

基于变温霍尔效应方法的一类 n-GaN 位错密度的测量

何菊生 张萌 潘华清 邹继军 齐维靖 李平

Determination of dislocation density of a class of n-GaN based on the variable temperature Hall-effect method

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

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 067201 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.067201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.067201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphys.ac.cn/CN/Y2017/V66/I6>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种测量纤锌矿 n-GaN 位错密度的新方法

[A new method to determine the dislocation density in wurtzite n-GaN](#)

物理学报.2016, 65(16): 167201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.167201>

等离子体表面处理对硅衬底 GaN 基蓝光发光二极管内置 n 型欧姆接触的影响

[Effect of plasma surface treatment on embedded n-contact for GaN-based blue light-emitting diodes grown on Si substrate](#)

物理学报.2017, 66(4): 047801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.047801>

一种测量纤锌矿 n-GaN 位错密度的新方法

[A new method to determine the dislocation density in wurtzite n-GaN](#)

物理学报.2016, 65(16): 167201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.167201>

刻蚀 AlN 缓冲层对硅衬底 N 极性 n-GaN 表面粗化的影响

[Influence of etching AlN buffer layer on the surface roughening of N-polar n-GaN grown on Si substrate](#)

物理学报.2016, 65(8): 088501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.088501>

应变对两层半氢化氮化镓薄膜电磁学性质的调控机理研究

[Strain field tuning the electronic and magnetic properties of semihydrogenated two-bilayer GaN nanosheets](#)

物理学报.2016, 65(2): 023101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.023101>

基于变温霍尔效应方法的一类n-GaN 位错密度的测量*

何菊生^{1)†} 张萌²⁾ 潘华清³⁾ 邹继军⁴⁾ 齐维靖²⁾ 李平⁵⁾

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)(核技术应用教育部工程研究中心(东华理工大学), 南昌 330013)

5)(南昌大学现代教育技术中心, 南昌 330031)

(2016年10月23日收到; 2016年12月8日收到修改稿)

结合莫特相变及类氢模型, 采用浅施主能量弛豫方法, 计算了一类常见n-GaN光电子材料的载流子迁移率, 给出了精确测定其刃、螺位错密度的电学方法. 研究表明, 对于莫特相变材料(载流子浓度超过 10^{18} cm^{-3}), 以位错密度 N_{dis} 、刃螺位错密度比 β 、刃位错周围浅施主电离能 ϵ_{D1} 、螺位错周围浅施主电离能 ϵ_{D2} 为拟合参数的载流子迁移率模型与实验曲线高度符合, 拟合所得刃、螺位错密度与X射线衍射法或化学腐蚀方法的测试结果也基本一致. 实验结果表明, 莫特相变材料虽然载流子浓度高、霍尔迁移率低, 但其位错密度却并不一定高过载流子浓度低、霍尔迁移率高的材料, 应变也无明显差异, 因此, 莫特相变与刃、螺位错密度及两类位置最浅的施主均无关系, 可能是位置较深的施主或其他缺陷所致, 需要比一般杂质带高得多的载流子浓度. 该方法适合霍尔迁移率在0 K附近不为零, 霍尔迁移率曲线峰位300 K左右及以上的各种生长工艺、各种厚度、各种质量层次的薄膜材料, 能够对迁移率曲线高度拟合, 迅速给出莫特相变材料的相关精确参数.

关键词: 氮化镓, 霍尔迁移率, 位错密度, 莫特相变

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

DOI: 10.7498/aps.66.067201

1 引言

氮化镓(GaN)具有优异的光电性能, 其位错密度的测试是其质量分析中的一项重要内容^[1,2], 相关研究长期以来一直是半导体领域的学术热点. 然而, 目前两类主要的测试方法X射线衍射(XRD)法和化学腐蚀(EPD)法都有很大的不确定性, 有时甚至只有数量级意义. 位错具有显著的光学、化学特性, 其电学特性也极为显著, 表现为van der Pauw变温霍尔效应测试具有极高的灵敏度, 借助于计算机自动测试和电学统计平均方法, 可以比

XRD和EPD更精确地测定n-GaN的刃、螺位错密度^[3], 非常适合高迁移率材料和器件. 可是对发光二极管、激光二极管等一些光电子器件而言, 室温霍尔迁移率偏低, 在0 K附近不为零, 且霍尔迁移率曲线峰位在300 K左右及以上, 并不符合我们在文献^[3]中提出的“霍尔迁移率曲线峰位在200 K左右及以下”(0 K时霍尔迁移率为0)的条件. 为此, 本文基于纤锌矿n-GaN的莫特相变(Mott transition)分析, 对我们在文献^[3]中所描述的材料之外的样品进行XRD和van der Pauw变温霍尔效应测试, 得到了一类常见材料的位错密度精确测定方法.

* 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

利用电学方法(霍尔迁移率曲线拟合)来测试位错密度,比光学(XRD)和化学(EPD)方法在精确性方面更具优势. 这里有两方面的原因: 一是虽然n-GaN材料内杂质种类众多且极为复杂,但只有聚集于刃、螺位错线周围呈六棱柱形分布的两类点缺陷能级位置最浅,最接近费米能级,霍尔迁移率基本上只受它们影响,且随着温度的变化,位错结构表现出极高的稳定性,使得霍尔迁移率与位错在各种温度下都如影相随,最适合直接反映位错密度水平;二是虽然n-GaN材料内热、光、电三者能量关系极为复杂,但是霍尔迁移率本质上只是浅能级电离能量活跃度的反映,干扰因素很少,且可以用各类宏观统计量来精确描述.

半导体发生莫特相变后电子载流子的能量与金属自由电子非常类似,几乎不随温度变化,与相变前对温度很敏感(电子动能为 $E_k = 3k_B T/2$,其中 k_B 为玻尔兹曼常数, T 为温度)有很大不同. 目前学术界对GaN材料莫特相变只有少量的实验研究,常常是变温霍尔效应测试的对比研究^[4,5]. 本文基于莫特相变材料的电离特征,理论上给出了霍尔迁移率的一般形式,并得到实验验证,可用于位错密度的精确测定.

2 实验与原理

2.1 类氢模型与莫特相变

n-GaN材料虽然浅施主杂质种类众多且极为复杂,但其平均效果,可以用类氢模型来描述. 杂质中心电子的半径为 $a = \kappa_0 a_B m_0 / m = 2.5 \times 10^{-9}$ m,其中静态相对介电常数 $\kappa_0 = 10.4$,氢原子玻尔半径 $a_B = 0.53 \times 10^{-10}$ m,电子有效质量 $m = 0.22m_0$,当电子波函数半径约为 $4a$,即载流子浓度 $n \approx 1/(4a)^3 \approx 10^{18}$ cm⁻³时,电导将向金属性过渡,这就是莫特相变. 这时,处于高掺杂状态的杂质原子外层电子波函数明显交叠,孤立的杂质能级扩展为能带,最多只有一个电子的杂质带能级实际可接受两个电子,也就是说,杂质带不到半满状态,杂质电子既可通过隧穿在带内实现电导,也可通过电离实现电导.

莫特相变状态下电离最明显的一个特征是:杂质隧穿电子能量稳定度极高,使得浅施主杂质吸收能量电离的过程变得很缓慢,热电离和碰撞电离似乎不存在,浅施主杂质几乎都是依靠温度涨落(自

发跃迁)才能电离,导致迁移率明显偏低,出现低温下迁移率不低(可超过100 cm²/(V·s))、高温下迁移率不高(最高300 cm²/(V·s)左右)的现象. 这种扁平状迁移率曲线与莫特相变前(载流子浓度小于10¹⁸ cm⁻³)完全不同:位置较浅的刃位错线周围一个浅施主可以瞬间吸收一个光学声子热电离(设电离能为 ϵ_{D1}),位置较深的螺位错线周围一个浅施主也能受到电子碰撞瞬间电离(设电离能为 ϵ_{D2}),导致低温下迁移率为零,室温下可超过900 cm²/(V·s),电离能量活跃度随温度急剧变化.

莫特相变状态下电离的另一个明显特征是:类氢模型下,能量稳定度极高的隧穿电子,在导带底附近形成了一个鲜明的杂质电子海“海面”,电离就发生在“海面”电子与上方近距离的导带底之间,考虑隧穿电子对原子核引力的屏蔽作用,“海面”就在类氢模型的某一能级上. 取导带底为能级零点,由能级 $E_n = -mE_0 / (m_0 \kappa_0^2 n^2) = (-27.7/n^2)$ meV,其中氢原子基态能量 $E_0 = -13.6$ eV,得 E_1 至 E_6 分别位于导带底下27.7, 6.92, 3.07, 1.73, 1.11, 0.77 meV处,由于海森伯不确定关系(存在零点振动能),靠近导带底的类氢能级上杂质电子能轻易进入导带,或者说这些较高能级实际不存在. Osinnikh等^[6]用光致发光方法观察到导带底约6, 2.5, 1 meV三个能级,并指出0.8 meV (10 K时的原子振动动能为 $k_B T$)以上的能级难以观察到,据此我们可以认为导带底 $E_5 (= 1.11$ meV)为类氢模型的最高能级,为杂质带电子“海面”.

2.2 浅施主能量弛豫计算

每条位错线周围都有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^[3]

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

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,采用类氢施主电离能 $\epsilon_D (= me^4 / [2(4\pi\kappa_0\epsilon_0\hbar)^2])$ 、光学声子频率 ω_{LO} 表示为

$$E_{放} = \frac{me^4}{2(4\pi\kappa_0\epsilon_0\hbar)^2} \cdot \omega_{LO}, \quad (2)$$

其中 e , m 分别为电子电量和有效质量; κ_0 为静态相对介电常数; ϵ_0 为真空介电常数; \hbar 为普朗克常数. 而单位时间里单施主杂质吸收的能量由单位时

间内受到一次碰撞的概率 $1/\tau$ (τ 为晶格能量弛豫时间)、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 决定^[3],

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

其中 k 由光学声子能量 $\hbar\omega_{\text{LO}}$ (=91.2 meV)、吸收一个光学声子引起的电子电离数 ζ 、莫特相变后类氢施主电离能 E_5 (= $\{me^4/[2(4\pi\kappa_0\varepsilon_0\hbar)^2]\}/25$)决定,

$$k = \frac{\zeta E_5}{\hbar\omega_{\text{LO}}} = \frac{\zeta me^4}{50\hbar\omega_{\text{LO}}(4\pi\kappa_0\varepsilon_0\hbar)^2}. \quad (4)$$

如前所述, 实际情况是有两类杂质原子电离. 在热运动中, 电子获得能量 ΔE 的概率为 $e^{-\Delta E/(k_{\text{B}}T)}$. 对于位置较深的螺位错线周围浅施主而言, 电离极其微弱, 基本不受导带底电子状态的影响, 电离概率用电离能 ε_{D2} 表示为 $e^{-\varepsilon_{\text{D2}}/(k_{\text{B}}T)}$, 而位置较浅的刃位错线周围浅施主, 电离非常强烈, ΔE 由与导带底电子占有状态有关的能量宏观吸收率 k' 、杂质原子热振动动能 $k_{\text{B}}T$ 、两类浅施主数目之比 β 三者决定,

$$\Delta E = k' \cdot k_{\text{B}}T \cdot \beta. \quad (5)$$

为求 k' , 用 $f_{\text{C}} = 1/[1 + \exp(E_{\text{C}} - E_{\text{F}})/(k_{\text{B}}T)]$, $f_{\text{D1}} = 1/[1 + 1/g_{\text{D}} \cdot \exp(E_{\text{D1}} - E_{\text{F}})/(k_{\text{B}}T)]$ 分别表示导带底和杂质能级上的电子占有率, 其中简并因子 $g_{\text{D}} = 2$, 而平均非占有率分别为 $(1 - f_{\text{C}})$, $(1 - f_{\text{D1}})$. 在热平衡情况下, 向上跃迁的电子数和向下跃迁的电子数相同, 有

$$f_{\text{D1}} \cdot (1 - f_{\text{C}}) \cdot T_{\text{D1} \rightarrow \text{C}} = f_{\text{C}} \cdot (1 - f_{\text{D1}}) \cdot T_{\text{C} \rightarrow \text{D1}}, \quad (6)$$

其中 $T_{\text{D1} \rightarrow \text{C}}$, $T_{\text{C} \rightarrow \text{D1}}$ 分别是杂质能级 E_{D1} 至导带底、导带底至杂质能级 E_{D1} 的电子宏观跃迁率, 由此得 E_{D1} 能级上电子一次循环的能量宏观吸收率 k' :

$$k' = \frac{T_{\text{D1} \rightarrow \text{C}}}{T_{\text{D1} \rightarrow \text{C}} + T_{\text{C} \rightarrow \text{D1}}} = \frac{1}{1 + 2 \exp[(E_{\text{C}} - E_{\text{D1}})/(k_{\text{B}}T)]} = \frac{1}{1 + 2 \exp[\varepsilon_{\text{D1}}/(k_{\text{B}}T)]}. \quad (7)$$

于是吸收一个光学声子引起的电子电离数 ζ 为

$$\zeta = \frac{1}{e^{-\beta/[1+g_{\text{D}} \cdot e^{\varepsilon_{\text{D1}}/(k_{\text{B}}T)}]} + e^{-\varepsilon_{\text{D2}}/(k_{\text{B}}T)}}. \quad (8)$$

由方程(1), (2), (3), (4)和(8)得载流子迁移率

$$\mu = \frac{e}{m} \tau = \frac{ec(2m\hbar\omega_{\text{LO}})^{1/2}}{300(2\pi\hbar)^2 N_{\text{dis}}} \times \frac{1}{e^{-\beta/[1+g_{\text{D}} \cdot e^{\varepsilon_{\text{D1}}/(k_{\text{B}}T)}]} + e^{-\varepsilon_{\text{D2}}/(k_{\text{B}}T)}}. \quad (9)$$

如位错密度、迁移率分别以 cm^{-2} , $\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 为单位, 则 μ 可表示为

$$\mu = \frac{4.81 \times 10^{10}}{N_{\text{dis}}} \{ e^{-\beta/[1+g_{\text{D}} \cdot e^{\varepsilon_{\text{D1}}/(k_{\text{B}}T)}]} + e^{-\varepsilon_{\text{D2}}/(k_{\text{B}}T)} \}^{-1}. \quad (10)$$

以 N_{dis} , β , ε_{D1} , ε_{D2} 为参数用(10)式对霍尔迁移率曲线 $\mu_{\text{H}}-T$ 进行拟合, 即可得到螺位错、刃位错密度,

$$N_{\text{screw}} = N_{\text{dis}}/(\beta + 1), \quad (11a)$$

$$N_{\text{edge}} = \beta N_{\text{dis}}/(\beta + 1). \quad (11b)$$

2.3 实 验

采用荷兰帕纳科公司X' Pert Pro MPD型X射线衍射仪测试了17#, 32#两实验样品的多个晶面的半高全宽(FWHM), 用Srikant方法^[7]拟合得到面内扭转角(twist)和面外倾斜角(tilt), 用 $N_{\text{edge}} = \beta_{\text{twist}}^2/(4.35b_{\text{e}}^2)$ 和 $N_{\text{screw}} = \beta_{\text{tilt}}^2/(4.35b_{\text{s}}^2)$ 换算得刃、螺位错密度, 其中 $b_{\text{e}} = 0.3189 \text{ nm}$, $b_{\text{s}} = 0.5185 \text{ nm}$. 拟合效果如图1所示, 拟合参数见表1, 换算结果见表2.

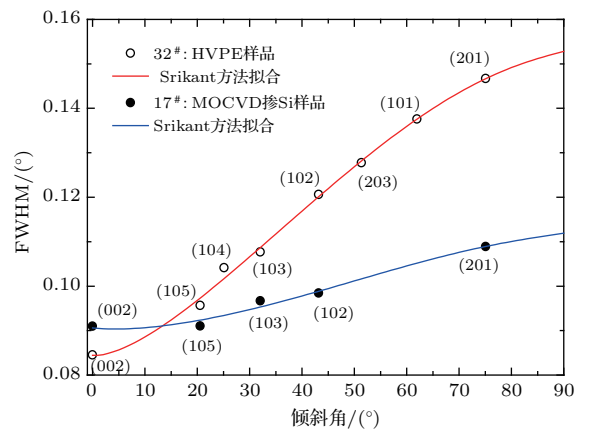


图1 (网刊彩色) 17#, 32# 样品各晶面 FWHM 与倾斜角的关系

Fig. 1. (color online) Width of ω -scans as a function of inclination angle ψ for sample 17# grown by MOCVD and 32# grown by HVPE. The symbols are experimental data and the lines are fitting curves by using Srikant model.

表1 17#, 32# 样品 Srikant 方法拟合参数
Table 1. Parameters of sample 17#, 32# fitted by Srikant method.

样品	n	m	tilt/(°)		twist/(°)	
			拟合结果	误差	拟合结果	误差
17#	1.74	0.10	0.09061	0.00198	0.11191	0.0144
32#	1.55	0.14	0.08443	0.00158	0.15281	0.00369

van der Pauw 变温霍尔效应测试采用 ECOPIA 公司的 HMS-5000/HMS-5500 全自动变温霍尔效应测试仪。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 × 10 mm, 铟作电极, 测试范围为 80—520 K, 测试结果如图 2 所示。

3 结果与讨论

图 2 表明, 实验曲线和 (10) 式符合得很好, 根据拟合值 N_{dis} 和 β , 由 (11a) 和 (11b) 式得到的刃、螺位错密度与 XRD 方法结果也有很好的一致性。

表 2 XRD 或 EPD 实验结果与迁移率拟合结果比较

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

样品 [文献]	生长工艺			XRD 或 EPD 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
17#[本文]	5.25	MOCVD	Si	2.1	8.6	10.7	1.8	8.5	10.3
32#[本文]	6.73	HVPE	非故意	1.9	16.1	17.9	2.2	14.5	16.7
D[8]	—	MOCVD	Si	—	—	20	2.1	15.3	17.4

表 3 莫特相变材料 (17#, 32#) 与非莫特相变材料 (2#, 62#) 应变比较

Table 3. The strain comparison between the Mott transition materials (17#, 32#) and the material without Mott transition (2#, 62#).

样品	(002)/(°)	(004)/(°)	(102)/(°)	(204)/(°)	a/nm	c/nm	水平应变/%	竖直应变/%
17#	17.9128	37.0610	24.0515	54.6089	0.3183	0.5191	-0.18	0.11
32#	17.8530	37.0075	24.0557	54.6096	0.3184	0.5190	-0.16	0.10
2#	17.3331	36.4814	24.0530	54.6159	0.3183	0.5190	-0.20	0.11
62#	17.6387	36.8115	24.0534	54.5966	0.3188	0.5185	-0.04	0.01

值得注意的是, 由于莫特相变, 材料载流子浓度高于 10^{18} cm^{-3} , 室温迁移率一般低于 $300 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 、可是其位错密度却与那些低载流子浓度 (低于 10^{18} cm^{-3})、高霍尔迁移率材料相当, 甚至可能更低, 可见, 仅凭室温载流子浓度和迁

我们还对文献 [8] 的霍尔迁移率曲线进行了拟合, 不仅曲线拟合较好, 而且位错密度与 EPD 法结果也基本一致, 如表 2 所列。

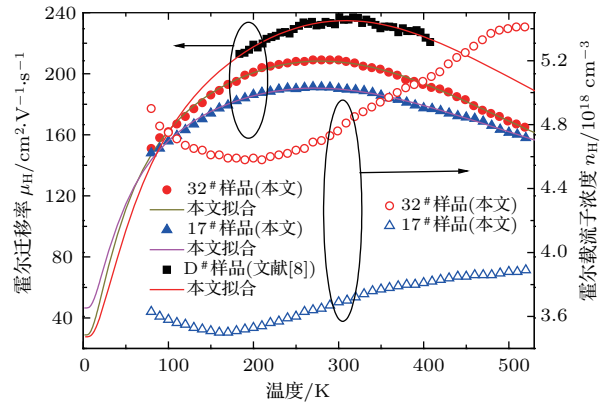


图 2 (网刊彩色) 本文方法对 17#, 32# 样品霍尔迁移率的拟合

Fig. 2. (color online) Experimental (points) and model (solid lines) mobility for sample 17# and 32#. The latter is determined by a least-square fit to our shallow donor energy relaxation calculation method using Eq. (10).

移率两个参数不能估算位错密度水平. 那么, 是否我们所测试的材料刚好内部应力很大, 尚未通过进一步产生位错来释放应力? 为此, 我们对 17#, 32# 样品进行了 ω - 2θ 扫描, 分别拟合出了 (002), (004), (102), (204) 四个晶面的衍射峰位, 如表 3 所列. 采

用文献 [9] 的方法, 消除仪器零点误差后, 得到了晶格常数的精确值, 由此得到准确的水平和竖直应变. 作为比较, 同样测试了两个我们在文献 [3] 报道的未莫特相变的样品 2#, 62# (其中 62# 是体材料), 结果表明, 四个样品应变都很低, 不存在进一步释放应力的可能. 因此, 我们认为, 在目前成熟的制备工艺里, 莫特相变材料 (载流子大于 10^{18} cm^{-3}) 与相对的非莫特相变材料都是晶格完美的低应变材料.

由于仪器最低测试温度所限 (液氮), 这里我们选择了 80—520 K 进行测试. 实际上, 如果仪器最低测试温度能低到 10 K 左右, 选择 0—300 K 范围测试, (10) 式将会有极高的精确度. 因为 (10) 式表明, 温度趋于零时, 霍尔迁移率完全由位错密度确定, 霍尔迁移率高的材料位错密度低, 霍尔迁移率低材料位错密度高, 可极大地排除各种干扰因素. 为此, 我们对文献 [4] 的测量结果进行了拟合, 如图 3 所示. Mavroidis 等 [4] 对样品 No. 1 进行了三次刻蚀, 厚度从 1.18 μm 先后减为 0.94, 0.82, 0.56 μm , 且先后进行了四次 van der Pauw 变温霍尔效应测试, 并采用公式

$$n_r = \frac{(n_{sb}\mu_b - n_{sa}\mu_a)^2}{t(n_{sb}\mu_b^2 - n_{sa}\mu_a^2)}, \quad (12a)$$

$$\mu_r = \frac{(n_{sb}\mu_b^2 - n_{sa}\mu_a^2)}{(n_{sb}\mu_b - n_{sa}\mu_a)} \quad (12b)$$

计算了刻蚀掉的 3 层的霍尔浓度和霍尔迁移率 n_r , μ_r , 其中 n_{sb} , μ_b 表示刻蚀前测到的二维载流子浓

度和霍尔迁移率; n_{sa} , μ_a 表示刻蚀后测到的二维载流子浓度和霍尔迁移率; t 表示样品厚度. 拟合结果表明, 每组实验数据符合得都很好, 并能给出精确拟合值, 如表 4 所列. 其中刃、螺位错密度的误差由下式算得:

$$\Delta N_{\text{edge}} = \frac{(\beta + 2)\Delta N_{\text{dis}}}{1 + \beta} + \frac{N_{\text{dis}}\Delta\beta}{(1 + \beta)^2}, \quad (13a)$$

$$\Delta N_{\text{screw}} = \frac{\Delta N_{\text{dis}}}{1 + \beta} + \frac{N_{\text{dis}}\Delta\beta}{(1 + \beta)^2}, \quad (13b)$$

式中误差 ΔN_{dis} , $\Delta\beta$ 由曲线拟合给出.

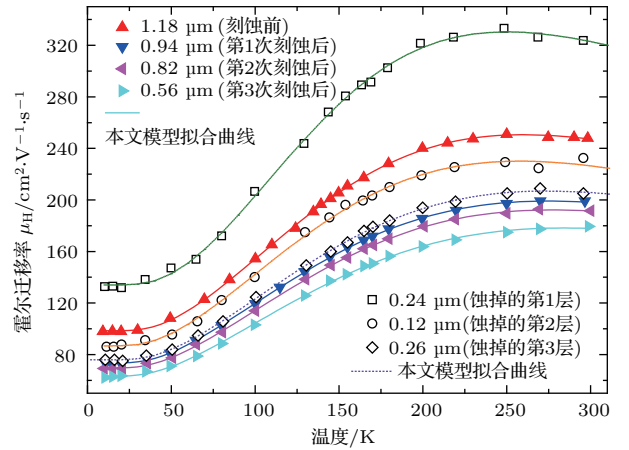


图 3 (网刊彩色) (10) 式对文献 [4] 经过连续 3 次刻蚀的样品霍尔测试结果的拟合

Fig. 3. (color online) Experimental μ_H vs T data (points) of sample No. 1 from Ref. [4] fitted using Eq. (10). \blacktriangle , as grown, 1.18 μm thick; \blacktriangledown , after first etch to 0.94 μm ; \blacktriangleleft , after second etch to 0.82 μm ; \blacktriangleright , after third etch to 0.56 μm .

表 4 文献 [4] No. 1 样品 (图 3) 的拟合参数, 刃、螺位错密度及其误差

Table 4. Fitted parameters of sample No. 1 from Ref. [4] (Fig. 3.) and our calculation values based on error theory.

	1.18 μm 原样品	0.94 μm 第 1 次刻蚀后	0.82 μm 第 2 次刻蚀后	0.56 μm 第 3 次刻蚀后
$N_{\text{dis}}/10^8 \text{ cm}^{-2}$	4.89±0.02	6.55±0.03	6.91±0.04	7.61±0.06
β	5.67±0.08	5.37±0.06	5.42±0.07	5.39±0.09
ϵ_{D1}/meV	15.1±0.02	13.9±0.2	13.8±0.2	13.7±0.3
ϵ_{D2}/meV	58±1	67±1	68±1	72±2
$N_{\text{screw}}/10^8 \text{ cm}^{-2}$	0.73±0.01	1.03±0.01	1.08±0.02	1.19±0.03
$N_{\text{edge}}/10^8 \text{ cm}^{-2}$	4.16±0.05	5.52±0.07	5.83±0.08	6.4±0.1

由表 4 可知, 随着薄膜增厚, 不断有位错终止于膜内晶界处, 位错密度逐渐降低, 但 β 基本不变, 表明刃、螺位错终止于晶界处的速度基本一致. 刃、螺位错密度的急剧降低, 意味着周围浅施主能级 E_{D1} , E_{D2} 上点缺陷数目的急剧减少, 而文献 [4] 报道样品的载流子浓度一直维持在 10^{18} cm^{-3} 以上并

无明显变化, 这表明, 莫特相变另有原因. 事实上, 我们在用 Rode 迭代法 [10,11] 计算 2# (室温载流子浓度为 $6.9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, 位错密度为 $1.4 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$) 等一些载流子浓度 10^{17} cm^{-3} 量级的样品时发现载流子浓度会远超电离施主浓度, 电平衡方程已不成立, 薄膜内已出现杂质带. 而本文表 4 中样品的位

错密度更低, 浅施主 E_{D1} , E_{D2} 浓度更低, 反而出现莫特相变, 这说明莫特相变不是位置最浅的两类施主引起的, 而是位置较深的施主或其他缺陷所致, 需要比一般杂质带高得多的载流子浓度.

另外, 将表 4 中两类杂质的电离能与其浓度关系 ($N_{D1} = 6N_{\text{edge}}/c$, $N_{D2} = 6N_{\text{screw}}/c$) 绘成图 4, 可直观地看出形成杂质带的杂质浓度大小. 形成杂质带时, 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, 这样杂质电离能随杂质浓度的增加而降低, 即浅施主电离能 ϵ_D 与浅施主浓度 N_D 的关系为 $\epsilon_D = \epsilon_{D0} - \alpha N_D^{1/3}$, 其中 E_{D0} 由杂质种类决定, n-GaN 的屏蔽因子 α 大约为 $2.7 \times 10^{-5} \text{ meV}\cdot\text{cm}^{10,11}$. 图 4 表明, ϵ_{D1} 明显小于 ϵ_{D2} , 那是因为 ϵ_{D1} 对应的浅施主浓度 N_{D1} 已处于杂质带, 这从杂质电离能随杂质浓度的增加而降低这一特征可清楚看出; 而 ϵ_{D2} 则相反, 不但没有因为轨道交叠而产生易电离的弱束缚区, 而且一旦电离就面临来自周围同样杂质中心的束缚, 周围杂质中心越多, 束缚也越多, 要想摆脱束缚就越困难, 因此 ϵ_{D2} 随杂质浓度 N_{D2} 的增加而增大.

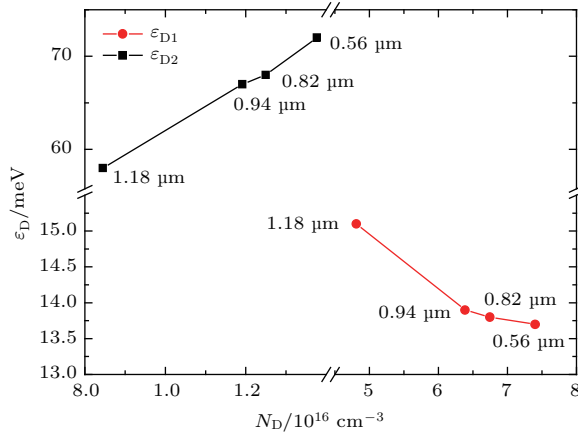


图 4 表 4 中浅施主电离能 ϵ_{D1} , ϵ_{D2} 随浅施主浓度 N_{D1} , N_{D2} 的变化

Fig. 4. Ionization energy of shallow donor versus its concentration from Table 4.

4 结 论

本文针对光学或化学方法难以精确测定纤锌矿 n-GaN 材料位错密度问题, 提出了对于一类常见

光电子材料(载流子浓度在 10^{18} cm^{-3} 以上), 可以通过拟合霍尔迁移率曲线, 由拟合参数来精确确定刃、螺位错密度的电学测定方法. 该方法以莫特相变和类氢模型为基础, 围绕刃、螺周围浅施主杂质的电离能量活跃度(能量弛豫)进行了相关统计宏观量的计算. 研究表明, 从霍尔迁移率曲线到刃、螺位错密度, 理论和实验都有很好的一致性. 该方法适用于 0 K 附近霍尔迁移率不为零, 曲线峰位在 300 K 左右及以上的各种生长工艺、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] 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]
- [2] Qi W J, Zhang M, Pan S, Wang X L, Zhang J L, Jiang F Y 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 077801 (in Chinese) [齐维靖, 张萌, 潘拴, 王小兰, 张建立, 江风益 2016 物理学报 **65** 077801]
- [3] He J S, Zhang M, Pan H Q, Qi W J, Li P 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 167201 (in Chinese) [何菊生, 张萌, 潘华清, 齐维靖, 李平 2016 物理学报 **65** 167201]
- [4] Mavroidis C, Harris J J, Jackman R B, Harrison I, Ansell B J, Bougrioua Z, Moerman I 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 9835
- [5] James A F, Yeo Y K, Ryu M Y, Hengehold R L 2005 *J. Electron. Mater.* **34** 1157
- [6] Osinnykh I V, Zhuravlev K S, Malin T V, Ber B Y, Kazantsev D Y 2014 *Semiconductors* **48** 1134
- [7] Srikant V, Speck J S, Clarke D R 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 4286
- [8] Zhang Z, Zhang R, Xie Z L, Liu B, Xiu X Q, Jiang R L, Han P, Gu S L, Shi Y, Zheng Y D 2008 *Sci. China Ser. G-Phys. Mech. Astron.* **51** 1046
- [9] Ding Z B, Yao S D, Wang K, Cheng K 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2977 (in Chinese) [丁志博, 姚淑德, 王坤, 程凯 2006 物理学报 **55** 2977]
- [10] Look D C, Sizelove J R 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 1133
- [11] Look D C, Sizelove J R, Keller S, Wu Y F, Mishra U K, DenBaas S P 1997 *Solid State Commun.* **102** 297

Determination of dislocation density of a class of n-GaN based on the variable temperature Hall-effect method*

He Ju-Sheng^{1)†} Zhang Meng²⁾ Pan Hua-Qing³⁾ Zou Ji-Jun⁴⁾ Qi Wei-Jing²⁾ Li Ping⁵⁾

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) (Engineering Research Center of Nuclear Technology Application (East China Institute of Technology), Ministry of Education, Nanchang 330013, China)

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

(Received 23 October 2016; revised manuscript received 8 December 2016)

Abstract

An analytical model for electron mobility in a class of wurtzite n-GaN, whose carrier concentration is over 10^{18} cm^{-3} (Mott's critical limit), is developed. With the dislocation density and two donor levels serving as the important parameters, the proposed model can accurately predict the electron mobility as a function of temperature. The edge and screw dislocation densities in two samples, which are respectively grown on sapphire (001) by metal organic chemical vapor deposition and hydride vapor phase epitaxy, are determined by using this model which is discussed in detail. It is shown that the data-fitting of $\mu_{\text{H}}-T$ characteristic curve is a highly suitable technique for accurately determining the edge and screw dislocation densities in n-GaN films. Quantitative analyses of donor concentration and donor activation energy indicate that the impurity band occurs when the carrier concentration is under 10^{17} cm^{-3} , much lower than the critical carrier concentration of Mott transition (10^{18} cm^{-3}). Such a behavior can also be confirmed by the results from solving the Boltzmann transport equation by using the Rode iterative method. Another anomaly is that the dislocation density in Mott transition material perhaps is lower than that of material with carrier concentration under 10^{18} cm^{-3} . This fact indicates that the cause of Mott transition should not be the shallow donor impurities around dislocation lines, but perhaps the deeper donor impurities or other defects. In the theoretical model calculation, two transition characteristics together with the donor distribution and its energy equilibrium are taken into account. Based both on the Mott transition and the H-like electron state model, the relaxation energies for the shallow-donor defects along the screw and edge dislocation lines are calculated by using an electrical ensemble average method. Besides, an assumption that should be made is that there are 6 shallow-donor defect lines around one dislocation line. The research results show that the Hall mobility should be taken as the live degree of the ionizing energy for the shallow-donor defects along the dislocation line. The experimental results indicate that our calculation function can be best fit by the experimental curve, with the values of dislocation density being between our model and others determined by X-ray diffraction or by chemical etching method, which are all in good agreement with each other. The method reported can be applied to the wurtzite n-GaN films grown by various preparation technologies under any condition, with the peak-mobility temperature about or over 300 K, whose Hall mobility near 0 K perhaps is over $10 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ and even $100 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$.

Keywords: gallium nitride, Hall mobility, dislocation density, Mott transition

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

DOI: 10.7498/aps.66.067201

* 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