

纤锌矿 n-GaN 室温补偿度解析模型

何菊生 张萌[†] 许彪 唐建成

(南昌大学材料科学与工程学院, 南昌 330031)

摘要: 用数值方法将室温 n 型 GaN 补偿度 θ 表示为 Caughey-Thomas 解析模型函数。对大多数非故意掺杂样品, 该模型值 θ_{Chin} 与 Chin 等人的理论值及普遍采用的变温霍耳测量拟合值比较表明, 二者具有较好的一致性。对掺 Si 样品及有氧或 Si 污染的非故意掺杂样品, 基于 Chin 理论的补偿度值与普遍采用的实验拟合值常有一定偏差, 通过理论计算及数值方法, 得到了掺硅 GaN 补偿度的解析模型函数 θ_{Si} , 在室温载流子浓度 $3 \times 10^{16} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 范围内, 该模型值与普遍采用的实验拟合值符合得较好, 与基于 Chin 理论的补偿度 θ_{Chin} 也有很好的相容性。该模型对 GaN 材料分析及器件的计算机模拟、器件仿真有重要意义。

关键词: 补偿度; GaN; 电子迁移率; 霍耳迁移率; 补偿受主

PACC: 7210; 7220F; 7280E

中图分类号: TN304. 2⁺ 3

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)07-1041-07

1 引言

目前, 以金属有机化学气相沉积(MOCVD)、分子束外延(MBE)、氢化物气相外延(HVPE)为主流工艺的 GaN 薄膜制备技术成熟, 各项参数稳定, 极大地促进了对 GaN 材料的精确表征和内在机理研究。但是, GaN 材料理论研究的许多方面仍处于起步阶段。例如, 除以迁移率等为参数来表征 GaN 的补偿度外, 尚没有 GaN 补偿度的计算模型。GaN 过高的生长温度(1000℃左右)、过高的 V/III 比(几千以上)及与衬底巨大的晶格失配必然引入大量的本征缺陷, 使它明显区别于 Si, GaAs 等半导体材料: GaN 通常有很高的补偿度, 高补偿度深刻地影响了 GaN 材料的物理性能, 降低了迁移率、辐射效率和结晶质量及其他性能^[1~3], 对器件产生重要影响^[4]。

众所周知, n 型半导体材料内有两类杂质, 一类是施主, 含量占多数, 适量的浓度有助于提高材料的电学及发光等性能; 另一类是受主, 占少数, 它会掩盖真实的施主浓度, 从而降低材料的各项性能。补偿度就是反映材料杂质纯度即补偿杂质(缺陷)浓度相对大小的重要特征参量。对 n 型半导体而言, 补偿度定义为受主和施主浓度之比 $\theta = N_A/N_D$ 。一般来说, θ 越小, 则受主相对含量越小, 材料性能越好。据我们所知, 除定义外, 目前尚没有一个用于计算 GaN 补偿度的公式, 这给 GaN 材料分析和研究工作带来诸多不便, 器件的计算机模拟、分析及器件仿真技术

的发展也迫切需要对补偿度的定量表达。Chin 等人^[5]以载流子浓度和补偿度为参量, 考虑 GaN 材料中最主要的散射机制(电离杂质散射、极性光学波散射、声学波压电散射及声学声子形变势散射), 运用变分原理将理论计算得到的室温电子迁移率用图像表示了出来。他们对 GaN 低场电子迁移率、载流子浓度和补偿度三者关系的研究成果, 产生了极广泛的影响, 被大量文献引用来评估 GaN 材料的补偿度。然而, 有文献^[6~8]指出, Chin 等人的计算基于计算机模拟和早期并不很成熟的技术生长的样品, 根据他们的图像比对得到的补偿度比实际变温霍耳测量拟合得到的值大很多。为此, 我们对 Chin 的图像进行了数值处理, 并反过来以载流子浓度和室温电子迁移率为参量, 用 Caughey-Thomas 解析模型表示出补偿度。张进城等人^[9]曾基于 Chin 理论用 Caughey-Thomas 解析模型来表示 GaN 低场电子迁移率。我们还从有关文献^[9~28]中查到了大量的 GaN 样品的变温霍耳测量图线, 通过拟合得到了比较准确的补偿度值。结果表明, Chin 等人的计算对大部分非故意掺杂 GaN 样品是准确的, 对掺 Si 样品可能偏大。在此基础上, 我们提出了可用于掺 Si 样品的补偿度计算模型。

2 室温下纤锌矿 n-GaN 补偿度模型

我们对 Chin 的电子漂移迁移率 $\mu(\theta, N_e)$ 图像进行数值处理, 得到的 GaN 室温补偿度 $\theta(\mu, N_e)$ 用

[†] 通信作者。Email: tiegang_zm@sina.com

2006-12-28 收到, 2007-01-31 定稿

©2007 中国电子学会

Caughey-Thomas 解析模型函数表示为

$$\theta_{\text{Chin}}(N_e, \mu) = \frac{\theta_1 - \theta_2}{1 + \left(\frac{N_e}{N_{re}}\right)^{\alpha}} + \theta_2 \quad (1)$$

这里 模型参数 $\theta_1 = 1.15$, $\theta_2 = 0.79 - \mu/169 + (\mu/323)^2 - (\mu/479)^3$, $N_{re} = 3.1 \times 10^{20}/\mu(\text{cm}^{-3})$, $\alpha = 0.5$. N_e 为室温电子载流子浓度; μ 为室温电子漂移迁移率. 模型参数由电子漂移迁移率表示. 函数曲线如图 1(a)所示.

为清楚地看出公式(1)和理论值的偏差, 我们将补偿度分别为 0, 0.15, 0.3, 0.45, 0.6, 0.75, 0.9 时, 模型中的电子漂移迁移率和理论值进行了比较, 如图 1(b)所示, 显然, 在电子浓度为 $10^{16} \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 的范围内, 模型和理论值有很好的一致性. 然而, 霍耳效应中测得的是霍耳迁移率 μ_H 和霍耳浓度 N_H , 并非电子浓度 N_e 和电子漂移迁移率 μ , 应作相应转换. 它们之间的关系是 $\mu = \mu_H/r$, $N_e = N_H r$. 霍耳因

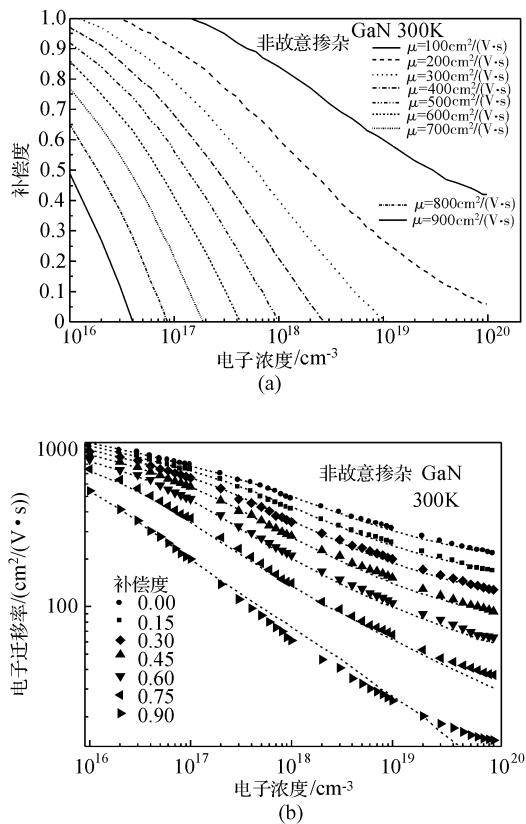


图 1 (a)GaN 补偿度随电子浓度和电子迁移率变化的关系曲线;(b)理论值(符号线)与模型值(虚线)的比较

Fig. 1 (a) Compensation ratios of GaN versus electron concentration for different electron mobilities; (b) Comparision between the theoretical results (the signals) and the simulated model values (the dotted lines)

子 r 取决于材料的载流子浓度、散射机构、能带结构、温度以及外加磁场等,一般情况下 GaN 的霍耳因子 r 是未知的,在室温弱场时可近似认为是载流子浓度 N_e 的函数,换算后以室温霍耳浓度 N_H 和室温迁移率 μ_H 为自变量的公式(1)的等效模型为:

$$\theta_{\text{Chin}}(N_H, \mu_H) = \frac{\theta_1 - \theta_2}{1 + \left(\frac{N_H}{N_{re}}\right)^{\alpha}} + \theta_2 \quad (2)$$

模型参数 $\theta_1 = 1.14$, $\theta_2 = 0.75 - \mu_H/176 + (\mu_H/350)^2 - (\mu_H/533)^3$, $N_{re} = 4.2 \times 10^{20}/\mu_H(\text{cm}^{-3})$, $\alpha = 0.5$.

实验上, GaN 补偿度由变温霍耳实验拟合得到. 拟合得到施主浓度 N_D 和补偿受主浓度 N_A 较为普遍采用的方法是, 考虑分别由电离杂质散射(迁移率为 μ_{ii})、极性光学波散射(μ_{po})、声学波压电散射(μ_{pe})、声学声子形变势散射(μ_{ac})及晶格畸变(晶界、应力、位错等)引起的散射($\mu_{defect} = C/T^{1.5}$, 其中 C 是不受温度影响的常数), 有关公式见(4)~(8)式, 总迁移率由上述散射机制按马修森定则(Matthiesen's rule) $1/\mu_{\text{total}} = \sum_i 1/\mu_i$ 决定, 由 μ_H-T 曲线拟合得到受主浓度 N_A . 由 n_H-T 曲线拟合得到施主浓度 N_D 、施主能级 E_D , 拟合过程中的电平衡方程为^[10]

$$n_H + N_A = \sum_{i=1}^M \frac{N_{Di}}{1 + \frac{g_i n_H}{N_c} \exp\left(\frac{E_{Di}}{kT}\right)} \quad (3)$$

式中 简并因子 $g_i = 2$; k 为玻耳兹曼常数; 导带有效状态数 $N_c = 2(2\pi mkT/h^2)^{3/2}$. 我们用该方法对文献[11]的变温霍耳测量结果进行了拟合, 如图 2 所示. 由 μ_H-T 曲线得到 $N_A = 3.4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $\mu_{defect} = 1.9 \times 10^7/T^{1.5}$; 由 n_H-T 曲线得到 $N_{D1} = 8.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $E_{D1} = 12 \text{ meV}$, $N_{D2} = 4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $E_{D2} = 38 \text{ meV}$, 补偿度拟合值为 $\theta = N_A/N_{D1} = 0.40$; 而根据测量结果 300K 时霍耳电子浓度 $N_H = 7.6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, 霍耳迁移率 $\mu_H = 790 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$, 由模型公式(2)算得补偿度为 $\theta = 0.32$, 与测量结果基本吻合.

我们对有关文献的变温霍耳测量结果进行了拟合, 将得到的补偿度拟合值和模型值进行了比较, 部分样品见表 1, 全部样品^[9~28]见图 3. 显然, 对大部分非故意掺杂样品, 拟合结果和模型值吻合得较好, 但对 GaN: Si θ_{Chin} 普遍偏高. Si 是 GaN 最有效最常用的 n 型掺杂剂.

为得到掺 Si 时的补偿度模型, 我们考虑最主要的散射机制, 从理论上进行了计算. 由极性光学声子散射所决定的迁移率^[18]为:

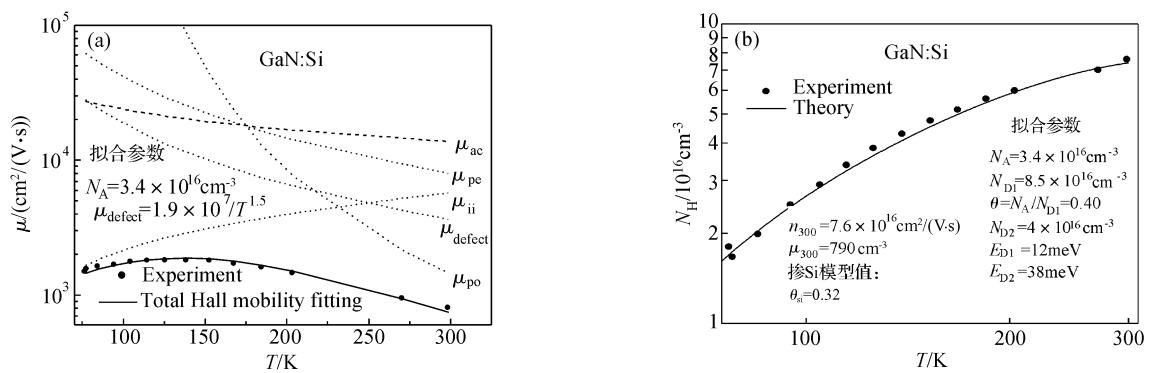


图2 GaN:Si霍耳迁移率的变温测量结果^[11]及本文的理论拟合(符号表示实验值,实线表示理论值) (a)霍耳迁移率拟合;(b)霍耳载流子浓度拟合

Fig.2 Variable temperature Hall-effect measurements results for Si doped GaN (points) from Ref.[11] and our theoretical fitting with full account of the scattering (solid curve) where μ_{po} , μ_{ii} , μ_{ac} and μ_{pe} are scatterings, respectively, due to optical phonon, ionized impurity, acoustic-mode deformation and piezoelectric field (a) Hall-mobility fitting; (b) Hall-concentration fitting

表1 变温霍耳测量拟合得到的GaN补偿度与模型值比较

Table 1 Comparison between the model of compensation ratio and the values through fitting of temperature dependent Hall effect measurements

样品[文献]	是否故意掺杂	测量值(300K)			补偿度		
		N_H/cm^{-3}	$\mu_H/(\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s}))$	拟合值 $\theta_{\text{拟}}$	模型值 θ_{Chin}	模型值 θ_{Si}	
Ref.[12]	非	1.1×10^{17}	670	0.45	0.40	0.35	
Ref.[13]	非	1.8×10^{17}	593	0.40	0.38	0.29	
1#, Ref.[14]	非	2.1×10^{17}	568	0.30	0.37	0.27	
Ref.[15]	非	1.2×10^{17}	785	0.24	0.16	0.17	
74 μm [16]	非	7.6×10^{16}	845	0.28	0.23	0.28	
40 μm , Ref.[16]	非	1.2×10^{17}	730	0.19	0.27	0.25	
15 μm , Ref.[16]	非	1.8×10^{17}	576	0.21	0.40	0.31	
A, Ref.[17]	Si	1.3×10^{17}	535	0.38	0.54	0.42	
B, Ref.[17]	Si	2.9×10^{17}	335	0.42	0.61	0.38	
5779#, Ref.[18]	Si	5.6×10^{17}	280	0.62	0.90	0.64	
5940#, Ref.[18]	Si	1.4×10^{17}	260	0.44	0.81	0.54	
5776#, Ref.[18]	Si	1.6×10^{17}	230	0.50	0.84	0.55	
5754#, Ref.[18]	Si	2.1×10^{17}	220	0.49	0.81	0.52	
1°, Ref.[10]	Si	1.7×10^{17}	620	0.27	0.36	0.29	
0°, Ref.[10]	Si	2.1×10^{17}	456	0.37	0.52	0.36	
Ref.[19]	Si	1.5×10^{17}	725	0.26	0.22	0.20	
1#, Ref.[20]	Si	3.0×10^{17}	312	0.43	0.63	0.39	
2#, Ref.[20]	Si	5.4×10^{17}	301	0.36	0.55	0.30	
2#, Ref.[14]	Si	9.3×10^{16}	370	0.63	0.76	0.55	
3#, Ref.[14]	Si	2.2×10^{17}	501	0.40	0.45	0.31	
Ref.[21]	Si	6.6×10^{16}	462	0.55	0.73	0.57	
Ref.[22]	Si	1.5×10^{17}	545	0.37	0.49	0.38	
Ref.[23]	Si	8.8×10^{16}	433	0.48	0.71	0.54	
Ref.[23]	Si	5.0×10^{17}	331	0.33	0.52	0.29	
Ref.[24]	O	4.4×10^{17}	314	0.39	0.57	0.33	
Ref.[25]	O	9.3×10^{15}	409	0.84	0.98	0.80	

$$\mu_{\text{op}} = 0.199 \left(\frac{T}{300} \right)^{1/2} \left(\frac{e^*}{m^*} \right)^2 \left(\frac{m}{m^*} \right)^{3/2} \times \\ (10^{22} M) (10^{23} v_a) (10^{-13} \omega_{\text{LO}}) \times \\ \left[\exp \left(\frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{k_B T} \right) - 1 \right] G \left(\frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{k_B T} \right) \quad (4)$$

其中 $e^* = \sqrt{M v_a \omega_{\text{LO}}^2 \epsilon_0 (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s)}$; $G \left(\frac{\hbar \omega_{\text{LO}}}{k_B T} \right)$ 是一个随温度缓慢变化的函数.

电离杂质散射所决定的迁移率^[18]为:

$$\mu_{\text{Im}} = \frac{128(2\pi)^{1/2} \epsilon_s^2 (k_B T)^{3/2}}{e^3 (m^*)^{1/2} (n + 2N_A)} [\ln(1 + \beta^2) - \\ \beta^2 / (1 + \beta^2)] \quad (5)$$

其中 $\beta^2 = \frac{24 m^* \epsilon_s (k_B T)^2}{e^2 \hbar^2 n'}; n' = n + \frac{(N_D - N_A - n)(n + N_A)}{N_D}$, $(N_D - N_A - n)/N_D$ 表示施主占有率, $(N_A + n)/N_D$ 表示施主电离几率.

压电散射^[18]为

$$\mu_{\text{pz}} = \frac{16(2\pi)^{1/2} \phi^2 \hbar^2 e}{3(eh_{\text{pz}}/\epsilon_s)^2 (m^*)^{3/2} (k_B T)^{1/2}} \quad (6)$$

声学声子形变势散射^[18]为

$$\mu_{\text{ac}} = \frac{2(2\pi)^{1/2} \phi^2 \hbar^4 e}{3E_1^2 (m^*)^{5/2} (k_B T)^{3/2}} \quad (7)$$

晶格畸变(晶界、应力、位错等)引起的散射^[18]为

$$\mu_{\text{defect}} = \frac{C}{T^{3/2}} \quad (8)$$

其中 C 是不受温度影响的常数, 对掺 Si 的 GaN 样品, 我们发现它是霍耳迁移率 μ_H 和霍耳浓度 N_H 的函数, 可表示为

$$C(\mu_H, N_H) = 0.08 \mu_H^{1.88} (\ln^2 N_H + 20 \ln N_H) \quad (9)$$

按马修森定则得到总迁移率 $\mu_H(\theta, N_H)$, 再用数值方法得到 $\theta(N_H, \mu_H)$, 即模型函数(10), 如图 3 所示.

表 2 计算中用到的 GaN 材料参数^[18]

Table 2 Material parameters of GaN used in the scattering formulas

参数	符号/单位	数值
静态介电常数(低频)	$\epsilon_s / (\text{F/m})$	$10.4 \epsilon_0$
静态介电常数(高频)	$\epsilon_\infty / (\text{F/m})$	$5.47 \epsilon_0$
密度	$\rho / (\text{kg/m}^3)$	6.10×10^3
声速	$s / (\text{m/s})$	6.59×10^3
声子形变势	E_1 / eV	9.2
极性耦合常数	$h_{\text{pz}} / (\text{C/m}^2)$	0.5
电子有效质量	m^* / kg	$0.22 m_0$
光学声子能量	$\hbar \omega_{\text{LO}} / \text{meV}$	91.2
约化离子质量	M / kg	1.936×10^{-26}
约化离子体积	v_a / m^3	2.283×10^{-29}

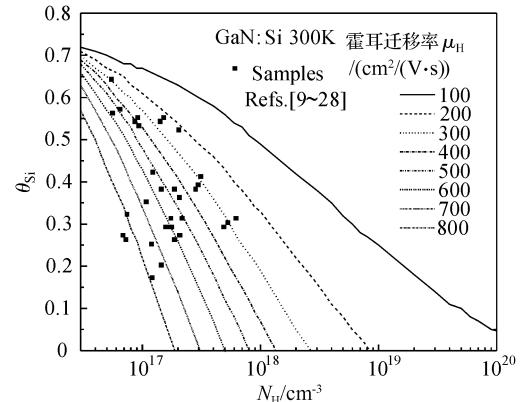


图 3 GaN:Si 补偿度随霍耳浓度和霍耳迁移率变化的关系曲线

Fig. 3 Compensation ratios of GaN:Si versus electron concentration for different Hall mobilities. The lines and the dots are the simulated values and the measured variable temperature Hall data, respectively.

得到掺 Si 的补偿度公式为:

$$\theta_{\text{Si}} = \frac{\theta_1 + \theta_2}{1 + \left(\frac{N_H}{N_{\text{re}}} \right)^\alpha} - \theta_2, \quad (10)$$

$$3.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} < N_H < 10^{18} \text{ cm}^{-3} \quad (10)$$

模型参数 $\theta_1 = 0.73 + \mu_H / 1820, \theta_2 = -0.33 + \mu_H / 197 - (\mu_H / 354)^2 + (\mu_H / 536)^3, N_{\text{re}} = 4.2 \times 10^{20} / \mu_H, \alpha = 0.5$.

3 分析与讨论

根据实验和理论计算结果, 目前一般认为^[7,29]非故意掺杂 GaN 中的浅施主为氮位氧(O_N)和镓位硅(Si_{Ga}), 受主则主要是镓空位(V_{Ga}), 与掺 Si 的 GaN 情况完全相同. 尽管杂质来源相同, 但有意的 Si, O 等掺杂, 势必增加施主的相对浓度, 从而降低补偿度. 我们从大量样品发现, Götz 等报道的一个非故意掺杂样品和一个掺 Si 样品变温霍耳测量结果竟然完全一样, 如图 4 所示. 它们应有完全相同的杂质能级和浓度, 也就是说, 它们杂质情况完全相同. 因此, 有些非故意掺杂样品, 实际已掺杂. 再如, di Forte-Poisson 等人^[30]报道, 以高纯 NH_3 气为氮源是低压金属有机化学气相沉积的非故意掺杂样品氧污染的主要原因. 从表 1 中可以看出, 文献[16]中的 $15\mu\text{m}$ 厚的非故意掺杂样品, 变温霍耳测量补偿度拟合值 $\theta_{\text{拟}}$ 基本接近掺 Si 模型值 θ_{Si} , 明显小于 θ_{Chin} , 说明实际已掺杂. 而同样生长条件下的 $74\mu\text{m}$ 厚样品, 与 θ_{Chin} 吻合较好. 可以这样来解释: 电学和电磁的测量通常是表征其宏观空间平均值, 样品 $15\mu\text{m}$ 厚时, 受其衬底 ZnO 预处理的影响, 高温生

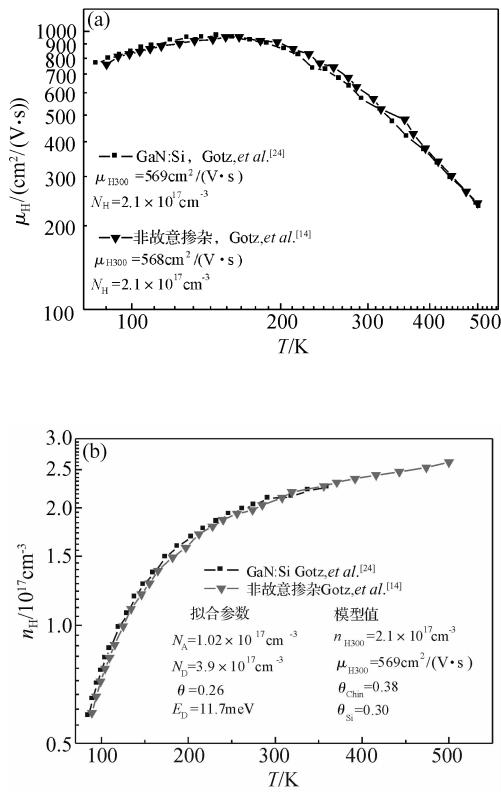


图4 非故意掺杂和掺Si两样品的变温霍耳效应测量曲线
Fig. 4 Variable temperature Hall results of two samples One unintentionally and the other Si-doped.

长条件下氧原子的扩散相对较严重,样品 $74\mu\text{m}$ 厚时,氧扩散的作用对整个外延层来说相对较低,因此更适用于非故意掺杂 θ_{Chin} 模型。

因此,严格区分非故意掺杂样品中有无Si,O等杂质污染,对于准确确定样品的补偿度就显得比较重要。有O,Si污染的非故意掺杂样品,相当于Si,O掺杂,只适用于掺Si的 θ_{Si} 模型。我们认为,Chin理论未考虑Si,O等高效掺杂剂的作用,是 θ_{Chin} 高于 θ_{Si} 的原因。表1中文献[13,16]报道的两个非故意掺杂样品,电子霍耳浓度随温度变化完全相同,它们有几乎相同的室温霍耳迁移率,如图5所示。这两个GaN样品的室温霍耳浓度和霍耳迁移率几乎一样,如采用同一模型,则有相同的补偿度值,然而最大迁移率分别为1121和1433 $\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$,表明补偿度有较大的差异。

目前,质量较好的GaN材料,霍耳浓度常小于 $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$,霍耳迁移率常大于 $300 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$,因此,掺Si模型 θ_{Si} 有较强的实际性。对于电子霍耳浓度接近或超过 10^{18} cm^{-3} 的样品,其补偿度的确定,目前一般有两种处理办法。其一,扣除衬底上外延层中结晶质量较差的厚约 $0.2\mu\text{m}$ 的界面层法,界面层的高电子浓度和低电子迁移率几乎不受温度影响,在各种温度下都对外延层产生重要影响。扣除界

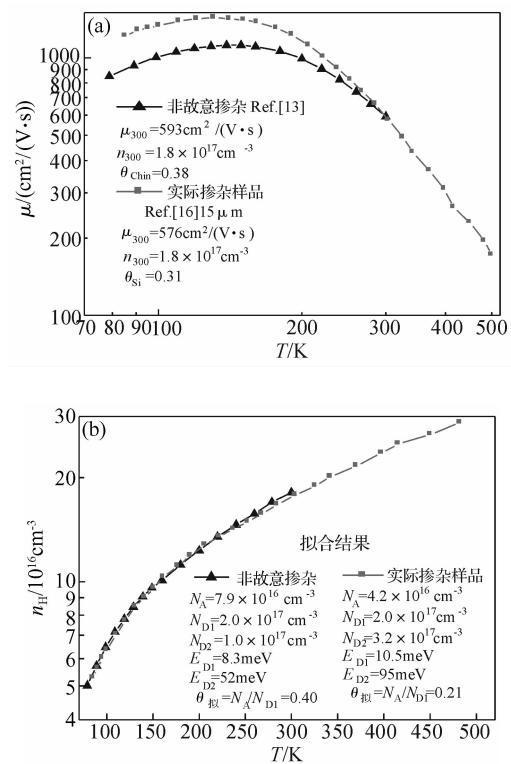


图5 非故意掺杂和掺Si两样品的变温霍耳效应测量曲线
Fig. 5 Variable temperature Hall results of two samples One unintentionally and the other Si-doped.

面层后的结晶质量较好的外延部分,霍耳浓度和霍耳迁移率分别为

$$\mu_b = \frac{\mu_{\text{exp}}^2 n_{\text{exp}} - \mu_i^2 n_i}{\mu_{\text{exp}} n_{\text{exp}} - \mu_i n_i}, \quad n_b = \frac{(\mu_{\text{exp}} n_{\text{exp}} - \mu_i n_i)^2}{\mu_{\text{exp}}^2 n_{\text{exp}} - \mu_i^2 n_i} \quad (11)$$

式中 $\mu_{\text{exp}}, n_{\text{exp}}$ 是变温霍耳测量结果,界面层的 μ_i , n_i 由极低温外延质量较好部分电子“冻结”时测得,最后由 μ_b, n_b 拟合得到质量较好部分外延层的补偿度,如文献[6,8,15,29]。其二,根据具有极广泛影响的Chin等人的 $\mu_H(\theta, N_H)$ 图像比对得到整个外延层的平均补偿度,如文献[1~3]。重掺Si情况下,则可比对Halidou等人^[31]的 $\mu_H(\theta, N_H)$ 图像得到整个外延层的平均补偿度。我们将Halidou等人的 $\mu_H(\theta, N_H)$ 函数转化为 $\theta(\mu_H, N_H)$ 函数,用Caughey-Thomas解析模型函数表示为

$$\theta_{\text{Hali}}(N_H, \mu_H) = \frac{\theta_1 + \theta_2}{1 + \left(\frac{N_H}{N_{\text{re}}}\right)^{\alpha}} - \theta_2 \quad (12)$$

模型参数 $\theta_1 = 0.99 - \mu_H/830$, $\theta_2 = 0.15 e^{\mu_H/327} + 0.44$, $N_{\text{re}} = 1.4 \times 10^{24} / \mu_H^{2.1} (\text{cm}^{-3})$, $\alpha = 0.53$ 。

θ_{Hali} 也明显小于同霍耳浓度和霍耳迁移率情况下的 θ_{Chin} ,我们认为其原因和 θ_{Si} 明显小于同霍耳浓度和霍耳迁移率水平的 θ_{Chin} 相同,因此,Si,O等杂

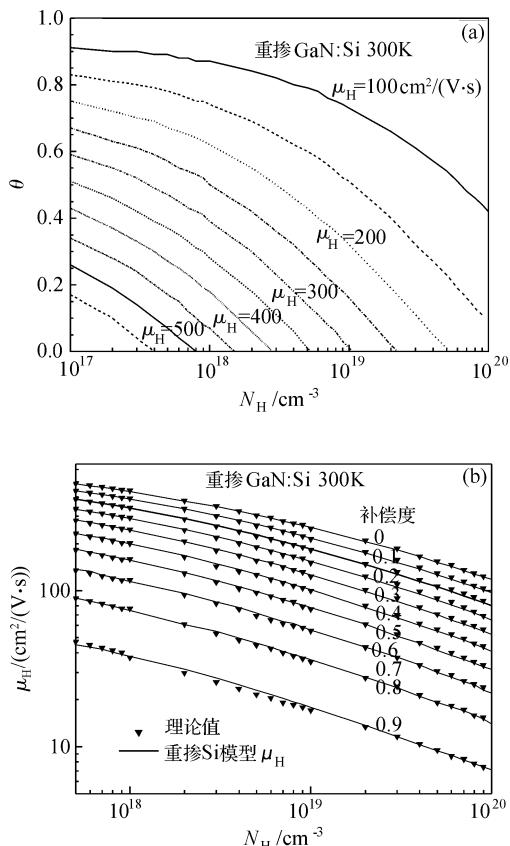


图 6 (a)重掺 Si:GaN 补偿度随霍耳浓度和霍耳迁移率变化的关系图;(b)理论值(符号)与模型值(实线)的比较

Fig. 6 (a) Compensation ratios of heavily Si-doped GaN versus Hall concentration for different Hall mobilities; (b) Comparison between the theoretical results and our model value for heavily Si-doped GaN

质在各种电子浓度下都能起到降低 GaN 材料的补偿度作用. 最后需要指出的是, 我们在对变温霍耳测量结果进行拟合的过程中, 没有考虑位错散射、中性杂质散射和 N 空位等散射, 如将它们考虑进去则补偿度拟合值势必减小, 因此, 个别样品的拟合结果和有关文献拟合不尽一致, 如文献[17]. 这样做, 一方面是由于这些散射通常是很次要的, 补偿度的理论计算一般不予考虑; 另一方面, 我们选择的是质量较高的样品, 未考虑这些散射的拟合和实验结果吻合得也很好, 我们认为可以不予考虑.

4 结论

补偿度是深刻影响 GaN 各项物理性能的重要特征参量, 也是 GaN 显著区别于其他半导体材料(如 Si, GaAs 等)的重要特征. 本文基于 Chin 理论给出的非故意掺杂补偿度 θ_{Chin} 解析模型, 电子霍耳浓度在 $10^{16} \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 范围内, 模型值和理论值及

由普遍采用的变温霍耳测量得到的拟合值有较好的一致性. 本文基于掺 Si 的 GaN 理论计算结果得到的掺 Si 补偿度 θ_{Si} 解析模型, 电子霍耳浓度在 $3 \times 10^{16} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 范围内, 和变温霍耳测量得到的拟合值有较好的一致性, 和非故意掺杂补偿度 θ_{Chin} 解析模型也有很好的相容性. 该模型适用于各种工艺和各种不同生长条件下的较高质量的 GaN 材料. 分析表明, 应用 Chin 理论得到的补偿度对大部分非故意掺杂 GaN 样品是准确的, 对掺 Si 的 GaN 普遍偏大. 补偿度 $\theta_{\text{Chin}}, \theta_{\text{Si}}$ 解析模型具有简便、准确等优点, 对于分析 GaN 材料的各项性能具有重要意义.

参考文献

- [1] Yao Dongmin, Wang Li, Xiong Chuanbing, et al. Relationship between compensation and ion channeling minimum yield in GaN. Chinese Journal of Luminescence, 2000, 21(2): 109(in Chinese) [姚冬敏, 王立, 熊传兵, 等. GaN 的补偿度与最小产额比 X_{\min} 的关系的研究. 发光学报, 2000, 21(2): 109]
- [2] Xin Yong, Xiong Chuanbing, Peng Xuexin, et al. Relationship between structural characteristics and compensation ratio in unintentionally doped GaN grown by MOCVD. Chinese Journal of Luminescence, 2000, 21(1): 33(in Chinese) [辛勇, 熊传兵, 彭学新, 等. MOCVD 生长的未掺杂 GaN 的结晶特性与补偿度关系的研究. 发光学报, 2000, 21(1): 33]
- [3] Li Shutu, Jiang Fengyi, Fan Guanghan, et al. Study of the blue luminescence in unintentional doped GaN films grown by MOCVD. Journal of Luminescence, 2004, 106: 219
- [4] Dmitriev A P, Levinstein M E, Rumyantsev S L, et al. Tunneling mechanism of the $1/f$ noise in GaN/AlGaN heterojunction field-effect transistors. J Appl Phys, 2005, 97: 123706
- [5] Chin V W L, Tansley T L, Osotchan T. Electron mobilities in gallium, indium, and aluminum nitrides. J Appl Phys, 1994, 75(11): 7368
- [6] Dhar S, Ghosh S. Low field electron mobility in GaN. J Appl Phys, 1999, 86(5): 2668
- [7] Meister D, Bohm M, Topf M, et al. A comparison of the Hall-effect and secondary ion mass spectroscopy on the shallow oxygen donor in unintentionally doped GaN films. J Appl Phys, 2000, 88(4): 1816
- [8] Huang Y, Chen X D, Fung S, et al. The depth-profiled carrier concentration and scattering mechanism in undoped GaN film grown on sapphire. J Appl Phys, 2004, 96(2): 1125
- [9] Zhang Jincheng, Ma Xiaohua, Hao Yue, et al. An analytic low field electron mobility model of wurtzite GaN. Chinese Journal of Semiconductors, 2003, 24(10): 1045 (in Chinese) [张进城, 马晓华, 郝跃, 等. 纤锌矿 GaN 低场电子迁移率解析模型. 半导体学报, 2003, 24(10): 1045]
- [10] Lin J C, Su Y K, Chang S J, et al. Activation energy of n-GaN epitaxial layers grown on vicinal-cut sapphire substrates. J Cryst Growth, 2005, 285: 481
- [11] Sakai M, Ishikawa H, Egawa T, et al. Growth of high-quality GaN films on epitaxial AlN/sapphire templates by MOVPE. J Cryst Growth, 2002, 244: 8
- [12] Kim K S, Cheong M G, Cho H K, et al. Direct measurement

- of electron transport in GaN/sapphire interface layer grown by metalorganic chemical vapor phase deposition. *Appl Phys Lett*, 2002, 80(5):800
- [13] Look D C, Sizelove J R, Keller S, et al. Accurate mobility and carrier concentration analysis for GaN. *Solid State Commun.*, 1997, 102(4):297
- [14] Gotz W, Johnson N M, Chen C, et al. Activation energies of Si donors in GaN. *Appl Phys Lett*, 1996, 68(22):3144
- [15] Look D C. Electrical transport properties of III-nitrides. *Mater Sci Eng B*, 1997, 50:50
- [16] Gotz W, Romano L T, Walker J, et al. Hall-effect analysis of GaN films grown by hydride vapor phase epitaxy. *Appl Phys Lett*, 1998, 72(10):1514
- [17] Mavroidis C, Harris J J, Kappers M J, et al. Detailed interpretation of electron transport in n-GaN. *J Appl Phys*, 2003, 93(11):9100
- [18] Tang H, Kim W, Botchkarev A, et al. Analysis of carrier mobility and concentration in Si-doped GaN grown by reactive molecular beam epitaxy. *Solid-State Electron*, 1998, 42: 844
- [19] Koleske D D, Twigg M E, Wickenden A E, et al. Properties of Si-doped GaN films grown using multiple AlN interlayers. *Appl Phys Lett*, 1999, 75(20):3142
- [20] Ng H M, Doppalapudi D, Moustakas T D. The role of dislocation in n-type GaN films. *Appl Phys Lett*, 1998, 73(6):822
- [21] Webb J B, Tang H, Bardwell J A, et al. Growth of high mobility GaN and AlGaN/GaN high electron mobility transistor structures on 4H-SiC by ammonia molecular-beam epitaxy. *Appl Phys Lett*, 2001, 78(24):3846
- [22] Tang H, Webb J B. Growth of high mobility GaN by ammonia-molecular beam epitaxy. *Appl Phys Lett*, 1999, 74(16): 2374
- [23] Webb J B, Tang H, Bardwell J A, et al. Defect reduction in GaN epilayers and HFET structures grown on (0001) sapphire by ammonia MBE. *J Cryst Growth*, 2001, 230:587
- [24] Gotz W, Kern R S, Chen C H, et al. Hall-effect characterization of III-V nitride semiconductors for high efficiency light emitting diodes. *Mater Sci Eng B*, 1999, 59:213
- [25] Detchprohm T, Hiramatsu K, Amano H, et al. Hydride vapor phase epitaxial growth of a high quality GaM film using a ZnO buffer layer. *Appl Phys Lett*, 1992, 61(22):2689
- [26] Yun F, Reshchikov M A, Jones K, et al. Electrical, structural, and optical characterization of free-standing GaN template grown by hydride vapor phase epitaxy. *Solid-State Electron*, 2000, 44:2225
- [27] Gotz W, Romano L T, Krusor B S, et al. Electronic and structural properties of GaN grown by hydride vapor phase epitaxy. *Appl Phys Lett*, 1996, 69(2):243
- [28] Joshkin V A, Parker C A, Bedair S M, et al. Effect of growth temperature on point defect density of unintentionally doped GaN grown by metalorganic chemical vapor phase deposition and hydride vapor phase epitaxy. *Appl Phys Lett*, 1999, 86(1):285
- [29] Xu Xiaoliang, Liu Hongtu, Shi Chaoshu. Residual donors and compensation in metalorganic chemical vapor phase deposition as-grown n-GaN. *J Appl Phys*, 2001, 90(12):6130
- [30] di Forte-Poisson M A, Huet F, Romann A, et al. Relationship between physical properties and gas purification in GaN grown by metalorganic vapor phase epitaxy. *J Cryst Growth*, 1998, 195:314
- [31] Halidou I, Benzarti Z, Chine Z, et al. Heavily silicon-doped GaN by MOVPE. *Microelectronics Journal*, 2001, 32:140

Analytic Models for Compensation Ratio of Wurtzite n-GaN at Room Temperature

He Jusheng, Zhang Meng[†], Xu Biao, and Tang Jiancheng

(School of Material Science and Engineering, Nanchang University, Nanchang 330031, China)

Abstract: Based on Chin's theory, which describes the concentration and compensation ratio dependencies of the low-field mobility in gallium nitride in wide concentration ranges ($10^{16} \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$) at room temperature, an analytic model for the compensation ratio of unintentionally doped GaN at room temperature has been obtained. Another model for Si-doped GaN has also been obtained by use of theoretical calculations and computational methods. A comparison of these models with the fitting value from experimental results shows that the new analytic models have a good agreement in the electron concentration range of $3 \times 10^{16} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Key words: compensation ratio; gallium nitride; electron drift mobility; Hall mobility; compensating acceptor

PACC: 7210; 7220F; 7280E

Article ID: 0253-4177(2007)07-1041-07

[†] Corresponding author. Email: tiegang_zm@sina.com

Received 28 December 2006, revised manuscript received 31 January 2007

©2007 Chinese Institute of Electronics