

GaN/SiC 异质结的慢正电子研究^{*}

王海云^{1)†} 翁惠民²⁾ C. C. Ling³⁾

1) 南京邮电大学应用物理系, 南京 210003)

2) 中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230026)

3) 香港大学物理系, 香港 中国)

(2007 年 9 月 12 日收到, 2008 年 3 月 4 日收到修改稿)

通过对不同生长厚度 GaN/SiC ($n-n$) 的慢正电子研究, 发现在 GaN/SiC 的界面中存在大量各种缺陷并在界面两端形成两个不同方向的电场. 这些缺陷的产生和 SiC 衬底表面制备以及 GaN 和 SiC 不同的热膨胀系数有关. 而缺陷中大量的带状缺陷在界面中形成一个费米能级钉扎 (Fermi level pinning), 它的存在使界面中存在一定高度的势垒, 导致在界面两端的一定区域内形成两个不同方向的电场. 用 VEPFIT 模拟该电场的存在, 分四层 (GaN/Interface/SiC1/SiC2) 进行拟合, 得到了很好的拟合效果, 并可以给出电场的确定数值. 这些电场的存在对正电子的湮没产生了重要影响, 使得在 SiC 区域, 有电场的区域内正电子的有效扩散长度减小. 界面两端电场大小和界面的带电量以及界面宽度等信息有关, 故对该电场的研究可以为研究真实的界面层及其性质的可能应用提供有效的参考价值.

关键词: 正电子湮没, 缺陷, 半导体

PACC: 7340J, 6170

1. 引言

GaN 作为一种直接宽带隙半导体具有优良的化学稳定性、高热导系数、高熔点及较高的电子饱和速度, 是制造短波长高亮度发光器件、耐高温器件等的理想材料, 并且相继制造出了蓝、绿色发光二极管和蓝色激光器等光电子器件^[1-4]. GaN 基电子器件的应用领域也极为广泛, 有望在航空航天、高温辐射环境、石油勘探、雷达与通信、汽车电子化等方面发挥作用. 同时, 由于 GaN 基器件在高温环境下工作无需制冷器, 故 GaN 基器件将大有用武之地. 一般来说, GaN 基电子器件所用的 GaN 主要通过异质外延法生长在 SiC 或蓝宝石上. GaN/SiC ($n-p$) 异质结可以用来制作一些发射极-异质双极性晶体管 (emitter-base heterobipolar transistor)^[5-7]. $n-6H-SiC$ 也可以做 GaN 异质外延生长的导电衬底, 生长方向沿 $n-6H-SiC$ 的 (0001) 晶向^[8].

基于异质结构 GaN/SiC 的双极性晶体管比其他 III 族氮化物以蓝宝石为衬底所形成的异质结有明显的优越性. $6H-SiC$ 和 GaN 都具有良好的热稳定

性, 所以以 $6H-SiC$ 为基底生长 GaN, 由温度变化所引起的晶格错位对器件的影响就很小. 作为生长 GaN 的衬底, $6H-SiC$ 和 GaN 晶格匹配程度要更好. 尽管以 SiC 为生长的导电衬底有很多的优势, 但是依然存在着很大的不足, 在制备的过程中由于种种因素都会在界面中导入大量的缺陷从而严重影响器件的性能和质量, 所以研究这种异质结构的界面结构、性质等情况就变得越来越重要.

以往对界面的正电子研究中, 往往忽略了由于大量缺陷存在于界面形成一定的势垒, 从而形成一定形式的内置电场, 更忽略了电场的存在对正电子湮没的影响. 本文主要利用多普勒展宽技术来研究 GaN/SiC 的界面中的缺陷并对内置电场的大小及其存在对正电子湮没的影响作以初步探讨.

2. 实验与测量

本实验中样品由香港大学提供. 利用分子束外延法以 n 型 $6H-SiC$ (0001) 为衬底生长 GaN 薄膜, 共有两个样品, 每个样品 GaN 薄膜的厚度不同, 分别为 100 nm 和 30 nm. 样品在进行慢正电子测量之前

^{*} 南京邮电大学研究基金 (批准号: NY207010) 资助的课题.

[†] E-mail: wanghy7810@yahoo.com.cn

用丙酮、酒精在超声波中清洗 10—15 min, 然后在酸性溶液 (HCl/HF) 中去除表面氧化物. 单能慢正电子束测量在中国科学技术大学近代物理系核固体实验室完成, 正电子能量从 0 到 16 keV, 可以探测 GaN/SiC 内至少 500 nm 以内的信息. 实验中湮没的 γ 光子的信息采集由高纯 Ge 探测系统完成, 其中每个谱的计数率达到 10 万个左右. 所有的数据分析即 S - E 曲线的拟合由 VEPFIT 完成.

正电子湮没谱学对研究固体的电学以及缺陷性质非常有效^[9,10]. 近年来慢正电子技术的发展^[11]使正电子湮没技术可以用来研究诸如薄膜、界面以及近表面的微观结构^[12]等. 正电子湮没能谱通常通过线性参数 S 来研究, S 参数的变化主要受能谱中心区相对计数的影响, 因而能够反映正电子与低动量电子湮没的情况. 对不同的物相和微观结构, 电子动量分布不同, 特别是在有缺陷的地方, 电子密度减少, 其中高动量核心电子减少更多, 因而在缺陷区的湮没能谱中, 低动量电子贡献比重增大, 即此时的 S 参数变大. 可见 S 参数的变化与固体中物相和微观结构有密切关系, 考虑到统计精度, 一般要求每谱峰区计数达到或超过 10 万个左右. 实验测量正电子不同能量 E 所对应的 S 参数, 即 S - E 曲线. 通过 VEPFIT^[13], 可以获得不同深度处的缺陷浓度和有效扩散长度等, 从而分析样品近表面不同深度处的缺陷浓度等信息.

3. 结果与讨论

GaN 厚度为 100 nm, 30 nm GaN/SiC 样品的慢正电子测试结果既 S - E 曲线在图 1(a)(b) 中.

从实验所得到 S - E 曲线可以看出, 两个样品的 S - E 曲线中都包含一个比较明显的突起.

利用 VEPFIT 中的多层拟合模型 MODEL5, 选用三层模型 GaN/Interface/SiC 对数据进行拟合, 拟合过程中 S 参数主要由下式给出:

$$S(E) = F_s(E)S_s + F_{\text{GaN}}(E)S_{\text{GaN}} + F_i(E)S_i + F_{\text{SiC}}(E)S_{\text{SiC}}, \quad (1)$$

其中 $F_s(E)$, F_{GaN} , 以及 $F_i(E)$ 和 F_{SiC} 分别是正电子在表面、GaN 层、界面层以及本底 SiC 层湮没的比例因子. 拟合所得到的有效扩散长度由下式给出:

$$L_{\text{eff}} = [D_+ / (\lambda_b + \kappa_i)]^{1/2}, \quad (2)$$

其中 D_+ 是正电子在物质中的扩散系数, λ_b 是正电子在物质中的体湮没率, κ_i 是正电子的俘获率, 和

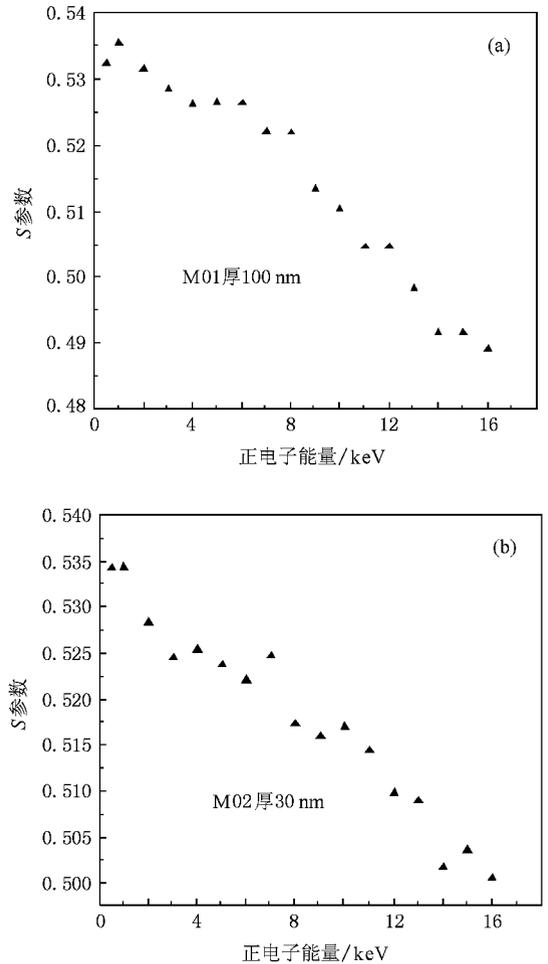


图 1 GaN 膜厚为 100 nm 和 30 nm 的 GaN/SiC S - E 曲线

对应的缺陷浓度 C_i 成正比, 为其关系为

$$k_i = \mu_i \times c_i.$$

在拟合过程中发现, 如果按照常规的做法进行拟合, 即假设正电子自由通过界面, 发现在实验曲线的突起部分总是得不到很好的拟合, 这就促使我们考虑模型的正确性.

在文献 [14] 中通过对 GaN/SiC (n-n) 做 I - V , C - V 和 DLTS 测试发现, 在 GaN/SiC 的界面存在一个比较大的势垒. 该势垒的形成一方面由 GaN 和 SiC 中导带位置的不同引起, 更重要的是因为在界面中, 由于大量的带状缺陷存在, 在界面中形成了一个费米能级钉扎 (Fermi level pinning). 它的形成, 使界面和 GaN, SiC 之间具有一定的势垒, 其高度大约为 0.5 eV.

这种存在于界面中的势垒会导致在界面两端产生电场, 而且电场方向相反. 根据这样的分析, 我们重新设计拟合模型, 由于 GaN 厚度很小, 我们认为

GaN 层完全耗尽,利用四层膜型来做拟合,四层分别为 GaN/Interface/SiC1/SiC2. 电场分布如图 2 所示,图中 SiC2 区域电场近似看作零.

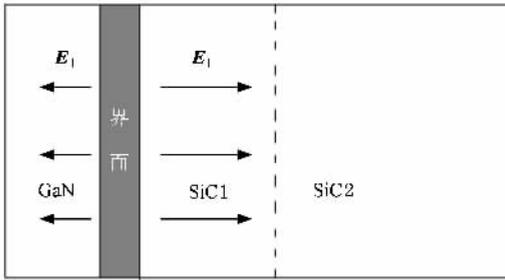


图 2 VEPFIT 多层拟合中所用的模型

表 2 实验样品利用四层模型 GaN/Interface/SiC1/SiC2 的拟合结果(有效扩散长度单位为 nm)

样品	S_s	S_{GaN}	S_1	S_{SiC1}	S_{SiC2}	L_{GaN}	L_1	L_{SiC1}	L_{SiC2}
100 nm	0.5379	0.4680	0.5622	0.5066	0.4716	34.2	3.9	244.4	251.7
Δ_{100}	(0.0013)	(0.0098)	(0.0082)	(0.0045)	(0.0019)	(21.2)	(3.0)	(169)	(29)
30 nm	0.5382	0.4358	0.5585	0.5238	0.4890	27.6	3.8	244.8	275.4
Δ_{30}	(0.0021)	(0.0213)	(0.0177)	(0.0025)	(0.0014)	(12.9)	(2.2)	(93.2)	(70.4)

电场值和 SiC1 的宽度分别是:在 100 nm 样品中: $E_{\text{GaN}} \approx 217 \text{ kVcm}^{-1}$, $E_{\text{SiC1}} \approx 85 \text{ kVcm}^{-1}$, 581 nm; 在 30 nm 样品中: $E_{\text{GaN}} \approx 169 \text{ kVcm}^{-1}$, $E_{\text{SiC1}} \approx 39 \text{ kVcm}^{-1}$, 599 nm.

从拟合结果可以看出,由于界面两端电场的存在,对正电子的湮没起到了一定的影响.分析有电场的和电场近似为零的 SiC1 和 SiC2 区域,比较其正电子的有效扩散长度,发现 SiC1 的有效扩散长度 244.4(244.8)nm 比 SiC2 区域的有效扩散长度 251.7(275.4)nm 要小一些.这主要是因为 SiC1 区域背离界面方向电场的存在.正是由于该电场,使该区的正电子在向表面扩散的过程中受到阻碍,所以有效扩散长度呈现出比没有电场的 SiC2 小的情况,这种情况也同时说明电场的存在对正电子湮没产生了一定的影响.

拟合结果中在界面处出现较高的 S 参数 S_1 -0.5622(0.5585)以及非常小的有效扩散长度 3.9(3.8)nm,这说明在界面中产生了大量的缺陷.这主要是由两方面的原因引起的:1) GaN 和 SiC 材料所具有的物理特性,如热膨胀系数、晶格常数等不尽相同,这样就会由于上述原因而出现应力释放,产生位错,从而大大降低 GaN/SiC 异质结的质量.2)

拟合中所用的参数如表 1.

拟合过程中,界面的值分别在 1—5 nm 之间变化,取拟合所得最佳值.通过加电场,实验曲线可以得到很好的拟合,如图 3 所示.拟合结果列于表 2.

表 1 VEPFIT 拟合中所使用各个参数

材料	GaN	SiC
密度 $\rho/\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	6.1	3.2
正电子平均注入深度计算参数		
$\alpha/\text{\AA}\cdot\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	360	360
M	2.0	2.0
N	1.6	1.6
M01 厚度 D/nm	100	0.5
M02 厚度 D/nm	30	0.5

生长过程中导电衬底 SiC 表面的不平整,在界面中形成大量的缺陷.例如当 6H-SiC 最上层堆垛顺序一定时,只会产生一种 AlN 堆垛顺序,如 6H-SiC 的堆垛顺序为 ABC 时,AlN 的堆垛顺序为 BCBC^[15],但是,实验中所用的 SiC 衬底表面是不平整的,存在一定的高度差,因此,就会分别在两个区域内形成 AlN 小岛,从而在相邻区域边界处产生线性缺陷(DPB 或者 IDB),其次每一个 AlN 小岛中的缺陷(堆垛层错)又会引起 c 轴小角度的倾斜和扭转,为了保持相邻小区域边界(即 c 轴发生小角度倾斜和扭转的区域)的连续性,会在边界处产生 $b = [0001]$ 的螺旋(threading dislocation)和 $1/3$ ^[16]的刃型位错,而螺旋位错和刃型位错的相互作用会产生 $1/3$ ^[16]的混和位错,在生长过程中有些位错会形成半环状而中止,但是很大一部分却会随着薄膜生长延伸至表面形成小凹陷.

以往很多研究工作都表明 GaN/SiC 的界面存在大量的缺陷,如透射电子显微镜对 GaN/SiC 界面的研究发现,利用不同的生长技术在 SiC 表面生长而成的 GaN 薄膜中,总是存在着诸如螺旋位错、堆垛层错(stacking faults),以及堆垛位错边界(stacking mismatch boundaries)等几种衍生缺陷^[17-20]. Poisson

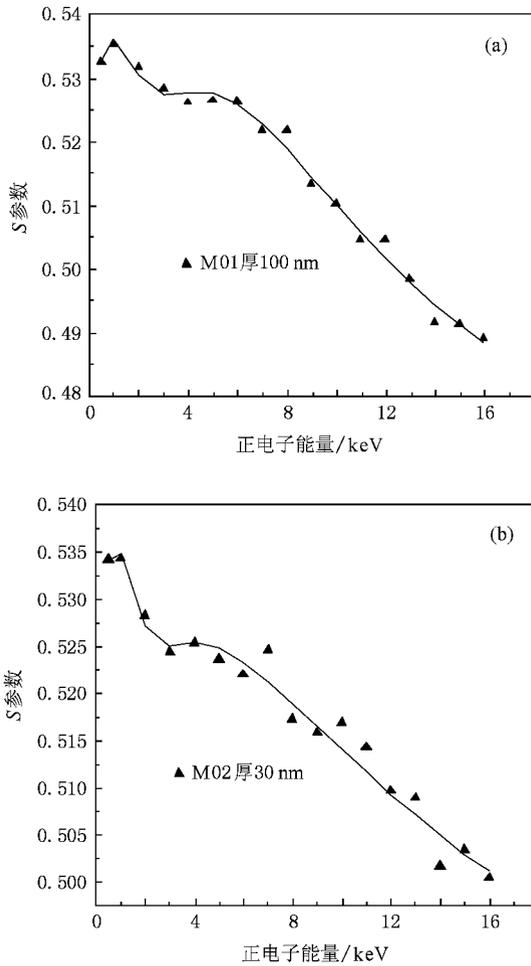


图3 加过电场后 GaN 膜厚为 100 nm 和 30 nm 的 GaN/SiC 拟合后的 $S-E$ 曲线(实线为拟合所得到的曲线)

等人^[21]在利用低压金属盐化学气相沉积法(LPMOCVD)制备 GaN/SiC 的过程中发现,导电衬底 SiC 的表面状态以及 GaN 的生长条件,如生长温度、膜层厚度以及应力等情况都会严重影响 GaN/SiC 的异质结的质量。在 n-GaN/n-6H-SiC 界面的研究中也发现在界面层中有大量的位错(dislocation zone)缺陷^[19,20]。Polyakov 等人^[22]利用电子束感应电流(EBIC)和阴极射线光致发光(MCL)发现在 GaN/SiC

(n-n)的界面中存在大量的错配位错等。该实验结果再次证明了在界面中存在大量的缺陷,从而也从侧面说明了我们所用模型的正确性。

拟合结果中还给出了电场的大小。对于两个不同的样品,电场情况分别为:对于 100 nm 的样品, $E_{\text{GaN}}:-217 \text{ kVcm}^{-1}$, $E_{\text{SiC}}:85 \text{ kVcm}^{-1}$;对于 30 nm 的样品, $E_{\text{GaN}}:-169 \text{ kVcm}^{-1}$, $E_{\text{SiC}}:39 \text{ kVcm}^{-1}$ 。分析拟合中所得到的电场大小,可以看出无论 GaN 膜厚多少,都存在一个整体上朝着表面方向的内置电场。拟合得到的电场的大小和界面两边势垒的高度以及电场作用的区域有关。这里要特别指出的是界面两端真实电场的情况比模型要复杂得多,电场值的大小和材料的制备、界面处由于大量缺陷存在所形成的费米能级的位置、以及 GaN 和 SiC 内载流子的浓度等众多因素有关。由模拟所得到的电场,能够为研究真实的电场提供一定的参考价值。

4. 结 论

本文利用慢正电子技术,运用 VEPFIT,通过分析由实验所得到的 $S-E$ 曲线来研究 GaN/SiC 的界面性质。按照常规的方法进行拟合,拟合结果和膜厚不能很好地符合。结合以前的一些研究,发现在界面中由于存在大量的带状缺陷,形成一个费米能级钉扎(Fermi level pinning),使界面中存在一定高度的势垒,并最终在界面两端的一定区域内形成两个方向的电场。用 VEPFIT 模拟该电场的存在,分四层(GaN/Interface/SiC1/SiC2)进行拟合,得到了很好的拟合效果,并给出了电场的定量值。该数值虽可能不够精确,但可以提供其他实验方法所不能给出的重要物理量的数量级。分析拟合结果,发现电场的存在对正电子的湮没产生了重要影响,导致在 SiC 区域,有电场的区域的正电子的有效扩散长度减小。这些结果对于深入了解异质结构界面物理性质及其可能的应用提供了重要的参考价值。

[1] Kawasuo Atsuo, Itoh Hisayoshi, Okada Sohei, Okumura Hajime 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 3232

[2] Kawasuo Atsuo, Itoh Hisayoshi, Okada Sohei, Okumura Hajime 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 5639

[3] Ling C C, Beling C D, Fung S 2000 *Phys. Rev. B* **62** 8016

Logothetidis S, Polatoglou H M, Petals J 1993 *Physica B* **185** 389

[5] Torvik J T, Leksono M, Pankove J I, Zeghbroeck B, VanNg H M, Moustakas T D 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 1371

[6] Polyakov A Y, Smirnov N B, Govorkov A V, Kozhukhova E A, Luo B, Kim J, Mehandru R, Ren F, Lee K P, Pearson S J, Osinsky A V, Norris P E 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3352

[7] Torvik J T, Leksono M W, Pankove J I, Heinlein C, Grepstad J K,

- Magee C 1999 *J. Elect. Mater.* **28** 234
- [8] Kribes Y , Harrison I , Tuck B , Cheng T S , Foxon C T 1998 *J. Crys. Growth.* **189/190** 773
- [9] Brandt W , Dupasquier A (eds) 1983 *Positron Solid State Physics : Proc. Int. School Physics Enrico Fermi ' , Course 83 (Varenna , 1981)* (Amsterdam : North-Holland)
- [10] Dupasquier A , Mills A P Jr (Ed) 1995 *Positron Spectroscopy of Solid : Proc. Int. School Physics Enrico Fermi ' , Course 125 (Varenna , 1993)* (Amsterdam : IOS)
- [11] Schultz P J , Lynn K G 1988 *Rev. Mod. Phys.* **60** 701
- [12] Ishii A (Ed) 1992 *Positrons at Metallic Surfaces* (Aedermannsdorf : Trans Tech.)
- [13] Van Veen A , Shcut H , de Vries J , Hakvoort A , Ijma M R 1990 *AIP conf. Proc. Ed*
- [14] Huang Y , Chen X D , Fung S , Beling C D , Ling C C , Dai X Q , Xie M H 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 122102
- [15] Sverdllov B N , Martin G A , Morkov H 1995 *Appl Phys Lett.* **67** 2063
- [16] Feng Q , Duan M , H Y 2003 *Acta Photonica Sinica.* **32** 1341
- [17] Danielsson E , Zetterling C M , Östling M , Nikolaev A , Nikitina I P , Dmitriev V 2001 *IEEE Trans. Elect. Dev.* **48** 444
- [18] Bendersky L A , Tsvetkov D V , Melnik Y V 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 1676
- [19] Nikitina I , Mosina G , Melnik Yu , Nikolaev A , Vassilevski K 1999 *Mater. Sci. Eng. B* **61-62** 325
- [20] Boscherini F , Lantier R , Rizzi A , Acapito F D , Mobilio S 1993 *Appl. Phys. Lett.* **74** 3308
- [21] di Forte-Poisson M-A , Romann A , Tordjman M , Magis M , Di Persio J , Jacques C , Vicente P 2004 *Journal of Crystal Growth.* **248** 533
- [22] Polyakov A V , Govorkov A V , Smirnov N B , Theys B , Jomard F , Nikitina I P , Nikolaev A E , Dmitriev V A 2000 *Solid-State Electronics* **44** 1955-1960

Study of GaN/SiC contact using slow positron beam^{*}

Wang Hai-Yun^{1)†} Weng Hui-Min²⁾ C. C. Ling³⁾

¹⁾ Department of Applied Physics , Nanjing University of Posts and Telecommunications , Nanjing 210003 , China)

²⁾ Department of Modern Physics , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China)

³⁾ Department of Physics , The University of Hong Kong , Hong Kong , China)

(Received 12 September 2007 ; revised manuscript received 4 March 2008)

Abstract

Using a slow positron beam and the program VEPFIT , we found there exists a barrier in the interface between GaN and SiC , which is caused by lots of band-like defects existing in it. The existence of the barrier induced two backing electric fields in diverse directions close to the interface. These fields can produce a longer diffusion length in the SiC region where no field exists compared with that of SiC region , which has an electric field at a set value. The fitted value of the electric field offers a good reference for studying the situation in a real the interface.

Keywords : positron annihilation , defect , semiconductor

PACC : 7340J , 6170

^{*} Project supported by the Nanjing University of Posts and Telecommunications Foundation , China (Grant No. NY207010).

[†] E-mail : wanghy7810@yahoo.com.cn