УДК 538.915

ЕСТЕСТВЕННО РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В ГЕТЕРОКОНТАКТАХ III-НИТРИДОВ

А. В. Филимонов, В. Б. Бондаренко

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
filimonov@rphf.spbstu.ru

В работе исследуются естественно размерный эффект и структура хаотического потенциала в гетероконтактах III-нитридов, обусловленного электростатическим полем заряженных дислокаций. С учётом пространственной дисперсии диэлектрического отклика двумерного электронного газа определены амплитуда и масштаб хаотического потенциала в плоскости контакта. Показана зависимость параметров хаотического потенциала от плотности поверхностных состояний и концентрации дислокаций. Установлено, что при уменьшении плотности поверхностных состояний в гетероконтактах амплитуда хаотического потенциала может достигать величин порядка 100 мэВ при концентрациях заряженных дислокаций 10^{10} см$^{-2}$ и более. При этом характерный масштаб указанных флуктуаций сравним со средним расстоянием между заряженными дислокациями.

Одной из возможных причин снижения подвижности носителей в двумерной электронной подсистеме гетероконтактов на основе III-нитридов является рассеяние носителей на хаотическом потенциале заряженных дислокаций. Очевидно, что интенсивность этого процесса зависит от плотности данных протяжённых дефектов в гетероконтакте и распределения электронного заряда на дислокационных состояниях [1].

Как отмечено ранее формальное описание приконтактной подсистемы в рамках одномерной модели изгиба зон может оказаться не вполне корректной из-за наличия естественного размерного эффекта в области пространственного заряда полупроводника [2]. Отсутствие усреднения поля по большому количеству зарядов означает наличие флуктуаций напряжённости поля и хаотического потенциала в плоскости локализации двумерного электронного газа. Кроме того, взаимодействие, обусловленное неоднородным электрическим полем системы линейно распределённых зарядов, фактически, носит самосогласованный характер, поскольку конечны по величине как плотность поверхностных состояний, так и величины плотности состояний на дислокациях. С учётом известных особенностей двумерных электронных систем [3], связанных с изменениями их проводимости от степени беспорядка, представляется актуальным исследование структуры хаотического потенциала заряженных дислокаций в гетероконтактах полупроводниковых нитридных соединений.

Для определённости рассмотрим гетероконтакт AlGaN/GaN, в котором прорастающие дислокации несоответствия с поверхностной концентрацией N_{disl} будем представлять в виде нормально ориентированных к плоскости контакта линейных дефектов. При некоррелированной локализации указанных протяжённых дефектов их распределение по количеству является пуассоновским. Таким образом, вероятность обнаружить N дислокаций на участке контакта площадью $S = \pi R^2$ равна

$$p(N) = \frac{<N>^N \exp(-<N>)}{N!}, \qquad (1)$$

где $<N> = N_{\mathrm{disl}} S$ - среднее количество этих дефектов. В силу возникающих механических напряжений в контакте полярных кристаллов AlN и GaN возникает значительный пьезоэффект, обуславливающий изгиб зон GaN более половины ширины запрещённой зоны E_g (для GaN E_g = 3.4 эВ). Как правило, канальный слой формируется на основе нелегированного нитрида галлия. В этом случае объёмный заряд в приконтактной области изгиба зон формируется главным образом отрицательно заряженными дислокациями. В приближении больших изгибов зон данные протяжённые дефекты в пределах области пространственного заряда можно полагать равномерно заряжёнными с некоторой линейной плотностью λ. Без потери общности можно считать, что соответствующие линейные дефекты в основном находятся только в одном полупроводнике. Если в гетероконтакте имеется делокализованный поверхностный заряд, то при высокой плотности поверхностных состояний D_0 (около 10^{14}см$^{-2}$эВ$^{-1}$ и более) для определения параметров хаотического поля также имеется возможность воспользоваться методом электростатических изображений. При этом рассматриваемая система аналогична совокупности диполей с линейно распределённым зарядом в своих плечах. Поле произвольно выбранной дислокации будем определять в полярной системе координат, в которой ρ - радиальная координата, определяющая расстояние от дислокации в плоскости контакта. Интегрирование вдоль заряженной дислокации в пределах области пространственного заряда шириной L_0 даёт величину напряжённости поля в плоскости контакта:

$$F_{\mathrm{i}}(\rho)=\frac{2\lambda}{\varepsilon}\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{\sqrt{\rho^2+L_0^2}}\right) \qquad (2)$$

Здесь ε - диэлектрическая проницаемость среды, в которой находится i-ая дислокация. При изгибах зон в гетероконтакте, во много раз превышающих характерную тепловую энергию носителей, вполне применимо приближение полностью обеднённого слоя, в рамках которого ширина области пространственного заряда имеет вид

$$L_0=\sqrt{\frac{\varepsilon U_0}{2\pi e\lambda N_{\mathrm{disl}}}}, \qquad (3)$$

где U_0 - величина изгиба зон. Статистический анализ [2] возникающих флуктуаций электрических полей вида (2) приводит к соответствующей амплитуде:

$$\delta F=\frac{4\lambda\sqrt{\pi N_{\mathrm{disl}}}}{\varepsilon} \qquad (4)$$

При указанных значениях плотности поверхностных состояний возможна непосредственная оценка величины амплитуды хаотического потенциала в плоскости локализации двумерного электронного газа. В этих условиях величина неоднородностей потенциала может быть определена в форме, известной как приближение Томаса-Ферми, в рамках которого флуктуации плотности заряда должны следовать за изменениями потенциала:

$$\delta\sigma=eD_0\cdot\delta U \qquad (5)$$

Разумеется, здесь предполагается малость возмущения потенциала по сравнению с энергией Ферми электрона в поверхностной зоне и пренебрегается изменением плотности состояний. Учитывая теперь линейную зависимость напряжённости поля от поверхностного заряда $F=4\pi\sigma/\varepsilon$, выражения (4) и (5), можно связать величину δU с параметрами системы:

$$\delta U=\frac{\lambda}{eD_0}\cdot\sqrt{\frac{N_{\mathrm{disl}}}{\pi}} \qquad (6)$$

В случае широкого диапазона значений плотности электронных состояний в гетероконтакте следует провести более детальный анализ возникающих флуктуаций потенциала с использованием функции диэлектрического отклика поверхностной подсистемы [4]. С учётом преобразования по Фурье-Бесселю для потенциальной энергии электрона в поле заряженной дислокации в пространстве волновых векторов q имеем

$$V_{\mathrm{i}}(q)=\frac{e\lambda}{q^2}\cdot[1-\exp(-qL_0)]$$

Экранированный потенциал, созданный i-ой дислокацией в плоскости контакта, определяется стандартным методом:

$$U_{\mathrm{i}}(\rho)=\int_0^\infty U_{\mathrm{i}}(q)J_0(\rho q)q\,dq,$$

где $J_0(s)$ - функция Бесселя первого рода нулевого порядка, $U_{\rm i}(q) = V_{\rm i}(q)/\varepsilon(q)$ - образ Фурье-Бесселя экранированного потенциала, $\varepsilon(q)$- функция диэлектрического отклика среды. Согласно теории экранирования в сильно вырожденных двумерных электронных системах соответствующая диэлектрическая проницаемость имеет вид:

$$\varepsilon(q) = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \cdot \left(1 + \frac{q_{\rm s}}{q}\right)$$

Здесь ε_1 и ε_2 - диэлектрические проницаемости контактирующих полупроводников (для AlGaN/GaN и других гетероконтактов III-нитридов $\varepsilon_1 \approx \varepsilon_2 \sim 10$ [5]), $q_{\rm s} = 4\pi e^2 D_0/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$ - параметр экранирования в двумерной электронной системе. Усреднение получаемого потенциала по площадке радиуса R в плоскости поверхности контакта приводит к значению величины вклада одной заряженной дислокации $< U_i > (R)$. После изменения порядка интегрирования в выражении для $< U_i > (R)$ и учёта среднеквадратичного отклонения в распределении (1) можно определить величины флуктуации потенциальной энергии электрона с характерным масштабом R:

$$\delta U(R) = \frac{4e\lambda\sqrt{\pi N_{\rm disl}}}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \cdot \int_0^\infty \frac{1 - \exp(-q \cdot L_0)}{q \cdot (q + q_{\rm s})} \cdot J_1(qR)\,dq \qquad (7)$$

Здесь $J_1(s)$ - функция Бесселя первого рода первого порядка. Исследование интеграла, входящего в (7), показывает, что при типичном условии $q_{\rm s} L_0 >> 1$ максимальное значение $\delta U(R)$ достигается при некотором размере площадки $R = R_0$:

$$R_0 \approx \sqrt{\frac{2L_0}{q_{\rm s}}} \qquad (8)$$

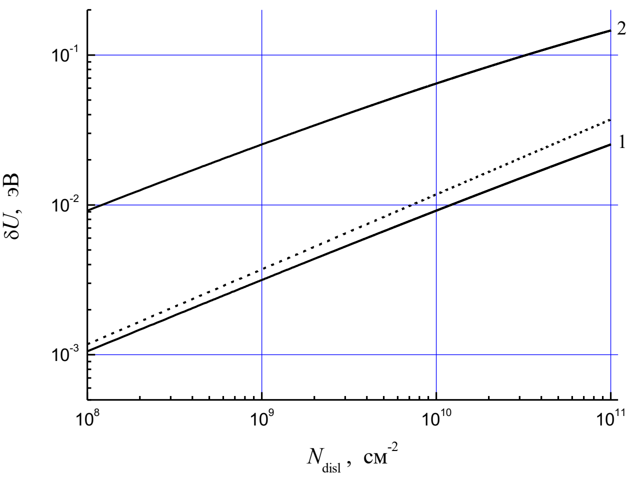

Рис. 1. Зависимость амплитуды хаотического потенциала заряженных дислокаций ($\lambda = 0.01$ СГСЭ) в гетероконтакте AlGaN/GaN от их концентрации при двух значениях плотности поверхностных состояний D_0: 1 - 10^{14} см$^{-2}$эВ$^{-1}$, 2 - 10^{13} см$^{-2}$эВ$^{-1}$. Пунктирной линией показан результат расчёта в приближении Томаса-Ферми (формула (6)) при $D_0 = 10^{14}$ см$^{-2}$эВ$^{-1}$

По смыслу радиус R_0 задает порядок величины размера области неоднородности потенциала в гетероконтакте. Вычисление δU можно произвести непосредственной подстановкой выражения (8) в формулу (7):

$$\delta U = \frac{4e\lambda L_0\sqrt{\pi N_{\text{disl}}}}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}\cdot\Phi\left(q_s L_0\right) \quad (9)$$

Здесь введенная функция $\Phi(y)$ имеет вид:

$$\Phi(y) = \int_0^\infty \frac{1-\exp(-x)}{x\cdot(x+y)}\cdot J_1\left(x\sqrt{2/y}\right)dx \quad (10)$$

Из определения данной функции [6] следует, что $\Phi(0)=1$ и её асимптотическое поведение $\Phi(y)\sim 1/y$ при условии $y>>1$. Типичная зависимость величины δU от концентрации заряженных дислокаций N_{disl} (9) при двух значениях плотности поверхностных состояний приведена на рис. 1.

Подведём некоторые итоги проведённого анализа. Расчёт показывает (см. рис.1), что при практически максимальном заполнении акцепторных дислокационных состояний ($\lambda = 0.01$ СГСЭ соответствует плотности около 1 электрона на постоянную решётки) наличие исходно в рассматриваемой системе сильно вырожденного делокализованного двумерного электронного газа высокой плотности (порядка 10^{14} см$^{-2}$эВ$^{-1}$ и более) приводит лишь к незначительным средним флуктуациям потенциальной энергии электрона, не превышающим тепловой энергии при комнатной температуре. При этом характерный масштаб данных флуктуаций в приведённом диапазоне концентраций линейных дефектов согласно формуле (8) составляет от сотен до десятков ангстрем, что меньше среднего расстояния между ближайшими дислокациями. Но при уменьшении плотности поверхностных состояний на порядок увеличиваются в несколько раз как величины δU, так и значения R_0. В частности, при $N_{\text{disl}} = 2\cdot 10^{10}$ см$^{-2}$ величина δU уже оказывается порядка 100 мэВ и R_0 сравнима с величиной $N_{\text{disl}}^{-1/2}$. Другими словами, в этих условиях хаотический потенциал перестаёт быть мелкомаштабным и необходимо учитывать частичную локализацию поверхностных состояний [7,8]. Следует также отметить, что приближение Томаса-Ферми даёт для амплитуды хаотического потенциала несколько завышенный результат.

Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2023-0016).

ЛИТЕРАТУРА

1. В.Б.Бондаренко, А.В.Филимонов, Kumar Ravi. Хаотический потенциал заряженных дислокаций в III-нитридах. Письма в ЖТФ, **47** (1), 12 (2021)
2. В.Б.Бондаренко, М.В.Кузьмин, В.В.Кораблев. Анализ естественных неоднородностей потенциала у поверхности примесного полупроводника. ФТП, **35**(8), 964 (2001)
3. В.Ф.Гантмахер. Электроны в неупорядоченных средах. М., Физматлит, 2003
4. Т.Андо, А.Фаулер, Ф.Стерн. Электронные свойства двумерных систем. М., Мир, 1985.
5. Физические величины. Справочник. Под редакцией И.С.Григорьева, Е.С.Мелихова. М., Энергоатомиздат, 1991
6. И.С.Градштейн, И.М.Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., Наука, 1971
7. Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. М., Наука, 1979
8. Дж.Займан. Модели беспорядка. М., Мир, 1982