

# Модель электрической изоляции GaN и ZnO при бомбардировке легкими ионами

© А.И. Титов<sup>¶</sup>, П.А. Карасев, С.О. Кучеев\*

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,  
195251 Санкт-Петербург, Россия

\* Research School of Physical Sciences and Engineering, The Australian National University,  
Canberra, ACT 0200, Australia

(Получена 30 января 2004 г. Принята к печати 20 марта 2004 г.)

Представлена модель формирования электрической изоляции GaN и ZnO под действием облучения быстрыми ионами. В качестве основного процесса, приводящего к снижению концентрации свободных носителей и росту сопротивления, рассматривается образование комплексов, состоящих из атома легирующей примеси и созданного ионным пучком простейшего точечного дефекта. Проведенное сравнение результатов модели и экспериментальных данных по возникновению изоляции, полученных для GaN и ZnO, показывает, что модель способна удовлетворительно описывать происходящие процессы.

## 1. Введение

Большой интерес к широкозонным полупроводниковым материалам стимулирован потенциальными возможностями их использования, например, в оптоэлектронике и электронике больших мощностей [1,2]. Поскольку в промышленном производстве одним из наиболее удобных инструментов является ионная имплантация, большие усилия были направлены на изучение взаимодействия ускоренных ионов с данным видом кристаллов.

Одной из технологических возможностей применения пучков быстрых ионов является создание изолирующих слоев, разделяющих активные приборы на пластине. Так, рядом авторов было экспериментально обнаружено, что образующиеся в процессе ионной бомбардировки нитрида галлия дефекты структуры могут приводить к росту поверхностного сопротивления образцов более чем на 10 порядков [1–6], причем высокое значение сопротивления в случае GaN сохраняется при отжиге до достаточно высоких температур.

Столь сильный рост сопротивления может быть вызван несколькими причинами. Во-первых, появлением в запрещенной зоне глубоких уровней, на которых эффективно связываются свободные носители. Во-вторых, деградацией подвижности, которая, однако, должна иметь меньшее влияние на сопротивление, поскольку диапазон ее изменения существенно уже, чем 10 порядков. Это подтверждается прямыми экспериментами. Так, в работе [5] приведены результаты холловских измерений подвижности и концентрации свободных носителей заряда и поверхностного сопротивления *n*-GaN от дозы облучения ионами H<sup>+</sup> с энергией 0.6 МэВ, показавшие, что снижение проводимости кристалла GaN под действием пучка быстрых ионов на ~ 5 порядков сопровождается снижением подвижности менее чем на порядок.

Построение модели, адекватно описывающей изменение сопротивления под действием облучения, затруд-

нено отсутствием информации о природе дефектов, образующих глубокие уровни в запрещенной зоне. Это могут быть: 1) изолированные точечные дефекты (такие как вакансии, межузельные атомы, антиструктурные дефекты) и их кластеры; 2) комплексы, состоящие из точечных дефектов и примесей, ненамеренно внесенных в кристалл в процессе роста; 3) комплексы, состоящие из точечных радиационных дефектов и легирующих примесей (мелких доноров для кристалла *n*-типа и акцепторов для *p*-типа).

Кинетика роста поверхностного сопротивления с увеличением дозы обычно имеет достаточно сложный нелинейный характер [1–11]. Если говорить о нитриде галлия, то до недавнего времени была предложена только одна модель [6], которая базировалась на предположении о том, что GaN является поликристаллическим. Изменение проводимости трактовалось в рамках приближения переноса электронов в поликристалле, высота межкристаллитного барьера в котором линейно зависит от количества внесенных дефектов (зависимость количества последних от дозы облучения также принимается линейной). Однако существующие экспериментальные данные [7,8] показывают, что превращения монокристаллического GaN в поликристалл не происходит, а рост сопротивления связан со снижением концентрации носителей за счет связывания их на образующихся в процессе облучения глубоких ловушках. Следовательно, данная модель [6] не адекватна реальности.

Недавно была предложена другая модель [9] возникновения дефектов, приводящих к снижению электропроводности в нитриде галлия, которая удовлетворительно описывает кинетику данного процесса. Она основана на предположении, что мелкие легирующие уровни трансформируются в глубокие путем образования комплексов точечный дефект–легирующий атом. Сравнение результатов моделирования в [9] с экспериментом ограничивалось в основном данными, полученными при облучении GaN быстрыми протонами. Далее мы покажем, что такая сравнительно простая модель вполне может

<sup>¶</sup> E-mail: titov@phff.stu.neva.ru

описать экспериментальные данные по изменению поверхностного сопротивления монокристаллических образцов GaN при облучении их широким набором легких быстрых ионов, а также и монокристаллов ZnO.

## 2. Модель

При движении ускоренного легкого иона в двухкомпонентном монокристалле образуется целый спектр простейших точечных дефектов, таких как вакансии в обеих подрешетках, межузельные атомы каждого из компонентов и антиструктурные дефекты. Однако до настоящего момента не ясно, какие именно из этих дефектов или комплексов образуют в запрещенной зоне глубокие уровни. В рассматриваемой модели предполагается, что существенную роль в электрической изоляции играет только один из них. Природа его не известна и из-за отсутствия конкретной информации не обсуждается. Далее, считается, что дефекты этого типа эффективно связываются в комплексы с атомами легирующей примеси с трансформацией мелких уровней в глубокие. При этом каждый из образовавшихся комплексов захватывает один носитель либо из валентной зоны (для полупроводника  $p$ -типа), либо из зоны проводимости (для полупроводника  $n$ -типа), снижая тем самым их концентрацию. Таким образом, радиационно-индуцированный рост поверхностного сопротивления вызван в основном снижением концентрации носителей вследствие их захвата на образовавшиеся глубокие уровни.

Данный подход представляется вполне реалистичным. Действительно, большинство атомов легирующей примеси при комнатной температуре, естественно, всегда находится в заряженном состоянии. Если рассматриваемые точечные дефекты, предполагаемые неустойчивыми, заряжаются, захватывая основные носители, то знак их заряда оказывается противоположен знаку заряда легирующей примеси и между ними должно происходить эффективное взаимодействие.

В экспериментах, с результатами которых будет проводиться сравнение модели, деградация электропроводности изучалась для эпитаксиальных проводящих пленок с достаточно однородным распределением легирующей примеси, а энергия первичных ионов ( $\sim 1$  МэВ) была такова, что генерация простейших дефектов была достаточно однородной по всей глубине этих пленок [4,10,11]. Эти обстоятельства позволяют не учитывать диффузионное перераспределение концентрации рассматриваемых дефектов. Кроме того, большая глубина проникновения первичных ионов позволяет не рассматривать химическое взаимодействие внедряемых атомов с мишенью в пределах проводящего слоя и влияние прыжковой проводимости в области, близкой к концу пробега ионов.

Итак, рассматриваются: 1) образование простейших точечных дефектов одного типа; 2) их рекомбинация на ненасыщаемых стоках, с характерным временем релаксации  $\tau$ ; 3) взаимодействие этих дефектов с леги-

рующей примесью, характеризуемое константой квазихимической реакции  $\alpha$ . Поскольку характерные времена облучения образца ( $t > 10$  с) намного превышают среднее время жизни рассматриваемых дефектов  $\tau$ , их концентрация  $n$  будет слабо зависеть от времени (квазиравновесное приближение), т.е. для каждого момента времени  $dn/dt \approx 0$ .

Исходя из вышесказанного получается следующая система уравнений:

$$\begin{cases} gF - n/\tau - \alpha n_i n (1 - n_d/n_i) = 0 \\ dn_d/d\Phi = \alpha n_i n F^{-1} (1 - n_d/n_i) \end{cases}, \quad (1)$$

где  $g$  — средняя плотность генерации дефектов, создаваемых каждым ионом;  $F$  — плотность потока ионов;  $n_d$  — концентрация образовавшихся комплексов дефект-легирующая примесь;  $n_i$  — концентрация легирующей примеси (равная начальной концентрации носителей заряда в образце);  $\Phi = Ft$  — доза ионов. В первом уравнении первое слагаемое описывает генерацию точечных дефектов, второе — их рекомбинацию на ненасыщаемых стоках, третье — их взаимодействие с легирующей примесью. Второе уравнение рассматривает изменение концентрации комплексов, формирующих глубокие ловушки.

Решение системы (1) с очевидным начальным условием  $n_d = 0$  при  $\Phi = 0$  дает следующее трансцендентное уравнение, связывающее концентрацию комплексов с дозой облучения:

$$\ln(1 - n_d/n_i) = \alpha \tau n_d (1 - g\Phi/n_d), \quad (2)$$

которое можно использовать для нахождения  $n_d(\Phi)$ . Концентрация свободных носителей заряда  $n_c$  и поверхностная концентрация носителей  $N_s$  определяются из следующих соотношений:

$$n_c = n_i - n_d = n_i(1 - n_d/n_i); \quad N_s = (n_c + n_{th})h. \quad (3)$$

Здесь  $h$  — толщина проводящего слоя, а  $n_{th}$  — остаточная концентрация носителей при очень больших дозах облучения, когда вся легирующая примесь уже образовала комплексы с дефектами. Ее величина на много порядков меньше начальной концентрации носителей  $n_i$ , и, следовательно, она вносит заметный вклад в сопротивление только при больших дозах. Окончательно поверхностное сопротивление  $R_s$  можно найти из следующего соотношения:

$$R_s = [e\mu N_s]^{-1} = [e\mu h(n_c + n_{th})]^{-1}, \quad (4)$$

где  $e$  — заряд электрона;  $\mu$  — эффективная подвижность носителей заряда.

В изменении величины поверхностного сопротивления вносит вклад не только зависимость концентрации носителей от дозы облучения, но и деградация их подвижности. На данном этапе в модели не рассматривается зависимость подвижности от дозы облучения,

Параметры модели, рассчитанные для GaN в приближении изменяющейся и постоянной подвижности и для ZnO в приближении постоянной подвижности

Мишень	Ион	Энергия, МэВ	$\alpha\tau$ , см <sup>3</sup>	$g$ , см <sup>-1</sup>	$g$ TRIM, см <sup>-1</sup>
GaN, $h = 1.5$ мкм, $\mu = f(\Phi)$	<sup>1</sup> H	0.6	$4.112 \cdot 10^{-17}$	2 164	2 521
	<sup>7</sup> Li	3.0	$4.288 \cdot 10^{-17}$	22 334	38 724
	<sup>12</sup> C	6.6	$4.292 \cdot 10^{-17}$	82 595	130 285
	<sup>16</sup> O	6.6	$4.289 \cdot 10^{-17}$	183 830	313 010
GaN, $h = 1.5$ мкм, $\mu = 570$ см <sup>2</sup> В <sup>-1</sup> с <sup>-1</sup>	<sup>1</sup> H	0.6	$2.793 \cdot 10^{-17}$	3 008	2 521
	<sup>7</sup> Li	3.0	$3.144 \cdot 10^{-17}$	30 606	38 724
	<sup>12</sup> C	6.6	$3.759 \cdot 10^{-17}$	101 020	130 285
	<sup>16</sup> O	6.6	$3.255 \cdot 10^{-17}$	247 520	313 010
ZnO, $h = 0.6$ мкм, $\mu = 80$ см <sup>2</sup> В <sup>-1</sup> с <sup>-1</sup>	<sup>7</sup> Li	0.7	$1.539 \cdot 10^{-18}$	16 579	132 276
	<sup>16</sup> O	2.0	$3.131 \cdot 10^{-18}$	43 046	734 133
	<sup>28</sup> Si	3.5	$2.876 \cdot 10^{-18}$	107 530	1886 521

поскольку это самостоятельная сложная задача, большинство исходных данных для которой не известно. Определенным извинением для этого служит факт, о котором говорилось выше, — изменение подвижности играет существенно меньшую роль в формировании кинетики  $R_s(\Phi)$ . Заметим, что при проведении расчетов кинетики электрической изоляции GaN мы учитывали зависимость  $\mu(\Phi)$ , оцененную на основе имеющихся экспериментальных данных (подробнее см. далее).

Рассмотрим два частных случая: малые и большие дозы облучения. При малых дозах концентрация комплексов дефект-легирующая примесь также мала, следовательно, отношение  $n_d/n_i \ll 1$ . Подстановка  $1 - n_d/n_i = 1$  в первое уравнение системы (1) позволяет получить аналитическое решение для концентрации носителей в виде

$$n_c = n_i \exp[-\alpha\tau g\Phi / (1 + \alpha\tau n_i)]. \quad (5)$$

В случае больших доз  $n_d/n_i \approx 1$ , и уравнение (2) можно переписать как  $\ln(1 - n_d/n_i) = -\alpha\tau g\Phi [1 - (n_d/n_i)(n_i/g\Phi)] = -\alpha\tau g\Phi + \alpha\tau n_i$ , что дает для концентрации носителей

$$n_c = n_i(1 - n_d/n_i) = n_i \exp[\alpha\tau n_i] \exp[-\alpha\tau g\Phi]. \quad (6)$$

Из (5) и (6) видно, что в обоих случаях зависимость концентрации носителей от дозы, построенная в полупрологарифмических координатах, должна иметь линейный характер. Данное обстоятельство имеет существенное значение, поскольку позволяет определить параметры уравнения (2), используя экспериментальные данные.

### 3. Сравнение с экспериментом для GaN

Для сравнения результатов модели с экспериментом использовалась работа [4], в которой описаны данные по облучению при комнатной температуре эпитаксиального

*n*-GaN, полученного методом MOCVD, со структурой вюрцита, легированного кремнием с толщиной проводящего слоя 1.5 мкм на нелегированном буферном слое толщиной 0.5 мкм, выращенного на сапфировой подложке. Кристалл был разрезан на одинаковые прямоугольные резисторы. Начальная концентрация носителей в образцах составляла  $3 \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup>, а поверхностное сопротивление 218 Ом/□. Тип и энергия ионов, использованных при бомбардировке, приведены в таблице, плотность ионного тока составляла  $\sim 6.4 \cdot 10^{10}$  см<sup>-2</sup>с<sup>-1</sup>. Поверхностное сопротивление измерялось *in situ* после каждого шага облучения по дозе.

Проведенный ранее [9] сравнительный анализ экспериментальных данных [5] по изменению проводимости GaN при облучении быстрыми легкими ионами и результатов расчетов по данной модели показал их хорошее согласие. В то же время расчеты кинетики поверхностного сопротивления были проведены только для протонного пучка из [5], поэтому представляет интерес проведение моделирования зависимостей поверхностного сопротивления от дозы и для других ионов из [4].

#### 3.1. Нормировки зависимостей сопротивления от дозы

Как уже было сказано выше, из рассматриваемой модели следует, что и при малых, и при больших дозах облучения зависимости обратной величины концентрации носителей  $n_c$  от дозы, построенные в полупрологарифмических координатах, должны представлять собой отрезки прямых (см. выражения (5) и (6)). На рис. 1 представлена одна из таких зависимостей, показывающая изменение концентрации носителей в образце GaN при облучении его протонами с энергией 0.6 МэВ [5] (методика пересчета  $R_s(\Phi)$  в  $n_c(\Phi)$  рассмотрена далее). Здесь достаточно четко видны два прямолинейных участка, один при малых ( $\Phi < 1 \cdot 10^{14}$  см<sup>-3</sup>) и второй при больших ( $\sim 2.0 \cdot 10^{14} < \Phi < 2.5 \cdot 10^{14}$  см<sup>-3</sup>) дозах. При

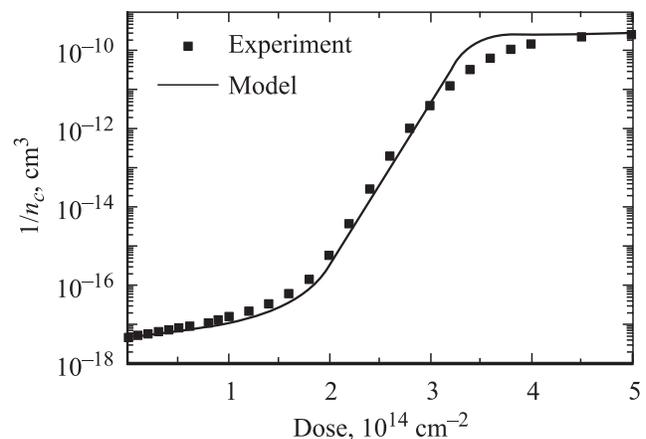
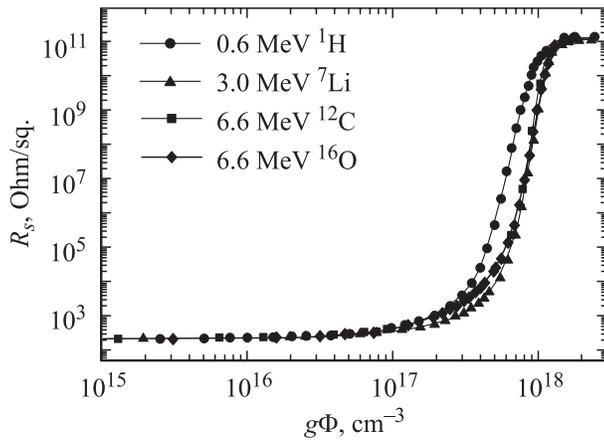
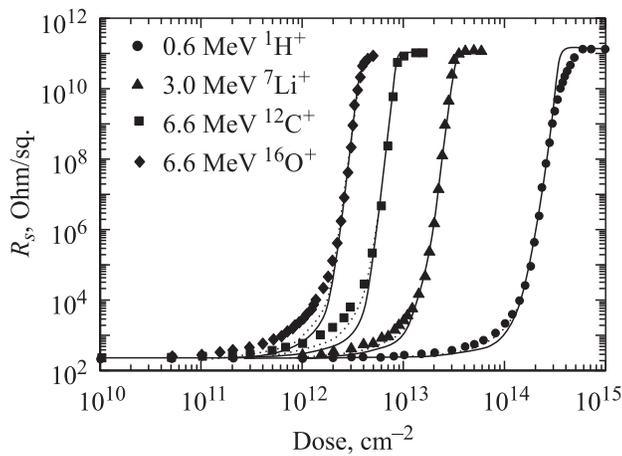


Рис. 1. Экспериментальная [5] (символы) и расчетная (линия) зависимости обратной концентрации носителей в GaN от дозы облучения протонами с энергией 0.6 МэВ.



**Рис. 2.** Поверхностное сопротивление одинаковых образцов GaN, облучаемых различными ионами [4] в зависимости от полного количества атомных смещений.



**Рис. 3.** Экспериментальные [4] (символы) и расчетные зависимости поверхностного сопротивления GaN от дозы облучения различными ионами с учетом (пунктир) и без учета (сплошные линии) изменения подвижности.

облучении GaN другими ионами (Li, C, O) поверхностная концентрация носителей изменяется с ростом дозы сходным образом, обнаруживая те же два характерных участка, но кривые сдвигаются в сторону меньших доз на 1–2 порядка. Итак, предположение о линейности изменения логарифма обратной величины поверхностной концентрации носителей при малых и больших дозах облучения подтверждается экспериментальными данными.

Если рассматривать в рамках модели изменение сопротивления образцов при их облучении различными ионами, то из уравнений (2), (5) и (6) следует, что концентрация комплексов дефект–легирующая примесь  $n_d$  и, следовательно, концентрация носителей  $n_c$  определяются произведением  $g\Phi$ , которое представляет собой полную концентрацию дефектов, созданных в слое за время облучения. Тогда зависимости сопротивления для идентичных образцов, облучаемых различными ионами,

построенные в координатах  $R_s(g\Phi)$ , должны совпасть. Проверка этого предположения требует определения плотности генерации дефектов одним ионом  $g$ . Ее можно оценить, опираясь на результаты баллистических расчетов, например на стандартную программу TRIM [12], однако точное определение значений  $g$  затруднено несколькими обстоятельствами. Во-первых, нам не известны данные о величине пороговой энергии смещения атомов в различных подрешетках, и, во-вторых, неизвестно, какие дефекты эффективно связываются с примесью. При проведении расчетов по TRIM (версия SRIM-2003.17) пороговые значения смещения атома принимались равными 25 эВ как для галлиевой, так и для азотной подрешетки. В последнем столбце таблицы для определенности приведено количество вакансий в азотной подрешетке GaN. Эти значения использовались при построении зависимостей  $R_s(g\Phi)$ , представленных на рис. 2 (экспериментальные данные взяты из [4] и приведены на рис. 3).

Хорошо видно, что в отличие от исходных зависимостей  $R_s(\Phi)$ , которые сдвинуты друг относительно друга для разных ионов на  $\sim 2$  порядка по дозам (рис. 3), кривые для ионов лития, углерода и кислорода совпадают в пределах ошибки измерений, а кривая для протонов сдвинута относительно них только в  $\sim 1.5$  раза. Заметим, что как это совпадение, так и значение сдвига не изменяются, если за  $g$  принять плотность генерации смещений не в азотной, а в галлиевой подсистеме. Сдвиг может возникать по нескольким причинам, например из-за грубости приближений нашей модели, ограничений программы TRIM для протонов, зависимости выхода пар Френкеля за пределы каскада от его плотности и т.д. Это требует дальнейшего анализа. Однако, несмотря на указанное отклонение, в целом можно сказать, что еще одно предположение модели удовлетворительно подтверждается экспериментом.

### 3.2. Зависимость пороговой дозы возникновения изоляции от начальной концентрации носителей и количества атомных смещений

Анализ изменения сопротивления с ростом дозы ионов показал, что существует пороговая доза облучения  $\Phi_{th}$ , т.е. доза, при которой в образце под действием бомбардировки создается концентрация уровней захвата, близкая к начальной концентрации свободных носителей, а кривая  $R_s(\Phi)$  выходит на насыщение. Зависимость пороговой дозы от начальной концентрации носителей в GaN, легированном кремнием, [4] имеет линейный характер ( $\Phi_{th} \propto n_i$ ). В то же время пороговая доза оказывается обратно пропорциональной количеству атомных смещений, производимых ионным пучком ( $\Phi_{th} \propto g^{-1}$ ).

В рамках нашей модели концентрация носителей  $n_{th}$ , соответствующая пороговой дозе облучения, может

быть получена из уравнения (6)

$$\begin{aligned} n_{th} &= n_i(1 - n_d(\Phi_{th})/n_i) \\ &= n_i \exp[\alpha\tau n_i] \exp[-\alpha\tau g\Phi_{th}], \end{aligned} \quad (7)$$

причем это выражение описывает пороговую концентрацию для различных материалов, различных начальных концентраций носителей  $n_i$  и облучения различными ионами. Из (7) следует

$$\Phi_{th} = [\alpha\tau n_i + \ln(n_i/n_{th})](\alpha\tau g)^{-1}. \quad (8)$$

Принимая во внимание приведенные в таблице значения  $\alpha\tau = 4.29 \cdot 10^{-17} \text{ см}^{-3}$  и  $n_{th} = 6.55 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$  и  $n_i = 0.3-5.6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , соответствующие облучению GaN ионами углерода [4], нетрудно убедиться, что отклонение от линейности составит менее одного процента. Таким образом, оба наблюдаемых экспериментально факта удовлетворительно описываются уравнением (8) и  $\Phi_{th} \propto n_i g^{-1}$ .

### 3.3. Изменение поверхностного сопротивления с ростом дозы

Большой интерес представляет применение нашей модели к описанию собственно зависимости поверхностного сопротивления от дозы облучения. Получить ее можно используя уравнение (2), из которого вытекает изменение концентрации комплексов дефект-примесь  $n_d(\Phi)$  с ростом дозы, и уравнения (3) и (4), связывающие эту концентрацию с концентрацией носителей и поверхностным сопротивлением. Однако прежде необходимо определить константы квазихимических реакций ( $\alpha$ ,  $\tau$ ), а также среднее количество дефектов, генерируемых одним ионом на единичную длину пробега  $g$ , являющиеся параметрами уравнения (2). Константы входят во все промежуточные уравнения в виде произведения  $\alpha\tau$ , поэтому их можно рассматривать как один параметр. Среднее количество дефектов  $g$  требует определения на основе экспериментальных данных по причинам, рассмотренным выше (3.1).

Оба параметра можно найти, используя любые два из следующих соотношений: 1) в соответствии с (5), в пределе малых доз зависимость логарифма обратной концентрации носителей  $\ln(n_c^{-1})$  от дозы является прямой линией, коэффициент наклона которой определяется как  $k_S = \alpha\tau g(1 + \alpha\tau n_i)$ ; 2) аналогично в пределе больших доз из (6) коэффициент наклона прямолинейного участка той же кривой равен  $k_L = \alpha\tau g$ ; 3) доза, при которой пересекаются определяемые выражениями (5) и (6) прямые, будет равна  $\Phi_I = (1 + \alpha\tau n_i)/\alpha\tau g$ .

Для того чтобы получить зависимость поверхностной концентрации носителей от дозы  $N_s(\Phi)$  из имеющейся экспериментальной зависимости поверхностного сопротивления  $R_s(\Phi)$ , надо знать, как с ростом дозы изменяется подвижность, поскольку в соответствии с (4)

$N_s^{-1}(\Phi) = e\mu(\Phi)R_s(\Phi)$ . Прямых экспериментальных данных нет, поэтому мы использовали результаты изохронного отжига GaN, облученного протонами с энергией 0.6 МэВ до дозы  $2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$  [5]. На основе этих данных была оценена корреляция подвижности и поверхностного сопротивления, что позволило определить  $N_s(\Phi)$  и, следовательно, параметры уравнения (2). С использованием полученной оценки  $\mu(R_s)$  и выражения (4) не сложно также получить зависимость подвижности от концентрации комплексов  $\mu(n_d)$ , которая использовалась при расчете  $R_s(\Phi)$  из решений уравнения (2). Безусловно, данная оценка подвижности весьма груба, поскольку при одном и том же значении поверхностного сопротивления концентрация и свойства рассеивающих центров (определяющих значение подвижности) в образце при его облучении и при изохронном отжиге могут различаться. В то же время отклонения в величине подвижности не должны сильно сказаться на виде зависимости  $R_s(\Phi)$ , поскольку изменение поверхностного сопротивления в результате облучения оказывается на несколько порядков выше изменения подвижности.

Основные результаты обработки экспериментальных данных сведены в таблицу. Первый набор строк в ней содержит значения расчетных параметров, полученных для случая облучения одинаковых образцов GaN различными ионами с учетом изменения подвижности носителей с ростом дозы. Во втором наборе — те же параметры для тех же комбинаций ион-мишень, но при постоянной подвижности, численно равной подвижности носителей в исходных образцах. Из таблицы видно, что в первом случае параметр  $\alpha\tau$  оказывается практически постоянной величиной. Этого и следовало ожидать, поскольку данный параметр характеризует эффективность взаимодействия простейших дефектов с легирующей примесью и их исчезновения на насыщаемых стоках, которые, очевидно, должны совпадать в серии экспериментов с использованием одинаковых образцов, вырезанных из одной пластины. Отказ от учета зависимости подвижности от дозы облучения приводит к небольшому росту разброса параметров. Отметим, что полученная для протонов в [9] величина  $\alpha\tau = 7.405 \cdot 10^{-17} \text{ см}^3$  отличается от значения, приведенного в таблице для случая переменной подвижности, приблизительно в 2 раза, однако она получена для образцов из другой серии. Средние плотности генерации дефектов каждым ионом  $g$ , полученные из TRIM и из экспериментальных кривых обратной поверхностной концентрации носителей, достаточно близки, что также говорит в пользу предлагаемой модели.

На рис. 3 представлены экспериментальные зависимости  $R_s(\Phi)$  и зависимости, полученные с учетом изменения подвижности с дозой облучения и в предположении, что подвижность постоянна и равна исходной. Видно, что учет  $\mu(\Phi)$  дает лучшее согласие с экспериментом и для самых легких ионов расчетные и экспериментальные кривые практически совпадают. Увеличение массы иона приводит к отличиям хода экспериментальных

и расчетных кривых в области перехода от малых доз к большим. Природа такого отличия требует дополнительного анализа. Возможно, что это связано с ростом плотности генерации дефектов при увеличении массы иона. Действительно, в [5] увеличение плотности генерации дефектов при увеличении плотности потока ионов  $F$  (а не  $g$ ) сопровождалось изменением хода  $R_s(\Phi)$  при достаточно больших значениях  $F$ . Это значит, что в систему уравнений (2) должны были бы входить нелинейные члены. Для простоты рассмотрения в [9] и в настоящей работе подобные нелинейные процессы не учитывались и модель должна быть более адекватной реальности для достаточно легких ионов и малых плотностей ионного тока.

Кроме того, на рис. 3 показано, что учет изменения подвижности с дозой не очень сильно сказывается на ходе расчетных зависимостей  $R_s(\Phi)$ . Этот факт позволяет рассчитывать на удовлетворительное описание зависимостей поверхностного сопротивления от дозы для тех материалов, для которых нет данных об изменении подвижности.

Недавно появилась интересная работа [13], посвященная холловским измерениям номинально не легированных пленок  $n$ -GaN, выращенных с помощью MOCVD, подвергнутых облучению электронами с энергией 0.9 МэВ при комнатной температуре со сравнительно низкими дозами, когда уровень повреждения GaN был мал по сравнению с обсуждаемыми выше случаями [4,5]. В ней было обнаружено снижение концентрации и подвижности электронов в зоне проводимости при низких температурах измерения, в то время как при комнатной температуре эти параметры не изменялись. Введенные радиационные дефекты в этом случае были нестабильны при  $T > 200^\circ\text{C}$  и при  $T = 400^\circ\text{C}$  полностью отжигались. Базируясь на своих данных, авторы [13] пришли к выводу, что атомы Si, предположительно ненамеренно введенные при MOCVD-процессе, не взаимодействуют с дефектами, созданными электронным пучком, что, казалось бы, противоречит рассматриваемой здесь модели для ионно-индуцированной изоляции  $n$ -GaN.

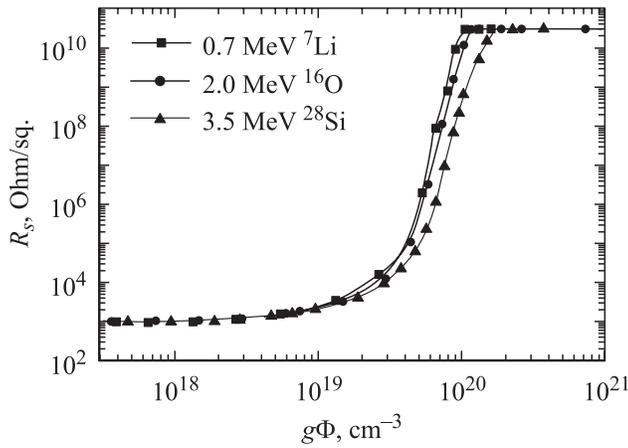
Однако необходимо заметить, что экспериментальные условия и поведение дефектов в моделируемых нами экспериментах [4,5] существенно отличаются от таковых в [13]. Действительно, концентрация электронов в исходных образцах была на 1–2 порядка больше, чем в [13], и соответственно отличалось положение уровня Ферми. При комнатной температуре измерения в работах [4,5], где  $n$ -GaN был специально легирован кремнием, электропроводность изменялась, причем ее уменьшение доходило до  $\sim 10$  порядков, подвижность падала по крайней мере на порядок и дефекты, ответственные за компенсацию доноров, полностью отжигались только при  $T > 600^\circ\text{C}$  даже для сравнительно низких доз. Если предположить, что компенсация донорных уровней атомов Si происходит в результате введения акцепторных уровней, соответствующих дефектам неизвестной природы, никак не связанным с комплексами, включающими

атомы Si, как это делалось в [13], то кинетика изоляции за счет ионного облучения должна была бы существенно отличаться от экспериментальных данных [4,5]. Такое различие в результатах в принципе может быть связано с тем, что даже в пленках GaN высокого качества, выращенных с помощью MOCVD, всегда присутствуют атомы ненамеренно введенных примесей, таких как H, C и O, с концентрациями, превышающими  $10^{16}\text{ см}^{-3}$  [1], что осложняет интерпретацию результатов. Таким образом, в настоящий момент нельзя говорить о том, что рассматриваемая здесь модель противоречит результатам работы [13], и требуются дополнительные исследования, чтобы понять особенности поведения дефектов в GaN при малых уровнях повреждения.

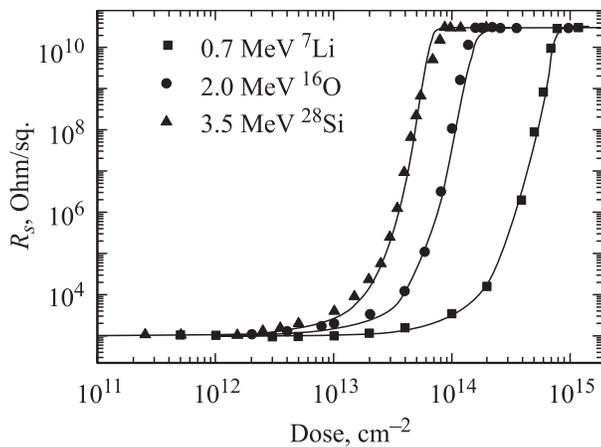
#### 4. Сравнение с экспериментом для ZnO

Зависимость поверхностного сопротивления оксида цинка, облучаемого ионами Li, O, Si, от дозы облучения имеет вид, очень похожий на рассмотренные выше кривые для нитрида галлия, с выраженными прямолинейными областями в полулогарифмическом масштабе при малых и больших дозах и выходом на насыщение при очень высоких дозах [10,11]. В данных работах описана кинетика возникновения изоляции в выращенных по методу MBE эпитаксиальных ненамеренно легированных образцах  $n$ -ZnO толщиной 0.6 мкм, выращенных на сапфировой подложке. Образец был разрезан на одинаковые резисторы размером  $3.5 \times 3.5$  мм. Начальная поверхностная концентрация носителей в резисторах составляла  $N_c \approx 10^{17}\text{ см}^{-3}$ , эффективная холловская подвижность  $\mu \approx 80\text{ см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$ , поверхностное сопротивление  $R_s \approx 1\text{ кОм}/\square$ . Полученные идентичные резисторы облучались при комнатной температуре ионами, тип и энергия которых приведены в таблице; плотность ионного тока составляла  $1.0\text{--}1.9 \cdot 10^{11}\text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ . Энергия ионов выбиралась таким образом, чтобы максимум смещений атомов лежал далеко в сапфировой подложке. Поверхностное сопротивление измерялось *in situ* после каждого шага по дозе. Поскольку данные условия облучения ZnO удовлетворяют приближениям модели, интересно применить ее для описания электрической изоляции еще в одном широкозонном полупроводнике. Несмотря на то, что природа донорной примеси в ZnO до сих пор окончательно не выяснена, все основные рассуждения модели о дефектах, ответственных за создание глубоких уровней, остаются прежними. А именно — появление этих глубоких уровней вызвано присоединением к легирующему неподвижному дефекту (чужеродному атому или собственному дефекту кристалла) подвижного точечного дефекта, рожденного внедряемым ионом.

Как было сказано выше, из предлагаемой модели следует, что концентрация носителей  $n_c$  определяется



**Рис. 4.** Поверхностное сопротивление одинаковых образцов ZnO, облучаемых различными ионами в зависимости от полного количества атомных смещений.



**Рис. 5.** Экспериментальные (символы) и расчетные (сплошные линии) зависимости поверхностного сопротивления ZnO от дозы облучения различными ионами.

полной концентрацией дефектов, созданных в проводящем слое за время облучения  $g\Phi$ , и кривые роста сопротивления для идентичных образцов, облучаемых различными ионами, построенные в координатах  $R_s(g\Phi)$ , должны совпадать. Для проверки этого положения были рассчитаны по TRIM приведенные в таблице плотности генерации дефектов  $g$  в цинковой подрешетке ZnO при его облучении ионами лития, кислорода и кремния. Пороговые энергии смещения атома принимались равными 57 эВ для обеих подрешеток, согласно данным из работ [14,15]. На рис. 4 представлен соответствующий набор перестроенных экспериментальных зависимостей из [10]. Видно, что они полностью совпадают для лития и кислорода, а для более тяжелых ионов кремния кривая незначительно сдвинута в сторону больших доз.

Проведение расчетов поверхностного сопротивления ZnO осложнено отсутствием зависимости подвижности носителей от дозы  $\mu(\Phi)$ . В то же время выше обоснова-

но, что в качестве первого приближения ее можно принять постоянной (в нашем случае — равной начальной подвижности носителей). Полученные таким образом из  $R_s(\Phi)$  экспериментальные зависимости концентрации носителей от дозы  $N_s^{-1}(\Phi)$  в полулогарифмических координатах также обнаруживают два характерных, предсказываемых моделью, прямолинейных участка при малых и больших дозах ионов.

Для количественного описания кинетики роста поверхностного сопротивления ZnO от дозы  $R_s(\Phi)$  из уравнений (2)–(4) были определены параметры ( $a\tau$  и  $g$ ). Найденные значения параметров приведены в последнем наборе строк таблицы. Как видно, значения  $a\tau$  для всех образцов близки друг к другу, хотя их разброс несколько больше, чем для нитрида галлия. В принципе это может быть связано с меньшей отработанностью способов получения эпитаксиальных слоев ZnO по сравнению с GaN. В то же время, средние плотности генерации дефектов  $g$ , полученные по TRIM и из экспериментальных данных, отличаются в 8–18 раз. Возможно, данный эффект связан с активным взаимодействием простейших точечных дефектов в оксиде цинка между собой еще в процессе развития первичного каскада. При этом эффективное количество простейших дефектов, вышедших из каскада и участвующих в квазихимической реакции с атомами примеси (получаемое обработкой экспериментальных кривых), будет меньше полного количества образованных дефектов, рассчитываемого по TRIM.

Результаты расчетов поверхностного сопротивления ZnO при его облучении ионами Li, O и Si в рамках модели приведены на рис. 5. Здесь видно хорошее согласие расчетных кривых с экспериментальными данными. Расхождения опять наблюдаются в основном в областях перехода от малых доз ионов ( $n_d/n_i \ll 1$ ) к большим ( $n_d/n_i \approx 1$ ) и перехода к стабильному состоянию с низкой проводимостью в области больших доз. Одной из причин подобного расхождения, безусловно, является принятая при расчетах независимость подвижности от дозы облучения. Однако можно сказать, что в целом модель неплохо описывает кинетику электрической изоляции ZnO. Лучшего согласия теоретических и экспериментальных результатов как для ZnO, так и для GaN, по-видимому, можно достичь, приняв в расчет: 1) более точную зависимость подвижности носителей от дозы облучения; 2) неоднородность генерации подвижных точечных дефектов по глубине образца; 3) нелинейные эффекты, связанные с образованием дополнительных видов комплексов дефектов. Последнее должно также описать эффекты, связанные с плотностью ионного тока.

## 5. Заключение

В работе рассмотрена модель изменения проводимости широкозонных полупроводников под действием облучения быстрыми легкими ионами. Механизм роста сопротивления в основном связан с образованием комп-

лексов, на которых эффективно связываются носители. Возникновение таких комплексов вызвано взаимодействием ионно-индуцированных дефектов с легирующей примесью. Проведенный анализ показывает, что развитая модель неплохо описывает происходящие процессы при малых плотностях ионного тока. В частности, она описывает зависимость поверхностного сопротивления от дозы и от количества атомных смещений, производимых пучком. Кроме того, она объясняет характер зависимости пороговой дозы образования изоляции от начальной концентрации носителей и количества атомных смещений.

Авторы благодарят В.С. Белякова и В.В. Емцева за ряд полезных замечаний и Министерство образования и Министерство науки и технологий РФ за поддержку исследований.

## Список литературы

- [1] S.J. Pearton, J.C. Zolper, R.J. Shul, F. Ren. *J. Appl. Phys.*, **86**, 1 (1999).
- [2] D.C. Look. *Mater. Sci. Eng. B*, **80**, 383 (2001).
- [3] S.J. Pearton, R.G. Wilson, J.M. Zavada, J. Han, R.J. Shul. *Appl. Phys. Lett.*, **73**, 1877 (1998).
- [4] H. Boudinov, S.O. Kucheyev, J.S. Williams, C. Jagadish, G. Li. *Appl. Phys. Lett.*, **78**, 943 (2001).
- [5] S.O. Kucheyev, H. Boudinov, J.S. Williams, C. Jagadish, G. Li. *J. Appl. Phys.*, **91**, 4117 (2002).
- [6] C. Uzan-Saguy, J. Salzman, R. Kalish, V. Richter, U. Tish, S. Zamir, S. Praver. *Appl. Phys. Lett.*, **74**, 2441 (1999).
- [7] S.J. Pearton. *Mater. Sci. Rep.*, **4**, 313 (1990).
- [8] S.O. Kucheyev, J.S. Williams, S.J. Pearton. *Mater. Sci. Eng., R*, **33**, 51 (2001).
- [9] A.I. Titov, S.O. Kucheyev. *J. Appl. Phys.*, **92**, 5740 (2002).
- [10] S.O. Kucheyev, P.N.K. Deenapanray, C. Jagadish, J.S. Williams, M. Yano, K. Koike, S. Sasa, M. Inoue, K. Ogata. *Appl. Phys. Lett.*, **81**, 3350 (2002).
- [11] S.O. Kucheyev, C. Jagadish, J.S. Williams, P.N.K. Deenapanray, M. Yano, K. Koike, S. Sasa, M. Inoue, K. Ogata. *J. Appl. Phys.*, **93**, 2972 (2003).
- [12] J.P. Biersack, L.G. Haggmark. *Nucl. Instr. a. Meth.*, **174**, 257 (1980).
- [13] V.V. Emtsev, V.Yu. Davydov, K.V. Emtsev, D.S. Poloskin, G.A. Oganessian, V.V. Kozlovskii, E.E. Haller. *Phys. Status Solidi C*, **0**, 601 (2003).
- [14] J.M. Meese, D.R. Locker. *Sol. St. Commun.*, **11**, 1547 (1972).
- [15] D.R. Locker, J.M. Meese. *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **19**, 237 (1972).

Редактор Л.В. Беляков

## Model for electrical isolation of GaN and ZnO by light-ion bombardment

*A.I. Titov, P.A. Karasev, S.O. Kucheyev\**

St. Petersburg State Polytechnical University,  
195251 St. Petersburg, Russia

\* Research School of Physical Sciences  
and Engineering,  
The Australian National University,  
Canberra, ACT 0200, Australia

**Abstract** We present a model for electrical isolation of GaN and ZnO by MeV light-ion bombardment. In our model, a decrease in the concentration of free carriers responsible for the isolation is assumed to be due to the formation of complexes of ion-beam-generated point defects with shallow donor or acceptor dopants. Results show that our model can adequately describe experimental data for electrical isolation in the case of MeV light-ion irradiation of *n*-GaN and ZnO.