

УДК 621

PACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz, 07.57.Kp,  
85.60.Dw

## Метод расчета концентрации носителей заряда в полупроводниковых соединениях группы нитридов с учетом модели зонных состояний

В. А. Улькаров, А. И. Дирочка, Н. И. Яковлева

*Из-за особенностей легирования полупроводниковых структур группы нитридов и высокой степени компенсации, существует проблема определения концентрации легирующей примеси традиционными методами. В работе предложен и исследован метод расчета концентрации носителей заряда с учетом модели зонных состояний в полупроводниковых структурах группы нитридов  $n$ -типа проводимости. Метод основан на уравнении электронейтральности носителей заряда с учетом статистического закона распределения носителей в зонах и на дополнительных уровнях в запрещенной зоне.*

*Ключевые слова:* AlGaN, GaN, ультрафиолетовый, УФ, гетероэпитаксиальные структуры, концентрация.

DOI: 10.51368/1996-0948-2021-2-60-66

### Введение

Метод расчета концентрации носителей заряда в полупроводниковых соединениях группы нитридов с учетом модели зонных состояний позволяет определять концентрацию носителей заряда и рассчитывать энергию активации легирующих примесей для образцов группы нитридов с любым количеством разрешенных донорных и акцепторных уровней энергии в запрещенной зоне, учитывая степень компенсации концентрации носителей заряда.

### Модель для полупроводников $n$ -типа

В кристаллически однородном полупроводнике на образование пары носителей заря-

да «электрон-дырка» требуется затратить значительное количество энергии, поэтому его проводимость весьма мала. Увеличить проводимость можно, легируя полупроводник донорными или акцепторными примесями. В примесных полупроводниках при комнатной температуре практически все атомы примеси находятся в возбужденном состоянии, причем количество созданных основных носителей заряда намного превышает количество неосновных, возникающих путем тепловой генерации электронно-дырочных пар. В результате этого примесная проводимость гораздо выше собственной проводимости полупроводника, поэтому концентрация носителей заряда в меньшей степени зависит от внешних факторов и определяется главным образом наличием легирующей примеси.

Рассмотрим случай, когда концентрация электронов существенно превышает концентрацию дырок  $n \gg p$ , что позволяет нам пренебречь плотностью  $p$ -носителей. Это характерно для структур на основе GaN  $n$ -типа, поскольку собственная концентрация в данном соединении при комнатной температуре мала ( $\sim 10^{-7} \text{ см}^{-3}$ ).

Запишем уравнение электронейтральности

Улькаров Вадим Айратович<sup>1,2</sup>, аспирант.  
Дирочка Александр Иванович<sup>1</sup>, гл. спец., д.ф.-м.н.  
Яковлева Наталья Ивановна<sup>1</sup>, гл.н.с., к.т.н.

<sup>1</sup> АО «НПО «Орион».

Россия, 111538, Москва, ул. Косинская, 9.

E-mail: orion@orion-ir.ru

<sup>2</sup> Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет).

Россия, 141701, Московская обл., г. Долгопрудный,  
Институтский пер., 9.

Статья поступила в редакцию 24 марта 2021 г.

© Улькаров В. А., Дирочка А. И., Яковлева Н. И., 2021

$$p + \sum_i N_{D_i}^+ = n + \sum_j N_{A_j}^-, \quad (1)$$

где  $\sum_i N_{D_i}^+$ ,  $\sum_j N_{A_j}^-$  – общее число ионизированных доноров и акцепторов,  $p$ ,  $n$  – концентрации дырок и электронов соответственно.

Пусть уровень Ферми находится выше донорных уровней на несколько  $kT$ , за исключением одного основного донорного уровня. Тогда функция распределения Ферми, связанная со всеми акцепторами и донорами, за исключением доминирующего уровня, не зависит от температуры. В этом случае все акцепторы ионизованы, а концентрация акцепторов связанная с акцепторным уровнем  $A_j$ , удовлетворяет уравнению  $N_{A_j}^- = N_{A_j}$ , если уровень Ферми выше уровня акцепторов, и равна нулю, если уровень Ферми ниже уровня акцепторов (считаем, что уровень Ферми определяется по отношению к дну зоны проводимости). Те же самые утверждения могут быть выражены следующим образом:

$$\begin{aligned} N_{A_j}^- &= N_{A_j} \text{ если } E_{A_j} < E_F \text{ на несколько } kT, \\ N_{A_j}^- &= 0 \text{ если } E_{A_j} > E_F \text{ на несколько } kT. \end{aligned}$$

Точно так же можно написать для донорного уровня  $D_i$

$$\begin{aligned} N_{D_i}^+ &= N_{D_i} \text{ если } E_{D_i} > E_F \text{ на несколько } kT, \\ N_{D_i}^+ &= 0 \text{ если } E_{D_i} < E_F \text{ на несколько } kT. \end{aligned}$$

$$N_A^{net} = \sum_j N_{A_j} \Big|_{E_{A_j} < E_F} - \sum_i N_{D_i} \Big|_{E_{D_i} > E_F},$$

где  $N_A^{net}$  – концентрация носителей на акцепторных уровнях [1].

Примем, что энергия донорного уровня  $E_1 = E_g - E_D$ , концентрация доноров в полупроводнике, в соответствии с уравнением статистики, равна

$$N_D^+ = n_{D0} = \frac{N_D}{1 + (g_{D10} / g_{D00}) e^{-\frac{E_{D10} - E_F}{kT}} (1 + F)}. \quad (2)$$

Уравнение баланса при условии, что концентрация дырок мала, с учетом статистики Ферми-Дирака, приобретает вид

$$\begin{aligned} n + N_A^{net} &= N_D^+ = \\ &= n_{D0} = \frac{N_D}{1 + (g_{D10} / g_{D00}) e^{-(E_{D10} - E_F)/kT}}. \end{aligned} \quad (3)$$

Запишем концентрацию носителей заряда для полупроводника  $n$ -типа в виде  $n = N_C \left( \frac{2}{\sqrt{\pi}} \right) F_{1/2} \left( -\frac{E_C - E_F}{kT} \right)$ , и от интеграла Ферми в случае отсутствия вырождения перейдем к уравнению Больцмана  $n = N_C e^{-(E_C - E_F)/kT}$ , что позволяет упростить уравнение (3).

$$n + N_A^{net} = \frac{N_D}{1 + (g_{D10} / g_{D00}) (n / N_C) e^{E_D/kT}}.$$

Решая квадратное уравнение, находим концентрацию электронов в виде выражения:

$$n = \frac{1}{2} (n_1 + N_A^{net}) \left\{ \left[ 1 + \frac{4n_1 (N_D - N_A^{net})}{(n_1 + N_A^{net})^2} \right]^{\frac{1}{2}} - 1 \right\}, \quad (4)$$

где  $n_1$  – концентрация электронов на примесном уровне  $E_1$ ,

$$n_1 = \frac{g_{D00}}{g_{D10}} N_C e^{-E_D/kT}, \quad (5)$$

$$\text{или } n_1 = \frac{g_{D00}}{g_{D10}} N_C' T^{3/2} e^{\alpha_D/k} \left[ e^{-E_{D0}/kT} \right],$$

где  $N_C = 2(2\pi m \times k)^{3/2} / h^3 T^{3/2}$  – плотность состояний;  $E_D = E_{D0} - \alpha_D T$  – энергия примесного уровня, которая линейно зависит от температуры с коэффициентом  $\alpha_D$ .

Найдем предельные зависимости из уравнения (4). При низких температурах и для  $n_1 \ll N_A^{net}$  и  $n_1 \ll (N_A^{net})^2 / (N_D - N_A^{net})$  уравнение упрощается до выражения

$$\begin{aligned} n &\approx \left( \frac{N_D}{N_A^{net}} - 1 \right) n_1 = \\ &= \left( \frac{N_D}{N_A^{net}} - 1 \right) \frac{g_{D00}}{g_{D10}} N_C' T^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\alpha_D}{k}} \left[ e^{-\frac{E_{D0}}{kT}} \right]. \end{aligned}$$

При низких температурах, если второе слагаемое в квадратных скобках в уравне-

нии (4) намного больше единицы, значение концентрации  $n$  становится  $n_1 \gg N_A^{net}$  и  $n_1 \ll (N_A^{net})^2 / (N_D - N_A^{net})$ . Тогда получим

$$n \approx \frac{1}{2} n_1 \frac{2(N_D - N_A^{net})^{\frac{1}{2}}}{n_1^{\frac{1}{2}}} = 2(N_D - N_A^{net})^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{g_{D00}}{g_{D10}} N_C' e^{\frac{\alpha_D}{k}} \right]^{\frac{1}{2}} T^{\frac{3}{4}} \left[ e^{-\frac{E_{D0}}{2kT}} \right].$$

Учитываем, что концентрация доноров должна быть намного больше концентрации акцепторов.

При высоких температурах с  $n_1 \gg N_A^{net}$  и  $n_1 \gg N_D - N_A^{net}$  находим, что концентрация электронов  $n$  равна

$$n \approx \frac{1}{2} (n_1 + N_A^{net}) \frac{2n_1 (N_D - N_A^{net})}{(n_1 + N_A^{net})^2} = N_D - N_A^{net}$$

и уравнение приводится к первоначальному виду  $n \approx N_D - N_A^{net}$ .

Рассчитаем температурную зависимость концентрации электронов в материале GaN для заданной концентрации доноров и различной степени компенсации акцепторов. В результате, проведя небольшие преобразования уравнения (4) и принимая, что степень вырождения равна 2, получаем выражение:

$$n = \sqrt{\frac{1}{4} (n_1 + \sum N_{A_j})^2 + n_1 (N_D - \sum N_{A_j})} - \frac{1}{2} (n_1 + \sum N_{A_j}), \quad (6)$$

где  $n_1 = (N_C / g) e^{-E_D/kT}$ .

Для некоторых образцов модель с одним донорным уровнем не соответствует температурной зависимости концентрации носителей заряда. В этом случае учитывается концентрация поверхностных носителей или наличие глубокого донорного уровня, что позволяет лучше аппроксимировать данные эксперимента.

Таким образом, получена математическая модель определения концентрации, основанная на уравнении нейтральности заряда и

уравнений статистики распределения носителей заряда в зоне проводимости, валентной зоне и на дополнительных уровнях. Несмотря на видимую простоту, данная модель неплохо аппроксимирует температурные зависимости концентрации в полупроводниках  $n$ -типа проводимости группы нитридов.

### Модельные и экспериментальные исследования для полупроводников $n$ -типа и обсуждение результатов

Проведён расчёт концентраций носителей заряда в материалах группы нитридов  $n$ -типа с учетом математической модели концентрации, основанной на уравнении нейтральности зарядов и уравнений статистики. Структура образца с активным слоем GaN  $n$ -типа проводимости показана на рис. 1.

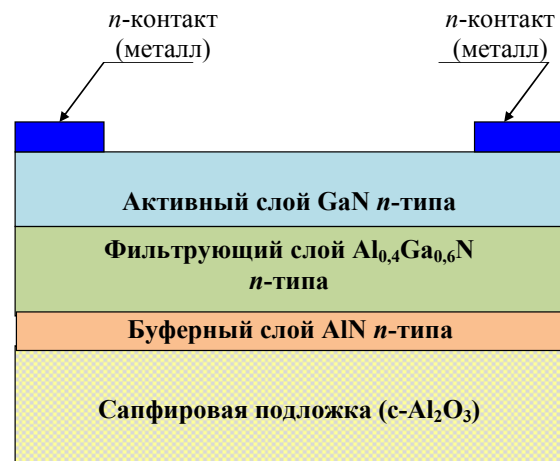


Рис. 1. Структура образца на основе GaN, состоящая из подложки, буферных слоев, фильтрующего слоя и поглощающего слоя  $n$ -типа проводимости.

Как видно из рис. 1, архитектура фоточувствительного элемента состоит из:

- прозрачной в УФ-диапазоне спектра сапфировой подложки;

- буферного слоя  $\text{AlN}$  для уменьшения плотности дислокаций в последующих слоях структуры;

- высоколегированного, фильтрующего оптическое излучение и уменьшающего плотность дефектов слоя  $\text{AlGaIn}$   $n^+$ -типа проводимости, состав которого зависит от выбранного типа фотоприемного устройства: для «солнечно-слепого» диапазона —  $\text{Al}_{0,64}\text{Ga}_{0,36}\text{N}$ , для «видимо-слепого» диапазона —  $\text{Al}_{0,23}\text{Ga}_{0,77}\text{N}$ .

Данный слой имеет ширину запрещенной зоны большую по сравнению с поглощающим слоем для того, чтобы фотоны могли достигать рабочего активного слоя GaN, не поглощаясь в нем. Состав фильтрующего слоя определяет коротковолновую границу спектральной чувствительности;

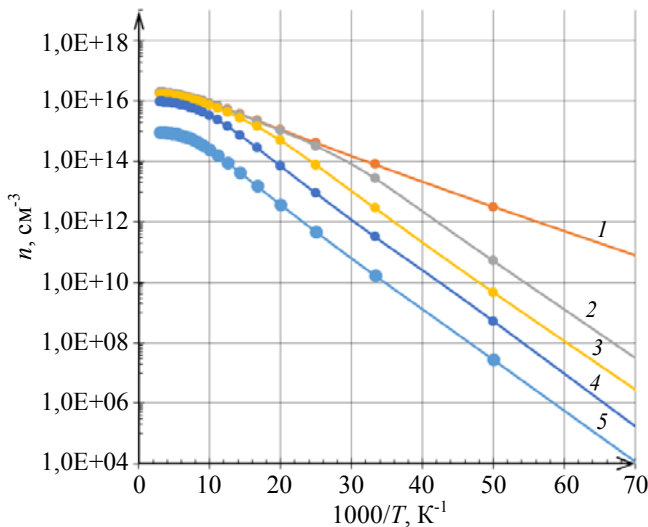
– поглощающего активного слоя GaN с шириной запрещенной зоны, обеспечивающей эффективное поглощение излучения в заданном спектральном диапазоне, состав которого определяет длинноволновую границу спектральной чувствительности.

По условиям решаемой задачи, концентрация доноров в поглощающем слое GaN составляла  $2 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , дополнительно в слое GaN имелась концентрация акцепторов, кото-

рая изменялась в диапазоне от 0 до  $1,9 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .

Согласно предложенной математической модели, для структуры рис. 1 рассчитана концентрация основных носителей заряда в соответствии с формулой (6).

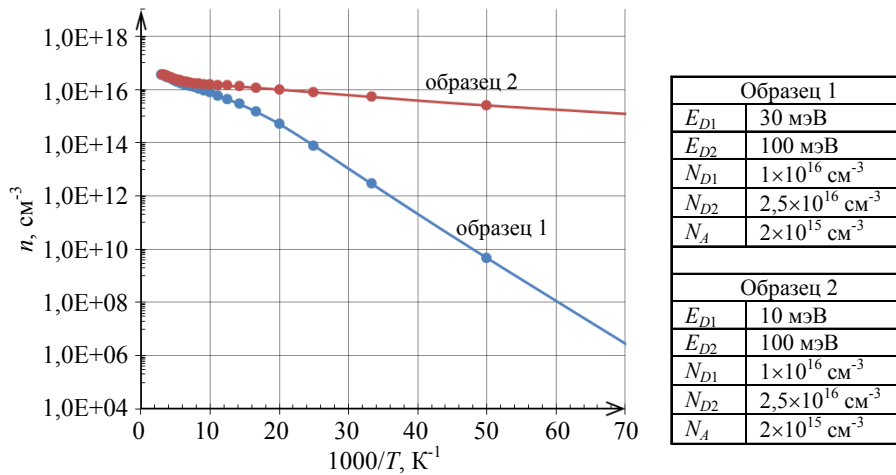
Результаты прямого моделирования концентрации для образца (рис. 1), проведенные по уравнению (6), показаны на рис. 2, где представлена суммарная концентрация носителей заряда в зависимости от температуры в заданной структуре, при условиях: концентрация доноров в активном слое GaN *n*-типа проводимости –  $2 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$  с энергий активации донорного уровня 30 мэВ, эффективная масса электронов – в соответствии с  $0,22m_0$ ; концентрация легирующей акцепторной примеси  $N_A$  – в диапазоне от 0 до  $1,9 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .



*Рис. 2. Температурная зависимость суммарной концентрации носителей заряда в активном слое GaN при концентрации доноров  $2 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$  и изменяющейся концентрации акцепторов от 0 до  $1,9 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ . Кр. 1 – при  $N_A = 0$ ; кр. 2 – при  $N_A = 0,02 \times 10^{16}$ ; кр. 3 – при  $N_A = 0,2 \times 10^{16}$ ; кр. 4 – при  $N_A = 1 \times 10^{16}$ ; кр. 5 – при  $N_A = 1,9 \times 10^{16}$ .*

На рис. 2 построены температурные зависимости концентрации носителей заряда в полупроводниковой структуре рис. 1 с изменяющейся концентрацией акцепторов от 0 до  $1,9 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$  с учетом различных степеней компенсации. Как видно из рис. 2, если концентрация акцепторов равна нулю или пренебрежимо мала, то суммарная концентрация (верхний график) имеет наименьший наклон в зависимости от температуры. При  $N_A \neq 0$ , наклон характеристики увеличивается, а суммарная концентрация носителей заряда уменьшается по мере возрастания  $N_A$ , что можно объяснить компенсацией донорной примеси.

Проведены расчеты суммарной концентрации носителей заряда в двух образцах 1 и 2: в первом образце с двумя донорными уровнями 30 и 100 мэВ и значениями концентраций  $N_{D1} = 1 \times 10^{16}$  и  $N_{D2} = 2,5 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ; и во втором образце с двумя донорными уровнями 10 и 100 мэВ с концентрациями  $1 \times 10^{16}$  и  $2,5 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$  соответственно. Эффективная масса электронов считалась равной  $0,2m_0$  с фактором вырождения доноров 2, концентрация акцепторов в обоих образцах составила  $2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . На рис. 3 представлены результаты прямого моделирования концентрации носителей заряда от обратной температуры для двух вышеуказанных образцов.



**Рис. 3.** Обратная температурная зависимость концентрации электронов для двух образцов на основе GaN: в первом с двумя донорными уровнями 30 и 100 мэВ и концентрациями  $1 \times 10^{16}$  и  $2,5 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , во втором с двумя донорными уровнями 10 и 100 мэВ и концентрациями  $1 \times 10^{16}$  и  $2,5 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .

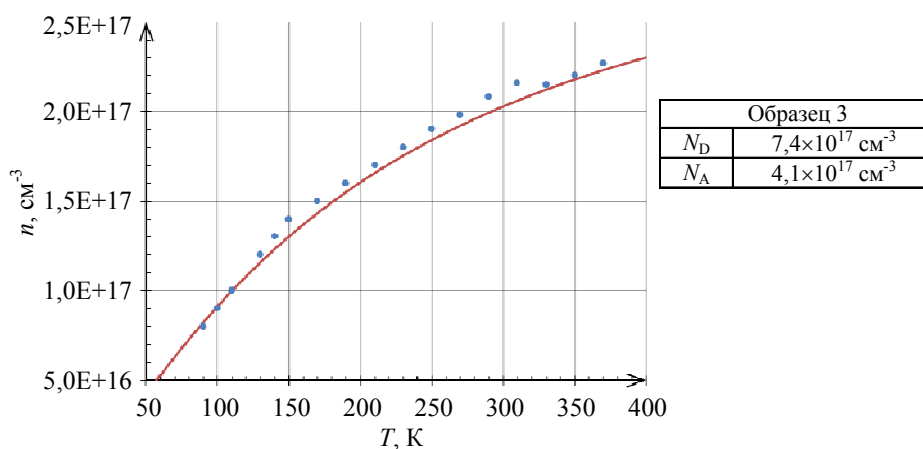
Температурные зависимости концентрации существенно отличаются по наклону, поскольку энергия активации мелкой донорной примеси целиком определяет угол наклона характеристик.

Для образца 3 со структурой, представленной на рис. 1, и с начальными параметрами: концентрация акцепторов  $4,1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , концентрация доноров  $7,4 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , была экспериментально снята температурная зависимость суммарной концентрации носителей заряда, которая представлена на рис. 4. Концентрации носителей заряда в образце, содержащем один донорный уровень с концентрацией  $7,4 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$  и один акцепторный уровень с концентрацией  $4,1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , близки по значению. Применяя модель зонных состо-

яний, была определена энергия активации донорного уровня, которая составила – 1 мэВ.

Таким образом, применение математической модели для расчета концентрации можно использовать для определения энергии активации.

Для образца 4 со структурой, представленной на рис. 1, и с начальными параметрами: концентрация акцепторов в образце  $1,1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , концентрация первого донорного уровня –  $6,5 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , энергия его активации – 125 мэВ, концентрация второго донорного уровня –  $1,6 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , энергия активации – 7 мэВ, была экспериментально измерена температурная зависимость концентрации носителей заряда, которая представлена на рис. 5.



**Рис. 4.** Экспериментальная зависимость концентрации носителей заряда от температуры (точки) и теоретическая зависимость (линия). Концентрация акцепторов  $4,1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , концентрация доноров –  $7,4 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$  с энергией активации – 1 мэВ.

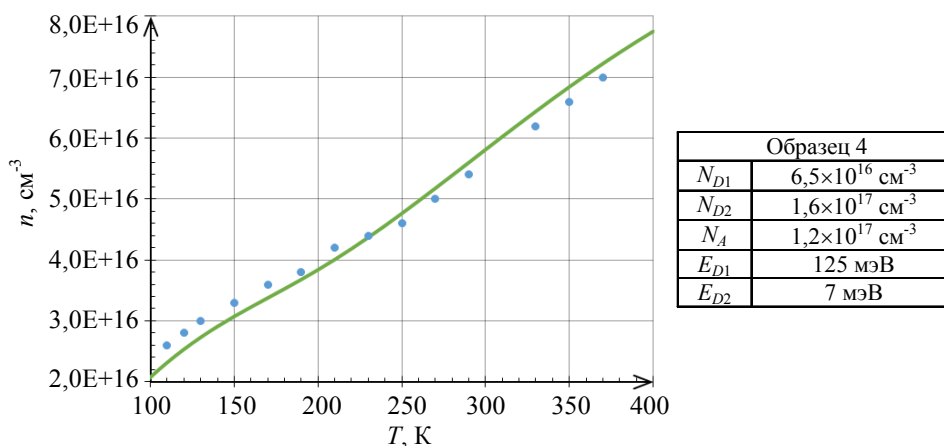


Рис. 5. Экспериментальные (синие маркеры) и расчётные (зелёная линия) данные температурной зависимости концентрации носителей заряда в образце с двумя донорными уровнями.

Применяя математическую модель расчёта концентрации, была получена аппроксимация экспериментальных точек (сплошная линия), что позволило рассчитать степень вырождения доноров в данном образце, которая составила 2. Расчет проведен с учетом двух донорных уровней [2, 3].

Таким образом, для рассмотренных в данной работе различных образцов донорного типа рассчитаны концентрации донорных и акцепторных примесей, а также определены энергии активации уровней в запрещенной зоне.

Отметим, что температурную зависимость концентрации носителей заряда можно определить экспериментально по измерениям коэффициента Холла [4]. Суммарная концентрация носителей складывается из концентрации доноров, концентрации акцепторов и плотности собственных дефектов, которые имеют донорный или акцепторный тип, что подтверждается экспериментальными исследованиями из альтернативных источников.

### Заключение

В работе представлен метод расчёта концентрации носителей заряда в гетероструктурах GaN *n*-типа проводимости с учетом уравнения нейтральности носителей заряда и статистического закона распределения носителей заряда на различных разрешенных уровнях, причем как в зонах проводимости и валентной, так и на дополнительных уровнях, расположенных в запрещенной зоне.

В соответствии с предложенным методом, определены концентрации носителей заряда. Метод позволяет определять концентрацию носителей заряда и рассчитывать энергию активации легирующих примесей для образцов группы нитридов с любым количеством разрешенных уровней энергии в запрещенной зоне, учитывая наличие донорных и акцепторных состояний и степень их компенсации.

Проведен анализ экспериментально полученных данных и сравнение их с теоретическими расчётами. Для метода зонных состояний наблюдается хорошее соответствие экспериментальных и теоретических зависимостей. Разработанный метод позволяет определять электрофизические параметры материалов группы нитридов (концентрация, подвижность носителей заряда), что может способствовать оптимизации процесса производства фотоприемников и улучшения их качества.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Look D. C. Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices. – John Wiley & Sons, Inc. 1989.
2. Huang D., Yun F., Visconti P., Reshchikov M. A., Jones K. M., Wang D., Morko H., Rode D. L., Farina L. A., Kurdak 3., Tsen K. T., Park S. S., Lee K. Y. // Solid-State Electronics. 2001. Vol. 45. No. 5. P. 711.
3. Gotz W., Johnson N. M., Chen C., Liu H., Kuo C., Imler W. // Applied Physics Letters. 1996. Vol. 68. P. 3144.
4. Улькаров В. А., Яковлева Н. И., Никонов А. В. // Успехи прикладной физики. 2020. Т. 8. № 3. С. 199.

## Investigation of methods for calculating the concentration of charge carriers in semiconductor compounds of the nitride group

V. A. Ulkarov<sup>1,2</sup>, A. I. Dirochka<sup>1</sup>, and N. I. Yakovleva<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Orion R&P Association, JSC  
9 Kosinskaya st., Moscow, 111538, Russia  
E-mail: orion@orion-ir.ru

<sup>2</sup> Moscow Institute of Physics and Technology  
9 Institutskiy al., Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia

Received March 24, 2021

*For doping semiconductor structures based on the nitride group with the high degree of compensation, it is important to determine the concentration of the dopant and the activation energy. In this paper, a calculation method of the charge carrier concentration have been proposed and investigated, taking into account the statistics depend on whether band states or donor or acceptor states in semiconductor structures of nitride group. The method is based on the equation of charge balance, taking into account the statistical law of carrier distribution in the zones and at additional levels in the band gap.*

*Keywords:* AlGa<sub>N</sub>, Ga<sub>N</sub>, ultraviolet, UV, heteroepitaxial structures, concentration.

**DOI:** 10.51368/1996-0948-2021-2-60-66

### REFERENCES

1. D. C. Look, *Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices* (John Wiley & Sons, Inc., 1989).
2. D. Huang, F. Yun, P. Visconti, M. A. Reshchikov, K. M. Jones, D. Wang, H. Morko, D. L. Rode, L. A. Farina,
3. Kurdak, K. T. Tsen, S. S. Park, and K. Y. Lee, *Solid-State Electronics* **45** (5), 711 (2001).
3. W. Gotz, N. M. Johnson, C. Chen, H. Liu, C. Kuo, and W. Imler, *Applied Physics Letters* **68**, 3144 (1996).
4. V. A. Ulkarov, N. I. Yakovleva, and A. V. Nikonov, *Usp. Prikl. Fiz.* **8** (3), 199 (2020).