低维量子结构应力调制对GaN基 材料量子效率和电学特性的影响

宽禁带半导体研究中心 王磊 2010-3-31

ALE

主要内容

>GaN半导体材料系简介
>基于GaN基材料研发的器件
>GaN基发光二极管和激光二极管
>我的相关研究工作介绍
>我的科研经历和体会



1.GaN半导体材料系简介

GaN是III族氮化物的典型代表,此外,还有InN,AIN等材料,还有他们的三元,四元合金材料,他们共同构成了III族氮化物材料体系。



			1											10					
Group	1	2		3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period																			
1	1 H																		He
2	3 Li	4 Be												5 B	6 C		8 0	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg												AI	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca		21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr		39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	-75 Re	76 OS	-77 -Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 ⊤I	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	**	103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Uun	111 Uuu	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo
*Lanthanoids		*	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb			
**Actinoids		**	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No			

GaN基材料的晶格结构分为闪锌矿和纤锌矿两种,在半导体器件中应用最广泛的要数纤锌矿结构的GaN材料







2.基于GaN材料研发的器件

>目前以III族氮化物研发的光电子器件有 短波光电子器件,蓝、绿光LED,蓝紫、 蓝光LD,紫外光电探测器件

>高温电子器件>高功率微波器件

>高场高功率电力电子器件



3.GaN基发光二极管和激光



主要介绍内容

 InGaN/GaN发光二极管 light emitting diode (LED)
 InGaN/GaN激光二极管 laser diode (LD)





从理论上来说, InGaN/GaN量子阱LED 通过调整In组分可以使发光波长覆盖整 个可见光波段,还可以达到紫外波段。 此外, InGaN/GaN量子阱LED具有发光 效率高,可以产生白光等优点,是目前 半导体照明取代传统照明灯管的理想材 料。





基于GaN材料的白光LED



GaN基LD是在LED的基础上,在量子阱有源区 两边分别加上光波导层和光限制层,使光场尽 量限制在有源区附近。同LED不同,LD是侧 向出光,并且在侧向有解离腔面,可以形成谐 振腔,具有选模作用。

LD在激光全彩显示,大容量蓝光存储和读取 光盘数据,激光电视,以及军事国防上都有很 大的应用。







Mobile Projection

Imagine, Entertain, Share.





北京大学宽禁带半导体研究中心研发的GaN基激光器实物图和近场光斑





■LED在国内外高校和公司研究都很多。 LD的主要研究机构是Nichia Sony Mitsubishi Sanyo Sharp Samsung Cree Xerox UCSB 中科院半导体所 北 京大学等等。 ➡接下来主要介绍一下GaN基LED和LD中 主要存在的问题和研究热点。



LED发光效率问题 对于LED来说,他是正面出光,发光效率 主要是由以下三点来决定 a) 载流子在量子阱有源区的注入效率 b) 量子阱有源区的辐射复合的内量子效 豖

c) 光子在LED外延表面的出光效率





✓ 通常采用调节pn结的相对位置,采用 电子阻挡层手段来解决。



▶量子阱有源区的辐射复合的内 量子效率

内量子效率是决定发光强弱最重要的因素。一般的通过变温PL方法测量到的量子效率一般在 20-40%左右,好的结果可以在70-80%左右。

影响内量子效率的主要原因主要有极化电场对辐射复合速率的影响(QCSE),生长过程中出现的非辐射复合中心,以及高注入大功率下的俄歇复合等等。



▶光子在LED表面的出光效率

主要原因就是光从折射率比较大的GaN层射向空气时 会发生全发射。从而影响光的射出。



✓ 一般采用出光表面粗糙化,在出光表面刻蚀出光子晶体,图形衬底技术,倒装焊等手段来解决。



对于LD来说,除了LED中提到的问题 外,还有就是要提高有源区量子阱的光 增益,使得光在传播过程中能够克制吸 收并逐渐被放大。还有就是提高解离腔 面的质量,高的反射率能够有效的降低 激光器激射阈值。



II. P型电阻率大的问题

对于GaN材料来说,p型区域载流子浓度 的提高是决定发光器件性能好坏的关 键,因为好的p型能够形成好的pn结区, 能够减小正向开启电压,增加空穴的注 入效率,并且可以使得p型欧姆接触工艺 简单化,这些都是决定GaN光电子器件 能否实现商业化的重要因素。



P区空穴浓度低的主要原因

a) N空位形成电子补偿
b) Mg受主激活能很高
c) Mg同MOCVD反应室里会和H原子结合 成络合物,从而不再是受主。



▶N空位形成电子补偿

■ N空位的出现,一般是生长过程中产生的,包括一价和三价氮空位,在GaN材料中都是施主,对受主有大的补偿作用。

✓可以采用在氮气下退火,把N空位给补偿掉。此外,还有一些其他的析出N空位的方法。



➤ Mg受主激活能很高 ■ Mg在GaN中的激活能一般为170至250meV, 在AlGaN中会更高,所以常温下受主激活效率 很低,激活出来的空穴浓度很低。 Mg受主激 活能很高是GaN材料本身的特性,是很难改变 的物理性质。

✓ 但是我们可以采用改变外延层结构,采用超晶格替代体材料等手段来降低Mg受主的有效激活能,从而得到比较高的空穴浓度。



▶Mg同H原子结合成络合物

这也是MOCVD生长过程中出现的问题,主要 是由于反应气体NH3在提供N原子的同时会产 生H原子,H原子和Mg结合络合物而使得Mg 不再具有受主性质。

✓可以通过高温氮气条件下退火析出外延片中的 H原子,还原Mg受主的性质。此外,更重要 的是在生长室中改变生长条件,抑制Mg和H 的结合。



4.我的相关研究工作介绍

针对以上GaN基材料在光电子器件中的 研究热点和亟待解决的问题。我主要是 从理论上证明了一个提高量子阱有源区 内量子效率的方法,实验证明还有待进 一步实现。另外就是实验上通过采用p型 AlGaN/GaN超晶格结构有效的改善了p 型的电学性质。



I. In组分渐变量子阱

前面讲到,极化电场引起的量子限制斯塔克效 (QCSE)是影响InGaN/GaN量子阱内量子 效率的重要因素。本人主要是通过用In组分渐 变的InGaN/GaN量子阱替代传统的方势阱来 改善量子阱的内量子效率。

➡ 首先介绍一下C面生长的GaN基材料的QCSE。



自发极化和压电极化





极化电场造成波函数分离





极化电场造成电子和空穴波函数空间分离,波函 数交叠积分减小,辐射复合速率下降。能带在极 化电场下发生倾斜发光波长出现红移现象。

KP 微扰理论
我采用的解法是利用
KP微扰理论来解GaN
材料的薛定谔方程。

$$\begin{pmatrix} \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\bar{r}) \end{pmatrix} \psi_{n\bar{k}}(\bar{r}) = E_n(\bar{k})\psi_{n\bar{k}}(\bar{r})$$

$$\psi_{n\bar{k}}(\bar{r}) = \exp(i\bar{k}\cdot\bar{r})\mu_{n\bar{k}}(\bar{r})$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V_0 + \frac{\hbar}{m_0}\bar{k}\cdot\bar{p} \end{pmatrix} \mu_{n\bar{k}}(\bar{r}) = \exp(i\bar{k}\cdot\bar{r})\mu_{n\bar{k}}(\bar{r})$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V_0 + \frac{\hbar}{m_0}\bar{k}\cdot\bar{p} \end{pmatrix} \mu_{n\bar{k}}(\bar{r}) = \left(E_n(\bar{k}) - \frac{\hbar^2k^2}{2m_0}\right)\mu_{n\bar{k}}(\bar{r})$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V_0 \qquad \hat{H}' = \frac{\hbar}{m_0}\bar{k}\cdot\bar{p} \qquad E'_n(\bar{k}) = E_n(\bar{k}) - \frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$$

$$\boxed{\left(\hat{H}_0 + \hat{H}'\right)\mu_{n\bar{k}}(\bar{r}) = E'_n(\bar{k})\mu_{n\bar{k}}(\bar{r})}}$$

$$\hat{H}\mu_{n\bar{k}}(\bar{r}) \approx \left(\hat{H}_0 + \frac{\hbar^2k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}\bar{k}\cdot\hat{p} + \hat{H}_{so}\right)\mu_{n\bar{k}}(\bar{r}) = E_n(\bar{k})\mu_{n\bar{k}}(\bar{r})$$

哈密顿矩阵的建立

$$\begin{split} u_{\bar{k}}(\bar{r}) &= \sum_{j}^{A} a_{j'}(\bar{k}) u_{j'0}(\bar{r}) + \sum_{\gamma}^{B} a_{\gamma}(\bar{k}) u_{\gamma 0}(\bar{r}) \\ \hat{H} &= \hat{H}_{6c6}(\bar{k} = 0) + D_{6c6} = \begin{bmatrix} F & -K^{*} & -H^{*} & 0 & 0 & 0 \\ -K & G & H & 0 & 0 & \Delta \\ -H & H^{*} & \lambda & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F & -K & H \\ 0 & 0 & \Delta & -K^{*} & G & -H^{*} \\ 0 & \Delta & 0 & H^{*} & -H & \lambda \end{bmatrix} \begin{vmatrix} |u_{1}\rangle & F = \Delta_{1} + \Delta_{2} + \lambda + \theta \\ |u_{2}\rangle \\ &= |u_{3}\rangle & G = \Delta_{1} - \Delta_{2} + \lambda + \theta \\ |u_{4}\rangle \\ |u_{5}\rangle & \Delta = \sqrt{2}\Delta_{3} \\ k &= \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}A_{5}(k_{x} + ik_{y})^{2} & H = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}A_{6}(k_{x} + ik_{y})k_{z} \\ & K = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}[A_{1}k_{z}^{2} + A_{2}(k_{x}^{2} + k_{y}^{2})] & \theta = \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}[A_{3}k_{z}^{2} + A_{4}(k_{x}^{2} + k_{y}^{2})] \end{split}$$





对于**InGaN/GaN**量子阱结构的薛 定谔方程

 $= \underbrace{\begin{array}{c} \begin{array}{c} \begin{array}{c} \begin{array}{c} \\ \end{array} \end{array}}_{n,k_{t}} (z) = \frac{\exp(\left[i \cdot k_{t} \cdot \vec{r}_{t}\right]\right)}{\sqrt{\Lambda}} \phi_{n}(z) \left|S,\eta\right\rangle \end{array}$ $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+V_e(z)+P_{ce}(z)\right)\phi_n(z)=\left(E_n^C-\frac{\hbar^2k_t^2}{2m}\right)\phi_n(z)$ $\Psi_{m}^{L}(z;k_{t}) = \frac{\exp(ik_{t}\cdot\vec{r}_{t})}{\sqrt{A}} (g_{m}^{(6)}(z;k_{t})|4\rangle + g_{m}^{(6)}(z;k_{t})|5\rangle + g_{m}^{(6)}(z;k_{t})|6\rangle)$ $H^{U} = \begin{bmatrix} F & K_{t} & -iH_{t} \\ K_{t} & G & \Delta - iH_{t} \\ iH_{t} & \Delta + iH_{t} & \lambda \end{bmatrix}$ $\sum_{i=1}^{3} \left[H_{ij}^{U} \left(k_{z} = -i \frac{\partial}{\partial z} \right) + \delta_{ij} E_{v}^{0}(z) \right] g_{m}^{j}(z;k_{t}) = E_{m}^{U}(k_{t}) g_{m}^{(i)}(z;k_{t})$



■ 费米黄金定则 $R_{a\to b} = \frac{2}{V} \sum_{k_{ab}} \frac{2\pi}{\hbar^2} |H'_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega) f_a (1 - f_b)$ ■ TE模式跃迁矩阵元

$$\left| \left(M_{x} \right)_{nm}^{\sigma} (k_{t}) \right|^{2} = \frac{\left| \langle s | P_{x} | x \rangle \right|^{2}}{4} \left\{ \langle \phi_{n} | g_{m}^{(1)} \rangle^{2} + \langle \phi_{n} | g_{m}^{(2)} \rangle^{2} \right\}, \text{ for } \sigma = U$$

$$\left| \left(M_x \right)_{nm}^{\sigma} (k_t) \right|^2 = \frac{\left| \langle s | P_x | x \rangle \right|^2}{4} \left\{ \langle \phi_n | g_m^{(4)} \rangle^2 + \langle \phi_n | g_m^{(5)} \rangle^2 \right\}, \text{for } \sigma = L$$

TM模式跃迁矩阵元
$$|(M_z)_{nm}^{\sigma}(k_t)|^2 = \frac{|\langle s|P_z|x\rangle|^2}{2} \langle \phi_n|g_m^{(3)}\rangle^2$$
, for $\sigma = U$

自发发射因子
$$|(M_z)_{nm}^{\sigma}(k_t)|^2 = \frac{|+z|^{-z}|^{1+1}}{2} < \phi_n |g_m^{(6)} >^2, fo$$

$$\int_{\sigma} \frac{2q^2 \pi}{n_r c \varepsilon_0 m_0^2 \omega L_\omega} \sum_{\sigma=U,L} \sum_{n,m} \int_0^\infty \frac{k_t dk_t}{2\pi} \left| (M_e)_{nm}^\sigma(k_t) \right|^2 \frac{f_n^c(k_t)(1 - f_{\sigma m}^v(k_t))}{(E_{\sigma,nm}^{cv}(k_t) - \hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma)^2}$$







II. p区电学特性的改善

▶P型GaN电学特性的改善也当前国际研究的热点,因为他是制约GaN基光电子器件的关键。

➤ P区的改善,最有效的,报道最多的就是采用 AlGaN/GaN超晶格替代GaN体材料的方法, 以前的工作主要集中在2000-2003年之间, 主要有E.F. Schubert和Monica Hansen两个 小组,还有就是日本,台湾的一些小组,主要 是后来的一些重复性工作。







■总结一下Schubert对超晶格改善p型电 学性质的解释。

✓他认为超晶格价带带阶的出现是使得Mg 受主激活能下降的原因,GaN势阱里的 电子会热激活到AlGaN势垒中的Mg受主 中。隧穿效应在激活中有着重要作用。

✓认为极化电场不是决定因素,且激活能 随AI组分升高而降低。



■总结一下Hansen对超晶格改善p型电学 性质的解释。

- ✓她认为超晶格中极化电场导致能带倾斜 是使得Mg受主激活能下降的原因。弯曲 的能带使得处于费米能级以上的部分被 激活,空穴大量积累。
- ✓认为高AI组分,长周期,都可以降低有 效激活能,提高空穴浓度。



很明显,他们的解释存在矛盾。后来日本台湾有很多人报道了和他们两个小组 类似的结果,他们的解释也是沿用前人 的,我认为这些解释并不是十分正确。 但是超晶格可以改善p型的电学特性还是 可以肯定的。



我们小组是做LD的,AlGaN/GaN超晶格是我 们必须用也是无法避免的,所以对超晶格的研 究工作对我们来说是相当重要的一个环节。我 们也做过很多p型超晶格的样品,不管是变超 晶格周期还是Al组分,空穴载流子浓度都和体 GaN差不多,并没有出现像他们报告的很明显 的改善,这也就和文献报道出现了矛盾,是值 得细致研究的,可能存在新的更为准确的解释。



结合以前我对能带理论的计算经验,我 想可不可以对AlGaN/GaN超晶格中应力 在GaN势阱层和AlGaN势垒层分配进行 调制,看看应力调制对空穴载流子浓度 有什么影响。





■实验表征手段

- ▶结构和组分表征: (002), (102), (105) XRD
- ▶位错密度表征: (002), (102) XRD的RC
 ▶应力分布表征: XRD的RSM
- ▶空穴载流子浓度和受主激活能表征:变温Hall方法。



■超晶格结构和应力调制测试





应力调制对空穴载流子浓度和有效激活能的影响

常温时,没有AIN插入层的超晶格空穴载流 子浓度仅为 6.6×10¹⁶ cm⁻³

有AIN插入层的超晶格空穴载流子浓度高达 1.6×10¹⁸ cm⁻³

水平

 $\ln p \propto -E_a / (k_B T)$

拟合得到,激活

下降到70meV。

能由150meV



■为了进一步验证,还做了变AIN插入层厚 度变化,超晶格周期变化,AI组分变化等 一系列的实验。



■ 根据我们自己的实验,我们得出以下结论。

✓应力调制对空穴激活起到决定性作用。

- ✓ Mg受主的隧穿激活机制的确存在, Schubert 的理论有正确性。
- ✓ Hansen考虑到极化电场对激活的影响也是正确的,但是原因解释对我们的样品并不适用。
- ✓ 超晶格的周期变化并不能使得空穴浓度得到明显改善,和hansen的说法不同。
- ✓ Al组分的提高使得空穴载流子浓度下降,而不 是像Schubert报道的那样反而会升高。



■ 对前人工作的总结

前人提出用超晶格改善p型电学性质是非常值 得肯定的。但他们的解释是片面的,不完善 的,有些还是错误的,原因在于他们对超晶格 能带的解释简单套用了量子阱的理论。而事实 上超晶格是掺杂结构,周期性边界条件也不能 简单应用,这些问题Schubert和Hansen都没 有很好的理解,所以才导致了他们解释的片面 性。



5.科研经历和体会

广泛调研和自己专业相关的文献,了解国内外相关专业的发展状况和研究热点。
 积极参与组内的科研工作,了解实验原理,动手操作实验,掌握实验细节,进一步明确各个实验手段的优缺点,并且有针对性的应用于自己的科研工作当中。



- 确定可行的研究题目方面,首先根据实验室自身的条件,结合组内的样品,测量手段,前人工作的阶段性成果,多和导师讨论。
- 如果一时间很难找到很好的科研题目,不妨先跟师兄师姐把实验先做起来,从实验中可以加深对本组科研的理解和认识,从而更容易找到自己的科研方向。



多思考,深入理解资深人士对研究问题 的看法。

- ■敢于怀疑权威,能够有自己的想法。
- ■多和师兄师姐讨论。
- 虚心,踏实,积极向上。
- 多参加体育锻炼,身心都会轻松,工作 才能更好的进行。





发表论文

- [1] **Lei Wang**, Rui Li, Ziwen Yang, Ding Li, Tao Yu, Ningyang Liu, Lei Liu, Weihua Chen, and Xiaodong Hu, Applied Physics Letters. 95, 211104 (2009).
- [2] **Lei Wang**, Rui Li, Ding Li, Ningyang Liu, Lei Liu, Weihua Chen, Cunda Wang, Zhijian Yang, and Xiaodong Hu, Applied Physics Letters. 96, 061110 (2010). 会议文章
- [1] L. Wang, W. H. Chen, R. Li, D. Li, N. Y. Liu, Y. B. Tao, L. Liu and X. D. Hu. Analysis of the blocking effect on threading dislocations by n-type GaN/AlGaN superlattices. The 4th Asia Pacific workshop on Wide-gap Simeconductors, (APWS2009).
- [2] Lei Wang, Rui Li, Ding Li, Ningyang Liu, Lei Liu, and Xiaodong Hu. Improvement of electrical properties of p-type Al0.14Ga0.86N/GaN superlattices by inserting an AlN interlayer. 第16届国际超晶格纳米结构与纳 米器件会议, (ICSNN2010), (accepted).
- [3] Lei Wang, Rui Li, Ding Li, Ningyang Liu, Lei Liu, and Xiaodong Hu. Low temperature cathodoluminescence investigation of the strain relaxtion in prestrained InGaN/GaN quantum wells. 第八届半导体发光器件会议, (ISSLED2010), (accepted).



欢迎大家给我提出建议和问题

