

## О влиянии заряженных дислокационных стенок на подвижность в эпитаксиальных слоях GaN

© С.Е. Красавин<sup>†</sup>

Объединенный институт ядерных исследований,  
141980 Дубна, Московская обл., Россия

(Получена 28 сентября 2011 г. Принята к печати 20 октября 2011 г.)

Предложена теоретическая модель в рамках традиционного представления о ридовских цилиндрах для объяснения коллапса подвижности как функции концентрации свободных носителей в пленках на основе GaN. Наряду с фоновыми и примесными механизмами рассеяния в модели учитывается рассеяние электронов за счет заряженных дислокаций, выстроенных в стенку. Найдено выражение для высоты дрейфового барьера в зависимости от концентрации свободных носителей. На основе полученных уравнений объясняется причина зависимости положения минимума подвижности от дислокационной структуры.

### 1. Введение

Хорошо известно, что формирование полупроводниковых пленок и различных слоистых структур часто сопровождается присутствием различного рода протяженных дефектов [1,2]. В этой связи вопрос о влиянии этих дефектов на проводящие свойства по-прежнему является актуальным, так как данные материалы широко используются в промышленной электронике.

В последнее время интерес к проблеме рассеяния носителей заряда дислокациями и схожими линейными дефектами был вызван исследованием уникальных транспортных и оптических свойств широкозонных полупроводящих соединений на основе GaN [3]. Однако часто приготовление пленок GaN приводит к рождению большого числа дислокаций несоответствия различного типа (типичное значение концентраций дислокаций  $10^9 - 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ). Исключение составляют материалы, полученные сравнительно недавно (см. [4,5]), с концентрацией дислокаций  $< 10^6 \text{ см}^{-2}$ .

Характерной особенностью GaN-гетеросистем, в отличие от других полупроводниковых систем, является наличие максимума в функциональной зависимости подвижности от концентрации свободных носителей [6–8]. Физическая интерпретация такого поведения, как было отмечено в работах [7,8], заключается в доминировании дислокационного канала рассеяния по мере уменьшения уровня допирования. В противоположном пределе больших плотностей свободных носителей (концентрация  $\sim 10^{18} \text{ см}^{-2}$ ) главными источниками рассеяния являются фононы и примеси. Вычисление полной подвижности как функции концентрации свободных носителей в указанных выше работах проводилось для отдельных, хаотически расположенных заряженных дислокаций в рамках модели равномерно заряженных линий (см. также [9,10]). Установлено, однако, что в пленках GaN дислокации, как правило, выстраиваются в ряд, формируя малоугловые границы между зернами [11–13]. В этой связи актуальной становится задача о рассеянии носителей заряда на потенциальных барьерах, образо-

ванных границами зерен, наряду с другими механизмами рассеяния в GaN. Такое рассмотрение в применении к пленкам GaN было предложено в работах [14–16] в рамках термоактивационного механизма подвижности. Однако, как отмечалось в работе [17], такой подход не в состоянии объяснить, почему величина критической плотности электронов, при которой реализуется минимум подвижности, зависит от дислокационной структуры.

В настоящей работе предложена модель для объяснения корреляции между дислокационной структурой и подвижностью в пленках GaN при комнатной температуре. Вычисления полной поперечной подвижности в зависимости от концентрации свободных носителей проводятся при наличии электростатического рассеивающего потенциала дислокационных стенок в слоистых GaN-структурах. Предполагается, что подвижность, связанная с рассеянием электронов на стенках, имеет термоактивационный характер при определенных значениях модельных параметров. Расчет электростатического потенциала заряженной дислокационной стенки проводился в приближении Шоттки, в рамках модели, предложенной в работе [18]. В данной статье предполагается, что отношение радиуса цилиндра пространственного заряда к расстоянию между дислокациями является произвольным, в отличие от подхода [18], где это отношение полагалось равным 1/2 (цилиндры касаются друг друга).

### 2. Электростатический потенциал дислокационной стенки

Как и в случае отдельной дислокации, потенциал  $\phi(x, y)$  для дислокационной стенки вычисляется из уравнения Пуассона. Пусть стенка из дислокаций выстроена вдоль оси  $y$  с периодом  $D$ , при этом линии дислокаций направлены вдоль оси  $z$ . В рамках модели Рида [19–21] можно говорить о периодическом расположении цилиндров радиуса  $R$  вокруг каждой дислокации, представляющих собой область, свободную от носителей тока. Рассматривая плотность объемного заряда в приближе-

<sup>†</sup> E-mail: krasavin@theor.jinr.ru

нии Шоттки, уравнение Пуассона в этом случае можно записать в виде [18]

$$\frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial y^2} = -\frac{e}{\epsilon \epsilon_0} \left[ (N_d^+ - N_a^-) \Theta(L(y) - |x|) - \frac{f \delta(x)}{c} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(y - nD) \right], \quad (1)$$

$$\Theta(\xi) = \begin{cases} 1, & \text{если } \xi > 0 \\ 0, & \text{если } \xi \leq 0, \end{cases}$$

где  $N_d^+$  и  $N_a^-$  — концентрация доноров и акцепторов соответственно,  $D = b/2 \sin(\alpha/2)$  ( $\alpha$  — угол разориентировки зерен),  $b$  — модуль вектора Бюргерса,  $f$  — степень заполнения электронами разорванных связей дислокации,  $c$  — расстояние между разорванными связями,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость полупроводника,  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная;  $L(y) = \sqrt{R^2 - y^2}$  — длина экранирования, являющаяся для выбранной геометрии периодической функцией от  $y$ , характеризующая область, где потенциал  $\phi(x, y)$  отличен от нуля (согласно определению  $\phi(\mathbf{r}) = 0$  при  $|x| \geq L(y)$ ). Заметим, что потенциал  $\phi(x, y)$  может быть представлен в виде ряда Фурье, так как является четной функцией по  $y$  с периодом  $D$ ,

$$\phi(x, y) = \phi_0(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \cos\left(\frac{2\pi n y}{D}\right). \quad (2)$$

Здесь коэффициенты разложения, согласно (1), удовлетворяют уравнениям

$$\frac{d^2 \phi_0(x)}{dx^2} = -\left[ \frac{e(N_d^+ - N_a^-)}{\epsilon \epsilon_0} a_0(x) - \frac{2ef \delta(x)}{cD\epsilon \epsilon_0} \right], \quad (3)$$

$$\frac{d^2 \phi_n(x)}{dx^2} - A_n^2 \phi_n(x) = -\left[ \frac{e(N_d^+ - N_a^-)}{\epsilon \epsilon_0} a_n(x) - \frac{2ef \delta(x)}{cD\epsilon \epsilon_0} \right], \quad (4)$$

$$A_n = \frac{2\pi n}{D} \left[ \frac{2R}{D} + \frac{\sin(4\pi n R/D)}{2\pi n} \right]^{1/2},$$

$$a_n(x) = \frac{2}{D} \int_{-R}^R d\xi \Theta(L(\xi) - |x|) \cos\left(\frac{2\pi n \xi}{D}\right).$$

Решения для  $\phi_0(x)$  и  $\phi_n(x)$  могут быть найдены с помощью функций Грина с учетом граничного условия  $\phi_n(|x| \geq L(y)) = 0$ :

$$\phi_0(x) = -\frac{e(N_d^+ - N_a^-)}{D\epsilon_0\epsilon} \left( 2Rx^2 + \frac{4R^3}{3} \right) + \frac{ef}{cD\epsilon_0\epsilon} |x|, \quad (5)$$

$$\phi_n(x) = \frac{2e(N_d^+ - N_a^-)}{A_n^2 \epsilon_0 \epsilon \pi n} \sin\left(\frac{2\pi n R}{D}\right)$$

$$- \frac{e(N_d^+ - N_a^-) \alpha_n}{A_n \epsilon_0 \epsilon D} \cosh(A_n x) - \frac{ef}{cDA_n \epsilon_0 \epsilon} \exp(-A_n |x|),$$

$$\alpha_n = \int_{-R}^R d\xi \cos\left(\frac{2\pi n \xi}{D}\right) \exp[-A_n L(\xi)]. \quad (6)$$

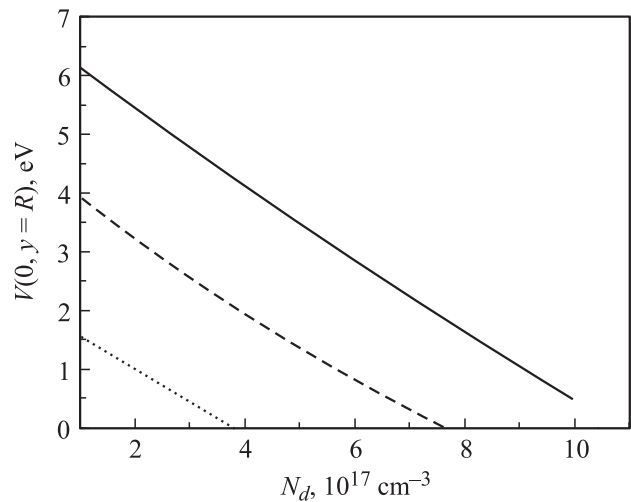


Рис. 1. Величина дрейфового потенциального барьера как функция коэффициента  $f$ , характеризующего степень заполнения ненасыщенных связей дислокации в стенке. Сплошная линия —  $f = 0.3$ , штриховая —  $f = 0.2$ , точечная —  $f = 0.08$ . Степень компенсации  $N_a/N_d = 0.3$ ,  $D = 10^{-5}$  см.

Термоактивационная подвижность, обусловленная наличием потенциальных барьеров, может быть вычислена по известной формуле [22]

$$\mu_{GB} = \frac{eL}{\sqrt{8kT\pi m^*}} \exp[-V(0, y = R)/kT], \quad (7)$$

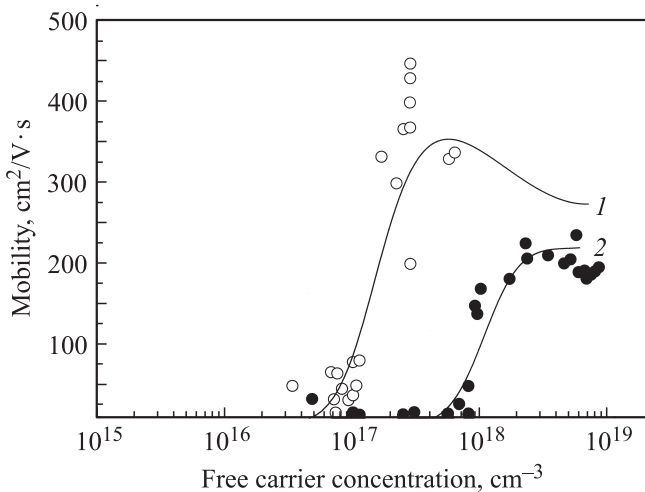
где  $e$  — заряд электрона,  $m^*$  — его эффективная масса,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура;  $V(0, y = R) = -e\phi(0, y = R)$  — дрейфовый потенциальный барьер в точке  $x = 0$ , обусловленный присутствием заряженной дислокационной стенки;  $L$  — средний размер зерна. Явный вид дрейфового потенциала может быть получен на основе уравнений (4), (5), из которых видно, что высота барьера  $V(0, x = R)$  зависит от величины допирования через  $R = \sqrt{f/\pi c(N_d^+ - N_a^-)}$ . Зависимость высоты дрейфового потенциала от величины допирования представлена на рис. 1 для различных значений коэффициента заполнения ненасыщенных связей электронами  $f$ . Отметим, что в случае  $2R \approx D$  дрейфовый потенциал имеет довольно простой вид:

$$V(0, y = D/2) = -e\phi(0, y = D/2) = \frac{4e^2(N_d^+ - N_a^-)R^3}{3\epsilon_0\epsilon D} - \frac{e^2 f}{2c\pi\epsilon_0\epsilon} \ln 2. \quad (8)$$

Таким образом, полная эффективная подвижность  $\mu^*$  может быть вычислена с помощью формулы [22,23]

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_{GB}}, \quad (9)$$

где  $\mu_1$  — подвижность, обусловленная другими каналами рассеяния в GaN без учета кулоновского рассеяния



**Рис. 2.** Электронная подвижность как функция концентрации носителей для двух образцов из работы [17] (точки) с плотностью дислокаций  $N_{\text{dis}} = 5 \cdot 10^9$  (1) и  $2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  (2). Сплошные линии — теоретические кривые с набором модельных параметров: 1 —  $f = 0.05$ ,  $D = 10^{-5} \text{ см}$ ,  $L = 3 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ ,  $N_a/N_d = 0.3$ ; 2 —  $f = 0.05$ ,  $D = 9 \cdot 10^{-6} \text{ см}$ ,  $L = 3 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ ,  $N_a/N_d = 0.4$ ; другие параметры взяты из работы [24].

дислокационными стенками. Явное выражение для  $\mu_1$ , используемое в настоящей работе, а также набор параметров для GaN были взяты из работы [24]. Зависимость  $\mu^*$  от концентрации свободных носителей  $n$  может быть вычислена с помощью уравнения зарядового баланса  $n = N_d^+ - N_a^- - f(N_{\text{dis}}/c)$ , где  $N_{\text{dis}}$  — средняя плотность дислокаций.

### 3. Результаты и обсуждение

Как видно из рис. 2, предложенная модель на основе полученных в предыдущем параграфе уравнений достаточно хорошо описывает поведение эффективной подвижности  $\mu^*$  от  $n$  в области ее минимального значения, а также при более высоких плотностях дислокаций (плотности дислокаций  $5 \cdot 10^9$  и  $2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ). Резкое падение  $\mu^*$  объясняется тем, что с уменьшением допирования вклад в эффективную подвижность, обусловленный  $\mu_{GB}$ , доминирует благодаря росту дрейфового потенциального барьера  $V(0, y = R)$ . Этот рост обусловлен тем, что  $V(0, y = R)$  в общем случае пропорционален некоторой степенной  $R$ , а эта величина в свою очередь связана с уровнем допирования через соотношение  $R \sim 1/(N_d^+ - N_a^-)^{1/2}$ . Так, для  $2R \approx D$  из формулы (8) имеем  $V(0, y = R) \propto 1/(N_d^+ - N_a^-)^{1/2}$ . Имеющаяся на рис. 2 корреляция между положением минимума  $\mu^*$  и плотностью дислокаций в данной модели объясняется следующим образом. Локальная плотность дислокаций в стенке, как хорошо известно, обратно пропорциональна расстоянию между ними (см. [25]), т.е. параметру  $D$  в нашем формализме. Поэтому величина  $V(0, y = R) \propto R/D$  растет по мере роста плотности

дислокаций в стенке (уменьшение  $D$ ) (при фиксированном уровне допирования). В силу сказанного в случае больших дислокационных плотностей, формирующих стенку, резкое падение  $\mu^*$  наблюдается при больших значениях  $n$ . В то же время модель не в состоянии объяснить наблюдаемое в экспериментах возрастание  $\mu^*$  в области малого допирования ( $n < 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ). Наши предварительные расчеты показывают, что для указанных  $N_{\text{dis}}$  эффект резкого подавления подвижности может быть наблюдаем и в случае хаотического расположения дислокаций. Такой расчет планируется провести в рамках ридовской модели [26] со стохастическим распределением значений потенциала.

### 4. Заключение

В данной работе показано, что эффект резкого подавления подвижности с уменьшением концентрации свободных носителей может быть объяснен в рамках стандартного представления о ридовских цилиндрах. К недостаткам модели следует отнести отсутствие описания поведения подвижности в области малого допирования. По-видимому, для получения возрастания подвижности в этом случае требуется дальнейшее усовершенствование предложенной в этой статье модели.

### Список литературы

- [1] Ю.А. Тхорик, Л.С. Хазан. *Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах* (Киев, Наук. думка, 1983).
- [2] В.М. Иевлев, А.В. Бугаков, В.И. Трофимов. *Рост и субструктура конденсированных пленок* (Воронеж, 2000).
- [3] S.J. Pearton, J.C. Zolper, R.J. Shul, F. Ren. *J. Appl. Phys.*, **86**, 1 (1999).
- [4] D. Huang, F. Yun, M.A. Reshchikov, D. Wang, H. Morkoc, D.L. Rode, L.A. Farina, C. Kurdak, K.T. Tsen, S.S. Park, K.Y. Lee. *Solid-State Electron.*, **45**, 711 (2001).
- [5] D.C. Look, J.R. Sizelove. *Appl. Phys. Lett.*, **79**, 1133 (2001).
- [6] N.G. Weimann, L.F. Eastman, D. Doppalapudi, H.M. Ng, T.D. Moustakas. *J. Appl. Phys.*, **83**, 3656 (1998).
- [7] H.M. Ng, D. Doppalapudi, T.D. Moustakas, N.G. Weimann, L.F. Eastman. *Appl. Phys. Lett.*, **73**, 821 (1998).
- [8] D.C. Look, J.R. Sizelove. *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 1237 (1999).
- [9] M.N. Gurusingham, T.G. Andersson. *Phys. Rev. B*, **67**, 235 208 (2003).
- [10] J. Ho You, Jun-Qiang Lu, H.T. Johnson. *J. Appl. Phys.*, **99**, 033 706 (2006).
- [11] S. Keller, B.P. Keller, Y.-F. Wu, B. Heying, D. Kapolnek, J.S. Speck, U.K. Mishra, S.P. DenBaars. *Appl. Phys. Lett.*, **68**, 1525 (1996).
- [12] V. Potin, P. Vermaut, P. Ruterana, G. Nouet. *J. Electron. Mater.*, **27**, 266 (1998).
- [13] A. Bere, A. Serra. *Interface Sci.*, **9**, 149 (2001).
- [14] M. Fehrer, S. Einfeldt, U. Birkle, T. Gollnik, D. Hommel. *J. Cryst. Growth*, **189/190**, 763 (1998).
- [15] J. Salzman, C. Uzan-Saguy, R. Kalish, V. Richter, B. Mayler. *Appl. Phys. Lett.*, **76**, 1431 (2000).

- [16] I. Shalish, L. Kronik, G. Segal, Y. Shapira, S. Zamir, B. Meyer, J. Salzman. *Phys. Rev. B*, **61**, 15 573 (2000).
- [17] J.-L. Farvacque, Z. Bougrioua, I. Moerman. *Phys. Rev. B*, **63**, 115 202 (2001).
- [18] К.М. Дошанов, С.Х. Шамирзаев. *ФТП*, **12**, 2328 (1978).
- [19] W.T. Read. *Phil. Mag.*, **45**, 775 (1954).
- [20] З.А. Велиев. *ФТП*, **19**, 158 (1985).
- [21] В.Б. Шикин, Ю.В. Шикина. *УФН*, **165**, 887 (1995).
- [22] J.W. Orton, M.J. Powell. *Rep. Progr. Phys.*, **43**, 81 (1980).
- [23] L.L. Kazmerski, W.B. Berry, C.W. Allen. *J. Appl. Phys.*, **43**, 3515 (1972).
- [24] M. Shur, B. Gelmont, M. Asif Khan. *J. Electron. Mater.*, **25**, 777 (1996).
- [25] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций* (М., Атомиздат, 1972).
- [26] З.А. Велиев. *ФТП*, **18**, 1673 (1984).

*Редактор Л.В. Шаронова*

## **Effect of charged dislocation walls on the mobility of GaN epitaxial layers**

*S.E. Krasavin*

Joint Institute for Nuclear Research,  
141980 Dubna, Moscow Region, Russia

**Abstract** A model to explain the observed collapse of the mobility as a function of the free carrier concentration in GaN epilayers is proposed. The scattering of electrons due to charged dislocation walls is considered together with phonon and impurity mechanisms of scattering. The free carrier concentration dependence of the drift barrier height is found. Based on the obtained equations the reason of correlation between the minimal mobility position and dislocation substructure is explained.