

Горячие электроны в бинарных твердых растворах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$

Н. А. Масюков, А. В. Дмитриев^а

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет,
кафедра физики низких температур и сверхпроводимости.
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2. E-mail: ^а dmitrieo@lt.phys.msu.su

Статья поступила 13.06.2017, подписана в печать 19.12.2017.

В электрических полях величиной до 30 кВ/см путем численного решения кинетического уравнения Больцмана найдены нелинейные полевые зависимости дрейфовой скорости горячих электронов в твердых растворах двух семейств полупроводников-нитридов: $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$. Расчет произведен при температурах 77 и 300 К и концентрации электронов $1 \cdot 10^{18}$ и $1 \cdot 10^{19}$ см⁻³. Состав x для обоих сплавов был в расчетах взят равным 0, 0.25, 0.5, 0.75 и 1.

Ключевые слова: полупроводники-нитриды, твердые растворы, горячие электроны, сильные поля, уравнение Больцмана.

УДК: 538.935, 517.958:537.84. PACS: 72.20.Ht.

Введение

В течение долгого времени считалось, что величина запрещенной зоны в электронном энергетическом спектре InN со структурой вюрцита близка к 2 эВ. Однако сравнительно недавно появились экспериментальные данные и спектральные расчеты, которые отчетливо показали, что фундаментальная щель в спектре InN имеет на самом деле значительно меньшую величину: около 0.7 эВ [1, 2]. Таким образом, стало ясно, что твердые растворы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ сравнительно узкозонного полупроводника InN в более широкозонном GaN имеют широкие перспективы использования в оптоэлектронных приборах видимого спектра и, что еще важнее, в разнообразных источниках бытового освещения [3]. Представители другого семейства нитридных твердых растворов, $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, активно используются в конструировании современных полупроводниковых диодов, транзисторов и гетероструктур [4–6]. Все это объясняет значительный интерес, который представляет изучение электронного транспорта в этих материалах в сильных электрических полях.

Кинетика горячих электронов в нитридных полупроводниках исследовалась в последнее время многократно [7–16]. Эти работы были, однако, сосредоточены в основном на чистых соединениях, таких как InN, AlN и особенно GaN. В данной статье эта проблема будет подробно изучена применительно к бинарным твердым растворам InN в GaN и AlN. До настоящего времени такие растворы приемлемой чистоты и качества были выращены преимущественно в области составов вблизи $x = 0$ и $x = 1$, однако в настоящей теоретической работе будет рассмотрен весь диапазон состава. Наши вычисления были проведены в электрических полях до 30 кВ/см при температурах решетки 77 и 300 К и концентрациях электронов $1 \cdot 10^{18}$ и $1 \cdot 10^{19}$ см⁻³.

Использованный нами метод расчетов основывается на кинетическом уравнении Больцмана для

электронов, которое решается численно. Для решения мы используем развитый нами ранее оригинальный итерационный метод [17–20], который уже был применен для изучения транспорта горячих электронов в InN [15] и привел к хорошему согласию с экспериментальными данными, полученными в работе [21].

1. Описание модели

В данной работе мы рассматриваем полупроводниковые сплавы n -типа. Минимум зоны проводимости в полупроводниках-нитридах со структурой вюрцита лежит в точке Γ их зоны Бриллюэна. Мы считаем, что электроны находятся только в этом минимуме, и используем поэтому однодолинную модель энергетического спектра. Мы не принимаем во внимание ни переход носителей заряда в верхние долины зоны проводимости, ни возможность межзонного пробоя и появления дырок. То и другое представляется разумным приближением в исследуемом диапазоне полей до 30 кВ/см (см. [20]).

В нитридных полупроводниках закон дисперсии электронов в окрестности Γ -точки в зоне проводимости изотропный, но не параболический:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon), \quad (1)$$

где ε — энергия электрона, m — его эффективная масса на дне Γ -долины, а α — параметр непараболичности, определяемый как

$$\alpha = \frac{1}{\varepsilon_g} \left(1 - \frac{m}{m_0}\right)^2. \quad (2)$$

Здесь m_0 — масса свободного электрона.

Помимо закона дисперсии, электронный транспорт определяется механизмами рассеяния носителей заряда. В настоящих расчетах мы принимаем во внимание все основные каналы электронного рассеяния в полупроводниках-нитридах: столк-

новения с заряженными примесями, рассеяние на деформационных и поляризационных акустических фононах, а также на полярных оптических фононах. Электрон-электронное взаимодействие мы не учитываем. Оно, в отличие от решеточного рассеяния, не влияет непосредственно на величину тока и дрейфовой скорости электронов, а может лишь воздействовать на форму функции распределения носителей. Концентрация электронов и заряженных доноров считается одинаковой: компенсация предполагается отсутствующей. Фононы находятся в равновесии, и температура решетки остается постоянной.

Для нахождения кинетических свойств горячих электронов в том или ином полупроводнике необходимо знать как параметры его электронного спектра, так и те характеристики материала, которые определяют интенсивность рассеяния в различных каналах. В твердых растворах нахождение этих многочисленных параметров, изменяющихся в зависимости от состава сплава, представляет собой самостоятельную задачу.

Поскольку зонная структура и законы дисперсии электронов в InN, GaN и AlN одностипны и их кристаллические решетки различаются не сильно, то для нахождения неизвестных параметров бинарных растворов $In_xGa_{1-x}N$ и $In_xAl_{1-x}N$ можно использовать простую линейную интерполяцию между величинами тех же параметров в компонентах рассматриваемого сплава: InN и GaN или InN и AlN. В самом деле, в статье [22] было показано, что зависимость ширины щели в спектре от параметра решетки в нитридах почти линейна и такова же зависимость параметра решетки от состава сплава.

Для использования интерполяции необходимо, очевидно, знать величины требуемых параметров в чистых соединениях InN, GaN и AlN. К сожалению, многие из них установлены к настоящему времени не вполне однозначно.

Наилучшая ситуация складывается в GaN, характеристики которого определены наиболее надежно (см. обзоры в работах [23, 27]). Взятые отсюда и использованные в наших расчетах параметры представлены в таблице.

Напротив, для InN в литературе можно найти по крайней мере 4 заметно различающихся набора материальных параметров (см. ссылки и обсуждение в статье [15]). Мы использовали для расчетов наиболее современный из них, который приведен в таблице. Его применение в работе [15] обеспечило хорошее согласие с экспериментальными данными [21].

В величинах параметров AlN также присутствует некоторая неопределенность, касающаяся даже такой важной характеристики, как эффективная масса электронов. В литературе для нее можно найти значения, различающиеся вдвое: от $0.24m_0$ до $0.48m_0$ [8, 23–26]. В настоящих расчетах было принято значение $0.32m_0$ [25], близкое к середине этого

Материальные параметры InN, GaN и AlN

Величина	Ед. изм.	InN	GaN	AlN
Ширина щели	эВ	0.7	3.4	6.2
Эффективная масса	m_0	0.07	0.2	0.32
Высокочастотная диэлектрическая проницаемость		6.7	5.35	4.77
Статическая диэлектрическая проницаемость		11.0	8.9	8.5
Скорость LA-фононов	10^5 см/с	5.2	6.56	9.06
Скорость TA-фононов	10^5 см/с	1.2	2.68	3.70
Акустический деформационный потенциал	эВ	3.6	8.3	9.5
Энергия LO-фононов	мэВ	73	90	99
Энергия TO-фононов	мэВ	57	70	74
Пьезоэлектрическая постоянная	Кл/м ²	0.375	0.375	0.92
Плотность материала	г/см ³	6.81	6.15	3.23

интервала. Величины других параметров были взяты из работы [8].

2. Результаты

В обеих системах твердых растворов — и в $In_xGa_{1-x}N$, и в $In_xAl_{1-x}N$ — вычисления были проведены при двух практически важных температурах: 77 и 300 К, при концентрациях электронов $1 \cdot 10^{18}$ и $1 \cdot 10^{19}$ см⁻³ и отсутствии компенсации. Состав x исследованных твердых растворов был равен 0, 0.25, 0.5, 0.75 и 1.

Найденные полевые зависимости дрейфовой скорости v электронов в $In_xGa_{1-x}N$ показаны на рис. 1 и 2. Из сравнения рисунков видно, что уменьшение уровня легирования приводит к существенному возрастанию скорости, что обусловлено падением интенсивности примесного рассеяния. Неудивительно, что рост скорости сильнее проявляется при низких температурах, когда рассеяние на фононах ослабевает. Тем не менее влияние примесного рассеяния на дрейфовую скорость отчетливо заметно и при 300 К. Помимо увеличения самой величины скорости, при уменьшении концентрации примесей наблюдается также существенное возрастание степени нелинейности полевой зависимости v .

На скорости электронов заметно сказывается, разумеется, и температура решетки. Увеличение температуры сопровождается падением дрейфовой скорости из-за возрастания интенсивности рассеяния электронов на фононах. Понятно, что температурное падение скорости слабее проявляется в сильно легированных материалах, где большую роль играет примесное рассеяние.

Эти общие черты транспорта горячих электронов в сплавах нитридных полупроводников близки к тем, которые характерны для InN [15]. В сплавах, однако, возникает новая переменная: состав твердого раствора x , которая тоже влияет на транспорт.

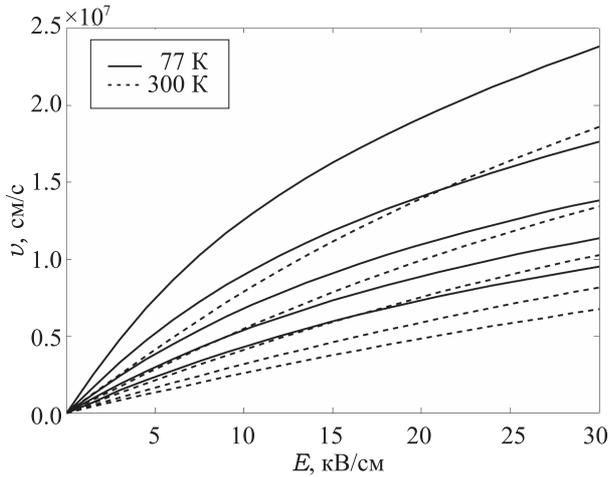


Рис. 1. Полевая зависимость дрейфовой скорости v электронов в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ при концентрации примесей $1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Сплошные линии отвечают температуре решетки 77 К, штриховые — 300 К. В обеих группах нижняя кривая относится к GaN, верхняя — к InN, а промежуточные получены при увеличении x каждый раз на 0.25

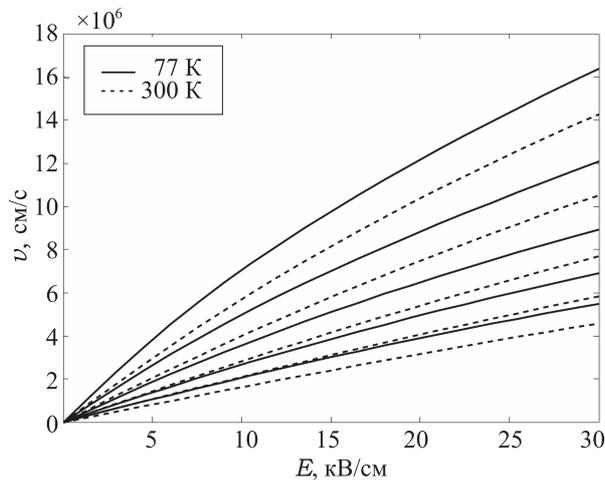


Рис. 2. Полевая зависимость дрейфовой скорости v электронов в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ при примесной концентрации $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Сплошные линии отвечают температуре решетки 77 К, штриховые — 300 К. В обеих группах нижняя кривая относится к GaN, верхняя — к InN, а промежуточные получены при увеличении x каждый раз на 0.25

Такого явления в чистых веществах, разумеется, быть не может.

Из рис. 1, 2 видно, что дрейфовая скорость электронов заметно падает в сплавах с высокой концентрацией GaN. Это явление связано в основном с возрастанием в таких растворах эффективной массы носителей заряда, которая в широкозонном GaN больше, чем в узкозонном InN (см. таблицу). По этой же причине при переходе от InN к GaN примерно втрое уменьшается подвижность электронов в слабых полях при данной температуре и уровне легирования. Эта цифра хорошо согласуется с величиной возрастания эффективной массы.

По мере уменьшения дрейфовой скорости электронов уменьшается и нелинейность ее полевой зависимости и кривая, отвечающая чистому GaN

при $T = 300 \text{ К}$ и $n = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, становится уже почти линейной (нижний график на рис. 2).

Рис. 1, 2 показывают также, что изменение температуры в пределах рассматриваемого нами диапазона сильнее отражается на степени нелинейности полевой зависимости скорости, чем вариация состав сплава. Это становится особенно хорошо заметно, когда сплошная и штриховая линии располагаются на рисунке рядом, как, например, вторая и третья кривые сверху на рис. 1.

Результаты наших расчетов для второго семейства твердых растворов, $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, представлены на рис. 3, 4. Общие закономерности изменения электронной дрейфовой скорости при вариации параметров близки в них к описанным выше для сплавов $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Но и подвижности электронов, и сами величины их дрейфовых скоростей в растворах на основе AlN оказываются ниже из-за большей

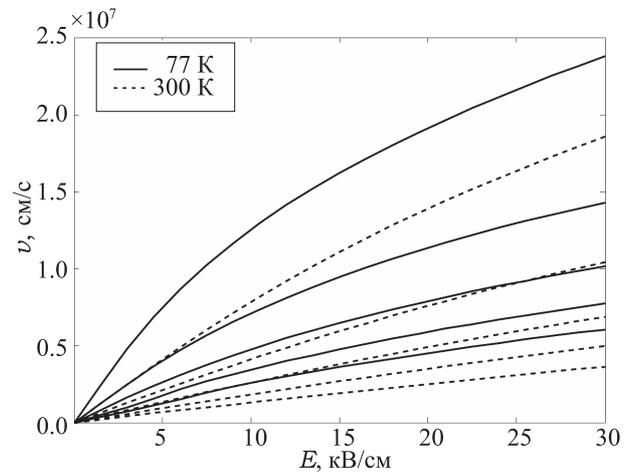


Рис. 3. Полевая зависимость дрейфовой скорости v электронов в $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ при концентрации $1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Сплошные линии отвечают температуре решетки 77 К, штриховые — 300 К. В обеих группах нижняя кривая относится к AlN, верхняя — к InN, а промежуточные получены при увеличении x каждый раз на 0.25

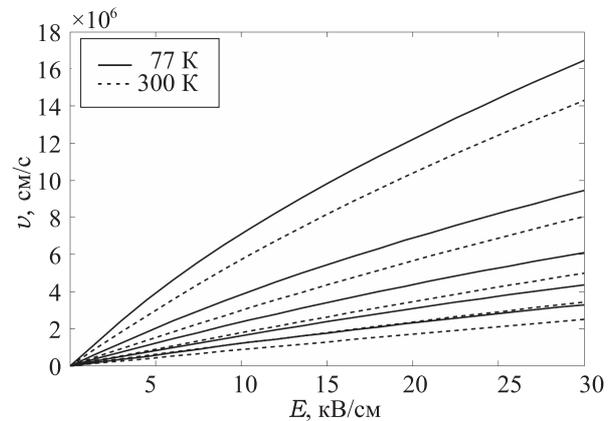


Рис. 4. Полевая зависимость дрейфовой скорости v электронов в $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ при концентрации $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Сплошные линии отвечают температуре решетки 77 К, штриховые — 300 К. В обеих группах нижняя кривая относится к AlN, верхняя — к InN, а промежуточные получены при увеличении x каждый раз на 0.25

эффективной массы электронов, которая в AlN в полтора раза превосходит ее величину в GaN. Уменьшение подвижности в слабых полях при переходе от InN к AlN при одной и той же температуре и уровне легирования оказывается примерно шестикратным, что снова близко к соответствующей степени увеличения эффективной массы.

Стоит отметить интересную и важную черту рассчитанных полевых зависимостей дрейфовой скорости в обоих рассмотренных семействах твердых растворов. И там и там эта зависимость оказывается близка к линейной при комнатной температуре в сплавах с низким содержанием InN и высоким уровнем легирования. Заметим в этой связи, что как раз такие сплавы на основе GaN с $x = 0.1-0.2$ наиболее важны для практических приложений, поскольку они обеспечивают высокий выход излучения видимого диапазона.

Заключение

Теоретически исследован транспорт горячих электронов в двух семействах нитридных полупроводниковых твердых растворов: $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, с проводимостью n -типа в электрических полях до 30 кВ/см. Рассчитаны нелинейные полевые зависимости дрейфовой скорости электронов при температуре 77 и 300 К и уровне легирования $1 \cdot 10^{18}$ и $1 \cdot 10^{19}$ см⁻³. В обоих семействах рассмотрены растворы с составами $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ и 1.

Проведен анализ закономерностей изменения полевых зависимостей электронной скорости при вариации состава сплава, уровня легирования и температуры исходя из соответствующих изменений параметров спектра и интенсивностей основных механизмов рассеяния носителей заряда.

Список литературы

1. Davydov V.Yu., Klochikhin A.A., Seisyan R.P. et al. // Phys. Stat. Sol. (B). 2002. **229**. P. R1.
2. Davydov V.Yu., Klochikhin A.A., Seisyan R.P. et al. // Phys. Stat. Sol. (B). 2002. **230**. P. R4.
3. Humphreys C.J. // MRS Bull. 2008. **33**. P. 459.

4. JunShuai Xue, JinCheng Zhang, YaoWei Hou et al. // Appl. Phys. Lett. 2012. **100**. P. 013507.
5. Haoran Chen, Lin'an Yang, Yue Hao // J. Appl. Phys. 2014. **116**. P. 074510.
6. Lugani L., Py M.A., Carlin J.-F., Grandjean N. // J. Appl. Phys. 2014 **115**. P. 074506.
7. Belloiti E., Doshi B.K., Brennan K.F. et al. // J. Appl. Phys. 1999. **85** (2). P. 916.
8. Foutz B.E., O'Leary S.K., Shur M.S., Eastman L.F. // J. Appl. Phys. 1999. **85** (11). P. 7727.
9. O'Leary S.K., Foutz B.E., Shur M.S., Eastman L.F. // J. Appl. Phys. 1998. **83** (2). P. 826.
10. O'Leary S.K., Foutz B.E., Shur M.S., Eastman L.F. // Appl. Phys. Lett. 2005. **87**. P. 222103.
11. Starikov E., Shiktorov P., Gruinskis V. et al. // J. Appl. Phys. 2005. **98**. P. 083701.
12. Polyakov V.M., Schwierz F. // Appl. Phys. Lett. 2006. **88**. P. 032101.
13. Polyakov V.M., Schwierz F. // J. Appl. Phys. 2006 **99**. P. 113705.
14. Rodrigues C.G., Vasconcellos A.R., Luzzi R., Freire V.N. // J. Appl. Phys. 2005. **98**. P. 043702.
15. Masyukov N.A., Dmitriev A.V. // J. Appl. Phys. 2011. **109**. P. 023706.
16. Zhang J.-Z., Dyson A., Ridley B. K. // J. Appl. Phys. 2015. **117**. P. 025701.
17. Масюков Н.А., Дмитриев А.В. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2009. № 4. С. 63. (Masyukov N.A., Dmitriev A.V. // Moscow Univ. Phys. Bull. 2009. **64**. P. 423.)
18. Masyukov N.A., Dmitriev A.V. // Moldavian J. Phys. Sci. 2009. **8**. P. 17.
19. Масюков Н.А., Дмитриев А.В. // Фундаментальная и прикладная математика. 2009. **15**. В. 6. С. 77.
20. Masyukov N.A., Dmitriev A.V. // J. Math. Sci. 2011. **172**. P. 811.
21. Zanoato D., Balkan N., Ridley B.K. et al. // Semicond. Sci. Technol. 2004. **19**. P. 1024.
22. Walukiewicz W., Ager III J.W., Yu K.M. et al. // J. Phys. D. 2006. **39**. P. R83.
23. Vurgaftman I., Meyer J., Ram-Mohan L. // J. Appl. Phys. 2001. **89**. P. 5815.
24. Silveira E., Freitas J.J.A., Kneissl M. et al. // Appl. Phys. Lett. 2004. **84**. P. 3501.
25. Rinke P., Winkelkemper M., Qteish A. et al. // Phys. Rev. B. 2008. **77**. P. 075202.
26. Fritsch D., Schmidt H., Grundmann M. // Phys. Rev. B. 2003. **67**. P. 235205.
27. Levinshtein M., Rumyantsev S., Shur M. Properties of Advanced Semiconductor Materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe. New York: Wiley, 2001.

Hot electrons in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ binary solid solutions

N. A. Masyukov, A. V. Dmitriev^a

Department of Low-Temperature Physics and Superconductivity, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia.

E-mail: ^a dmitriev@lt.phys.msu.su.

The nonlinear field dependences of the hot electron drift velocity have been calculated by means of numerical solution of the Boltzmann kinetic equation in two families of nitride semiconductor solid solutions: $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$. The calculations have been carried out in the electric field up to 30 kV/cm at lattice temperatures of 77 and 300 K, and for electron concentrations of 1×10^{18} and 1×10^{19} см⁻³. In the calculations, the composition x has been taken as 0, 0.25, 0.5, 0.75, and 1 for both alloys.

Keywords: nitride semiconductors, solid solutions, hot electrons, strong fields, Boltzmann equation.

PACS: 72.20.Ht. Received 13 June 2017.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2018. **72**, No. 3. Pp. 325–328.

Сведения об авторах

1. Масюков Никита Андреевич — аспирант; тел.: (495) 939-59-05.

2. Дмитриев Алексей Владимирович — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-59-05, e-mail: dmitriev@lt.phys.msu.su.