

Магнетосопротивление и симметрия двумерного электронного газа гетероструктур AlGaN/AlN/GaN¹⁾

Н. К. Чумаков⁺²⁾, А. А. Андреев⁺, И. В. Белов⁺, А. Б. Давыдов*, И. С. Езубченко⁺, Л. Л. Лев[×],
Л. А. Моргун*, С. Н. Николаев⁺, И. А. Черных⁺, С. Ю. Шабанов⁺, В. Н. Строков[°], В. Г. Валеев⁺²⁾

⁺Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

[×]Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

[°]Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, CH-5232 Villigen, Switzerland

Поступила в редакцию 15 декабря 2023 г.

После переработки 1 марта 2024 г.

Принята к публикации 12 марта 2024 г.

Физические свойства двумерного электронного газа, локализованного в слое GaN вблизи интерфейса AlN/GaN гетероструктур AlGaN/AlN/GaN, изучаются не одно десятилетие. По сложившимся представлениям его симметрия совпадает с симметрией несимморфной пространственной группы C_{6v}^4 в объеме GaN. Последнее, однако, неверно. В самом деле, единственный составной элемент этой группы – вращение системы на 120° вокруг оси [0001], направленной по нормали к плоскости интерфейса, с одновременным сдвигом вдоль нее на полпериода кристаллической решетки GaN – для двумерного газа запрещен потенциалом конфайнмента, который, следовательно, понижает его симметрию до симметрии тригональной точечной группы C_{3v} . Настоящая работа посвящена подтверждению этого факта результатами расчетов из первых принципов методом функционала плотности и данными электрофизических экспериментов.

DOI: 10.31857/S1234567824080056, EDN: KAIEIEB

1. Введение. Нитридные транзисторы с высокой подвижностью электронов (HEMT) на основе гетероструктур AlGaN/AlN/GaN получили широкое практическое применение в качестве базовых компонент устройств стабильной высокотемпературной микроволновой электроники высокой мощности. Их уникальные свойства обусловлены наличием в них двумерного электронного газа (2DEG) с концентрацией носителей $\sim 10^{13}$ см⁻², локализованного в слое нитрида галлия вблизи границы раздела AlN/GaN, без специального легирования. На этом фоне растет интерес к более глубокому изучению физических свойств этого семейства материалов, мотивируемый потребностью расширения их функциональных возможностей.

Одной из актуальных задач в этой области является описание динамических токовых состояний в таком 2DEG. Ее решение, однако, осложняется тем, что некоторые основные физические свойства этой системы исследованы недостаточно глубоко. В част-

ности, величина и тип тензора эффективных масс 2DEG в гетероструктуре AlGaN/AlN/GaN, знание которых критически необходимо для расчета откликов системы на внешние воздействия, до сих пор служат предметом обсуждения. Господствующим является предположение, что 2DEG локализован достаточно глубоко в толще GaN и “видит” его объемную (C_{6v}^4) симметрию, см., например, работу [1] (в частности пункт 2a of Appendix 1, *Model for single-subband 2DEGs*) и библиографию в ней. Ниже будет показано, что эти выводы противоречат результатам недавней работы [2], где 2DEG гетероструктур GaN/AlN HEMT со сверхтонким барьерным слоем был исследован методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) в мягком рентгеновском диапазоне. В этом эксперименте получены первые прямые изображения основных характеристик электронного строения системы в обратном пространстве – поверхности Ферми (ПФ), электронного спектра и заполнения зон, что позволило показать, что форма ПФ электронов 2DEG характеризуется гексагональным искажением с коэффициентом анизотропии порядка 11%, которое трансли-

¹⁾См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾e-mail: Chumakov_NK@nrcki.ru; Valeev_VG@nrcki.ru

руется в 22%-ную анизотропию эффективной массы его электронов и, в частности, приводит к анизотропии насыщения скорости дрейфа носителей тока в нелинейных транспортных свойствах гетероструктур GaN/AlN/AlGaIn в сильных электрических полях. При этом ARPES, в отличие от косвенных данных электрофизических методик, является практически единственным прямым методом исследования электронной структуры материалов.

Возможная причина этого факта была связана в [2] с релаксацией позиций приинтерфейсных атомов GaN. Однако было отмечено, что предсказанная в расчетах, выполненных без учета спиновой степени свободы электронов, атомная релаксация ограничивается несколькими атомными слоями вблизи границы раздела AlN/GaN, и неясно, почему она должна существенно влиять на электронные свойства 2DEG, максимальная плотность которого локализована на расстоянии ~ 3 нм от этой границы.

Этот и ряд других фактов не находят адекватной интерпретации в предположении о C_{6v}^4 симметрии системы в области локализации 2DEG.

Ранее мы показали, что результаты работы [2] можно объяснить, приняв во внимание то обстоятельство, что наличие в системе конфайнмента 2DEG, порожденного интерфейсом GaN/AlN гетероструктуры, лежащим в плоскости (0001), понижает симметрию 2DEG до симметрии группы C_{3v} – вращений на 120° вокруг тригональной оси c (она же [0001]) и зеркального отражения $x \rightarrow -x$, где x – направление оси $\Gamma\bar{K}$ [3]. Отметим, что из общих соображений подобное утверждение высказывалось и ранее [4]. Простой анализ физической модели [3], основанной на этом наблюдении, показал, что в отсутствие внешнего магнитного поля наблюдаемая в ARPES анизотропия поверхности Ферми 2DEG может быть объяснена членами спин-орбитальной связи (SOC) третьего порядка в k -гамильтониане $\hat{H}_n(\mathbf{k})$ (индекс n здесь нумерует размерно-квантованные состояния электронов в квантовой яме (QWS)), нарушающими вращательную симметрию затравочного гамильтониана $\hat{H}_0 = \hbar^2 k^2 / 2m^*$, где $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ и m^* – эффективная масса электронов в центре зоны Бриллюэна плоскости (0001) в объеме GaN. Действительно, симметрия системы C_{3v} и инвариантность ее свойств по отношению к обращению времени диктуют следующий выбор эффективного 2×2 гамильтониана электронов 2DEG:

$$\hat{H}_n(\mathbf{k}) = E_n + \hat{H}_0 + v_k(k_x \hat{\sigma}_y - k_y \hat{\sigma}_x) + \frac{\lambda}{2}[k_+^3 + k_-^3] \hat{\sigma}_z, \quad (1)$$

где E_n , $n = 0, 1, \dots$ – энергия n -го QWS (предполагается сепарабельный удерживающий потенциал

$V_c = V_c(z)$, где ось z направлена вдоль [0001]), $k_\pm = k_x \pm ik_y$, $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$ – стандартные матрицы Паули в спиновом подпространстве, $v_k = v(1 + \alpha k^2)$, третье, циркулярно-симметричное слагаемое – спин-орбитальный вклад Рашбы, а член, пропорциональный λ – кубическая по квазиимпульсу добавка Дресельхауса к SOC в C_{3v} -симметричной системе.

Спектр 2DEG гамильтониана (1) есть $E_{n\sigma}(\mathbf{k}) = E_n + \hbar^2 k^2 / 2m^* + \sigma \sqrt{v_k^2 k^2 + \lambda^2 k^6 \cos^2(3\theta)}$ где $E_{n\sigma}(\mathbf{k})$, $\sigma = \pm 1$ – энергия σ -й псевдоспиновой подзоны n -й QWS, θ – азимутальный угол квазиимпульса электрона \mathbf{k} , отсчитываемый от направления оси Ox , ориентированной вдоль одного из главных направлений $\Gamma\bar{K}$. Заметим, что хотя виду инвариантности свойств системы относительно инверсии времени в отсутствие магнитного поля электронный спектр 2DEG имеет гексагональную симметрию, период его спиновой текстуры в k -пространстве вдвое больше. Результаты подгонки ПФ к данным ARPES [2], а также вид спиновой текстуры фермиевских электронов для нижней ($n = 0$) QWS, двукратно расщепленной по псевдоспину, приведены на рис. 1.

Отметим, что трехмерный GaN со структурой вюрцита представляет собой нецентросимметричный кристалл, и если бы исследуемый 2DEG наследовал его симметрию (C_{6v}^4), вместо (1) для его гамильтониана следовало бы написать (см. в [5] табл. 1): $\hat{H}_n(\mathbf{k}) = E_n + \hat{H}_0 + a_1(k_x \hat{\sigma}_y - k_y \hat{\sigma}_x) + i \frac{a_2}{2}[k_+^6 - k_-^6] \langle k_z \rangle \hat{\sigma}_z$, где a_1 и a_2 – константы материала. В отличие от [5], где соответствующая формула записана для трехмерного случая, мы заменили множитель k_z в последнем слагаемом его средним значением для электрона в размерно-квантованном состоянии. Спектр этого гамильтониана в тех же обозначениях имеет вид $E_{n\sigma}(\mathbf{k}) = E_n + \hbar^2 k^2 / 2m^* + \sigma \sqrt{a_1^2 k^2 + a_2^2 k^{12} \sin^2(6\theta)}$ и, в отличие от случая симметрии C_{3v} , описанного выше, отвечает не гексагональному, а додекагональному искажению электронного спектра, что явно противоречит данным ARPES [2]. Как мы увидим ниже, этот вывод согласуется с результатами наших расчетов из первых принципов и с данными электрофизических экспериментов.

2. Поверхность Ферми: расчет из первых принципов. Анализ гетероструктур GaN/AlN НЕМТ методом функционала плотности с учетом спина электронов в пакете программ VASP [6–9], v. 5.4.4, который, насколько нам известно, выполнен впервые в настоящей работе, качественно подтверждает эти представления. Расчеты выполнены при $B = 0$ с использованием PAW-обобщения ультрамягкого псевдопотенциала Вандербиля (US-PP) и метода линеаризованных

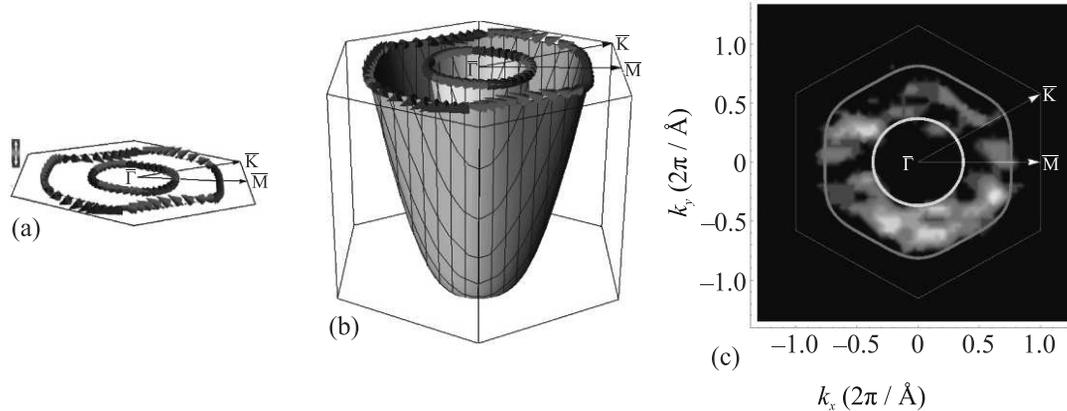


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а), (б) – Поведение спина электронов на поверхности Ферми 2DEG; (с) – результат фитинга поверхности Ферми к данным ARPES [2]

присоединенных плоских волн (LAPW) в параметризации Ceperley-Alder для xc -потенциала, см. [10–14]. Самосогласованные вычисления проведены с энергией отсечки плоских волн 400 эВ. Исходная структура сверхъячейки из 106 атомов (7 слоев AlN и 19 слоев GaN, пассивированных NH) и вакуумной щели, получена путем релаксации ионных степеней свободы системы, форма и объем сверхъячейки были такими же, как в объемном GaN, z -координаты атомов фиксировались. Релаксация прекращалась при условии, что абсолютные значения всех сил Хеллмана–Фейнмана на каждом атоме меньше, чем $EDIFFG = 3 \times 10^{-2}$ эВ/Å. Энергия системы найдена из вариационного принципа, записанного в терминах плотности электронов, при условии, что изменение свободной энергии Гельмгольца между двумя шагами итерации было меньше, чем $EDIFF = 10^{-6}$ эВ.

На рисунке 2 представлен результат DFT-расчета ПФ нижней (из двух частично заполненных) QWS 2DEG с плотностью электронов 2.5×10^{13} см $^{-2}$, наложенный на данные ARPES [2]. Видно, что

(а) эта подзона размерного квантования двукратно расщеплена по псевдоспину;

(б) обе псевдоспиновые подзоны гексагонально искажены;

(с) фермиевские импульсы в них как функции азимутального угла θ меняются в противофазе, что отвечает спектру модельного гамильтониана (1) и было бы невозможно в случае простой непараболичности электронного спектра, рассмотренной в [2];

(д) учет кулоновского взаимодействия электронов позволяет получить существенно лучшее соответствие результатов расчета данным ARPES.

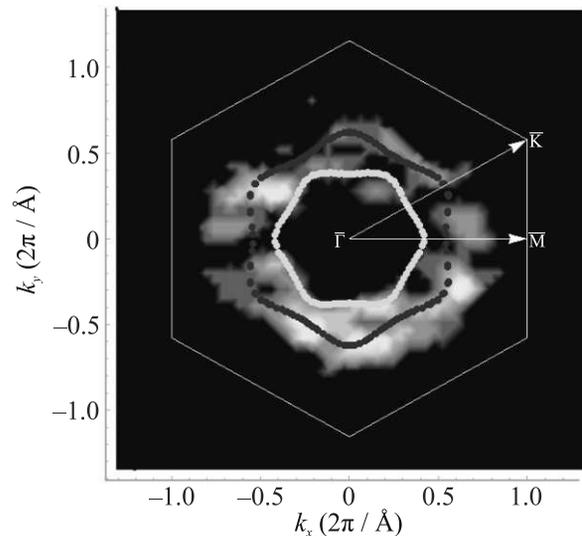


Рис. 2. (Цветной онлайн) Результат DFT-расчета поверхности Ферми 2DEG с электронной плотностью 2.5×10^{13} см $^{-2}$, совмещенный с данными ARPES [2]

Отметим отдельно, что “на вход” VASP получил только химический состав системы и ее исходную структуру в реальном пространстве.

Таким образом, 2DEG нитридных НЕМТ есть двумерный нецентросимметричный металл. Как известно, отсутствие центра инверсии качественно меняет природу блоховских электронов, приводя к наличию нетривиальных геометрических свойств их волновых функций и возникновению сложной спиновой текстуры в обратном пространстве [5] (см. рис. 1б). Нетрудно показать, что во внешнем поперечном магнитном поле спектр 2DEG в модели НВМ теряет гексагональную симметрию – в отличие от электронов в плоскости (0001) объема GaN, симметрия которых, напротив, становится гексагональной.

3. Образцы. В настоящей работе изучены некоторые проявления этих свойств в данных магнито-транспортных экспериментов в области поперечных магнитных полей B до 14 Тл в интервале температур от 3 до 300 К. Для этого на исследуемых гетероструктурах методом лазерной фотолитографии были сформированы модули в виде классического холловского креста и в геометрии ван дер Пау миллиметровых размеров, а также изготовлены образцы в форме окружности, круга и дуги диаметром в 200 микрон с множеством контактов, ориентированных под разными углами относительно кристаллической решетки GaN (см. вставки в рис. 3а и 4а).

4. Результаты эксперимента и обсуждение. Магнитотранспортные измерения в геометрии ван дер Пау показали, что как холловское сопротивление $R_{xy}(1/B)$, так и величина магнетосопротивления 2DEG $R_{xx}(1/B)$, усредненная методом ван дер Пау, демонстрируют осцилляции Шубникова–де-Гааза. Рассчитанная по их периоду плотность электронов $n_s = 1.5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ согласуется с вычисленной по данным о величине постоянной Холла. Однако R_{xx} , измеряемое на образцах в стандартной геометрии холловского креста, существенным образом зависит от направления протекания тока и имеет вид суперпозиции осциллирующих вкладов, амплитуды и фазы которых также зависят от направления протекания тока. Отметим, что анизотропия магнитолевой зависимости поперечного сопротивления в области осцилляций Шубникова–де-Гааза для двух главных кристаллографических направлений GaN наблюдалась ранее в работе [8], где, однако, вопрос о физическом механизме этого явления не обсуждался.

Удельное магнетосопротивление каждой из дуг (α, β) образца определяется спектром электронов в сильном магнитном поле и зависит как от ширины $(\alpha - \beta)$ дуги и так и от направления $(\alpha + \beta)/2$.

Приведенные на рис. 3 данные получены на образце в форме кольца, данные рис. 4 – на образце в форме дуги.

Анализ данных рис. 3, 4 показывает, что результаты измерений магнетосопротивления для нескольких дуг разной пространственной ориентации с углом раствора в $120^\circ - (-60^\circ, 60^\circ), (-30^\circ, 90^\circ), (0^\circ, 120^\circ), (30^\circ, 150^\circ)$ – совпадают друг с другом. При этом существенно, что результаты усреднения магнетосопротивления *по любой* дуге с углом раствора в 120° совпадают как между собой (рис. 3а, 4а), так и с результатом усреднения по дуге 360° (рис. 3б), которое фактически реализуется при измерениях магнетосопротивления методом ван дер Пау. В то же время,

для дуг меньшего размера относительное отклонение сопротивления $\Delta R_{(\alpha, \beta)}(B)/R_p(B)$ от основного хода полевой зависимости сильно зависит от направления протекания тока (рис. 3с, 4б). Причем $\Delta R_{(\alpha, \beta)}$ для дуг одинаковой ширины, отличающихся ориентацией, в одном и том же магнитном поле может иметь разный знак.

Отметим, что особенности, наблюдаемые на $\Delta R_{(\alpha, \beta)}(B)$ для дуг малого углового размера $(\alpha, \beta) < 120^\circ$, не являются шумами или ошибкой измерений – они воспроизводятся с высокой точностью в разных по времени сканах по магнитному полю, не зависят от направления скана по оси магнитных полей и слабо зависят от температуры (см. рисунки в дополнительных материалах).

Кроме отчетливо наблюдаемых в сильных полях осцилляций Шубникова–де Гааза присутствует вклад в магнетосопротивление от универсальных флуктуаций проводимости, который, более заметен для коротких дуг и уменьшается с ростом длины. Измерение магнетосопротивления на дугах с достаточно большими углами раствора $(\alpha - \beta)$ позволяет уменьшить вклад фундаментальных флуктуаций.

Следует подчеркнуть, что магнетосопротивление дуг 120° не зависит от ориентации $(\alpha + \beta)/2$ относительно кристаллографических осей GaN, тогда как зависимости магнетосопротивлений дуг 90° , например, измеряемые методом Ван дер Пау для кольцевого образца с симметричными контактами существенно отличаются. И лишь усреднение по всем четырем измерениям дает совпадение с усреднением по дуге 120° (рис. 3а, б).

Мы полагаем, что наблюдаемая зависимость магнетосопротивления от направления протекания тока относительно кристаллографических осей и особенности $R_{xx}(\theta, B)$ в области осцилляций Шубникова–де-Гааза обусловлены суперпозицией вкладов двух частично заполненных подзон размерного квантования электронного спектра 2DEG. Каждая из них двукратно расщеплена спин-орбитальной связью, вид которой обусловлен понижением симметрии системы с симметрии несимметричной группы C_{6v}^4 в объеме GaN со структурой вюрцита до тригональной симметрии C_{3v} вследствие наличия конфинмента 2DEG у интерфейса GaN/AlN. При этом наблюдаемая анизотропия $R_{xx}(\theta, B)$ определяется особенностями электронной структуры 2DEG.

Итак, поперечное магнетосопротивление 2DEG имеет тригональную симметрию C_{3v} . И поскольку симметрия 2DEG не может быть выше симметрии любого из его физических свойств и при этом огра-

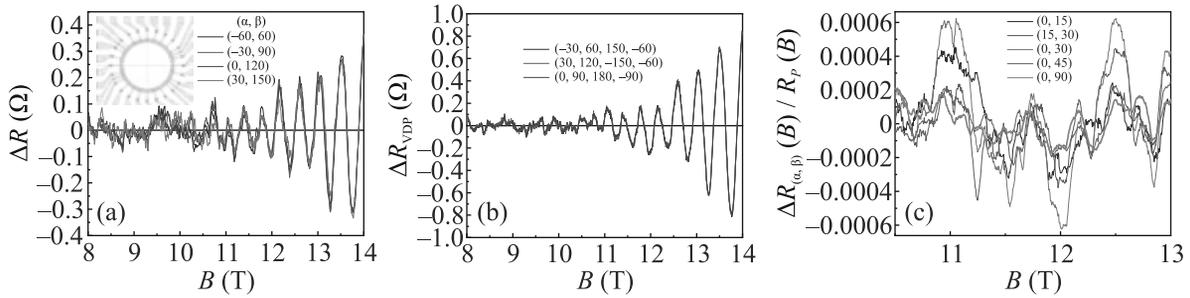


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Магнитопольные зависимости отклонения сопротивления ΔR от среднего значения $R_p(B)$ для дуг (α, β) , по-разному ориентированных относительно кристаллографических осей GaN. $\Delta R(B) = R(B) - R_p(B)$, где $R_p(B)$ – результат аппроксимации зависимости основного хода магнетосопротивления полиномом 5-й степени методом средних квадратов в диапазоне $8 \div 14$ Тл. (б) – Результаты измерений магнетосопротивления образца методом ван дер Пау для трех четверок контактов $(-30^\circ, 60^\circ, 150^\circ, -120^\circ)$; $(30^\circ, 120^\circ, -150^\circ, -60^\circ)$; $(0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, -90^\circ)$. (с) – Относительное отклонение $\Delta R_{(\alpha, \beta)}(B)/R_p(B)$ для дуг (α, β) с разными угловыми размерами $(\alpha - \beta)$ и ориентациями $(\alpha + \beta)/2$ относительно кристаллографических осей GaN

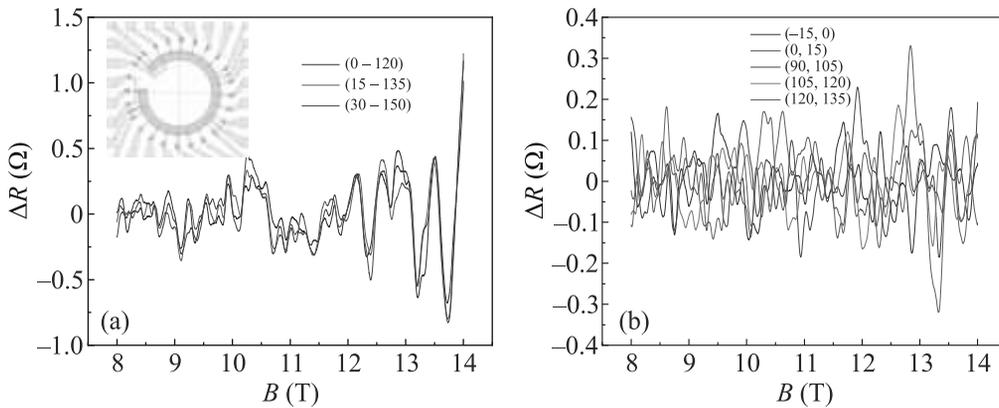


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимости – магнетосопротивления 2DEG за вычетом ее основного хода ΔR_{xx} при разных направлениях тока относительно кристаллографических осей для дуг шириной 120° (а) и 15° (б)

ничена снизу симметрией кристаллического поля, такова симметрия и самого исследуемого 2DEG. А это значит, что процессы переноса в нем нельзя корректно описать без учета геометрических свойств его зонной структуры – наличия кривизны Берри, возникновения в k -пространстве аналога магнитного поля, перенормировки магнитного момента блоховских электронов.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 23-29-00536) с использованием оборудования Ресурсного центра Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”. Квантовохимические расчеты проведены на ресурсах Федерального центра коллективного пользования научным оборудованием “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок НИЦ “Курчатовский институт”. Л. Л. Лев благодарит Министерство науки и высшего образования РФ (государственное задание по

Соглашению 075-03-2024-107 от 17.01.2024 г. (проект FSMG-2023-0006)).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. J. Fu, P. H. Pentead, D. R. Candido, G. J. Ferreira, D. P. Pires, E. Bernardes, and J. C. Egues, *Phys. Rev. B* **101**, 134416 (2020).
2. L. L. Lev, I. O. Maiboroda, M. A. Husanu, E. S. Grichuk, N. K. Chumakov, I. S. Ezubchenko, I. A. Chernykh, X. Wang, B. Tobler, T. Schmitt, M. L. Zanaveskin, V. G. Valeyev, and V. N. Strocov, *Nat. Commun.* **9**(1), 2653 (2018).
3. N. K. Chumakov, I. S. Ezubchenko, I. A. Chernykh, I. V. Belov, M. L. Zanaveskin, L. L. Lev, V. N. Strocov, and V. G. Valeyev, *VIII Euro-Asian Symposium “Trends in MAGnetism” EASTMAG-2022, Book of abstracts*, Kazan, Russia (2022), v. II, p. 305.
4. Е. Л. Ивченко, *Симметрия в физике твердого тела*, https://solid.phys.spbu.ru/images/Ivch_lec_asp.pdf.

5. K. V. Samokhin, *Ann. Phys.* **324**, 2385 (2009).
6. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993).
7. G. Kresse and J. Furthmuller, *Comput. Mater. Sci.* **6**, 15 (1996)
8. G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
9. P. E. Blochl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994)
10. D. Hobbs, G. Kresse, and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **62**, 11556 (2000).
11. G. Kresse and J. Hafner, *Journ. Phys: Cond. Matt.* **6**, 8245 (1994).
12. O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **12**, 3060 (1975)
13. D. M. Ceperley and B. J. Alder, *Phys. Rev. Letts.* **45**, 566 (1980).
14. L. Yang, J. Wang, T. Wang, M. Wu, P. Wang, D. Wang, X. Yang, F. Xu, W. Ge, X. Wu, X. Wang, and B. Shen, *Appl. Phys. Lett.* **115**(15), 152107 (2019).