

Научная статья

УДК 538.915

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17102>

ХАОТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ЗАРЯЖЕННЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В ГЕТЕРОКОНТАКТАХ III-НИТРИДОВ ПРИ ЛОКАЛИЗАЦИИ ДВУМЕРНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

А. В. Филимонов ✉, **В. Б. Бондаренко**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ filimonov@rphf.spbstu.ru

Аннотация. В работе исследуется хаотический потенциал (ХП) в гетероконтактах III-нитридов, обусловленный электростатическим полем заряженных дислокаций, в условиях локализации двумерного электронного газа в приконтактной области. В рамках статистического анализа пуассоновского ансамбля линейных дефектов определены амплитуда и масштаб ХП в плоскости контакта. Показана зависимость параметров ХП от плотности поверхностных состояний и концентрации дислокаций на пороге подвижности двумерного электронного газа. Установлено, что при наличии эффектов локализации электронного заряда в гетероконтактах амплитуда ХП превышает 100 мЭВ в широком диапазоне изменения параметров системы.

Ключевые слова: хаотический потенциал, гетерокontakt III-нитридов, двумерный электронный газ, естественный размерный эффект

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

Для цитирования: Филимонов А. В., Бондаренко В. Б. Хаотический потенциал заряженных дислокаций в гетероконтактах III-нитридов при локализации двумерного электронного газа // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 1. С 21–28. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17102>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17102>

A CHAOTIC POTENTIAL OF CHARGED DISLOCATIONS IN GROUP III-NITRIDE HETEROJUNCTIONS DURING LOCALIZATION OF A TWO-DIMENSIONAL ELECTRON GAS

A. V. Filimonov ✉, **V. B. Bondarenko**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ filimonov@rphf.spbstu.ru

Abstract. This work studies a chaotic potential (CP) in the heterojunctions of III-nitrides, the CP caused by the electrostatic field of charged dislocations, under localization conditions of a two-dimensional electron gas in the near-contact region. Within the framework of the statistical analysis of a Poisson ensemble of linear defects, the amplitude and scale of the CP in the contact plane have been determined. The CP parameter dependence on the density of surface

states and the concentration of dislocations at the mobility threshold of the two-dimensional electron gas was shown. The CP amplitude was established to exceed 100 meV in a wide range of changes in the system parameters, in the presence of electronic charge localization effects in the heterojunctions.

Keywords: chaotic potential, III-nitride heterojunction, two-dimensional electron gas, natural size effect

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2023-0016).

For citation: Filimonov A. V., Bondarenko V. B., A chaotic potential of charged dislocations in group III-nitride heterojunctions during localization of a two-dimensional electron gas, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (1) (2024) 21–28. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17102>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Двумерный электронный газ в гетероконтактах на основе III-нитридов обладает, как правило, высокой подвижностью. Однако данное свойство указанной подсистемы существенным образом зависит от совершенства полупроводниковых структур. Дефектность контактирующих полупроводников и межфазной границы ограничивает подвижность свободных носителей заряда [1]. В ряде случаев уменьшение длины свободного пробега носителей возможно и в результате их рассеяния на заряженных дислокациях [1 – 3]. Очевидно, что при исследовании процессов подобного рода необходимо учитывать как возможные концентрации данных протяженных дефектов в гетероконтактах, так и заселенность дислокационных состояний [4]. Перераспределение электронной плотности между поверхностными состояниями и состояниями линейных дефектов приводит к изменениям электрического поля и потенциала в плоскости контакта. При некоторых же предельных значениях случайных полей может возникнуть состояние сильной локализации двумерного электронного газа [5].

Оценки показывают, что флуктуации электрических полей на поверхности полупроводников и формирование хаотического потенциала (ХП) могут быть связаны не только с дефектностью самой поверхности, но и с локализованными зарядами в приповерхностных слоях обеднения электрических полей. В широком диапазоне параметров полупроводниковых структур возникает классический размерный эффект в контактах, связанный с естественной сопоставимостью характерных масштабов в области пространственного заряда (ОПЗ) полупроводника [6]. Установлено, что в условиях данного естественного размерного эффекта и неоднородности локальных полей заряженных дефектов в гетероконтактах при уменьшении плотности делокализованных поверхностных состояний происходит рост амплитуды и характерного масштаба ХП [7]. Кроме того, само распределение электронного заряда в области контакта самосогласованным образом зависит от ХП, формируемого на границе раздела, поскольку изменяется спектр поверхностных состояний и, возможно, их локализация. С учетом ослабления экранирующей способности двумерного электронного газа в условиях его локализации представляется важным исследовать структуры ХП заряженных дислокаций в гетероконтактах полупроводниковых нитридных соединений.

Цель настоящей работы – определить указанный ХП в гетероконтактах III-нитридов и характер его зависимости от параметров системы.

Распределение потенциала заряженных дислокаций в гетероконтакте

Для примера проанализируем гетероструктуру на основе контакта AlGaN/GaN [8]. Рассмотрим модель, согласно которой прорастающие дислокации несоответствия с поверхностной концентрацией N_{disl} в указанной гетероструктуре представлены в виде заряженных нитей, перпендикулярных к плоскости контакта. В пренебрежении взаимодействием

между дислокациями их распределение по количеству можно считать пуассоновским. В этом представлении вероятность расположения N указанных линейных дефектов на участке контакта радиуса R равна

$$p(N) = \frac{\langle N \rangle^N \exp(-\langle N \rangle)}{N!}, \quad (1)$$

где $\langle N \rangle$ – среднее количество этих дефектов на данном участке, и $\langle N \rangle = N_{disl} \pi R^2$.

Вследствие полярности химической связи в кристаллах нитридов алюминия и галлия, в механически напряженных гетероконтактах возникают пьезоэффект и спонтанная поляризация [8]. В результате инжекции электронов в область контакта формируются поверхностное поле и соответствующий изгиб зон в нитриде галлия, при этом величина последнего превышает половину ширины запрещенной зоны (она составляет около 1,8 эВ). Поскольку формируемый канальный слой рассматриваемой гетероструктуры практически всегда содержит нелегированный или компенсированный нитрид галлия GaN, объемный заряд в области изгиба зон в основном образован заряженными дислокациями. При наличии больших изгибов зон такие протяженные дефекты в пределах ОПЗ будем считать равномерно заряженными с некоторой линейной плотностью λ . Если в гетероконтакте имеется только локализованный поверхностный заряд, то для определения параметров ХП имеется возможность воспользоваться принципом суперпозиции. Можно показать, что при этом доминирующий вклад в крупномасштабные флуктуации поля в контакте вносит система заряженных дислокаций [7].

Потенциал поля произвольно выбранной дислокации в плоскости контакта будем определять в полярной системе координат, в которой ρ – радиальная координата, определяющая расстояние от данного линейного дефекта до точки наблюдения. Интегрирование вдоль заряженной дислокации в пределах ОПЗ шириной L_0 дает величину потенциальной энергии поверхностного электрона в плоскости контакта:

$$U_i(\rho) = \frac{2e\lambda}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \ln \frac{\sqrt{\rho^2 + L_0^2} + L_0}{\rho}, \quad (2)$$

где $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ – величины диэлектрической проницаемости полупроводников, приведенных в контакт.

Объемный заряд в области изгиба зон нитрида галлия в рамках приведенных модельных представлений имеет плотность, равную λN_{disl} . При этом характерная ширина ОПЗ может быть представлена в виде

$$L_0 = \sqrt{\frac{\varepsilon_2 U_0}{2\pi e \lambda N_{disl}}}, \quad (3)$$

где U_0 – величина изгиба зон.

Для дальнейшего анализа системы необходим простой расчет, аналогичный использованному в работе [7]. В рамках приведенного метода прежде всего можно определить средний вклад в значение потенциальной энергии поверхностного электрона в электрическом поле одной дислокации. Аналогичное усреднение выражения (2) по площадке радиуса R дает следующий результат:

$$\langle U_i \rangle(R) = \frac{2e\lambda}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)R^2} \left(L_0 \sqrt{R^2 + L_0^2} - L_0^2 + R^2 \ln \frac{\sqrt{R^2 + L_0^2} + L_0}{R} \right). \quad (4)$$

Учитывая распределение заряженных дислокаций (1), можно представить также среднеквадратичное отклонение их количества на заданном участке поверхности в виде

$$\delta N(R) = R \sqrt{\pi N_{disl}}. \quad (5)$$

Путем перемножения выражений (4) и (5) с последующим поиском максимума полученного произведения можно оценить характерную величину неоднородностей потенциальной энергии поверхностного электрона в поле заряженных дислокаций. Соответствующий предельный переход $R \rightarrow \infty$ даст значение искомой величины:

$$\delta U = \frac{4e\lambda L_0 \sqrt{\pi N_{disl}}}{\epsilon_1 + \epsilon_2}. \quad (6)$$

Подстановка в выражение (6) зависимости (3) ширины области пространственного заряда от параметров системы приводит к следующему результату:

$$\delta U = \frac{2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \sqrt{2e\lambda\epsilon_2 U_0}. \quad (7)$$

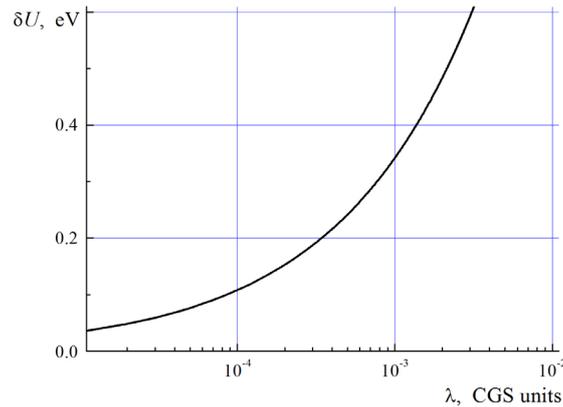


Рис. 1. Зависимость средней величины флуктуаций хаотического потенциала заряженных дислокаций в гетероконтакте AlGaIn/GaN от линейной плотности заряда.

Величина изгиба зон $U_0 = 1,8 \text{ эВ}$

В рассматриваемой гетероструктуре диэлектрические проницаемости нитрида алюминия и нитрида галлия равны соответственно 9,2 и 10,4 [8]. Характерный вид полученной зависимости $\delta U(\lambda)$ (см. формулу (7)) представлен на рис. 1 при значении параметра величины изгиба зон $U_0 = 1,8 \text{ эВ}$. Поскольку выражение (6) для δU было получено при осуществлении формального предельного перехода $R \rightarrow \infty$, ХП, найденный таким образом, является крупномасштабным.

Плотность поверхностных состояний в гетероконтакте

Наличие крупномасштабного ХП заряженных дислокаций в приконтактной области рассматриваемой гетероструктуры модифицирует квазиклассический спектр поверхностных состояний и приводит к появлению «хвостов» их плотности. В этом случае, при известном виде закона распределения потенциальной энергии электрона, можно получить соответствующую энергетическую зависимость плотности состояний $D(E)$ [9]. С учетом квазинепрерывности спектра электронных состояний исходное выражение для их плотности имеет вид

$$D(E) = \int_{-\infty}^E D_0(E-U) \cdot f(U) dU, \quad (8)$$

где $D_0(E)$ – невозмущенная плотность состояний, $f(U)$ – функция плотности распределения вероятности для потенциальной энергии электрона U на поверхности.

При параболическом законе дисперсии квазиклассическая плотность поверхностных состояний в пределах разрешенной зоны в отсутствие ХП и долинного вырождения является константой [10] и зависит только от эффективной массы электрона. Поэтому выражение (8) можно упростить:

$$D(E) = D_0 \int_{-\infty}^E f(U) dU. \quad (9)$$

Таким образом, вид функциональной зависимости $D = D(E)$ полностью определяется характером распределения потенциальной энергии поверхностного электрона. При учете



принципа суперпозиции полей случайно расположенных заряженных дислокаций вполне применима модель гауссова распределения ХП [11]:

$$f(U) = \frac{1}{\delta U \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{U^2}{2 \cdot \delta U^2}\right). \quad (10)$$

После подстановки функции плотности распределения вероятности (10) в выражение (9) и вычисления интеграла результат для плотности поверхностных состояний получаем через функцию ошибок:

$$D(E) = \frac{D_0}{2} \cdot \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{E}{\delta U \sqrt{2}}\right)\right]. \quad (11)$$

Эта формула позволяет получить выражение для концентрации двумерного электронного газа

$$n_s = \int_{-\infty}^{E_F} D(E) dE, \quad (12)$$

при низких температурах T (формально при $T \rightarrow 0$ К), которое имеет следующий вид [12]:

$$n_s = \frac{D_0}{2} \cdot \left\{ E_F \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{E_F}{\delta U \sqrt{2}}\right)\right] + \delta U \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{E_F^2}{2 \cdot \delta U^2}\right) \right\}. \quad (13)$$

Здесь E_F – энергия Ферми в поверхностной зоне.

Хаотический потенциал в гетероконтакте на пороге подвижности двумерного электронного газа

Конкретные значения величин δU и n_s можно оценить при известных условиях, характерных для формируемых контактных структур. Прежде всего можно полагать, что в равновесном состоянии выполнено условие электронейтральности:

$$N_s = n_s + \frac{\lambda}{e} N_{dist} L_0, \quad (14)$$

где N_s – концентрация поверхностного заряда в контакте.

Если величина (14) зависит только от природы контактирующих полупроводников, то для заданной гетероструктуры $N_s = \text{const}$. В этом случае возможно лишь перераспределение локализованного заряда между поверхностными и дислокационными состояниями, которое будет зависеть от реализуемой ситуации. Например, на классическом пороге подвижности (т. е. при условии $E_F = 0$ [9]) практически все локализованные поверхностные состояния будут заполнены, что соответствует условию появления на диэлектрической поверхности максимального электронного заряда. В этом случае из выражения (14), с учетом (3), (7) и (13), удастся получить явную зависимость характерных величин ХП от количества заряженных дислокаций на единице площади поверхности контакта:

$$\delta U = \frac{4\sqrt{2\pi} \cdot e^2 N_s}{4e^2 D_0 + (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \sqrt{2N_{dist}}}. \quad (15)$$

Для значения величины поверхностной концентрации заряда $N_s = 10^{13}$ см⁻² и двух значений плотности поверхностных состояний D_0 график зависимости средней величины флуктуаций потенциальной энергии (15) от концентрации заряженных дислокаций представлен на рис. 2.

Обсуждение результатов

Проведенный анализ показывает, что в условиях локализации двумерного электронного газа уже при достаточно умеренных величинах линейной плотности заряда на дислокациях (по сравнению с максимально возможными величинами порядка 0,01 ед. СГСЭ [7]), амплитуда ХП в гетероконтакте может достигать значений в несколько сотен миллиэлектронвольт (см. рис. 1). Зависимость $\delta U = \delta U(\lambda)$, полученная для указанного случая, достаточно слабая: согласно выражению (7), величина δU пропорциональна квадратному

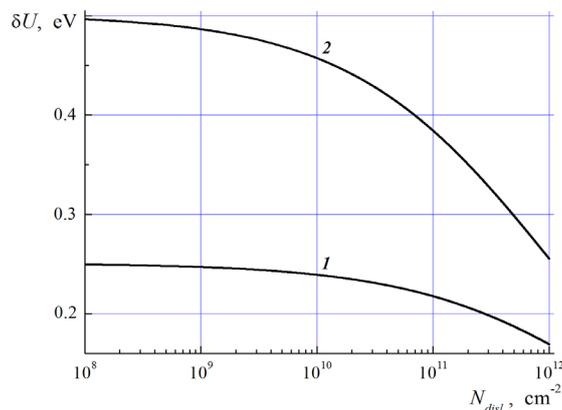


Рис. 2. Зависимости средней величины флуктуаций хаотического потенциала заряженных дислокаций в гетероконтакте от их концентрации на пороге подвижности двумерного электронного газа, при двух значениях плотности поверхностных состояний D_0 , $\text{см}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$: $1 \cdot 10^{14}$ (1) и $5 \cdot 10^{13}$ (2); $N_s = \text{const}$

корню из величины линейной плотности заряда λ . Другими словами, указанные величины характерных неоднородностей потенциала в контакте сохраняются в достаточно широком диапазоне изменения параметров системы. Кроме того, ввиду наличия неэкранированных, медленно меняющихся в пространстве кулоновских полей вида (2), получаемый ХП в контакте оказывается крупномасштабным.

Естественными следствиями существования крупномасштабного ХП в гетероконтакте являются появление «хвостов» плотности поверхностных состояний и возможность перераспределения локализованного заряда. Если в гетероконтакте величина полного поверхностного заряда остается неизменной, то при увеличении концентрации заряженных дислокаций происходит, в рамках принятого модельного приближения, снижение средней величины флуктуаций потенциальной энергии поверхностного электрона (см. рис. 2). Такое поведение величины δU связано с ослаблением естественного размерного эффекта, поскольку в этом случае заряд распределяется по большему количеству протяженных дефектов и достигается лучшее статистическое усреднение неоднородных полей. Снижение же плотности поверхностных состояний (что соответствует меньшим значениям эффективной массы электрона в поверхностной зоне) приводит к заметному росту δU .

Заключение

В работе исследованы особенности хаотического потенциала (ХП) в гетероконтактах нитридов третьей группы, индуцированного электростатическим полем дислокаций, в условиях локализации двумерного электронного газа в приконтактной области. Определены амплитуда ХП в плоскости контакта и характер пространственного распределения соответствующего поля. Показана зависимость характерных величин ХП от параметров системы. Установлено, что при наличии эффектов локализации электронного заряда в гетероконтактах III-нитридов величина амплитуды ХП может превышать значение 100 мэВ. Данный результат представляется важным как с точки зрения совершенствования технологии синтеза полупроводниковых приборов на основе соответствующих контактных структур, так и с позиций теоретических исследований свойств двумерного электронного газа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Weimann N. G., Eastman L. F., Doppalapudi D., Ng H. M., Maustakus T. D. Scattering of electrons at threading dislocations in GaN // Journal of Applied Physics. 1998. Vol. 83. No. 7. Pp. 3656–3659.

2. **Debdeep J., Gossard A. C., Mishra U. K.** Dislocation scattering in a two-dimensional electron gas // *Applied Physics Letters*. 2000. Vol. 76. No. 13. Pp. 1707–1709.
3. **Протасов Д. Ю., Малин Т. В., Тихонов А. В., Цацульников А. Ф., Журавлев К. С.** Рассеяние электронов в гетероструктурах AlGa_N/Ga_N с двумерным электронным газом // *Физика и техника полупроводников*. 2013. Т. 47. No 1. С. 36–47.
4. **Шикин В. Б., Шикина Ю. В.** Заряженные дислокации в полупроводниковых кристаллах // *Успехи физических наук*. 1995. Т. 165. № 8. С. 887–917.
5. **Бондаренко В. Б., Филимонов А. В.** Критерий сильной локализации на поверхности полупроводника в приближении Томаса – Ферми // *Физика и техника полупроводников*. 2017. Т. 51. № 10. С. 1372–1375.
6. **Бондаренко В. Б., Давыдов С. Н., Филимонов А. В.** Естественные неоднородности потенциала на поверхности полупроводника при равновесном распределении примеси // *Физика и техника полупроводников*. 2010. Т. 44. № 1. С. 44–47.
7. **Jena D., Wood C.** Polarization effects in semiconductors: From *ab initio* theory to device applications. New York: Springer, 2008. 515 p.
8. **Бондаренко В. Б., Филимонов А. В., Kumar R.** Хаотический потенциал заряженных дислокаций в гетероконтактах III-нитридов // *Письма в Журнал технической физики*. 2021. Т. 47. № 1. С. 12–14.
9. **Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.** Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979. 416 с.
10. **Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Кайпер Р., Миронов А. Г., Эндерлайн Р., Эссер Б.** Электронная теория неупорядоченных полупроводников. М.: Наука, 1981, 384 с.
11. **Градштейн И. С., Рыжик И. М.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Наука, 1971. 1108 с.

REFERENCES

1. **Weimann N. G., Eastman L. F., Doppalapudi D., et al.,** Scattering of electrons at threading dislocations in GaN, *J. Appl. Phys.* 83 (7) (1998) 3656–3659.
2. **Debdeep J., Gossard A. C., Mishra U. K.,** Dislocation scattering in a two-dimensional electron gas, *Appl. Phys. Lett.* 76 (13) (2000) 1707–1709.
3. **Protasov D. Yu., Malin T. V., Tikhonov A. V., et al.,** Electron scattering in AlGa_N/Ga_N heterostructures with a two-dimensional electron gas, *Semiconductors*. 47 (1) (2013) 33–44.
4. **Shikin V. B., Shikina Yu. V.,** Charged dislocations in semiconductor crystals, *Physics – Uspekhi*. 38 (8) (1995) 845–876.
5. **Bondarenko V. B., Filimonov A. V.,** Criterion for strong localization in the Tomas – Fermi approximation, *Semiconductors*. 51 (10) (2017) 1321–1325.
6. **Bondarenko V. B., Davydov S. N., Filimonov A. V.,** Inherent potential inhomogeneity on the semiconductor surface for equilibrium impurity distribution, *Semiconductors*. 44 (1) (2010) 41–44.
7. **Jena D., Wood C.,** Polarization effects in semiconductors: From *ab initio* theory to device applications, Springer, New York. 2008.
8. **Bondarenko V. B., Filimonov A. V., Kumar R.,** A chaotic potential of charged dislocations in group III-nitride heterojunctions, *Tech. Phys. Lett.* 47 (1) (2021) 8–10.
9. **Shklovskii B. I., Efros A. L.,** Electronic properties of doped semiconductors (Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 45) Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg GmbH, 2012.
10. **Bonch-Bruyevich V. L., Zvyagin I. P., Kayper R., et al.,** Electronic theory of disordered semiconductors, Nauka, Moscow, 1981 (in Russian).
11. **Gradshteyn I. S., Ryzhik I. M.,** Table of integrals, series, and products, Edited by D. Zwillinger and V. Moll, Academic Press, Elsevier Inc., 2014.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович — доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы, соруководитель научно-образовательного центра «Физика нанокompозитных материалов электронной техники» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

filimonov@rphf.spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-2793-5717

БОНДАРЕНКО Вячеслав Борисович — кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

vyacheslav.b.bondarenko@mail.ru

ORCID: 0000-0002-2669-0471

THE AUTHORS

FILIMONOV Alexey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

filimonov@rphf.spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-2793-5717

BONDARENKO Vyacheslav B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

vyacheslav.b.bondarenko@mail.ru

ORCID: 0000-0002-2669-0471

Статья поступила в редакцию 27.10.2023. Одобрена после рецензирования 28.11.2023. Принята 28.11.2023.

Received 27.10.2023. Approved after reviewing 28.11.2023. Accepted 28.11.2023.