нормировки (12) были определены следующие выражения для констант:

$$\begin{aligned} a &= 1/(k_{GaN} + b), \quad C_1 = aC_2, \\ C_2 &= \sqrt{1/(a^2/k_{GaN} + 2/b^3 + 2a/b^2 + a^2/b)}, \quad (13) \\ b &= (33\pi m_{InGaN}^* N_{2DEG} / 2\varepsilon_0)^{1/3} (e/\hbar)^{2/3}, \end{aligned}$$

которые вместе с волновыми функциями (11) использовались для вычислений вероятностей (10).

3. ЭФФЕКТ НЕПАРАБОЛИЧНОСТИ ЗОНЫ ПРОВОДИМОСТИ

В квантово-размерных структурах на основе МКЯ $In_xGa_{1-x}N/GaN$ встроенные электрические поля могут влиять на параболичность закона дисперсии носителей заряда в зоне проводимости E_C .

Т. Хиросима и Р. Ланг предположили, что непараболичность закона дисперсии основных носителей заряда в зоне проводимости приводит к увеличению их эффективной массы [16]. Оценить величину данного эффекта можно в рамках двухзонной модели Кейна [17]:

$$m_F^* = m_0^* \sqrt{(1 + 4(\langle E_K \rangle + E_F)/E_g^{In_xGa_{1-x}N})}, \quad (14)$$

где m_F^* и m_0^* — значения эффективной массы квазиуровня Ферми и основного энергетического уровня, $\langle E_k \rangle = E_0/3$ — средняя кинетическая энергия двумерного электронного газа (2ДЭГ) в модели треугольной КЯ.

4. ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Исследования электрон-фононного взаимодействия в гетероструктурах со МКЯ $In_xGa_{1-x}N/GaN$

проводились ранее, например, в работе [18]. В гетероструктурах $InGaN/AlGaN/GaN$ связь между основными носителями в КЯ и продольными оптическими (ЛО)-фононами в барьере GaN носит дальнедействующий характер, так как осуществляется посредством электрического поля поляризационной волны [19].

Интенсивность электрон-фононного взаимодействия зависит от диэлектрического окружения и концентрации 2ДЭГ, а также от толщины КЯ. В гетероструктурах $InGaN/AlGaN/GaN$ взаимодействие между основными носителями и ЛО-фононами характеризуется значением константы Фрёлеха $\alpha = 0.49$, что говорит о промежуточном характере связи [20].

При взаимодействии носителей заряда с интерфейсными ЛО-фононами дискретные энергетические уровни в КЯ могут смещаться, что, в свою очередь, сопровождается увеличением эффективной массы

$$m_p^* = m_F^*(1 + \pi\alpha I/8), \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} I &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{z^3(8\beta^3 + 9\beta^2z + 3\beta z^2)}{(1+z^2)^3(z+\gamma)(z+\beta)^3} dz, \quad (16) \\ \gamma &= q_{TF}/q_0, \quad \beta = b/q_0. \end{aligned}$$

Формулы (15)–(16) содержат волновой вектор в модели экранирования Томаса–Ферми $q_{TF} = m_F^*e^2/\varepsilon_0\hbar^2$ и волновой вектор ЛО-фонона $q_0 = \sqrt{2m_{GaN}^*\omega_{LO}/\hbar^2}$ с частотой $\omega_{LO} = 732.4 \text{ см}^{-1}$ [16, 21].

5. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА ПО ДАННЫМ THZ-TDS

Из закона дисперсии стробируемых 2Д-плазменных следует, что квадрат частоты плазмонного резонанса обратно пропорционально зависит от эффективной массы носителей заряда [4]. Так как эффективная масса является функцией температуры, то квадрат частоты 2Д-плазмонного резонанса также зависит от температуры:

$$f_{g,n}^2(T) \cong \frac{A}{m^*(T)}, \quad (17)$$

где A — нормировочная постоянная.

При взаимодействии ближнего ИК-излучения с гетероструктурами $InGaN/AlGaN/GaN$ частоты 2Д-плазмонных резонансов испытывают длинноволновое смещение в диапазоне температур от 90 до 170К [4]. Поэтому в качестве нормировочной константы A в выражении (17) следует брать значение квадрата частоты 2Д-плазмонного резонанса при пороговой температуре $T = 90 \text{ К}$:

$$m^*(T) \cong f_{g,n}^2(90\text{К})/f_{g,n}^2(T) = \Xi(T). \quad (18)$$

Таким образом, в формуле (18) мы осуществили переход от абсолютных значений квадратов резонансных частот $f_{g,n}^2$ к их относительным величинам. Определим функцию смещения 2Д-плазменной резонансной частоты:

$$\Xi(T) = f_{g,n}^2(90K)/f_{g,n}^2(T). \quad (19)$$

С ее помощью можно исследовать температурную зависимость эффективной массы основных носителей заряда в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

В настоящей работе для моделирования функции температурного сдвига 2Д-плазменных резонансов $\Xi(t)$ используется следующее выражение:

$$\Xi_{sim}(T) = 1 + \alpha \exp\left(\frac{T}{90K}\right)^\beta, \quad (20)$$

где α и β — неизвестные постоянные. Для определения их значений прологарифмируем обе части выражения (20):

$$\ln(\Xi - 1) = \ln \alpha + (T/90K)^\beta. \quad (21)$$

Вводя обозначение $\ln \alpha = C$, получим, что $\ln(\Xi - 1)$ является степенной функцией нормированной температуры $T/90K$ с постоянными коэффициентами C и β :

$$\ln(\Xi - 1) = C + (T/90K)^\beta. \quad (22)$$

Таким образом, решая систему линейных уравнений (22), можно определить значения неизвестных α и β .

В настоящей работе функция (20)

$$m^*(T)/m_0 \cong 1 + \alpha \exp\left(\frac{T}{90K}\right)^\beta \quad (23)$$

используется для описания температурной зависимости эффективной массы носителей заряда в гетероструктурах с МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В качестве исходных параметров в процессе самосогласованного решения системы дифференциальных уравнений (3-4) использовались данные, значения которых представлены в табл. 1.

Характерной особенностью гетероструктур со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ являются малые значения спонтанной поляризации $P_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{sp}$ в слое $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (табл. 1). Следовательно, основное влияние на динамику носителей заряда в КЯ оказывают встроенные пьезоэлектрические поля.

На рис. 1, а, б представлены энергетические диаграммы одиночной КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ шириной 2.5 и 3 нм, полученные на основании самосогласованного решения системы уравнений Шредингера (3) и электронейтральности Пуассона (4). На рис. 1, в, г, д, е показаны формы волновых функций

Таблица 1. Параметры гетероструктур со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

x_{In}	0.23
φ_b , эВ	1.3
$E_g^{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}$, эВ	2.6
E_g^{GaN} , эВ	3.4
ε_{GaN}	9.5
$\varepsilon_{\text{InGaN}}$	12.2
a^{GaN} , нм	0.31
a^{InGaN} , нм	0.33
P_{GaN}^{sp} , Кл/м ²	-0.029×10^{-6}
$P_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{sp}$, Кл/м ²	-0.032×10^{-6}
$P_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{pz}$, Кл/м ²	0.092×10^{-6}

носителей заряда на основном E_0 и возбужденном E_1 энергетических уровнях.

Решение уравнения Шредингера показало, что в КЯ заселены только два энергетических уровня со значениями энергий $E_0 = 2.7$ эВ и $E_1 = 3.4$ эВ (рис. 1, а), а также $E_0 = 2.4$ эВ и $E_1 = 3.1$ эВ (рис. 1, б). Энергетические уровни расположены ниже квазиуровня Ферми, величина которого составляет 3.4 эВ (рис. 1, а, б).

Численное решение уравнения Пуассона позволило установить отклонение электростатического потенциала от прямоугольной формы вследствие воздействия встроенных пьезоэлектрических полей. Потенциальный профиль одиночной КЯ приближен к треугольному (рис. 1, а, б).

В гетероструктурах с МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ хвост волновой функции основных носителей заряда в КЯ частично локализован в области барьера GaN (рис. 1, г, д). Следовательно, эффект гибридизации волновой функции может приводить к увеличению эффективной массы носителей заряда в КЯ. Так как максимум плотности вероятности нахождения носителя заряда на возбужденном энергетическом уровне локализован ближе к гетерогранице, чем на основном, то его волновая функция проникает в область барьера GaN на большую глубину. В табл. 2 представлены значения эффективной массы двумерных носителей, рассчитанные с использованием формул (9)–(10).

В исследованных гетероструктурах ширина барьера GaN составляет 15 нм при ширине КЯ, равной 3 нм. Изолированность КЯ приводит к тому, что хвост волновой функции проникает в GaN лишь на небольшую глубину. В силу малого значения вероятности P_{gen} , равного 1.1%, гибридизация волновой функции вызывает незначительное увеличение эффективной массы носителей заряда в гетероструктурах с МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ (табл. 2).

В одиночной КЯ квазиуровень Ферми значительно удален от дна зоны проводимости (рис. 1, а).

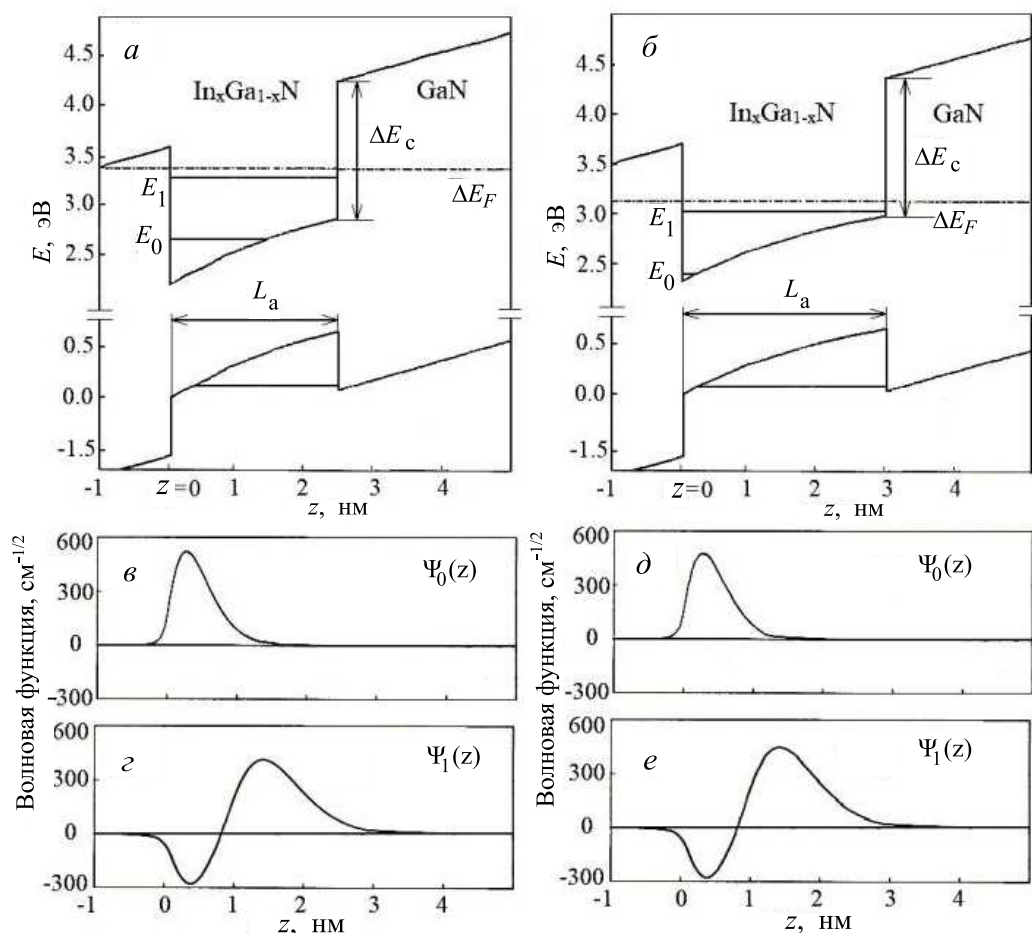


Рис. 1. Зонные диаграммы одиночной КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ (а) шириной 2.5 нм и (б) 3 нм, полученные на основании самосогласованного решения системы уравнений Шредингера и Пуассона. E_F — квазиуровень Ферми, E_0, E_1 — положения основного и возбужденного энергетических уровней, ΔE_C — разрыв зоны проводимости на гетерогранице. в, з, д, е — Формы волновых функций $\Psi_0(z), \Psi_1(z)$ на энергетических уровнях E_0 и E_1

Таблица 2. Рассчитанные значения параметров 2ДЭГ в гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

$P_{gen}, \%$	1.1
$E_F, \text{эВ}$	3.4
$E_0, \text{эВ}$	2.7
m_1^*	$0.23m_0$
m_{GaN}^*	$0.19m_0$
$U_0, \text{эВ}$	1.4

Следовательно, эффект непараболичности закона дисперсии должен проявляться сильнее для носителей заряда, локализованных вблизи квазиуровня Ферми. Вычисления с использованием формулы (10) показали, что вследствие нарушения параболичности закона дисперсии эффективная масса носителей заряда в зоне проводимости увеличивается лишь на 20% относительно значения, равного $0.22m_0$.

С ростом температуры от 90 до 170 К в гетероструктурах усиливается роль электрон-фонон-

ного взаимодействия. На основании численного интегрирования с использованием формулы (16) получены следующие значения: $I = 0.36$, $q_0 = 2.6 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$ и $m_p^*/m_F^* \approx 1.1$. Столь малая поправка дает основания не учитывать электрон-фононное взаимодействие и его влияние на изменение эффективной массы. Следовательно, электрон-фононное взаимодействие, гибридизация волновой функции и непараболичность закона дисперсии не приводят к увеличению эффективной массы основных носителей заряда до значения, равного $0.42m_0$ при $T = 90 \text{ К}$ [4].

Температурная перенормировка эффективной массы с масштабом порядка полутора раз может быть связана с особенностями взаимодействия ближнего ИК-излучения с гетероструктурами с МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. В табл. 3 представлены значения частот 2Д-плазмонных в диапазоне от 90 до 170 К, которые были получены ранее в работе [4]. В гетероструктурах с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ полное смещение плазмонной резонансной частоты составляет 700 ГГц и 600 ГГц (табл. 3).

Таблица 3. Значения частот 2Д-плазмонных резонансов в диапазоне температур от 90 до 170 К в гетероструктурах с МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

	T, K				
	90	110	130	150	170
$f_{g,n}^{3QW}$, ТГц	3.3	3.2	3.2	2.9	2.6
$f_{g,n}^{5QW}$, ТГц	3.4	3.3	3.3	3.0	2.8

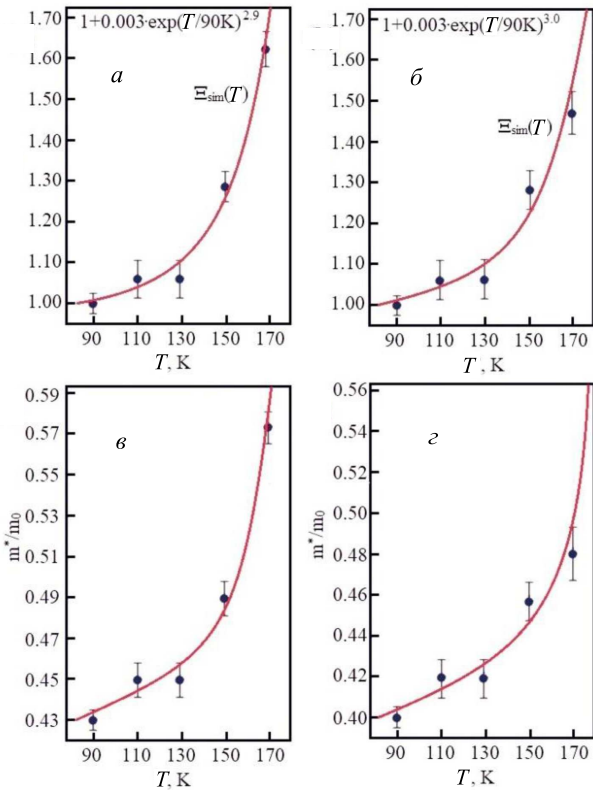


Рис. 2. (а,б) Функция смещения 2Д-плазмонной резонансной частоты и (в,г) температурная зависимость эффективной массы основных носителей заряда в гетероструктурах с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. На рис. 2, в,г точками показаны экспериментальные значения эффективной массы, полученные ранее в работе [4]

Так же, как и авторы работы [3], мы связываем длинноволновое смещение плазмонной резонансной частоты с температурной перенормировкой эффективной массы, которая становится существенной при температурах $T > 90\text{K}$. Для аппроксимации температурной зависимости эффективной массы мы используем функцию смещения 2Д-плазмонной резонансной частоты (23). На рис. 2 показан результат такой аппроксимации.

В гетероструктурах с тремя и пятью КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ с ростом температуры от 90 до 170 К эффективная масса увеличивается на 40% и 20% относительно своего исходного значения при $T = 90\text{K}$ (рис. 2, в, г). Данный эффект может быть связан с неоднородным распределением концентрации In в области КЯ, возникающим в процессе послойного осаждения исследованных гетероструктур методом газовой фазной эпитаксии. Действительно, слой GaN осаждается при более высоких температурах (10000°C), чем слой $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (7000°C). Поэтому в процессе роста неизбежен процесс диффузии атомов In в GaN, что может приводить к их неравномерному распределению вдоль всего слоя $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, а также к их частичной локализации в области барьера GaN.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании численного самосогласованного решения системы уравнений Шредингера и электронейтральности Пуассона рассчитаны зонные диаграммы одиночной КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Показано, что в КЯ заполнены только два энергетических уровня, расположенные ниже квазиуровня Ферми. Форма потенциального рельефа одиночной КЯ приближена к треугольной.

Изучено влияние электрон-фононного взаимодействия, непараболичности закона дисперсии и гибридизации волновой функции на эффективную массу основных носителей заряда в КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. При оценке влияния каждого из них установлено, что температурная перенормировка эффективной массы со столь большим масштабом, порядка полутора раз, связана с особенностями взаимодействия фемтосекундных ИК-импульсов с гетероструктурами $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$. Данные эффекты не могут быть использованы в качестве объяснения температурной перенормировки эффективной массы двумерных носителей в гетероструктурах с МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

Для описания температурной перенормировки эффективной массы использована функция смещения 2Д-плазмонной резонансной частоты с экспоненциальным типом зависимости. В гетероструктурах со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ эффективная масса увеличивается от значения $0.42m_0$ при $T = 90\text{K}$ до $0.56m_0$ при $T = 170\text{K}$.

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «Базис».

[1] Popov V.V. // Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves 32, 1178 (2011).

[2] Schuster F., Coquillat D., Videliere H. et al. // Optics Express 19, 7827 (2011).

- [3] *Pashnev D., Kaplas T., Korotyeyev V.V. et al. // Appl. Phys. Lett.* **117**, 051105 (2020).
- [4] *Бурмистров Е.Р., Авакянц Л.П. // ЖЭТФ* **163**, 5, (2023).
- [5] *Syed S., Heroux J.B., Wang Y.J. et al. // Appl. Phys. Lett.* **83**, 4553 (2003).
- [6] *Tang N., Shen B., Wang M.J. et al. // Appl. Phys. Lett.* **88**, 172115 (2006).
- [7] *Pristousek M. // Appl. Phys. Lett.* **102**, 242105 (2013).
- [8] *Зубрилов А.С., Мельник Ю.В., Николаев А.Е. и др. // ФТП* **33**, 10 (1999).
- [9] *Schley P., Goldhahn R., Gobsch G. et al. // Physica Status Solidi (B)* **246**, 6 (2009).
- [10] *Pelb R.R., Caetano C., Marques M. et al. // Applied Physics Letters* **98**, 15 (2011).
- [11] *BenDaniel D.J., Duke C.B. // Phys. Rev. textbf152*, 683 (1966).
- [12] *Stern F., Sarma S.D. // Phys. Rev. B* **30**, 840 (1984).
- [13] *Stern F. // Phys. Rev. B* **5**, 4891 (1972).
- [14] *Фадеев М.А., Марков К.А.* Численные методы. Нижний Новгород: Издательство Нижегородского университета, 2005.
- [15] *Bastard G.* Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures. Les Editions de Physique, Paris, 1988.
- [16] *Hiroshima T., Lang R. // Appl. Phys. Lett.* **49**, 8 (1986).
- [17] *Ando T., Fowler A.B., Stern F. // Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [18] *Давыдов В.Н., Лапин А.Н., Задорожский О.Ф. // Изв. вузов. Физика* **64**, 3 (2021).
- [19] *Bernardini J.F., Fiorentini V., Vanderbilt D. // Phys. Rev. B* **56**, 10024 (1997).
- [20] *Drechsler M., Hofmann D.M., Meier B.K. et al. // Japan. J. of Appl. Phys.* **34**, 2, (1995).
- [21] *Hofmann T., Köhne P., Schüuche S. et al. // Appl. Phys. Lett.* **101**, 19 (2012).

Influence of Dimensional Quantization Effects on the Effective Mass of Major Charge Carriers in LED Heterostructures with $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ Multiple Quantum Wells

E.R. Burmistrov^a, L.P. Avakyants^b

*Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
Moscow 119991, Russia*

E-mail: ^a eugeni.conovaloff@yandex.ru, ^b avakyants@genphys.phys.msu.su

By numerically solving the self-consistent system of the Schrödinger equations and Poisson electroneutrality, zone diagrams of LED heterostructures with $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ multiple quantum wells have been calculated. The effect of electron–phonon interaction, nonparabolicity of the dispersion relation, and hybridization of the wave function on the values of the effective mass of major charge carriers in the $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ quantum wells has been studied. The long-wave shift of 2D-plasmon resonances is associated with the temperature renormalization of the effective mass of two-dimensional carriers. To describe the temperature dependence of the effective mass, the function for the displacement of the 2D-plasmon resonance frequency is introduced.

PACS: 78.47.+p, 71.22.+i, 72.90.+y.

Keywords: heterostructures, effective mass, dispersion law, temperature renormalization, long-wave shift.

Received 07 April 2024.

English version: *Moscow University Physics Bulletin.* 2024. **79**, No. 4. Pp. 469–476.

Сведения об авторах

1. Бурмистров Евгений Романович — аспирант, мл. науч. сотрудник; e-mail: eugeni.conovaloff@yandex.ru.
2. Авакянц Лев Павлович — профессор, доктор физ.-мат. наук; e-mail: avakyants@genphys.phys.msu.su.