

InAlN/GaN 异质结二维电子气波函数的变分法研究

李群 陈谦 种景

Variational study of the 2DEG wave function in InAlN/GaN heterostructures

Li Qun Chen Qian Chong Jing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 027303 (2018) DOI: 10.7498/aps.20171827

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.20171827>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I2>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

表面钝化效应对 GaAs 纳米线电子结构性质影响的第一性原理研究

Effect of surface passivation on the electronic properties of GaAs nanowire: A first-principle study

物理学报.2017, 66(19): 197302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.197302>

量子局域效应和应力对 GaSb 纳米线电子结构影响的第一性原理研究

First-principles study of effects of quantum confinement and strain on the electronic properties of GaSb nanowires

物理学报.2015, 64(22): 227303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.227303>

界面形核时间对 GaN 薄膜晶体质量的影响

Effect of interface nucleation time of the GaN nucleation layer on the crystal quality of GaN film

物理学报.2015, 64(12): 127305 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.127305>

GaN 基高压发光二极管理想因子与单元个数关系研究

Research on the relationship between ideality factor and number of units of GaN-based high voltage light-emitting diode

物理学报.2015, 64(1): 017303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.017303>

AlN 插入层对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 界面电子散射的影响

Effect of inserted AlN layer on the two-dimensional electron gas in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$

物理学报.2015, 64(19): 197303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.197303>

InAlN/GaN 异质结二维电子气波函数的变分法研究*

李群^{1)†} 陈谦¹⁾ 种景²⁾

1)(西安理工大学自动化与信息工程学院, 西安 710048)

2)(中国卫星海上测控部, 江阴 214431)

(2017年8月13日收到; 2017年10月2日收到修改稿)

使用变分法推导了InAlN/GaN异质结二维电子气波函数和基态能级的解析表达式, 并讨论了InAlN/GaN异质结结构参数对二维电子气电学特性的影响. 在假设二维电子气来源于表面态的前提下, 使用了一个包含两个变分参数的尝试波函数推导电子总能量期望值, 并通过寻找能量期望极小值确定变分参数. 计算结果显示, 二维电子气面密度随InAlN厚度的增大而增大, 且理论结果与实验结果一致. 二维电子气面密度增大抬高了基态能级与费米能级, 并保持二者之差增大以容纳更多电子. InAlN/GaN界面处的极化强度失配随着In组分增大而减弱, 二维电子气面密度随之减小, 并导致基态能级与费米能级减小. 所建立的模型能够解释InAlN/GaN异质结二维电子气的部分电学行为, 并为电子输运与光学跃迁的研究提供了解析表达式.

关键词: InAlN/GaN 异质结, 二维电子气, 变分法, 波函数

PACS: 73.61.Ey, 73.20.At, 73.21.Fg, 73.43.Cd

DOI: 10.7498/aps.67.20171827

1 引言

正确求解异质结二维电子气 (two-dimensional electron gas, 2DEG) 波函数是对与2DEG有关的电学行为做出合理解释与精确预测的前提. 求解2DEG波函数有数值法和解析法, 其中数值方法通过直接求解垂直于异质界面方向的泊松方程与薛定谔方程, 能够得到波函数的精确解^[1,2]; 解析方法往往采用多种近似处理, 或避免直接求解理论模型, 导致解析解不如数值解精确. 但是相对于数值方法, 解析方法能够提供更清晰的物理图像, 并为电子输运与光学跃迁的研究提供易于应用的解析公式, 因此解析方法仍然在异质结能级结构研究中广泛使用^[3,4]. 规则势阱近似与变分法是两种常用的解析方法. 规则势阱近似将异质结界面处的导带形状近似为方形或三角形等规则形状, 此时电子

波函数可以使用正弦函数、Airy函数等形式来表示^[5,6]. 变分法使用尝试波函数推导电子能量期望值, 利用能量期望值取极小值的变分原理, 确定尝试波函数中的变分参数, 能够在接近工程实际的理论模型中确定波函数表达式, 同时确定异质结导带结构与子带能级, 是一种精度较高的近似方法^[3,4].

近二十年来, 以AlGaIn/GaN, InAlN/GaN为代表的GaN基异质结材料得到了系统而深入的研究, 并以高电子迁移率晶体管为主要器件形式, 广泛应用于高频、高能器件领域^[7-9]. 与传统的AlGaAs/GaAs异质结相比, GaN基异质结具有很强的自发极化、压电极化效应, 并能够在非有意掺杂的情况下形成高迁移率、高电子面密度的2DEG, 施主类表面态被认为是形成2DEG的主要电荷源^[10-12]. 但据我们所知, 在已有的GaN基异质结的变分法研究中, 还没有将表面态的作用

* 国家自然科学基金 (批准号: 11647053) 和陕西省教育厅科学研究计划项目 (批准号: 17JK0552) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liqun@xaut.edu.cn

考虑在内, 因此无法预测结构参数对2DEG电学特性的影响^[3,4,13]. 本文将以InAlN/GaN异质结为例, 建立考虑极化效应与表面态的静电模型, 使用变分法推导电子波函数与基态能级表达式, 并讨论InAlN/GaN异质结结构参数对2DEG面密度、费米能级、基态能级等参数的影响.

2 理论模型

InAlN/GaN异质结通常沿 c 轴([0001])方向生长, 将该方向定义为 z 轴, InAlN势垒层与GaN沟道层分别位于 $z < 0$ 和 $z > 0$ 区域. 本文假设2DEG所有电子都处于基态, 使用Ando提出的一个分段函数作为尝试波函数^[14]:

$$\psi(z) = \begin{cases} Ab^{\frac{1}{2}} \exp(bz/2), & z < 0, \\ Bk^{\frac{1}{2}}(kz + c) \exp(-kz/2), & z > 0. \end{cases} \quad (1)$$

该函数的两个表达式分别表示电子在InAlN和GaN层的分布, 因此能够描述电子向InAlN层的隧穿效应. (1)式中, A, B, c, b, k 为变分参数, 这5个参数并不独立, 应满足以下约束条件:

$$Ab^{\frac{1}{2}} = Bk^{\frac{1}{2}}c, \quad (2a)$$

$$\frac{1}{2}Ab^{\frac{3}{2}} = Bk^{\frac{3}{2}}(1 - c/2), \quad (2b)$$

$$A^2 + B^2(c^2 + 2c + 2) = 1, \quad (2c)$$

其中(2a)、(2b)式分别由波函数 ψ 以及波函数的一阶导数 ψ' 在InAlN/GaN界面处连续得到, (2c)式由波函数的归一化条件得到. 通过(2)式, A, B, c 可以表示为 b, k 的函数:

$$A^2 = \frac{1}{1 + \frac{5b}{2k} + \frac{2b^2}{k^2} + \frac{b^3}{2k^3}}, \quad (3a)$$

$$B^2 = \frac{\frac{b}{k} + \frac{2b^2}{k^2} + \frac{b^3}{k^3}}{4 + \frac{10b}{k} + \frac{8b^2}{k^2} + \frac{2b^3}{k^3}}, \quad (3b)$$

$$c = \frac{2k}{k + b}. \quad (3c)$$

InAlN/GaN异质结中电势能的 z 向分布函数 $V(z)$ 可表示为

$$V(z) = -e\phi(z) + \Theta(-z) \cdot \Delta E_c, \quad (4)$$

其中 e 为电子电荷, $\phi(z)$ 为电势, $\Theta(z)$ 为阶跃函数, 当 $z > 0$, $\Theta(z) = 1$; $z \leq 0$, $\Theta(z) = 0$. $\Theta(z)$ 在InAlN/GaN界面($z = 0$)的位置引入了由InAlN,

GaN导带阶 ΔE_c 导致的能量突变, 使InAlN层的电势能被整体抬高一个常数. 电势 $\phi(z)$ 由泊松方程确定:

$$\frac{d^2}{dz^2} \phi = -\frac{\sigma(z)}{\epsilon}, \quad (5)$$

其中 ϵ 为介电常数, $\sigma(z)$ 为电荷分布函数, 描述InAlN/GaN异质结中的所有可能电荷分布. 由于在非有意掺杂的情况下, InAlN, GaN层的残余施主浓度不足以形成高面密度的2DEG, 本文忽略了残余施主对2DEG的贡献, 而采用表面态假设, 认为施主类表面态是2DEG的电荷源. 有研究表明^[10,11], AlGaIn/GaN, InAlN/GaN异质结表面态在表面禁带内的一定范围均匀分布[见图1(a)]. 因此, 本文采用两个参数, 即表面态密度 N_{sd} 与表面态到InAlN表面导带的距离 E_d 来描述表面态. 可以近似认为费米能级 E_F 以下的表面态完全被电子占据, E_F 以上的表面态完全离化, 离化表面态面密度表示为

$$\sigma_{Surf} = eN_{sd} \cdot [V(-d) - E_d - E_F], \quad (6)$$

其中 d 为InAlN层厚度.

InAlN, GaN的自发极化、压电极化效应导致InAlN/GaN异质结上表面、界面、下表面存在净剩的极化电荷, 电荷面密度分别设为 σ_{Tp} , σ_{Ip} , σ_{Bp} . 极化电荷面密度依赖于InAlN层In含量 x , 具体的计算方法可以参见已有的文献报道^[15]. 沿[0001]方向生长的GaN下表面极化电荷为正, 必须认为 σ_{Bp} 被下表面带负电的表面态 σ_{Bott} 完全补偿, 否则电子无法在InAlN/GaN界面处聚集形成2DEG. 本文假设 σ_{Bp} 与 σ_{Bott} 恰好抵消, 因此只需要考虑图1(b)虚线框内的电荷成分, $\sigma(z)$ 的具体形式为

$$\sigma(z) = \sigma_{Surf}\delta(z + d) - \sigma_{Tp}\delta(z + d) + \sigma_{Ip}\delta(z) - N_e(z). \quad (7)$$

(7)式中除2DEG浓度 $N_e(z)$ 外, 其余电荷成分都是 δ 函数, σ_{Surf} , σ_{Tp} 位于InAlN上表面($z = -d$), σ_{Ip} 位于InAlN/GaN界面($z = 0$). 应注意(7)式等号右边的符号都表示电荷浓度的绝对值, 各电荷成分的电性由各物理量前面的正负号表示. 电子分布 $N_e(z)$ 可以写为

$$N_e(z) = N_s \cdot |\psi(z)|^2, \quad (8)$$

其中 N_s 为2DEG面密度. N_s 取决于费米能级 E_F 与电子基态能级 E_1 的相对位置, 利用费米-狄拉克公式在整个能量范围内进行统计得到:

$$N_s = \frac{em^*k_B T}{\pi\hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_1}{k_B T} \right) \right], \quad (9)$$

其中 m^* 为电子有效质量, \hbar 为约化普朗克常数, k_B 为玻尔兹曼常数. 异质结中所有电荷成分应满足电中性条件:

$$\int_{-d}^w \sigma(z) dz = 0. \quad (10)$$

(10) 式表示对整个异质结区域进行积分, $z = w$ 为 GaN 下表面坐标.

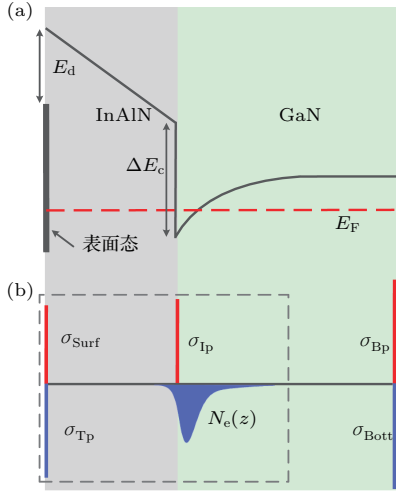


图1 InAlN/GaN 异质结的 (a) 导带结构与 (b) 电荷分布示意图

Fig. 1. Schematic diagrams of (a) conduction band profile and (b) charge distribution in InAlN/GaN heterostructure.

对 (5) 式两端进行两次积分可以得到电势分布 $\phi(z)$, 积分使用了两个边界条件: 1) $\phi'(\infty) = 0$, 意味着 GaN 深处电场强度为 0, 该边界条件与 GaN 下表面呈电中性的假设保持一致; 2) $\phi(0) = 0$, 该边界条件将 InAlN/GaN 界面导带能量设为 0.

利用 (4) 式, 可以得到 $V(z)$ 的表达式:

$$V(z) = V_{\text{ex}}(z) + V_{\text{h}}(z) + V_{\text{Ec}}(z), \quad (11)$$

其中,

$$V_{\text{ex}} = \frac{e[(z+d)(\sigma_{\text{Surf}} - \sigma_{\text{Tp}})\Theta(z+d) + z\sigma_{\text{Ip}}\Theta(z)]}{\varepsilon}, \quad (12a)$$

$$\begin{aligned} V_{\text{h}} = & -\frac{e N_s A^2}{\varepsilon b} e^{bz} \Theta(-z) + \frac{e N_s}{\varepsilon} \left[-\frac{A^2}{b} - A^2 z \right. \\ & - B^2 \left(kz^2 + 4z + \frac{6}{z} \right) e^{-kz} - B^2 \left(-\frac{6}{k} + 2z \right) \\ & - 2B^2 c \left(z + \frac{2}{k} \right) e^{-kz} - 2B^2 c \left(-\frac{2}{k} + z \right) \\ & \left. - B^2 c^2 \left(\frac{e^{-kz}}{k} - \frac{1}{k} + z \right) \right] \Theta(z), \quad (12b) \end{aligned}$$

$$V_{\text{Ec}} = \Delta E_c \Theta(-z). \quad (12c)$$

(11) 式将 $V(z)$ 分成三部分, 其中 V_{ex} 来自 InAlN/GaN 异质结中离化表面态、极化电荷等

固定电荷的贡献, V_{h} 来自 2DEG 的贡献, V_{Ec} 来自 InAlN、GaN 导带阶的贡献.

电子总能量期望值 $\langle E \rangle$ 等于动能期望值 $\langle T \rangle$ 与势能期望值 $\langle V \rangle$ 之和:

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$$

$$\begin{aligned} &= \langle \psi^* \mathbf{T} \psi \rangle + \langle \psi^* V_{\text{ex}} \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi^* V_{\text{h}} \psi \rangle \\ &+ \langle \psi^* V_{\text{Ec}} \psi \rangle. \quad (13) \end{aligned}$$

(13) 式将 2DEG 贡献的势能期望值取半, 避免重复计算电子间作用势能; 去掉 1/2 因子则得到电子基态能级 E_1 的表达式.

将 (1) 和 (12) 式, 以及动能算符 $\mathbf{T} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2}$ 代入 (13) 式, 在整个异质结范围内积分, 可得

$$\begin{aligned} \langle E \rangle = & -\frac{\hbar^2}{8m^*} [A^2 b^2 + B^2 k^2 (c^2 - 2c - 2)] \\ & + \frac{e}{\varepsilon} \left[\frac{(\sigma_{\text{Surf}} - \sigma_{\text{Tp}}) B^2}{k} (c^2 + 4c + 6) \right. \\ & - \frac{(\sigma_{\text{Surf}} - \sigma_{\text{Tp}}) A^2}{b} \\ & + \frac{\sigma_{\text{Ip}} B^2}{k} (c^2 + 4c + 6) + d(\sigma_{\text{Surf}} - \sigma_{\text{Tp}}) \left. \right] \\ & - \frac{e}{2\varepsilon} \left[\frac{N_s A^4}{2b} + \frac{N_s A^2 B^2 (c^2 + 4c + 6)}{b} \right] \\ & - \frac{e N_s}{2\varepsilon k} [A^2 B^2 (c^2 + 4c + 6) \\ & + B^4 \left(\frac{15}{4} + \frac{15c}{2} + \frac{15c^2}{2} + 3c^3 + \frac{c^4}{2} \right)] \\ & + \Delta E_c A^2. \quad (14) \end{aligned}$$

对于结构参数已知的 InAlN/GaN 异质结, 若已知 N_s , 则离化表面态面密度 σ_{Surf} 可由 (10) 式确定, $\langle E \rangle$ 仅是变分参数 b 和 k 的函数, 根据 $\langle E \rangle$ 取极小值的变分原理, 即令

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial b} = 0, \quad (15a)$$

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial k} = 0, \quad (15b)$$

可以确定变分参数 b 和 k , 则电子波函数以及导带结构、电子基态能级等参数分别被确定.

在已知表面态面密度 N_{sd} 和能级位置 E_d 的前提下, 可以利用该模型预测 InAlN/GaN 异质结不同结构参数下的电学特性. 具体的方法是, 设定 2DEG 面密度初始值 N_s , 利用电中性条件确定离化表面态面密度 σ_{Surf} , 计算电子基态能级 E_1 , 利用 (6) 式确定费米能级 E_F , 利用 (9) 式计算 2DEG 面密度 N'_s , 比较 N_s 与 N'_s , 如果相差较大, 逐步改变 N_s , 重复上述计算过程, 直至 N_s 与 N'_s 相等.

3 结果与讨论

将表面态参数设置为 $\sigma_{\text{surf}} = 8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}/\text{eV}$, $E_d = 2.3 \text{ eV}$, 与文献[11]报道保持一致.

图2是计算得到的晶格匹配的 $\text{In}_{0.17}\text{Al}_{0.83}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结导带结构与2DEG分布, InAlN 层厚度 $d = 15 \text{ nm}$. 由于忽略了异质结的残余施主, InAlN 层只在上下表面存在极化电荷, 因此 InAlN 内部电场强度为常数, 导带能量呈线性变化. InAlN/GaN 界面处存在导带阶 ΔE_c 引起的能量突变, 并在 GaN 一侧形成近三角势阱. GaN 深处的电场强度为0, 因此导带能量为常数. 2DEG面密度 $N_s = 1.96 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 集中分布在界面附近几个纳米的范围内, 电子到界面的平均距离为2.23 nm, 有6.5%的电子隧穿到 InAlN 层.

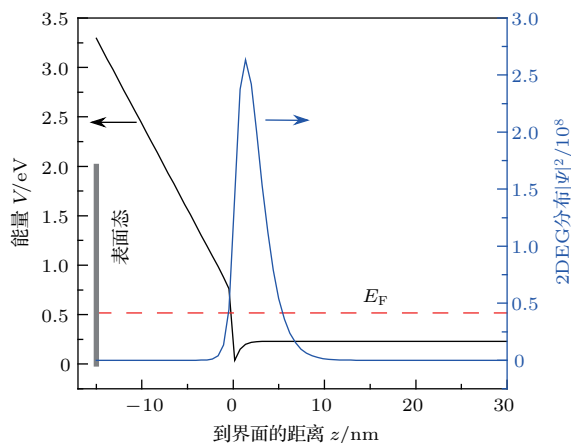


图2 $\text{In}_{0.17}\text{Al}_{0.83}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结导带结构与2DEG分布
Fig. 2. The conduction band profile and 2DEG distribution in an $\text{In}_{0.17}\text{Al}_{0.83}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructure.

图3是 $x = 0.1, 0.17, 0.25$ 三个不同In组分下2DEG面密度随 InAlN 厚度的变化关系. $x = 0.17$ 时, InAlN 与 GaN 晶格匹配, InAlN 处于无应力状态, 但 InAlN 、 GaN 自发极化强度具有较大差异, 界面处净剩的正极化电荷诱导电子在 GaN 一侧聚集, 形成2DEG. 随着 InAlN 厚度增大, InAlN 表面导带能量线性增长(见图2), 但 E_F 的位置相对稳定, 因此更多表面态上升到 E_F 之上并释放出电子, 导致2DEG面密度持续增大. 当2DEG面密度增大到与 InAlN/GaN 界面处的极化电荷面密度相等时, 2DEG面密度达到饱和. $x = 0.1$ 时, InAlN 处于张应变状态, 自发极化强度更大, 且与压电极化强度相互加强, 导致 InAlN/GaN 界面处更大的极化失配, 诱导产生的2DEG面密度更大. 在 $x = 0$ 的极

限情况, AlN/GaN 异质结在 AlN 厚度为5 nm时即可实现 $4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 的2DEG面密度[16], 但由于较大的晶格失配, 当 AlN 达到6 nm, 就会通过产生裂纹释放应力[17]. InAlN 的自发极化强度随In组分增大而下降, 当 $x > 0.17$, InAlN 处于压应变, 压电极化强度与自发极化强度反向, 开始逐步抵消自发极化强度, InAlN/GaN 界面处的净剩极化电荷减少, 诱导形成的2DEG面密度不断减小. 随着In组分增大, 形成2DEG的 InAlN 临界厚度不断增大, 当 $x = 0.25$ 时, InAlN 厚度小于10 nm的异质结无法形成2DEG.

图3中给出了晶格匹配的 $\text{In}_{0.17}\text{Al}_{0.83}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结的一组实验数据, 可以看出 $x = 0.17$ 的计算曲线基本反映了2DEG面密度对 InAlN 厚度的依赖关系. 由于实验条件的差异, 实验数据本身具有一定的离散性, 单一的参数配置不能使计算结果严格重复实验数据.

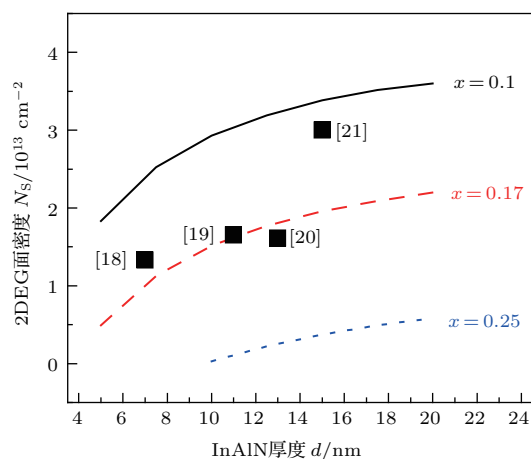


图3 不同In组分下2DEG面密度对 InAlN 厚度的依赖关系, 实心方块为文献报道的实验结果[18-21].
Fig. 3. Dependence of 2DEG sheet density on InAlN thickness for different In mole fraction. The filled squares represent the experimental data from the literature [18-21].

由图3已知, 2DEG面密度随着In组分 x 的增加而减小, 图4显示这种变化为线性变化. 该模型在计算 InAlN 极化强度时采用了线性插值的方法, InAlN 层总极化强度随 x 线性变化, 同时假设表面态在 InAlN 表面导带以下均匀分布, 共同导致了2DEG面密度对In组分的线性依赖关系.

图5(a)显示了晶格匹配的 $\text{In}_{0.17}\text{Al}_{0.83}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结费米能级 E_F 与基态能级 E_1 对 InAlN 厚度的依赖关系. 随着 InAlN 厚度增大, 不断增大的2DEG面密度抬高了 E_1 与 E_F , 并保持 E_F 、 E_1 间距

增大, 为越来越多的电子提供了更大的能量空间. 图 5 (b) 显示了 $d = 10$ nm 时费米能级与基态能级对 In 组分的依赖关系. 随着 In 组分增大, 不断减小的 2DEG 面密度降低了 E_F 与 E_1 , $E_F - E_1$ 同时减小.

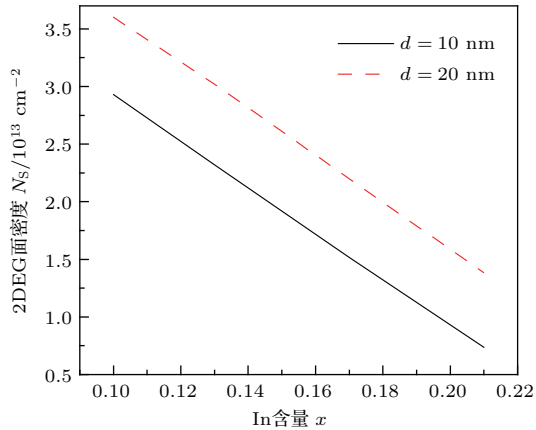


图 4 2DEG 面密度对 In 组分的依赖关系

Fig. 4. Dependence of 2DEG sheet density on In mole fraction.

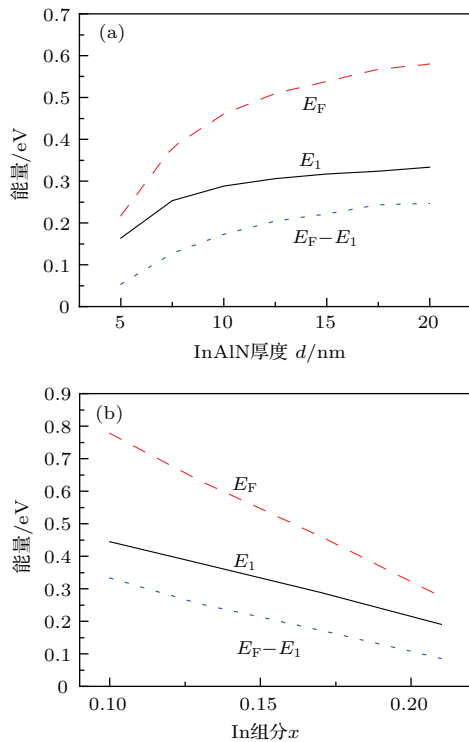


图 5 费米能级与基态能级对 (a) InAlN 厚度与 (b) In 组分的依赖关系

Fig. 5. Dependences of E_F and E_1 on (a) InAlN thickness, and (b) In mole fraction.

4 结 论

在表面态假设的基础上, 利用变分法推导了 InAlN/GaN 异质结 2DEG 波函数与基态能级的

表达式, 并讨论了 InAlN/GaN 异质结构参数对 2DEG 面密度、费米能级、基态能级等参数的影响. 计算结果显示, 2DEG 面密度随着 InAlN 厚度的增加而增加, 且理论预测与实验结果一致, 2DEG 面密度的增加抬高了基态能级与费米能级, 2DEG 面密度随着 In 组分的增大而下降, 并降低了基态能级与费米能级.

参考文献

- [1] Li Q, Zhang J W, Meng L, Hou X 2014 *Phys. Status Solidi B* **251** 755
- [2] Zhang Y, Gu S L, Ye J D, Huang S M, Gu R, Chen B, Zhu S M, Zheng Y D 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 150202 (in Chinese) [张阳, 顾书林, 叶建东, 黄时敏, 顾然, 陈斌, 朱顺明, 郑有焯 2013 物理学报 **62** 150202]
- [3] Tien N T, Thao D N, Thao P T B, Quang D N 2015 *Physica B* **479** 62
- [4] Manouchehri F, Valizadeh P, Kabir M Z 2014 *J. Vac. Sci. Technol. A* **32** 021104
- [5] Stern F 1972 *Phys. Rev. B* **5** 4891
- [6] Fouillant C, Alibert C 1994 *Am. J. Phys.* **62** 564
- [7] Hao Y, Zhang J F, Zhang J C, Ma X H, Zheng X F 2015 *Chin. Sci. Bull.* **60** 874 (in Chinese) [郝跃, 张金凤, 张进成, 马晓华, 郑雪峰 2015 科学通报 **60** 874]
- [8] Fang Y L, Feng Z H, Yin J Y, Zhang Z R, Lv Y J, Dun S B, Liu B, Li C M, Cai S J 2015 *Phys. Status Solidi B* **252** 1006
- [9] Arulkumaran S, Ng G I, Ranjan K, Kumar C M M, Foo S C, Ang K S, Vicknesh S, Dolmanan S B, Bhat T, Tripathy S 2015 *Jpn. J. Appl. Phys.* **54** 04DF12
- [10] Goyal N, Fjeldly T A 2016 *IEEE Trans. Electron Dev.* **63** 881
- [11] Jiao W, Kong W, Li J, Collar K, Kim T H, Losurdo M, Brown A S 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109** 082103
- [12] Gordon L, Miao M S, Chowdhury S, Higashiwaki M, Mishra U K, van de Walle C G 2010 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43** 505501
- [13] Quang D N, Tung N H, Tuoc V N, Minh N V, Huy H A, Hien D T 2006 *Phys. Rev. B* **74** 205312
- [14] Ando T 1982 *J. Phys. Soc. Jpn.* **51** 3900
- [15] Yang P, Lü Y W, Wang X B 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 197303 (in Chinese) [杨鹏, 吕燕伍, 王鑫波 2015 物理学报 **64** 197303]
- [16] Cao Y, Jena D 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 182112
- [17] Kaun S W, Ahmadi E, Mazumder B, Wu F, Kyle E C H, Burke P G, Mishra U K, Speck J S 2014 *Semicond. Sci. Technol.* **29** 045011
- [18] Dong X, Li Z H, Li Z Y, Zhou J J, Li L, Li Y, Zhang L, Xu X J, Xu X, Han C L 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 037102
- [19] Zhang J F, Wang P Y, Xue J S, Zhou Y B, Zhang J C, Hao Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 117305 (in Chinese) [张金凤, 王平亚, 薛军帅, 周勇波, 张进成, 郝跃 2011 物理学报 **60** 117305]

- [20] Xue J S, Zhang J C, Zhang W, Li L, Meng F N, Lu M, Jing N, Hao Y 2012 *J. Cryst. Growth* **343** 110
[21] Čičo K, Gregušová D, Gažiš, Šoltýs J, Kuzmík J, Car-

lin J F, Grandjean N, Pogany D, Fröhlich K 2010 *Phys. Status Solidi C* **7** 108

Variational study of the 2DEG wave function in InAlN/GaN heterostructures*

Li Qun^{1)†} Chen Qian¹⁾ Chong Jing²⁾

1) (School of Automation and Information Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

2) (China Satellite Maritime Tracking and Control Department, Jiangyin 214431, China)

(Received 13 August 2017; revised manuscript received 2 October 2017)

Abstract

The variational method has been widely used to study the electronic structures of heterostructure materials in spite of this method being less accurate than the numerical method, because analytical formulas for some electrical parameters can be derived using this method. However, effects of surface states on the two-dimensional electron gas (2DEG) have not been taken into account in the variational studies of GaN-based heterostructures. In the present study, analytical formulas for the electron wave function and ground state energy level of the 2DEG in InAlN/GaN heterostructures are derived using the variational method, and the influences of structural parameters of InAlN/GaN heterostructures on the electrical properties are discussed. In the theoretical model, evenly distributed surface states below the conduction band are assumed to be the origin of the 2DEG, and the polarization charges at the InAlN surface and the InAlN/GaN interface due to spontaneous and piezoelectric polarization effects in InAlN/GaN heterostructures are taken into account. A trial envelope wave function with two variational parameters is used to derive the expectation value of the total energy per electron. The variational parameters are determined by minimizing the expectation value. The model predicts a linear conduction band profile in InAlN barrier layer and an approximately triangular-shaped potential well on the GaN side of the InAlN/GaN interface. Electrons released from the surface states are confined in the potential well, forming the 2DEG. The 2DEG sheet density for the lattice-matched InAlN/GaN heterostructure with a 15 nm InAlN layer is $1.96 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, and the average distance from the InAlN/GaN interface of electrons is 2.23 nm. The 2DEG sheet density increases rapidly with InAlN thickness increasing when the InAlN layer exceeds the critical thickness, and starts to be saturated above 15 nm. The dependence of the calculated 2DEG sheet density on the InAlN thickness quantitatively agrees with recently reported experimental data. The increasing 2DEG sheet density results in increasing the ground state energy level and Fermi energy, and the energy spacing between the two also increases for containing more electrons. The polarization discontinuity at the InAlN/GaN interface decreases with increasing In mole fraction, causing the 2DEG sheet density to decrease, and thus the ground state energy level and the Fermi energy to decrease. This model is conducive to understanding the electrical behaviors of InAlN/GaN heterostructures and providing readily applicable formulas for studying the electron transport and optical transitions.

Keywords: InAlN/GaN heterostructure, two-dimensional electron gas, variational method, wave function

PACS: 73.61.Ey, 73.20.At, 73.21.Fg, 73.43.Cd

DOI: 10.7498/aps.67.20171827

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11647053) and the Scientific Research Program Funded by Shaanxi Provincial Education Department, China (Grant No. 17JK0552).

† Corresponding author. E-mail: liqun@xaut.edu.cn