

# GaN 异质结的二维表面态

薛舫时

(南京电子器件研究所, 南京 210016)

**摘要:** 提出了氮化物表面强极化电荷产生薄吸附层形成的二维表面态新模型. 从薛定谔方程和泊松方程的自洽计算中得到了新的二维表面态. 计算了不同吸附层能带带阶、厚度和表面势下的表面状态, 研究了表面态与异质结构间的关联. 算得的表面能级同实验测量数据相吻合. 用该态模型解释了氮化物产生高密度表面态的原因和深表面能级与较浅的瞬态电流激活能间的矛盾.

**关键词:** 氮化物表面; 二维表面态; 极化吸附层; 电流崩塌

**EEACC:** 7320C; 2550E; 2520D

**中图分类号:** TN386      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0253-4177(2005)10-1939-06

## 1 引言

AlGaIn/GaN HFET 射频工作中的电流崩塌和高温下栅极的泄漏电流是制约器件生产和应用的两个难题. 势垒层的表面能级是产生这两个问题的关键因素, 因而成为器件研究的热点.

众所周知, GaAs 的高表面态密度产生费米能级钉扎. AlGaIn/GaN HFET 的表面态密度更高, 达  $10^{13} \text{cm}^{-2}$ , 表面费米能级的位置就成为研究的焦点. Behn 等人<sup>[1]</sup>测量了三种不同气氛下的紫外光反射谱, 发现随气氛改变而产生显著变化, 没有费米能级钉扎. Hashizume 等人<sup>[2]</sup>测量了不同表面处理工艺下的表面费米能级, 发现表面能带弯曲可以有近 1eV 的变化. 在适当的表面处理下, 表面态密度降低到  $2 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ . 肖特基势垒研究也证明了低至  $3 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$  的表面态密度<sup>[3]</sup>. 说明极性氮化物表面并不存在高密度的固有表面态密度. Nguyen 等人<sup>[4]</sup>指出, 不同器件的电流崩塌特性差别很大, 说明它不是一种本征现象, 而是由不适当工艺处理造成的.

Klein 等人<sup>[5,6]</sup>用光照射产生电流崩塌的器件来恢复漏电流, 在光离化谱中发现两个峰, 分别位于导带下 1.8eV 和 2.85eV. 后一能级的浓度随 C 含量改变而变化, 被确定为 C 沾污的能级. Hasegawa 等人<sup>[7]</sup>测量了无栅 HFET 的瞬态电流, 发现一个快

速的指数衰变过程和一个缓变的非指数响应, 得出导带下 0.37eV 的深能级和禁带中的连续表面态. Auret 等人<sup>[8]</sup>用 DLTS 谱研究了 GaN 表面的陷阱能级, 发现导带下 0.45eV 的能级具有连续能谱的特性. Fang 等人<sup>[9]</sup>的 DLTS 测量得出导带下 0.18eV 和 0.53eV 能级, 后者依赖于样品中的电场强度. Look 等人<sup>[10]</sup>测得位于导带底以下 0.34eV 和 1.04eV 的两个表面陷阱.

AlGaIn/GaN HFET 的漏电流 DLTS 谱测出了器件工作状态下的表面态. Vertiatchikh 等人<sup>[11]</sup>测得主峰能级位于导带下 1.43eV. 当器件用 SiN 钝化后该峰显著减弱, 而且能级移动到 1.427eV. Okino 等人<sup>[12]</sup>在 HFET 中测得分别位于导带底以下 0.58eV 和 1.1eV 的两个陷阱能级. 当生长介质层制成 MISHFET 后只测得导带下 0.49eV 处的一个陷阱. 在器件模型研究中, Hasegawa 等人<sup>[7]</sup>以瞬态电流激活能 0.37eV 为表面能级建立栅泄漏电流和电流崩塌的模拟理论. Meneghesso 等人<sup>[13]</sup>由栅延迟的温度变化中测得 0.3eV 的激活能. 假设表面能级是距价带顶 0.3eV 的空穴陷阱.

实验表明, 表面能级是由表面吸附、沾污及相关缺陷造成的, 同器件制作中的表面处理、杂质沾污及表面钝化有关, 而且还受器件中电场的影响. 目前对此还没有很好的理论描述. 此外, 表面能级究竟是离带边 1eV 以上的深能级, 还是像电流激活能测量中

薛舫时 男, 1939 年出生, 研究员, 从事 GaN HFET 研究.

2005-01-02 收到, 2005-06-10 定稿

获得的 0.3 ~ 0.4eV 的较浅的能级,也是一个亟待解决的重要课题. 笔者认为氮化物的重要特征是存在很强的表面极化电荷. 极化电荷吸附周围分子后形成一极化吸附层,构成二维势阱,产生二维表面态. 由此就能自洽求解薛定谔方程和泊松方程来计算二维表面态,研究它与表面吸附层的厚度、特性以及异质结能带和电场间的关联,建立起新的表面态模型.

## 2 表面态模型和表面能级计算

Kohn 等人<sup>[14]</sup>在研究 GaN HFET 的瞬态特性时指出,势垒层表面的负极化电荷会吸附分子层. 吸附层电荷平衡了沟道电子的电荷,达到电中性. 当吸附层电荷失去平衡时,就形成虚栅,产生电流的瞬态变化和电流崩塌. 吸附层同 MISHFET 中的薄介质层一样,其能带和势垒层能带间有一带阶,构成一个阱深为带阶的表面势阱. 不同表面处理可用不同的吸附层带阶来表征. 吸附层是非极性材料,它同势垒层间产生一极化电荷. 采用文献[15]中的非线性极化系数,极化电荷密度 为:

$$P = P_{AlGaN}^{sp} + P_{AlGaN}^{pz} = [-0.09x - 0.034(1-x) + 0.019x(1-x) - 0.918 + 9.541x^2 - x(0.89 + 17.429x^2)] \times 10^{-4} C/cm^2$$

式中  $x$  是 Al 组百分比;  $P_{AlGaN}^{sp}$  和  $P_{AlGaN}^{pz}$  是 AlGaN 层的自发和压电极化;  $\epsilon$  是应变,

$$\epsilon = (a_{GaN} - a_{AlGaN}) / a_{AlGaN}$$

$a_{GaN}$  和  $a_{AlGaN}$  分别为 GaN 和 AlGaN 的晶格常数. 实验证明沟道中有较密集的子带,而表面态只有相距 0.5eV 以上的两个表面能级. 这表明表面态的局域性比沟道子带更强. 由 AlGaN/GaN 异质结能带计算得出,沟道中的电子波函数被限制在约 2nm 的窄阱内,由此估计表面量子阱即吸附层的宽度约为 2nm 或更小. DL TS 和光离化实验证明表面能级比导带底低 1eV 以上. 由此估计能带带阶约在 1 ~ 1.5eV 范围. 界面极化电荷、吸附层厚度及能带带阶完整地描述了表面阱的结构,它和沟道异质结构成一个量子系统. 笔者使用最新发表的氮化物非线性极化系数<sup>[15]</sup>和 InN 带隙数据<sup>[16]</sup>编制了自洽求解薛定谔方程和泊松方程的计算软件,计算沟道中的二维电子气和二维表面态. 计算中从电子波函数的受限位置来区分这两种状态. 由于表面态的能级常比沟道电子气子带高,因此,必须从高激发态的计算中

来寻找相应的表面态. 对于能量较高的表面态,往往要计算二百多个高激发态. 为此,笔者选用有限差分方法,精心优化计算程序,保证了高激发态的计算精度.

## 3 计算结果

首先计算势垒层厚 30nm, Al 组百分比为 0.3 的 AlGa<sub>0.3</sub>N/GaN 异质结. 设表面吸附层厚 2nm, 吸附层同势垒层间的带阶为 1.2eV. 计算得到的异质结能带和二维电子气分布如图 1 所示. 异质结界面上大带阶和强极化电荷形成一个很窄的量子阱,产生强而窄的二维电子气尖峰. 阱结构不对称,右边的能带比较平缓,而左边的势垒却陡直地上升. 极化吸附层与势垒层间的大带阶和强极化电荷,构成一个更窄更深的表面阱. 产生局域性更强的高表面能级,表面态中没有填充电子. 图 2 中的实线、虚线和点划线分别画出沟道中三个子能带的波函数. 不对称的阱结构使能量较高的波函数向右扩展. 图 3 中的实线和虚线分别画出表面阱中的基态和激发态波函数. 波函数被压缩在表面层内,势垒层内只留下一个指数衰减尾巴.

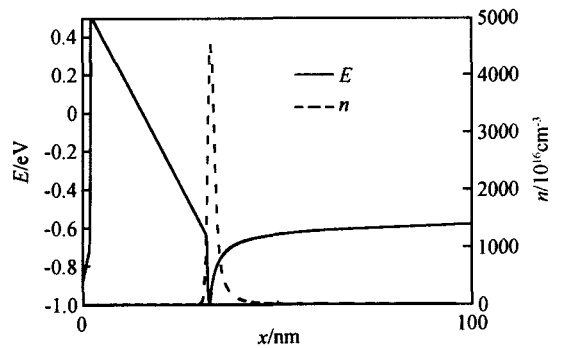


图 1 AlGa<sub>0.3</sub>N/GaN 异质结上的表面阱、能带和二维电子气分布

Fig. 1 Surface well, energy band and two dimensional electron gases at AlGa<sub>0.3</sub>N/GaN heterojunction

图 4 中的实线和虚线分别画出了基态和激发态表面能级随吸附层带阶的变化. 图中取导带底为能量零点. 随着带阶增大,表面阱变深,表面能级线性上升. 解释了不同表面处理下表面能带弯曲改变达 ~ 1eV 的实验结果<sup>[2]</sup>. 图 5 中画出了表面能级随吸附层厚度的变化. 随吸附层厚度减薄表面阱变窄,能级升高. 最近 Koley 等人<sup>[17]</sup>用 Kelvin 探针测量了 AlGa<sub>0.3</sub>N/GaN HFET 在大电压应力下栅-漏间表面

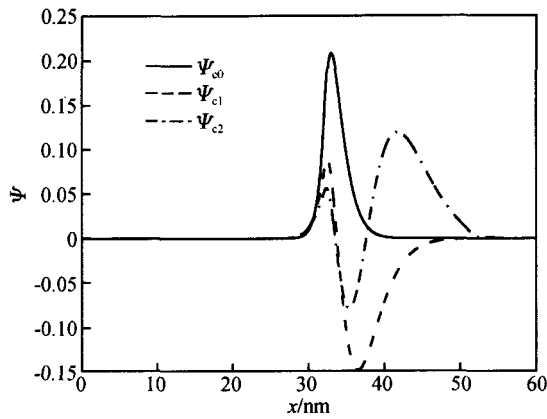


图 2 沟道中二维电子气的波函数

Fig. 2 Wave functions of two dimensional gases in channel

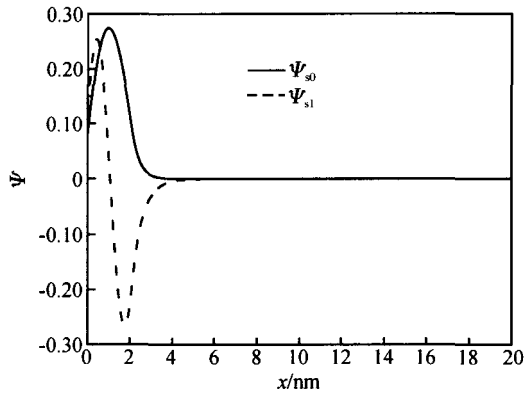


图 3 表面二维电子的波函数

Fig. 3 Wave functions of two dimensional electrons at surface

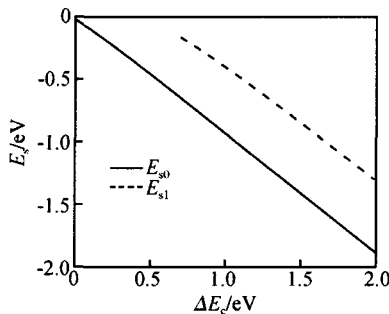


图 4 Al-GaN/GaN 异质结二维表面电子能级随表面层能带带阶的变化

Fig. 4 Two dimensional surface electron levels at Al-GaN/GaN heterojunction versus band offset at surface

电势的变化,测到了 2V 左右的表面势变动. 为此,图 6 中的实线和虚线分别画出不同表面势下的基态

和激发态表面能级. 表面势高于 - 1. 3eV 时,表面能级高于沟道子能带,电子都积聚在沟道中,表面能级的改变就比较平缓. 在低表面势下电子转向表面,能级也随之线性下降. 由此清楚地看出表面状态受沟道电子气布局制约的特性.

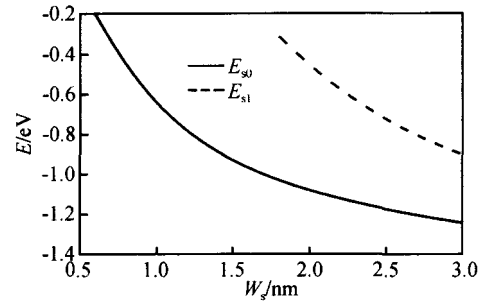


图 5 Al-GaN/GaN 异质结二维表面电子能级随吸附层厚度的变化

Fig. 5 Two dimensional surface electron levels at Al-GaN/GaN heterojunction versus depth of absorbed layer

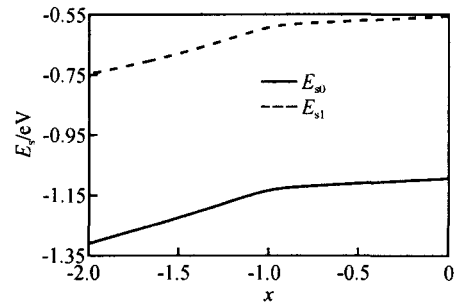


图 6 Al-GaN/GaN 异质结二维表面电子能级随表面势的变化

Fig. 6 Two dimensional surface electron levels at Al-GaN/GaN heterojunction versus surface potential

表 1 中列出了实验测得的表面能级. 能级随异质结构和表面状态变化而产生较大的分散性. 同计算能级依赖于表面极化吸附层的能带带阶,吸附层厚度和表面势的趋势相吻合. 三种 DL TS 测量都存在 - 1V 以下和 - 0. 5V 左右两个表面能级,和计算得到的基态和激发态表面能级基本一致. 二维表面模型合理地反映了表面态的局域特性. 光离化实验中测得的 TRIP(1)是基态表面能级. 高激发态表面能级上没有电子,不能观察到相应的谱线. 假设表面吸附层的厚度为 2. 2nm,吸附层的能带带阶为 1. 2eV,表面势为 - 0. 9V,则计算的基态和激发态表面能级分别为 - 1. 1eV 和 - 0. 58eV,同 DL TS 测量中测得的 # (4) 和 # (2) 能级一致. 制成 MISHFET

时,介质层把极化吸附层压得很薄,取吸附层厚度为 0.8 nm,计算得到的基态表面能级为 -0.46 eV,同他们测得的 # A 能级相近.文献[12]认为 MISHFET 中的 # A 能级是同 HFET 中的 # (2) 相当的能级.而本文计算得出的 # A 能级却是同 # (4) 相当的基态能级.文献[11]发现钝化后  $E_2$  峰显著减小,且能级移向 -1.427 eV.这表明钝化膜不均匀,个别点上仍残留有吸附层,使能级密度显著减少.残留点吸附层的变化导致  $E_2$  能级移动,较好地解释了钝化器件的实验结果.

表 1 AlGaIn/GaN 异质结表面能级的实验测量值

Table 1 Measured values of surface energy levels of AlGaIn/GaN heterojunction

Energy level	$E_s$ /eV	Measuring method	References
# (2)	- 0.58	DL TS	12
# (4)	- 1.1	DL TS	12
# A	- 0.49	DL TS	12
$E_2$	- 1.434	DL TS	11
TRIP(1)	- 1.8	photoionization	5,6
TRAP(2)	- 2.85	photoionization	5,6
A1	- 1.04	DL TS	10
C	- 0.34	DL TS	10

GaN HFET 的性能依赖于异质结构.在开关试验中,AlGaIn/InGaIn/GaN 双异质结 HFET 的表面势变化很小,不产生电流崩塌<sup>[18]</sup>.AlGaIn/AlN/GaN HFET 用薄 AlN 层来隔离势阱和势垒,抑制势垒层合金散射提高了电子气的迁移率.它还能防止沟道电子溢出到沟道外被表面态俘获,显著降低了电流崩塌<sup>[19~21]</sup>.图 7 中的实线、虚线和点划线分别画出了 AlGaIn/GaN,AlGaIn/InGaIn/GaN 和 AlGaIn/AlN/GaN 三种异质结构的能带图.其中,In 的组分比取为 0.1,AlN 厚 2 nm. AlGaIn/InGaIn/GaN 双异质结提高了沟道的右势垒. AlGaIn/AlN/GaN 中 AlN 薄势垒及其强极化电荷又增强了沟道左势垒.三者相比可看出对沟道左、右势垒的影响.当沟道电子被强电场加速激发到高激发态子带后能隧穿到表面态而产生电流崩塌.因此表面态同沟道子带的间距是研究焦点.图 8 中画出了该能量间距随吸附层厚度的变化.在薄吸附层中表面能级很高,同沟道间的相互作用较弱,不同异质结构间的偏差较小.随着吸附层增厚,表面能级降低,同异质结构间的依赖加大.在 AlN 夹层结构中,AlN 层形成很高的左势垒,增大了表面能级与沟道子带的间距.表面能级同异质结构间的关联为抑制电流崩塌提供了新思路.

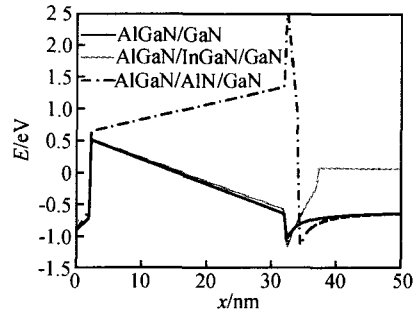


图 7 三种异质结构的能带图

Fig. 7 Energy bands for three heterostructures

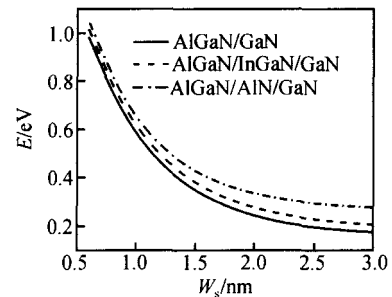


图 8 三种异质结构中表面能级与沟道电子子带间的能带间距随吸附层厚度的变化

Fig. 8 Energy intervals between surface energy level and sub-band in channel versus the depth of adsorbed layer for three heterostructures

## 4 讨论

本文从吸附层形成的表面阱出发来计算表面能级,提出了新的二维表面态模型.即使 1~2 nm 的薄吸附层就能产生高密度表面态,解释了产生高密度表面能级而又没有费米能级钉扎的难题.实测表面能级随材料生长和表面处理不同而存在较大的分散性,但可归结出相距 0.5 eV 以上的两个能级,表征了表面能级的局域性.算出的二维表面态具有基态和激发态两个能级,同实验观察趋势相符,说明表面阱模型是合理的.表面态具有类似于沟道电子的二维子带结构,依赖于异质结构和电场,不是孤立能级.最近 Oh 等人<sup>[22]</sup>用不同温度下 HFET 的加光照和加光照的漏电流差来测定表面能级的分布.他们发现表面态类似于 AlGaIn/GaN 异质界面上的二维电子态,其密度依赖于 AlGaIn 势垒层的 Al 组分比,证实了这一二维表面态理论.在不同的表面处理中,表面吸附层中产生不同的化学键,改变了吸附层的能带带阶,使表面能级移动,改变了表面能带弯

曲. 解释了 MIS 结构和钝化膜的实验结果. 从二维表面态模型来看, 钝化前的表面清洗和处理及钝化层的质量是极为重要的. 提高表面清洁度, 制作均匀的优质钝化膜, 清除吸附层化学键, 是降低表面态密度的关键.

在传统理论中, 表面态是禁带中的孤立能级, 只能同带边交换电子. 因此, 文献[7, 13]根据瞬态电流的激活能, 分别把表面能级取作导带底以下 0.37eV 的电子陷阱和价带顶以上 0.3eV 的空穴陷阱. 如果表面能级真的离带边这样近, 只要用红外光照射受电流崩塌的器件就能使电流恢复, 显然是违背实验结果的. 当沟道电子在电场加速下跃迁到与表面带持平的激发子带时, 就能隧穿达到表面态. 因此表面能级对沟道电子的俘获显然依赖于表面基态能级与沟道子带间的能量差. 实测的瞬态电流激活能正是该能量差, 而不是表面能级. 表面激发态能级较高, 一般情形下电子很难跃迁到该能级, 不影响器件工作. 研究优化的表面处理和钝化工艺, 使表面能级升高, 抑制沟道电子跃迁到表面态, 也就自然降低了电流崩塌.

沟道中的二维电子态依赖于异质结构和器件工作时的偏置状态. 而二维表面态也受这些条件的制约. 器件在大信号工作时, 沟道热电子的带间跃迁及同表面态间的隧穿过程是决定电流崩塌的关键. 这将在另外的论文中详细讨论.

## 参考文献

- [ 1 ] Behn U, Thamm A, Brandt O, et al. Unpinned behavior of the surface Fermi level of GaN detected by photoreflectance spectroscopy. *J Appl Phys*, 2000, 87(9) : 4315
- [ 2 ] Hashizume T, Ootomo S, Oyama S, et al. Chemistry and electrical properties of surfaces of GaN and GaN/ AlGaIn heterostructures. *J Vac Sci Technol*, 2001, B19(4) : 1675
- [ 3 ] Kalinina E V, Kuznetsov N I, DiMitriev, et al. Schottky barriers on n-GaN grown on SiC. *J Electron Mater*, 1996, 25(5) : 831
- [ 4 ] Nguyen C, Nguyen N X, Grider D E. Drain current compression in GaN MODFETs under large-signal modulation at microwave frequencies. *Electron Lett*, 1999, 35(16) : 1380
- [ 5 ] Klein P B, Binari S C, Kossi-Anastasiou K, et al. Investigation of traps producing current collapse in AlGaIn/ GaN high electron mobility transistors. *Electron Lett*, 2001, 37(10) : 661
- [ 6 ] Klein P B, Binari S C, Kossi K, et al. Current collapse and the role of carbon in AlGaIn/ GaN high electron mobility transistors grown by metalorganic vapor-phase epitaxy. *Appl Phys Lett*, 2001, 79(21) : 3527
- [ 7 ] Hasegawa H, Inagaki T, Ootomo S, et al. Mechanisms of collapse and gate leakage currents in AlGaIn/ GaN heterostructure field effect transistors. *J Vac Sci Technol*, 2003, 21(4) : 1844
- [ 8 ] Auret F D, Goodman S A, Koschnick F K, et al. Sputter deposition-induced electron traps in epitaxially grown n-GaN. *Appl Phys Lett*, 1999, 74(15) : 2173
- [ 9 ] Fang Z Q, Look D C, Visconti P, et al. Deep centers in a free-standing GaN layer. *Appl Phys Lett*, 2001, 78(15) : 2178
- [ 10 ] Look D C, Fang Z Q. Characterization of near-surface traps in semiconductors: GaN. *Appl Phys Lett*, 2001, 79(1) : 84
- [ 11 ] Vertiatchikh A V, Eastman L F, Schaff W J, et al. Effect of surface passivation of AlGaIn/ GaN heterostructure field-effect transistor. *Electron Lett*, 2002, 38(8) : 388
- [ 12 ] Okino T, Ochiai M, Ohno Y, et al. Drain current DLTS of AlGaIn- GaN MIS-HEMTs. *IEEE Electron Device Lett*, 2004, 25(8) : 523
- [ 13 ] Meneghesso G, Verzellesi G, Pierobon R, et al. Surface-related drain current dispersion effects in AlGaIn- GaN HEMTs. *IEEE Electron Devices*, 2004, 51(10) : 1554
- [ 14 ] Kohn E, Daumiller I, Kunze M, et al. Transient characteristics of GaN-based heterostructure field-effect transistors. *IEEE Trans Microw Theory Tech*, 2003, 51(2) : 634
- [ 15 ] Fiorentini V, Bernardini E, Ambacher O. Evidence for nonlinear polarization in nitride alloy heterostructures. *Appl Phys Lett*, 2002, 80(7) : 1204
- [ 16 ] Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, et al. Unusual properties of the fundamental band gap of InN. *Appl Phys Lett*, 2002, 80(21) : 3967
- [ 17 ] Koley G, Tilak V, Eastman L F. Slow transients observed in AlGaIn/ GaN HFETs: effects of SiN<sub>x</sub> passivation and UV illumination. *IEEE Trans Electron Devices*, 2003, 50(4) : 886
- [ 18 ] Neuburger M, Daumiller I, Zimmermann T, et al. Surface stability of InGaIn-channel based HFETs. *Electron Lett*, 2003, 39(22) : 1614
- [ 19 ] Lee J S, Kim J W, Lee J H, et al. Reduction of current collapse in AlGaIn/ GaN HFETs using AlN interfacial layer. *Electron Lett*, 2003, 39(9) : 750
- [ 20 ] Balmer R S, Hilton K P, Nash K, et al. AlGaIn/ GaN microwave HFET including a thin AlN carrier exclusion layer. *Phys Status Solidi C*, 2003, 0(7) : 2331
- [ 21 ] Balmer R S, Hilton K P, Nash K, et al. Analysis of thin carrier exclusion layers in AlGaIn/ GaN microwave heterojunction field-effect transistors. *Semicond Sci Technol*, 2004, 19(2) : L65
- [ 22 ] Oh C S, Youn C J, Yang G M, et al. Thermal distributions of surface states causing the current collapse in unpassivated AlGaIn/ GaN heterostructure field-effect transistors. *Appl Phys Lett*, 2005, 86(12) : 012106

## Two Dimensional Surface States in a GaN Heterostructure

Xue Fangshi

(*Nanjing Electronic Devices Institute, Nanjing 210016, China*)

**Abstract:** A new model of two dimensional surface states produced by a strong polarized charge on a nitride heterostructure surface is presented. The Schrödinger equation and Poisson equation are solved self-consistently to calculate the new two dimensional surface states. The surface states for different band offsets, width of absorbed layers, and surface potentials are calculated, from which the relationship between surface states and heterostructures is discussed. The calculated surface levels agree with the experimental measurements. This new two dimensional surface states model explains the origin of surface states and the contradiction between deep surface levels and the low activation energy of a transient current.

**Key words:** nitride surface; two dimensional surface states; polarization absorbed layer; current collapse

**EEACC:** 7320C; 2550E; 2520D

**Article ID:** 0253-4177(2005)10-1939-06