

На правах рукописи

Медведев Олег Сергеевич

ДИСЛОКАЦИОННАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ В НИТРИДЕ ГАЛЛИЯ

01.04.10 – физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург
2018

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном университете

Научный руководитель: **Вывенко Олег Федорович**,
доктор физико-математических наук, профессор
кафедры электроники твёрдого тела ФГБОУ ВО
«Санкт-Петербургский государственный университет»

Официальные оппоненты: **Заморянская Мария Владимировна**,
доктор физико-математических наук, зав. лаб. «Диффузия и дефектообразование в полупроводниках»,
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
г. Санкт-Петербург

Якимов Евгений Борисович,
доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник Института проблем технологии микроэлектроники РАН, г. Черноголовка

Ведущая организация: Институт физики твёрдого тела Российской академии наук (ИФТТ РАН), г. Черноголовка

Защита состоится «___» _____ 2018 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 212.232.33 по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук при Санкт-Петербургском государственном университете по адресу: 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская д. 5, ауд. 209.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке им. М. Горького Санкт-Петербургского государственного университета. Диссертация и автореферат диссертации размещены на сайте СПбГУ: www.disser.spbu.ru.

Отзывы на автореферат в 2-х экземплярах, заверенные печатью, просим направлять по адресу: 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская, д.1, ученому секретарю диссертационного совета Д 212.232.33 А.М. Поляничко.

Автореферат разослан «___» _____ 2018 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
к.ф.-м.н., доцент

А.М. Поляничко

Актуальность работы

Нитрид галлия и твёрдые растворы других тринитридов являются основой для промышленного производства светоизлучающих приборов в видимой области спектра и перспективными материалами для создания различных устройств силовой и оптоэлектроники. Именно на этих материалах были созданы «эффективные синие светодиоды, которые сделали возможными яркие и энергосберегающие белые источники света», за что Накамура и др. в 2014 году была присуждена Нобелевская премия. Вследствие отсутствия коммерчески доступных подложек с совершенной кристаллической структурой GaN, кристаллы и плёнки этого материала выращиваются гетероэпитаксиально на монокристаллических подложках из сапфира или, реже, из карбида кремния и кремния. Большая разница в постоянных решётках и коэффициентах термического расширения с подложкой приводит к огромной плотности дислокаций в выращенных кристаллах GaN, которая, как правило, значительно больше 10^5 см^{-2} . Последнее обстоятельство стимулировало проведение интенсивных исследований, посвящённых изучению свойств ростовых дислокаций, в результате которых было выяснено, что определяющую роль на их электронные свойства играют точечные дефекты и примеси неизвестной природы, сегрегированные на дислокациях в процессе роста.

Что касается свойств собственно дислокаций свободных от примесных атмосфер, то нынешний уровень понимания электронных свойств дислокаций в GaN до сих пор значительно уступает достигнутому для элементарных полупроводников – кремния и германия, история исследования которых насчитывает уже более полувека. Такая ситуация связана с тем, что для исследований свойств дислокаций в элементарных полупроводниках использовались изначально бездислокационные кристаллы, и разработанные для них подходы не могут быть применимы в образцах с исходной высокой плотностью дислокаций. Единственным способом исследовать свойства свежевведенных дислокаций в GaN была и остается до сих пор локальная пластическая деформация посредством индентирования или нанесения царапин с последующим применением измерительных методик, обладающих достаточным пространственным разрешением.

Результаты ранее выполненных исследований показали, что в подавляющем большинстве случаев дислокации в нитриде галлия как ростовые, так и введённые локальной пластической деформацией, являются центрами безызлучательной рекомбинации или, в лучшем случае, рекомбинационно неактивными центрами [1]. Вместе с тем, феномен люминесценции чистых дислокаций давно и хорошо известен и является общим для широкого круга полупроводников с тетраэдрической координацией как элементарных Si [2], так и бинарных [3], и можно было предположить, что нитрид галлия не является в этом смысле исключением.

Свидетельством чисто дислокационного происхождения люминесцентных линий являлись следующие факты: прямое наблюдение индивидуальных светящихся дислокаций [3], чувствительность спектра дислокационного излучения к тонкой структуре ядер дислокаций [4,5], высокая интенсивность дислокационного излучения, связанная с локализацией неравновесных носителей в одномерных квантовых ямах, образованных дислокациями [6]. Что касается GaN, то к моменту постановки настоящей работы подобных свидетельств о чисто дислокационном происхождении нескольких люминесцентных полос, которые возникали при введении дислокаций в GaN [1], не имелось.

Автором настоящей работы в составе исследовательской группы в 2014 году впервые было найдено, что винтовые дислокации в базисной плоскости в GaN являются эффективными источниками люминесценции со специфическим спектральным составом [7], что и определило содержание диссертации как всестороннее изучение обнаруженного явления с целью установления природы и механизма его происхождения.

Задачи диссертационной работы

Исходя из вышесказанного, были поставлены следующие задачи настоящего исследования:

1) Методом катодolumинесценции в сканирующем электронном микроскопе исследовать люминесцентные свойства дислокаций различных типов, введенных локальной деформацией.

2) Исследовать зависимости интенсивности и спектральных характеристик дислокационного излучения в кристаллах GaN с разным уровнем легирования от температуры, механических напряжений и тока электронного луча.

3) Исследовать влияние высокотемпературного отжига на свойства получаемой дислокационной структуры и излучения.

4) Определить методами просвечивающей микроскопии структуру ядер исследованных дислокаций.

Научная новизна

1) Обнаружено, что а-винтовые дислокации, введенные локальной пластической деформацией в низкоомные кристаллы GaN, являются источником высокоинтенсивной люминесцентной полосы с энергией излучения 3.15-3.18 эВ при 70 К и 3.1 эВ при 300 К.

2) Установлено, что полоса указанной дислокационной люминесценции характеризуется тонкой структурой, состоящей из разрешенного дублета узких спектральных линий, сопровождающихся фоннными повторениями

3) Исследованы зависимости спектрального положения и интенсивности полосы дислокационной люминесценции от температуры, механических напряжений и уровня возбуждения, результаты которых привели к выводу о её экситонном происхождении.

4) Исследовано влияние высокотемпературного термического отжига на дислокационную люминесценцию и показано, что она сохраняется при отжиге вплоть до температуры 750 К.

5) Обнаружено, что места пересечений винтовых дислокаций могут являться источником высокоинтенсивной специфической люминесцентной полосы с энергией излучения, отличной от люминесценции регулярных дислокационных сегментов.

6) Продемонстрировано, что а-винтовые дислокации в специально нелегированном нитриде галлия расщеплены на частичные и могут образовывать растянутые дислокационные узлы в местах их пересечений.

7) Предложена новая модель оптических переходов на винтовых дислокациях в GaN, учитывающая расщепленный характер их ядер.

Положения, выносимые на защиту

1) Винтовые дислокации в базисной и призматической плоскостях нитрида галлия в направлениях $\langle 11-20 \rangle$, введённые локальной пластической деформацией, в низкоомных кристаллах GaN, являются источником высокоинтенсивной люминесцентной полосы с энергией излучения 3.15-3.18 эВ при 70 К и 3.1 эВ при 300 К. Тонкая структура спектра полосы дислокационного излучения (ДИ) состоит из дуплета узких линий, разделённых промежутком 30-35 мэВ, величина которого не зависит от концентрации свободных электронов, механических напряжений и температуры и является характеристикой одиночной дислокации.

2) Совпадение зависимостей энергетического положения ДИ и излучения свободного экситона от температуры, от механических напряжений и уровня возбуждения свидетельствуют об экситонном происхождении ДИ. Компоненты спектрального дуплета ДИ существенно различаются по форме и ширине и температурным зависимостям их интенсивностей. По указанным свойствам высокоэнергетическая компонента подобна прямому экситону, а низкоэнергетическая – непрямому.

3) Места пересечений а-винтовых дислокаций обладают собственной линией люминесцентного излучения с энергией ~ 3.3 эВ при температуре 70 К.

4) Свежевведенные а-винтовые дислокации в низкоомном GaN расщеплены на две 30° частичные дислокации с величиной расщепления 4-6 нм. В местах их пересечений возможно образование протяжённых узлов размером в несколько раз превышающим величину расщепления прямолинейных сегментов.

5) Модель оптических переходов пространственно прямых и непрямых переходов с электронного уровня, образованного дефектом упаковки и частичными дислокациями, на дырочные уровни азотной и галлиевой частичных дислокаций.

Достоверность полученных результатов

Достоверность экспериментальных результатов исследования дислокационного излучения и его спектрального состава подтверждается их воспроизводимостью на большом количестве образцов монокристаллов GaN, выращенных различными методами. Достоверность интерпретации полученных результатов и предложенной модели определяется привлечением ранее хорошо обоснованных теоретических положений.

Научная и практическая значимость

1) Полученные новые данные расширяют фундаментальные представления об оптических свойствах дислокаций в полупроводниках и в GaN, в частности, в котором ранее дислокации считались преимущественно безызлучательными центрами рекомбинации неравновесных носителей.

2) Высокая по сравнению с зонно-зонным переходом интенсивность дислокационной люминесценции при комнатной и более высоких температурах, а также устойчивость дислокационной структуры к высокотемпературному отжигу даёт основание рассматривать это явление как перспективное для его использования при создании светоизлучающих приборов повышенной светоотдачи.

Апробация работы

Основные положения данной диссертационной работы докладывались на российских и международных конференциях:

1) 12-ая Международная конференция «Лучевые методы исследования микроструктур и в полупроводниках» (BIAMS 12) (Цукуба, Япония, 2014)

2) 10-ая Всероссийская конференция «Нитриды галлия, индия и алюминия: структуры и приборы» (Санкт-Петербург, Россия, 2015)

3) 28-ая Международная конференция по дефектам в полупроводниках (ICDS-28) (Хельсинки, Финляндия, 2015);

4) 17-ая Всероссийская молодёжная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и нанoeлектронике (Санкт-Петербург, Россия, 2015)

5) 5-ая Международная конференция «Современные тенденции научных исследований нанообъектов искусственного и природного происхождения» (STRANN 5) (Санкт-Петербург, Россия, 2016)

6) 13-ая Международная конференция «Лучевые методы исследования микроструктур и в полупроводниках» (BIAMS 13) (Версаль, Франция, 2016)

7) 18-ая Международная конференция по протяжённым дефектам в полупроводниках (EDS-2016) (Лес Иссамбрес, Франция, 2016)

8) 11-ая Всероссийская конференция «Нитриды галлия, индия и алюминия: структуры и приборы» (Москва, Россия, 2017)

9) 17-ая Международная Конференция: «Геттерирование и инженерия дефектов в полупроводниковой технологии» (GADEST 2017) (Лопота, Грузия, 2017)

Основные работы, включённые в диссертацию

1) О. С. Медведев, О. Ф. Вывенко, А. С. Бондаренко, “Люминесценция свежевведенных а-винтовых дислокаций в низкоомном GaN,” ФТП, 49, 9, 2015.

2) O. S. Medvedev, O. F. Vyvenko, and A. S. Bondarenko, “Luminescence of a-screw dislocations in low-ohmic GaN,” J. Phys. Conf. Ser., vol. 690, p. 12008, 2016.

3) O. S. Medvedev, O. F. Vyvenko, A. S. Bondarenko, V. Y. Mikhailovskii, E. V. Ubyivovk, P. Peretzki, and M. Seibt, “Recombination-related properties of a-screw dislocations in GaN: A combined CL, EBIC, TEM study,” AIP Conf. Proc., vol. 1748, p. 20011, 2016.

4) O. Medvedev, O. Vyvenko, and A. Bondarenko, “Thermal stability of DRL in n-GaN,” Phys. Status Solidi C, vol. 1700111, pp. 1–4, 2017.

5) O. Medvedev and O. Vyvenko, “Intersection Nodes of Basal Screw Dislocations as Luminous Quantum Dots in GaN,” Phys. status solidi - Rapid Res. Lett., vol. 1700297, p. 1700297, 2017.

Личный вклад автора

Лично автором осуществлялась подготовка образцов для исследований, проведены катодолюминесцентные измерения спектров дислокационной люминесценции в GaN при различных температурах, механических напряжениях, токах электронного луча в образцах с разным уровнем концентрации основных носителей тока, выращенных различными методами, а также обработка всех полученных данных и написание научных статей.

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения, списка сокращений, благодарностей и списка литературы. Объём работы составляет 131 страницы, в том числе 76 рисунков и 9 таблиц. Список литературы включает 205 наименований.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, определена цель работы и сформулированы задачи, а также представлены научная новизна и практическая значимость полученных в работе результатов, сформулированы научные положения, выносимые на защиту.

Глава 1 посвящена обзору строения бинарных тетраэдрически координированных полупроводников и общих свойств дислокаций в подобных материалах. В главе подробно рассмотрены типы дислокаций, их атомная структура и системы скольжения в гексагональных кристаллах, к которым относится нитрид галлия.

Далее приводится литературный обзор электронных и рекомбинационных свойств дислокаций, освещены основные модели излучательной и безызлучательной рекомбинации неравновесных носителей тока через дислокационные уровни. В данном разделе особое внимание уделено дислокационной люминесценции в различных полупроводниковых материалах. Последняя часть главы непосредственно посвящена анализу литературных данных энергетической структуры GaN и влияния на неё различных структурных дефектов. Наиболее распространёнными дефектами в гетеропитаксиальных слоях GaN являются прорастающие дислокации и дефекты упаковки. В главе подробно рассматриваются их электрические и оптические свойства. Далее описываются свойства свежевведённых дислокаций в GaN, их излучательная и безызлучательная активности. В конце первой главы, исходя из проведённого литературного обзора, формируется цель работы, состоящая в установлении природы и механизма происхождения дислокационной люминесценции свежевведённых а-винтовых дислокаций в GaN.

В **главе 2** приведено описание используемых методик для исследования образцов, описание самих образцов и особенности их пробоподготовки. Вначале описаны основы люминесцентной спектроскопии, механизмы рекомбинации носителей тока и их особенности. Далее приводится принципиальная схема сканирующего электронного микроскопа, а также область генерации сигналов, формируемых при облучении первичным пучком электронов. В данной работе для исследования свежевведённых дислокаций широко использовался метод катодолюминесценции, позволяющий получить высокое пространственное и спектральное разрешение. С целью оценки возможностей и ограничений данного метода во второй главе рассматриваются особенности формирования катодолюминесцентного (КЛ) излучения, размер области генерации КЛ сигнала в GaN и приводится оценка неравновесной концентрации дырок при используемых в экспериментах значениях тока электронного луча и ускоряющего напряжения. Затем следует описание экспериментальной установки Carl Zeiss Supra 40VP и приводится схема регистрации КЛ излучения, используемая в данном микроскопе. В конце главы описываются исследуемые образцы и методы локальной пластической деформации кристаллов нитрида галлия, используемые для введения дислокаций.

В **главе 3** приведены сводные результаты исследования дислокационной структуры пластически деформированных монокристаллов GaN. В начале главы подробно рассмотрены типы дислокаций при индентировании базисной (0001) и призматической (01-10) плоскостей и царапани базисной плоскости. Для примера, на рис.1 (А) приведена КЛ панхроматическая карта вблизи укола (в верхнем левом углу приведён снимок укола во вторичных электронах, отражающих морфологию поверхности). На КЛ карте отчётливо наблюдаются прямолинейные яркие контрасты, отходящие от места индентирования, которые являются ничем

иным как винтовыми дислокациями в направлениях $\{11\text{-}20\}$, которые далее будут обозначаться как *a*-винтовые дислокации. Спектр люминесценции *a*-винтовых дислокаций при температуре 300 и 70 К представлен на рис. 1 (Б) сплошной линией. Линии излучения с энергией 3.15-3.18 эВ связаны непосредственно с дислокациями и обозначены как DRL (Dislocation Related Luminescence). Спектр кристалла GaN вдали от места укола представлен на рис.1 (Б) пунктирной линией. Также в данной главе подробно исследуется дислокационная структура при вариации нагрузки индентора, ускоряющего напряжения и направления царапания. Далее суммируются экспериментальные данные, и описывается полная схема распространения дислокаций при локальной деформации. Выделяется два набора дислокаций «базисные» и «призматические». Дислокации «базисного» набора представлены излучательными прямолинейными *a*-винтовыми участками, оканчивающиеся безызлучательными криволинейными сегментами. Длина призматических дислокационных петель обычно в 3-6 раз меньше базисных. *a*-винтовые участки призматических дислокационных петель также, как и в случае базисного скольжения, имеют светлый контраст и выходят на поверхность дислокационными сегментами с краевой компонентой, имеющие тёмный контраст.

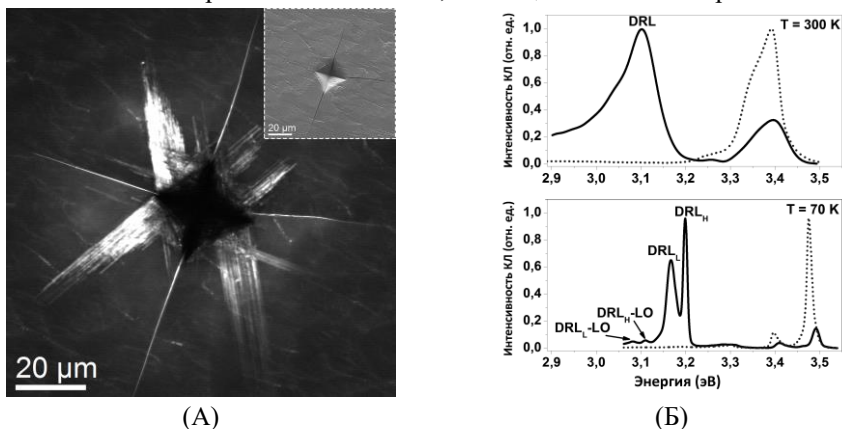


Рис.1 (А) Панхроматическая КЛ карта укола индентора на ростовой поверхности (0001) GaN (снимок во вторичных э). (Б) Сплошные линии – спектры *a*-винтовых дислокаций, пунктирные линии – спектры GaN вдали от укола при температуре 70 и 300 К. $V_b = 10$ кВ, $I_b = 500$ нА

В следующем разделе приводятся экспериментальные данные об атомном строении *a*-винтовых дислокаций, полученные методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Было обнаружено, что *a*-винтовые дислокации являются расщеплёнными, а ширина образованного дефекта упаковки составляет 5 нм (рис. 2). Также в работе показано, что в местах пересечений *a*-винтовых дислокаций возможно образование растянутых узлов с характерным расстоянием от

центра до ограничивающих его частичных дислокаций примерно равным 15 нм (рис.2).

Далее в работе представлен ряд экспериментов, посвящённых изучению влияния термических отжигов на дислокационную структуру и люминесценцию свежевведённых дислокаций. В данном разделе показано, что дислокационное излучение наблюдается непосредственно при нагреве образца до 420 К, значительные изменения дислокационной структуры начинаются при температурах отжига больших 600 К, а полное исчезновение дислокаций и дислокационного излучения происходит при отжигах порядка 1000 К. Наблюдаемая термическая стабильность дислокационной структуры связывается непосредственно с атомным строением а-винтовых дислокаций. В конце третьей главы представлен результат, демонстрирующий движение дислокаций при облучении электронным лучом, которое наблюдалось как при 300 К, так и при температуре жидкого азота.

В главе 4 в большей степени представлены спектральные особенности люминесценции свежевведённых а-винтовых дислокаций (линии DRL). В начале главы приводятся спектры дислокационного излучения при 300 К и 70 К (рис. 1 (Б)), подробно рассматривается дуплетная структура DRL, форма каждого из пиков, сравнивается спектр дислокаций, введённых на базисной и призматической поверхностях, а также проводится сравнение дислокационного излучения в кристаллах GaN с концентрацией свободных электронов от $4 \cdot 10^{16}$ до $8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Линия DRL наблюдается во всех исследуемых низкоомных образцах GaN, так же как и дуплетная структура линии DRL, обозначенная как DRL_H – высокоэнергетическая компонента, DRL_L – низкоэнергетическая. Стоит отметить, что форма каждого из пиков DRL различна. Высокоэнергетическая компонента имеет схожую полуширину с линией излучения свободного экситона, в то время как низкоэнергетическая компонента, вероятнее всего, состоит из неразрешённых линий и является уширенной в сравнении с высокоэнергетической компонентой. Важными свойствами линии DRL являются сохранение энергетического расщепления $\text{DRL}_H\text{-DRL}_L$ (30-35 мэВ) и изменение спектрального положения DRL идентичное изменению спектрального положения излучения свободного экситона (FE – free

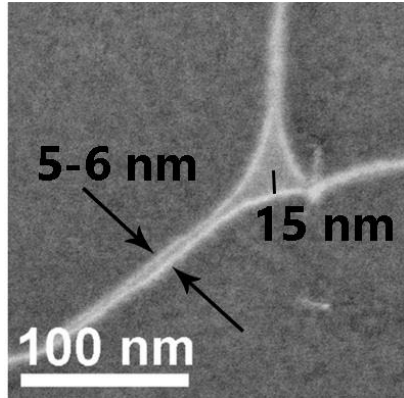


Рис.2 Тёмнопольное ПЭМ изображение растянутого узла в GaN. Расщепление а-винтовой дислокации 5-6 нм. Характерный размер растянутого узла – 15 нм.

exciton) при вариации механических напряжений в диапазоне 0-600 МПа и изменении температуры в диапазоне 70-130 К (рис. 4 (А) и (Б)), что свидетельствует об экситонном происхождении DRL. Дополнительным экспериментальным фактом в пользу данного предположения является линейный рост интенсивности DRL линий при увеличении тока электронного луча.

Однако, поведение относительной интенсивности пиков при увеличении температуры разительно отличается; так при 70 К доминирует низкоэнергетическая компонента DRL_L , которая резко затухает при повышении температуры и становится не различима при температурах больших 190 К (рис.4 (Б)).

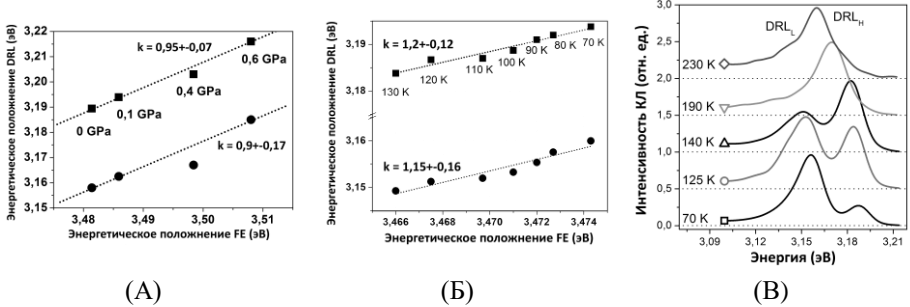


Рис. 4 Зависимость положения максимумов DRL_H и DRL_L от энергии FE при различных значениях механического напряжения вблизи царапины (А) и в диапазоне температур 70-130 К (Б). (В) Нормированные на максимум спектры DRL в диапазоне энергий 70-230 К.

Следующий раздел посвящён изучению спектральных особенностей люминесценции пересечений свежewedённых а-винтовых дислокаций (IRL – intersection related luminescence). На рис. 5 (А) и (Б) представлены монохроматические КЛ карты вблизи царапины, полученные при регистрации фотонов с энергией 3.32 и 3.18 эВ. На рис. 5(Б) видно, что от царапины отходят а-винтовые дислокации в направлениях $\{11-20\}$, а в местах их повышенной плотности вблизи царапины образуются яркие белые контрасты (рис. 5(А)). Спектр, полученный из ярких точек, представлен на рис. 5 (В) сплошной линией, откуда видно, что места пересечений имеют высокоинтенсивную линию ~ 3.3 эВ, обозначенную IRL. Было обнаружено, что облучение электронным лучом приводит к увеличению количества ярких точек вблизи царапины, зарегистрированных на монохроматических КЛ картах с энергией фотонов 3.3 эВ. Данный экспериментальный факт находится в согласии с тем, что облучение электронным лучом стимулирует движение дислокаций в базисной плоскости, которое также может приводить и к взаимодействию дислокаций между собой с образованием новых структур. Образованные структуры характеризуются иным спектральным положением излучаемого света, а именно 3.3 эВ. Опыт по последовательному нанесению уколов индентора показал, что об-

разование светящихся точек не зависит от угла, под которым пересекаются дислокации. Обнаруженные в ПЭМ растянутые дислокационные узлы в местах пересечения а-винтовых дислокаций свидетельствуют в пользу того, что именно они ответственны за линию излучения 3.3 эВ. Стоит отметить, что данная спектральная линия имеет сложную структуру и состоит как минимум из двух неразрешённых линий. Температурные исследования показывают, что излучение с энергией 3.3 эВ пропадает при температурах выше 100 К.

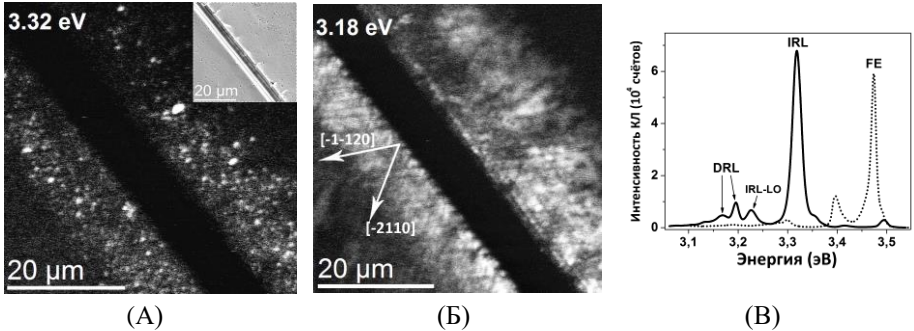


Рис. 5 КЛ монохроматические карты, снятые при энергии фотонов 3.32 эВ (А) и 3.18 эВ (Б). (В) Сплошная линия – спектр люминесценции ярких точек, представленных на рис. 5(А), пунктирная линия – спектр исходного кристалла. $T = 70$ К, $V_b = 10$ кВ, $I_b = 500$ нА

В главе 5 представлен подробный анализ причин дислокационной люминесценции (DRL) в GaN, а также их энергетического различия в полуизолирующих кристаллах GaN (3.3 эВ [8]) и в низкоомных кристаллах GaN (3.13-3.18 эВ [7,9]). Важным является факт, что структура ядер а-винтовых дислокаций является различной: так в полуизолирующем кристалле а-винтовые дислокации являются совершенными [8], в то время как в низкоомном – расщеплёнными, как показано в данной диссертационной работе. В приближении теории деформационного потенциала s-состояния минимума зоны проводимости в Γ точке не должны быть чувствительны к сдвиговым напряжениям, которые создаются ядром совершенной винтовой дислокации. При этом притягивающий потенциал представлен только для дырок в валентной зоне. Теоретические расчёты дырочных состояний в деформационном потенциале винтовой дислокации предсказывают значения меньше 0.14 эВ [10]. Чтобы объяснить подобное различие М. Albrecht и др.[8] и немногим позже I. Velabbas и др. [11] провели более тщательный расчёт, который показал наличие вклада вышележащих подуровней зоны проводимости в электронные состояния вблизи ядра дислокации.

Логично предположить, что дополнительный сдвиг в низкоэнергетическую сторону на 150 мэВ DRL линии в низкоомном GaN в сравнении с DRL в полуизо-

лирующих образцах связан с конкретными электронными свойствами ядра расщеплённой дислокации, как комплекса из кванторазмерного узкого дефекта упаковки (ДУ) и 30 градусных частичных дислокаций. Исходя из люминесцентных свойств ДУ [12], ДУ типа I2 может обеспечить дополнительное понижение энергии электронных уровней на величину порядка 150 мэВ. Образование квантовой ямы за счёт ДУ и наличие одномерных подзон частичных дислокаций дают суммарное понижение энергии электронных уровней, которое и приводит к суммарному сдвигу DRL излучения в низкоомных кристаллах GaN на величину порядка 300 мэВ. Предполагаемая схема оптических переходов для расщепленной дислокации представлена на рис. 6

Экспериментальные данные по температурной зависимости (Рис.4 (В)), несмотря на схожее поведение энергетического положения обеих линия DRL и свободного экситона, обнаруживают определённые различия в поведении интенсивности линий DRL друг относительно друга. Низкоэнергетическая компонента DRL_L доминирует в спектре при низких температурах, но быстро затухает с увеличением температуры, хотя более низкая энергия оптического перехода должна соответствовать более глубокому уровню и, следовательно, обладать большей стабильностью при повышении температуры.

С учётом поведения DRL компонент при повышении температуры была предложена следующая модель оптических переходов вблизи ядра расщеплённой дислокации. На рис. 6 учтено, что ядра двух 30° частичных дислокаций, ограничивающих полосу дефекта упаковки типа I2, состоят из различных атомов: ядро одной из дислокаций состоит преимущественно из атомов азота, другое – из галлия. Из-за наличия электрических полей, вызванных спонтанной поляризацией кристаллов GaN, и различно заряженными ядрами частичных дислокаций [11], энергетические уровни Ga^+ и N^- терминированных дислокаций будут различаться друг относительно друга. Деформационный и кулоновский потенциалы Ga-частичной дислокации вместе с уровнем дефекта упаковки формируют глубокий уровень для электронов (на рис. 6 обозначен как $E_{ду}$). В тоже время кулоновский и деформационный потенциалы формируют на N частичной дислокации глубокий уровень для дырок. Так как боровский радиус экситона в объёме GaN (примерно равен 3 нм) сопоставим с шириной дефекта упаковки, то волновые функции электронов и дырок, локализованных на частичных дислокациях, перекрываются достаточно для формирования вместе с ДУ квазиодномерной электронной структуры, и рекомбинация носителей происходит через совместные электронные состояния. В таком случае два хорошо различимых оптических перехода могут быть изображены на рис. 6: *пространственно прямой переход* между состояниями одной и той же дислокации (галлиевой), и *пространственно непрямой переход* с

электронных состояний галлиевой дислокации на дырочные состояния азотной дислокации.

В данной модели энергия непрямых переходов и их интенсивность должны быть чувствительны к ширине дефекта упаковки, тогда как для прямых переходов это будет неважно. Изменение ширины дефекта упаковки вдоль линий дислокаций действительно наблюдалось в ПЭМ на исследуемых в данной работе образцах, как и наблюдалось изменение формы и интенсивности низкоэнергетической

компоненты DRL_L на различных участках одной дислокации, в то время как форма Лоренц-подобной высокоэнергетической компоненты DRL_H была довольно стабильной.

Во втором разделе пятой главы рассматриваются возможные дислокационные реакции, приводящие к образованию растянутых узлов. Из данных по монокристаллическому КЛ картированию и результатов ПЭМ делается вывод о том, что в местах пересечения a -винтовых дислокаций образуются растянутые узлы. Смещение излучения дислокационных узлов в высокоэнергетическую сторону связано с тем, что размер DU начинает значительно превышать боровский радиус свободного экситона в GaN, и дислокационный узел начинает приобретать свойства протяжённых DU типа I2, а именно: спектральное положение, форма и полуширина люминесцентной линии.

В заключении работы сформулированы основные результаты:

1) Определены основные особенности распространения дислокаций в GaN при локальной пластической деформации базисной и призматической плоскостей. Как при индентировании, так и при нанесении царапин на базисные поверхности кристаллов GaN возникает двуслойная дислокационная структура, в верхнем слое которой происходит образование дислокационных петель в призматической системе скольжения, а в более глубоком слое – в базисной системе скольжения. При индентировании базисные петли распространяются на расстояния в несколько раз большее, чем призматические, в то время как у царапины длина базисных и призматических петель примерно равны.

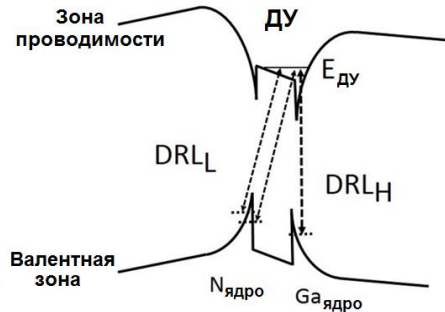


Рис. 6. Модель оптических переходов в ядре расщеплённой винтовой дислокации с учётом внутренних электрических полей

2) Установлено, что только прямолинейные сегменты а-винтовых дислокаций в базисной и призматической системах скольжения представлены собственной интенсивной полосой излучения с энергией излучения 3.15-3.18 эВ при температуре $T = 70$ К. Дислокационное излучение представлено явно выраженной дуплетной линией с шириной расщепления 30-35 мэВ с фоновными повторениями каждой из линий. Дуплетная структура является характеристикой одиночной дислокации, полуширина высокоэнергетической компоненты равна полуширине свободного экситона, в то время как полуширина низкоэнергетической компоненты является уширенной и состоит из двух неразрешённых линий. Спектр ДИ при деформации базисной и призматической плоскостей идентичен. ДИ при комнатной температуре представляет собой широкую полосу с энергией порядка 3.1 эВ и продолжает наблюдаться при нагреве образца до 420 К.

Совпадение поведения излучения свободного экситона и зависимостей энергетического положения ДИ, полуширины высокоэнергетической компоненты при изменении температуры, а также зависимости энергетического положения ДИ от механических напряжений свидетельствуют об экситонном происхождении ДИ.

3) Методами просвечивающей электронной микроскопии установлено, что свежевведённые а-винтовые дислокации в низкоомном GaN являются расщеплёнными на две 30° частичные дислокации с величиной расщепления 4-6 нм.

4) Результаты термического отжига, а именно сохранение достаточной интенсивности дислокационного излучения для её регистрации вплоть до 420 К и сохранение дислокационной люминесценции после отжига при температурах вплоть до 750 К являются прямым следствием атомного строения а-винтовых дислокаций.

5) При изучении структурных свойств пластически деформированных образцов в ПЭМ было обнаружено наличие растянутых дислокационных узлов в местах пересечения а-винтовых дислокаций, характерный размер (радиус) которых составляет примерно 15 нм. В тоже время точки пересечения а-винтовых дислокаций в катодолюминесцентных исследованиях представлены собственной линией излучения с энергией порядка 3.3 эВ при 70 К. Исходя из данных фактов следует, что источниками излучения с энергией 3.3 эВ, вероятнее всего, являются растянутые дислокационные узлы, представляющие собой 2D дефект упаковки типа I2, излучающий с той же энергией и имеющий схожую полуширину с протяжёнными дефектами упаковки I2 в GaN.

6) На основе экспериментальных данных и анализа литературных данных предложена модель оптических переходов в ядре расщепленной а-винтовой дислокации, описывающая наблюдаемые свойства дислокационного излучения и

предполагающая наличие пространственно прямых и непрямых переходов с общего электронного уровня дефекта упаковки на дырочные уровни азотной и галлиевой частичных дислокаций.

7) Высокая по сравнению с зонно-зонным переходом интенсивность дислокационной люминесценции при комнатной и более высоких температурах, а также устойчивость дислокационной структуры к высокотемпературному отжигу позволяет рассматривать это явление как кандидат для его использования при создании светоизлучающих приборов повышенной светоотдачи.

Список литературы

1. M. Albrecht Nonradiative recombination at threading dislocations in n-type GaN: Studied by cathodoluminescence and defect selective etching / Albrecht M., Weyher J. L., Lucznik B., Grzegory I., Porowski S. // *Appl. Phys. Lett.* 2008. Vol. 92, № 23. P. 231909.
2. N.A. Drozdov Recombination radiation on dislocations in silicon / Drozdov N.A., Patrin A.A., Tkachev V.D // *JETP Lett.* 1976. Vol. 23. P. 651–653.
3. V.D. Negrii Dislocation Structure and Motion in CdS Crystals / Negrii V.D., Osipyan Y.A., Lomak N. V. // *Phys. Status Solidi.* 1991. Vol. 126, № 1. P. 49–61.
4. A.N. Izotov Photoluminescence and Splitting of Dislocations in Germanium / Izotov A.N., Kolyubakin A.I., Shevchenko S.A., Steinman, E.A. // *Phys. Status Solidi.* 1992. Vol. 130. P. 193–198.
5. V. V. Kveder Influence of the splitting of dislocations on the g factor of holes in one-dimensional dislocation band / Kveder V. V., Shalynin A.I., Shtetnman E.A. // *JETP.* 1996. Vol. 83, № October. P. 829–833.
6. V.V. Kveder Dislocations in silicon and D-band luminescence for infrared light emitters / Kveder V.V., Kittler M. // *Mater. Sci. Forum.* 2008. Vol. 590. P. 29–56.
7. O.S. Medvedev Direct observation of luminescence of individual screw dislocations in GaN / Medvedev O.S., Vyvenko O.F., Bondarenko A.S., Voronkov V.V. // *12th Int. Work. Beam Inject. Assess. Microstruct. Semicond.* 2014. P. MoA4.
8. M. Albrecht Origin of the unusually strong luminescence of a -type screw dislocations in GaN / Albrecht M., Lymperakis L., Neugebauer O. // *Phys. Rev. B.* 2014. Vol. 241201, № 90. P. 1–4.
9. J. Huang Dislocation luminescence in GaN single crystals under nanoindentation / Huang J., Xu K., Fan Y.M., Wang J.F., Zhang J.C., Ren G.Q. // *Nanoscale Res. Lett.* 2014. Vol. 9, № 649. P. 1–7.
10. J.L. Farvacque Numerical determination of one-dimensional energy bands bound to dislocations / Farvacque J.L., Franc P. // *Phys. B Condens. Matter.* 1999. Vol. 274. P. 995–998.
11. I. Belabbas Core properties and mobility of the basal screw dislocation in wurtzite GaN: a density functional theory study / Belabbas I., Chen J., Heggie M.I., Latham C.D., Rayson M.J., Bridson P.R. // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* IOP Publishing, 2016. Vol. 24, № 7. P. 75001.
12. J. Lähnemann Luminescence associated with stacking faults in GaN / Lähnemann J., Jahn U., Brandt O., Flissikowski T., Dogan P., Grahn H.T. // *J. Phys. D. Appl. Phys.* 2014. Vol. 47, № 42. P. 423001.