

# AlN-Si(111) 异质结构界面陷阱态研究\*

周春红<sup>†</sup> 郑有 邓咏楨 孔月婵 陈 鹏 席冬娟  
顾书林 沈 波 张 荣 江若琰 韩 平 施 毅

(南京大学江苏省光电信息功能材料高技术研究重点实验室 物理系, 南京 210093)

(2003 年 11 月 3 日收到, 2004 年 2 月 17 日收到修改稿)

利用 Al-AlN-Si(111) MIS 结构电容-频率谱研究了金属有机化学气相沉积法生长的 Si 基 AlN 的 AlN-Si 异质结构中的电荷陷阱态. 揭示了 AlN-Si 异质结构界面电荷陷阱态以及 AlN 层中的分立陷阱中心. 结果指出: AlN 层中存在  $E_t - E_v = 2.55\text{eV}$  的分立陷阱中心; AlN-Si 界面陷阱态在 Si 能隙范围内呈连续分布, 带中央态密度最低,  $N_{ss}$  为  $8 \times 10^{11}\text{eV}^{-1}\text{cm}^{-2}$ , 对应的时间常数  $\tau$  为  $8 \times 10^{-4}\text{s}$ , 俘获截面  $\sigma_n$  为  $1.58 \times 10^{-14}\text{cm}^2$ ; 在 AlN 界面层存在三种陷阱态, 导致 Al-AlN-Si 异质结构积累区电容的频散.

关键词: 界面陷阱态, AlN-Si, 电容-频率谱

PACC: 7280E, 7340L, 7320D

## 1. 引 言

AlN(氮化铝)是 III 族氮化物宽带隙半导体中带隙宽度最宽(6.2eV)、压电效应最强的一种新型半导体材料. 它不仅与 GaN 等其他 III 族氮化物半导体一样, 可用于发展短波长光电子器件及高温高频电子器件, 还有其独特的技术应用价值, 已成为最近的研究热点, 各种 AlN 器件已陆续问世. 例如: 用宽带隙的晶态 AlN 薄膜作为绝缘层取代  $\text{SiO}_2$ , 发展 MIS 场效应器件<sup>[1]</sup>、MIS 结构氢传感器<sup>[2]</sup>、AlN 声表面波器件<sup>[3,4]</sup>等. 这些器件通常都是以 Si 单晶为衬底, 采用金属有机化学气相沉积(MOCVD)法或分子束外延(MBE)异质外延晶态 AlN 薄膜形成的 AlN-Si 异质结构.

由于衬底 Si 和 AlN 间的失配率达 20% 左右, 而且在 MOCVD 法高温(1100℃)生长过程中会有一些 Si 原子和 O 原子通过扩散进入 AlN 层, 从而在 AlN-Si 界面引入载流子陷阱态, 并在 AlN 薄膜中引入分立陷阱中心, 严重影响了 AlN-Si 异质结构及相关器件的性能, 因此, 研究 AlN-Si 异质结构的界面陷阱态, 对提高 AlN 的晶体质量, 改善器件的性能,

有十分重要的意义, 然而目前对这方面的研究还很少. 本文利用 Al-AlN-Si(111) MIS 结构的电容-频率谱对 AlN-Si 异质结构的界面特性进行了系统研究, 揭示了 MOCVD 法生长的 AlN-Si 异质结构界面以及 AlN 层中陷阱态, 给出了 AlN-Si 异质结构界面陷阱态密度、时间常数, 以及俘获截面在 Si 带隙能量范围内的分布, 并提出了 AlN 分立陷阱中心和陷阱态的产生机理.

## 2. 样品制备与测量

### 2.1. Al-AlN-Si MIS 结构样品制备

样品采用 MOCVD 法在电阻率为  $15\Omega \cdot \text{cm}$ 、晶向为(111)的 n 型 Si 上生长的晶态 AlN 薄膜<sup>[5]</sup>. 图 1 为 AlN-Si(111)结构的 x 射线衍射谱图. 从图 1 可以看到只存在 AlN(0002)和 AlN(0004)衍射峰, AlN(0002)的半高宽为  $2\theta'$ , 表明 AlN 薄膜有良好的晶体质量. 然后用真空热蒸发在 AlN 薄膜上淀积金属 Al 膜, 光刻制成直径为 0.27mm 的 Al 点制成 Al-AlN-Si MIS 结构电容器.

\* 国家重点基础研究发展规划项目(批准号: G20000683)、国家自然科学基金重点项目(批准号: 60136020 和 60290080)和国家高技术研究发展计划(批准号: 2002AA305304)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: xdxu@nju.edu.cn

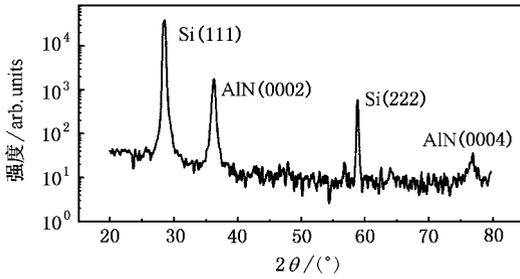


图1 AlN-Si(111)结构的x射线衍射谱图

## 2.2. Al-AlN-Si MIS 电容-频率谱测量

采用 Agilent 4284A  $C-V$  测试仪测量样品的电容-频率谱,测试频率范围为 40Hz—1MHz.

图2为 Al-AlN-Si MIS 结构示意图及该结构 1MHz 时的典型  $C-V$  曲线.可以看出以 AlN 为绝缘层的 MIS 结构高频  $C-V$  特性与以  $\text{SiO}_2$  为绝缘层的 MOS 结构  $C-V$  特性有类似的变化规律,有积累区、耗尽区、反型区,积累区和反型区的电容都趋于饱和.

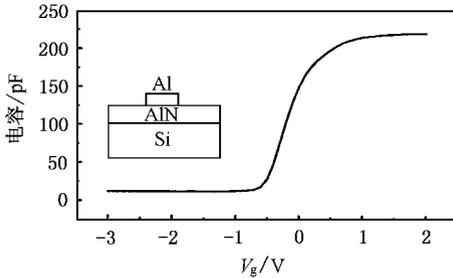


图2 Al-AlN-Si(111)结构图及1MHz时的C-V特性曲线

从 MIS 结构  $C-V$  特性知道,耗尽区范围内 MIS 电容反映了界面陷阱态参与电荷俘获与发射的物理过程.因此,我们测量了 Al-AlN-Si MIS 样品耗尽区以偏压作为参变量的电容-频率依赖关系,即“MIS 电容-频率谱”,如图3所示.由此,研究 AlN-Si 异质结构界面陷阱态.

MIS 结构  $C-V$  积累区电容是反映绝缘层的介质电容,对理想绝缘体应是恒定电容.但本项研究是以宽禁带(6.2eV)半导体 AlN 作为介质层,虽然它有半绝缘的性质,但作为半导体会存在电荷陷阱态,从而参与积累区 AlN 介质电容的电荷交换过程.测量了积累区 AlN 层电容-频率谱,用来研究 AlN 中的陷阱态.

此外, MIS 结构  $C-V$  反型区电容反映界面层少

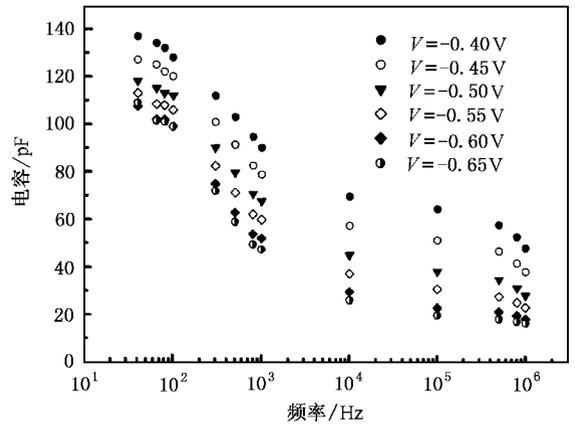


图3 Al-AlN-Si(111) MIS 结构耗尽区电容-频率谱

数载流子热产生的物理过程,它包含体产生与深陷阱中心的少数载流子热产生过程.为探测 AlN-Si 界面层深陷阱中心,测量了反型区以频率作为参变量的变频  $C-V$  特性,用以研究 AlN-Si 界面层的深陷阱中心.

## 3. 结果与讨论

### 3.1. 界面陷阱态

半导体中费米能级的位置决定了电子能级的填充状态.当对 Al-AlN-Si(111) MIS 器件施加偏压后,半导体的费米能级  $E_f$  相对于界面态能级的位置发生变化,界面态电荷将随之变化,具体表现为一个与界面态密度和界面态时间常数有关的电容,即界面态电容.图4为 Al-AlN-Si(111) MIS 结构分别在热平衡、正偏压、反偏压状态的能带图.

根据 Shockly-Read 关于复合中心的统计理论,可得界面陷阱态电容的具体表达式为<sup>[6]</sup>

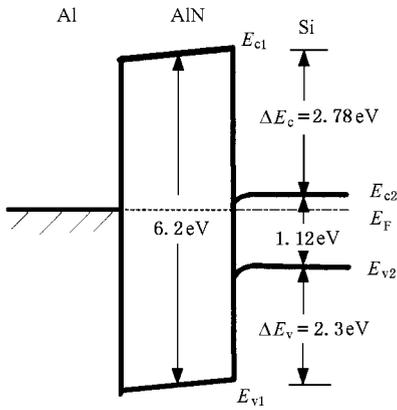
$$C_p(\omega, t) = C_p^0 \frac{\arctan(\omega\tau)}{\omega\tau}, \quad (1)$$

其中

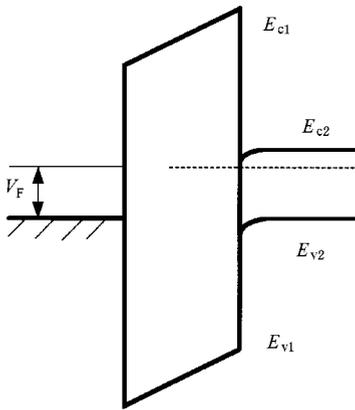
$$C_p^0 = qAN_{ss}, \quad (2)$$

$\omega$  为测试信号角频率,  $A$  为金属电极面积,  $N_{ss}$  为界面陷阱态密度,  $\tau$  为时间常数.

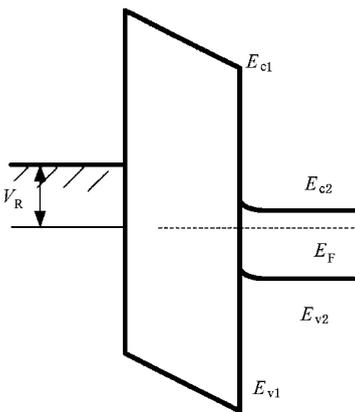
低频时由于界面陷阱态电荷发射和俘获电子能随频率变化,  $C_p(\omega, t)$  趋于定值  $C_p^0$ ; 高频时界面陷阱态电荷不能随信号变化,  $C_p(\omega, t)$  趋于零.因此在  $C_p(\omega, t)-f$  曲线中形成一个台阶.时间常数越小,台阶处的频率越高;反之,时间常数越大,台阶处



(a) 热平衡时的能带图



(b) 正偏压时的能带图



(c) 反偏压时的能带图

图4 Al-AIN-Si MIS 结构能带图

界面态对电子的俘获截面  $\sigma_n$  为

$$\sigma_n = (\tau v_{th} N_D)^{-1} \exp\left(-\frac{qV_s}{KT}\right), \quad (3)$$

其中  $v_{th}$  为电子热运动速度,  $N_D$  为掺杂浓度,  $V_s$  为半导体表面势。

对于理想的 Al-AIN-Si MIS 结构, 外加偏压  $V_G$  的一部分降落在 AIN 层内, 一部分作用于半导体表面, 所以 Al-AIN-Si MIS 结构的总电容  $C$  为 AIN 层电容  $C_{AIN}$  和表面空间电荷层电容  $C_D$  的串联组合. 当在 AIN-Si(111) 界面存在连续分布的界面态时, 界面态电容  $C_p$  与  $C_D$  并联后再与  $C_{AIN}$  串联<sup>[7]</sup>. 耗尽区 MIS 结构的等效电路如图 5(a) 所示. 图 5(b) 为简化后的等效电路. 图 5 中  $C_p$  和  $C_D$  分别为界面陷阱态等效并联电导和等效并联电容,  $C_M$  和  $G_M$  为等效电路总电容和总电导, 其中  $C_M, G_M$  可从实验直接测量得到. 高频时界面态电容  $C_p(\text{HF})=0$ . 利用  $C_M$  和  $G_M$ , 经过变换可得界面态电容  $C_p$  随频率的变化为

$$C_p(\omega) = C_{AIN}(\omega) \left\{ \frac{1}{\frac{C_{AIN}(\omega)}{C_M(\omega)} - 1} - \frac{1}{\frac{C_{AIN}(\omega)}{C_M(\text{HF})} - 1} \right\}. \quad (4)$$

利用(4)式即可由实验测出的  $C_M$  求出  $C_p$ . 因此由 Al-AIN-Si MIS 结构耗尽区的电容-频率谱, 即可得到对应于等偏置电压下的耗尽区界面陷阱态电容-频率( $C_p$ - $f$ )曲线. 图 6 分别为耗尽区偏压为  $-0.45$  和  $-0.60\text{V}$  时的典型电容-频率曲线. 从图 6 可以看出, 理论与实验符合较好. 在耗尽区取多个不同偏压值进行拟合, 则可得耗尽区界面态密度、时间常数、俘获截面等在 Si 带隙能量范围内的分布, 如图 7(a)~(c) 所示. 从图 7(a) 可以看出, 在导带底附近, 界面陷阱态密度最高, 为  $9.9 \times 10^{11} \text{eV}^{-1} \text{cm}^{-2}$ , 在禁带中央, 界面陷阱态密度最低, 为  $8.0 \times 10^{11} \text{eV}^{-1} \text{cm}^{-2}$ . 图 7(b) 表明在 Si 禁带中界面态时间常数随能量线性变化, 在靠近导带底附近, 界面态与导带交换电子速度最快, 时间常数最小, 为  $6.0 \times 10^{-4} \text{s}$ ; 在禁带中央处, 界面态与导带交换电子速度最慢, 时间常数最大, 为  $8 \times 10^{-4} \text{s}$ . 从时间常数看, 该界面态为慢陷阱态.

### 3.2. AIN-Si 界面分立陷阱中心

图 8 为 Al-AIN-Si MIS 结构反型层的变频  $C$ - $V$  特性, 可以看到低频时从  $100\text{Hz}$  开始在偏压  $-0.98\text{V}$  的位置  $C$ - $V$  曲线出现台阶, 而且台阶只在低频时出

的频率越低. 根据台阶的位置即可求出时间常数  $\tau$ , 同时根据(2)式, 由  $C_p^0$  可求出界面态密度  $N_{ss}$ . 因此通过拟合同一偏压下不同频率时的界面陷阱态电容值, 可以得到界面态密度和时间常数.

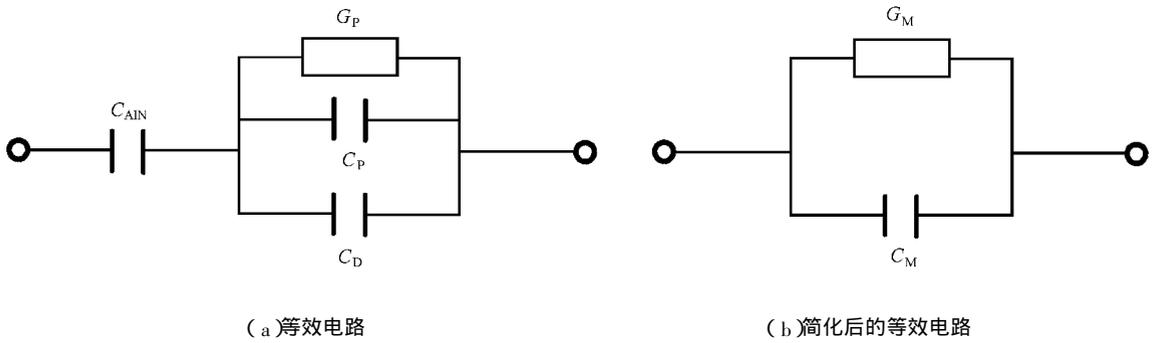


图5 Al-AIN-Si(111) MIS 结构等效电路图

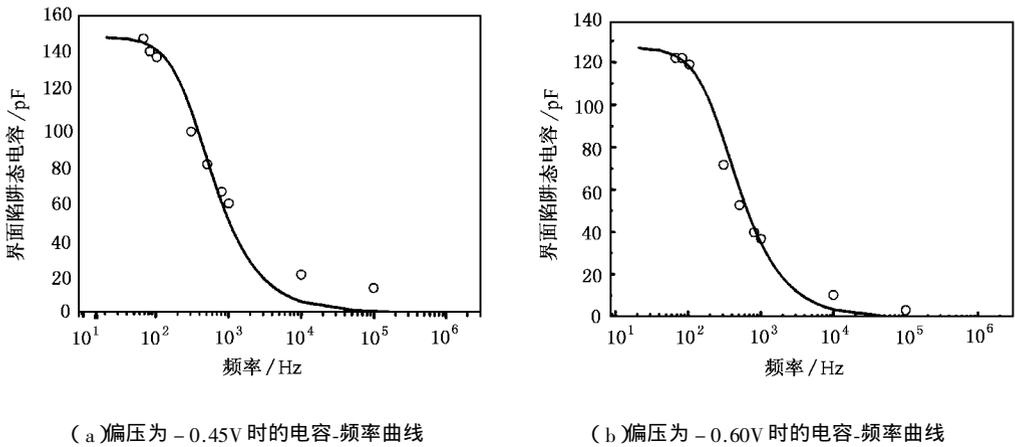


图6 不同偏压下的电容-频率曲线 ○为实验值, —为理论拟合结果

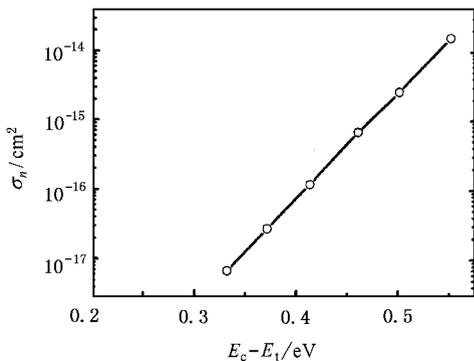
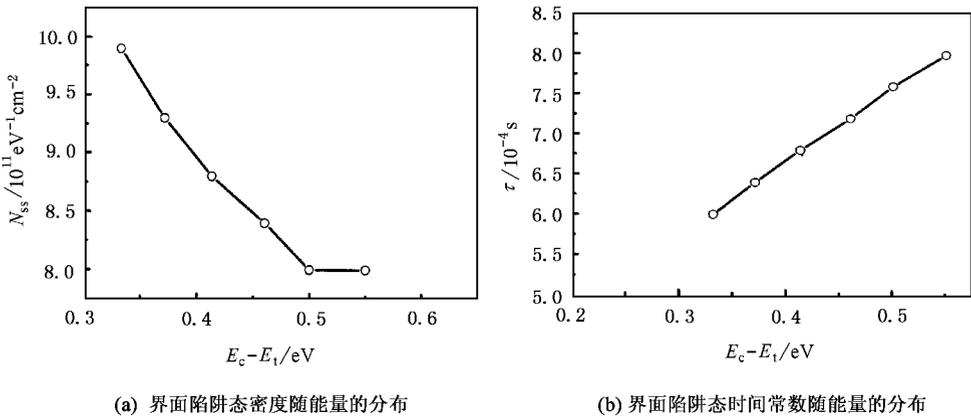


图7 界面陷阱态密度、时间常数和俘获截面随能量的分布



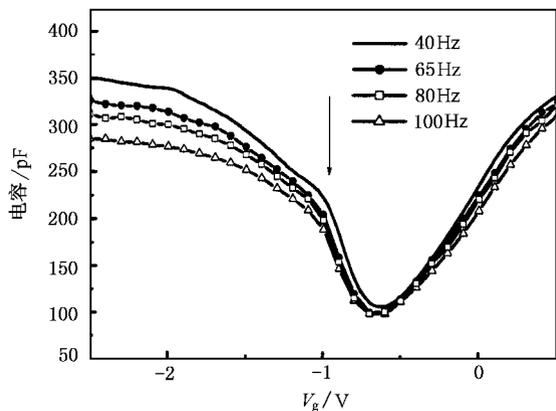


图 8 Al-AlN-Si MIS 结构 C-V 特性低频台阶

现,高频时并不出现.这是由于界面存在高浓度分立的深陷阱能级,该能级在较低频率时才能随信号变化,参与发射和俘获电子,从而对电容有贡献.经计算可知,分立深能级位于 AlN 价带  $E_{v1}$  上 2.55eV 位置.

为了进一步弄清该深能级的来源,测量了 AlN-Si 样品在常温下的光荧光 (PL) 谱,如图 9 所示.从图 9 可以看出,常温下 PL 谱在 475nm 处呈一宽发光峰,峰值对应能量为 2.61eV,这说明 MOCVD 法生长的 AlN-Si 薄膜存在深陷阱中心,能级为  $E_t - E_v = 2.61\text{eV}$ .这与从 MIS 电容-频率谱法得出的 AlN-Si 界面分立深能级位于 AlN 价带上方 2.55eV 处基本符合,这表明两种方法测得的是同一种分立深能级,因此,可以认为 AlN-Si 界面分立深能级位于 AlN 层内. MOCVD 法生长 AlN 薄膜过程中产生的 N 空位及扩散进入 AlN 层的 O 原子可能是产生该分立深能级的原因.

### 3.3. AlN 界面层陷阱态

图 10 为积累区电容-频率谱,可以看出在积累区电容随着频率色散,有三个台阶 I, II, III 表明存在不同的载流子陷阱态.这种以 AlN 为绝缘层的 MIS 结构积累区电容随频率色散的现象已被多位作者发现<sup>[8,9]</sup>,但均未做进一步的分析.对于理想的情况,AlN 是一良好的绝缘层,则 Al-AlN-Si MIS 结构积累区电容应为定值,即 AlN 层电容不随频率变化.因此图 10 中积累区电容的频率色散表明在 AlN-Si (111)界面处 AlN 一侧存在载流子陷阱态,该陷阱态可与 Si 的导带交换电子.

在积累区状态下,AlN-Si(111)异质结可近似看

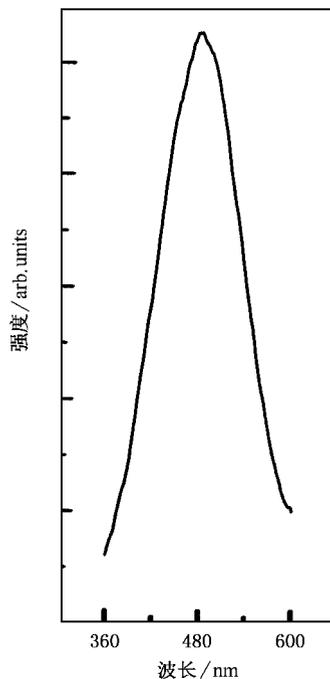


图 9 AlN-Si 样品的常温 PL 谱

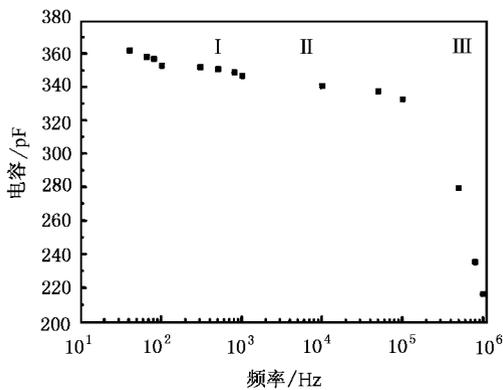


图 10 积累区电容-频率谱

成是肖特基接触,则可用图 11 所示等效电路对该陷阱态给出定量分析<sup>[8]</sup>,可得陷阱态电容  $C_p(\omega)$  为

$$C_p(\omega) = C_{AlN}(\omega) - C_{AlN}(HF), \quad (5)$$

$C_{AlN}(HF)$  为 Al-AlN-Si(111) MIS 结构高频积累区电容,高频时陷阱态不随信号变化,  $C_p(\omega) = 0$ . AlN 高频介电常数可取为  $4.7 \times 10^{11}$ , 样品 Al 电极面积为  $5.72 \times 10^{-4} \text{cm}^2$ , 因此 AlN 高频积累区电容为 161pF.

图 12 为积累区电容-频率曲线.从图 12 可以看出,在 AlN 层共有三种陷阱态,两个快态、一个慢态.这三种陷阱态的态密度和时间常数分别为:  $N_{ss1} = 1.26 \times 10^{12} \text{eV}^{-1} \text{cm}^{-2}$ ,  $\tau_1 = 5.4 \times 10^{-4} \text{s}$ ,  $N_{ss2} = 1.19 \times$

$10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\tau_2 = 5.4 \times 10^{-5} \text{ s}$ ,  $N_{\text{ss}3} = 1.11 \times 10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\tau_3 = 6.2 \times 10^{-7} \text{ s}$ . 我们认为三种陷阱态的存在与 AlN 过渡区的微结构相关. AlN-Si(111)界面的俄歇电子能谱显示<sup>[11]</sup>在 AlN-Si 界面的 AlN 外延层有一层较厚的含 Si, O 的界面微结构过渡区, 它可

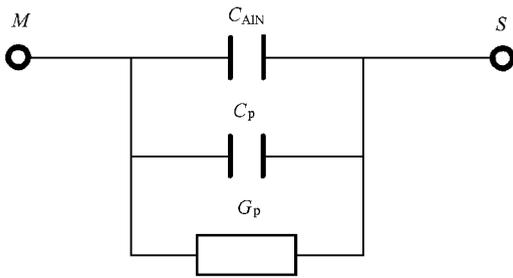


图 11 AlN 绝缘层陷阱态等效电路图

能是由于 MOCVD 法高温(1100°C)生长时有较多来自于 Si 衬底表面的 Si 原子和 O 原子通过扩散进入 AlN, 从而有可能在界面过渡区产生复杂的杂质缺陷络合中心, 这可能是 AlN 层中存在载流子陷阱态的原因, 其详细机理将另行研究.

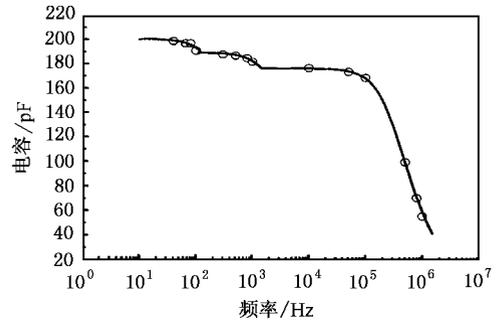


图 12 积累区电容-频率曲线 图注同图 6

## 4. 结 论

本文利用 Al-AlN-Si MIS 结构电容-频率谱系统揭示了 AlN-Si 异质结构界面电荷陷阱态. 研究发现 AlN-Si 界面电荷陷阱态在 Si 能隙范围呈连续分布在 Si 导带附近, 态密度最高为  $9.9 \times 10^{11} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ , 带中央态密度最低为  $8 \times 10^{11} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ , 对应的时间常数  $\tau$  为  $8 \times 10^{-4} \text{ s}$ , 俘获截面  $\sigma_n$  为  $1.58 \times$

$10^{-14} \text{ cm}^2$ ; AlN-Si 界面存在分立陷阱中心, 从 AlN-Si 异质结构 PL 谱可以确定分立陷阱中心位于 AlN 薄膜内, 能级位置  $E_t - E_{V1} = 2.55 \text{ eV}$ ; AlN 界面层有三种陷阱态, 其态密度和时间常数分别为:  $N_{\text{ss}1} = 1.26 \times 10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\tau_1 = 5.4 \times 10^{-4} \text{ s}$ ,  $N_{\text{ss}2} = 1.19 \times 10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\tau_2 = 5.4 \times 10^{-5} \text{ s}$ ,  $N_{\text{ss}3} = 1.11 \times 10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\tau_3 = 6.2 \times 10^{-7} \text{ s}$ . AlN 界面陷阱态与 Si 导带交换电子是 Al-AlN-Si MIS 结构积累区电容频散的原因.

[1] Stevens K S, Kinniburgh M, Schwartzman A F, Ohtani A and Beresford R 1995 *Appl. Phys. Lett.* **66** 3179  
 [2] McCullen E F, Prakasam H E, Mo W J, Naik R, Ng K Y S, Rimai L and Auner G W 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 5757  
 [3] Dubois M A, Murali P and Plessky V 1999 *Proc. IEEE Ultrason. Symp.* **2** 907  
 [4] Takagaki Y, Santos P V, Wiebicke E, Brande O, Schonherr H P and Ploog K H 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 2538  
 [5] Chen P, Zhang R, Zhao Z M, Xi D J, Shen B, Chen Z Z, Zhou Y G, Xie S Y, Lu W F and Zheng Y D 2001 *J. Cryst. Growth* **225** 150  
 [6] Singh A 1984 *Solid-State Electron.* **28** 223

[7] Deuling H, Klausmann E and Goetzberger A 1972 *Solid-State Electron.* **15** 559  
 [8] Adam T, Kolodzey J, Swann C P, Tsao M W and Rabolt J F 2001 *Appl. Surf. Sci.* **175-176** 428  
 [9] Harris H, Biswas N, Temkin H, Gangopadhyay S and Strathman M 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 5825  
 [10] Pearton S J, Zolper J C, Shul R J and Ren F 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 1  
 [11] Xi D J, Zheng Y D, Chen P, Zhao Z M, Chen P, Xie S Y, Jiang R L, Shen B, Gu S L and Zhang R 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 543

# Study of interface trap states of AlN-Si(111) heterostructure<sup>\*</sup>

Zhou Chun-Hong<sup>†</sup> Zheng You-Dou Deng Yong-Zhen Kong Yue-Chan Chen Peng Xi Dong-Juan  
Gu Shu-Lin Shen Bo Zhang Rong Jiang Ruo-Lian Han Ping Shi Yi

( Jiangsu Provincial Key Laboratory of Photonic and Electronic Materials Science and Technology ,  
Department of Physics , Nanjing University , Nanjing 210093 , China )

( Received 3 November 2003 ; revised manuscript received 17 February 2004 )

## Abstract

The charge trap states of AlN-Si(111) grown by metal-organic chemical , vapor deposition are studied by the capacitance spectroscopy of Al-AlN-Si MIS structure. The interface charge trap states of AlN-Si heterostructure and discrete trap center in AlN films are studied. The discrete trap center 2.55eV about  $E_v$  in AlN film is found. The distribution of interface states is continuous in the energy range of Si. The lowest state density  $N_{ss}$  is  $8 \times 10^{11} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$  in the middle of the band gap. The corresponding time constant  $\tau$  is  $8 \times 10^{-4} \text{ s}$  and the capture cross section  $\sigma_n$  is  $1.58 \times 10^{-14} \text{ cm}^2$ . There are three kinds of trap states in the boundary layer of AlN film which causes the frequency dispersion in the accumulation region of Al-AlN-Si MIS structure.

**Keywords** : interface trap states , AlN-Si , capacitance spectroscopy

**PACC** : 7280E , 7340L , 7320D

<sup>\*</sup> Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China( Grant No. G20000683 ) , the Major Program of the National Natural Science Foundation of China( Grant Nos. 60136020 and 60290080 ) , and the National High Technology Development Program of China ( Grant No. 2002AA305304 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : xdxu@nju.edu.cn