

一种测量纤锌矿 n-GaN 位错密度的新方法

何菊生 张萌 潘华清 齐维靖 李平

A new method to determine the dislocation density in wurtzite n-GaN

He Ju-Sheng Zhang Meng Pan Hua-Qing Qi Wei-Jing Li Ping

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 167201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.167201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.167201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I16>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

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>

不同散射机理对 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ nMOSFET 反型沟道电子迁移率的影响

Effects of different scattering mechanisms on inversion-channel electron mobility in $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ nMOSFET

物理学报.2013, 62(15): 157201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.157201>

表面效应对 Li 掺杂的 ZnO 薄膜材料 p 型电导的影响

The surface effect on the p-type conductivity of Li-doped ZnO film

物理学报.2012, 61(15): 157301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.157301>

一种测量纤锌矿 n-GaN 位错密度的新方法*

何菊生^{1)†} 张萌²⁾ 潘华清³⁾ 齐维靖²⁾ 李平⁴⁾

1) (南昌大学科学技术学院, 南昌 330029)

2) (南昌大学材料科学与工程学院, 南昌 330031)

3) (上饶职业技术学院机械工程系, 上饶 334100)

4) (南昌大学现代教育技术中心, 南昌 330031)

(2016年2月29日收到; 2016年6月7日收到修改稿)

采用点缺陷线性分布模型, 利用能量弛豫方法得到了基于 van der Pauw 变温霍尔效应测量来确定纤锌矿 n-GaN 位错密度的新方法. 用高分辨率 X 射线衍射仪测试了两个分别用 MOCVD 方法和用 HVPE 方法生长的 n-GaN 样品, 用 Srikant 方法拟合得到了位错密度. 结果表明两种方法高度一致. 进一步的研究表明, 新方法和化学腐蚀方法的测试结果基本一致, 相关拟合参数与采用 Rode 迭代法精确求解 Boltzmann 运输方程的理论结果也基本一致. 研究还表明, 新方法能有效消除施主杂质带和界面简并层对测试结果的影响, 测试剔除界面层影响后的整个外延层的刃、螺位错密度, 而不是穿透位错密度. 该方法适合霍尔迁移率曲线峰位在 200 K 左右及以下并且峰位明确的各种生长工艺、各种厚度、各种质量层次的薄膜和体材料, 具有对迁移率曲线高度拟合, 材料参数精确, 计算简便、收敛速度快等优点.

关键词: 氮化镓, 霍尔迁移率, 位错密度, Rode 迭代法

PACS: 72.10.Fk, 72.20.Fr, 73.20.Hb, 81.70.-q

DOI: 10.7498/aps.65.167201

1 引言

氮化镓 (GaN) 是制备工艺成熟、性能优异、应用广泛的第 3 代半导体材料, 但通常位错密度高达 10^8 — 10^{10} cm⁻², 会导致器件漏电流提高、少数载流子寿命缩短, 成为杂质迅速扩散的途径, 制约了 GaN 基发光器件的性能^[1], 因此, 对 GaN 材料中各种类型位错密度的测试长期以来都是国内外学术研究的热点. 目前主要的测试方法有 X 射线衍射法 (XRD)^[2-7]、化学腐蚀法 (EPD)^[5,6] 两大类. 前者包括单独根据各衍射晶面的半高宽 (FWHM) 进行的简单换算法, 如 (002) 等^[2-4], (201)^[2], (302)^[3], (105)^[4] 晶面, 以及综合多个衍射晶面 FWHM 的模型法, 如 Williamson-Hall 方法^[4,5,7], Srikant 方法等^[3,6,7]. XRD 方法制样简单, 但 FWHM 除了受位

错展宽外, 还受到很多因素影响, 尤其是受镶嵌块 (马赛克结构) 尺寸效应以及异质外延中晶片翘曲的展宽可能的影响很大, 有时使得测试只有数量级意义甚至不能测试, 不确定性较大; 化学腐蚀法有湿法选择性腐蚀^[5] 等许多辅助腐蚀工艺, 存在腐蚀工艺不到位或位错腐蚀坑重叠等问题, 并且采取人工统计, 只能测出穿透位错密度, 测试具有破坏性. 上述方法都是微区观测, 对于位错密度横向纵向通常分布很不均匀的 n-GaN 材料来说, 其局限性是很明显的. 而 van der Pauw 变温霍尔效应测试能给出许多电学量的统计平均, 理论完备, 测试精确, 吸引了大批研究者进行了许多尝试, 例如许多研究者就用室温迁移率和载流子浓度两个参数来推定位错密度^[8-10]. 事实上, 位错散射远不如电离杂质散射和极性光学波散射, 这两个参数不足以反映位错密度的准确信息, 甚至想用 Matthiessen 定则拟合

* 江西省自然科学基金 (批准号: 20151BAB207066) 和南昌大学科学技术学院自然科学基金 (批准号: 2012-ZR-06) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: Hejusheng_2004@sohu.com

或采用弛豫时间近似方法求解 Boltzmann 输运方程来从测试曲线上准确分离出位错密度信息也是不可能实现的, 因为位错散射实在是不够强.

为此, 我们在计算上避开通常采用的各种载流子散射机理, 利用 n-GaN 材料具有高位错密度这一突出特征, 采用两类点缺陷分别聚集于刃、螺位错线周围呈线性分布模型, 围绕三大电离方式(热电离、碰撞电离、光电离)进行宏观统计计算, 通过点缺陷(浅施主)——而不是载流子——的能量弛豫, 建立起了可用于实验测试的霍尔迁移率与位错密度间的严格函数关系, 并通过实验测试, 对新方法进行了检验.

2 实验与原理

2.1 浅施主能量弛豫模型

n-GaN 材料根据内部极化情况可分为 Ga 极性、N 极性、半极性、非极性四类, 而目前只有 Ga 极性材料制备工艺成熟, van der Pauw 变温霍尔效应测量基本集中在这类材料上, 后三类则鲜有报道, 因为它们普遍晶体质量较差, 表面形貌粗糙不规则, 非故意掺杂样品自由载流子浓度高、室温迁移率低, 无法达到器件应用级别, 目前还处于初始研究阶段. 因此, 本模型只针对 Ga 极性材料.

n-GaN 材料的高位错密度, 使点缺陷聚集于位错线周围呈线性分布. 这是因为位错产生悬挂键, 易于吸收周围杂质和缺陷的电子成为受主中心, 在带负电的位错线周围形成了一个圆柱形正电荷空间区, 确切地说, 是六棱柱形正电荷空间区. 化学腐蚀实验表明^[5], 对于 Ga 极性 GaN 材料, 螺位错、刃位错和混合位错的腐蚀坑都是六角形结构(N 极性 GaN 材料的腐蚀坑是圆形^[5]), 并且相比较而言, 螺位错腐蚀坑很大、刃位错腐蚀坑很多. 这些正电荷是电离了的施主杂质, 而且 n-GaN 的费米能级在导带底附近, 表明决定 van der Pauw 变温霍尔效应测试结果的是各种浅施主杂质, 因此, 可以这样认为, 每一条位错线周围都有 6 条浅施主杂质线, 由此用位错密度 N_{dis} 和 c 轴晶格常数得到单个浅施主杂质占据的体积 V 为

$$V = \frac{1}{6} \frac{c}{N_{\text{dis}}}. \quad (1)$$

高密度的浅施主杂质围绕刃、螺位错线呈六棱柱形分布这一简单特点, 使晶界等处浅施主杂质可

忽略不计, 而沿生长面方向浅施主杂质的周期性分布, 使得刃、螺位错周围两类浅施主杂质能级清晰. 这些特征, 保证了从理论上采用动力学方法, 可以方便、准确得到关于单施主杂质的各类统计宏观量.

如采用类氢施主模型, 在晶格能量弛豫过程中, 单位时间里从单施主上释放的总能量用浅施主电离能 ε_{D} ($\varepsilon_{\text{D}} = me^4/[2(4\pi\kappa_0\varepsilon_0\hbar)^2]$)、光学声子频率 ω_{LO} 表示为

$$E_{\text{放}} = \frac{me^4}{2(4\pi\kappa_0\varepsilon_0\hbar)^2} \cdot \omega_{\text{LO}} \cdot 2, \quad (2)$$

其中 e , m 分别为电子电量和有效质量, κ_0 为静态介电常数, ε_0 为真空介电常数, \hbar 为普朗克常数. 下面计算在晶格能量弛豫过程中, 单位时间里单施主杂质吸收的能量.

设载流子能量弛豫时间(即晶格能量弛豫时间)为 τ , 则浅施主杂质吸收的能量由单位时间内受到一次碰撞的概率 $1/\tau$ 、光学声子能量 $\hbar\omega_{\text{LO}}$ 、单施主体积 V 、能量状态密度 $4\pi(2m\hbar\omega_{\text{LO}})^{3/2}/[8(2\pi\hbar)^3]$ 及单施主能量宏观吸收率 k 共同决定

$$E_{\text{吸}} = \frac{1}{\tau} \cdot \hbar\omega_{\text{LO}} \cdot V \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} (2m\hbar\omega_{\text{LO}})^{3/2} \cdot k. \quad (3)$$

问题的关键是计算 k . 如前所述, 浅施主实际上是两类杂质, 电离能不一样. 一般认为, 随着杂质浓度的增加, 杂质电子会发生轨道交叠, 受杂质中心的束缚减弱, 因此杂质电离能随杂质浓度的增加而降低, 常用屏蔽公式 $\varepsilon_{\text{D}} = \varepsilon_{\text{D0}} - \alpha N_{\text{D}}^{1/3}$ 来描述浅施主电离能 ε_{D} 与浅施主浓度 N_{D} 的关系, 其中 ε_{D0} 由杂质种类决定, 对 n-GaN 屏蔽因子 $\alpha \approx 2.7 \times 10^{-5} \text{ meV}\cdot\text{cm}^{[11,12]}$. 刃位错腐蚀坑明显多很多, 表明刃位错周围的浅施主浓度 N_{D1} 远大于螺位错周围的浅施主浓度 N_{D2} , 因此, 刃位错周围的浅施主电离能 ε_{D1} 远低于螺位错 ε_{D2} , 在晶格能量弛豫过程中, 刃位错周围的浅施主首先电离, 这种由晶格振动引起的电离叫热电离, 由于 van der Pauw 变温霍尔效应测试是在样品避光下进行, 我们未考虑光电离. 浅施主电离能 ε_{D1} , ε_{D2} 通常在 90 mV 以下, 对应波长为 13.6 μm 以上的远红外光, 任何物体任何温度下都会向外辐射远红外光, 因此避光情况下样品照样可以发射远红外光子, 使浅施主光电离, 但目前学术界对于避光条件下浅施主电离中光电离可能占有多大份额, 没有明确的看法,

一般都笼统地称为光热电离, 考虑到在避光条件下这是以损失样品原子的振动动能为代价的, 或者说样品原子本可以发射一个声子使浅施主电子热电离, 却变为发射一个远红外光子, 使浅施主电子光电离. 从实际效果上看, 我们认为忽略光电离, 不会对结果产生明显影响, 于是很容易计算单施主从晶格振动中获得的能量宏观吸收率 k . 如图 1 所示, 设导带和浅施主能级 E_{D1} 上电子平均占有率用 Fermi-Dirac 函数分别表示为

$$f_C = 1 / \{1 + \exp[(E_C - E_F) / (k_B T)]\},$$

$$f_{D1} = 1 / \{1 + 1/g_D \cdot \exp[(E_{D1} - E_F) / (k_B T)]\},$$

其中简并因子 $g_D = 2$, 而平均非占有率分别为 $(1 - f_C)$, $(1 - f_{D1})$. 由细致平衡原理可知, 在热平衡情况下, 向上跃迁的电子数 (吸收能量的过程) 和向下跃迁的电子数 (释放能量的过程) 必然相同, 即

$$f_{D1} \cdot (1 - f_C) \cdot T_{D1 \rightarrow C} = f_C \cdot (1 - f_{D1}) \cdot T_{C \rightarrow D1}, \quad (4)$$

其中 $T_{D1 \rightarrow C}$, $T_{C \rightarrow D1}$ 分别是杂质能级 E_{D1} 至导带、导带至杂质能级 E_{D1} 的电子宏观跃迁率, 由此得单施主能量宏观吸收率 k 为

$$k = \frac{T_{D1 \rightarrow C}}{T_{D1 \rightarrow C} + T_{C \rightarrow D1}} = \frac{1}{1 + 2 \exp[(E_C - E_{D1}) / (k_B T)]}, \quad (5)$$

而 $E_C - E_{D1} = (E_C - E_{C \min}) + (E_{C \min} - E_{D1}) = E_k + \varepsilon_{D1}$, 其中 E_k 是由于电离消耗了较小的能量

(约 10 meV), 进入导带后保存下来的电子统计宏观动能 (通常 40 meV 以上). 由于原子质量比电子质量大很多, 运动比电子迟缓得多, 可以认为, 在很迅速的电子跃迁过程中, 原子的情况 (位置和速度) 基本不变, 这就是弗兰克-康登原理 (Franck-Condon principle). 这样, 一方面使得导带电子与原子碰撞后能够返回原能级 (分别吸收和发射光学声子), 另一方面大量的导带电子必然在螺位错周围的浅施主杂质尚未从晶格能量弛豫过程中获得足够“电离”的能量之前就将其碰撞电离, 与热电离方程 (4) 类似, 有碰撞电离方程

$$f_{D2} \cdot (1 - f_C) \cdot T_{D2 \rightarrow C} = f_C \cdot (1 - f_{D2}) \cdot T_{C \rightarrow D2}. \quad (6)$$

不同的是, 导带电子只在导带底和杂质能级 E_{D2} 间跃迁, 原因还是弗兰克-康登原理, “笨重”的螺位错周围的浅施主杂质原子通过原子振动 (与晶格交换声学声子), 刚缓慢积蓄到足够的能量时总能被“等待”的导带电子迅速“发现”, 在晶格振动 (光学声子) 的配合下, 导带电子终于迎来了在导带底与能级 E_{D2} 间往返的机会. 可见, 碰撞电离和热电离实质上都是晶格振动和导带电子碰撞的结果, 只不过碰撞电离是导带电子的动能高到了一个极限, 使得最难撼动的杂质原子得以电离. 由动量守恒定律和能量守恒定律可知, 这一极限动能就是原子的振动动能 $k_B T$, 由此可以确定热电离过程中的电子统计宏观动能 E_k 由原子的振动动能 $k_B T$ 、碰撞电离

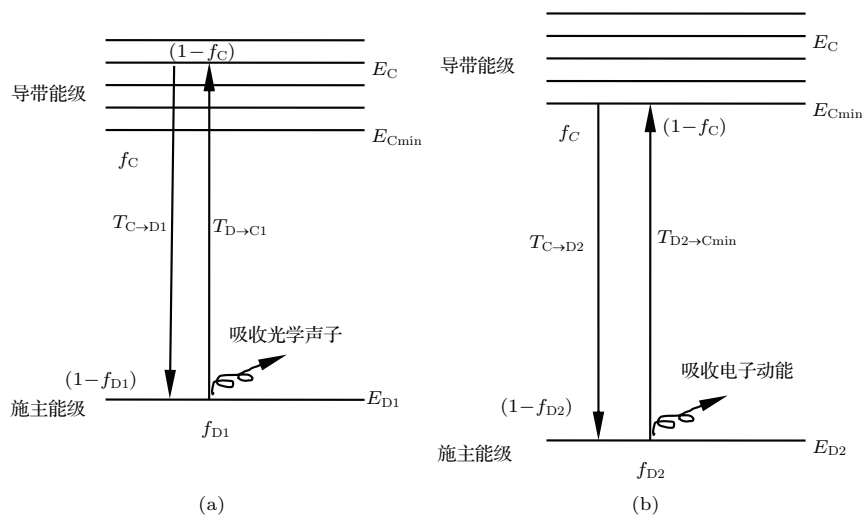


图 1 (a) 刃位错周围杂质 E_{D1} 能级上电子的热电离; (b) 螺位错周围杂质 E_{D2} 能级上电子的碰撞电离

Fig. 1. (a) Thermoionization of the impurity around the edge dislocation; (b) ionization by collision with the conduction band electron of the impurity around the screw dislocation.

过程单施主能量宏观吸收率 k' 、热电离与碰撞电离的宏观碰撞次数之比 β 三者决定: $E_k = k_B T \cdot k' \cdot \beta$, 从宏观统计看, 其中 β 也为能级 E_{D1} 与能级 E_{D2} 上的杂质数目之比, 即 $\beta = (6N_{\text{edge}})/(6N_{\text{screw}})$, k' 由方程 (6) 得到

$$k' = \frac{T_{D2 \rightarrow C}}{T_{D2 \rightarrow C} + T_{C \rightarrow D2}} = \frac{1}{1 + 2 \exp[(E_{C \text{ min}} - E_{D2})/(k_B T)]} = \frac{1}{1 + 2 \exp[\varepsilon_{D2}/(k_B T)]}. \quad (7)$$

这样, 电子统计宏观动能 E_k 为

$$E_k = k_B T \cdot k' \cdot \beta = \frac{\beta k_B T}{1 + 2 \exp[\varepsilon_{D2}/(k_B T)]}, \quad (8)$$

所以

$$k = \frac{T_{D1 \rightarrow C}}{T_{D1 \rightarrow C} + T_{C \rightarrow D1}} = \{1 + g_D \cdot \exp\{\beta/[1 + g_D \cdot \exp(\varepsilon_{D2}/(k_B T))] + \varepsilon_{D1}/(k_B T)\}\}^{-1}. \quad (9)$$

由 (2) 式, (3) 式和 (9) 式得载流子迁移率

$$\mu = \frac{e}{m} \tau = \frac{2^{3/2} \kappa_0^2 \varepsilon_0^2 c (\hbar \omega_{LO})^3 / 2}{3 e^3 m^{1/2} N_{\text{dis}}} \times \frac{1}{1 + g_D \cdot e^{\varepsilon_{D1}/(k_B T)} + \beta/[1 + g_D \cdot e^{\varepsilon_{D2}/(k_B T)}]}. \quad (10)$$

如位错密度、迁移率分别以 cm^{-2} , $\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 为单位, 计算采用表 1 中材料参数, ε_0 , m_0 分别为真空中的介电常数和自由电子质量, 则 (10) 式可表示为

$$\mu = \frac{3.99 \times 10^{12}}{N_{\text{dis}}} \times \frac{1}{1 + g_D e^{\varepsilon_{D1}/(k_B T)} + \beta/(1 + g_D e^{\varepsilon_{D2}/(k_B T)})}. \quad (11)$$

表 1 纤锌矿 n-GaN 材料参数

Table 1. Material parameters of wurtzite n-GaN.

参数名称 / 单位	参数值
静态介电常数 κ_0 / ε_0	10.4
电子有效质量 m/m_0	0.22
光学声子能量 $\hbar \omega_{LO}/\text{meV}$	91.2
c 轴晶格常数/nm	0.5185

在霍尔效应现象里, 浅施主能量弛豫可看作准平衡状态, 因此可以直接将迁移率 μ 看成霍尔迁移率 μ_H , 以 N_{dis} , ε_{D1} , ε_{D2} , β 为参数用 (11) 式对霍尔迁移率曲线 μ_H-T 进行拟合, 即可得到螺位错、刃位错密度:

$$N_{\text{screw}} = N_{\text{dis}}/(\beta + 1), \quad (12a)$$

$$N_{\text{edge}} = \beta N_{\text{dis}}/(\beta + 1). \quad (12b)$$

2.2 实验

两实验样品为: 02# 厚度为 2.75 μm , MOCVD 方法生长轻掺 Si, 62# 厚度为 373 μm , HVPE 方法生长自支撑未故意掺杂. 采用荷兰帕纳科公司 X'Pert Pro MPD 型 X 射线衍射仪测试了多个晶面的半高宽 (FWHM), 测试结果如图 2 所示. 用 Srikant 方法 [6] 拟合得到 2# 面内扭转角 (twist), 面外倾斜角 (tilt) 分别为 0.13885° 和 0.07182° , 得刃、螺位错密度为 $N_{\text{edge}} = \beta_{\text{twist}}^2/(4.35b_{\text{edge}}^2) = 1.3 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 和 $N_{\text{screw}} = \beta_{\text{tilt}}^2/(4.35b_{\text{screw}}^2) = 1.3 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$; 而 62# 面内扭转角 (twist), 面外倾斜角 (tilt) 分别为 0.03721° 和 0.01896° , 得刃、螺位错密度为 $N_{\text{edge}} = 9.5 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$ 和 $N_{\text{screw}} = 9.4 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$.

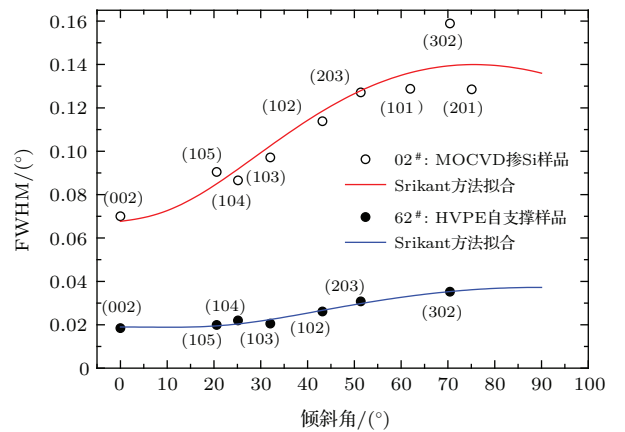


图 2 (网刊彩色) 02#, 62# 样品各晶面半高宽与倾斜角的关系 Fig. 2. (color online) Width of ω -scans as a function of inclination angle ψ for sample 02# grown by MOCVD and 62# grown by HVPE. The symbols are experimental data and the lines are fits to them using Srikant model.

van der Pauw 变温霍尔效应测试在 ECOPIA 公司的 HMS-5000/HMS-5500 全自动变温霍尔效应测试仪上进行. 测试电流为 1 mA, 磁场为 5.5 kG, 温控精度 0.5 K, 样品尺寸 10 mm \times 10 mm, 用金属钢做电极, 避光, 测试范围为 80—320 K, 霍尔迁移率测试结果如图 3 所示. 为清楚地观察本文

的计算模型对这两个电学参数相差较大的样品都能非常精确地拟合, 我们采用了双对数坐标系.

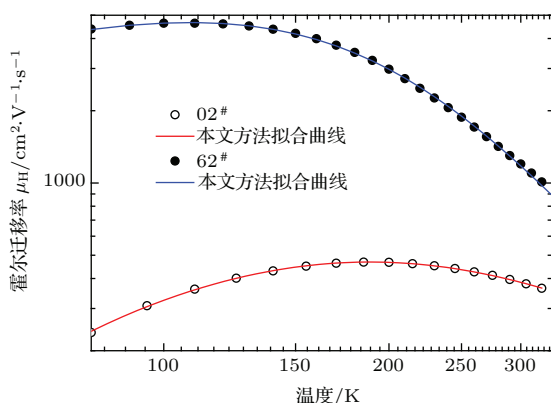


图3 (网刊彩色) 本文方法对02#, 62# 样品霍尔迁移率的拟合

Fig. 3. (color online) Experimental (points) and model (solid line) mobility for sample 02# and 62#; the latter is determined by a least-square fit to our shallow donor energy relaxation calculation model using Eq. (11).

3 结果与讨论

采用(11)式对两实验样品霍尔迁移率拟合的结果为: 02# $N_{\text{dis}} = (1.38 \pm 0.02) \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$, $\varepsilon_{\text{D1}} = (11.7 \pm 0.1) \text{ meV}$, $\varepsilon_{\text{D2}} = (53 \pm 1) \text{ meV}$, $\beta = 11.8 \pm 0.3$, 62# $N_{\text{dis}} = (1.92 \pm 0.04) \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$, $\varepsilon_{\text{D1}} = (4.3 \pm 0.2) \text{ meV}$, $\varepsilon_{\text{D2}} = (45.7 \pm 0.6) \text{ meV}$, $\beta = 24.8 \pm 0.5$, 可见拟合精密度很高. 我们对各种质量层次、各种厚度、各种掺杂水平、各种生长工艺的百余 n-GaN 薄膜(体)材料都进行了这种拟合, 结果表明, 霍尔迁移率曲线峰位在 200 K 左右及以下并且峰位明确的样品(室温迁移率可以在 $100 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 以下), 即除了个别较差的样品(室温迁移率只有 $100 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 左右或更低且霍尔迁移率曲线峰位在 300 K 左右及以上、峰形很平缓的样品), 模型都能和实验精确符合.

进一步采用(12a)式和(12b)式得到的刃、螺位错密度如表2所列, 可见新方法与X射线衍射法有较高的一致性.

必须指出的是, 62#号样品的刃位错密度两种方法明显有偏差(1.0 vs. 1.9), 可能是仪器没有测出(101)和(201)两晶面的FWHM所致. 我们测试了5家机构不同年份不同批次生长的数十个样品, 发现没有一个样品是严格按Srikant模型曲线分布的, 图2中的62#样品好象还比较

符合, 其实那是和2#样品在同一图像里, 纵坐标范围太大($0^\circ-0.16^\circ$)的缘故, 如果将范围改为 $0^\circ-0.036^\circ$, 如图4所示, 则实验和Srikant模型偏离非常明显, 如果去掉(203)晶面, 则拟合曲线及拟合结果(β_{twist} 和 β_{tilt})明显不一样, 而刃、螺位错密度与这两个角的平方成正比, 即 $N_{\text{edge}} = \beta_{\text{twist}}^2/(4.35b_{\text{edge}}^2)$, $N_{\text{screw}} = \beta_{\text{tilt}}^2/(4.35b_{\text{screw}}^2)$, 明显加剧了这种偏差. 去掉(203)后拟合得到 $N_{\text{screw}} = 8.9 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$, $N_{\text{edge}} = 1.3 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$, 两类位错和我们方法的结果都比较接近. 由此可见, 如我们前文所述, X射线衍射法有很大的不确定性.

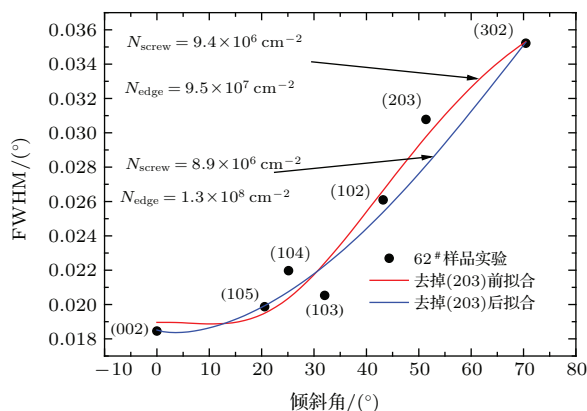


图4 (网刊彩色) 62# 样品去掉(203)前后拟合结果比较
Fig. 4. (color online) Comparison between the fit to all the experimental FWHM and that to part (excluding (203)) using Srikant mode for sample 62#. The solid curve is the fitted total FWHM curve, including (203), while the dashed curve fit to part, excluding (203).

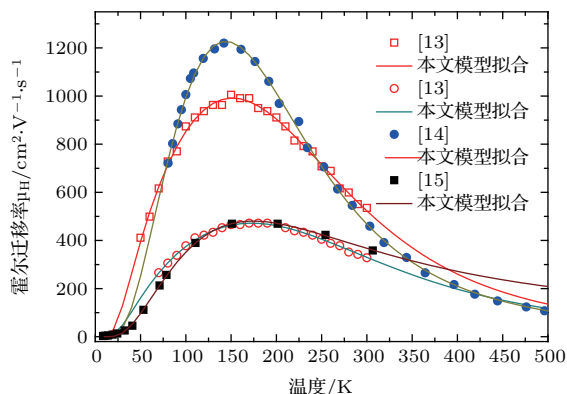


图5 (网刊彩色) 本文模型对做过化学腐蚀实验的4样品的迁移率拟合

Fig. 5. (color online) Experimental μ_{H} vs. T datas (points) of 4 samples from [13–15] fitted in terms of relaxation energy for shallow donor using our Model (solid lines). The dislocation density of these samples has been determined by EPD.

表 2 中还列出了文献 [13—15] 的 4 个样品, 其化学腐蚀实验测试结果与我们对文献中霍尔迁移率拟合的结果也基本一致, 拟合效果如图 5 所示, 遗憾的是文献 [13—15] 没给出刃、螺位错密度, 事实上, 利用 van der Pauw 变温霍尔效应测试来确定刃、螺位错密度的研究还未见报道.

为考察拟合参数 ε_{D1} , ε_{D2} 的准确性, 最精确的方法是求解 Boltzmann 输运方程. 可是该方程没有精确的解析解, 目前最精确的数值方法有 Rode 迭代法 [11,12] 等, 迭代中我们考虑了电离杂质散射、极性光学波散射、压电散射、中性杂质散射和声学波

形变势散射, 拟合参数有补偿受主浓度 N_A 、弹性常数 C_L 及高频介电常数 κ_∞ [11,12]. 然后用如下电平衡方程求得 ε_{D1} , ε_{D2} ,

$$n + N_A = \sum_{i=1}^{i=2} \frac{N_{Di}}{1 + 2 \frac{n}{N_C} e^{\varepsilon_{Di}/(k_B T)}}, \quad (13)$$

其中有效态密度 $N_C = 2(2\pi m k_B T/h^2)^{3/2}$. 该方法需要在 n_H-T 曲线和 μ_H-T 曲线间多次计算, 过程繁复、运算量大. 由此我们得到 62# 样品 $\varepsilon_{D1} = 4.0$ meV, $\varepsilon_{D2} = 45.7$ meV, 可见理论计算和我们的模型拟合非常符合, 迭代效果如图 6 所示.

表 2 X 射线衍射或化学腐蚀实验与迁移率拟合结果比较 (单位: 10^8 cm^{-2})

Table 2. The comparison of dislocation density between the experimental values and our model values through fitting of μ_H vs T data (unit: 10^8 cm^{-2}).

样品 [文献]	生长工艺			X 射线衍射或化学腐蚀实验结果			本文模型对霍尔迁移率拟合结果		
	厚度/ μm	方式	掺杂	螺位错	刃位错	总位错	螺位错	刃位错	总位错
02#[本文]	2.75	MOCVD	Si	1.3	13	15	1.1	13	14
62#[本文]	373	HVPE	非故意	0.094	0.95	1.0	0.074	1.8	1.9
A[13]	3.92	MOCVD	非故意	—	—	10	0.33	7.6	7.9
B[13]	1.62	MOCVD	Si	—	—	20	0.8	16.4	17.2
[14]	15	HVPE	非故意	—	—	3	0.17	4.2	4.3
[15]	2	MOCVD	Si	—	—	10	1.0	11.1	12.1

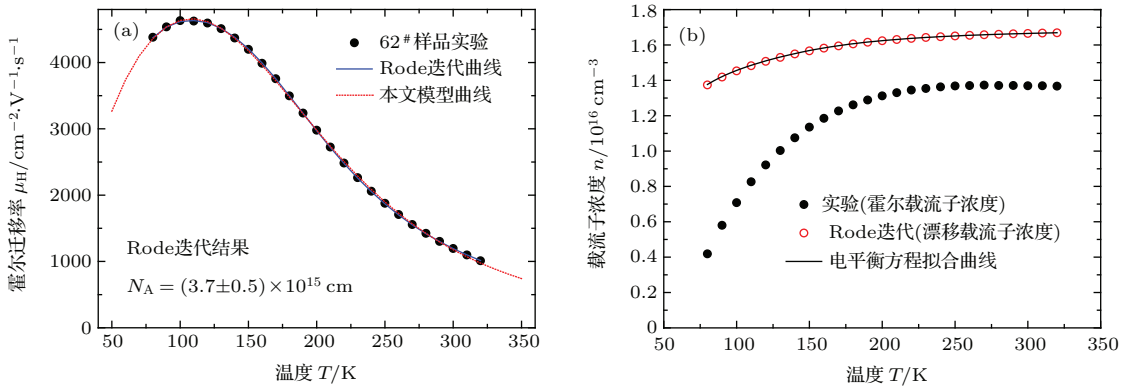


图 6 (网刊彩色) (a) 对 62# 样品的 Rode 迭代法计算结果与本文模型曲线比较; (b) 对 62# 样品的漂移载流子浓度用电平衡方程进行拟合

Fig. 6. (color online) (a) Comparison between the Rode iterative and our model calculation for sample 62#; (b) $n-T$ fit for sample 62# by Eq. (13).

然而迭代计算中我们发现, 对不少样品, 如 02# 样品, 迭代效果较差, 这时电平衡方程 (13) 已不成立, 因为该方程中的载流子必须全部是电离载流子, 而实际情况是除了电离载流子, 样品中常含有杂质带载流子和界面简并层载流子. 这是因为当

杂质浓度超过某一定值时, 杂质原子的平均间距会小于电子轨道半径, 波函数会部分重叠, 此时, 电子不需电离, 即不需激发到导带中去, 也能通过隧道效应由施主能级隧穿到相邻施主能级产生电导, 形成所谓杂质带, 界面简并层电导与此类似. 显然,

我们的浅施主能量弛豫模型只考虑施主杂质电离前后的能量弛豫, 杂质带和界面层内数量可能更多的未电离施主杂质电子并不参与能量弛豫过程, 这样, 本文模型也适用各种简并或受界面层严重影响的样品, 拟合结果中不包含界面层的位错. 因此, 我们的模型揭示了迁移率背后的电离本质, 避开了载流子来源的复杂性对测试结果的影响 (如图 7 所示).

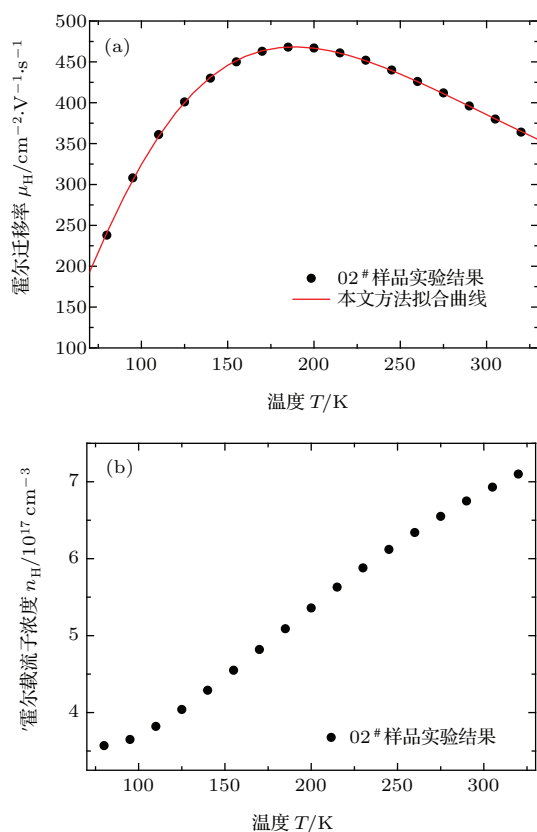


图 7 02# 样品的霍尔迁移率和霍尔载流子浓度
Fig. 7. Experimental μ_H vs T datas(points) and n_H vs T datas (points) of sample 02#.

最后需指出的是, 参数 β 的意义指出了本文方法另一个规律, 那就是, 对一些生长工艺可使位错迅速终结于晶体内晶界处, 只在样品表面出现少量穿透位错的样品, 新方法得到的不是穿透位错密度, 而是剔除界面层后整个晶体的刃、螺位错密度.

4 结 论

本文针对用高分辨率 X 射线衍射仪或化学腐蚀方法测试纤锌矿 n-GaN 样品位错密度时常会出现很大不确定性等不利因素, 提出了一种基于 van der Pauw 变温霍尔效应测量来确定纤锌矿 n-GaN

位错密度的新方法. 该方法基于刃、螺位错周围浅施主杂质的分布、电离特征, 围绕能量弛豫进行了相关统计宏观量的计算, 建立了避开载流子浓度仅凭霍尔迁移率曲线拟合就能精确得到刃、螺位错密度的新模型, 4 个拟合参数和其他实验方法或理论计算都有很好的一致性. 该方法能有效消除施主杂质带、界面简并层对测试结果的影响, 具有精确、简便等优点, 适用于迁移率曲线峰位在 200 K 左右及以下并且峰位明确的各种生长工艺、各种厚度、各种掺杂、各种质量层次的纤锌矿 n-GaN 薄膜和体材料.

感谢南昌大学国家硅基 LED 工程技术研究中心在实验测试方面提供的大力支持.

参考文献

- [1] Kozodoy P, Ibbetson J P, Marchand H, Fini P T, Keller S, Speck J S, DenBaars S P, Mishra U K 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 975
- [2] Stephen W K, Peter G B, Man H W, Erin C H K, Umesh K M, James S S 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 262102
- [3] Heinke H, Kirchner V, Einfeldt S, Hommel D 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 2145
- [4] Metzger T, Hopler R, Born E, Ambacher O, Stutzmann M, Stommer R, Schuster M, Gobel H, Christiansen S, Albrecht M, Strunk H P 1998 *Philos. Mag. A* **77** 1013
- [5] Ivantsov V, Volkova A 2012 *Condens. Matter Phys.* **18** 4023
- [6] Srikant V, Speck J S, Clarke D R 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 4286
- [7] Zhang Y, Xie Z L, Wang J, Tao T, Zhang R, Liu B, Chen P, Han P, Shi Y, Zheng Y D 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 056101 (in Chinese) [张韵, 谢自力, 王健, 陶涛, 张荣, 刘斌, 陈鹏, 韩平, 施毅, 郑有焯 2013 物理学报 **62** 056101]
- [8] Ibrahim M A M, Korotkov R Y 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 093715
- [9] You J H, Lu J Q, Johnson H T 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 033706
- [10] Weimann N G, Eastman L F, Doppalapudi D, Hock M N, Moustakas T D 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 3656
- [11] Look D C, Szelove J R 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 1133
- [12] Look D C, Szelove J R, Keller S, Wu Y F, Mishra U K, DenBaars S P 1997 *Solid State Commun.* **102** 297
- [13] Mavroidis C, Harris J J, Kappers M J, Humphreys C J, Bougrioua Z 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 9095
- [14] Götz W, Romano L T, Krusor B S, Johnson N M, Molnar R 1996 *J. Appl. Phys. Lett.* **69** 242
- [15] Chen Z, Yuan H R, Lu D C, Sun X H, Wan S K, Liu X L, Han P D, Wang X H, Zhu Q S, Wang Z G 2002 *Solid-State Electron.* **46** 2069

A new method to determine the dislocation density in wurtzite n-GaN*

He Ju-Sheng^{1)†} Zhang Meng²⁾ Pan Hua-Qing³⁾ Qi Wei-Jing²⁾ Li Ping⁴⁾

1) (School of Science and Technology, Nanchang University, Nanchang 330029, China)

2) (School of Material Science and Engineering, Nanchang University, Nanchang 330031, China)

3) (Department of Mechanical Engineering, Shangrao Vocational and Technical College, Shangrao 334100, China)

4) (Modern Education Technology Center of Nanchang University, Nanchang 330031, China)

(Received 29 February 2016; revised manuscript received 7 June 2016)

Abstract

We develop a new method to determine the edge and screw dislocation density in wurtzite n-GaN film. The method is to fit the van der Pauw variable temperature Hall-effect measurements with a analytic expression of low-field electron mobility in n-GaN. Our calculations take the comprehensive effect between the dislocation line and the shallow-donor defects as the main cause to depress the carrier mobility. Because of the crystal distortion near the dislocation line, the energy is so high that shallow-donor defects in the GaN crystal can be captured near the dislocation line. In other words, the shallow-donor defects distribute in lines along the dislocation line, but the shallow-donor defects along the screw and edge dislocation line have different energy levels. The shallow-donor defects take energy from lattice and the carrier, which is in relaxation process, then deliver the energy through ionizing. So, it is found that the following assumptions need to be made in order to obtain the model function for the mobility over a wide temperature range: i) there are 6 shallow-donor defect lines around one dislocation line; ii) two donor energy levels belonging to the screw and edge dislocation respectively must be taken into account; iii) the exchange energy between the carrier and the shallow-donor defect is $\hbar\omega_{LO}$, the energy value of polar optical phonon. Under these assumptions, experiments indicate that our calculation function can fit the experimental curve best. The values of dislocation density from our model and others determined by x-ray diffraction or by chemical etching method are in good agreement, and the values of donor energy levels from our model and Rode iterative method to solve the Boltzmann equation are also in good accordance with each other. This method is applicable for the wurtzite n-GaN films grown by various preparation technologies under any condition, which is for the sample with the peak-mobility temperature about or under 200 K, not for the sample with the peak-mobility temperature about or above 300 K, which room-temperature mobility usually is about or less than $100 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$.

Keywords: gallium nitride (GaN), Hall mobility, dislocation density, rode iterative

PACS: 72.10.Fk, 72.20.Fr, 73.20.Hb, 81.70.-q

DOI: 10.7498/aps.65.167201

* Project supported by the Natural Science Foundation of Jiangxi Province, China (Grant No. 20151BAB207066) and the Natural Science Foundation of College of Science and Technology of Nanchang University, China (Grant No. 2012-ZR-06).

† Corresponding author. E-mail: Hejusheng_2004@sohu.com