

p-GaN/p-Al_xGa_{1-x}N 异质界面处二维空穴气的性质及其对欧姆接触的影响*

王晓勇[†] 种明¹⁾ 赵德刚²⁾ 苏艳梅¹⁾

1) (中国科学院半导体研究所, 纳米光电子实验室, 北京 100083)

2) (中国科学院半导体研究所, 集成光电子国家重点实验室, 北京 100083)

(2012年4月12日收到; 2012年5月18日收到修改稿)

通过自洽求解一维泊松方程和薛定谔方程, 得到了 p-GaN/p-Al_xGa_{1-x}N 异质界面处的价带结构和二维空穴气 (2DHG) 分布, 研究了 Al 组分和压电极化效应对界面处 2DHG 性质的影响, 给出了异质界面处 2DHG 的面密度、浓度分布以及价带结构. 实验结果表明: 随着 Al 组分的增加, 异质界面处势阱明显加深变窄, 这使得 2DHG 的峰值密度加速上升, 也使得面空穴密度近直线上升; 压电极化效应也明显使界面处势阱加深变窄, 并且使费米能级向势垒顶端移动, 峰值浓度的位置向界面处移动; 另外, 价带带阶高度和受主杂质浓度对 2DHG 的影响较小. 利用这层 2DHG 制作的 p-Al_xGa_{1-x}N 的欧姆接触, 电流电压特性明显好于直接制作的电极, 说明了 2DHG 可以显著改善 p-Al_xGa_{1-x}N 的欧姆接触性能.

关键词: p-AlGa_xN, 压电极化, 二维空穴气, 欧姆接触

PACS: 73.20.-r, 73.40.Kp, 73.40.Ns

1 引言

近年来, 新型 III-V 族半导体材料 GaN 和 AlN 成为研究热点. 由于它们都是宽禁带直接带隙半导体, 可以通过调节二者的合金 Al_xGa_{1-x}N 不同的 Al 组分使禁带宽度在 3.39—6.2 eV 之间变化, 非常适合制作紫外光波段的光电子器件. 它们已经在 LED, HEMT 以及太阳盲紫外探测器等光电器件中得到广泛应用^[1-3]. 电阻率较低的 p 型 Al_xGa_{1-x}N 材料对制作这些光电子器件来说非常重要, 而制作性能良好的 p 型 GaN 及 Al_xGa_{1-x}N 的欧姆接触也是非常重要的. 由于 GaN 和 Al_xGa_{1-x}N 的 p 型掺杂缺乏一个合适的受主, 目前通常用 Mg 作为受主掺杂, 而 Mg 容易与 H 结合而失去活力, 加之 Mg 的电离能较大, 常温下离化程度低, 所以很难得到空穴浓度比较高的 p 型 GaN 及 Al_xGa_{1-x}N 材料. 也因如此, p

型 GaN 和 Al_xGa_{1-x}N 在与金属接触时, 很难形成良好的欧姆接触. 对于高 Al 组分的 p-Al_xGa_{1-x}N 来说更是如此.

由于极化效应, 在 p-GaN/p-Al_xGa_{1-x}N 异质结中存在密度较高的二维空穴气 (2DHG)^[4-7]. 为了得到较好的高 Al 组分 p-Al_xGa_{1-x}N 的欧姆接触, 有一种办法是在 p-Al_xGa_{1-x}N 上面生长一层 p 型 GaN^[8,9], 利用异质界面的 2DHG 来降低材料的电阻率. 本文正是基于这种异质结构, 从一维泊松方程和薛定谔方程自洽求解^[10-12]出发, 研究了 Al 组分及压电极化对 p-GaN/p-Al_xGa_{1-x}N 异质结构中 2DHG 的性质的影响, 并利用 2DHG 制作了性能较好的 p-Al_xGa_{1-x}N 欧姆接触.

2 计算模型

在受到应变时, 纤锌矿结构的 III 族氮化物具有很强的压电极化效应. 不仅如此, 由于纤锌矿结

* 国家自然科学基金 (批准号: 60776047) 和国家高技术研究发展计划 (批准号: 2007AA03Z401) 资助的课题.

[†] E-mail: wangxy08@semi.ac.cn

构的材料对称性不够高, 即使在没有受到应变时, 也存在较强的极化作用, 称之为自发极化. 在本文中, 用 P_{sp} 表示自发极化, 用 P_{pz} 表示压电极化. 如图 1 所示, 本文所用的材料是在蓝宝石衬底上沿 [0001] 方向生长 (即图中 z 轴方向), 在 p-GaN/p-Al_xGa_{1-x}N 界面 ($z = 0$) 两侧, p-Al_xGa_{1-x}N 没有应变材料中只有自发极化; 表层 p-GaN 受到压应变, 材料中同时存在自发极化和压电极化.

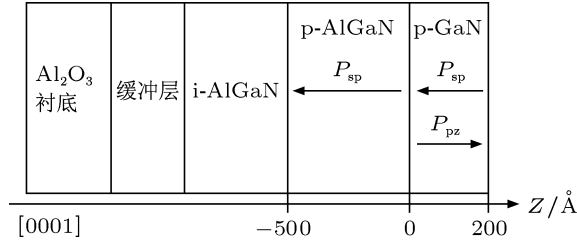


图 1 p-GaN/p-Al_xGa_{1-x}N 异质结构示意图

所以, 由极化引起的面电荷密度 σ 可表示为^[9]

$$|\sigma| = |P_{sp}^{AlGaN} - P_{sp}^{GaN} - P_{pz}^{GaN}|, \quad (1)$$

其中,

$$P_{pz}^{GaN} = 2 \times \frac{a^{AlGaN} - a^{GaN}}{a^{GaN}} \times \left(e_{31}^{GaN} - e_{33}^{GaN} \frac{C_{13}^{GaN}}{C_{33}^{GaN}} \right). \quad (2)$$

界面 $z = 0$ 处电场强度满足如下条件:

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 \varepsilon^{GaN} E^{GaN} + P_{sp}^{GaN} + P_{pz}^{GaN} \\ = \varepsilon_0 \varepsilon^{AlGaN} E^{AlGaN} + P_{sp}^{AlGaN}. \end{aligned} \quad (3)$$

在 (1) 到 (3) 式中, a 表示材料的晶格常数, e_{31} 和 e_{33} 表示材料的压电常数, C_{13} 和 C_{33} 表示材料的弹性常数, ε 表示材料的相对介电常数, ε_0 表示真空介电常数, E 表示材料中的电场. 参数的上标表示其所属材料.

沿材料的生长方向 [0001], 也即如图 1 所示的 z 轴方向, 空穴分布遵从一维薛定谔方程和泊松方程如下^[9-11]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) \psi_i(z) = E_i \psi_i(z), \quad (4)$$

$$\frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{d}{dz} \right) V(z) = -\rho(z), \quad (5)$$

其中,

$$\rho(z) = q \left(N_d^+ - N_a^- - n + p \right)$$

$$+ \sum p_i |\psi_i(z)|^2), \quad (6)$$

$$p_i = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left(1 + e^{\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T} \right)} \right). \quad (7)$$

在 (4) 到 (7) 式中, m^* 表示空穴的有效质量, \hbar 为普朗克常数, E_i 和 ψ_i 分别表示二维空穴的能级和相应的波函数, $V(z)$ 表示价带顶能量, $\rho(z)$ 表示总的空间电荷密度, N_d^+ 和 N_a^- 分别表示离化的施主浓度和离化的受主浓度, n 和 p 分别表示电子浓度和空穴浓度, p_i 表示子能级 i 上占有的电荷数, k_B 表示玻尔兹曼常数, T 表示温度 (本计算中均采用常温 300 K), E_F 表示费米能级.

在计算中, 对 p-GaN/p-Al_xGa_{1-x}N 异质结做了以下合理假设^[4,10-15]: 以费米能级作为能量零点; 空穴服从费米-狄拉克统计分布, 并设只有能量最低的三个能态占有电荷; 只考虑重空穴和轻空穴; 在远离异质结界面的地方, 半导体处于电中性, 二维空穴的波函数在两端边界处均趋于零; 少数载流子对空间电荷的影响可以忽略; Al_xGa_{1-x}N 中有效受主掺杂浓度为 $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, GaN 中有效受主掺杂浓度为 $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; 价带带阶为两者禁带宽度之差的四分之一.

根据以上假设, (6) 式和价带带阶分别可表示为

$$\rho(z) = q \left(-N_a^- + p + \sum p_i |\psi_i(z)|^2 \right), \quad (8)$$

$$\Delta E_v = 0.25 \times (E_g^{AlGaN} - E_g^{GaN}). \quad (9)$$

计算中采用的材料参数列举在表 1 中, 其中 Al_xGa_{1-x}N 的禁带宽度 E_g 按照二次插值计算, 取二次插值因子为 1.0 eV^[16], 其他各项参数均按照 GaN 和 AlN 的线性插值计算.

表 1 计算中所使用的参数列表

参数符号	GaN	AlN
E_g/eV	3.39 ^{a)}	6.2 ^{a)}
$a/\text{\AA}$	3.189 ^{a)}	3.112 ^{a)}
ε	8.9 ^{a)}	8.5 ^{a)}
m_{hh}/m_0	1.4 ^{a)}	3.53 ^{a)}
m_{lh}/m_0	0.3 ^{a)}	3.53 ^{a)}
$P_{sp}/\text{C}\cdot\text{m}^{-2}$	-0.029 ^{b)}	-0.081 ^{b)}
$e_{31}/\text{C}\cdot\text{m}^{-2}$	-0.35 ^{b)}	-0.50 ^{b)}
$e_{33}/\text{C}\cdot\text{m}^{-2}$	1.27 ^{b)}	1.79 ^{b)}
C_{13}/GPa	106 ^{b)}	108 ^{b)}
C_{33}/GPa	398 ^{b)}	373 ^{b)}

a) 取自文献 [17]; b) 取自文献 [16]

3 计算结果与分析

首先按照图 1 中所示结构, 计算了表层 GaN 处于完全应变和完全弛豫 (即考虑 P_{pz} 和忽略 P_{pz}) 两种情况下, 异质结中空穴的峰值浓度和面空穴密度随着 Al 组分的变化曲线, 结果如图 2 和图 3 所示.

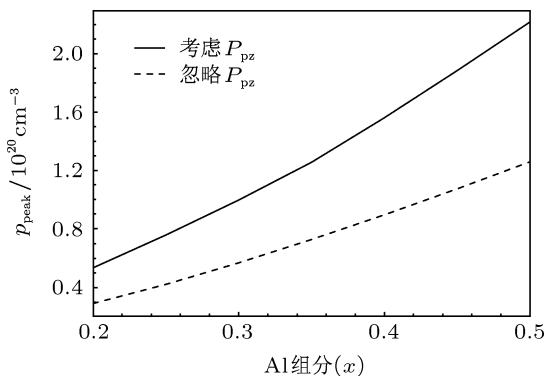


图 2 峰值浓度随 Al 组分的变化曲线

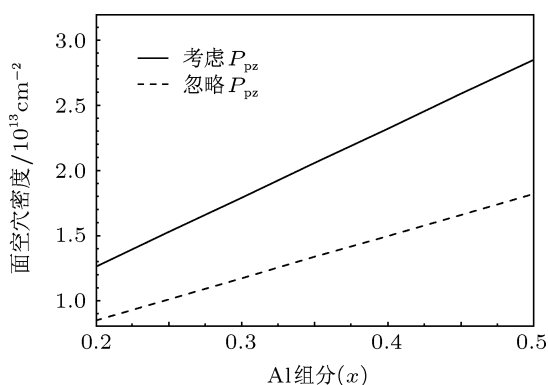


图 3 面电荷密度随 Al 组分的变化曲线

由图 2 和图 3 可以看出, 当 Al 组分从 0.2 增加到 0.5 时: 考虑 P_{pz} 时, 峰值浓度从 $5.34 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 增至 $2.22 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 增加幅度 $1.69 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 面空穴密度从 $1.26 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 增至 $2.85 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 增加幅度 $1.59 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$; 忽略 P_{pz} 时, 峰值浓度从 $2.89 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 增至 $1.26 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 增加幅度 $0.97 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 面空穴密度从 $8.48 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, 增加至 $1.82 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 增加幅度 $0.97 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. 明显地, 在考虑 P_{pz} 时, 峰值浓度和面空穴密度随 Al 组分的增加幅度要显著高于忽略 P_{pz} 时的增加幅度, 这说明 Al 组分越高受压电极化效应的影响越大.

随着 Al 组分的增加, 在考虑 P_{pz} 和忽略 P_{pz} 两种情况下, 峰值浓度均呈加速上升, 曲线都近似抛

物线; 面电荷密度均呈匀速上升, 曲线都近似直线. 这是因为 Al 组分的增加不仅导致界面处势阱加深, 也使势阱变窄. 为进一步研究 Al 组分对界面处势阱和 2DHG 分布的影响, 计算了在完全应变情况下不同 Al 组分对应的价带结构和 2DHG 分布, 结果如图 4 所示.

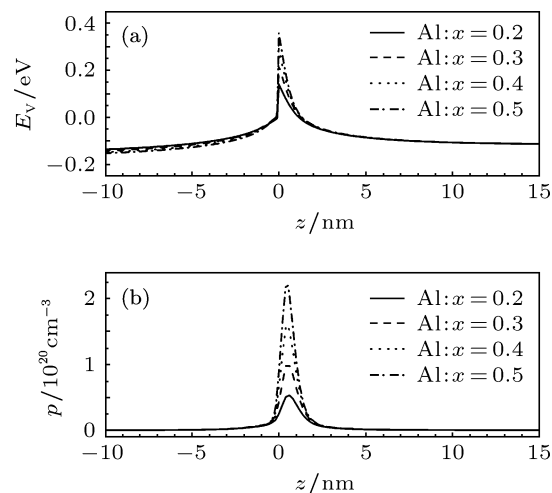


图 4 Al 组分对势阱和 2DHG 分布的影响 (a) 界面处价带结构图; (b) 2DHG 的分布图

由图 4 可以看出, 随着 Al 组分的增加, 势阱明显加深并且变窄 (当 Al 组分从 0.2 增加至 0.5 时, 势阱底由 0.141 eV 增加至 0.359 eV (以费米能级为能量零点)), 势阱对空穴的限制作用显著增加, 2DHG 的峰值浓度也显著增加. 这里的势阱加深来自于两方面: 一方面, Al 组分增加, 价带带阶增加, 使势阱加深; 另一方面, Al 组分增加, 应变增加, 压电极化效应增强, 也使势阱加深. 为进一步研究应变引起的压电极化效应对界面处势阱和 2DHG 的影响, 计算了 Al 组分为 40% 时考虑 P_{pz} 和忽略 P_{pz} 两种情况下的价带结构和 2DHG 的分布, 结果如图 5 所示.

由图 5 可以看出, 当考虑 P_{pz} 时, 界面处势阱加深, 阱底由 0.213 eV 增至 0.292 eV (以费米能级为能量零点), 这使得异质结界面处 2DHG 浓度显著增加, 峰值浓度由忽略 P_{pz} 时的 $8.98 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 增加到 $1.52 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 增加幅度 $6.22 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. 在势阱加深的同时, 势阱变窄, 费米能级更加靠近势垒顶端, 峰值位置向异质界面 ($z = 0$) 移动.

为研究其他因素对 2DHG 性质的影响, 进一步计算了价带阶和受主掺杂浓度对面空穴密度的影响. 以 Al 组分 40% 为例: 当价带带阶从 $0.15 E_g$ 增加到 $0.25 E_g$ 时, 面空穴密度仅增加了 $1.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$; 当 GaN 层有效受主掺杂浓度

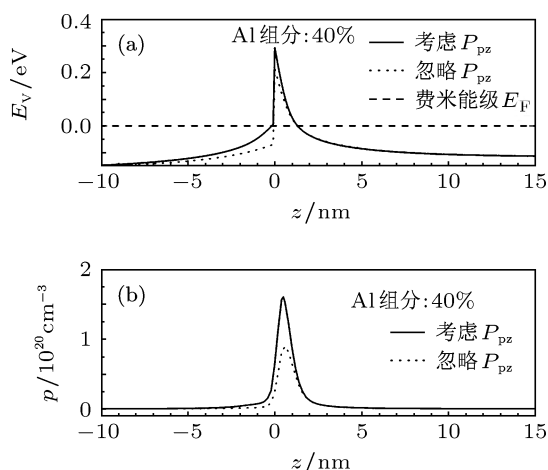


图5 压电极化对势阱和二维空穴的影响 (a) 界面处价带结构图; (b) 二维电子气的分布图

从 $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 增加到 $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时, 面空穴密度增加了 $1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$; 当 AlGa_{0.4}N 层有效受主掺杂浓度从 $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 增加到 $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时, 面空穴密度增加了 $1.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. 计算结果表明: p-Al_xGa_{1-x}N 层的受主掺杂浓度对 2DHG 的

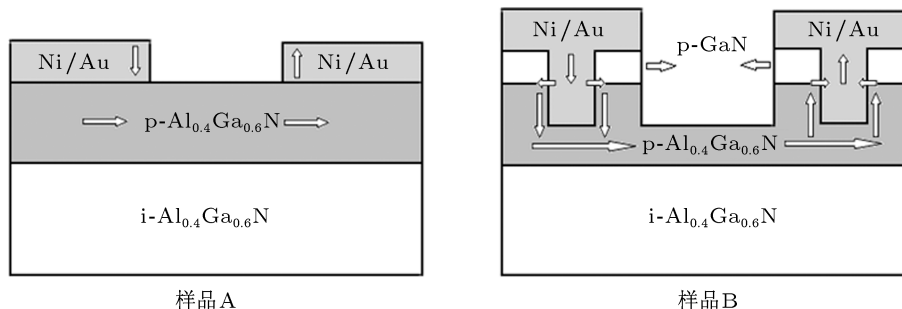


图6 样品 A 和样品 B 电极结构示意图

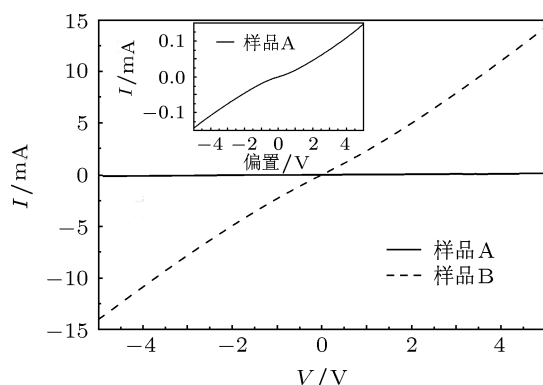


图7 两个样品的 $I-V$ 特性曲线插图为样品 A 的 $I-V$ 特性曲线

如图 6, 在样品 A 中如箭头所示为自由载流子从一侧电极经表层 p-Al_xGa_{1-x}N 流向另一侧电极;

影响要大于 p-GaN 层掺杂深度的影响; 与 Al 组分及压电极化效应相比, 2DHG 受价带带阶和受主掺杂浓度的影响要小很多.

4 欧姆接触实验

本实验利用这种异质界面存在的 2DHG 制作了 p-Al_xGa_{1-x}N 的欧姆接触.

实验用到两个样品, 分别为样品 A 和样品 B, 其材料结构如图 1 所示. 材料中的 Al 组分为 40%. 样品 A 和样品 B 取自同一个样片上. 样品 A 将表面的 p-GaN 帽层刻蚀掉, 然后上面制作电极; 样品 B 的电极制作方法如图 6 所示. 两个样品的电极均采用剥离工艺制作, 成分相同, 为 Ni(20 nm)/Au(20 nm), 在氮气氛围中 600 °C 时退火 10 min, 样品 B 采用氩离子刻蚀, 刻蚀深度约为 30 nm. 样品 A 和样品 B 上两电极之间的间隔均为 10 μm.

而样品 B 中如箭头所示为自由载流子从一侧电极经过 2DHG 层和 p-Al_xGa_{1-x}N 层流向另一侧电极.

制作好电极后, 分别对两个样品进行了电流-电压 ($I-V$) 特性的测试, 得到如图 7 所示的曲线. 由图 7 可以看出: 在 5 V 偏压下, 样品 A 的电流为 0.144 mA, 而样品 B 的电流为 13.9 mA; 并且样品 B 的 $I-V$ 曲线比样品 A 更近似直线. 因此, 样品 B 的欧姆接触特性明显好于样品 A, 这说明了异质界面处这层 2DHG 可显著改善 p-Al_xGa_{1-x}N 的欧姆接触性能.

5 总结

本文从一维泊松方程和薛定谔方程出发, 研究

了 Al 组分及压电极化对 p-GaN/p-Al_xGa_{1-x}N 异质结中 2DHG 的影响, 并利用这层 2DHG 制作了性能较好的 p-Al_xGa_{1-x}N 欧姆接触. 实验结果表明: Al 组分和压电极化效应对 2DHG 影响比较大, 随着 Al 组分的增加, 界面处势阱加深变窄, 导致 2DHG 的峰值密度加速上升, 面电荷密度近直线上升; 压电极化效应也明显使势阱加深变窄, 并且使费米能级

向势垒顶端移动峰值浓度的位置向界面处移动; 另外, 价带带阶高度和受主掺杂浓度对 2DHG 的影响较小. 利用这层 2DHG 制作的 p-Al_xGa_{1-x}N 的欧姆接触, *I-V* 特性明显好于直接制作的电极, 说明了 2DHG 可以显著改善 p-Al_xGa_{1-x}N 的欧姆接触性能.

- [1] Norimichi N, Hirayama H, Yatabe T, Kamata N 2009 *Phys. Status Solidi C* **6** S459
- [2] Cheng X X, Wang Y 2010 *Solid-State Electronics* **54** 1300
- [3] Biyikli N, Kimukin I, Aytur O, Ozbay E 2004 *IEEE Photon. Technol. Lett.* **16** 1718
- [4] Lee S N, Jang T, Son J K, Peak H S, Sakong T, Yoon E, Nam O H, Park Y 2006 *J. Cryst. Growth* **287** 554
- [5] Hackenbuchner S, Majewski J A, Zandler J, Vogl P 2001 *J. Cryst. Growth* **230** 607
- [6] You D, Xu J T, Tang Y W, He Z, Xu Y H, Gong H M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6600 (in Chinese) [游达, 许金通, 汤英文, 何政, 徐运华, 龚海梅 2006 物理学报 **55** 6600]
- [7] Nakajima A, Sumida Y, Dhyani M H, Kawai H, Sankara Narayanan E M 2010 *Appl. Phys. Express* **3** 121004
- [8] Arulkumaran S, Egawa T, Ishikawa H 2005 *Jpn. J. Appl. Phys.* **44** 2953
- [9] Lin Y J 2006 *Jpn. J. Appl. Phys.* **45** L86
- [10] Rashmi Kranti A, Haldar S, Gupta R S 2002 *Solid-State Electronics* **46** 621
- [11] Tan I H, Snider G L, Chang L D, Hu E L 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 4071
- [12] Ando T 1982 *J. Phys. Soc. Japan* **51** 3893
- [13] Stern F, Dassarma S 1984 *Phys. Rev. B* **30** 840
- [14] Kong Y C, Zheng Y D, Chu R M, Gu S L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1756 (in Chinese) [孔月婵, 郑有焱, 储荣明, 顾书林 2003 物理学报 **52** 1756]
- [15] Yu L 2006 *Semiconductor Heterostructure Physics* (2nd Edn.) (Beijing: Science Press) pp30–40, 119–137, 271–306 (in Chinese) [虞丽 2006 半导体异质结物理 (第二版) (北京: 科学出版社) 第 30—40 页, 第 119—137 页, 第 271—306 页]
- [16] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 5815
- [17] Levinshstein M E (Translated by Yang S R) 2003 *Properties of Advanced Semiconductor Materials* (Beijing: Chemical Industry Press) pp1, 2, 42, 43 (in Chinese) [Michael E Levinshstein 著, 杨树人译 2003 先进半导体材料性能与数据手册 (北京: 化学工业出版社) 第 1, 2 页, 第 42, 43 页]

Two-dimensional hole gas in p-GaN/p-Al_xGa_{1-x}N heterojunctions and its influence on Ohmic contact*

Wang Xiao-Yong^{1)†} Chong Ming¹⁾ Zhao De-Gang²⁾ Su Yan-Mei¹⁾

1) (Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Nano-Optoelectronics Laboratory, Beijing 100083, China)

2) (Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, State Key Laboratory of Integrated Optoelectronics, Beijing 100083, China)

(Received 12 April 2012; revised manuscript received 18 May 2012)

Abstract

In this paper, the characteristics of the two-dimensional hole gas (2DHG) in p-GaN/p-Al_xGa_{1-x}N heterojunction is investigated in detail, based on self-consistent solutions of one-dimensional Poisson and Schrödinger equations. The valence band structures and the 2DHG distributions are calculated in the cases of different Al components and piezoelectric polarization effects. Then, the influences of Al components and piezoelectric polarization effects on 2DHG are analysed specifically. The results show that with the increase of Al component, the quantum well at the heterojunction interface turns deeper and narrower, which leads to an accelerated growth of the 2DHG peak density and a line increase of the 2DHG sheet concentration. Furthermore, piezoelectric polarization effects also make the quantum well at the heterojunction interface deeper and narrower, at the same time, the Fermi level moves close to the top of the barrier and the location of peak density moves close to the heterojunction interface. In addition, the influences of valence band offset and acceptor doping concentration on 2DHG are relatively small. Ohmic contact of p-Al_xGa_{1-x}N is fabricatea with the 2DHG, and its *I-V* characteristic is much better than that without the 2DHG, which indicates that the 2DHG can significantly improve the performance of p-Al_xGa_{1-x}N ohmic contact.

Keywords: p-AlGa_xN, piezoelectric polarization, two-dimensional hole gas, Ohmic contact

PACS: 73.20.-r, 73.40.Kp, 73.40.Ns

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60776047) and the National High Technology Development Program of China (Grant No. 2007AA03Z401).

† E-mail: wangxy08@semi.ac.cn