

界面极化效应对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结 pin 探测器光电响应的影响*

周建军[†] 江若璇 姬小利 谢自立 韩平 张荣 郑有焱

(南京大学物理系, 江苏省光电信息功能材料重点实验室, 南京 210093)

摘要: 设计了正面入射的探测波长范围限制在 326~365nm 的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结 pin 光电探测器. 利用自洽求解薛定谔-泊松方程计算了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结在无极化、完全极化和部分极化的能带图, 结合光电响应谱的模拟, 分析了界面极化效应对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结 pin 紫外光电探测器响应特性的影响并提出了改善方法.

关键词: 极化效应; AlGa_xN/GaN 异质结; pin 探测器

PACC: 7480G; 7340L

中图分类号: O472+.8

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)06-0947-04

1 引言

近年来, III-V 族氮化物材料由于具有直接带隙、组分连续可调等优异的材料特性得到广泛的关注. 蓝绿光发光二极管的商品化和激光二极管的研究进展使人们对 III-V 族氮化物材料在发光器件方面的关注进一步提高. 同时, 由于紫外探测器在宇宙飞船、火焰羽烟探测、火灾监测等领域中有重要的应用价值, 使 III-V 族氮化物紫外光电探测器件的应用研究也得到快速发展. 其中, pin 型光电探测器由于具有响应速度快、噪声低、零偏下可工作等优点成为探测器研究的一个重点. 对于 GaN 基紫外光电探测器, 为了提高 pin 光电探测器的性能, 或者为了起波长选择作用, 通常使用 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构. 作为窗口层的宽带隙 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料可以减少光信号的损耗, 增加探测器对光信号的吸收效率, 提高光电探测器的量子效率, 并且可起表面钝化作用. 由于 III-V 族氮化物具有很强的极化效应, 在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结界面会产生大量的极化电荷, 形成附加的极化电场使异质结能带弯曲, 甚至于形成界面二维电子气^[1,2]. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结的这一特性目前主要被用于制作高速微电子器件, 如高电子迁移率晶体管^[3]. 但是, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结中极化效应对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 光电探测器的影响到底如何, 则需要做深入研究, 以便为设计和制备这类探测器提供理论指导. 本文通过自洽求解薛定谔-泊松方程获得无极化、完全极化、部分极化

情况下 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ pin 紫外光电探测器的能带图, 对上述情况下光电探测器的光电响应谱进行了理论模拟, 分析了界面极化效应对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结 pin 紫外光电探测器响应特性的影响并提出了改善方法.

2 结构设计

我们设计了正面入射的探测波长范围限制在 326~365nm 的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结 pin 光电探测器, 其结构示意图见图 1. 假设样品采用金属有机化学气相沉积(MOCVD)方法在蓝宝石衬底上生长获得, 根据 GaN 基材料的禁带宽度、吸收系数等参数和目前材料生长的技术水平, p, i, n 各层的厚度和掺杂浓度设计如下: 最上层 10nm 的 p^+-GaN 的作用是为了获得更好的 p 型欧姆接触. 下面 300nm 的 $\text{p-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 作为窗口材料, Al 组分 x 选为 0.2, 起到滤去波长小于 326nm 入射光的作用, 使该探测器探测波长范围限制在 326~365nm, 其载流子浓

p^+-GaN (10nm)
$\text{p-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ (300nm)
i-GaN (200nm)
n^+-GaN ($2\mu\text{m}$)
Buffer
Sapphire (0001)

图 1 AlGa_xN/GaN 异质结 pin 探测器结构示意图

Fig. 1 Schematic structure of the AlGa_xN/GaN heterojunction pin photodetectors

* 国家重点基础研究发展规划 (批准号: 2006CB6049) 和国家自然科学基金 (批准号: 60476030, 60676057) 资助项目

[†] 通信作者. Email: jjzhouhawk@hotmail.com

2006-11-02 收到, 2007-01-18 定稿

度为 $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. i-GaN 吸收层的厚度为 200nm, 载流子浓度为 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. n^+ -GaN 层的厚度为 $2 \mu\text{m}$, 载流子浓度为 $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

3 理论模型、模拟结果及分析

利用薛定谔-泊松方程自洽求解上述设计的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结 pin 紫外探测器在无极化、完全极化、部分极化情况下的能带图^[1,4,5]. 一维单电子薛定谔方程为:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \times \frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (1)$$

其中 \hbar 是约化普朗克常数; m^* 是电子有效质量; $V(z)$ 是电子势能; E 和 Ψ 分别为电子能量和波函数. 导带底能量 $V(z) = -q\Phi(z) + \Delta E_C(z)$, ΔE_C 是导带不连续的能量差. 静电势 Φ 通过一维泊松方程求解:

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon \frac{d}{dz} \right) \Phi(z) = -q \left[\frac{1}{\epsilon_0} [N_d^+(z) - N_a^-(z) + p(z) - n(z)] \right] \quad (2)$$

其中 ϵ, ϵ_0 和 q 分别为相对介电常数、真空介电常数和电子电荷; N_d^+ 和 N_a^- 分别为离化的施主和受主浓度; p 和 n 分别是空穴和电子的浓度. n 型半导体中电子浓度和波函数的关系如下:

$$n(z) = \sum_k^m \Psi_k^*(z) \Psi_k(z) n_k \quad (3)$$

其中 m 是束缚态数目, 每个态上电子占据的浓度 n_k 为:

$$n_k = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{E_k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{(E - E_f)/kT}} dE \quad (4)$$

其中 E_k 是每个态对应的能量; E_f 和 T 分别是费米能级和温度. p 型半导体中空穴浓度和波函数的关系与 (3), (4) 式类似. 由薛定谔方程获得的波函数和能量可用于计算半导体中载流子的分布, 再将载流子分布代入泊松方程求解异质结中的电势分布, 然后用新获得的电势分布代入薛定谔方程进一步迭代求解, 直到自洽为止, 从而获得能带图. 界面极化电荷作为求解边界条件, 用于描述界面的情况. 在 AlGaIn/GaN 界面产生的极化面电荷密度 σ 为:

$$\sigma(P_{SP} + P_{PE}) = \{P_{PE}(\text{AlGaIn}) - P_{PE}(\text{GaN})\} + \{P_{SP}(\text{AlGaIn}) - P_{SP}(\text{GaN})\} \quad (5)$$

其中 P_{SP} 和 P_{PE} 分别是材料的自发极化和压电极化. 极化电荷计算中具体的公式见文献[1]. 在计算中假定忽略所有界面陷阱态及材料中陷阱的影响. 图 2 是无极化的情况下自洽求解薛定谔-泊松方程得到的器件能带图. 其中, 实线是能带, 虚线是电场分布. 从图中可以看出, 无极化时耗尽区电场主要分布在吸收层 i-GaN 侧, 由于 p 层浓度不够高, 在 p-AlGaIn 层也发生了部分耗尽(约 80nm). 图 3 是假

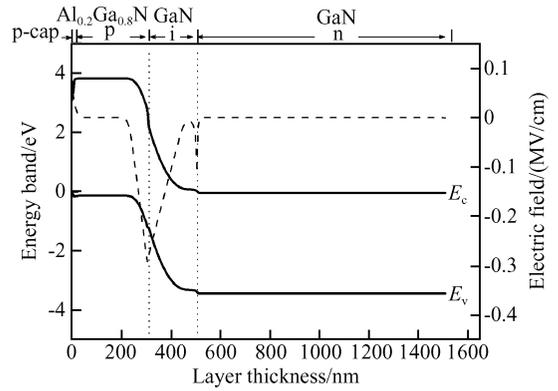


图 2 无极化时 AlGaIn/GaN 异质结 pin 探测器能带图
Fig.2 Calculated band diagrams of AlGaIn/GaN heterojunction pin photodetectors without polarization charges

设 AlGaIn 层完全应变, 此时极化效应影响最大. 对比图 2 和图 3 可以发现, 此时 p-AlGaIn 层中的耗尽区展宽(约 135nm), i-GaN 吸收层的耗尽区基本消失. 这主要是由于极化作用, 在 AlGaIn/GaN 界面产生了大量的极化电荷形成很大的附加电场——极化电场. 事实上, 自发极化与异质结两种材料本身的自发极化有关, 压电极化和材料的应变密切相关, 生长在 GaN 上 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 的临界厚度理论上约十几 nm^[3], 因此较厚的 AlGaIn 层不会完全应变. 而且材料的杂质缺陷以及生长界面的陡峭等也会显著影响自发极化的大小. 考虑到这些因素, 我们认为 AlGaIn/GaN 异质结 pin 结构中实际存在的极化电荷比理论的大为降低. 图 4 是假设 AlGaIn 层部分应变, 极化电荷只有完全应变的 10% 时的能带图. 从图中可以看出, 此时由于极化的存在依然使 p-AlGaIn 侧耗尽区展宽(约 115nm), 使 i-GaN 吸收层内的耗尽区变窄(约 130nm).

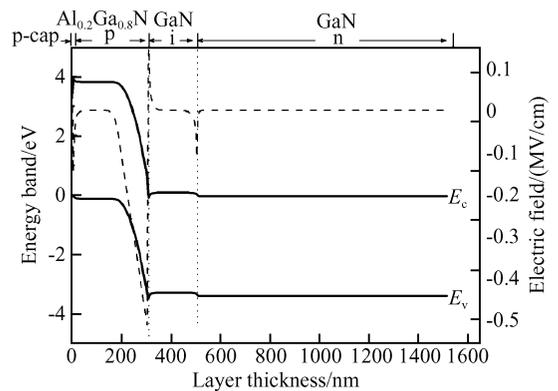


图 3 完全极化时 AlGaIn/GaN 异质结 pin 探测器的能带图
Fig.3 Calculated band diagrams of AlGaIn/GaN heterojunction pin photodetectors with full polarization charges

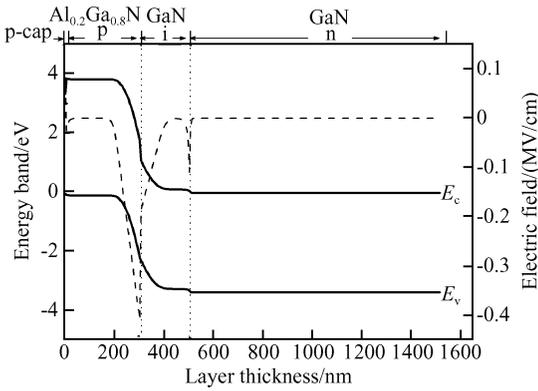


图 4 10%极化条件下 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结 pin 光电探测器的能带图

Fig.4 Calculated band diagrams of AlGaIn/GaN heterojunction pin photodetectors with 10% polarization charges

对于 pin 光电探测器, i 层加入的目的是为了增加耗尽层的宽度, 使光信号吸收主要集中在耗尽区中. 在准中性区中产生的光生载流子要通过扩散到达耗尽区才会贡献给外电路. 在本文的模拟计算中, 没有考虑耗尽区中缺陷能级对光生载流子复合的影响, 所以耗尽区中产生的光生载流子通过内部电场的作用, 几乎全部都对外电路有贡献. 因此, 当光吸收主要集中在耗尽区中会获得最大的光电响应. 为了更清楚地了解极化对 pin 光电探测器光电响应的影响, 对不同极化情况下光电响应谱进行了模拟. 根据紫外光电探测器响应模型^[6-8], 光电探测器的响应度 R 可以通过下式计算:

$$R(\lambda) = \frac{J_c(\lambda) + J_h(\lambda) + J_{dr}(\lambda)}{qF(\lambda)[1 - r(\lambda)]} \quad (6)$$

其中 $F(\lambda)$ 是一个 Hz 的带宽下、单位时间、面积下入射光子数; r, λ 和 q 分别是反射系数, 波长和电子电量; J_c, J_h 和 J_{dr} 分别代表 p 准中性区电子、n 准中性区空穴的扩散电流密度和耗尽区的漂移电流密度. 这些电流密度可通过小注入下的稳态连续方程和电流密度方程获得:

$$G_c - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_c} + \frac{1}{q} \times \frac{dJ_c}{dx} = 0 \quad (7)$$

$$G_h - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_h} + \frac{1}{q} \times \frac{dJ_h}{dx} = 0 \quad (8)$$

$$J_c = q\mu_c n_p E + qD_c \frac{dn_p}{dx} \quad (9)$$

$$J_h = q\mu_h p_n E - qD_h \frac{dp_n}{dx} \quad (10)$$

其中(7)和(9)式分别是描述 p 区中电子的连续方程和电流密度方程, (8)和(10)式分别是描述 n 区中空穴的连续方程和电流密度方程. n 和 p 分别是电子和空穴浓度, 下标 n 和 p 分别代表 n 型和 p 型半导

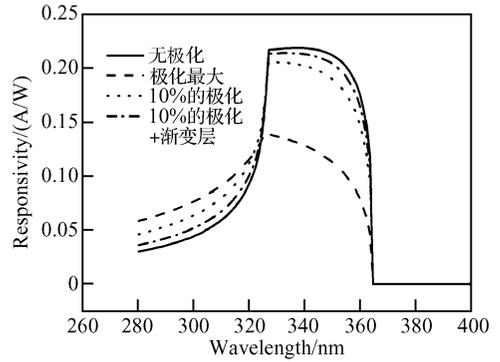


图 5 不同极化条件下 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结 pin 光电探测器的光电响应谱

Fig.5 Spectral response of AlGaIn/GaN heterojunction pin photodetectors with different polarization charges

体材料, 下标 e 和 h 分别代表电子和空穴. D, μ 和 E 分别是扩散系数, 迁移率和电场. τ 是寿命, G 是电子-空穴对的产生率可写为:

$$G(\lambda, x) = \alpha(\lambda)F(\lambda)[1 - r(\lambda)]\exp(-\alpha(\lambda)x) \quad (11)$$

其中 α 是吸收系数; x 是材料厚度. 根据这一模型, 计算了不同极化情况下 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结 pin 紫外光电探测器的响应谱, 结果见图 5. 从图中可以看出, $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$ 的响应窗口是 326~365nm. 无极化时器件响应最高, 当极化效应最大时, 由于吸收层耗尽区的减少, 导致在 GaN 侧产生的光生载流子主要通过扩散方式对外电路贡献, 因此光电响应显著下降. 而 p-AlGaIn 侧, 由于耗尽区的展宽, 增加了短波光生载流子的收集效率, 因此短波侧响应显著提高. 极化电荷为最大值 10% 时的光电响应谱与完全极化时的光电响应谱相比已经有了很大的改善, 但是仍不如无极化的情况.

为了获得更高的光电响应, 需要进一步降低极化效应的影响. 极化效应包括两部分, 压电极化和自发极化. 压电极化和材料内部的应力相关, 当应变层厚度超过临界厚度, 材料内部应变开始得到释放, 导致应力降低. 由于 300nm 厚度的 p-AlGaIn 比这种材料的临界厚度大得多, 压电极化会显著减弱, 而且在完全应变中自发极化产生的极化电荷面密度 ($0.01\text{C}/\text{m}^2$) 大于压电极化产生的极化电荷面密度 ($0.0072\text{C}/\text{m}^2$), 所以该结构在部分极化的情况下主要受到自发极化的影响. 自发极化产生的极化电荷和界面两种材料的自发极化差有关, 通过降低界面两种材料组分突变可以减少自发极化在界面诱导的极化电荷. 这一点可以考虑在异质结界面增加一层比较薄的组分渐变层. 图 6 是在 10% 极化的情况下加入了 20nm 厚的组分渐变层 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结的能带图. 和图 4 比较可以发现, 增加了组分渐

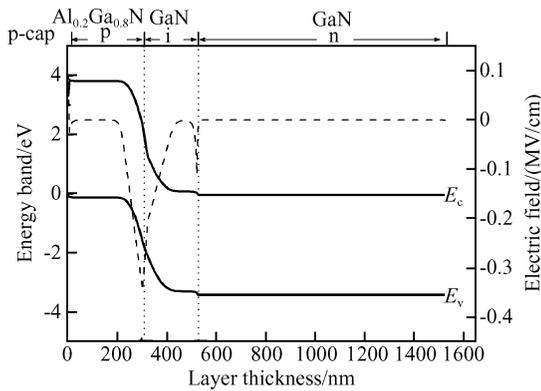


图 6 10%极化和加入组分渐变层后 AlGaIn/GaN 异质结 pin 光电探测器的能带图

Fig.6 Calculated band diagrams of AlGaIn/GaN heterojunction pin photodetectors with 10% polarization charges and 20nm alloy composition gradual change layer

变层之后, p-AlGaIn 侧耗尽区宽度有所减少 (95nm), 过渡层和 i-GaN 层中的耗尽区展宽 (170nm). 从光电响应谱中也明显可以看出, 加入了组分渐变层之后, 326~365nm 的光电响应得到提高, 326nm 以下的响应进一步得到抑制. 因此, 使用薄的组分渐变层对于减少极化效应的影响, 提高异质结 pin 探测器的光电响应有明显的作用.

4 结论

在异质结 pin 光电探测器中, 由于极化效应的存在, 导致 i 层中耗尽区宽度减少, 使光电探测器的响应降低. 在完全极化的理想情况下, 光电探测器

的响应几乎下降一半. 异质结界面两边材料组分相差越大, 极化对 pin 探测器的影响也会越大, 这在 pin 探测器设计的时候需要注意. 通过在结构中加入组分渐变层可以有效降低极化效应的影响, 提高光电探测器的响应.

参考文献

- [1] Ambacher O, Smart J, Shealy J R, et al. Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGaIn/GaN heterostructures. *J Appl Phys*, 1999, 85(6): 3222
- [2] Ambacher O, Smart J, Shealy J R, et al. Mechanism of two-dimensional electron gas formation in Al_xGa_{1-x}N/GaN heterostructures. *Appl Phys Lett*, 2002, 81(7): 1249
- [3] Khan A, Yang J W, Simin G. Strain energy band engineering approach to AlN/GaN/InN heterojunction devices. *International Journal of High Speed Electronics and Systems*, 2002, 12(2): 401
- [4] Tan I H, Snider G L, Chang L D, et al. A self-consistent solution of Schrodinger-Poisson equations using a nonuniform mesh. *J Appl Phys*, 1990, 68(8): 4071
- [5] Zervos M, Kostopoulos A, Constantinidis G, et al. Investigation into the charge distribution and barrier profile tailoring in AlGaIn/GaN double heterostructures by self-consistent Poisson-Schrodinger calculations and capacitance-voltage profiling. *J Appl Phys*, 2002, 91(7): 4387
- [6] Morkoc H, Carlo A D, Cingolani R. GaN-based modulation doped FETs and UV detectors. *Solid-State Electron*, 2002, 46: 157
- [7] Razeghi M, Rogalski A. Semiconductor ultraviolet detectors. *J Appl Phys*, 1996, 79: 7433
- [8] Hanzaz M, Bouhdada A, Monroy E, et al. Modeling of the spectral response of Al_xGa_{1-x}N p-n junction photodetectors. *Eur Phys J Ap*, 2000, 11: 29

Influence of Interface Polarization Effects on Photoelectric Response of AlGaIn/GaN Heterojunction pin Photodetectors*

Zhou Jianjun[†], Jiang Ruolian, Ji Xiaoli, Xie Zili, Han Ping, Zhang Rong, and Zheng Youdou

(Key Laboratory of Advanced Photonic and Electronic Materials, Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

Abstract: A 326~365nm Al_xGa_{1-x}N/GaN heterojunction pin photodetector is designed. Energy band diagrams of this structure with complete polarization and partial polarization and without polarization are obtained by self-consistent Schrodinger-Poisson calculation. Meanwhile, the photoelectric response spectrum of the photodetector is simulated. Using the energy band diagram and photoelectric response spectrum, the influence of the interface polarization effects on the photoelectric response of the photodetector is analyzed.

Key words: polarization effects; AlGaIn/GaN heterojunction; pin photodetector

PACC: 7480G; 7340L

Article ID: 0253-4177(2007)06-0947-04

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (No. 2006CB6049) and the National Natural Science Foundation of China (Nos. 60476030, 60676057)

[†] Corresponding author. Email: jzzhouhawk@hotmail.com

Received 2 November 2006, revised manuscript received 18 January 2007