

تأثیر آلاینده‌های Si, Ge و O بر خواص ترابری الکتریکی n-GaN - کپه‌ای

محمد هادی رئیس‌یان و حسین عشقی

دانشکده فیزیک - دانشگاه صنعتی شاهرود

پست الکترونیکی: h_eshghi@shahroodut.ac.ir

چکیده

به علت اهمیت زیاد *GaN* به عنوان یک نیم‌رسانای با گاف نواری پهن در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی بررسی خواص ترابری الکتریکی آن مورد توجه بسیاری از محققین قرار گرفته است. در حالت کلی وجود ناخالصی‌ها و دررفتگی‌ها در نیم‌رساناها بر خواص ذاتی آن‌ها تأثیر می‌گذارد. هدف ما در این مقاله بررسی نظری تأثیر حضور ناخالصی‌های متفاوت (*Si*, *Ge* و *O*) به عنوان آلاینده نوع *n* در خواص الکتریکی سه نمونه از این نیم‌رسانا است. محاسبات ما مبتنی بر نظریه‌های خنثایی بار و سازوکارهای پراکندگی الکترونی بر مبنای تقریب زمان واهلش است. تحلیل نتایج تجربی حاکی از آن است که *Si* آلاینده‌ای مناسب با تراز انرژی کم عمق (17 meV)، نسبت به لبه نواری رسانش، به شمار رفته و وجود آن به تراکم دررفتگی بلورینی نسبتاً پایین در حدود 10^9 cm^{-3} منجر می‌گردد. این در حالی است که آلیش ماده با *Ge* و *O* سبب ایجاد ترازهای ناخالصی عمیق‌تر به ترتیب 19 meV و 28 meV شده و همچنین حضور آن‌ها به ایجاد تراکم دررفتگی‌های بلورینی و نیز تراکم تهیج‌های نیتروژنی بیش‌تر، به ترتیب با ضریبی در حدود 10^3 و 10^3 ، در این ماده می‌انجامد.

واژه‌های کلیدی: نیم‌رسانا، گالیوم نیتراید آلاینده نوع *n*، خواص ترابری، سازوکارهای پراکندگی

مقدمه

آن‌ها، تراکم حامل‌ها و سازوکارهای مؤثر پراکندگی در تحرک حامل‌ها در دمای مورد نظر از جمله پارامترهای مهم در فرآیند رسانایی یک قطعه نیم‌رسانا به‌شمار می‌روند. ما در این مقاله به بررسی نظری خواص ترابری الکتریکی سه نمونه *GaN* با رسانندگی الکتریکی نوع *n* که به طور خواسته با ناخالصی‌های *Si*, *Ge* و *O* آلیش یافته‌اند می‌پردازیم [۲]. این نمونه‌ها با ضخامتی در حدود $3 \mu\text{m}$ و با آلیشی یکنواخت بر روی *Sapphire* با روش *MOCVD* رشد داده شده‌اند و داده‌های گزارش

در یک دهه اخیر پیشرفت‌های قابل ملاحظه‌ای در مواد با گاف نواری پهن برای به‌کارگیری در قطعات اپتوالکترونیکی شامل دیودهای نورگسیل و دیودهای لیزری در ناحیه مرئی و فرابنفش، و نیز الکترونیک با توان و دمای بالا انجام گرفته است [۱]. حضور ناخالصی‌ها (خواسته یا ناخواسته) در یک نیم‌رسانا تعیین کننده رفتار قطعات ساخته شده از آن‌ها هستند. عواملی نظیر تراکم ناخالصی‌های بخشنده و یا پذیرنده، انرژی فعال‌سازی

از ناخالصی‌های یونیده با تراکم‌های N_d و N_a ، تهیجاها و دررفتگی‌های بلوری از مهم‌ترین سازوکارهای پراکندگی الکترون‌ها در GaN هستند که تحرک حامل‌های آزاد را در دماهای مختلف محدود می‌سازند. ما برای محاسبه تحرک کلی الکترون‌ها در این نیم‌رسانا از قاعده ماتیسین:

$$\mu_{total} \cong \frac{1}{\sum \frac{1}{\mu_i}} \quad (2)$$

استفاده کرده‌ایم به طوری که μ_i نشان‌گر تحرک الکترونی وابسته به هر یک از پراکندگی‌های یاد شده به طور جداگانه می‌باشد که در ادامه معرفی شده‌اند. بندهای الف-ج سازوکارهای مربوط به پراکندگی‌های ذاتی و بندهای د-و سازوکارهای پراکندگی‌های غیرذاتی هستند. در این فرمول‌بندی‌ها پارامترهای ذکر شده معانی معمول خود را دارند که برخی از آن‌ها به همراه مقادیر وابسته که در محاسبات به کار گرفته شده‌اند در جدول ۱ آمده است.

جدول ۱ - مقادیر پارامترهای مادی وابسته به GaN

مرجع	مقدار	نماد	پارامتر
[۱۷]	۰/۲۲	m_n^*/m_0	جرم مؤثر الکترون
[۱۰]	۱۰/۴	ϵ_s	ثابت دی الکتریک فرکانس پایین
[۴]	۵/۴۳	ϵ_∞	ثابت دی الکتریک فرکانس بالا
[۱۸]	۹۲	$\hbar\omega_p$ (meV)	انرژی فونون قطبی-نوری
[۱۰]	$6/59 \times 10^3$	v_s	سرعت صوت (m/s)
[۱۹]	$6/1 \times 10^3$	ρ	چگالی جرمی (kg/cm^3)
[۱۰]	۰/۵	h_{pz}	ضریب پیزو الکتریک (C/m^2)
[۲۰]	۱۲	E_{dp}	پتانسیل تغییر شکل (eV)
[۲۱]	۵/۱۲۵	a	ثابت شبکه (\AA)

الف - ارنریچ [۹] تحرک‌پذیری الکترونی محدود به پراکندگی فونون‌های قطبی-نوری را به صورت زیر بیان کرده است:

شده حاصل اندازه‌گیری‌های اثر هال در دماهای گوناگون است. انتظار می‌رود به منظور فراهم شدن شرایط لازم برای مشارکت این ناخالصی‌ها به عنوان اتم‌های بخشنده، Si و Ge به جای اتم‌های Ga ، و O به جای N در شبکه GaN جایگزین شوند.

نظریه بستگی دمایی تراکم الکترونی

عمل برازش داده‌های مربوط به تغییرات n برحسب T برای نمونه‌های مورد بررسی ما با در نظر گرفتن معادله خنثایی بار ($n + N_a^- = p + N_d^+$) انجام شده است. برای یک لایه GaN از نوع n غیر واگن و در نظر گرفتن آمار ماکسول-بولتزمن، این معادله به صورت زیر درمی‌آید [۳]:

$$n = \frac{N_d}{1 + \frac{ng_n}{N_c} \exp\left(\frac{\Delta E_d}{k_B T}\right)} - N_a \quad (1)$$

که در آن g_n ضریب واگنی ($\nu = 2$) [۴]، N_d و ΔE_d به ترتیب تراکم و انرژی فعال‌سازی اتم‌های بخشنده، N_a تراکم اتم‌های پذیرنده و $N_c = \left[2(\pi m^* k_B T / h^2)\right]^{3/2}$ چگالی مؤثر حالت‌ها در لبه نوار رسانش است. بنا بر گزارش‌های منتشر شده [۵-۸] در صورت اطلاع از تغییرات دمایی n در یک نمونه می‌توان کمیت‌های وابسته به ویژگی‌های الکترونیکی ماده شامل N_d ، ΔE_d و N_a را یافت. بدیهی است مقادیر یافت شده بایستی همزمان به عنوان یکی از عوامل مؤثر در مجموعه فرآیندهای پراکندگی الکترونی که سبب محدودیت تحرک آن‌ها می‌گردند، سازگار باشند.

فرآیندهای پراکندگی الکترونی در GaN

پراکندگی‌های وابسته به فونون‌های قطبی-نوری، پیزوالکتریکی، آکوستیکی و همچنین پراکندگی‌های ناشی

د- تحرک‌پذیری الکترونی محدود به پراکندگی ناخالصی‌های یونی [۱۳]:

$$\mu_{imp} = \frac{12\lambda(2\pi)^{1/2} \epsilon_s^* \epsilon_s (k_B T)^{3/2}}{q^2 (m_n^*)^{3/2} (n + 2N_a)} \left[\ln(1+b) - \frac{b}{1+b} \right]^{-1} \quad (6)$$

که در آن:

$$b = \frac{24 m_n^* \epsilon_s \epsilon_s (k_B T)}{q^2 \hbar^2 n'}$$

و

$$n' = n + \frac{(N_d - N_a - n)(n + N_a)}{N_d}$$

ه- تحرک‌پذیری الکترونی محدود به پراکندگی تهیج‌های نیتروژن در GaN از جمله سازوکارهای پراکندگی است که توسط چن [۱۴] گزارش شده است و از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\mu_{vac} = \frac{9}{16\sqrt{3}\pi} \frac{e \hbar^2}{(m^*)^{5/2}} \frac{1}{N_v} \frac{1}{U_v a^2} (k_B T)^{-1/2} \quad (7)$$

که در آن a ثابت شبکه، N_v تراکم تهیج‌های نیتروژن و $U(r) = U_0 e^{-r/\beta}$ ضریب تناسب در پتانسیل‌نمایی U_0 وابسته به تهیج‌ها (در GaN برابر 0.4 meV [۱۴]) است به طوری که β پهنای مؤثر این پتانسیل ($\beta \approx a$) می‌باشد.

و- تحرک‌پذیری الکترونی محدود به پراکندگی دررفتگی‌ها توسط پودور [۱۵] با فرمول‌بندی زیر بیان شده است:

$$\mu_{dis} = \frac{2\sqrt{2}\pi \epsilon_s^* \epsilon_s d^2 (k_B T)^{3/2}}{q^2 N_{dis} f^2 L_D m^{*3/2}} \quad (8)$$

که در آن d [۱۶] $\left(\frac{2}{\sqrt{N_{dis} \pi}} = d \right)$ فاصله بین مراکز نقایص در امتداد خط دررفتگی، f کسر مراکز اشغال شده که برابر واحد اختیار شده است [۸]، N_{dis} چگالی

$$\mu_{POP} = 0.199 \left[\frac{T}{300} \right]^{1/2} \left[\frac{q}{\epsilon_c^*} \right]^2 \left[\frac{m_n}{m_n^*} \right]^{-3/2} \quad (3)$$

$$\times (1.0^{22} M) (1.0^{22} V_a) (1.0^{-12} \omega_{LO}) (e^z - 1) (G(z))$$

به طوری که:

$$\epsilon_c^* = \sqrt{M \omega_{LO} V_a \epsilon_s \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right)}$$

موسوم به بار یونی مؤثر کالان، M جرم کاهش یافته نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه و V_a حجم سلول واحد است (دو کمیت اخیر برای GaN با ساختار وورتسایت به ترتیب برابر 1.0^{-23} g و $2/283 \times 1.0^{-23} \text{ cm}^3$ [۹] است). همچنین در این معادله، $G(z)$ تابعی از $\left(\frac{\theta_{LO}}{T} = \frac{\hbar \omega_{LO}}{k_B T} \right) z$ با تغییرات بسیار آهسته است و مقادیر آن توسط هامر و مگناسون [۱۰] محاسبه شده است.

ب- تحرک‌پذیری الکترونی محدود به پراکندگی فونون‌های پیزوالکتریکی از فرمول‌بندی زیر به دست می‌آید [۱۱]:

$$\mu_{PZ} = \frac{16(2\pi)^{1/2} \rho v_s^2 \hbar^2 q}{3(q \hbar_{pz} / \epsilon_s \epsilon_s)^2 (m_n^*)^{3/2} (k_B T)^{1/2}} \quad (4)$$

ج- تحرک‌پذیری الکترونی محدود به پراکندگی فونون‌های آکوستیکی [۱۲] به صورت زیر با کمیت‌های فیزیکی ماده در ارتباط است:

$$\mu_{ac} = \frac{2(2\pi)^{1/2} \rho v_s^2 \hbar^2 q}{3 E_{dp}^2 (m_n^*)^{5/2} (k_B T)^{3/2}} \quad (5)$$

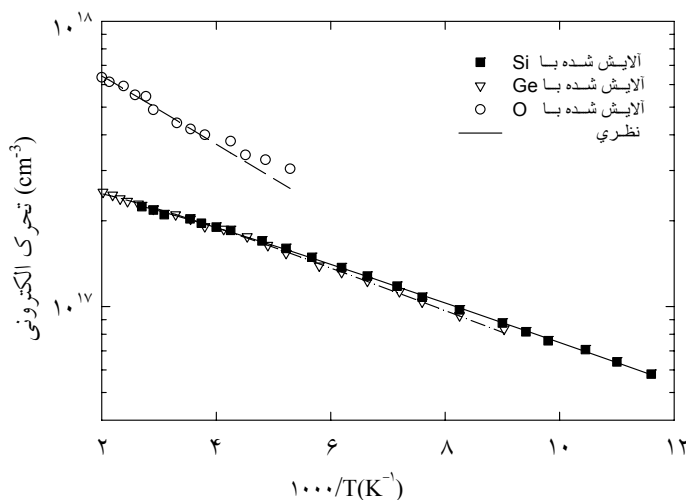
پراکندگی حاصل از ناخالصی‌های یونیده، وجود تهیج‌ها و نیز دررفتگی‌ها از سازوکارهای غیرذاتی مهم در محدودسازی تحرک حامل‌ها به شمار می‌آیند که عبارتند از:

روش کوچکترین مربعات داده‌های تجربی و معادله (۱) را نشان می‌دهد. با انجام این کار مقادیر تراکم‌های N_a, N_d و نیز انرژی فعال‌سازی اتم‌های بخشنده، ΔE_d ، به دست آمده‌اند. این مقادیر به همراه نتایج اندازه‌گیری شده با روش SIMS که توسط گاتز برای مشخصه‌یابی این نمونه‌ها انجام داده‌اند در جدول ۲ آمده است.

در رفتگی‌ها در واحد سطح و $L_D = \left(\sqrt{\epsilon_s \epsilon_0 \frac{k_B T}{q^2 n}} \right)$ [۱۷] طول دمای است.

تحلیل داده‌های تجربی

شکل ۱ داده‌های تجربی مربوط به تغییرات تراکم الکترونی (n) بر حسب دما (برگرفته از مقاله گاتز و همکارانش [۲]) و همچنین منحنی‌های برازشی مبتنی بر



شکل ۱- تراکم الکترونی بر حسب عکس دما برای نمونه‌های GaN با آلیش Si، Ge، O همراه با منحنی‌های نظری برازشی (به متن مراجعه شود).

متناظر مربوط به تراکم ناخالصی‌های بخشنده با دقت خوبی به یکدیگر نزدیک‌اند، اما در نمونه آلیش شده با O تفاوتی در حدود ۱۰ برابر ظاهر می‌شود. این اختلاف به باور ما می‌تواند ناشی از جایگزین نشدن برخی از اتم‌های اکسیژن به جای اتم‌های نیتروژن و عمل نکردن به عنوان یک ناخالصی بخشنده مؤثر در شبکه بلوری GaN باشد. نکته جالب توجه دیگر آن که در نمونه‌های آلیش شده با Si و Ge تراکم اتم‌های ناخالصی بخشنده، انرژی فعال‌سازی آن‌ها و نیز تراکم اتم‌های پذیرنده در این نمونه‌ها با تقریب بسیار خوبی به هم نزدیک‌اند. این موضوع با توجه به منحنی‌های منطبق شده بر داده‌های

جدول ۲- نتایج محاسبات برازشی توسط رابطه (۱)،

همراه با نتایج اندازه‌گیری شده با روش SIMS [۲]

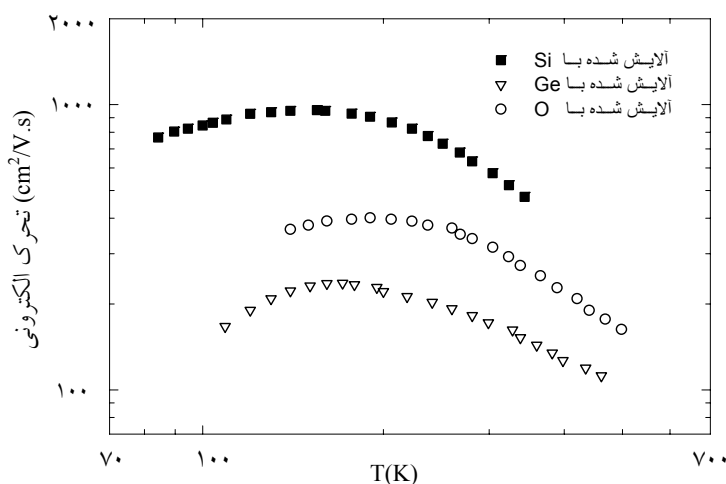
آلیش	مقادیر به دست آمده از برازش نتایج تجربی			
	تراکم (cm^{-3})	$N_d (cm^{-3})$	$\Delta E_d (meV)$	$N_a (cm^{-3})$
Si	4×10^{17}	3.02×10^{17}	۱۷	2.42×10^{16}
Ge	1×10^{17}	3.11×10^{17}	۱۹	2.5×10^{16}
O	8×10^{18}	1×10^{18}	۲۸	5×10^{16}

از مقایسه نتایج این تحلیل و اندازه‌گیری‌های SIMS پیداست که در نمونه‌های با آلیش Si و Ge مقادیر

داده‌ها لازم است تأثیر پراکندگی سازوکارهای گوناگون الکترونی مشتمل بر فونون‌های قطبی-نوری، پیژوالکتریکی و آکوستیکی و نیز عوامل غیر ذاتی شامل ناخالصی‌های یونی، تهیج‌های نیتروژن و دررفتگی‌ها در نظر گرفته شوند. شکل ۳ نتیجه این محاسبات را در هر یک از این نمونه‌ها و تأثیر حضور سازوکارهای پراکندگی مختلف (معادلات ۳ تا ۷) و نیز تحرک کل (معادله ۲) را بر حسب تابعی از دما نشان می‌دهد.

تجربی در این شکل نیز قابل مشاهده است. در مقایسه، نمونه آلیش شده با اکسیژن، از تراکم و همچنین انرژی فعال‌سازی بزرگ‌تری نسبت به ناخالصی‌های دیگر برخوردار است.

شکل ۲ بستگی دمایی تحرک الکترون‌ها را در این سه نمونه نشان می‌دهد. همان‌طور که پیداست نمونه با آلیش Si دارای بیش‌ترین تحرک و نمونه آلییده با Ge کم‌ترین تحرک الکترونی را داراست. به منظور تفسیر این



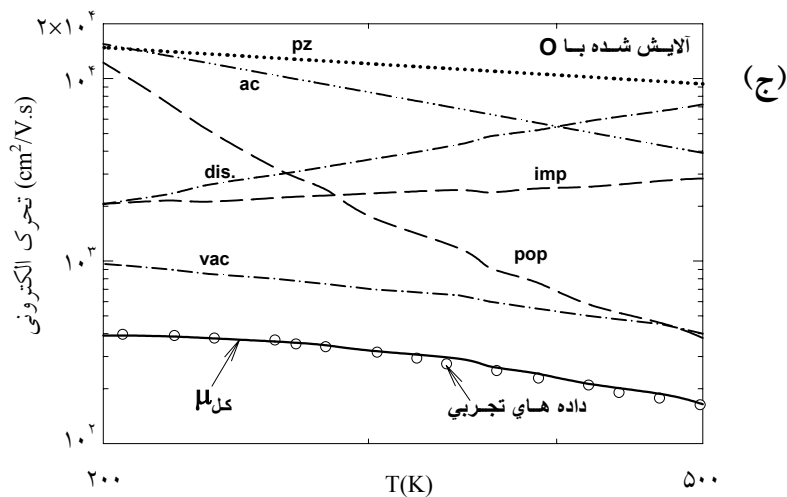
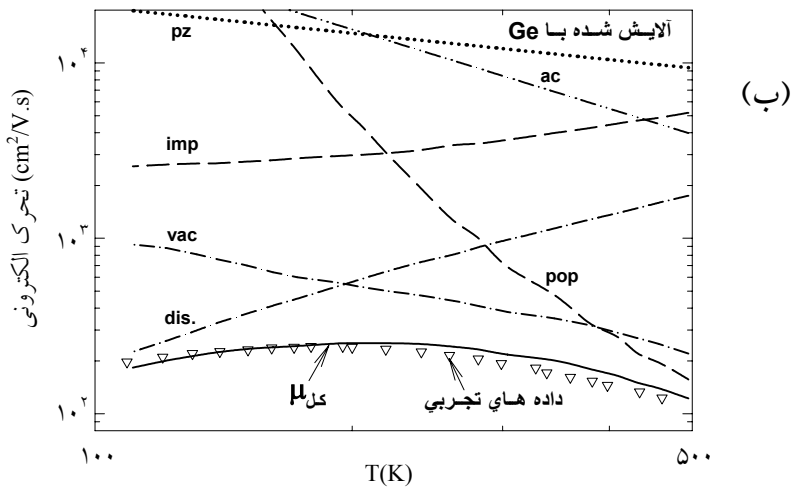
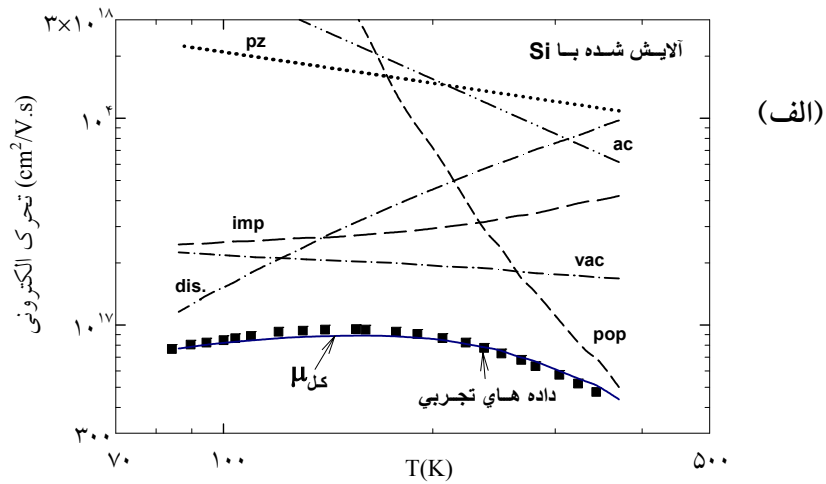
شکل ۲- داده‌های تجربی تحرک الکترونی بر حسب دما برای نمونه‌های GaN آلییده با ناخالصی‌های Si, Ge و O [۲].

جدول ۳- نتایج محاسبات برازشی وابسته به تحرک

الکترونی در نمونه‌های آلییده گالیوم نیتراید

آلاینده	$N_{dis} (cm^{-2})$	$N_v (cm^{-3})$
Si	2×10^9	1×10^{17}
Ge	$1/5 \times 10^{12}$	3×10^{17}
O	$1/4 \times 10^{12}$	2×10^{17}

در این نمونه‌ها حصول به یک برازش قابل قبول در داده‌های تجربی در محدوده دماهای متوسط و پایین تنها هنگامی میسر می‌گردد که تأثیر پراکندگی ناشی از تهیج‌ها و همچنین دررفتگی‌های بلوری در نظر گرفته شوند. جدول ۳ مقادیر حاصل از برازش داده‌ها در نظریه‌های پراکندگی یاد شده را برای نمونه‌های مورد بررسی نشان می‌دهد. در این تحلیل مقادیر وابسته به تراکم دررفتگی‌ها و نیز تراکم تهیج‌های نیتروژنی به عنوان پارامترهای برازشی اختیار شده‌اند.



شکل ۳- منحنی های برازشی برحسب داده های تجربی مربوط به تحرک محدود شده توسط سازوکارهای مختلف پراکندگی

الکترونی، برای نمونه های GaN آلیپده با (الف) Si، (ب) Ge، و (ج) O

فعال‌سازی (17meV) در بین سایر ناخالصی‌ها است. همچنین ملاحظه شد که نمونه آلاینده با Si از تحرک الکترونی بیش‌تری (در حدود ۵ برابر) در مقایسه با نمونه آلاینده با Ge برخوردار است، که می‌تواند به دلیل پایین‌تر بودن تراکم دررفتگی‌های بلوری (در حدود ۳ مرتبه بزرگی) و همچنین تراکم تهیج‌های نیتروژن (در حدود ۳ برابر) در این نمونه باشد. همچنین ملاحظه شد که اتم‌های آلاینده O با انرژی فعال‌سازی 28meV احتمالاً به علت واقع نشدن تمامی آن‌ها در موضع درست اتم‌های نیتروژن در جایگاه‌های شبکه‌ای، به‌خوبی به صورت اتم‌های بخشنده فعال عمل نمی‌کنند. بدین ترتیب با ویژگی‌های نشان داده شده می‌توان گفت Si مناسب‌ترین ناخالصی در حصول به یک لایه GaN با رسانندگی الکتریکی نوع n است.

مراجع

- [1] Nakamura, S., Mukai, T. and Senoh, M. Jap. J. Appl. Phys. 31 (1992) 2883.
- [2] Gotz, W., Kern, R.S., Chen, C.H., Liu, H., Steigerwald, D.A. and Fletcher, R.M., Materials Science and Engineering B 59 (1999) 211.
- [3] Look, D.C., Electrical Characterization of GaAs Material and Devices, John Wiley, New York, (1989).
- [4] Huang, D., Yun, F., Reshchikov, M.A., Morkoc, H. and Rode, D.L., Solid State Electronics 45 (2001) 714.
- [5] Tang, H., Kim, W., Botchkarev, A., Popovici, G., Hamdani, F. and Markoc, H., Solid State Electronics, 42 (1998) 839.

با توجه به این نتایج ملاحظه می‌شود که: (الف) آلیش GaN با ناخالصی Ge در مقایسه با Si، تراکم دررفتگی‌ها را تا حدود ۳ مرتبه بزرگی افزایش داده و همین سبب کاهش قابل ملاحظه تحرک حامل‌ها در نمونه آلاینده با Ge شده است. همچنین در نمونه‌های آلاینده با Ge و O ملاحظه می‌شود با وجود نزدیکی مقادیر تراکم دررفتگی‌ها، تحرک الکترون‌ها در نمونه آلاینده با O بیشتر است. به باور ما این می‌تواند ناشی از بالاتر بودن تراکم الکترون‌های آزاد در نمونه با آلیش O باشد که تحت تأثیر پدیده استتار آثار پراکندگی دررفتگی‌ها را تقلیل داده است. البته تأیید این امر نیازمند مطالعات نظری و تجربی بیش‌تر می‌باشد. (ب) در نمونه‌های آلاینده با O و Ge تراکم تهیج‌ها (نقص‌های بلوری) بین ۲ تا ۳ برابر بیش از نمونه آلیش شده با Si است. این نتیجه می‌تواند به عنوان شاهد دیگری در رشد کیفیت بالاتر این نمونه در مقایسه با دو نمونه دیگر باشد. (ج) با توجه به شکل ۳، اگرچه تأثیر عوامل پراکندگی ذاتی در هر سه نمونه قابل مقایسه با یکدیگر است، لکن در سازوکارهای وابسته به پراکندگی‌های غیرذاتی به علت متفاوت بودن پارامترهای برازشی مربوط به هر نمونه (جداول ۲ و ۳) تفاوت قابل ملاحظه‌ای در میزان تأثیر آن‌ها در محدودسازی تحرک کلی حامل‌ها (μ) مشاهده می‌شود.

نتیجه‌گیری

با به‌کارگیری معادله خنثایی بار و تحلیل داده‌های مربوط به تحرک کلی الکترون‌ها توسط قاعده ماتیسن برای سه نمونه GaN با آلیش‌های بخشنده Si، Ge و O میزان تراکم این ناخالصی‌ها به همراه انرژی فعال‌سازی آن‌ها، تراکم پذیرنده‌های ناخواسته همچنین تراکم دررفتگی‌ها و تهیج‌های مربوط به این نمونه‌ها را به‌دست آوردیم. دریافتیم که اتم‌های Si دارای کوچک‌ترین انرژی

- [15] Pödör, B., Phys. Stat. Sol. 16, K167 (1966).
- [16] Leonid Chernyak, Andrei Osinsky, Alfons Schulte, Solid-State Electronics 45 (2001) 1692.
- [17] Eckhause, T.A., Suzer, O., Kurdak, C., Yun, F. and Morkoc, H., Appl. Phys. Lett. 82 (2003) 3037.
- [18] Subhabrata Dhar, Subhasis Ghosh, J. Appl. Phys. 86, (1999) 2674.
- [19] Fonciulli, M., Lei, T. and Moustakas, T.D., Phys. Rev. B 48, 48 (1993).
- [20] Bykhovski, A.D., Kaminski, V.V., Shur, M.S., Chen, Q.C. and Khan, M.A., Appl. Phys. Lett. 68, (1996) 818.
- [21] Lagerstedt, O. and Monemar, B., Phys. Rev. B 19 (1979) 3064.
- [6] Eshghi, H. and Lancefield, D., Phys. stat. sol (b) 216 (1999) 733.
- [7] Lancefield, D. and Eshghi, H., J. Phys.: Condens. Matter 13, (2001) 8939.
- [8] Tansley, T.L. and Egan, R.J., Physica B 185 (1993) 190.
- [9] Ehrenreich, H., J. Phys. Chem. Solid 8, 130 (1959).
- [10] Morkoc, H., Nitride Semiconductors and Devices, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York (1999).
- [11] Hammar, G. and Magnusson, B., Phys. Scripta 6 (1972) 206.
- [12] Anderson, D.A. and Aspley, N., Semicond. Sci. Technol. 1 (1986) 187.
- [13] Brooks, H., Adv. Electron. Phys., 7, 85 (1955).
- [14] Zhen Chen, hairong Yuan, Da- Cheng Lu, Xuehao Sun, Solid State Electronics 46 (2002) 2069.