

國立交通大學

電子工程學系電子研究所碩士班

碩士論文

P 型氮化鋁鎵/氮化鎵超晶格之電性模擬



Simulation of Electrical Properties of P-type

AlGa_N/Ga_N Superlattices

研究生：陳俞謙

指導教授：顏順通 博士

中華民國九十四年六月

P 型氮化鋁鎵/氮化鎵超晶格之電性模擬
Simulation of Electrical Properties of P-type
AlGa_N/Ga_N Superlattices

研究生：陳俞謙

Student : Yu-Chen Chen

指導教授：顏順通

Advisor : Shun-Tung Yen

國立交通大學

電子工程學系電子研究所碩士班



Submitted to Department of Electronics Engineering
College of Electrical Engineering and Computer Science
National Chiao Tung University

In partial Fulfillment of the Requirements

For the Degree of Master in

Electrical Engineering

June 2005/6/29

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十四年六月

P 型氮化鋁鎵/氮化鎵超晶格之電性模擬

學生：陳俞謙

指導教授：顏順通博士

國立交通大學電子工程研究所 碩士班

摘要

本論文利用漂移擴散電流模型及熱離子發射電流模型且考慮壓電場效應下，計算 P 型塊材氮化鎵及氮化鋁鎵/氮化鎵超晶格之電流電壓特性，發現 P 型氮化鋁鎵/氮化鎵超晶格之電洞藉由熱離子發射機制產生之電流電壓特性可以比塊材氮化鎵之電洞藉由漂移擴散機制產生之電流電壓特性還好。

對於氮化鎵的 wurtzite 結構，我們也研究不同方向(Ga-face、N-face)之壓電場對於氮化鋁鎵/氮化鎵超晶格之電流電壓特性之影響，進而發現壓電場之不對稱效應會造成超晶格之邊界出現尖型能障，阻礙電洞流動而造成跨壓，損害元件的操作特性，因而提出了在氮化鋁鎵中採用漸變式鋁之組成成份來消除壓電場之不對稱效應，改善超晶格邊界之尖型能障，進而改良元件操作特性。

Simulation of Electrical Properties of P-type AlGa_N/Ga_N Superlattices

Student : Yu-Chen Chen

Advisors : Dr. Shun-Tung Yen

Institute of Electronics Engineering

National Chiao Tung University

ABSTRACT

In the thesis, we have performed a theoretical investigation of the electrical properties and current-voltage characteristics of p-type bulk Ga_N and AlGa_N/Ga_N superlattices. The calculations are based on the nonlinear Poisson equation, drift diffusion current model, and thermionic emission current model, with piezoelectric field effect taken into account. We found that the current-voltage characteristics of p-type AlGa_N/Ga_N superlattices are better than those of p-type bulk Ga_N because the holes in AlGa_N/Ga_N superlattices transport mostly by thermionic emission mechanism, while the holes in bulk Ga_N transport mostly by drift diffusion mechanism.

For wurtzite structure, We found that the current-voltage characteristics of AlGa_N/Ga_N superlattices with different direction of piezoelectric field (Ga-face ∖ N-face) is different. We also found that there is a spike potential on the boundary of superlattices due to the asymmetry of piezoelectric field. The spike potential will obstruct the holes and may cause too much joule heat to damage the device which uses the superlattices structure. For this reason, we used the structure of a gradual change of Al composition to eliminate the asymmetry of piezoelectric field and the spike potential, in order to improve the electrical properties of the AlGa_N/Ga_N superlattices.

誌謝

首先要感謝父母及二位姐姐在生活及學業上全力支持，讓我在求學生涯中可以無後顧之憂，順利得到碩士學位。

感謝指導教授顏順通老師，顏老師適時地點出我在學習中的盲點，讓我在求學研究的過程中可以事半功倍。

感謝實驗室的夥伴們，士哲、德賢、璧如、立欣、佩鋼、信佑、正國、宗澤、哲民，有你們的幫助與陪伴我才有充實的碩士生涯，也特別感謝士哲學長對我碩士論文的指導。



陳俞謹

民國 94 年 6 月

目錄

中文摘要	i
英文摘要	ii
誌謝	iii
目錄	iv
圖目錄	v
符號說明	viii
一、	緒論	1
二、	理論	2
2-1	異質接面結構之彎曲能帶	2
2-1-1	基本理論	2
2-1-2	Jacobian-Newton 疊代法	4
2-1-3	改善收斂速度與情況之方法	5
2-2	電流注入	6
2-2-1	漂移擴散電流模型(Drift-Diffusion Current Model)	6
2-2-2	熱離子發射電流模型(Thermionic Emission Current Model)	7
2-3	壓電場效應(Piezoelectric Field Effect)	9
三、	結果與討論	11
3-1	電荷分佈及空間平均電洞濃度	12
3-2	考慮及不考慮壓電場之擴散漂移電流	19
3-3	考慮及不考慮壓電場之熱離子發射電流	20
3-4	改善尖型能障之結構	25
四、	結論	30
參考文獻	31
簡歷	33

圖目錄

(圖 1) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ band diagram without piezoelectric field ($L=10\text{\AA}$)	13
(圖 2) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ charge distribution without piezoelectric field ($L=10\text{\AA}$)	13
(圖 3) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ band diagram with piezoelectric field ($L=10\text{\AA}$)	13
(圖 4) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ charge distribution with piezoelectric field ($L=10\text{\AA}$)	13
(圖 5) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ band diagram without piezoelectric field ($L=20\text{\AA}$)	14
(圖 6) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ charge distribution without piezoelectric field ($L=20\text{\AA}$)	14
(圖 7) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ band diagram with piezoelectric field ($L=20\text{\AA}$)	14
(圖 8) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ charge distribution with piezoelectric field ($L=20\text{\AA}$)	14
(圖 9) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ band diagram without piezoelectric field ($L=30\text{\AA}$)	15
(圖 10) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ charge distribution without piezoelectric field ($L=30\text{\AA}$)	15
(圖 11) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ band diagram with piezoelectric field ($L=30\text{\AA}$)	15
(圖 12) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ charge distribution with piezoelectric field ($L=30\text{\AA}$)	15
(圖 13) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ band diagram without piezoelectric field ($L=40\text{\AA}$)	16
(圖 14) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ charge distribution without piezoelectric field ($L=40\text{\AA}$)	16
(圖 15) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ band diagram with piezoelectric field ($L=40\text{\AA}$)	16
(圖 16) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ charge distribution with piezoelectric field ($L=40\text{\AA}$)	16
(圖 17) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ band diagram without piezoelectric field ($L=60\text{\AA}$)	17
(圖 18) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ charge distribution without piezoelectric field ($L=60\text{\AA}$)	17
(圖 19) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ band diagram with piezoelectric field ($L=60\text{\AA}$)	17
(圖 20) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ charge distribution with piezoelectric field ($L=60\text{\AA}$)	17
(圖 22) Drift-diffusion current and voltage characteristic of Bulk GaN and superlattices with/without piezoelectric field	18
(圖 23) Thermionic emission current and voltage characteristic of Bulk GaN and superlattices with/without piezoelectric field	19

(圖 24)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN without piezoelectric field (Current density = 0 A/cm ²)	22
(圖 25)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN with N-face piezoelectric field (Current density = 0 A/cm ²)	22
(圖 26)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN with Ga-face piezoelectric field (Current density = 0 A/cm ²)	22
(圖 27)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN without piezoelectric field (Current density = 49 A/cm ²)	23
(圖 28)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN with N-face piezoelectric field (Current density = 49 A/cm ²)	23
(圖 29)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN with Ga-face piezoelectric field (Current density = 49 A/cm ²)	23
(圖 30)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN without piezoelectric field (Current density = 841 A/cm ²)	24
(圖 31)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN with N-face piezoelectric field (Current density = 841 A/cm ²)	24
(圖 32)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN with Ga-face piezoelectric field (Current density = 841 A/cm ²)	24
(圖 33)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN with Ga-face piezoelectric field (L=20Å , Ns=40)	25
(圖 34)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN with Ga-face piezoelectric field (L=20Å , Ns=80)	25
(圖 35)	Al _{0.15} Ga _{0.85} N/GaN with Ga-face piezoelectric field (L=40Å , Ns=20)	26
(圖 36)	Conventional structure band diagram without piezoelectric field (L=20Å , Ns=40 , Current density = 0 A/cm ²)	27
(圖 37)	Conventional structure band diagram with piezoelectric field (L=20Å , Ns=40 , Current density = 0 A/cm ²)	27
(圖 38)	New structure band diagram without piezoelectric field	

	($L=20\text{\AA}$, $N_s=40$, Current density = 0 A/cm^2)	27
(圖 39)	New structure band diagram with piezoelectric field	
	($L=20\text{\AA}$, $N_s=40$, Current density = 0 A/cm^2)	27
(圖 40)	Conventional structure band diagram without piezoelectric field	
	($L=20\text{\AA}$, $N_s=40$, Current density = 324 A/cm^2)	28
(圖 41)	Conventional structure band diagram with piezoelectric field	
	($L=20\text{\AA}$, $N_s=40$, Current density = 324 A/cm^2)	28
(圖 42)	New structure band diagram without piezoelectric field	
	($L=20\text{\AA}$, $N_s=40$, Current density = 324 A/cm^2)	28
(圖 43)	New structure band diagram with piezoelectric field	
	($L=20\text{\AA}$, $N_s=40$, Current density = 324 A/cm^2)	28
(圖 44)	I-V curve of conventional and new structure with/without piezoelectric field	29



符號說明

q : elementary charge

ε : dielectric constant

ε_0 : permittivity in free space

ϕ : electrostatic potential

$F_{1/2}$: Fermi-Dirac integral

N_d : concentration of donor

N_a : concentration of acceptor

N_d^+ : concentration of ion donor

N_a^- : concentration of ion acceptor

N_c : conduction band effective density of state

N_v : valance band effective density of state

g_d : conduction band degeneracy factor

g_a : valance band degeneracy factor

E_d : energy state of donor

E_a : energy state of acceptor

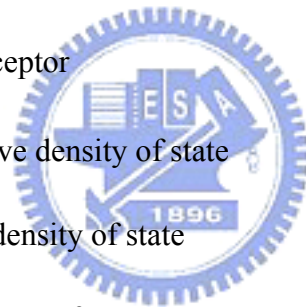
E_f : fermi level

E_{fn} : quasi fermi level of electron

E_{fp} : quasi Fermi level of hole

μ_n : mobility of electron

μ_p : mobility of hole



一、緒論

近十年來，III-V 族氮基半導體由於能隙調變範圍大以及異質接面的載子濃度高，在高速電子元件及光電元件應用廣泛，如 HEMT 及藍紫外光發光二極體，雷射二極體。

但 III-V 族氮基半導體一直面臨到的問題則是受體雜質 Mg 的解離能高至 230meV，以致於 P 型區域摻雜不易。對雷射二極體應用來說，此問題會造成 P 型區域阻值過高，壓降過大，從量子井漏出來的電子在此區域形成大量漂移漏電流，進而燒毀雷射二極體。目前日本的 Nakamura[1]的解決方法是將 P 型區域由塊材(Bulk)的 GaN 改成 AlGaIn/GaN 所形成的低阻值超晶格(superlattices)。

對於 AlGaIn/GaN 所形成的超晶格為何阻值較低，有許多人的看法[2]是由於 AlGaIn/GaN 與基板晶格不匹配而在其中產生形變，進而產生壓電場(piezoelectric field)。此現象會造成在 AlGaIn/GaN 界面處有大量電洞累積，形成二維電洞氣，因此阻值降低。對於此現象 Peter Kozodoy[3][4]團隊便提出在 AlGaIn/GaN 界面作調變摻雜，可使二維電洞氣在 AlGaIn/GaN 的界面二維平面有較高的遷移率(mobility)。

不過至今仍僅限於討論壓電場對載子解離及分佈的影響，沒有對於垂直方向電流有較完整的描述，也就是壓電場所形成的二維電洞氣對於垂直方向電流有沒有貢獻？因此我們將用漂移擴散電流模型來計算塊材 GaN 以及 AlGaIn/GaN 超晶格的垂直方向電流，但由於此模型無法對 AlGaIn/GaN 超晶格有較完整的描述，所以我們再進一步用熱離子發射電流模型來計算 AlGaIn/GaN 超晶格垂直方向的電流。可以發現 AlGaIn/GaN 超晶格的熱離子發射電流電壓特性比塊材 GaN 的漂移擴散電流電壓特性還好。而再考慮壓電場則會使 AlGaIn/GaN 超晶格的熱離子發射電流電壓特性稍微變差，原因為壓電場使得電洞所要跨過的能障變高。

我們將會討論 Ga-face、N-face 壓電場對於載子解離及分佈的一些影響及產生隱藏性的問題，以及二種電流模型的適用性及差異。

二、理論

2-1 異質接面結構之彎曲能帶

當二種不同半導體材料接觸在一起時，由於整體費米能階需達成平衡，以及材料間的傳導能帶及價電能帶偏差值（band offset）需維持固定，在接面處會形成空乏區以及彎曲能帶，使載子在其中達成動平衡，整體電流總和為零。

2-1-1 基本理論

欲計算彎曲能帶，需解出一維非線性 Poisson 微分方程[5]：

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\epsilon(x) \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right] = -q \epsilon_0^{-1} [p(x, \phi) - n(x, \phi) + N_d^+(x, \phi) - N_a^-(x, \phi)] \quad (1)$$

其中

$$n(x) = N_c(x) F_{1/2} \left(\frac{E_f - E_c(x)}{K_b T} \right) \quad (2)$$

$$p(x) = N_v(x) F_{1/2} \left(\frac{E_v(x) - E_f}{K_b T} \right) \quad (3)$$

$$N_d^+(x) = N_d(x) / (1 + g_d \exp((E_f - E_d) / K_B T)) \quad (4)$$

$$N_a^-(x) = N_a(x) / (1 + g_a \exp((E_a - E_f) / K_B T)) \quad (5)$$

$$E_c(x) = E_c(\text{flatband}) + q\phi(x) \quad E_v(x) = E_v(\text{flatband}) + q\phi(x) \quad (6)$$

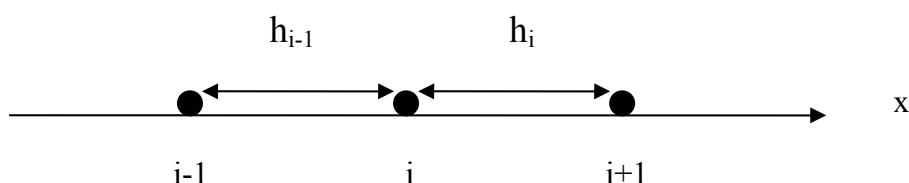
欲解出此非線性方程可用猜測初始值及疊代方式求得近似解，在疊代過程中，由於為熱平衡零偏壓之下，整體的費米能階 $E_f = \text{定值}$ ，由最左右二層端點的摻雜濃度決定，

以下為疊代過程：

步驟	輸入	方程式	輸出
1	猜測初始值：flat band	(2),(3),(4),(5)	$n(x), p(x), N_d^+(x), N_a^-(x)$
2	$n(x), p(x), N_d^+(x), N_a^-(x)$	(1)	$\Phi(x)$

3	$\Phi(x)$	(6)	$E_c(x), E_v(x)$
4	$E_c(x), E_v(x)$	(2),(3),(4),(5)	$n(x), p(x), N_d^+(x), N_a^-(x)$
5	重覆 2~4 直到 $\Phi(x)$ 收斂		

在步驟 2 時，(1)式可由有限差分法展開，可變為聯立方程組，當取了 N 點，便有 N 個方程式聯立，取點方式由下圖表示。



當 i 不為接面邊界上的點時，需滿足的方程為(7)式。當 i 為接面上的點時，接面邊界條件為電位移連續即(8)式，端點邊界條件為 Dirichlet 邊界條件(9)式。

$$\frac{\varepsilon_i \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h_i} - \varepsilon_{i-1} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h_{i-1}}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} = -q\varepsilon_0^{-1} [p(\phi_i) - n(\phi_i) + N_a^+(\phi_i) - N_a^-(\phi_i)] \quad (7)$$

$$\varepsilon_i \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h_i} = \varepsilon_{i-1} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h_{i-1}} \quad (8)$$

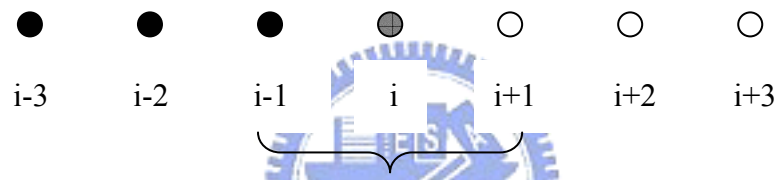
$$\phi(0) = 0 \quad \phi(L) = 0 \quad (9)$$

將此聯立方程組寫成矩陣型式 $A\Phi = B$ ，便可直接左乘 A 的反矩陣得到 Φ 向量，即為用有限差分法所取之點上的 Φ 值，但用反矩陣的方法得到之解在疊代過程中會無法收斂，原因是(1)式為二階微分方程，給定 Dirichlet boundary condition 會得到滿足方程式但不符合物理意義的解：無電荷存在的區域仍會有一電場定值存在。因此在下節將討論穩定的數值疊代方法：Jacobian-Newton 疊代法。

2-1-2 Jacobian-Newton 疊代法

此方法的精神則是不將有限差分法所展開的 N 個方程式聯立，而用 Newton 法逐步解出單一方程式，並將解出的 Φ 值疊代到下一個方程式，符合 Jacobian 法的精神，所以稱為 Jacobian-Newton 疊代法。在解上節中疊代步驟 2~5 時，不使用反矩陣求解，而改用 Jacobian-Newton 疊代法。

當 i 不為接面邊界上的點時，需滿足的方程式為(7)式。首先可將 N 個點的初始值設為零，解第 i 個方程式時，第 $i-1$ 個點用已解出的新值代入，第 $i+1$ 個點用初始值代入，此時(7)式成為非線性一維二階微分方程，唯一的未知數為 Φ_i ，可用 Newton 法解出 Φ_i ，解出的 Φ_i 則要代入第 $i+1$ 個方程式當作已知值。若 i 為接面邊界上的點時，則只要將需滿足的方程式改為(8)式。解完 N 個點後，再重回第 1 點進行下一次疊代，直到收斂。



i 不為接面邊界上的點：代入(7)式

i 為接面邊界上的點：代入(8)式

- 在本次疊代中已解出的新值
- ◐ 欲解之值
- 需代入上次疊代之值

若使用 Jacobian-Newton 疊代法，疊代步驟改為：

步驟	輸入	方程式	輸出
1	$E_c(x), E_v(x)$ $E_f = \text{定值}$	(2),(3),(4),(5) (1)	$n(x), p(x), N_d^+(x), N_a^-(x)$ $\Phi(x)$
2	$\Phi(x)$	(6)	$E_c(x), E_v(x)$
3	重覆 1~2 直到 $\Phi(x)$ 收斂		

當收斂完成後，需滿足電中性，即為整體正電荷與負電荷值相等：

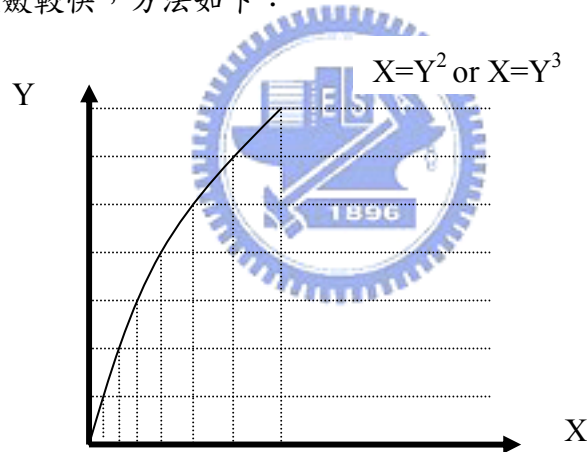
$$\frac{1}{L} \int_0^L n(x) dx + \frac{1}{L} \int_0^L N_a^-(x) dx = \frac{1}{L} \int_0^L p(x) dx + \frac{1}{L} \int_0^L N_d^+(x) dx \quad (10)$$

由於 finite difference 而改為 discrete 形式：

$$\frac{1}{L} \sum_{i=1}^N n_i \times h_i + \frac{1}{L} \sum_{i=1}^N N_{ai}^- \times h_i = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^N p_i \times h_i + \frac{1}{L} \sum_{i=1}^N N_{di}^+ \times h_i \quad (11)$$

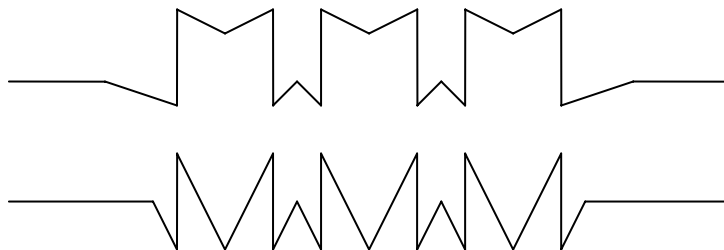
2-1-3 改善收斂速度與情況之方法

由(7)式可知，當摻雜濃度增加時， Φ 在疊代時的變化量較大，因此收斂速度快，同理 h 大也會使得收斂速度快，但會造成能帶圖左右不對稱以及滿足電中性的情形較差， h 小時則相反。為了使收斂速度快，能帶圖左右對稱以及滿足電中性情形較好，可採用非等距間隔，在接面附近的間隔較小，使得圖形對稱及滿足電中性，遠離接面的區域間隔較大，可使收斂較快，方法如下：



此時靠近接面的地方可以有較小的間距，遠離接面的地方有較大的間距。

另外，在初始值猜測時，可以用其他更接近收斂值的 band 來取代 flat band，以加快收斂速度，例如用線性三角形的 band，而其斜率可以由各層的費米能階，能障及能井寬度來估計。



2-2 電流注入

當加上偏壓或注入電流時，欲計算電流電壓關係曲線以及能帶的變化，可考慮以下二種模型：漂移擴散電流模型及熱離子發射電流模型。

2-2-1 漂移擴散電流模型

在半導體中，電流的形成可由電子電洞受到電場而漂移，以及電子電洞濃度梯度而擴散二種方式來描述，此種描述會用到準費米能階的假設，即電子系統和電洞系統在整體中的任何位置各自達成熱平衡，有各自的 Fermi-Dirac 分佈，或是簡化成 Boltzmann 分佈，而準費米能階會是位置的連續函數。

漂移擴散電流：

$$J_n(x) = q\mu_n n(x)E + qD_n \frac{\partial n(x)}{\partial x} \quad (12)$$

$$J_p(x) = q\mu_p p(x)E - qD_p \frac{\partial p(x)}{\partial x} \quad (13)$$

若電子電洞濃度用 Boltzmann 分佈近似：

$$n(x) = N_c(x) \exp\left(\frac{E_{fn}(x) - E_c(x)}{K_b T}\right) \quad (14)$$

$$p(x) = N_v(x) \exp\left(\frac{E_v(x) - E_{fp}(x)}{K_b T}\right) \quad (15)$$

代入(12)(13)式，得

$$J_n(x) = \mu_n n(x) \frac{\partial E_{fn}(x)}{\partial x}$$
$$J_p(x) = \mu_p p(x) \frac{\partial E_{fp}(x)}{\partial x} \quad (16)$$

再加上穩態電流連續方程式，不考慮電子電洞結合：

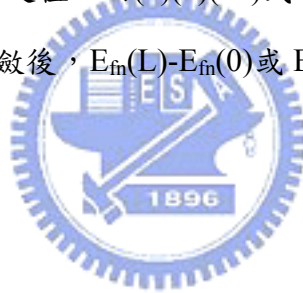
$$\nabla \cdot J(x) = 0 \quad (17)$$

給定左右端點的摻雜濃度，即固定住 $E_c(0)-E_{fn}(0)$ ， $E_c(L)-E_{fn}(L)$ ，或是 $E_v(0)-E_{fp}(0)$ ，

$E_v(L)-E_{fp}(L)$ ，再經由疊代求出其中 Band 的變化及 I-V 曲線，疊代過程如下：

步驟	輸入	方程式	輸出
1	$E_c(x), E_v(x), E_{fn}(x), E_{fp}(x)$	(2),(3),(4),(5) (1)	$n(x), p(x), N_d^+(x), N_a^-(x)$ $\Phi(x)$
2	$\Phi(x)$	(6)	$E_c(x), E_v(x)$
3	$E_c(x), E_v(x)$ $J_n(x), J_p(x)$	(2),(3)(16)	$n(x), p(x)$ $E_{fn}(x), E_{fp}(x)$
4	重覆 1~3 直到 $\Phi(x), E_{fn}(x), E_{fp}(x)$ 收斂		

在步驟 1，(1)式仍由 Jacobian-Newton 疊代法解出得到 $\Phi(x)$ 。在步驟 3，輸入的 $J_n(x)$ 及 $J_p(x)$ 由(17)式得知可以給一定值，而(2)(3)(16)式合起來為非線性一階微分方程，可用 Newton 法逐點解出。疊代收斂後， $E_{fn}(L)-E_{fn}(0)$ 或 $E_{fp}(L)-E_{fp}(0)$ 為對應到之 J 的外加偏壓 V，即得到 J-V 關係。



2-2-2 熱離子發射電流模型

對於異質介面來說，漂移擴散電流模型無法對載子的移動作出完整的描述，例如無法描述載子遇到能障阻擋，只有較高能量的載子能從能障上方通過，以及載子經過能障區域時不一定能達成 Fermi-Dirac 分佈，即無法有準費米能階的近似，也就無法用漂移擴散電流模型計算其間的電流。而熱離子發射電流模型則可以考慮這些現象[6][7][8][9]。

但熱離子發射電流模型也並非最完整的描述，在此所用的模型仍有一些假設或近似如下：

1. 高於能障能量的載子可完全通過能障，不會被能障反射。
2. 低於能障能量的載子無法通過能障，沒有穿隧現象。
3. 能井域仍需假設載子達成 Fermi-Dirac 分佈，再簡化為 Boltzmann 分佈，便可將多個能障分開計算，再耦合。

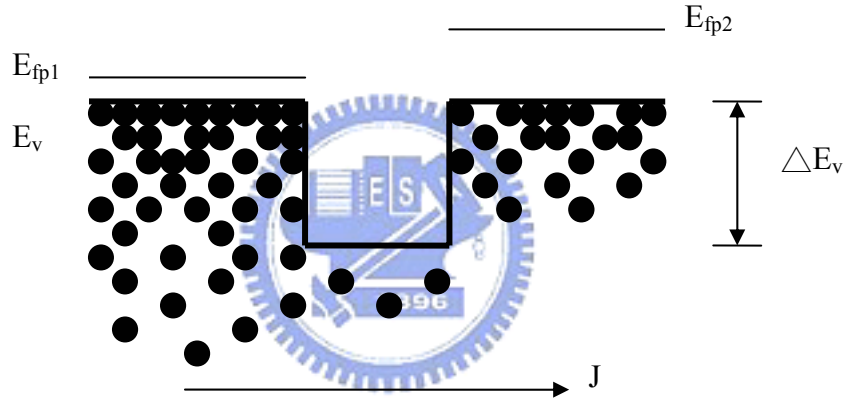
4. 拋物線能帶近似，即有等效電子電洞質量，而電洞的等效質量為三個共價帶的等效質量之平均值[10]。

基於上述的假設，可將一般化的熱離子發射電流模型(18)式簡化為(19)式以及將超晶格簡化為單一能障問題。(18)及(19)式皆為淨電流。

$$J = \frac{2q}{(2\pi)^3} \iiint \frac{1}{\eta} \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \right) dk_x dk_y dk_z T(E, k_y, k_z) [f_1(E(\vec{k})) - f_2(E(\vec{k}))] \quad (18)$$

$$J = A^* T^2 \left[\exp\left(\frac{E_{fp1} - E_v - \Delta E_v}{K_b T}\right) - \exp\left(\frac{E_{fp2} - E_v - \Delta E_v}{K_b T}\right) \right] \quad (19)$$

其中 $A^* = 4\pi m^* q k^2 / h^3$



由(19)式及上圖得知，若要有淨電流值 J ，則能障二旁的費米能階 E_{fp1} ， E_{fp2} 需有差值，當 E_{fp1} ， E_{fp2} 求出後，仍要進行疊代來調整 E_v ， E_{fp1} ， E_{fp2} 直到收斂。在疊代過程中需要知道能障上的載子濃度，也因此雖然能障的費米能階並無意義，仍將其用漂移擴散電流模型求出，以便於計算載子濃度。熱離子發射電流由能障的高度決定，與能障的費米能階關係不大，所以此假設對結果無太大影響。當一個能障收斂完成後，再耦合下一個能障，以避免費米能階收斂到錯誤值。

2-3 壓電場效應

當在基板(substrate)上所成長的薄膜(layer)與基板的晶格常數不相匹配時，薄膜中的原子會受到壓縮(compressive)或拉伸(tensile) 應變(strain)而形變，在其中產生極化，形成壓電場(Piezoelectric Field)。

對於 GaN 的 Wurtzite 結構，壓電場為下式：

$$P_{pz} = e_{33}\varepsilon_{zz} + e_{31}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \quad (20)$$

其中

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_L}{a_L} \quad (21)$$

$$\varepsilon_{zz} = -2 \frac{c_{13}}{c_{33}} \varepsilon_{xx}$$

a_s 為基板的晶格常數， a_L 為薄膜的晶格常數。以下為材料參數[11]：

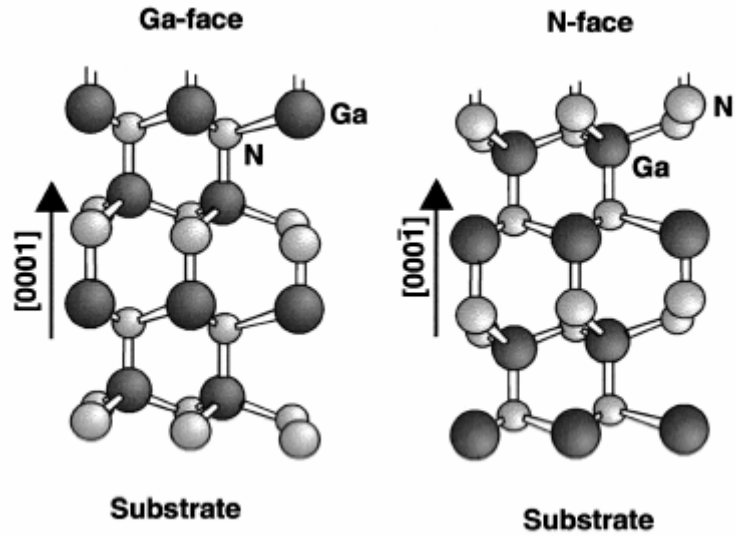
	$c_{13}(\text{N/m}^2)$	$c_{33}(\text{N/m}^2)$	$e_{31}(\text{N/m}^2)$	$e_{33}(\text{N/m}^2)$
AlN	12×10^{11}	39.5×10^{11}	-0.6	1.46
GaN	10.9×10^{11}	35.5×10^{11}	-0.49	0.73

壓電場為磊晶完成後即存在於晶體之中，不會因為摻雜濃度及外加偏壓而改變，所以在計算及疊代過程中，可把壓電場的效應放入 flat band 裡，即(6)式改為(20)式：

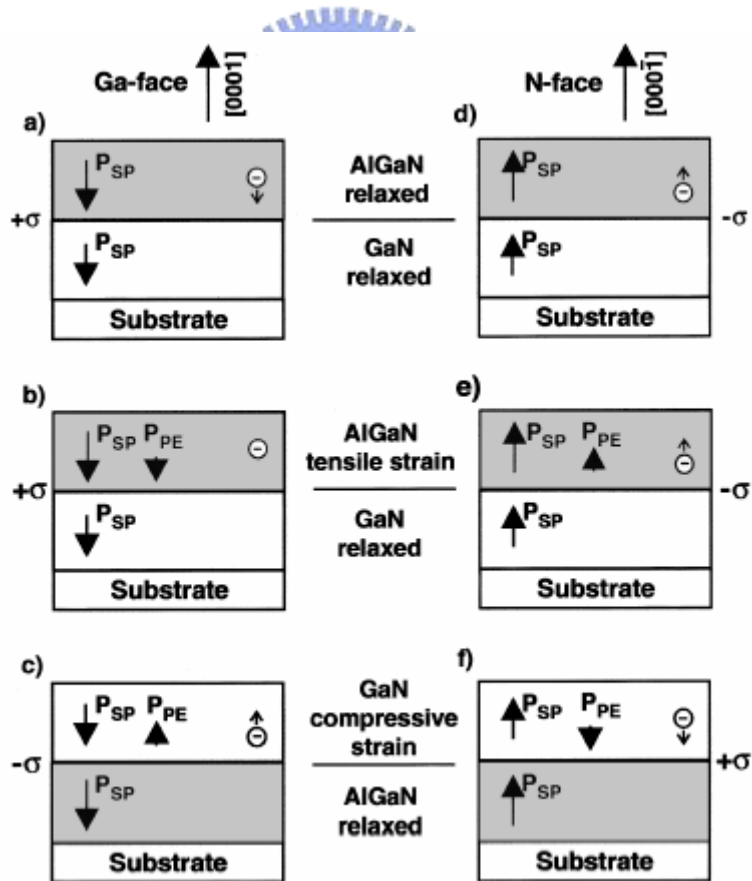
$$E_c(x) = E_c(\text{flatband} + \text{piezoelectric.field}) + q\phi$$

$$E_v(x) = E_v(\text{flatband} + \text{piezoelectric.field}) + q\phi \quad (22)$$

壓電場(P_{PE})的方向可由磊晶方式決定，下圖中 Ga-face 通常可由 MOCVD 磊晶方式得到，N-face 通常可由 MBE 磊晶方式得到。



除了 Ga-face 及 N-face 會影響到壓電場的方向之外，compressive 或 tensile strain 也是主要原因，因而產生多種方向變化，進而在 AlGaN/GaN 接面產生不同電性的電荷累積，由下圖可看出。在此不考慮 Spontaneous Polarization: P_{sp} 。

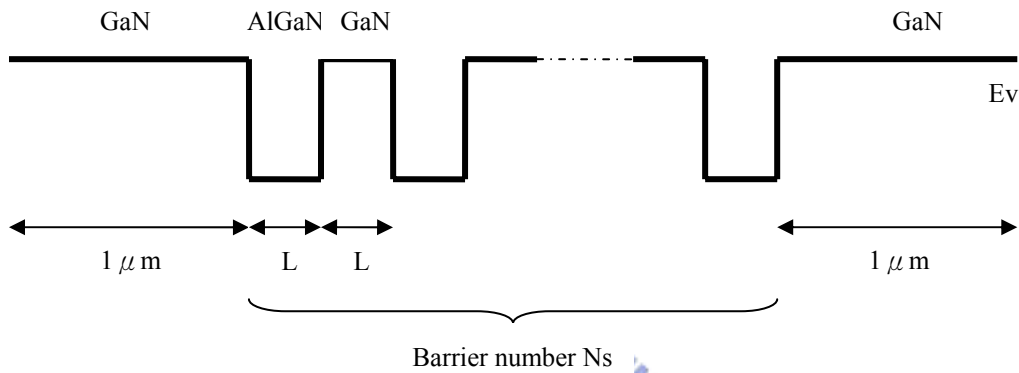


資料來源[11]

三、結果與討論

AlGa_xN/GaN 超晶格可調變的參數有許多，如下圖：

1. Al 的組成成份 x ，影響到能障的高度及壓電場。
2. 能障及能井的數目 N_s 及寬度 L ，影響到壓電場分佈的範圍。
3. 雜質摻雜的濃度及區域，影響到電荷分佈之區域及分佈寬度。



我們將固定均勻摻雜濃度 10^{19}cm^{-3} 以及能障數目為 10 個，而在不同研究討論下，將會調整其它的參數值以利於分析。下表即為將討論的參數變化整理：

Al _{0.15} Ga _{0.85} N	電荷分佈		漂移擴散電流				熱離子發射電流		
	(2)	(3)	(1)	(2)	(3)	(4)	(2)	(3)	(4)
L=10 Å									
L=20 Å									
L=30 Å									
L=40 Å									
L=60 Å									

- (1)：塊材 GaN
- (2)：不考慮壓電場之超晶格
- (3)：考慮 Ga-face 壓電場之超晶格
- (4)：考慮 N-face 壓電場之超晶格

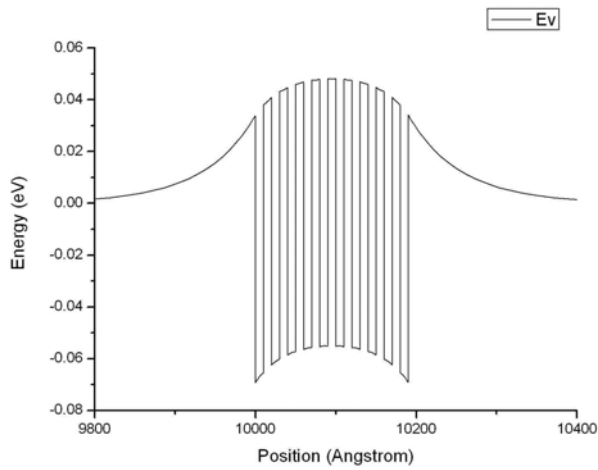
3-1 電荷分佈與空間平均電洞濃度

從(圖 1)至(圖 20)是固定能障數目為 10 個，變化能障及能井寬度(10, 20, 30, 40, 60Å)所計算出的能帶對空間圖及電荷濃度對空間圖。其中，同一個能障及能井寬度，我們也計算有考慮壓電場的能帶對空間圖及電荷濃度對空間圖。

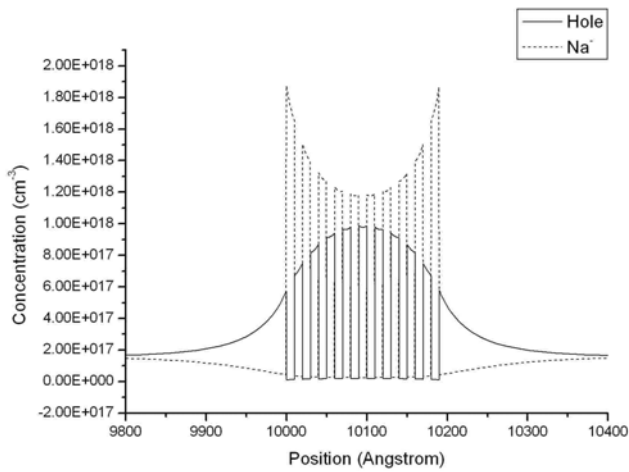
我們可以看到當考慮壓電場時，能帶彎曲並呈尖型，且稍微有不對稱效應，而能障及能井寬度愈小，不對稱效應愈大，並在 10 個能障的最左右二邊產生較突出的尖端能障。在電荷分佈亦如此，當考慮壓電場，10 個能障的最左右二邊的電荷累積之電性是相反，而能障及能井寬度愈小，10 個能障和能井有明顯不同的電荷濃度分佈

當考慮壓電場時，能帶及電荷分佈會呈現不對稱，主要是因為壓電場在晶體中本來就為不對稱，而超晶格的整體長度若和能帶及電荷分佈的漸變範圍長度(空乏區)接近，也就是超晶格仍處於能帶及電荷分佈的漸變範圍之中，超晶格會呈現非常不對稱的現象。若要使超晶格內的每個能障所呈現的情況相同，必須將超晶格的整體長度變長，也就是能障數目要增多，或是能障寬度增加，但在邊界的地方仍無法消除壓電場所產生的不對稱現象。

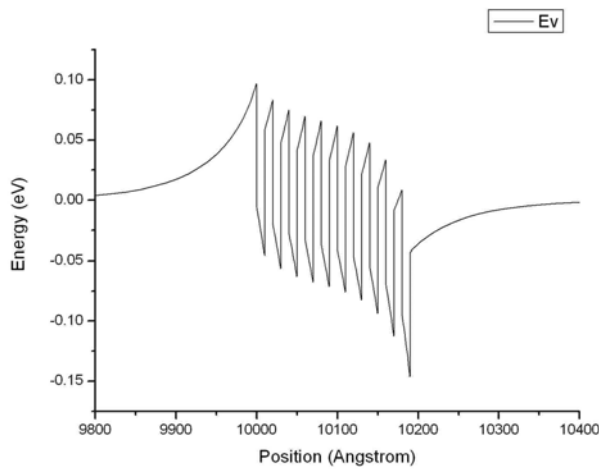
(圖 21)是將分佈不均的電洞對空間作平均之後對能障寬度作圖，可以看到考慮壓電場，電洞濃度隨著能障的寬度增加而增加，雜質的解離比例比較高。



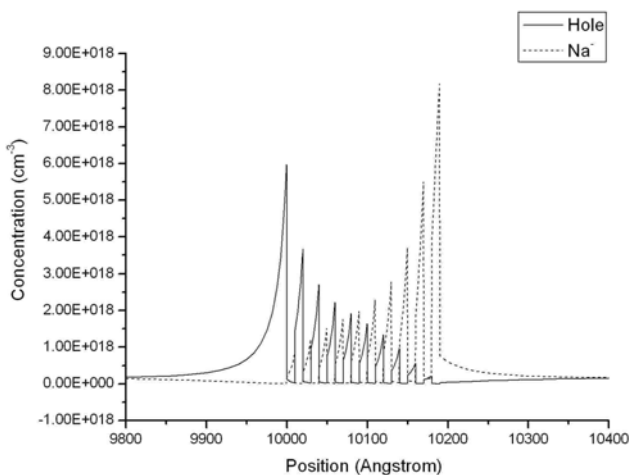
(圖 1) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ band diagram
without piezoelectric field
 $L=10\text{\AA}$



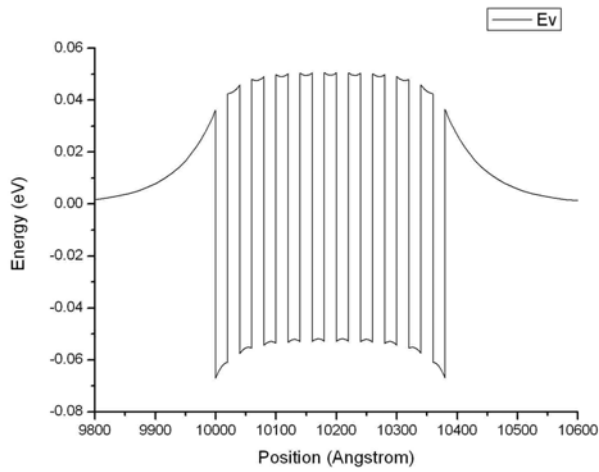
(圖 2) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ charge
distribution without piezoelectric field
 $L=10\text{\AA}$



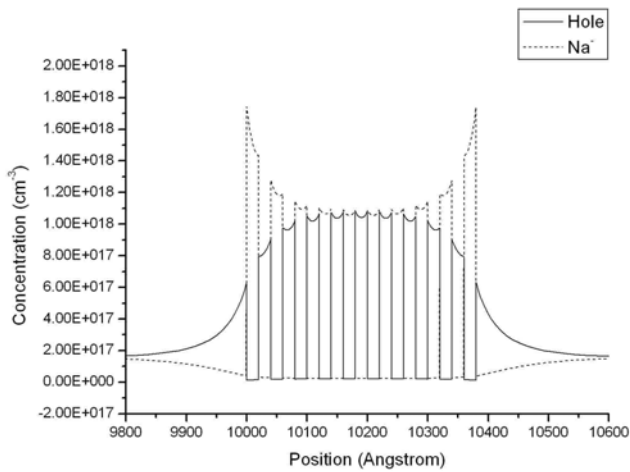
(圖 3) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ band diagram
with piezoelectric field
 $L=10\text{\AA}$



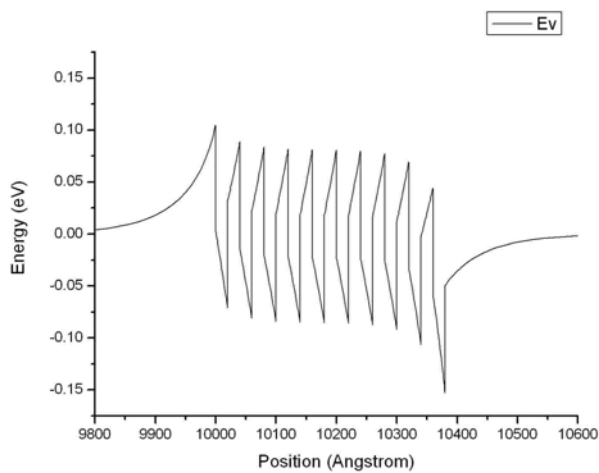
(圖 4) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ charge
distribution with piezoelectric field
 $L=10\text{\AA}$



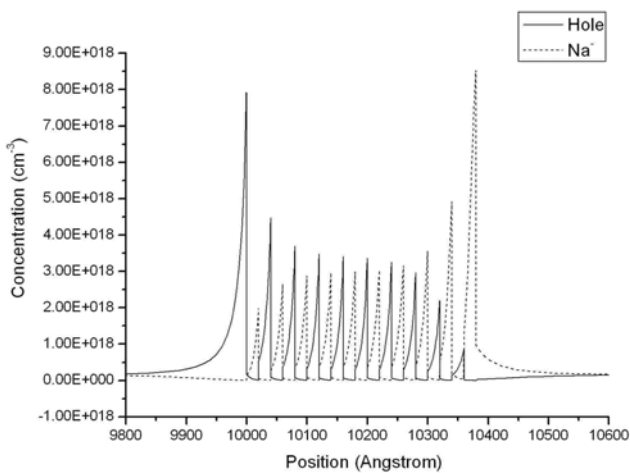
(圖 5) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ band diagram
without piezoelectric field
 $L=20\text{\AA}$



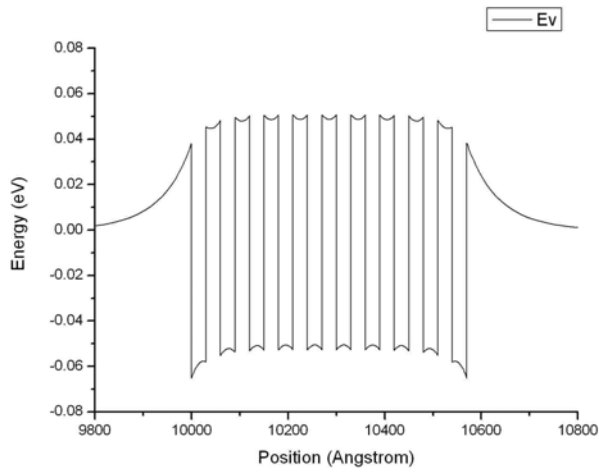
(圖 6) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ charge
distribution without piezoelectric field
 $L=20\text{\AA}$



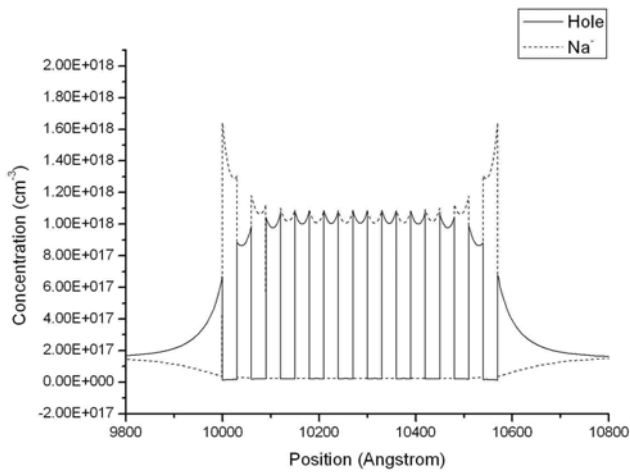
(圖 7) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ band diagram
with piezoelectric field
 $L=20\text{\AA}$



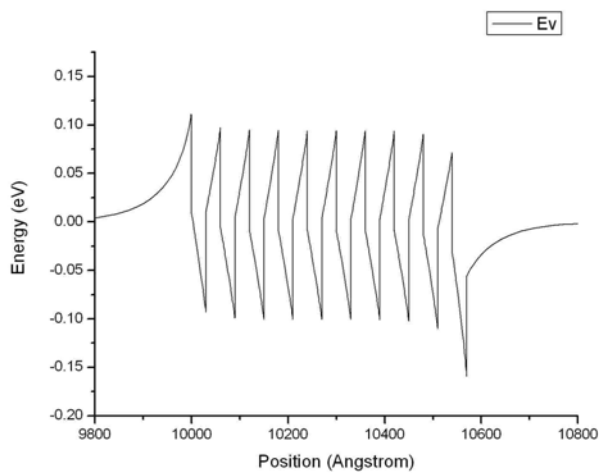
(圖 8) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ charge
distribution with piezoelectric field
 $L=20\text{\AA}$



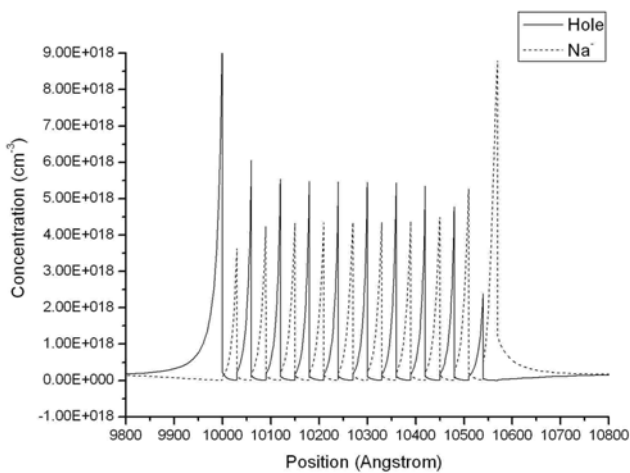
(圖 9) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ band diagram
without piezoelectric field
 $L=30\text{\AA}$



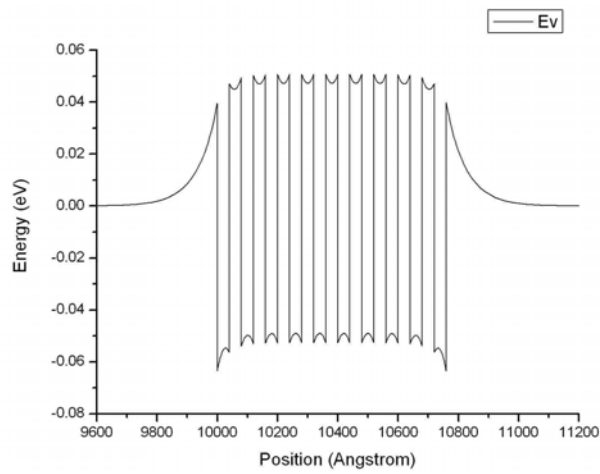
(圖 10) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ charge
distribution without piezoelectric field
 $L=30\text{\AA}$



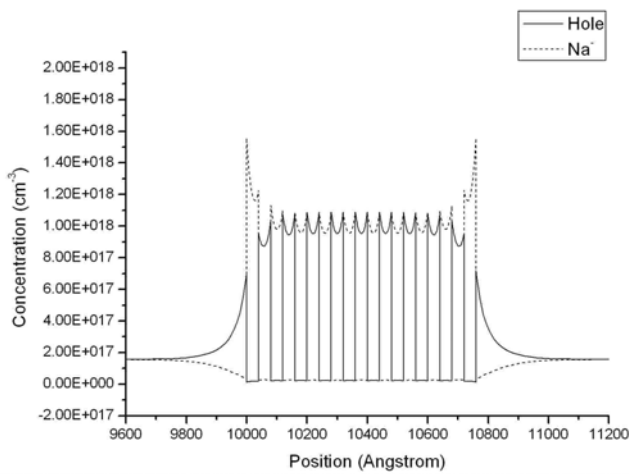
(圖 11) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ band diagram
with piezoelectric field
 $L=30\text{\AA}$



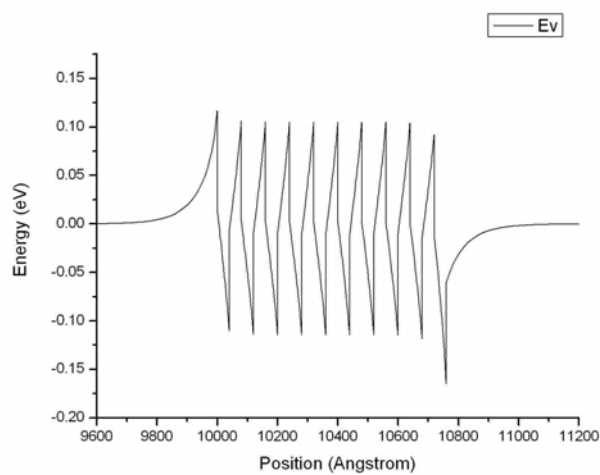
(圖 12) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ charge
distribution with piezoelectric field
 $L=30\text{\AA}$



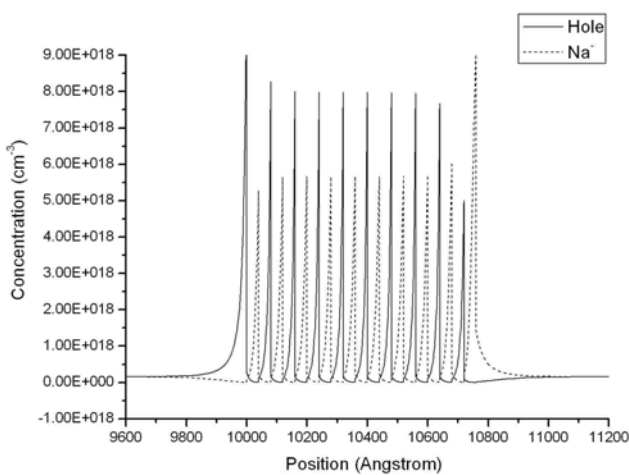
(圖 13) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ band diagram
without piezoelectric field
 $L=40\text{\AA}$



(圖 14) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ charge
distribution without piezoelectric field
 $L=40\text{\AA}$

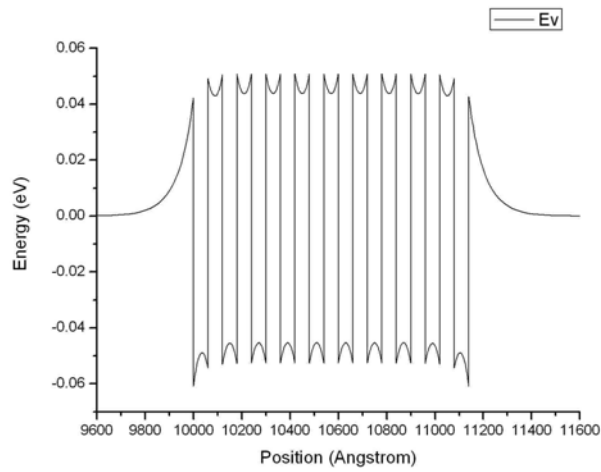


(圖 15) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ band diagram
with piezoelectric field
 $L=40\text{\AA}$

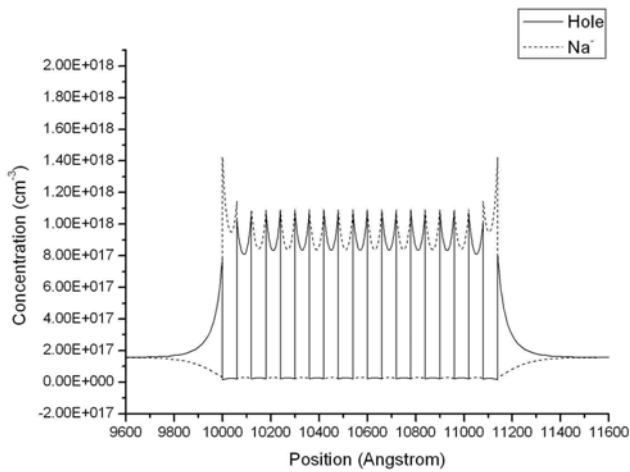


(圖 16) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ charge
distribution with piezoelectric field
 $L=40\text{\AA}$

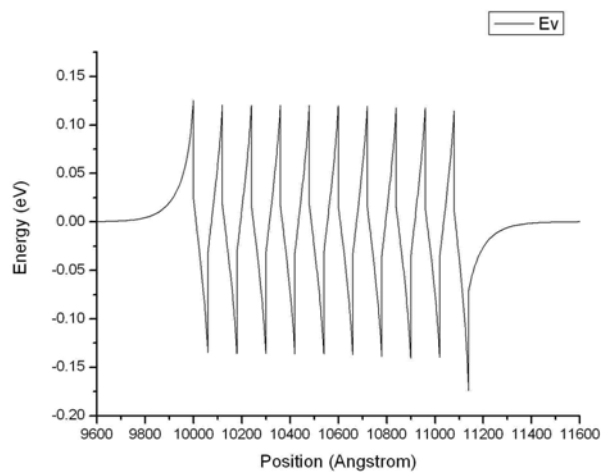




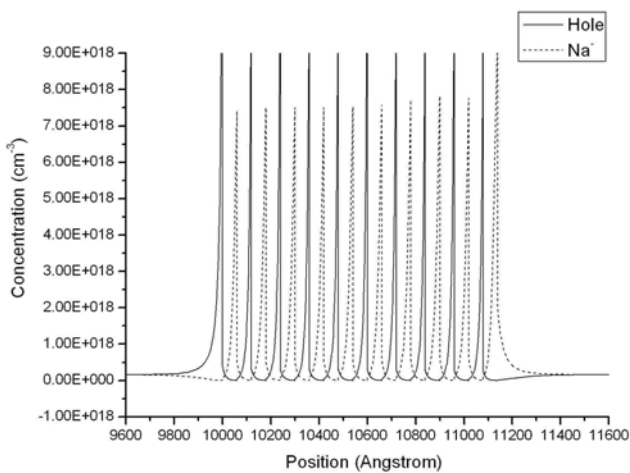
(圖 17) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ band diagram
without piezoelectric field
 $L=60\text{\AA}$



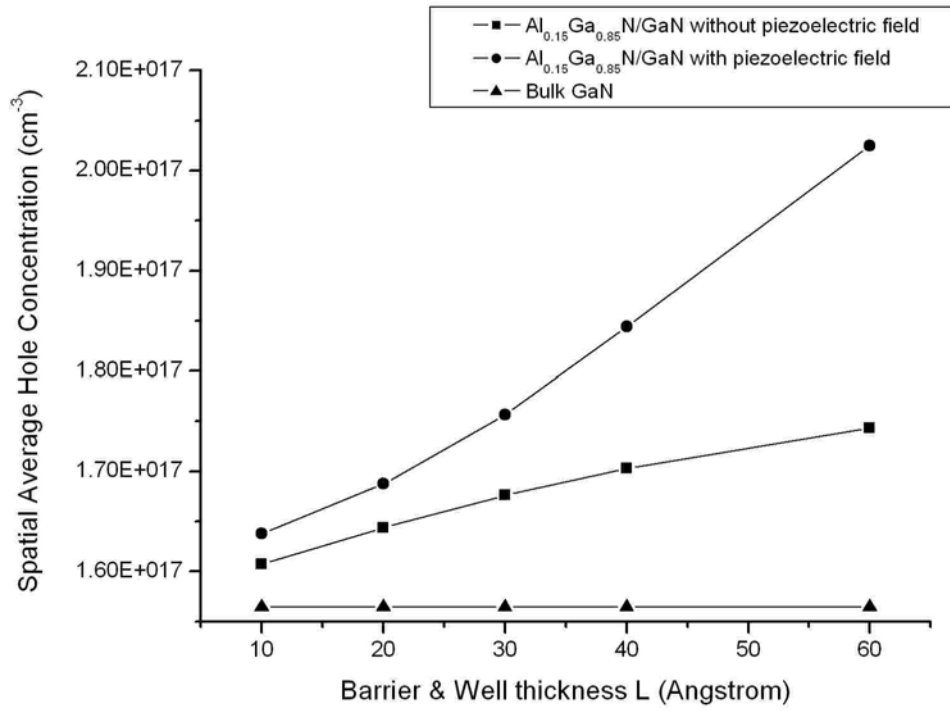
(圖 18) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ charge
distribution without piezoelectric field
 $L=60\text{\AA}$



(圖 19) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ band diagram
with piezoelectric field
 $L=60\text{\AA}$



(圖 20) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ charge
distribution with piezoelectric field
 $L=60\text{\AA}$



(圖 21) Spatial averaged hole concentration with/without piezoelectric field

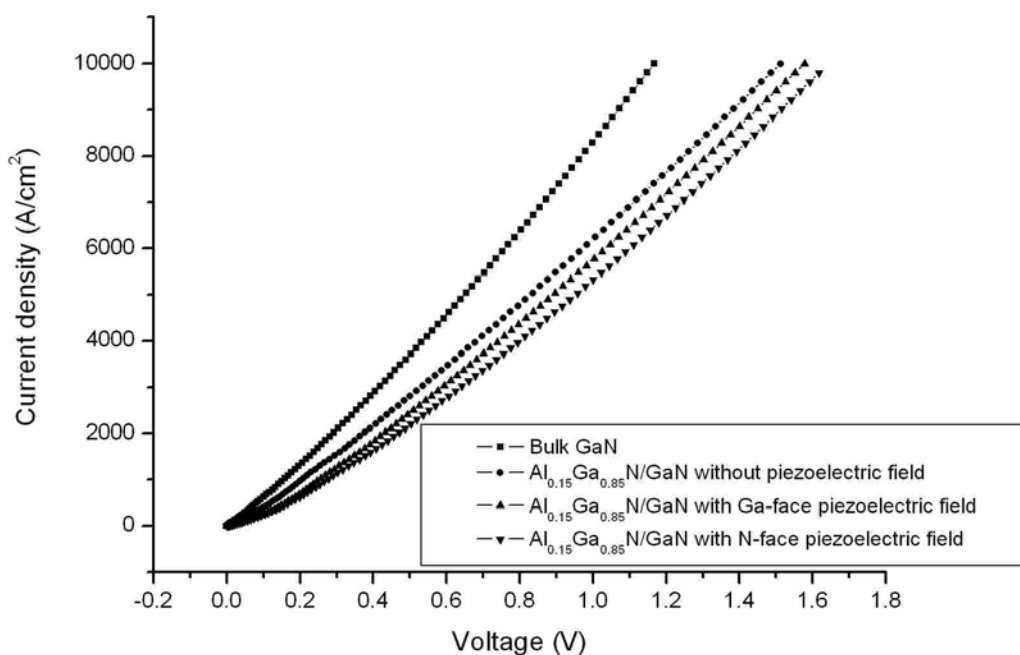


3-2 考慮及不考慮壓電場之擴散漂移電流

(圖 22)為用漂移擴散電流模型所算出塊材 GaN，有考慮及無考慮壓電場的超晶格的電流電壓關係圖。計算所用到的遷移率是配合實驗得到的模型[12]。

可以看出不論是否有考慮壓電場，超晶格的漂移擴散的電流電壓特性比塊材 GaN 還要差，也就是垂直方向阻值較高。原因為超晶格在能障區域的載子濃度很低，若用漂移擴散電流模型來計算電流，在這些載子很低的區域會出現跨壓很大的現象，但在實際情況這麼大的跨壓已讓 well 裡的載子跨過能障形成電流。

而從實際情況我們知道超晶格的阻值可比塊材 GaN 還低，所以我們在下一節將以熱離子發射電流模型重新計算超晶格的電流電壓特性。



(圖 22)Drift-diffusion current and voltage characteristic of Bulk GaN and superlattices with/without piezoelectric field

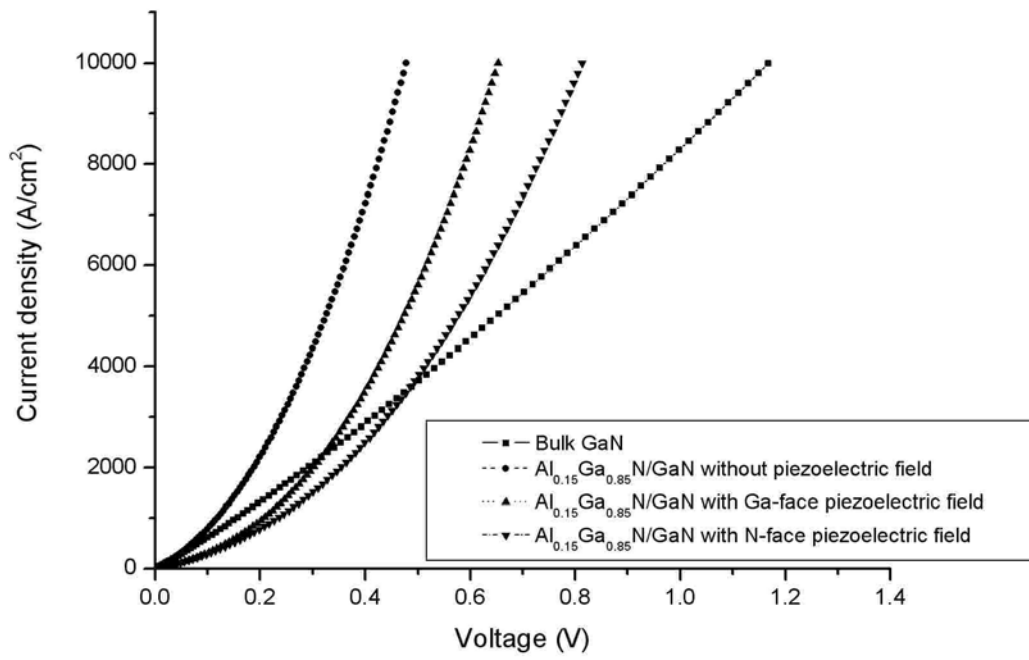
3-3 考慮及不考慮壓電場之熱離子發射電流

(圖 23)為用熱離子發射電流模型所算出塊材 GaN，有考慮及無考慮壓電場的超晶格的電流電壓關係圖。

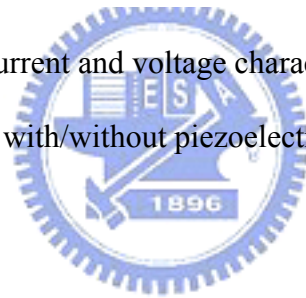
可以看出當用熱離子發射電流模型計算超晶格的電流，超晶格垂直方向阻值可以比塊材 GaN 還低。而再考慮 Ga-face 或 N-face 的壓電場，阻值會稍微降低。

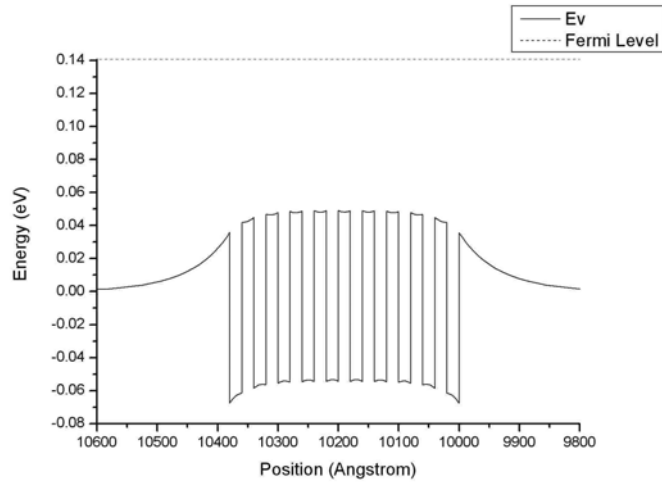
(圖 24)至(圖 32)即為用來觀察二種不同 face 的壓電場為何會造成阻值上升，並且為何二種不同 face 的壓電場效應不同。(圖 24)至(圖 26)是在未注入電流時的能帶對位置圖，Ga-face 和 N-face 是完全對稱，並在邊界產生較突出的尖型能障。(圖 27)至(圖 29)是注入電流密度為 49 A/cm^2 時的能帶對位置圖，可看出 Ga-face 和 N-face 的邊界尖型能障佔掉大部份跨壓。(圖 30)至(圖 32) 是注入電流密度為 841 A/cm^2 時的能帶對位置圖，Ga-face 和 N-face 的邊界尖型能障仍然佔掉大部份跨壓，但已看得出佔掉的跨壓已不同大小，原因為當電洞遇到二種 face 中最突出的尖型能障，所要跨過的高度不同。要跨過 Ga-face 中最突出的尖型能障，只需跨過 band offset，而要跨過 N-face 中最突出的尖型能障，需跨過 band offset 及壓電場所造成能帶傾斜的總和，所以 N-face 的尖型能障所佔掉的跨壓較大。

因此可說，超晶格可以降低垂直方向阻值，比塊材 GaN 還低，但會造成跨壓集中於因為壓電場的不對稱而在邊界產生的尖型能障，若用於需要較大電流的雷射二極體，尖型能障可能會產生過多的焦耳熱而使元件燒毀。



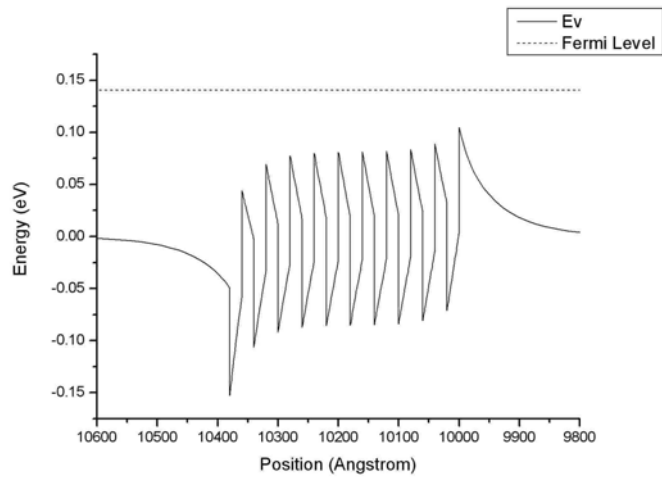
(圖 23) Thermionic emission current and voltage characteristic of Bulk GaN and superlattices with/without piezoelectric field





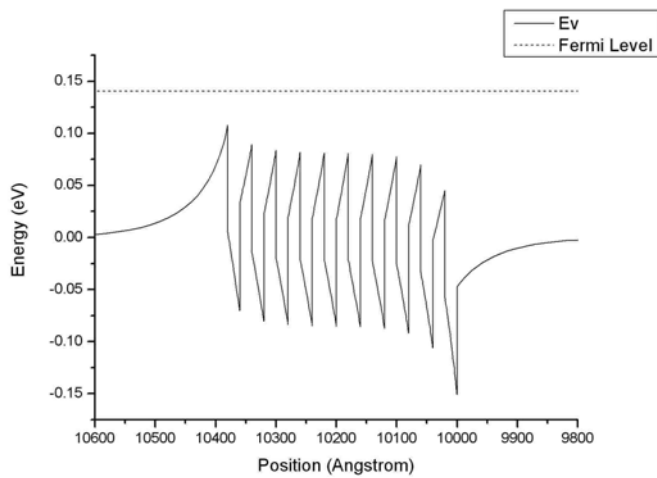
$$L=20\text{\AA} , N_s=10$$

(圖 24) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ without piezoelectric field (Current density = 0 A/cm^2)



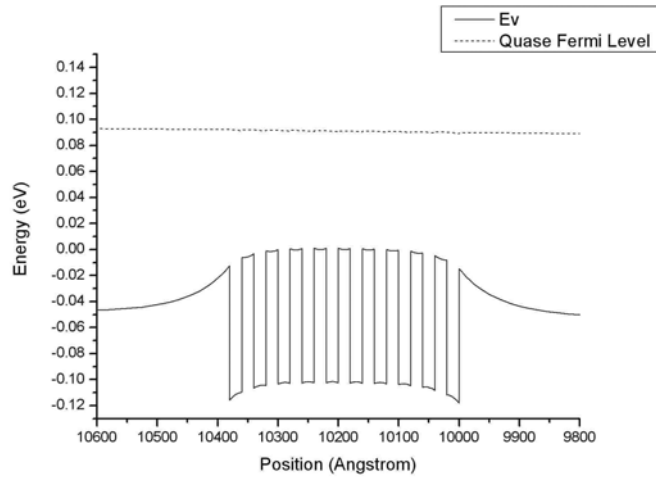
$$L=20\text{\AA} , N_s=10$$

(圖 25) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ with N-face piezoelectric field (Current density = 0 A/cm^2)



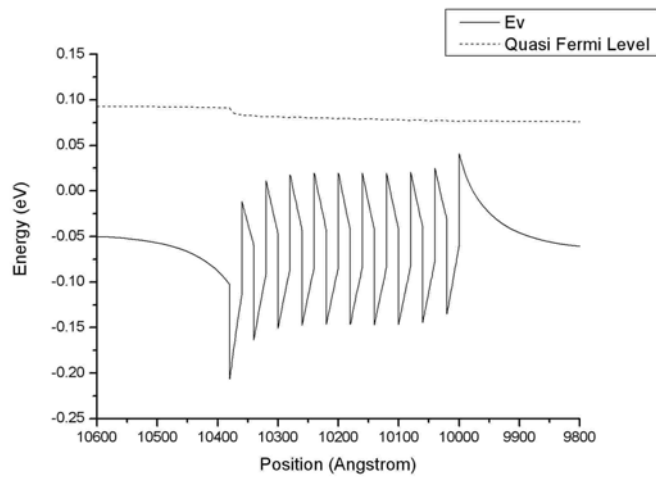
$$L=20\text{\AA} , N_s=10$$

(圖 26) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ with Ga-face piezoelectric field (Current density = 0 A/cm^2)



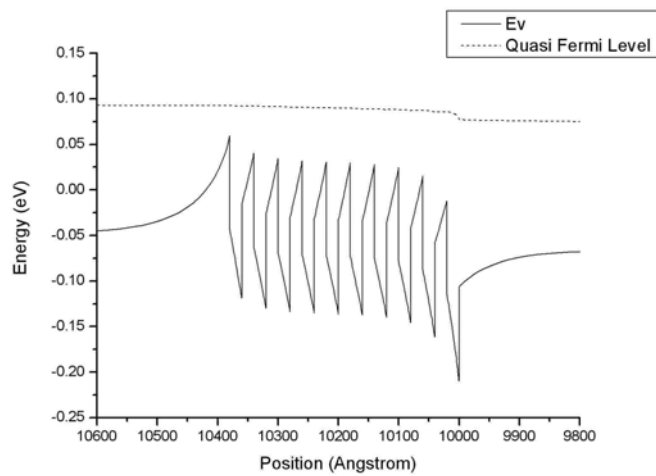
$L=20\text{\AA}$, $N_s=10$

(圖 27) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ without piezoelectric field (Current density = 49 A/cm^2)



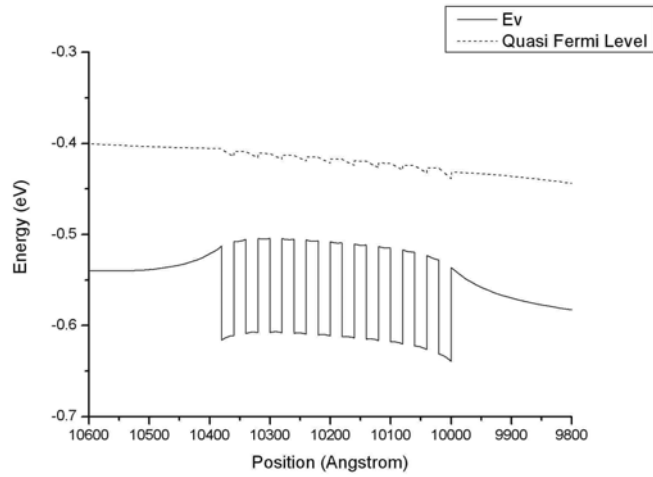
$L=20\text{\AA}$, $N_s=10$

(圖 28) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ with N-face piezoelectric field (Current density = 49 A/cm^2)



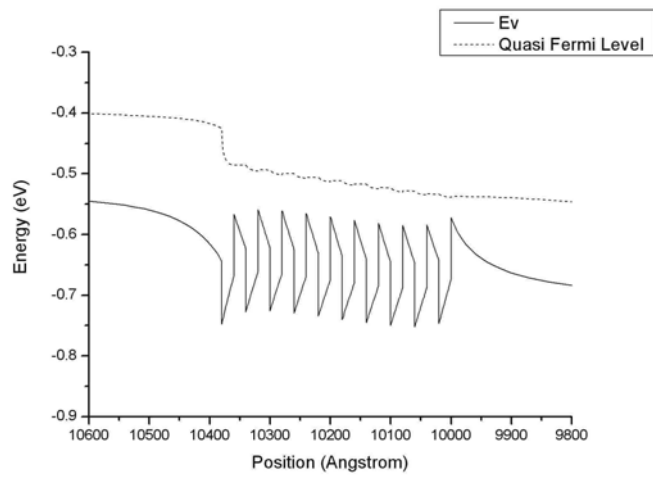
$L=20\text{\AA}$, $N_s=10$

(圖 29) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ with Ga-face piezoelectric field (Current density = 49 A/cm^2)



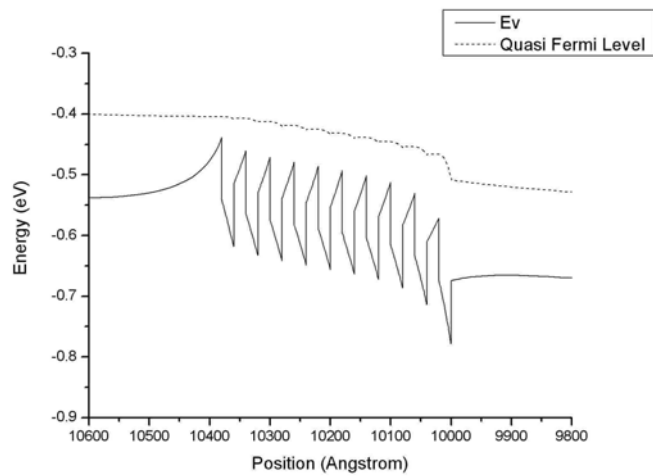
$L=20\text{\AA}$, $N_s=10$

(圖 30) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ without piezoelectric field (Current density = 841 A/cm^2)



$L=20\text{\AA}$, $N_s=10$

(圖 31) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ with N-face piezoelectric field (Current density = 841 A/cm^2)

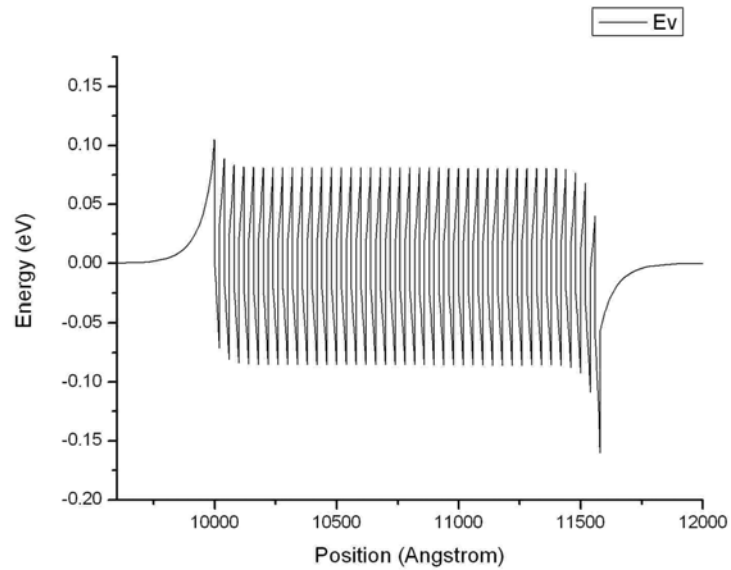


$L=20\text{\AA}$, $N_s=10$

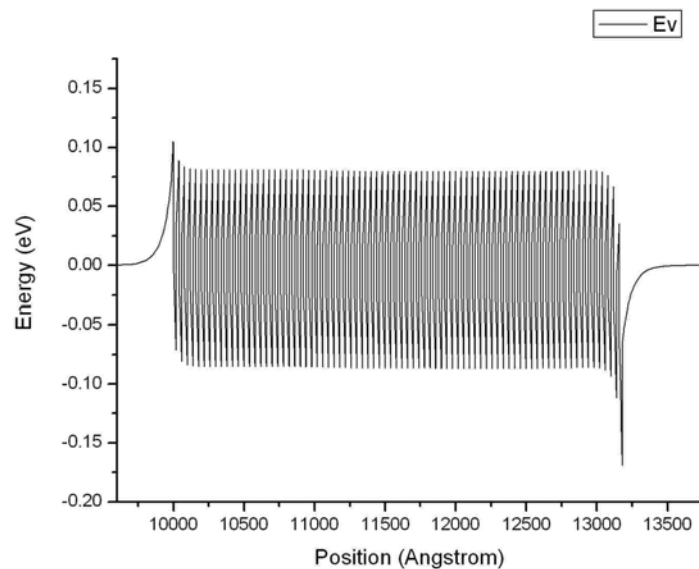
(圖 32) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ with Ga-face piezoelectric field (Current density = 841 A/cm^2)

3-4 改善尖型能障之結構

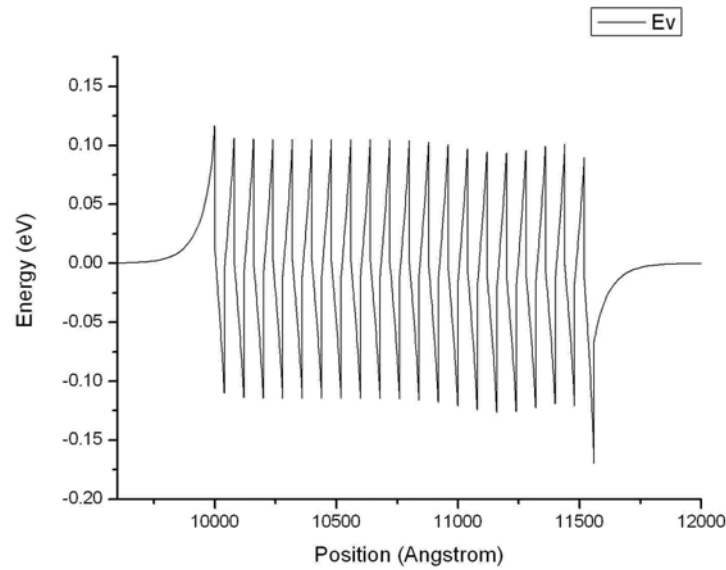
從上一節得知，超晶格雖然整體電壓可比塊材 GaN 小，但跨壓卻會跨在最突出的尖型能障上，是否此現象可由一些簡單的結構變化加以改善？(圖 33)至(圖 35)即為變化能障的數目及寬度，可以看到在邊界上仍然有尖型能障存在。



(圖 33) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ with Ga-face piezoelectric field ($L=20\text{\AA}$, $N_s=40$)



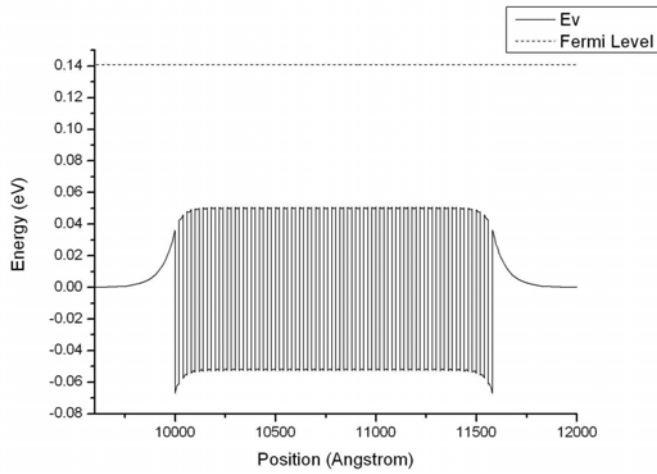
(圖 34) $A_{10.15}Ga_{0.85}N/GaN$ with Ga-face piezoelectric field ($L=20\text{\AA}$, $N_s=80$)



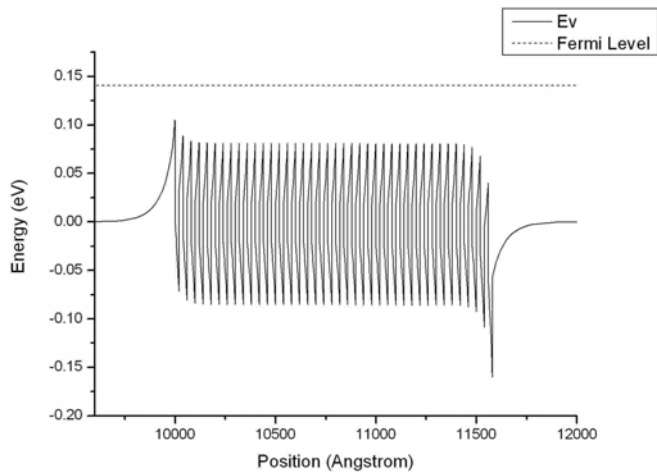
(圖 35) $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ with Ga-face piezoelectric field ($L=40\text{\AA}$, $N_s=20$)

上面所討論的結構是對稱的，但壓電場使得能帶圖形是不對稱的，所以無法將尖型能障消除。將結構改為不對稱可為解決方法之一。我們將超晶格最後數層能障的 Al 成份逐漸降低，稱為新結構(New structure)，如(圖 38)(圖 39)，可以看出新結構邊界的尖型能障已消除。(圖 40)至(圖 43)為注入電流密度 324 A/cm^2 的能帶對位置圖。從(圖 40)和(圖 41)可看出傳統結構(Conventional structure)由於壓電場的邊界效應，有大部份跨壓跨在邊界的尖型能障，而從(圖 42)和(圖 43)可看出改成新結構後，已無大部份跨壓跨在邊界尖型能障的現象產生。

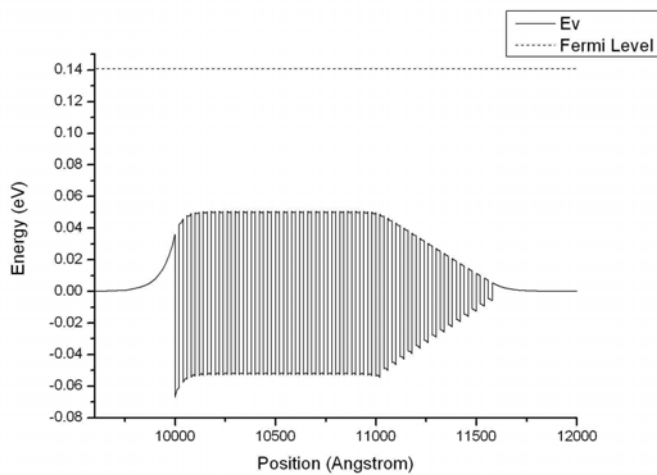
從(圖 44)可看出改成新結構後，無考慮及有考慮壓電場的二條曲線已較靠近，原因為已消除邊界的尖型能障，而傳統結構有考慮及無考慮壓電場的二條曲線離得比較遠，原因為有邊界尖型能障佔掉跨壓。



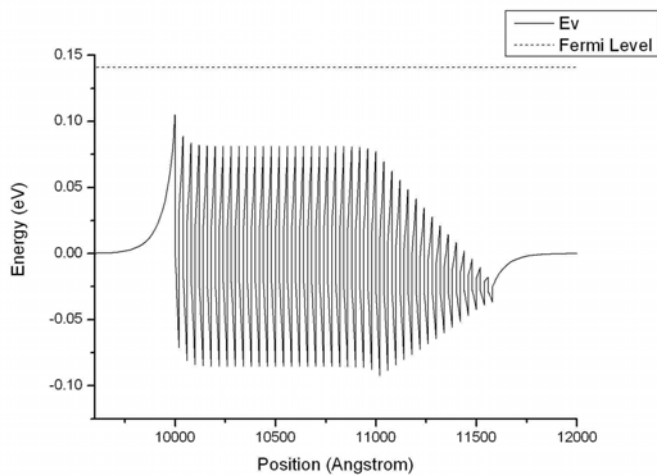
(圖 36) Conventional structure band diagram without piezoelectric field
 $L=20\text{\AA}$, $N_s=40$
 Current density = 0 A/cm^2



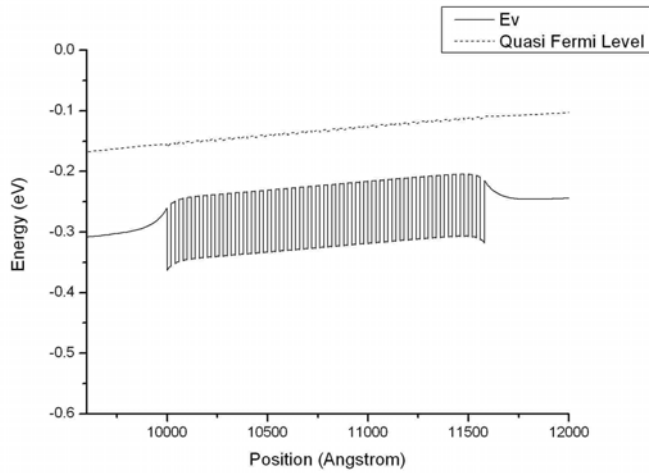
(圖 37) Conventional structure band diagram with piezoelectric field
 $L=20\text{\AA}$, $N_s=40$
 Current density = 0 A/cm^2



(圖 38) New structure band diagram without piezoelectric field
 $L=20\text{\AA}$, $N_s=40$
 Current density = 0 A/cm^2



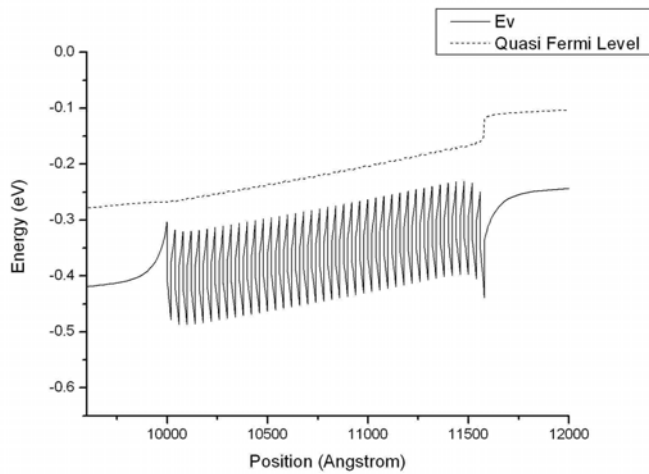
(圖 39) New structure band diagram with piezoelectric field
 $L=20\text{\AA}$, $N_s=40$
 Current density = 0 A/cm^2



(圖 40)Conventional structure band diagram without piezoelectric field

$L=20\text{\AA}$, $N_s=40$

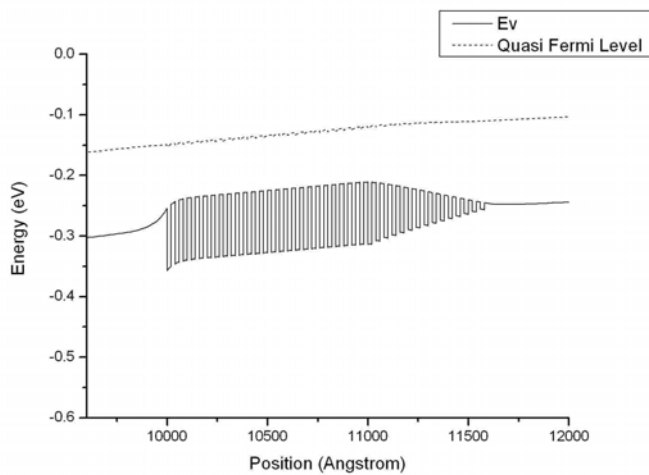
Current density = 324 A/cm^2



(圖 41)Conventional structure band diagram with piezoelectric field

$L=20\text{\AA}$, $N_s=40$

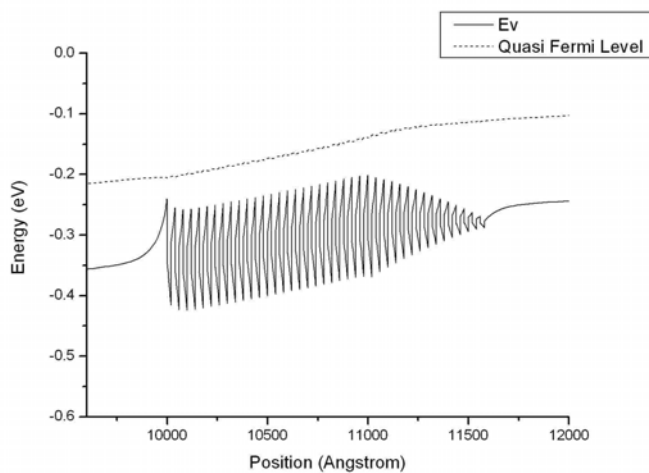
Current density = 324 A/cm^2



(圖 42)New structure band diagram without piezoelectric field

$L=20\text{\AA}$, $N_s=40$

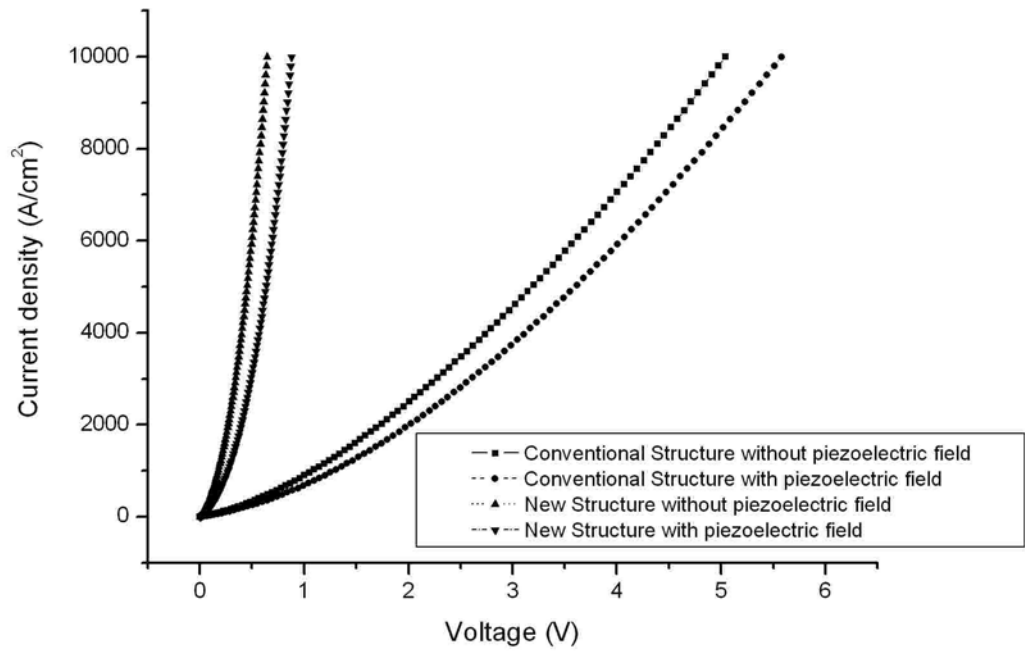
Current density = 324 A/cm^2



(圖 43)New structure band diagram with piezoelectric field

$L=20\text{\AA}$, $N_s=40$

Current density = 324 A/cm^2



(圖 44) I-V curve of conventional and new structure with/without piezoelectric field



四、結論

我們經由模擬分析可以了解電洞在 AlGaIn/GaN 超晶格裡藉由熱離子發射機制形成電流，可使阻值低於由漂移擴散機制形成電流的塊材 GaN。而壓電場對載子的解離有幫助，但會使得超晶格邊界有尖型能障出現，阻礙載子流動，並且大部份跨壓跨在此尖型能障。對於雷射二極體用途來說，此尖型能障可能會產生過多焦耳熱而使元件燒毀。我們也探討了電洞對於 Ga-face 和 N-face 壓電場所要跨過的能障高度不同，以及跨壓會分別位於超晶格的不同側。

我們用二種簡單電流模型模擬出超晶格垂直方向的電流電壓特性，也考慮了二種不同方向的壓電場所產生的效應，也探討了壓電場在超晶格的邊界所產生的效應，以及提出改善邊界效應的結構。

若要考慮更詳細的模型以了解更多超晶格及壓電場所產生的效應，可以從我們所作的假設及近似來改善，例如對於價帶能帶來說，拋物線能帶近似及等效質量的假設並不是很適當，可以真正去算出超晶格結構的能帶圖及其中的能階，而代價是增加龐大的計算量。對於能障的穿透率來說，高於能障能量的電洞可考慮反射現象，且由於超晶格有 mini-band 的現象，低於能障能量的電洞可藉由 mini-band 穿遂形成電流。另外，我們也假設能井裡的電洞可以達成準熱平衡，因此可以將超晶格分成多個能障來耦合計算，但若電洞的平均自由路徑大於能井的寬度，也就是電洞遇到散射的平均路徑比能井寬，電洞可在能井裡達成準熱平衡的情況需作修正，此時便可能要考慮超晶格整體效應，而不能分成單一能障再耦合計算。

参考文献

- [1] Shuji Nakamura, Masayuki Senoh, “Present status of InGaN/GaN/AlGaN-based laser diode,” Journal of Crystal Growth 189, 820, (1998)
- [2] Kazuhide Kumakura, Naoki Kobayashi, “Increased Electrical Activity of Mg-Acceptors in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ Superlattices,” Jpn. J. Appl. Phys. 38, L1012, (1999)
- [3] Peter Kozodoy, Monica Hansen, “Enhanced Mg doping efficiency in $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$ superlattices,” Applied Physics Letters 74, 3681, (1999)
- [4] Peter Kozodoy, Yulia P. Smorchkova, “Polarization-enhanced Mg doping of AlGaN/GaN superlattices,” Applied Physics Letters 75, 2444, (1999)
- [5] Clifford M. Krowne, “Semiconductor heterostructure nonlinear Poisson equation,” J. Appl. Phys. 65, 1602, (1989)
- [6] Kazushige Horio, Hisayoshi Yanai, “Numerical Modeling of Heterojunctions Including the Thermionic Emission Mechanism at the Heterojunction Interface,” IEEE Transactions on Electron Devices 37, 1093, (1990)
- [7] Kyoungsoon Yang, Jack R. East and George I. Haddad, “Numerical modeling of Abrupt Heterojunctions Using a Thermionic Field Emission Boundary Condition,” Solid State Electronics 36, 321, (1993)
- [8] C. M. Wu, E. S. Yang, “Carrier Transport Across Heterojunction Interfaces,” Solid State Electronics 22, 241, (1979)
- [9] C. R. Crowell, “The Richardson Constant for Thermionic Emission in Schottky Barrier Diode,” Solid State Electronics 8, 395, (1965)
- [10] B Santic, “On the hole effective mass and the free hole statistics in wurtzite GaN,” Semicond. Sci. Technol. 18, 219, (2003)
- [11] O. Ambacher, J. Smart, “Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGaN/GaN heterostructures,” Journal of

Applied Physics 85, 3222, (1999)

[12] Tigran T. Mnatsakanov, Michael E. Levinshtein, “Carrier mobility model for GaN,” Solid State Electronics 47, 111, (2003)



簡歷

姓 名：陳俞謙

出生日期：70年9月17日

出生地點：台北市

電子信箱：chenchen.ee92g@nctu.edu.tw

學 歷：國立清華大學動力機械系 (88.9-92.6)

國立交通大學電子工程研究所 (92.9-94.6)

