

基于 AlGaIn/GaN 共振隧穿二极管的退化现象的研究*

陈浩然 杨林安 朱樟明 林志宇[†] 张进成

(西安电子科技大学微电子学院, 宽禁带半导体材料与器件教育部重点实验室, 西安 710071)

(2013年7月7日收到; 2013年7月22日收到修改稿)

文章研究了 GaN 基共振隧穿二极管 (RTD) 的退化现象. 通过向 AlGaIn/GaN/AlGaIn 量子阱中引入三个实测的深能级陷阱中心并自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 计算并且讨论了陷阱中心对 GaN 基 RTD 的影响. 结果表明, GaN 基 RTD 的退化现象是由陷阱中心的缺陷密度和激活能的共同作用引起. 由于陷阱中心的电离率和激活能的指数呈正相关关系, 因此具有高激活能的陷阱中心俘获更多电子, 对负微分电阻 (NDR) 特性的退化起主导作用.

关键词: 共振隧穿二极管, GaN, 陷阱中心, 电离率

PACS: 73.21.Fg, 73.63.Hs

DOI: 10.7498/aps.62.217301

1 引言

作为第三代半导体材料的代表, GaN 和其他氮化物材料是近年来光电子材料领域的研究热点之一 [1–5]. 由于具有宽带隙、高电子漂移速度、大导带偏移、耐高温、大功率等优点, GaN 基共振隧穿二极管 (RTD) 在太赫兹产生和测量领域有着很大的潜力. 文献 [6–9] 对 AlIn/GaN 和 AlGaIn/GaN 双势垒单势阱结构进行生长和测量, 研究显示随着扫描次数的增加, 峰值电流 (I_P) 和电流峰谷比 (PVCR) 下降明显. 这一现象被称为退化现象, 该现象已经被证明是由陷阱效应引起. 被缺陷俘获的电荷降低了有效势垒高度, 改变了主要的传输机理, 造成了负微分电阻 (NDR) 特性的不稳定. 国内外的研究者采用很多措施减少陷阱中心对 NDR 特性的影响, 比如使用低 Al 组分的 AlGaIn/GaN 异质结, 降低 GaN 外延的生长温度 [9,10]. 然而和传统 III-V 族化合物半导体相比, GaN 基 RTD 的 NDR 特性依然衰减严重, 因此不能获得稳定的太赫兹震荡信号. 本文通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 分析了室温下 AlGaIn/GaN RTD 的输出特性, 重点研究了陷阱中心的缺陷密度、激活能以及结构变化对 RTD 的 NDR 特性的影响, 就退化现象的机理进行深层

次的理论分析, 揭示了 NDR 特性的退化现象和陷阱中心的内在联系.

2 结构参数和理论模型

2.1 结构参数

仿真中采用的 RTD 有源区的结构如图 1 所示. 量子阱由 n 型的 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 双势垒单势阱结构组成, 它夹在两块 100 nm 的 n 型 GaN 欧姆接触区之间, 这两块欧姆接触区分别为集电区和发射区, 欧姆接触区为重掺杂, 掺杂浓度为 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. 在量子阱和欧姆接触区之间的是两层 5 nm 的隔离区.

本文的讨论基于 Ga 面 GaN 结构. 为了使仿真符合实际情况, 电极和欧姆接触区的电阻率设置为 $4.36 \times 10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}^2$ [8], RTD 的截面积为 $30 \mu\text{m}^2$. 本文重点对 1.5/1.5/1.5 nm 的 AlGaIn/GaN/AlGaIn 量子阱结构进行研究, 同时在 1.3–1.7 nm 范围内改变 AlGaIn 势垒和 GaN 势阱的宽度, 以分析其对 NDR 特性的影响.

本文采用的网格大小为 0.1 Å, 以增加计算的准确性. 使用的基本材料参数如下: GaN 和 AlN 的有效质量分别为 $0.228 m_0$ 和 $0.3 m_0$, 其

* 国家自然科学基金 (批准号: 61076079) 和国家科技重大专项 (批准号: 2013ZX02308-002) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: linzhiyu14051@163.com

中 m_0 是自由电子质量. 用线性插值方法得到 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 的电子有效质量. GaN 和 AlN 的介电常数分别为 8.9 和 8.5. 根据经验公式 $E_{\text{g}(\text{AlGaN})} = [x \times E_{\text{g}(\text{AlN})} + (1-x) \times E_{\text{g}(\text{GaN})} - 1.0 \times x \times (1-x)]$ 和 $\Delta E_{\text{g}(\text{AlGaN})} = 0.7 \times (E_{\text{g}(\text{AlGaN})} - E_{\text{g}(\text{GaN})})$ 分别计算出 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 的禁带宽度和 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结的导带偏移^[11], 其中 x 为 Al 组分, 本文为 0.2.

GaN 发射区 (100 nm)
GaN 隔离区 (5 nm)
AlGaIn 势垒 (1.5 nm)
GaN 势阱 (1.5 nm)
AlGaIn 势垒 (1.5 nm)
GaN 隔离区 (5 nm)
GaN 集电区 (100 nm)

图 1 RTD 有源区结构示意图

根据一些深能级瞬态谱 (DLTS) 的实验测量结果可知, 大部分缺陷由界面处的位错引起, 它们主要分布在 AlGaIn/GaN 异质结界面的 AlGaIn 一侧. 本文主要考虑三个陷阱中心, 第一个陷阱中心的激活能为 0.208 eV (E_{a1}), 缺陷密度和俘获截面分别为 $4.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 和 $1.1 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$; 第二个陷阱中心的激活能为 0.42 eV (E_{a2}), 缺陷密度和俘获截面分别为 $1.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 和 $1.3 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$; 第三个陷阱中心的激活能为 1.02 eV (E_{a3}), 缺陷密度和俘获截面分别为 $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 和 $2.0 \times 10^{-12} \text{ cm}^2$ ^[12,13].

2.2 理论模型

本文在仿真过程中使用 SILVACO 软件的 ATLAS 模块^[14]. 为了有效的模拟量子效应, 在自洽求解薛定谔方程和泊松方程的过程中, 同时求解了许多基础的方程, 如载流子连续性方程、载流子的漂移-扩散模型等等.

包含缺陷的泊松方程如下:

$$\text{div}(\epsilon \nabla \psi) = q(n - p - N_D^+ + N_A^-) - Q_T, \quad (1)$$

式中, n 和 p 分别为自由电子和空穴浓度, N_D^+ 和 N_A^- 分别为电离的施主和受主杂质浓度, $Q_T = q \times \text{Density} \times F_{tA}$ 为陷阱和缺陷引入的电荷, 其中 Density 为陷阱中心的缺陷密度. 电离率 F_{tA} 由下面

的表达式计算:

$$F_{tA} = \frac{v_n \text{SIGN}n + e_{pA}}{v_n \text{SIGN}n + v_p \text{SIGP}p + e_{nA} + e_{pA}}, \quad (2)$$

式中, SIGN 和 SIGP 分别为电子和空穴俘获截面, v_n 和 v_p 分别为电子和空穴的热速度. 受主型缺陷的电子和空穴发射率定义如下:

$$e_{nA} = \text{SIGN}n_i v_n \exp \frac{E_t - E_i}{kT}, \quad (3)$$

$$e_{pA} = \text{SIGP}n_i v_p \exp \frac{E_i - E_t}{kT}, \quad (4)$$

式中, n_i 为本征载流子浓度, E_t 为受主型缺陷的能级, E_i 为本征能级.

软件自动调整边界条件和初始值, 根据这些数值求解薛定谔方程. 求解载流子的浓度分布, 将载流子的浓度代入到泊松方程求解所需的电荷分布. 所得电势分布重新代入薛定谔方程中的电场分布. 这个重复迭代的过程一直持续直到满足收敛条件, 一个自洽求解薛定谔-泊松方程的过程完成.

GaN 基器件与 GaAs 等传统器件的区别在于 GaN 基器件中的二维电子气 (2DEG) 是由于极化效应造成的, 而不是常规的调制掺杂. 2DEG 的出现将改变泊松方程中的电荷分布函数, 从而改变结构的能带、电场分布以及此后求得的载流子分布和分立能级的位置. 为了给出确切的载流子的分布和分立能级的位置, 本文向 AlGaIn/GaN 异质结界面引入极化电荷以表征 2DEG 对 NDR 特性的影响^[15].

3 计算结果与分析讨论

3.1 器件的 I - V 特性

本文通过对 RTD 进行第一次正向和反向扫描, 得到了器件的 I - V 特性, 导带剖面图以及其他特性. 图 2(a) 为零偏压下的静态导带剖面图, 其中量子阱结构为 1.5/1.5/1.5 nm. 从图 2(a) 中抽取得到的电场分布和自由电子浓度分布如图 2(b) 所示. 由于 2DEG 和内建电场的存在, 能带弯曲效应很明显. 内建电场改变了结构中电子的分布, 所以发射区的电子在靠近集电区的隔离层积聚. 图 2(c) 为 AlGaIn/GaN RTD 的 I - V 特性, 其中 I_p 为 0.182 A, PVCr 为 1.53. 由于相对窄的量子阱结构, 以及在发射极和集电极上较小的电荷积聚, I_p 和 PVCr 比实际的 AlGaIn/GaN RTD 大^[8]. 与实际的 AlN/GaN 和 AlGaIn/GaN RTD 相比, 本文的阈值电压 V_p (0.345 V) 较小^[6-9]. 众所周知 V_p 主要由两部

分组成: 使第一分立能级降低到和发射极导带底对准的外加偏压, 以及串联电阻上的压降. 为了得到分立能级的静态分布, 计算了零偏压下传输系数和能量的关系, 结果如图 2(d) 所示. 根据计算得出的传输系数, 第一传输峰对应的能量为 0.171 eV, 因此 GaN 量子阱中第一分立能级的位置在 0.171 eV, 这

是 V_p 较小的主要原因. V_p 的另外一部分由寄生电阻和电极上的电荷积聚引起的压降组成, 本文也考虑在内, 但是比实际器件中的小 [6-9]. 从图 2(c) 中可见 AlGaIn/GaN RTD 的电流滞回效应, 该效应和实际 AlGaIn/GaN RTD 的趋势一致, 由界面处的缺陷和位错引起 [6-9].

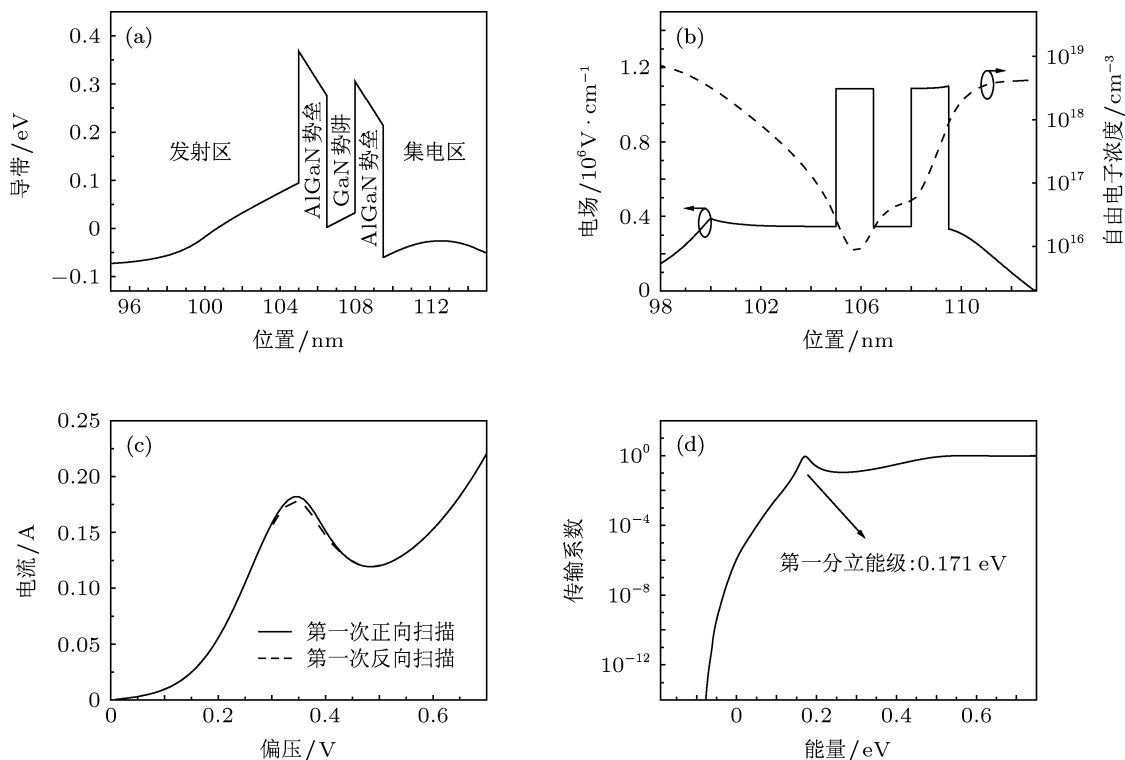


图 2 AlGaIn/GaN RTD 的 (a) 静态导带剖面图; (b) 电场和自由电子浓度分布; (c) I - V 特性; (d) 零偏压下的传输系数

3.2 陷阱中心对退化现象的影响

本文通过对 RTD 进行多次正向和反向扫描, 分析了陷阱中心对 RTD 退化现象的影响. 根据文献 [12, 13], 此时采用的三个陷阱中心的激活能分别为 0.208 eV (E_{a1}), 0.42 eV (E_{a2}) 和 1.02 eV (E_{a3}), 它们分别分布在量子阱的 AlGaIn 势垒中. 图 3 所示的是 AlGaIn/GaN RTD 分别在第 1, 50, 100 和 200 次扫描下的正向 I - V 特性. 随着扫描次数的增加, I_p 和 PVCR 下降明显, NDR 特性有明显退化. 在第 200 次扫描时, I_p 有 70% 的衰减, NDR 特性接近消失. 这一趋势和实际 AlGaIn/GaN RTD 的测量结果一致 [6-10]. 被陷阱中心俘获的电荷降低了有效势垒高度, 改变了主要的传输机理, 造成 NDR 特性的不稳定 [6]. 根据 (2)–(4) 式, 由于陷阱中心的电离率 F_{tA} 和激活能的指数呈正相关关系, 因此激活能为 1.02 eV (E_{a3}) 的陷阱中心在 NDR 特性的退化过

程中起主要作用, 这将在下文详细定量讨论.

为了从理论上揭示激活能, 电离率, 缺陷密度, 已电离缺陷密度与退化的 NDR 特性之间的关系, 本文在外部偏压为阈值电压 V_p (0.345 V) 的状态下计算了 (1)–(4) 式. 首先将激活能 0.208 eV (E_{a1}), 0.42 eV (E_{a2}) 和 1.02 eV (E_{a3}) 代入 (3) 和 (4) 式中, 计算出电子和空穴发射率. 接着将得到的电子和空穴发射率, 载流子俘获截面, 电子和空穴热速度代入 (2) 式中, 计算出两个陷阱中心对应的电离率 F_{tA1} , F_{tA2} 和 F_{tA3} . 从泊松方程右端减去的总电荷 Q_T 为 $Q_T = q \times (\text{Density1} \times F_{tA1} + \text{Density2} \times F_{tA2} + \text{Density3} \times F_{tA3})$, 其中 $\text{Density} \times F_{tA}$ 为已电离缺陷密度, 它对 NDR 特性造成负面影响. 接着计算自洽泊松方程和薛定谔方程以得到计算结果. 计算出的电离率和已电离缺陷密度如表 1 所示. 结果表明 GaN 基 RTD 的退化现象是由陷阱中心的缺陷密度和激活能的共同作用引起. 虽然陷阱中心 2(激活

能为 0.42 eV) 的缺陷密度比陷阱中心 3(激活能为 1.02 eV) 的高,但是由于陷阱中心的电离率和激活能的指数呈正相关关系,因此陷阱中心 3 的已电离缺陷密度高,所以俘获更多电子,从而在 NDR 特性的退化中起主导作用.

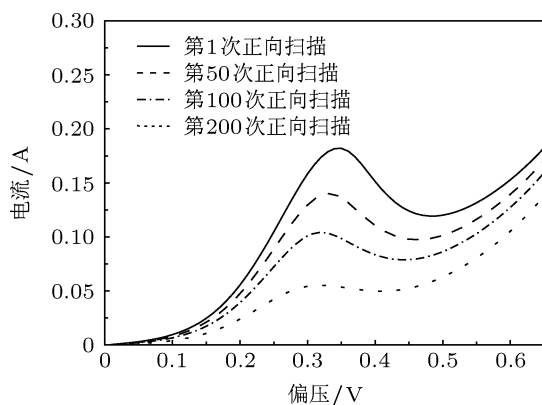


图 3 经过 1, 50, 100 和 200 次扫描后的 AlGaIn/GaN RTD 的 I-V 特性 (缺陷的激活能分别为 0.208 eV, 0.42 eV 和 1.02 eV)

表 1 陷阱中心参数

激活能/eV	0.208 (E_{a1})	0.42 (E_{a2})	1.02 (E_{a3})
缺陷密度/cm ⁻³	4.3×10^{16}	1.4×10^{17}	2.0×10^{14}
电离率	7.2×10^{-10}	6.36×10^{-6}	3.15×10^{-1}
已电离缺陷密度/cm ⁻³	3.1×10^7	8.9×10^{11}	6.3×10^{13}

为了从理论上验证激活能为 1.02 eV 的陷阱中心对 NDR 特性的影响,本文再次对 RTD 进行多次正向和反向扫描,如图 4 所示.当采用激活能分别为 0.208 eV (E_{a1}) 和 0.42 eV (E_{a2}) 的两个陷阱中心而不采用激活能为 1.02 eV (E_{a3}) 的陷阱中心时, NDR 特性的退化得到了明显的抑制.在第 200 次扫描时, I_p 有 9% 的衰减.与图 3 相比, I_p 的衰减得到了明显抑制.结果从另一个侧面说明了具有高激

活能的陷阱中心俘获更多电子,对 NDR 特性的退化起主导作用.这意味着当减少陷阱中心的激活能时,RTD 的退化现象将得到有效的抑制.因此有必要采用有效手段来抑制 NDR 特性的退化,包括增进材料质量、采用同质外延生长技术并且使用低 Al 组分的 AlGaIn/GaN 异质结 [6-10]. 这些手段都能有效降低陷阱中心的缺陷密度和激活能,减小晶格失配,降低陷阱中心的电离率,从而抑制 NDR 特性的退化.

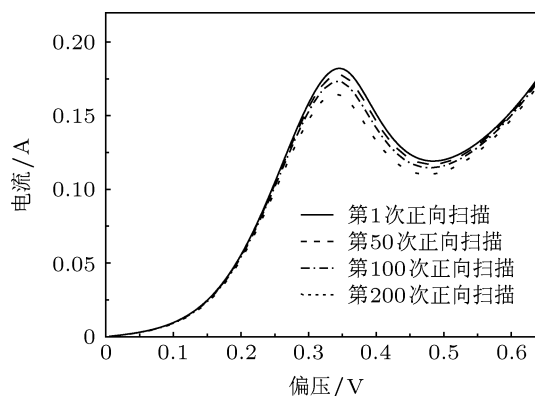


图 4 经过 1,50,100,200 次扫描后的 AlGaIn/GaN RTD 的 I-V 特性 (缺陷的激活能分别为 0.208 eV 和 0.42 eV)

3.3 势垒厚度和势阱宽度变化对 NDR 特性的影响

本文也研究了 AlGaIn 势垒厚度和 GaN 势阱宽度变化对 NDR 特性的影响.图 5(a) 中的 I_p 随着量子阱宽度的增大 (1.3—1.7 nm) 而下降.众所周知,随着量子阱宽度的增加,传输峰对应的能量宽度 ΔE 变窄,分立能级的能量也减小 [16]. 因为共振电流与 ΔE 和分立能级的能量的乘积成正比,所以 I_p 随着量子阱宽度的增加而下降.由于分立能级的能量随着量子阱宽度的增加而减小,所以 V_p 下降.

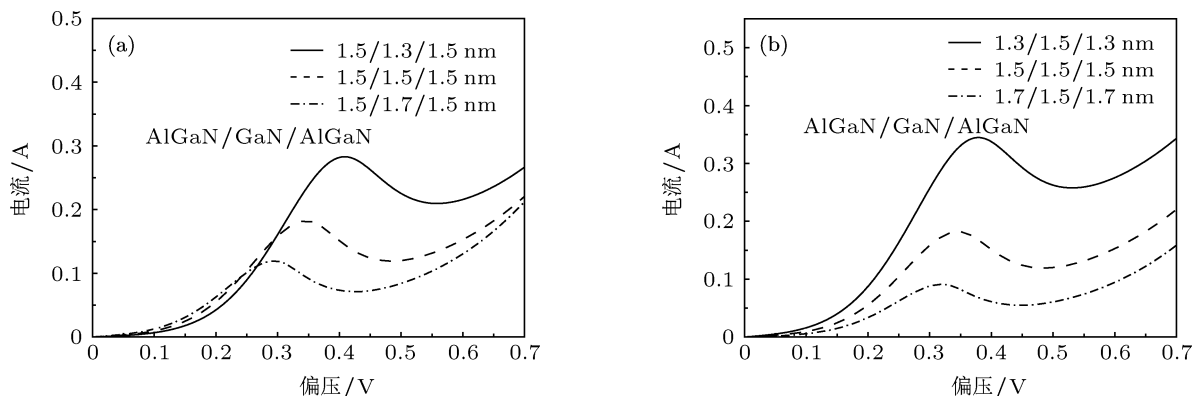


图 5 (a) GaN 势阱宽度和 (b) AlGaIn 势垒厚度对 AlGaIn/GaN RTD 的 I-V 特性的影响

随着 AlGa_{0.2}N 势垒宽度从 1.3 增大到 1.7 nm, 图 5(b) 中的 I_P 下降. 这是由于传输系数和势垒宽度成反比, I_P 随着传输系数的下降而下降. 随着势垒宽度的增加, V_P 略有下降, 这是由于在寄生电阻上的压降随着 I_P 的下降而下降. 因此缩小量子阱结构的尺寸能增进 RTD 的性能. 以上结果和前人的结论一致 [17].

4 结论

通过向极化 Al_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN RTD 量子阱中引入三个深能级缺陷, 从理论上分析了 NDR 特性的退化机理. 采用的三个深能级缺陷中心的激活能分别为 0.208 eV (E_{a1}), 0.42 eV (E_{a2}) 和 1.02 eV (E_{a3}), 缺陷密度分别为 $4.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $1.4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 和

$2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. 结果显示经过 200 次扫描, NDR 特性有明显退化, 这和 AlGa_{0.2}N/GaN RTD 实验测试结果一致. 本文揭示了 GaN 基 RTD 的退化现象是由陷阱中心的缺陷密度和激活能的共同作用引起. 由于陷阱中心的电离率和激活能的指数呈正相关关系, 所以具有高激活能的陷阱中心俘获更多电子, 对 NDR 特性的退化起主导作用. 因此有必要采用有效手段来抑制 NDR 特性的退化, 包括增进材料质量、采用同质外延生长技术并且使用低 Al 组分的 AlGa_{0.2}N/GaN 异质结. 本文也研究了量子阱结构变化对 NDR 特性的影响, 研究表明缩小量子阱结构的尺寸能增进 RTD 的性能. 本文的研究结果表明降低深能级缺陷中心的激活能和缺陷密度能抑制 GaN 基 RTD 的 NDR 特性的退化.

- [1] Zhang J F, Wang P Y, Xue J S, Zhou Y B, Zhang J C, Hao Y 2011 *Acta phys. Sin.* **60** 117305 (in Chinese) [张金凤, 王平亚, 薛军帅, 周勇波, 张进成, 郝跃 2011 物理学报 **60** 117305]
- [2] Wang P Y, Zhang J F, Xue J S, Zhou Y B, Zhang J C, Hao Y 2011 *Acta phys. Sin.* **60** 117304 (in Chinese) [王平亚, 张金凤, 薛军帅, 周勇波, 张进成, 郝跃 2011 物理学报 **60** 117304]
- [3] Xu S R, Zhang J C, Li Z M, Zhou X W, Xu Z H, Zhao G C, Zhu Q W, Zhang J F, Mao W, Hao Y 2009 *Acta phys. Sin.* **58** 5706 (in Chinese) [许晟瑞, 张进城, 李志明, 周小伟, 许志豪, 赵广才, 朱庆伟, 张金凤, 毛维, 郝跃 2009 物理学报 **58** 5705]
- [4] Xu S R, Hao Y, Zhang J C, Zhou X W, Cao Y R, Ou X X, Mao W, Du D C, Wang H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 107204
- [5] Lin Z Y, Zhang J C, Xu S R, Lü L, Liu Z Y, Ma J C, Xue X Y, Xue J S, Hao Y 2011 *Acta phys. Sin.* **61** 186103 (in Chinese) [林志宇, 张进成, 许晟瑞, 吕玲, 刘子扬, 马俊彩, 薛晓咏, 薛军帅, 郝跃 2011 物理学报 **61** 186103]
- [6] Bayram C, Vashaei Z, Razeghi M 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 092104
- [7] Vashaei Z, Bayram C, Razeghi M 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 083505
- [8] Bayram C, Vashaei Z, Razeghi M 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 181109
- [9] Bayram C, Vashaei Z, Razeghi M 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 042103
- [10] Boucherit M, Soltani A, Monroy E, Rousseau M, Deresmes D, Berthe M, Durand C, De Jaeger J C 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 182109
- [11] Ambacher O, Cimalla V 2008 *Polarization Effects in Semiconductors: From Ab Initio Theory to Device Applications* (New York: Springer Science+Business Media) p35
- [12] Malbert N, Labat N, Curutchet A, Sury C, Hoel V, de Jaeger J C, De-france N, Douvry Y, Dua C, Oualli M, Bru-Chevallier C, Bluet J M, Chikhaoui W 2009 *Microelectron Reliab.* **49** 1216
- [13] Fang Z Q, Look D C 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 182115
- [14] <http://www.silvaco.com> for Atlas User's Manual, Version, 5.16.3.R
- [15] Ambacher O, Foutz B, Smart J, Shealy J R, Weimann N G, Chu K, Murphy M, Sierakowski A J, Schaff W J, Eastman L F 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 334
- [16] Sacconi F, Carlo A D I, Lugli P 2002 *Phys. Status Solidi A* **190** 295
- [17] Hermann M, Monroy E, Helman A, Baur B, Albrecht M, Daudin B, Ambacher O, Stutzmann M, Eickhoff 2004 *Phys. Status Solidi C* **1** 2210

Theoretical study on degradation phenomenon on AlGaIn/GaN resonant tunneling diode*

Chen Hao-Ran Yang Lin-An Zhu Zhang-Ming Lin Zhi-Yu[†] Zhang Jin-Cheng

(Key Laboratory of Wide Band Gap Semiconductor Materials and Devices, School of Microelectronics, Xidian University, Xi'an 710071, China)

(Received 7 July 2013; revised manuscript received 22 July 2013)

Abstract

In this paper we study theoretically the degradation phenomenon of GaN-based resonant tunneling diode (RTD). The effects of trapping centers on GaN-based RTD are calculated and studied by self-consistently solving the Poisson-Schrödinger aligns when three experimentally obtained deep-level trapping centers are introduced into the AlGaIn/GaN/AlGaIn quantum well. Results show that the degradations of negative differential resistance (NDR) characteristic in GaN-based RTDs are actually caused by the combined action of the activation energy and the defect density. The deep-level trapping center with high activation energy plays a dominating role in the degradation of NDR characteristics because the probability of ionization is exponentially proportional to the activation energy.

Keywords: RTD, GaN, trapping centers, probability of ionization

PACS: 73.21.Fg, 73.63.Hs

DOI: 10.7498/aps.62.217301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61076079), and the National Science and Technology Major Project of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. 2013ZX02308-002).

[†] Corresponding author. E-mail: linzhiyu14051@163.com