



中国科学院大学

University of Chinese Academy of Sciences

博士学位论文

压电电子/光电子学在氮化镓基器件中的应用

作者姓名: _____ 姜春艳

指导教师: _____ 胡卫国 研究员

_____ 国家纳米科学中心

学位类别: _____ 理学博士

学科专业: _____ 凝聚态物理

研究所: _____ 国家纳米科学中心

2018 年 5 月

Applications of Piezotronics and Photo-Phototronics in Gallium
Nitride Based Devices

A dissertation submitted to
University of Chinese Academy of Sciences
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Doctor of Philosophy
in Condensed Matter Physics

By
Jiang Chunyan
Supervisor: Professor Hu Weiguo

National Center for Nanoscience and Technology

May 2018

中国科学院大学
研究生学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。

作者签名：姜春艳
日期：2018.5.29

中国科学院大学
学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以按照学术研究的公开原则和保护知识产权的原则公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延迟期后适用本声明。

作者签名：姜春艳	导师签名：胡卫周
日期：2018.5.29	日期：2018.5.29

摘 要

压电电子学和压电光电子学经过十几年的发展,已经在传感器、人与硅基技术的交互界面、微机电系统等领域得到广泛应用。由于 III 族氮化物具有宽的直接带隙范围,高电子迁移率,高热稳定性和许多其他优异的性能,因此它作为新一代半导体材料备受关注,具有非常广阔的应用前景。本文基于 III-氮化物材料的特性,利用各种微纳加工工艺制备了 GaN 基器件,结合材料表征、电学测试系统、光学测试系统、应力表征技术等对器件性能进行研究,实现了压电效应在氮化镓基电力电子器件、LED、太阳能电池器件中的应用。根据量子力学中的微扰理论,进一步解释了外应力产生的极化电场与晶格失配内应力产生的极化电场相互作用的机制。主要的研究内容和结论如下:

一、压电电子学效应调制 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管

采用 MOCVD 外延工艺和 TOP-DOWN 微纳加工工艺,制作了 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管,并从实验上和理论上证明了压电电子学效应对 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管的调制作用。栅极电压为-1V 时,在 15N 外加压力下,饱和电流增加约 21%。通过一维薛定谔方程和泊松方程的自洽数值计算模型证明,这种饱和电流的增加是由于压应力作用下异质结界面处产生了压电电荷,进而导致 2DEG 密度的增加。将经过压电效应调制的二维电子气密度放入经典器件方程中,计算得到的源漏极电流曲线与实验结果吻合较好。这项研究很好地揭示了压电极化效应与 2DEG 起源之间的因果关系。

二、压电光电子学在 LED 可见光通讯中的应用

我们设计了一种基于双波长 InGaIn/GaN MQW 纳米柱结构的压电光电子学效应调制的可见光通讯系统。将不同施加力下的光致发光 (PL) 强度输出定义为逻辑电平,实现数据的实时传输。与传统的可见光通信相比,应力编码技术的双通道模式在优势在于误码自甄别/消除,能够同时实现多通道信息的准确传输,保

证了传递信息的准确性。此外，来自 InGaN/GaN 纳米柱的双波长发射有效地消除了源自干涉光的干扰，同时降低了系统的误码率。

三、压电光电子学效应增强 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池

我们提出了压电光电子学效应增强的 InGaN/GaN MQWs 太阳能电池，通过拉曼光谱分析得出了施加在样品内部的应变的实际值，并展示了 InGaN/GaN 多量子阱 (MQWs) 太阳能电池的短路电流密度和转换效率在外部应力调制下的变化。在 0.134% 的外部应力作用下，太阳电池的短路电流从 1.05 mA/cm^2 增加到 1.17 mA/cm^2 ，最大转换效率由 1.12% 提高到 1.24%。外部应力引起的压电极化部分补偿了材料本身的极化，使得电子-空穴波函数重叠增加，量子阱对光子的吸收增加，进而增加太阳电池转换效率。并依据压电光电子学基本理论，结合光伏测试技术、应力表征技术，定量验证了该物理机制。

关键词：AlGaIn/GaN HEMT，压电电子学，太阳电池，压电光电子学，LED。

Abstract

Piezotronics and piezo-phototronics have been widely used in sensors, human-silicon based interfaces and MEMS after ten years development. III-nitrides have attracted much attention as a new generation of semiconductor materials and have very broad application prospects due to its wide direct bandgap range, high electron mobility, high thermal stability *etc.* In this paper, the devices were fabricated with micro-nano fabrication processes, corresponding with material characterization system, electrical test system, optical test system, and stress analysis system, *etc.* The application of piezoelectric effect in GaN-based power electronic devices, LED and solar cell devices has been studied. According to the perturbation theory in quantum mechanics, the influence of the polarization electric field generated by the complex external stress on the built-in electric field generated by the lattice mismatch and spontaneous polarization has been explained. The main research contents and conclusions are shown as follows:

1. Piezotronic effect tuned AlGaIn/GaN high electron mobility transistor (HEMT)

AlGaIn/GaN HEMT were fabricated by MOCVD epitaxial process and TOP-DOWN micro-nano process, and experimentally and theoretically proved the piezotronic effect tuned AlGaIn/GaN HEMT. When the gate voltage was -1 V, the saturation current increased by 21% under 15 N applied stress. The self-consistent numerical calculation of the Schrödinger and Poisson equations revealed that the piezoelectric charges generated at the AlGaIn/GaN heterojunction interface under compressive stress, which lead to an increase of 2DEG concentration. Put the 2DEG density into the classic device equation, the calculated current-voltage curves fitted well with the measured results. This study reveals well the causal relationship between the effect of piezoelectric polarization and the origin of 2DEG.

2. The application of piezo-phototronic effect in LED visible light communication

We designed a piezo-phototronic effect modulated visible light communication

based on dual-wavelength InGaN/GaN MQW nanopillar structure. The photoluminescence (PL) intensity output under different applied forces was defined as a logic level to realize real-time data transmission. Compared with traditional visible light communication, the PVLC system has the advantage of error checking/elimination, which can transmit multi-channel information accurately at the same time and ensure the accuracy of the information. In addition, the dual-wavelength emission from the InGaN/GaN nanopillar effectively eliminated the interference from the interference light while reducing the bit error rate of the system.

3. Enhanced the conversion efficiency of InGaN/GaN MQW solar cells by piezo-phototronic effect

The piezo-phototronic effect enhanced conversion efficiency of InGaN/GaN MQW solar cells was observed. Because of the dependency of the phonon frequencies on strain, Raman spectroscopy was used to investigate the strain in InGaN/GaN MQWs. The short-circuit current density and the conversion efficiency of the solar cell have been modulated under external stress. Under 0.134% applied strain, the short-circuit current of the solar cell was increased from 1.05 mA/cm² to 1.17 mA/cm², and the maximum conversion efficiency was increased from 1.12% to 1.24%. Piezoelectric polarization caused by external stress partially compensated the intrinsic polarizations of the crystal, which increased the overlap of electron-hole wave functions. Therefore, the optical absorption in the quantum well enhanced, resulting in higher conversion efficiency. Based on the basic theory of piezoelectric optoelectronics, combined with photovoltaic test technology and stress characterization technology, the physical mechanism was verified quantitatively.

Keywords: AlGaIn/GaN HEMT, piezotronic, solar cell, piezo-phototronic, LED.

目 录

第一章 引言.....	1
1.1 GaN 基半导体器件的研究背景.....	1
1.1.1 GaN 基电力电子器件.....	2
1.1.2 GaN 基 LED.....	3
1.1.3 GaN 基太阳电池.....	4
1.2 压电电子/光电子学在半导体器件中的应用.....	5
1.2.1 压电电子学晶体管的研究.....	5
1.2.2 压电光电子学对发光二极管的影响.....	13
1.2.3 压电光电子学光伏电池的研究.....	21
1.3 本论文的研究内容.....	30
第二章 压电电子学效应调制 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管.....	33
2.1 引言.....	33
2.2 AlGaIn/GaN HEMT 的制备方法和测试手段.....	34
2.2.1 HEMT 器件的制备方法.....	34
2.2.2 HEMT 器件的测试方法.....	35
2.3 AlGaIn/GaN HEMT 器件的性能与分析.....	36
2.3.1 AlGaIn/GaN HEMT 器件的直流性能.....	36
2.3.2 不同压缩应力下 AlGaIn/GaN HEMT 器件性能.....	38
2.4 AlGaIn/GaN 异质结构能带自洽计算模型.....	40
2.4.1 耦合原理机制的定性分析与解释.....	40
2.4.2 一维薛定谔方程和泊松方程的自洽数值分析方法.....	41
2.4.3 HEMT 器件 I-V 特性解析模型.....	48
2.5 本章小结.....	50
第三章 压电光电子学在 LED 可见光通讯中的应用.....	51
3.1 引言.....	51

3.2 基于压电光电子学效应的双通道可见光通信.....	52
3.2.1 压电光电子学可见光通信系统搭建.....	52
3.2.2 LED 样品的结构表征和发光特性表征.....	53
3.3 压电光电子学效应调制的可见光通讯系统.....	56
3.3.1 PVLC 的编码调制模式.....	56
3.3.2 压电光电子学效应调制的可见光通讯系统实现误码校正.....	58
3.4 理论解释.....	62
3.5 本章小结.....	63
第四章 压电光电子学效应增强 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池...	65
4.1 引言.....	65
4.2 样品的材料表征与应力分析.....	66
4.2.1 样品的结构表征.....	66
4.2.2 光致发光 (PL) 谱.....	68
4.2.3 拉曼光谱和应力分析.....	69
4.3 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池的制备方法 with 测试手段.....	72
4.3.1 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池的制备方法.....	72
4.3.2 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池的测试.....	75
4.4 压电电子学效应调制 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池.....	76
4.4.1 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池的性能分析.....	76
4.4.2 压电光电子学效应增强 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池.....	77
4.5 压电电子学效应增强 InGaN/GaN MQW 太阳电池的机制.....	79
4.5.1 压电电子学效应增强太阳电池效率的定性解释.....	79
4.5.2 基于有限元的数值计算分析.....	80
4.6 本章小结.....	82
第五章 总结与展望.....	83
5.1 主要结论.....	83
5.2 有待进一步开展的工作.....	84
参考文献.....	85

附 录.....	99
致 谢.....	101
作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与研究成果.....	103

第一章 引言

1.1 GaN 基半导体器件的研究背景

GaN 及其与 Al 和 In 的合金组成的化合物通常被称为 III-氮化物半导体材料，由于现有的材料生长技术已经能够制备获得晶体质量很高的 GaN 薄膜，如图 1.1 所示，III-氮化物具有六角形纤锌矿结构，并且具有从 6.2eV (AlN) 经 3.4eV (GaN) 到 0.7eV (InN) 可调谐的直接带隙，发光波长范围包含从深紫外 (UV) 到红外区域，这就使得 III-氮化物半导体材料在电力电子领域、LED、光电子器件、射频领域等具有极为广泛的应用。GaN 具有高击穿电场，高导热性和高电子迁移率，使得 GaN 成为高功率和 RF 电子器件的绝佳选择。除此之外，III-氮化物在高温热电应用中表现出很高的塞贝克系数和非常优异的温度稳定性。掺杂的 GaN 在相关应用中表现出其他独特性质，如掺杂磁性的过渡和稀土金属 GaN，以及用于核探测的铟 (In) /钆 (Gd) /硼 (B) /锂 (Li) 掺杂的 GaN。在 III 族氮化物出现之前，获得如此广泛的光谱区域和这些众多应用的能力传统上需要使用许多不同的 III-V 族材料和复杂的器件结构[1-6]。总之，GaN 作为第三代半导体材料，具有非常明显的性能优势，在某些方面甚至远优于现有的一切半导体材料。

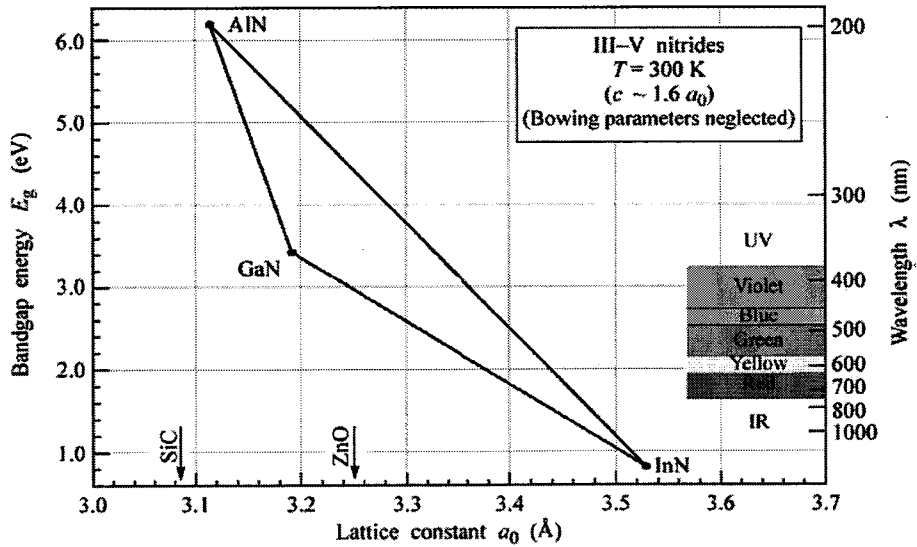


图 1.1 GaN 的带隙和晶格常数

Figure 1.1 Bandgap and lattice constant for GaN.

1.1.1 GaN 基电力电子器件

在过去的几十年中,已经报道了基于 GaN 的多种电力电子器件,包括异质结场效应晶体管(HFET),异质结双极晶体管(HBT),双极结型晶体管(BJT),肖特基和 P-I-N 整流器以及金属氧化物半导体场效应晶体管(MOSFET)等等。功率转换器效率的提高以及尺寸和成本的降低一直是 GaN 当前的研究领域之一。当前,利用氢化物气相外延法制备的 GaN 肖特基器件,其工作电压范围在 600-3300V[7]。由于与硅器件相比,氮化镓器件具有更低的导通电阻和更高的击穿电压,因此 GaN 器件也越来越受到关注。[8]对 GaN HFET 的研究表明,外延生长层越厚,击穿电压越大。据报道,对于 6.5 μm 的外延层,击穿电压为 2000 V。在 DC-DC 转换器应用中,氮化镓器件已经显示出比硅 MOSFET 器件更高的竞争力。GaN 及其化合物用于升压和降压变压器中的研究也正在进行。对于 1 MHz 开关频率,有研究证明了 175-350 V (效率 97.8%,输出功率 300 W) 和 940 V (效率 94.2%,输出功率 122 W) 电压范围内的高效升压转换器。[9-11]升压转换器在 1.2 MHz 下,基于 GaN 基 FET 和 Si 基 MOSFET 的 48/12 V 未调节隔离式总线转换器的比较表明, GaN 基 FET 器件的功耗比 Si 基 MOSFET 器件小 25%。[8]这说明了 GaN 在升压转换器中的高效应用。

自 2005 年以来 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管(HEMT)已经可以作为商用器件, AlGaIn/GaN HEMT 具有高击穿电压,允许使用大的漏极电压,从而导致每瓦 RF 功率具有高输出阻抗,从而更容易匹配并降低电路损耗。在 20 世纪 90 年代后期开始,高质量的 4H-SiC 衬底可以被重复生长以后, GaN HEMT 的研究已经取得了非常大的进展。SiO₂ 钝化层的引入使得 HEMT 器件表现出更好的亚阈值特性,栅极漏电流降低了两个数量级,关态电流 I_{off} 降低 1429 倍[12]。通过在栅极引入高介电常数的 HfO₂ 和 Y₂O₃ 插入层,制备了单片集成增强/耗尽模式 AlGaIn MIS-HEMT 器件,可以应用于高速混合信号传输中。对于增强型 GaN MIS-HEMT,与绝缘栅结合的凹陷结构会改进器件的阈值电压(1.4 V)和电流密度(834 mA/mm)。对于耗尽型和增强型的 HEMT,最大跨导分别为 311 mS/mm 和 248 mS/mm,在具有 908MHz 振荡频率的 MIS-HEMT 环形振荡器中实现了高

速响应[13]。因此, GaN 由于具有高击穿电压, 高功率密度和高电子迁移率等特性而成为高功率和 RF 应用的非常有前景的器件。然而, 与 HEMT 栅极设计相关的挑战, 成本高以及缺乏 GaN 开关测试设备等问题尚未解决。还需要进一步研究材料生长技术和器件制备技术, 实现 GaN 在电力电子领域的更大的价值。

1.1.2 GaN 基 LED

1971 年, 第一个 GaN 基发光二极管(LED)在美国无线电公司被制作出来[14], 当时其输出功率只有 $1\text{-}5\ \mu\text{W}$, 随着 AlN 和 GaN 缓冲层的引入以及 MOCVD 和 MBE 生长技术的发展, 蓝宝石衬底上生长的 GaN 薄膜的晶体质量越来越高[15-16]。1989 年, Amano 等人实现了 GaN 中 P 型掺杂技术[17], 空穴的补偿机制也在 1992 年被相应报道出来。1991 年, Nakamura 等人报道了第一个 PN 结 GaN LED[18], 其输出功率是 $42\ \mu\text{W}$, 外量子效率为 0.18% [19]。由于 GaN 是具有 3.45eV 的禁带宽度的直接带隙半导体材料, 因此, (Al, In, Ga) N 的多种合金半导体材料对于能带工程而言是紫外和可见光 LED 的标志。1993 年, 第一个 P-GaN/N-InGaN/N-GaN 双异质结构蓝光 LED 制备成功[20-21]。紧接着, 90 年代中期, 基于 InGaN/GaN MQW 结构的蓝光和绿光 LED 已经商业化, 此时, 这些 LED 的输出功率和 EQE 分别为 $3\text{-}5\ \text{mW}$ 和 $6\text{-}9\%$ [22-25]。经过众多科学研究者的努力, InGaN/GaN 发光二极管(LED)技术领域取得了一系列重大进展, 以便获得更高的效率和光输出。目前效率在 $90\ \text{lm/W}$ 以上的器件目前在市场上可买到, 并且研究样品的效率已经超过 $120\ \text{lm/W}$ 。由于其高效率, 对大气介质具有良好的稳定性以及非常高的调制速度, GaN 基 LED 被视为替代广泛使用的白炽灯的理想选择[26]。

近年来, 半导体器件研究人员致力于获得白光 LED, 自从高亮度蓝光 LED 的发展以来, LED 市场占有率已经显著增加。基于三原色原理, 目前有三种通过 LED 获得白光的方法: 红色, 绿色和蓝色 LED 组合; 紫外 GaN LED 添加蓝色和黄色荧光粉; 以及蓝色 III-氮化物 LED 与黄色荧光粉的组合。[27-28]大多数白光 LED 在蓝光范围 ($400\text{-}490\ \text{nm}$) 具有峰值发射, 在黄光 ($500\text{-}700\ \text{nm}$) 范围具

有宽带发射, 可以实现全彩显示和并成为白光源。[29]目前, LED 在许多应用中扮演重要角色, 包括大面积显示器, 汽车和飞机照明, 交通信号灯。另一方面, 得益于半导体技术的进步, LED 的光输出性能每 10 年就会提高近一个数量级, 美国能源部 (DOE) 正在推动 SSL 技术开发及其应用, 所提出的固态照明 (SSL) 战略预计到 2035 年与无 SSL 的情景相比能够节约 75% 的能源。

1.1.3 GaN 基太阳电池

InN, AlN, GaAs 和 GaN 等 III 族氮化物半导体因为其良好的物理特性而被广泛用于光电子领域[30]。与 Si, Ge 和 GaAs 体系的材料相比, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金材料[31]的带隙可以从 InN 的 0.7eV 连续变化到 GaN 的 3.4eV, 除此之外, 该材料合金组分内具有直接带隙、载流子迁移率高、漂移速度快、接触电阻小等特点[32-33], 因此对于设计多量子阱太阳电池具有非常优越的性能优势。另外, InGaN 的带边吸收率比较高 (在带边缘 $> 10^5 \text{ cm}^{-1}$) [34], 这表明 99% 以上的入射光能量较高比带隙在材料的第一个 500 nm 内被吸收, 对与薄膜的太阳能电池来说非常有利。研究表明, 当 InGaN 合金中的 In 组分超过 40% 时, 可以设计 InGaN 基太阳电池的结构以获得高于 50% 的光电转换效率。[35]

由 Jani 等人完成的工作首次在实验上证明了 GaN 可以作为高性能光伏材料。[36]太阳电池器件是基于 P-I-N 异质结结构, 其中 200 nm 厚的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (In 组分在 4%-5%) 作为有源层, P 型 GaN 和 N 型 GaN 分别作为 P 型层和 N 型层。通过室温下的光致发光观察到, 材料内的相分离是外延生长过程中需要克服的主要问题, 较低带隙相分离材料导致开路电压和短路电流密度的退化。随后通过改进的工艺步骤解决了相分离问题, 这是由于使用 MOCVD 技术推进了 InGaN 合金生长技术的发展。Horng 等人通过激光剥离技术去除 P-I-N 结构的 InGaN/GaN 太阳电池器件的蓝宝石基底, 然后通过晶圆键合将剩余的整个器件转移到涂覆了 Ti/Ag 层的 Si 衬底上, 太阳电池的转换效率从 0.55% 增加到 0.80% [37]。Ho 等人将 P-GaN 表面粗糙化, 使得 InGaN MQW 太阳电池的转换效率从 0.43% 增加到 0.87% [38]。通过使用氧化铟锡 (ITO) 在 P-GaN 表面作为电流扩展层 (CSL) 会

在一定程度上增加光吸收, 增加太阳能电池器件的功率转换效率。另外, 表面陷光结构的加入会使得器件的效率从 0.68% 增加到 0.92%[39]。

可见, 氮化镓及其合金 InGaN 在光电子应用方面取得了令人振奋的成果, 这是因为它们在各种 In 组分具有可调的直接带隙和高吸收系数水平。然而, 随着 In 组分的增加, 会给 InGaN 合金引入过多的缺陷, 这就限制了基于 GaN 的高效太阳能电池的性能。通过使用多量子阱, 超晶格或肖特基结等结构可以在一定程度上消除这些限制, 但仍需要进一步研究和改进太阳能电池的特性。

1.2 压电电子/光电子学在半导体器件中的应用

2007 年, 王中林教授基于一系列外加应力对氧化锌纳米线电输运性质有所改变的实验观察, 首次引入了纳米压电电子学的概念[40-42]。压电电子学效应是利用应变引起的界面极化电荷调制界面处能带结构并进而有效地调节和控制界面或结区的载流子输运过程的一个物理效应。另一方面, 压电电子学效应产生的压电势可以作为晶体管中的门极电压, 调节场效应晶体管中的载流子传输过程, 从而控制器件的开关过程。紧接着, 压电光电子学效应在 2010 年被提出, 是应用压电势调节和控制界面或结区载流子的产生、分离和传输以及其他复合过程的效应, 通过对压电光电子学的研究可以实现高性能的光电子器件。压电光电子学效应是基于同时具有半导体、光激发和压电性质的材料, 对半导体、光激发和压电特性三者之间耦合效应的研究[43-46]。经过多年的发展, 压电光电子学效应已经在基于纳米线的传感器、人与硅基技术的交互界面、微机电系统以及主动式柔性电子器件等领域得到广泛应用。

1.2.1 压电电子学晶体管的研究

金属-半导体接触是一种非常重要的器件结构, 如图 1.2 (a) 所示, 是一个典型的基于 ZnO 纳米线的晶体管示意图[47], 当纳米线受到外部的张应力或者拉应力时, ZnO 两端与金属接触的界面处就会出现压电电荷, 当有电流通过纳米线时, 这种压电电荷就会对载流子的输运过程产生相应的影响。为说明实际问题, 采用

单一的金属-半导体接触界面为例，来阐述压电电子学晶体管的基本原理：

传统的半导体理论中，金属半导体界面处的载流子浓度如下式所示：

$$J = J_n = q\mu_n nE + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (1.1)$$

其中， J 和 J_n 表示电流密度， q 为电子电荷量， n 为载流子分布函数，电场强度 E 的大小用下式表示：

$$E = \frac{d\psi_i}{dx} = \frac{dE_c}{dx} \quad (1.2)$$

根据肖特基扩散理论，金属端接正偏压时，对应的电流密度为：

$$J_n \approx J_D \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1\right] \quad (1.3)$$

其中 J_D 是饱和电流密度。当器件受到外部应力的作用时，金属与半导体界面处会产生压电电荷，压电电荷引起的等效肖特基势垒高度的变化可以用公式 (1.4) 表示：

$$\phi_{Bn} = \phi_{Bn0} - \frac{q^2 \rho_{piezo} W_{piezo}^2}{2\varepsilon_s} \quad (1.4)$$

这种情况下，最终的电流密度就可以表示为：

$$J_n \approx J_{D0} \frac{q^2 \rho_{piezo} W_{piezo}^2}{2\varepsilon_s kT} \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1\right] \quad (1.5)$$

其中， J_{D0} 是无外加电压时的饱和电流密度。

如图 1.2 (b) - (d) 所示，分别是金属-半导体界面处的空间电荷、电场分布和能带图，图中虚线对应没有压电电荷的情况，实线对应有压电电荷的情况。与式 (1.7) 结合可以看出，外部应力可以使得界面处的能带发生轻微变化，从而对传输电流进行调控，这就是金-半接触的压电晶体管的基本原理[44]。

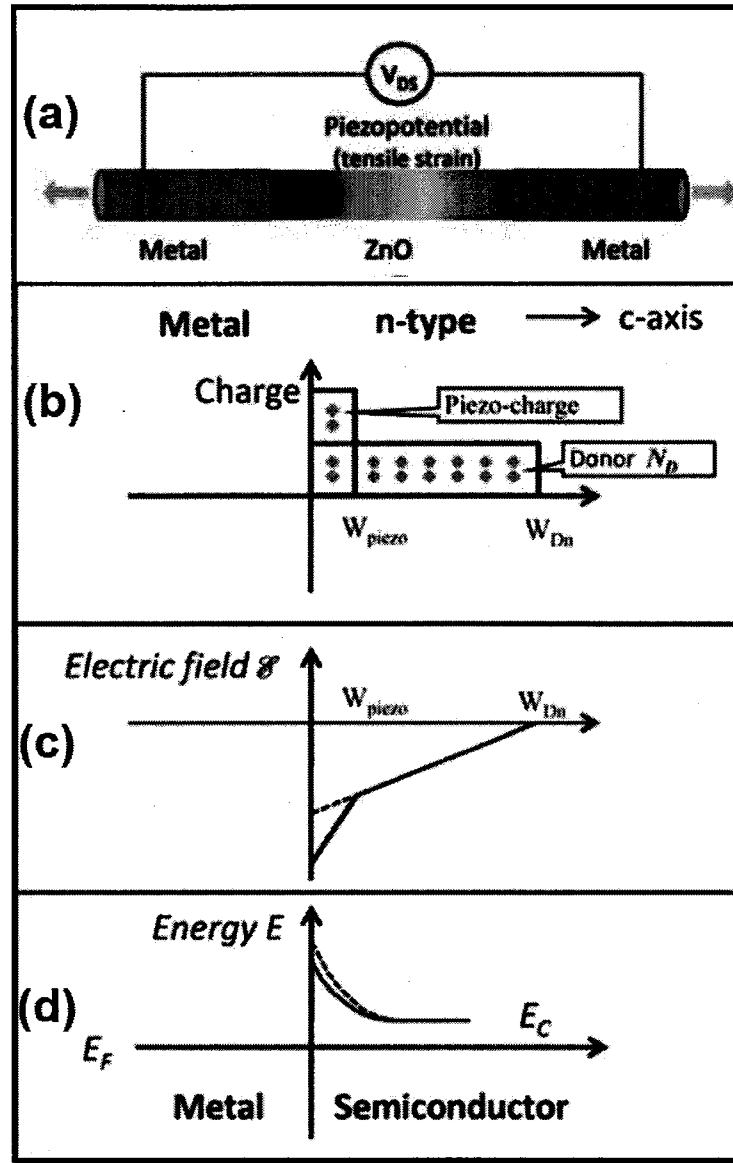


图 1.2 (a) 基于 ZnO 纳米线的晶体管示意图；(b) 金-半接触界面的空间电荷分布；(c) 界面处的电场分布；(d) 界面处的能带图。图中虚线对应没有压电电荷的情况，实线对应有压电电荷的情况[47]。

Figure 1.2 (a) Schematic diagram of a transistor based on ZnO nanowires. (b) Space charge distribution at the gold-semi-contact interface. (c) Electric field distribution at the interface. (d) Energy band diagram at the interface [47].

基于以上理论, Reza 等人利用阵列式的氧化锌制备了压电调制的晶体管, 利用氧化锌中的压电效应, 实现了对晶体管的调制作用[48]。在这项研究中, Reza 等人制作了两种类型的器件, 一种是使用水热生长的纳米线 (HG), 其形貌图如

图 1.3 (a) 所示, 另一种是使用由连续微波辅助生长 (SMAG) 生长的 ZnO 纳米线, 如图 1.3 (b) 所示。利用这两种生长方式得到的纳米线阵列分别被用于制作了两种类型的器件, 器件的示意图如图 1.3 (c) 中的插图所示, ZnO 纳米线生长在晶体管的栅极位置, 分别是 HGFET 和 SMAGFET。图 1.3 (c) 是研究人员设计的电路, 将金属棒设计成可以垂直运动, 从而在 ZnO 纳米线阵列上沿 c 轴轴施加力, 使用数字示波器和万用表实时测量器件的 I-V 特性作为输出。在 NR 阵列上方还放置了一块小平板玻璃, 以确保纳米线阵列上力学分布的均匀并绝缘。

在外部应力下, 器件在不同应力下的传输特性如图 1.3 (d) (e) 所示, 在 $V_{GS} = 0\text{ V}$ 时, HGFET 和 SMAGFET 随应力的变化不尽相同。外部应力从 0N 增加到 2N 的过程中, HGFET 的 I-V 特性变化并不明显, 而 SMAGFET 随应力的变化却很明显, 这说明 ZnO 的质量对材料的压电性能有很大的影响, 测量得到 SMAG ZnO 阵列的压电系数高达 66 pC/N , 这项研究在一定程度上证明了压电电子学在晶体管中的应用。

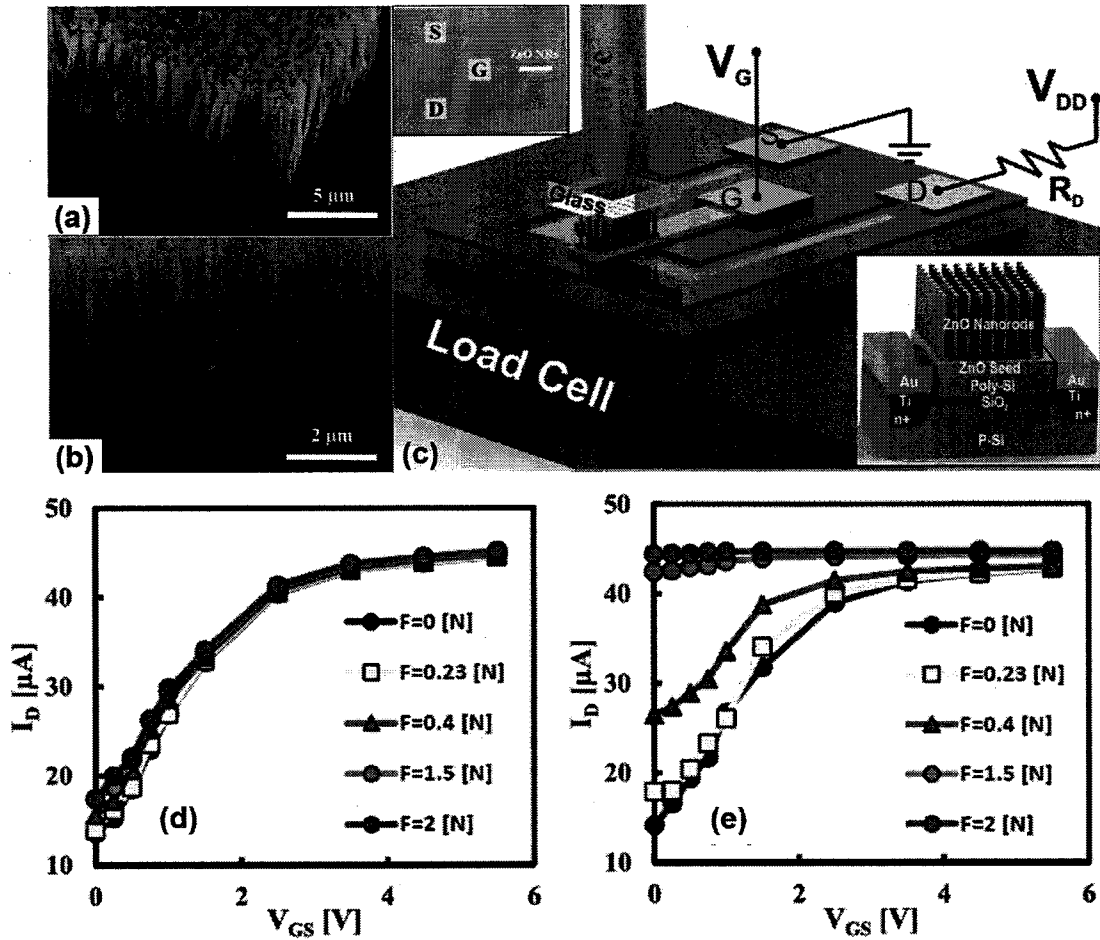


图 1.3 (a) 电场发射扫描电子显微镜获得的利用水热法生长的纳米棒阵列图像；(b) 利用 SMAG 法生长的纳米棒氧化锌纳米棒阵列的 SEM 图；(c) 压电晶体管传感器工作原理示意图；(d) 水热法生长的纳米棒阵列晶体管在不同外部应力下的直流响应特性；(e) SMAG 法生长的纳米棒阵列晶体管在不同外部应力下的直流响应特性[48]。

Figure 1.3 The FESEM images of the NR arrays grown with a) HG and b) SMAG methods. (c) The schematic of the piezoelectric sensor test system. (d) DC response of the HGFET sensor under different force. (e) DC response of SMAGFET sensor under different force[48].

Zhang 等人制作了一种基于 In 掺杂的单根 ZnO 纳米带的压电晶体管[49]，垂直结构的晶体管器件如图 1.4 (a) 所示，将单根 ZnO 纳米带平铺在覆盖有 Au 层的基底上，用 Pt/Ir 探针在 AFM 中测试样品的电学信号。其中单根 ZnO 纳米带的长度超过 20 μm ，宽度不超过 1 μm ，厚度约为 34 nm，如图 1.4 (b) 所示，其中的插图表示单根 ZnO 纳米带的形貌图。

在这种垂直结构的晶体管中，AFM 的 Pt 尖端和 Au 膜分别用作晶体管的源极和漏极，晶体管的电输运性能受到压应变的影响，外部应力充当栅极，调控器件内部的电输运特性。其工作机理归因于压阻和压电耦合作用下肖特基势垒高度的变化。测试获得的样品的电信号如图 1.4 (c) 所示，器件的 I-V 特性在外部应力的调制下变化非常明显。当外加的应力增加时，正偏压和负偏压下的电流都被抑制。I-V 曲线表明在源极和漏极接触处形成肖特基接触，但由于不同的界面特性而具有不同的势垒。当负载力增加到 806 nN 时，电流下降到 0.007 nA，将其定义为晶体管的关断状态。图 1.4 (d) 给出的是 $\ln(I)$ 随 $V^{\frac{1}{4}}$ 的变化关系， $\ln(I)$ 与 $V^{\frac{1}{4}}$ 近似呈线性关系，这与热电子发射-扩散理论模型是一致的。总之，这种晶体管将在高分辨率测试设备和 MEMS 器件中具有重要应用。

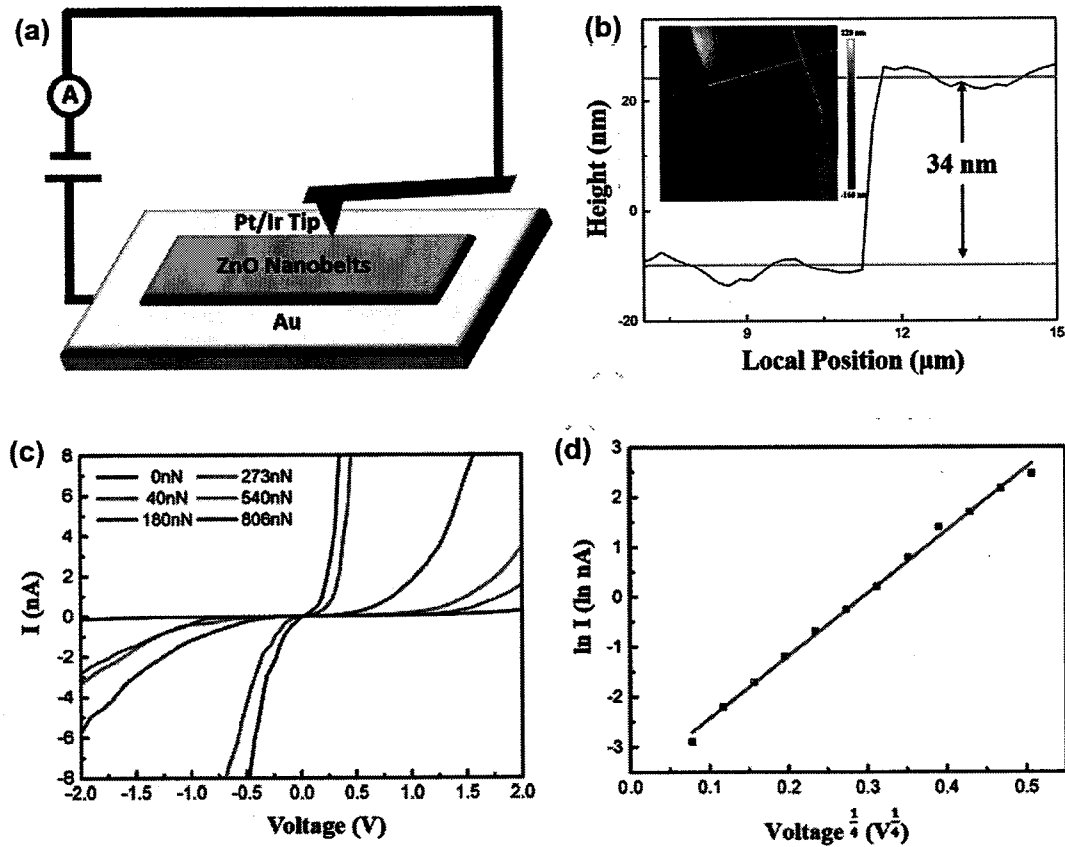


图 1.4 (a) 晶体管结构示意图；(b) 纳米棒高度的测量结果，图中的插图是纳米棒的形貌图；(c) 不同外力下 In 掺杂的 ZnO 纳米棒的 I-V 特性曲线；(d) $\ln(I)$ 随 $V^{\frac{1}{4}}$ 的变化关系[49]。

Figure 1.4 (a) The schematic diagram of the transistor. (b) The height of the nanobelt. The inset is the morphology of the nanobelt. (c) I-V curves of the In-doped ZnO nanobelt at different applied

forces. (d) Plot of $\ln(I)$ as a function $V^{1/4}$ [49].

此外, Siarhei 等人基于压电电子学基本理论, 提高了 ZnO 薄膜晶体管(TFT) 压电传感器的性能, 进一步实现了商用芯片与新型力传感技术的兼容[50]。所用到的单个 ZnO 薄膜晶体管示意图如图 1.5 (c) 中的插图所示, 晶体管的三个电极均采用的是 ITO, Al_2O_3 作为绝缘层介于 ZnO 与 ITO 中间, 整个器件是在玻璃基底上制备的。图 1.5 (a) 是用于表征单个 TFT 阵列器件的压力灵敏度的实验装置示意图, 最高压力灵敏度可以通过在最大跨导点偏置晶体管来获得, 所述最大跨导点可以在 TFT 阵列中从一个元件到另一个元件变化。在这里, Siarhei 等人使得氧化锌薄膜晶体管处于饱和状态, 以排除器件对噪声的敏感性。施加到 ZnO 沟道的应力导致电子在沟道表面积聚, 从而增加漏极电流。因此, 可以通过每 Kpa 的压力对应的漏极电流改变量, 或者等效的栅极电压改变量来量化器件的灵敏度。提取漏极电流的变化作为 TFT 上施加的压力的函数, 并将其绘制在图 1.5 (b)

(底部栅极) 和图 1.5 (d) (顶部栅极) 中, 图中不同的曲线对应不同的栅极电压。然后使用 $I_{\text{DS}}\text{-}V_{\text{GS}}$ 特性来估算在器件中引起等效电流变化所需的有效栅极电压, 如图 1.5 (c) 和 (e) 所示, 这样, 施加到 TFT 阵列上的压力可以轻易地被输出信号感知, 实现了更高的灵敏度。这些传感器基于氧化锌薄膜晶体管, 由于每个传感器同时作为开关进行操作, 并且能够轻松扩展为大阵列。

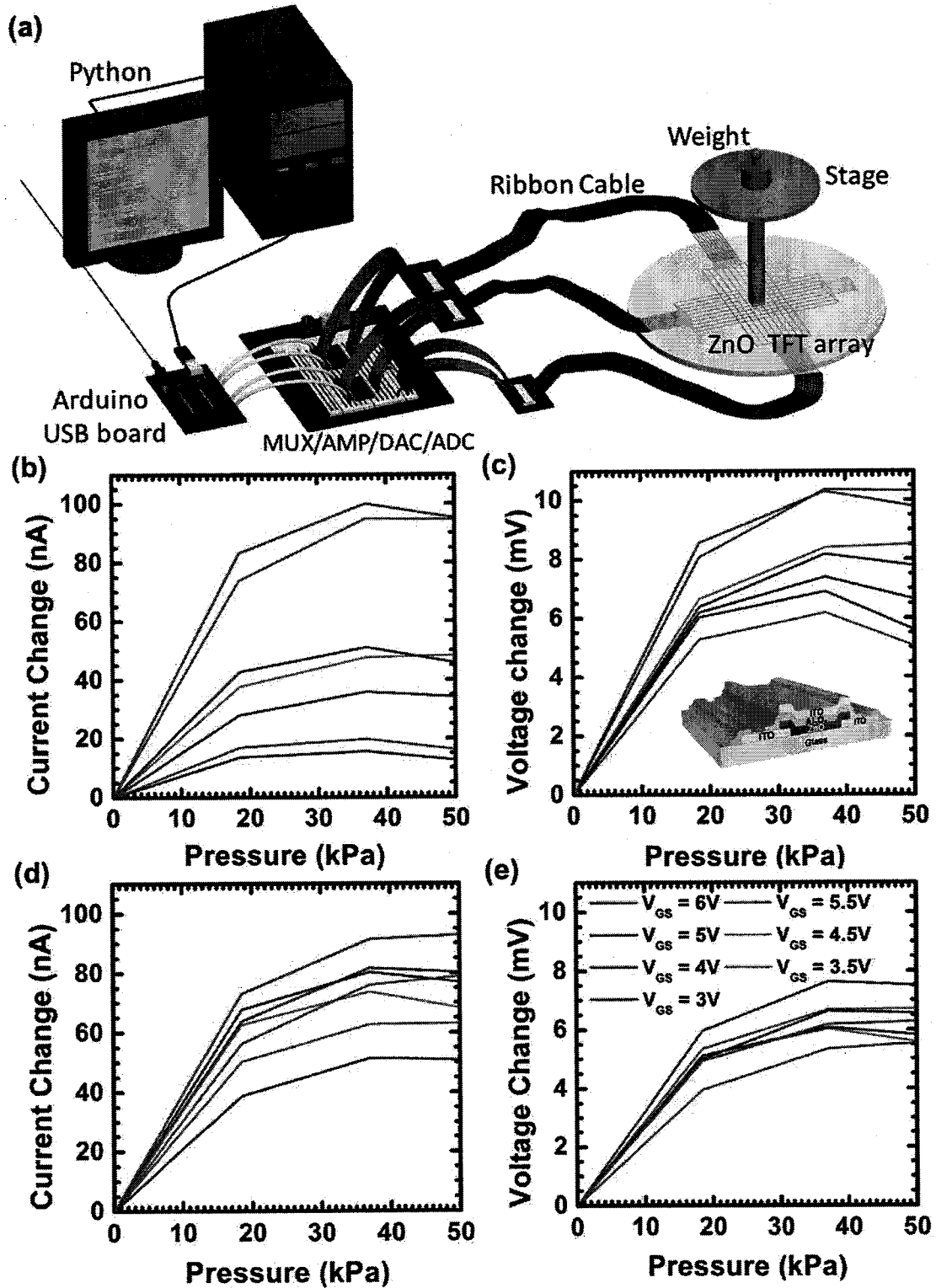


图 1.5 (a) 实验测试原理图; (b) 不同栅压下, 漏极电流对压强的依赖关系; (c) 引起与 (b) 中相同的电流变化所需的有效栅极电压变化; (d) 泄漏电流测量的变化与压力的函数关系; (e) 引起与 (d) 中相同的电流变化所需的有效栅极电压变化[50]。

Figure 1.5 (a) Schematic diagram of the measurement system. (b) Under different gate voltages,

the drain current measured as a function of pressure. (c) Extracted effective gate voltage change needed to cause the current. (d) Drain current measured change as a function of pressure. (e) Extracted effective gate voltage change needed to cause the current[50].

1.2.2 压电光电子学对发光二极管的影响

肖克莱理论是研究压电 PN 结的 I-V 特性的基础。为了说明压电效应对发光二极管的影响, Wang 等人以 ZnO PN 结结构为基本原型, 解释基本的物理过程, 如图 1.6 所示[51]。为了简单起见, 假定 p 型区域是非压电的而 n 型区域是压电的。考虑到 ZnO 纳米线阵列是沿着 c 轴的方向生长, 通过沿着 c 轴施加压缩应力, 在 PN 结的 N 型侧就会产生正压电电荷。这里采用的是突变结模型, 其中 PN 结中的杂质浓度从受主杂质的 N_A 突变为施主杂质的 N_D 。内建电势由下式给出:

$$\psi_{bi} = q \cdot 2\epsilon_s^{-1} \cdot (N_A W_{Dp}^2 + \rho_{piezo} W_{piezo}^2 + N_D W_{Dn}^2) \quad (1.6)$$

其中 N_D 是施主浓度, N_A 是受主浓度, W_{Dp} 和 W_{Dn} 分别是 P 侧和 N 侧的耗尽层宽度, 这说明内建电位的变化可以通过应变诱导的压电电荷来调节。

对于一个简单的情况: 对于 N 型侧具有施主浓度 N_D 的突变结来说, 局部的载流子浓度 $p_{n0} \gg n_{p0}$, 其中 p_{n0} 是 N 型半导体中的热平衡空穴浓度, n_{p0} 是 P 型半导体中的热平衡电子浓度, 基于 PN 结的压电晶体管的总电流密度由下式给出:

$$J = J_{c0} \cdot \exp[q^2 \rho_{piezo} W_{piezo}^2 (2kT\epsilon_s)^{-1}] \cdot \exp[qV \cdot kT^{-1} - 1] \quad (1.7)$$

其中, J_{c0} 是没有压电势时的饱和电流密度。这说明通过 PN 结传输的电流是局部压电电荷密度的指数函数, 其正负号是由应变的类型决定的。因此, 不仅可以通过应变的大小, 而且可以通过应变(拉伸或压缩)的性质来有效调节载流子传输。因此, 压电效应调制的 LED 输出的光功率的大小可以用式 (1.8) 表示:

$$P_{optic} = \beta \{ J_{c0} \cdot \exp[q^2 \rho_{piezo} W_{piezo}^2 (2kT\epsilon_s)^{-1}] \cdot \exp[qV \cdot (kT)^{-1} - 1] \}^b \quad (1.8)$$

其中, β 是由器件本身决定的常数, b 是幂律参数, $b = 1$ 对应线性近似, $b \neq 1$ 对应的是非线性近似的情况。

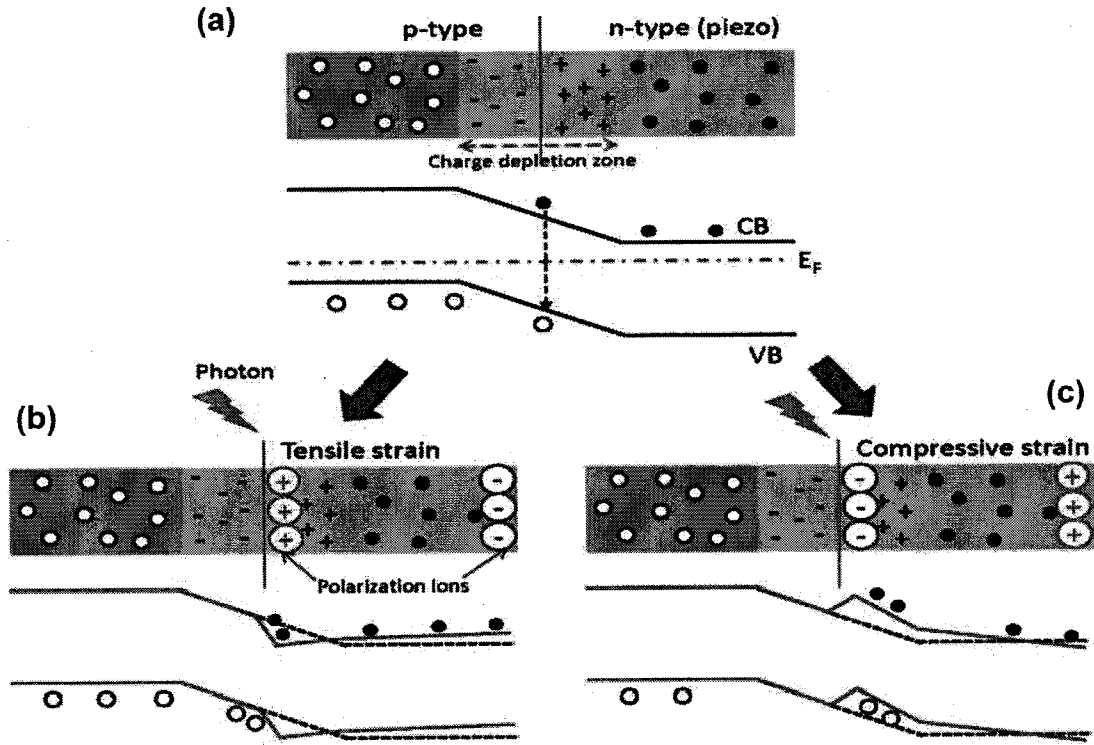


图 1.6 用于说明在 PN 结处的压电效应的示意图。(a) 无应力时 PN 结结构和能带示意图；(b) 外加拉伸应力时 PN 结处的能带示意图；(c) 外加压缩应力时 PN 结处的能带示意图 [51]。

Figure 1.6 A schematic diagram illustrating the piezoelectric effect at the PN junction. (a) PN junction structure and energy band diagram without stress; (b) Energy band diagram of the PN junction with tensile stress; (c) Energy band diagram of the PN junction with compressive stress[51].

对于压电效应调制的 PN 结 LED，由于存在压电电荷，外量子效率 (EQE) 可以推导为 $\eta_{ex} = \alpha \eta_{ex0}$ ，其中 η_{ex0} 是在 PN 结内没有压电电荷的 EQE，表示压电光电子效应的项 $\alpha = \{\exp[q^2 \rho_{piezo} W_{piezo}^2 (2kT\epsilon_s)^{-1}]\}^{-1}$ ，表示的是压电电荷在载流子传输和光子复合过程中的调制/调谐效应。更具体地说，对于沿 c 轴生长的 GaN 或 ZnO 纳米线，沿着 c 轴的应变 s_{33} ，如果采用非线性近似，取 $b = 2$ ，则压电效应调制的 PN 结 LED 的光功率输出具体可以表示为：

$$P_{optic} = \beta \{J_{c0} \cdot \exp[-qe_{33}s_{33}\rho_{piezo}(2kT\epsilon_s)^{-1}] \exp[qV \cdot (kT)^{-1} - 1]\}^2 \quad (1.9)$$

同时 EQE 具体表示为 $\eta_{ex} = \exp[-qe_{33}s_{33}\rho_{piezo}(2kT\varepsilon_s)^{-1}] \cdot \eta_{ex0}$, 这非常直接地显示了 LED 光电发射过程中压电势的调谐/控制, 这是压电光电子学的核心内容[52]。

氮化镓基 LED 由于其非常高的出光效率(对于白光 LED 效率高达 150lm/W)、高的载流子寿命、对击穿和静电放电具有高度的稳健性、以及较低的预期成本等使其成为可以用于实现下一代光源的理想器件。另外, GaN LED 可以通过精确控制材料的组成结构来调整发射波长, 因此更加激发了研究人员的研究热情。而压电光电子学效应的提出使得 GaN LED 的应用具备了更多的可能性。

Peng 等人首次利用压电光电子学效应的调制的 GaN 基 LED 实现了 PL 成像[53]。在这项工作中, 如图 1.7 (a) 所示, 通过在 c-面蓝宝石衬底上的外延的 InGaN/GaN 多量子阱结构自上向下刻蚀实现周期性分布的纳米柱阵列。纳米柱阵列的密度为 $6.25 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$ 。单根纳米柱的高度是 $1.2 \mu\text{m}$, 半径是 $0.4 \mu\text{m}$ 相邻两个纳米柱中心的距离是 $4 \mu\text{m}$ 。经过对比, 这种设计方式与 6350 dpi 的分辨率非常一致。为了保持纳米柱在受到应力后的完整性, Peng 等人在纳米柱的空间阵列间隙填充了 PMMA (聚甲基丙烯酸甲酯), 因为 PMMA 对光的吸收几乎为零, 光线的透过率非常高, 所以, PMMA 的填充对器件的 PL 发光没有影响, 填充后的纳米柱阵列的 SEM 图如图 1.7(b) 所示。激光器的激发波长是 405 nm, 控制激光器激发的区域, 就可以实现 LED 阵列的显示功能。图 1.7 (c) 对应的是一个正方形区域的 PL 发光, 可以看出, 样品中每一个纳米柱都是一个发光的像素点, 这些像素点规则排列, 且光强分布均匀。图 1.7 (d) 显示的是不同激发功率下纳米柱阵列的 PL 谱, PL 谱的强度随着激发功率的增加而增加, 这是因为在高的激发功率下, 会有更多的电子跃迁到高能级, 从而导致强度增加。Peng 等人还研究了同一入射光功率, 不同压强下样品的 PL 光谱, 如图 1.7 (e) 所示。为了更直接地获得 PL 谱强度与压强的依赖关系, 图 1.7 (f) 中给出了 PL 强度的相对变化 $(\frac{L_s - L_0}{L_0})$ 随压强的变化曲线, 其中, L_0 表示无压力的 PL 强度, L_s 表示有压力时的 PL 强度。图 1.7 (g) 是具有 'BINN' 字样的与 MQW 纳米柱阵列接触的

模板的光学图像。将此模板覆盖在 InGaN/GaN 多量子阱纳米柱阵列样品的表面，并同时测试器件的 PL 谱，就会有“BINN”图样显示出来，当在模板上施加不同的压强时，图样的亮度便会不同。具体来说，施加的压强分别为 1.87 MPa，7.47 MPa 和 14.94 MPa 时，对应的纳米柱阵列的发光分别如图 1.7 (h) - (j) 所示，图形在每一个对应的压强下都是均匀发光，并且压强越大，图形越清晰。由此可以得出，可以通过改变模板上的图案便会改变显示的图案，通过改变施加在模板上的应力改变图案的清晰度，这就实现了 LED 显示器的基本功能。

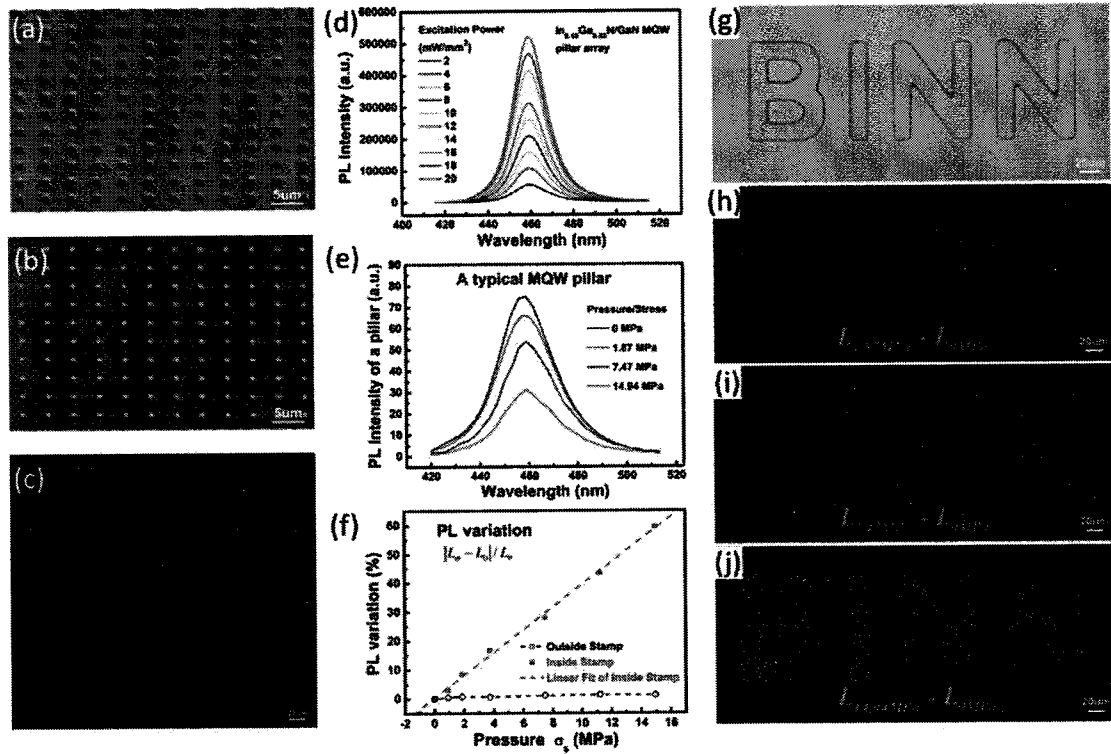


图 1.7 (a) InGaN/GaN MQW 纳米柱的 SEM 图像；(b) PMMA 涂覆后，用氧等离子体蚀刻以暴露尖端之后的柱阵列的 SEM 图像；(c) MQW 柱阵列的 PL 图像；(d) MQW 柱阵列在不同激励功率密度下的 PL 光谱；(e) 不同压力下典型 MQW 柱的 PL 谱；(f) BINN 图案内部和外部的 PL 强度随所施压力的变化而变化；(g) 与 MQW 纳米柱阵列接触的 BINN 印记的光学图像；(h) - (j) 分别在 1.87MPa，7.47MPa 和 14.94MPa 下记录的 PL 强度差异图像[53]。

Figure 1.7 (a) SEM image of the InGaN/GaN MQW nanopillar. (b) SEM image of the nanopillar array after PMMA coating and oxygen plasma etching. (c) PL image of the MQW nanopillar array. (d) PL spectra of the InGaN/GaN MQW nanopillar under different excitation power densities. (e)

PL spectra of a InGaN/GaN MQW nanopillar under different stress. (f) Changes of PL intensity inside and outside the BINN stamp as a function of the applied stress. (g) Optical image of the BINN stamp in contact with the MQW nanopillar array. (h)-(j) PL intensity images observed with microscope under 1.87 MPa, 7.47 MPa and 14.94 MPa, respectively[53].

另外, Wang 等人在之前的一系列工作的基础上, 利用压电光子效应增强 GaN 基微米线紫外发光二极管的发光并同时抑制了二极管效率的降低[54]。如图 1.8 所示, 实验中使用的 GaN 微米线是通过金属有机化学气相沉积 (MOCVD) 系统合成的, GaN 线的生长方向是沿着 a 轴, 如图 1.8 (a1) 所示是 GaN 的原子结构示意图。Wang 等人将 GaN 微米线通过微纳加工工艺放置在一半覆有氧化铟锡 (ITO) 另一半覆有 P-GaN 的蓝宝石衬底上, 就获得了单根 GaN 微米线的 PN 结 LED。图 1.8 (b) 给出的是 GaN 基 PN 结 LED 的示意图, 图中右上角的插图是在显微镜下观察到是 LED 的光斑, 右下角的插图是 GaN 微米线的梯形端面的 SEM 图像。在外置偏压下, 光从 GaN 微米线末端与 P-GaN 的异质结界面处形成的 PN 结处发出, 可以看出, LED 器件发出的光斑明亮且稳定。

为了研究压电光子效应对所制备的 GaN 基 LED 器件性能的影响, Wang 等人搭建了一套用于表征在压缩应变下 LED 的性能测试系统, 该系统主要由一个自由倒置显微镜、压电纳米定位平台和光纤光谱仪组成, 如图 1.8 (c) 所示。其中压电纳米定位平台可以给样品施加一系列均匀的外部应变的同时测量样品的电学特性。图 1.8 (d) 则是在施加压缩应变变化的情况下, 在正向偏压下 LED 的 I-V 特性, 电流在压缩应变的调制下逐渐增加, 这是由于外加应变的引入使得异质结界面处能带的弯曲发生变化, 从而改变了载流子的传输特性。为了获得 GaN 基 PN 结 LED 的光电特性对外部应变的相应, 在 20 μA 电流下, 不同的压缩应变下器件的 EL 光谱和光学图像如图 1.8 (e) 所示, 同样地, 外部应变越强, 器件发光强度的变化越大。进一步计算每个发射光谱的积分面积与器件的 EQE 随外部应变的变化, 在注入电流密度 J 为 33.3 A/cm^2 时, 在施加-0.12% 压缩应变的情况下, 计算得到的 EQE 增加了 450% 以上。

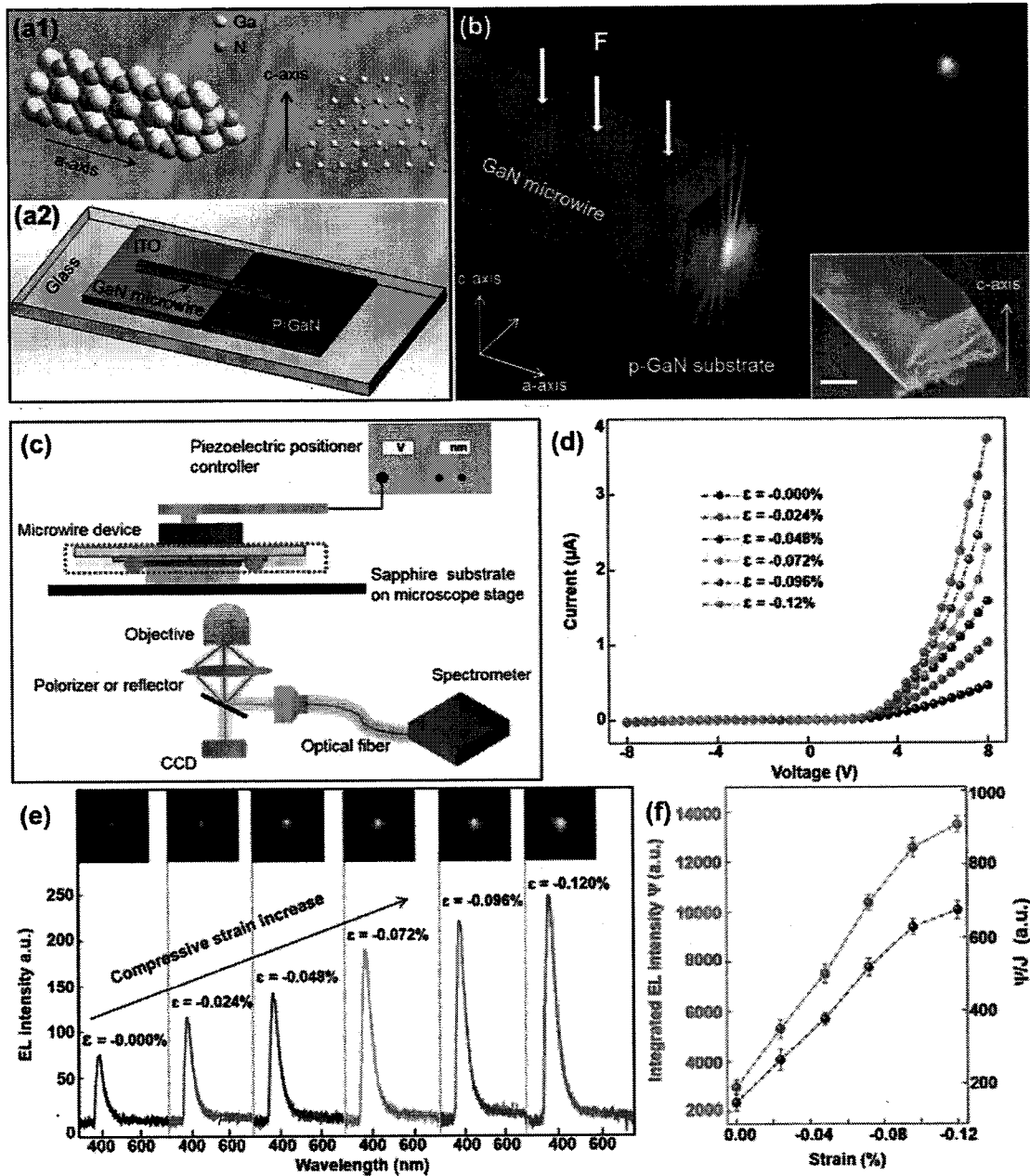


图 1.8 (a1) GaN 微米线的原子结构模型(总体和横截面视图)以及制备的 LED 器件(a2)的示意图; (b) GaN 微米线发光的示意图, 图中右上角的插图是在显微镜下观察到是 LED 的光斑, 右下角的插图是 GaN 微米线的梯形端面的 SEM 图像; (c) 实验中搭建的用于表征在压缩应变下 LED 的性能测试系统的示意图; (d) 在施加压缩应变变化的情况下, 在正向偏压下 LED 的 I-V 特性; (e) 在 20 μA 电流下, 在不同的压缩应变下器件的 EL 光谱和光学图像; (f) 随着外部压缩应变的增加, 基于 GaN 微米线的 LED 的 EL 强度的积分和相对 EQE 的变化[54]。

Figure 1.8 Atomic structure model of the GaN MW (a1) and schematic image of the LED (a2).

(b) Schematic image showing the light emission of the GaN MW. Upper inset: light emission of the

MW-based LED observed under microscope. Lower inset: SEM image of the GaN MW. (c) Schematic diagram of the measurement system for characterizing the performances of MW-based LEDs under compressive strain. (d) I–V characteristic of the LED at forward bias under the variation of the applied strain. (e) Optical spectra collected from the MW-based LED at 20 μ A injection current and corresponding CCD images of the GaN MW under different applied strain. (f) The integrated EL intensity and the relative EQE of the device with increasing externally compressive strain[54].

另外，为了减轻 GaN 基 LED 在工作状态下的自热现象，Du 等人通过传统的光刻技术制作条带状排列的 InGaN/GaN MQW LED，利用压电光电子学效应抑制了器件中的热效应[55]。器件的结构图如图 1.9 (a) 所示，InGaN/GaN 多量子阱结构的微米阵列是通过光刻工艺和刻蚀工艺结合制作的，通过电子束蒸发将 Cr/Ni/Al 和 Ni/Au 分别沉积作为 N 型和 P 型电极。条带状的结构经刻蚀后，形貌图如图 1.9 (b) 所示，每个单条的宽度，高度和占空比分别为 3 μ m，0.7 μ m 和 4 μ m，图中的插图是刻蚀后的截面图。当给器件施加正向偏压时，N 型 GaN 中的电子和 P 型 GaN 中的空穴同时注入到 MQW 区域中，电子从导带到价带的跃迁会同时产生光子。图 1.9 (c) 显示了注入电流从 1mA 增加到 7mA，不同注入电流下的 EL 光谱，随注入电流增加，发光强度近乎线性增加。

图 1.9 (d) 是压电光电子学效应对条带结构的 LED 的电致发光 (EL) 特性的作用，通过应力控制器将外部应变施加在芯片上，并同时利用红外测温仪来获得样品的环境温度。在不同的温度下，外部应力对器件 EL 光谱的影响分别如图 1.9 (e) - (g) 所示，显然，在每个温度条件下，随着外部应变增加，发射强度增加。这是由于压电光电子学效应引起的 InGaN/GaN 界面处的外部应变产生的极化电荷使得异质结结构中内建电场的弱化，多量子阱中辐射复合率增强，因而发光强度增大。图 1.9 (h) 给出的是不同温度下 LED 的 EL 强度的积分对应变的依赖性。在每个温度下 EL 强度的积分值都随应变增加而单调增加。图 1.9 (i) 中温度的等高线图显示了 EL 强度积分的温度依赖性作为应变的函数，随着温度

的升高,真正值得一提的是,在没有应变的情况下,在 364K 的 EL 积分强度降低到 300K 时 EL 积分强度的 67.8%,然而,通过施加 0.09%的应变后 EL 强度就增加到 300K 时积分强度的 104%。因此,可以在 LED 封装中引入足够的应变,以缓解热效应对较高发射输出的不良后果,作为传统散热方法的补充/替代方案。这项工作提供了一个深入的研究压电光电子学效应在超出之前报道的低温和室温的高温范围,可以更好地理解压电光电子学效应并有效缓解 LED 的工业化的热效应。

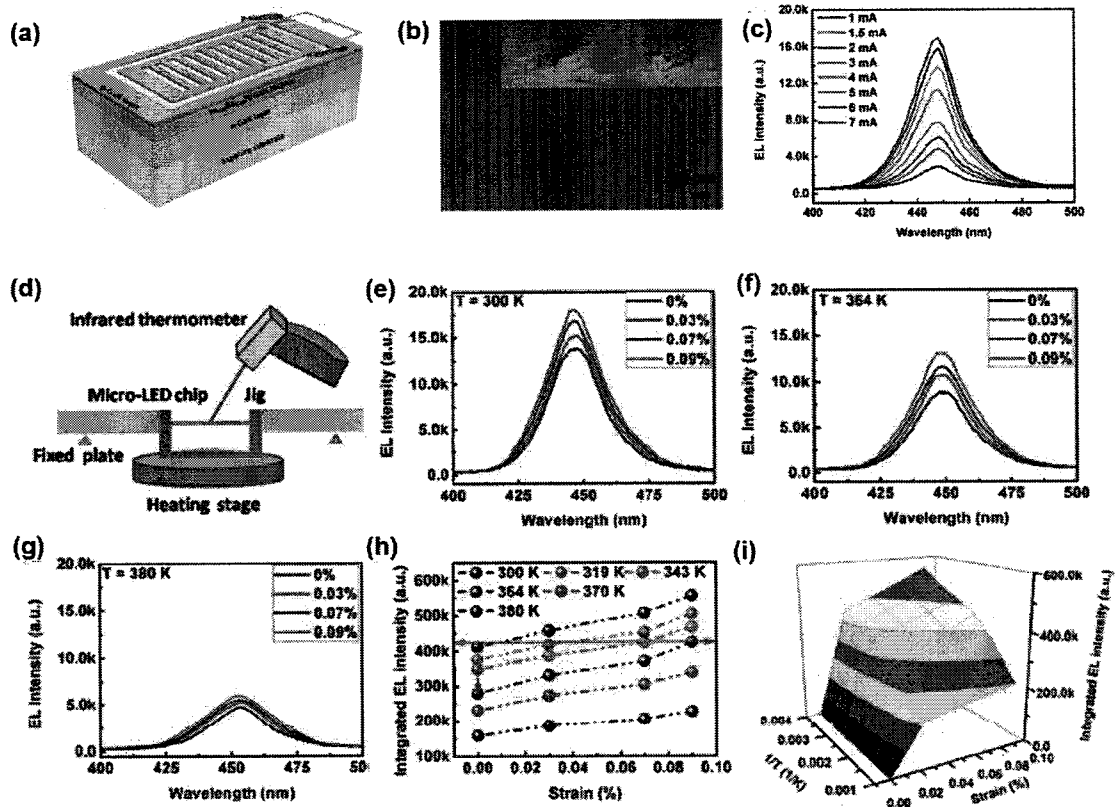


图 1.9 (a) InGaN/GaN MQWs 微条带 LED 器件示意图; (b) 条带结构的 SEM 图, 图中的插图是条带结构的截面图; (c) 不同电流下器件的电致发光光谱 (EL); (d) 器件变温测试的示意图; (e) - (g) 分别对应 300K, 364K 和 380K 温度下, 器件在一系列应力下的 EL 光谱; (h) 不同温度下, 器件 EL 光谱积分强度随外部应力的变化; (i) EL 光谱积分随外加应力和温度变化的三维图[55]。

Figure 1.9 (a) Schematic diagram of the microstripe arrayed InGaN/GaN MQWs LED device.(b) Top view SEM image of microstripe array structure, the inset is the cross-section. (c) EL spectra

under a series of currents. (d) The schematic setup for variable temperature EL measurement. EL spectrum under externally applied strains at (e) 300 K, (f) 364 K, and (g) 380 K. (h) Under different temperatures, the integrated EL intensity as a function of external strain. (i) The 3D plot of the integrated EL intensity as a function of external strain and temperature[55].

1.2.3 压电光电子学光伏电池的研究

压电效应调制的纳米线太阳电池有望成为太阳能电池领域的推动者，P3HT/ZnO微纳米线异质结太阳电池的提出是第一次观察到的压电效应对柔性异质结太阳能电池输出电压的影响。通过应变调整 ZnO 和 P3HT 之间界面处的极化电荷使得器件的开路电压发生变化，实现了压电光电子学效应在太阳电池领域的应用。另外，基于压电半导体（如 CdS，ZnO 和 CdTe）材料的纳米线太阳电池的研究也是压电光电子学光伏电池发展的推动者。研究人员使用压电光电效应首次大幅增强了 N-CdS/P-Cu₂S 同轴纳米线光伏（PV）器件的性能。器件工作过程中，压电光电子学可以调控电子-空穴对的产生，传输，分离/重组，从而使得太阳电池器件的性能提高 70%。这种增强型柔性太阳能电池在自供电技术中具有极大的应用前景。

根据前期压电效应的理论工作，Zhang 等人提出以理想的 PN 结作为理解压电太阳能电池独特性质的一个例子。施加了外部应力时压电半导体材料有两种典型效应：压阻效应和压电效应。压阻效应主要是体积效应，它对半导体中压电极化的极性反转不敏感，因此它可以真正地被认为是半导体材料的电阻变化，对接触特性几乎没有影响。尽管带隙的变化会影响太阳能电池的饱和电流密度和开路电压，但带隙的变化与器件接触处产生的压电电荷的正负无关。第二个效应是压电效应，这种效应涉及了接触区产生的压电电荷导致的晶体内压电势与材料极化方向间的依赖关系。实验表明，在 P3HT/ZnO 太阳能电池上的开路电压对 ZnO 微米线的极化取向具有很强的依赖性，这表明了压电光电子学效应在一定程度上可以调制太阳能电池输出。器件的开路电压和最大输出功率对施加到 ZnO 的应变大小非常敏感，而短路电流密度则不然。因此，假定 PN 结纳米/微米级太阳能电

池的光电流密度（短路电流密度）与外部应变无关，并忽略 P 型和 N 型材料之间的带隙的不同。理论上，短路电流密度是由太阳辐射激发过量载流子引起的，为简单起见，模型假设电子和空穴产生速率 G_n 和 G_p 为常数，即：

$$G_n = G_p = \frac{J_{solar}}{q(L_n + L_p)} \quad (1.10)$$

其中， J_{solar} 是短路电流密度， L_n 和 L_p 分别表示电子和空穴的扩散长度。假设没有辐射过程发生，这意味着在模型中没有光子发射。在之前的工作中，压电 PN 结模型是为了使用 Shockley 理论理解压电半导体物理而开发的。压电电荷调制下的 PN 结中的电流密度也已经得到。考虑存在光电流密度 J_{solar} 的情况下使用一维压电 PN 结模型，通过在简化条件下求解压电理论的基本方程，可以得到理想 PN 结压电太阳能电池的总电流密度：

$$J = J_{pn} \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] - J_{solar} \quad (1.11)$$

$$J_{pn} \equiv \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} + \frac{qD_n n_{p0}}{L_n} \quad (1.12)$$

其中， J_{pn} 为饱和电流密度， D_p 和 D_n 分别为电子和空穴扩散系数， p_{n0} 和 n_{p0} 分别为热平衡下 N 型半导体中的空穴密度和 P 型半导体中的电子浓度。在 ZnO 作为 N 型材料，聚合物材料作为 P 型材料的有机太阳能电池器件中，ZnO 微/纳米线具有非常高的 N 型电导率。所以，模型假定 P 型半导体侧为掺杂浓度是 N_A 的突变结，也就是说，PN 结内部， $J_{pn} \approx \frac{qD_p n_{p0}}{L_n}$ ，其中， $n_{p0} = n_i \exp(-\frac{E_i - E_F}{kT})$ ， n_i 是本征载流子浓度， E_i 是本征费米能级。根据前期压电电子学的理论工作，总电流密度可以用下式表示：

$$J = J_{pn0} \exp\left(-\frac{q^2 \rho_{piezo} W_{piezo}^2}{2\varepsilon_s kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] - J_{solar} \quad (1.13)$$

$$J_{pn} = J_{pn0} \exp\left(-\frac{q^2 \rho_{piezo} W_{piezo}^2}{2\varepsilon_s kT}\right) \quad (1.14)$$

其中，无外加应变下的费米能级和饱和电流密度分别用 E_{F0} 和 J_{pn0} 表示，而 J_{pn0} 可以表示为 $J_{pn0} = \frac{qD_n n_{p0}}{L_n} \exp(-\frac{E_i - E_F}{kT})$ 。

对于压电太阳能电池，方程 (1.13) 和 (1.14) 表明，饱和电流密度 J_{pn} 随着 PN 结界面处的压电电荷呈指数下降。必须指出的是，方程 (1.14) 的指数函数内部

的项与我们以前的压电 PN 结相比具有负号。半导体物理学的机理是饱和电流密度 J_{pn} 取决于两个部分：N 型半导体中的热平衡空穴浓度 p_{n0} 和 P 型半导体中的热平衡电子浓度 n_{p0} 。从公式 (1.12) 可以直接得到两个近似情况：第一种情况是 $n_{p0} \gg p_{n0}$ ，这意味着 P 型半导体中的热平衡电子浓度 n_{p0} 主导电流特性。这种情况对应于压电太阳能电池模型。第二种情况是 $p_{n0} \gg n_{p0}$ ，这意味着 n 型半导体中的热平衡空穴浓度 p_{n0} 主导电流特性。这个情况已经在之前关于压电 PN 结太阳能电池的研究中阐明。至于模型中的负应变（压缩应变）情况，正压电电荷吸引电子的同时排斥空穴。相应地，对于正应变（拉伸应变）情况，负压电电子吸引空穴的同时排斥电子。正负压电电荷之间的差异导致两种情况的相反效果，这对应于公式 (1.14) 中的指数函数中的符号反转。根据等式 (1.13) 和 (1.14)，令 $J = 0$ ，则压电太阳能电池的开路电压可以表示为：

$$V_{oc} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{J_{solar}}{J_{pn}} + 1\right) \quad (1.15)$$

对于传统的太阳能电池，有 $J_{solar} \gg J_{pn}$ ，这时候开路电压可以近似写成：

$$V_{oc} \approx \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{J_{solar}}{J_{pn}}\right) = \frac{kT}{q} \left\{ \ln\left(\frac{J_{solar}}{J_{pn}}\right) + \frac{q^2 \rho_{piezo} W_{piezo}^2}{2\varepsilon_s kT} \right\} \quad (1.16)$$

公式 (1.16) 将开路电压表示为压电电荷的函数。开路电压不仅可以通过改变应变的大小调节，而且可以通过应变的符号（拉伸与压缩）来有效地调整或控制[46]。尽管此模型是基于二维纳米/微米模型给出了上述结果，但是压电光电子学的机理同样适用于块体和薄膜太阳能电池。

基于以上理论，Hu 等人研制了压电光电子学增强的 ZnO 微米线/钙钛矿异质结构的柔性光伏电池[56]，器件的基本结构如图 1.10 (a) 所示，ZnO 微米线被两端固定在柔性聚苯乙烯(PS)基片上，一端用银胶固定并作为光伏电池的正极；另一端首先用的是钙钛矿 ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) 薄膜，然后在钙钛矿薄膜上覆盖染料敏化太阳能电池材料 (spiro-MeOTAD)，最后再用银胶封住并作为光伏电池的负极。整个器件被环氧树脂封装，便于维持器件的稳定性和保持良好的性能。实验中用到的 ZnO 微米线是基于气-液-固 (VLS) 机制的催化反应生长法生长出来的，图 1.10 (b) 是 ZnO 线的 SEM 图，从图中可以看出，单根 ZnO 线的直径大约 4

μm ，长度超过 $100\mu\text{m}$ 。单根 ZnO 线的选区电子衍射图如图 1.10 (c) 所示，插图是对应的电子衍射图案，显然，生长得到的 ZnO 是单晶，并且其生长方向是沿着 c 轴方向。

Hu 等人为了系统研究压电效应对 ZnO 微米线/钙钛矿异质结构的柔性光伏电池性能的调制作用，利用在三轴位移台给样品施加连续的外加应力，器件在外力的作用下向两个方向弯曲，压缩应变和拉伸应变就被施加到器件结构中。器件的 I-V 特性对外加应变的依赖关系如图 1.10 (d1) (d2) 所示，可以看到，器件的开路电压和短路电流都随压应变的增加而增加，随张应变的增加而减小。为了清楚地观察到开路电压和短路电流对应变的依赖性，Hu 等人将 V_{oc} 和 I_{sc} 在不同应变下得到的数值单独提取出来并绘制曲线，如图 1.10 (e1) (e2) 所示，曲线大致成线性。具体地， I_{sc} 从无压缩应变时的 0.59 V 增加到 0.8% 压缩应变下的 0.74% ，增加了 25% ，而 I_{sc} 相应增加了将近 700% ；在压缩应变下， I_{sc} 从 0.73 V 被大小为 0.71% 的张应变调制为 0.7 V ， I_{sc} 衰减为原来的 71% 。类似地，填充因子 FF 和太阳电池转换效率随外加应变的变化分别在图 1.10 (f1) (f2) 给出，应变对填充因子的影响不大；相应于压缩应变从 0% 增加到 0.8% ，功率转换效率从 0.0216% 增加到 0.298% ，转化效率提高了约 1280% 。

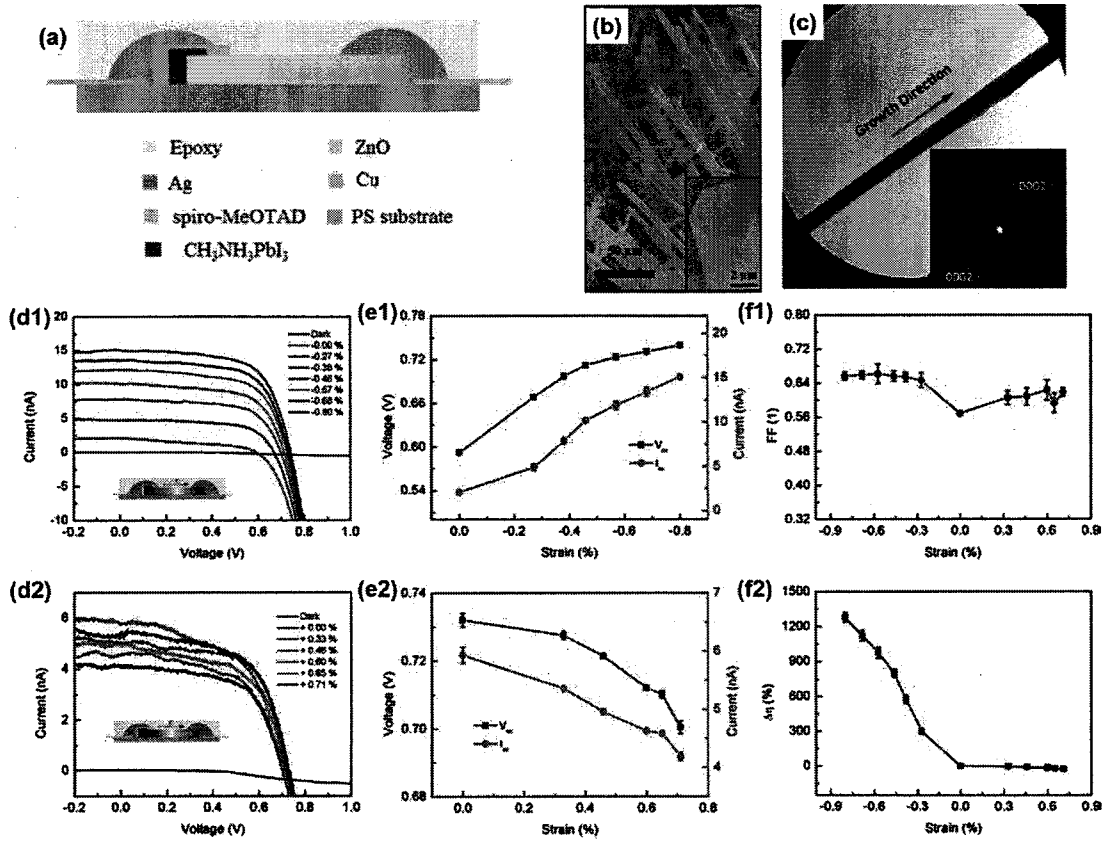


图 1.10 (a) 氧化锌/钙钛矿太阳能电池器件示意图; (b) 生长得到的氧化锌纳米线的 SEM 图; (c) 氧化锌纳米线的选区电子衍射图; (d1, d2) 器件的 I-V 曲线, (d1) 和 (d2) 分别对应压缩应变和拉伸应变; (e1, e2) 分别为压缩应变下和拉伸应变下开路电压、短路电流对应变的依赖关系, (f1, f2) 分别为压缩应变下和拉伸应变下填充因子对应变的依赖关系[56]。

Figure 1.10 (a) Schematic of a ZnO/perovskite solar cell. (b) SEM of the ZnO NWs; Inset: enlarged SEM image of a single ZnO NW. (c) The shadow image of the ZnO NW in the SAED pattern of ZnO NW. (d1, d2) I-V curves of the device under different compressive strain (d1), and under different tensile strain (d2). (e1, e2) Dependence of the V_{OC} and the J_{SC} under compressive strain (e1), and under tensile strain (e2). (f1, f2) Dependence of the FF (f1), and $\Delta\eta$ change (f2) on the strains[56].

另外, Zhu 等人设计了基于 N-ZnO/P-SnS 核-壳纳米线阵列的压电光电子学增强的大规模柔性光伏器件[57]。SnS 具有 4.0 eV 的电子亲和势, 具有 1.3 eV 的直接带隙, 并且其光吸收系数高达 10^4 cm^{-1} 。由于 SnS 容易形成受体 Sn 空位缺陷, 所以可以测到其具有 10^{15} - 10^{18} cm^{-3} 的范围内的 P 型电导率, 这使得它成为良好的壳材料用于核-壳式太阳能电池。利用 ZnO 纳米线阵列的压电势作为驱动力, 通过改变 ZnO/SnS 异质结的能带结构来有效地促进光生载流子分离和传输。这

项研究显示了压电光电子学在高性能大规模可弯曲柔性太阳能电池中的潜在应用，并进一步证实了压电太阳能电池的基本理论。

所设计的太阳电池器件的结构如图 1.11 (a) 所示，器件是在 ITO 涂覆的 PET 衬底上生长的 N-ZnO/P-SnS 核-壳纳米线阵列，c 轴的正方向是自下而上，这就构成了一个 PN 结太阳能电池，图 1.11 (b) (c) 分别为合成的 ZnO 纳米线阵列的 SEM 图和 ZnO/SnS 异质结纳米线阵列的 SEM 图，可以看出，纳米线阵列排列整齐，单根纳米线与基底垂直并沿 c 轴生长。为了研究压电光电子学对 N-ZnO/P-SnS 核-壳纳米线阵列太阳电池的影响，Zhu 等人研究了太阳电池的 J-V 特性对外加应变的依赖关系。外加应变是通过三轴位移台施加在 PET 衬底上的，外加应变的范围在 -0.88% - 0.88%。从图 1.11 (d) 中可以看出，开路电压对外部应变的变化比短路电流敏感，另外，对样品施加同样大小的拉伸应变和压缩应变时，太阳能电池的效率的改变量不同，如图 1.11 (e)。具体来说，样品不受应变时，太阳能电池效率为 1.2%，当样品受到压缩应变时，太阳能电池效率增加，而当样品受到拉伸应变时，太阳能电池效率减小，且压缩应变对效率的调控作用更强。图 1.11 (f) (g) 给出的是太阳电池的具体参数对外加应变的依赖性，开路电压和短路电流随应变变化的趋势与图 1.11 (e) 中几乎一致，而填充因子稳定在 0.48 附近，这也在一定程度上说明外加应力对太阳电池本身影响不大，应力撤销后，器件仍能正常工作，这在实际应用中具有十分重要的意义。同时，Zhu 的实验设计也证明了 N-ZnO/P-SnS 核-壳纳米线阵列太阳电池的性能可以通过外加应力/应变调节。

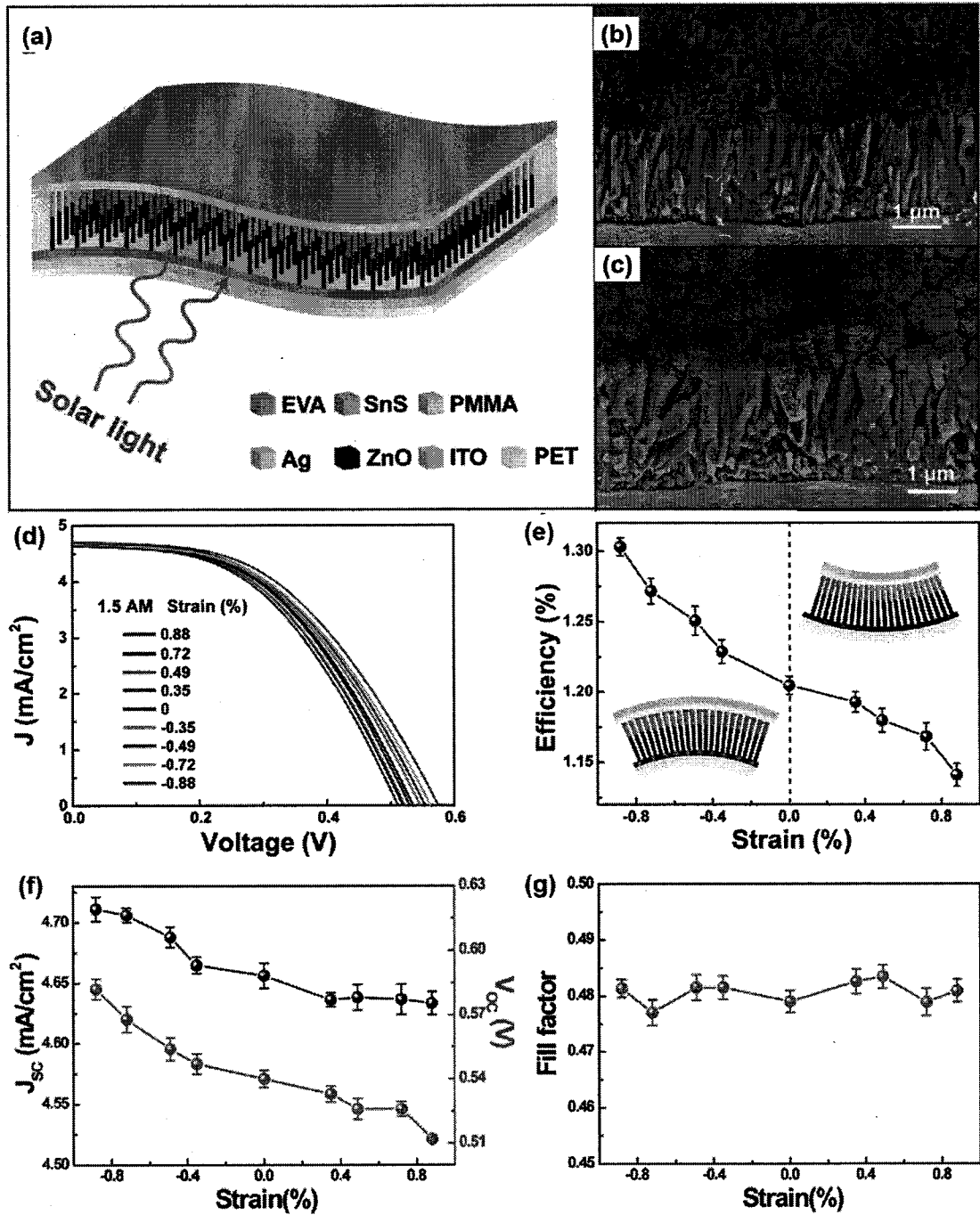


图 1.11 (a) 基于 n-ZnO/p-SnS 核壳层 NW 阵列的刚合成柔性太阳能电池的示意图; (b) 合成的 ZnO 纳米线阵列的 SEM 图像; (c) n-ZnO/p-SnS 核壳结构纳米线阵列的 SEM 图; (d) 太阳能电池在不同弯曲应变和 AM1.5G 照射下的 J-V 特性; (e) 太阳能转换效率对弯曲应变的依赖关系; (f) 电流密度和开路电压对弯曲应变的依赖性; (g) 填充因子对弯曲应变的依赖性[57]。

Figure 1.11 (a) The schematic diagram of the flexible n-ZnO/p-SnS core-shell NW array solar cell. (b) SEM image of the as-synthesized ZnO NW array. (c) SEM image of the n-ZnO/p-SnS core-shell NW array. (d) J-V characteristics of the solar cell under 1.5 AM illumination for various strain levels. (e) Efficiency (%) versus Strain (%). (f) Short-circuit current density (J_{sc}) and open-circuit voltage (V_{oc}) versus Strain (%). (g) Fill factor versus Strain (%).

shell NW array. (d) J-V characteristics of the solar cell under different bending strains at AM 1.5G illumination. (e) Strain dependence of the solar energy conversion efficiency. (f) Strain dependence the J_{SC} and the V_{OC} . (g) Bending strain dependence of the FF[57].

压电光电子学效应在量子点太阳电池领域也取得了一定的成果, Shi 等人基于 ZnO/PbS 异质结量子点太阳能电池 (QDSC) 进行了一系列研究[58], 太阳电池的光电转换效率在压电效应的调制下提高, 这对于光伏器件的研究非常有利。器件的基本结构如图 1.12 (a) 所示, 太阳电池器件是在 PET 基底上制作的, ITO 层和 Au 分别作为器件的两个电极。研究人员首先测试了器件在不同光照强度下的 I-V 曲线, 如图 1.12 (b) 所示。ZnO/PbS QDSCs 在外力作用下的性能变化被用于研究压电光电子学效应对 QDSCs 的影响, 如图 1.12 (c) 所示, 在无光照情况下, 太阳电池的在反偏条件下的暗电流密度约为 100 nA/cm^2 。为了最大程度地体现压电效应的影响, 并避免不必要的缺陷或表面状态的屏蔽效应, 首先在非常低的光强下表征 QDSCs 的应力响应特性。光强为 0.0047 mW/cm^2 时, 器件的短路电流密度与应变的函数关系呈现为线性, 开路电压的变化不是特别大。图 1.12 (d) 给出的是太阳能转换效率随应变的函数关系, 应变每变化 0.01% , 效率就相应变化 1.1% 。另外, 研究人员在 25 mW/cm^2 的光照强度下对器件进行了应变测试, 短路电流密度和转换效率随应变的变化关系表现出了相同的趋势, 但是每 0.01% 的应变变化量对应的短路电流密度和效率变化分别为 0.51% 和 0.55% 。这一结果表明, 来自捕获的光解电荷的显著屏蔽效应可以减弱压电效应对太阳电池的调制能力, 从而降低光伏器件性能变化的程度。这一研究为改善 QDSCs 的光伏效率提供了新的见解, 并通过引入压电效应揭示了异质结器件的电输运性质。

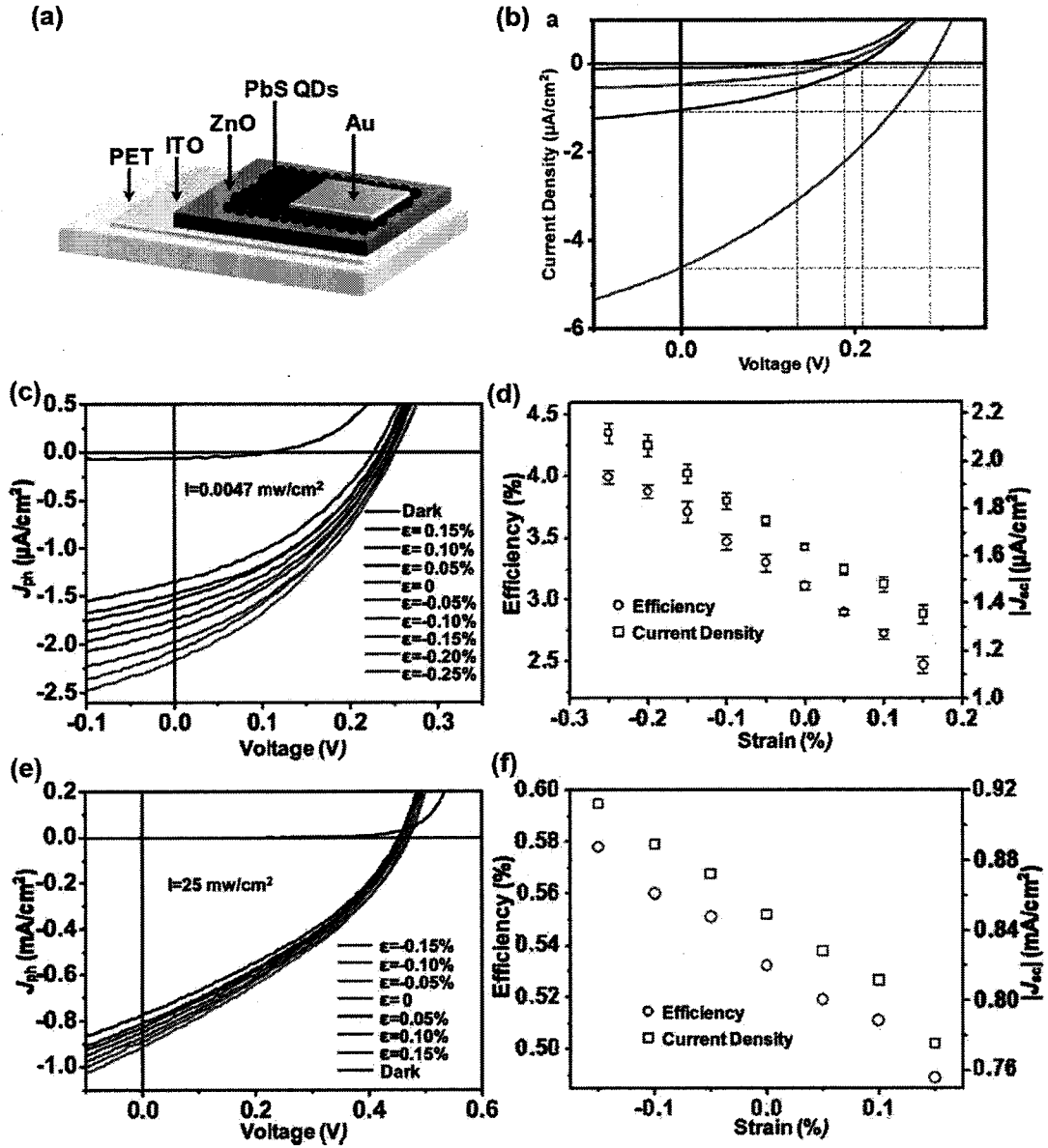


图 1.12 (a) 耗尽的异质结量子点太阳能电池的示意图；(b) 单个量子点太阳电池在不同光照强度下的 J-V 特性曲线；(c) 在不同应变下 0.0047 mW/cm^2 照明下采集的 QDSC 的 J-V 特性；(d) QDSC 效率和短路电流密度作为应变函数的关系曲线；当 QDSC 在 25 mW/cm^2 光强度下测量时 J-V 特性 (e) 和 J_{sc} (f) 随应变的变化[58]。

Figure 1.12 (a) Schematic of depleted heterojunction quantum dots solar cell. (b) J-V characteristics of a QDSC under different illumination intensities. (c) J-V characteristics of a QDSC collected at 0.0047 mW/cm^2 illumination under different strains. (d) Plot of QDSC efficiency and the short-circuit current density as a function of strain. (e,f) J – V characteristics (e) and J_{sc} -strain relationships (f), when the QDSC was measured under 25 mW/cm^2 light intensity[58].

1.3 本论文的研究内容

III 族氮化物作为新一代半导体材料备受关注，具有非常广阔的应用前景。与硅相比，III-氮化物是更好的电源和射频（RF）电子器件的替代品；基于 III 族氮化物的发光二极管彻底改变了固态照明行业；基于 III-氮化物的太阳能电池和热电发电机支持可持续的能源进步。压电电子学和压电光电子学经过十几年的发展，基于纳米线的压电电子学已经在传感器、柔性电子器件等诸多领域得到了广泛应用。本章的前几小节已经详细介绍了压电电子学和压电光电子学在各种电子、光电子器件中的应用，并且已经开始作用于氮化镓基的器件中。本文基于 III-氮化物材料的特性，分别研究了压电效应在氮化镓基电力电子器件、LED、太阳能电池器件中的应用，并预测了在各个领域中的应用。

本论文的主体主要分为以下三部分：

1 压电电子学效应调制 AlGa_N/Ga_N 高电子迁移率晶体管

压电效应是利用应变诱导的压电极化电荷来调整通过界面/异质结处的载流子传输。在这一部分中，主要研究了压电电子学效应对 AlGa_N/Ga_N 高电子迁移率晶体管的调制作用。介绍了 Ga_N 基 HEMT 器件的制备方法和测试手段，通过一维薛定谔方程和泊松方程的自洽数值计算模型对 Ga_N 基材料的极化效应和 AlGa_N/Ga_N 异质结构中 2DEG 的产生机理进行了研究；考虑非线性压电效应[59]，对器件的电流-电压特性进行建模。本研究证明了压电极化效应与二维电子气形成之间的因果关系，为提高器件性能提供了可调解决方案。压电电子学效应调制的 HEMT 在人机界面和电力系统安全控制中具有潜在的应用价值。

2 压电光电子学在 LED 可见光通讯中的应用

在这一部分的研究内容中，设计并研究了基于 InGa_N/Ga_N MQW 纳米柱的压电光电子学效应调制的双通道可见光通信（PVLC）系统。采用应力编码方式，将不同施加力下的光致发光（PL）强度输出定义为逻辑电平，实现实时数据传输。这种新的编码调制模式也有助于避免 LED 亮/灭的闪烁，以减少对人眼睛的副作用，对照明影响较小。此外，来自 InGa_N/Ga_N 纳米柱的双波长发射有效地消除

了源自干涉光的干扰，同时降低了系统的误码率。这是首次将压电光子效应应用于可见光通信系统，该系统提供了一种新颖、安全、低成本、有效和节能的通信方法。

3 压电光电子学效应增强 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池

我们提出了压电光电子学效应增强的 InGaN/GaN MQWs 太阳能电池，通过拉曼光谱分析得出了施加在样品内部的应变的实际值，并展示了 InGaN/GaN 多量子阱 (MQWs) 太阳能电池的短路电流密度和转换效率在外部应力调制下的变化。在外部应力作用下，太阳电池的短路电流从 1.05 mA/cm^2 增加到 1.17 mA/cm^2 ，最大转换效率由 1.12% 提高到 1.24%，相对提高了 11%。此外，我们建立了一个自洽的数值模型来说明压电光电子学效应对 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池中的调制作用，并得到了许多重要的结论。这项研究不仅在理论上和实验上证明了第一个压电光电子学效应调制的量子光伏器件，而且为在当前的能源革命中最大限度地利用太阳能提供了很大的希望。

第二章 压电电子学效应调制 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管

2.1 引言

GaN 基 HEMT 中, AlGaIn/GaN 界面的二维电子气是实现高速传输的主要载流子, 通常被认为与 AlGaIn 层的压电极化和自发极化有关。理解和控制异质结界面的载流子的传输行为, 对于优化器件性能是非常重要的。压电效应是王中林教授首先提出的, 它是利用外部应力引起的压电极化电场作为栅极电压, 从而控制界面处的载流子传输[42-45, 60-63]。基于这种效应, 各种新颖的电子器件已经被制备出来, 对科学和技术应用有重大的影响[53, 64-66]。许多论文已经详细介绍了由外部机械应变/应力调谐的压电器件[67], 包括压电增强光电探测器[68], 化学传感器响应度增强[69-70], 振动传感器输出优化以及压电效应调制异质结构微米线[41, 71]等等。以前的研究大多集中在新型化学合成纳米结构, 很少考虑复杂和高度集成的微电子器件。

随着研究人员对氮化镓材料中压电极化与半导体性能的耦合的研究, 氮化镓基 HEMT 器件的性能极有可能通过压电效应的调制作用得到改善, 这将在机电传感、驱动和机械能量采集方面具有很大的应用前景。在之前本领域的工作中, 通过结构设计减小电流崩塌的几率和降低器件的自热, 是对 AlGaIn/GaN HEMT 的性能进行调优/控制的两种有效措施[72]。然而, 很少有报道研究压电效应是如何影响 HEMT 的器件性能的。

在本章节中, 我们主要研究了压电电子学效应对 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管的调制作用。[73]。首先介绍了 GaN 基 HEMT 器件的制备方法和测试手段, 通过一维薛定谔方程和泊松方程的自洽数值计算模型对 GaN 基材料的极化效应和 AlGaIn/GaN 异质结构中 2DEG 的产生机理进行了研究; 考虑非线性压电效应[59], 对器件的电流-电压特性进行建模。这种实验设计和理论建模相结合的方法加深了我们对压电效应基本原理的理解, 为器件的设计和优化提供了有效的

指导。本章节的研究内容也为实现人机界面的实现提供了一种新的途径。

2.2 AlGaIn/GaN HEMT 的制备方法和测试手段

2.2.1 HEMT 器件的制备方法

AlGaIn/GaN 异质结构是通过金属有机化学气相沉积(MOCVD)生长在(0001)面的蓝宝石衬底上的。材料结构包括 20 nm 氮化镓缓冲层, 2 μm C 掺杂的 GaN 和 100 nm 厚的本征氮化镓, 最上面是 Al 组分为 25%的 AlGaIn 层, 如图 2.1(a)所示。在对样品进行清洗后, 用紫外光刻法在 AlGaIn 表面用负光刻胶 SU-9I 制作了一个凸形, Ti/Al/Ni/Au (200/1000/450/550 Å)是通过电子束蒸发沉积在样品表面的, 然后在 850° C 在氮气环境中退火 30 秒形成欧姆接触[74]。为了形成一个肖特基接触的栅极, 采用电子束蒸发 Ni/Au (800/500 Å)金属多层结构, 这是制备 HEMT 表面电极一个普遍的方案。图 2.1(b)是在室温下 AlGaIn/GaN 异质结构的欧姆接触曲线和肖特基接触曲线。图 2.1(c)和(d)分别是源极/漏极的截面图和栅极的截面 SEM 图。采用 Ti/Al/Ti/Au 合金薄膜作为源电极, 总厚度为 220 nm, Ni/Au 层为漏极, 厚度约为 130 nm, 与实验设计的厚度一致。图 2.1(e)是 HEMT 的部分顶部视图的图像, 可以看出, 图形清晰, 图形质量满足测试需求。

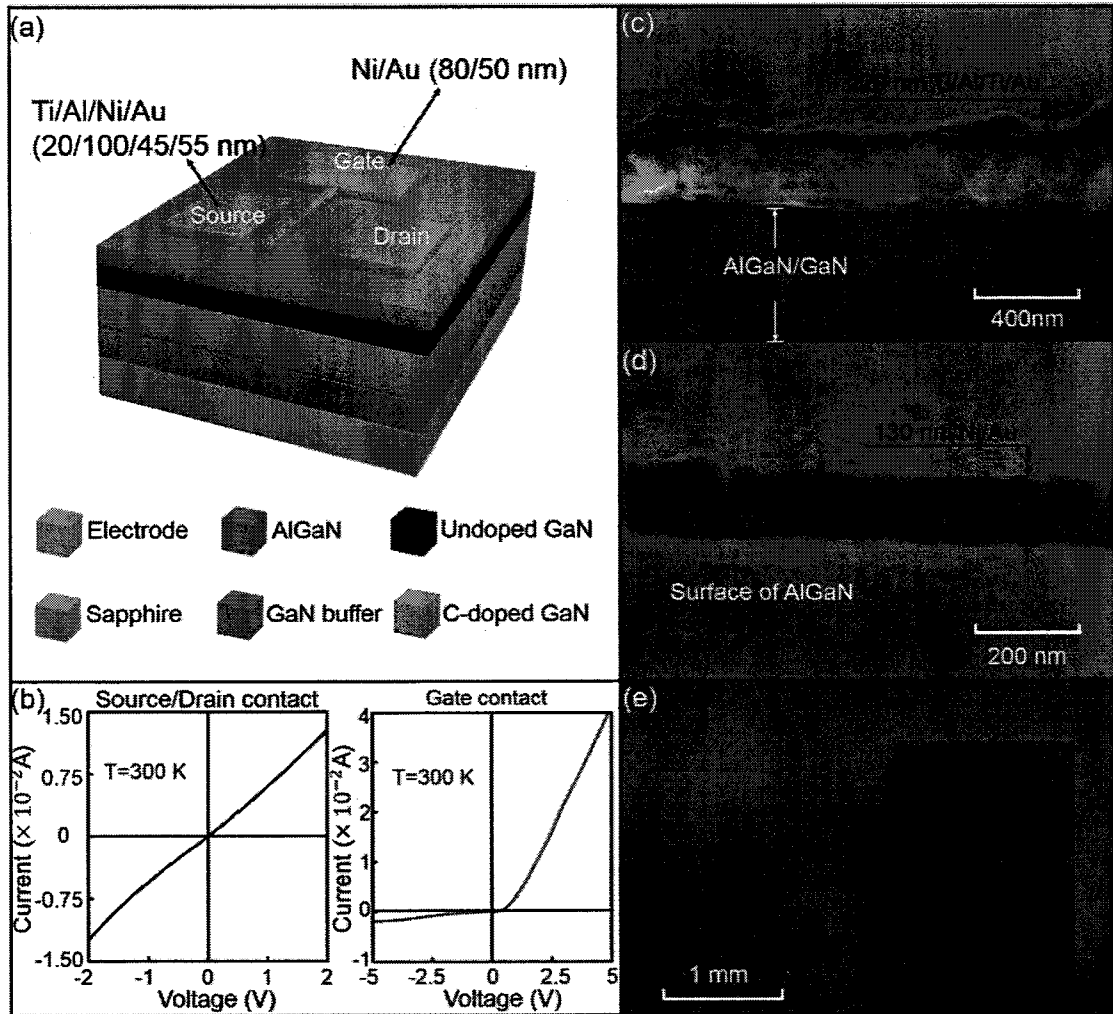


图 2.1 (a) AlGaN/GaN HEMT 器件结构示意图；(b)在室温下 AlGaN/GaN 异质结构的欧姆接触曲线和肖特基接触曲线；(c)Ti/Al/Ni/Au 欧姆接触电极的截面图；(d)Ni/Au 肖特基接触电极的截面图；(e)HEMT 器件的顶视图。

Figure 2.1 (a) Schematic diagram of the AlGaN/GaN HEMT device. (b) Ohmic contact curve and schottky contact curve of the device based on AlGaN/GaN heterostructure at 300 K. (c) Partial cross-sectional view of the ohmic contact. (d) Partial cross-sectional view of the schottky contact. (e) Partial top view of the HEMT.

2.2.2 HEMT 器件的测试方法

用 Keithley 4200 型半导体表征系统与探针台相结合，测量了直流 $I_{DS} - V_{DS}$ 特性。在特定的栅极电压下，通过扫描施加在漏极的电压测试源漏之间的电流曲线。通过改变栅极电压，可以测试得到器件的电流-电压曲线受栅极电压的调控

情况。低温下器件性能的测量是通过 PPMS 将样品置于低温环境中，用 Keithley 4200 测试器件的电学性能。

2.3 AlGaIn/GaN HEMT 器件的性能与分析

2.3.1 AlGaIn/GaN HEMT 器件的直流性能

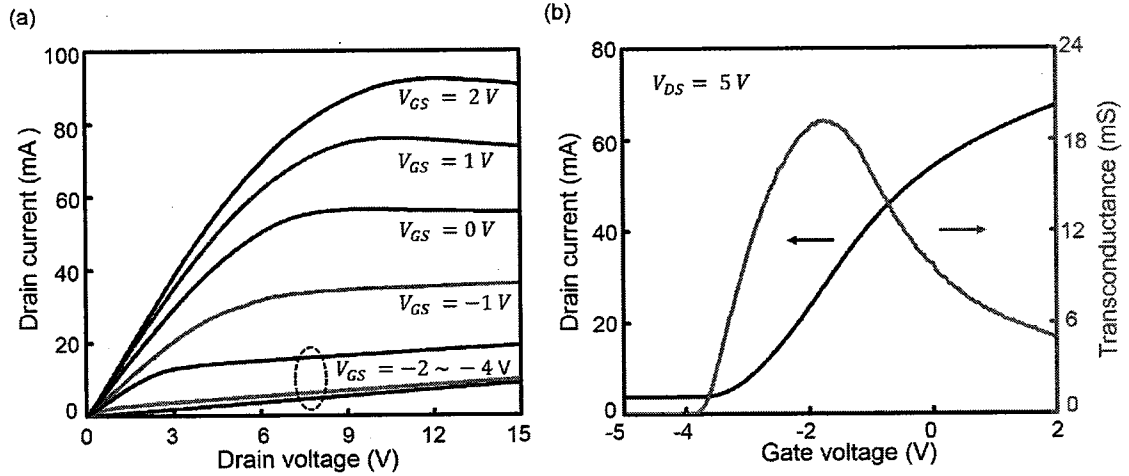


图 2.2 (a)测量得到的 AlGaIn/GaN HEMT 的电流-电压特征；(b)黑色的曲线表示器件的直流特性曲线，红色的曲线对应在 $V_{DS} = 5$ V 时的传输特性曲线。

Figure 2.2 (a) Measured $I_{DS} - V_{DS}$ characteristics of the AlGaIn/GaN HEMT, and the V_{GS} from -4 V to 2 V, step by 1 V. (b) DC characteristics of HEMT (Black), and the transfer characteristic at $V_{DS} = 5$ V (Red).

对于 HMET 器件而言，其直流特性包括输出特性和转移特性。测量结果如图 2.2 所示。图 2.2 (a) 展示的是从 -4 V 到 2 V 的不同栅极电压下的电流-电压特性曲线，步长为 1 V。可以看出，当源漏电压比较低时，电流-电压特性有一个良好的线性区域，然后漏极电流随电压增加接近饱和，这与经典的耗尽型的 MIS-HFET 相似[13, 75]。栅极是肖特基接触，栅极电压用于控制沟道中二维电子气 (2DEG) 的传输，从而改变饱和状态下的源漏电流。在 $V_{GS} = 2$ V 时，器件的最大饱和电流为 92 mA，在最大电流器件的膝点电压约为 11 V。HEMT 器件的阈值电压约为 -3.5 V。器件的转移特性曲线如图 2.2 (b) 所示，最大跨导为 19 mS。

当栅极电压从 -3.5 V 增加到 2 V 时, GaN 中的导电沟道变宽, 并且饱和漏极电流以准线性关系从 4 mA 显著增加到 67 mA 。

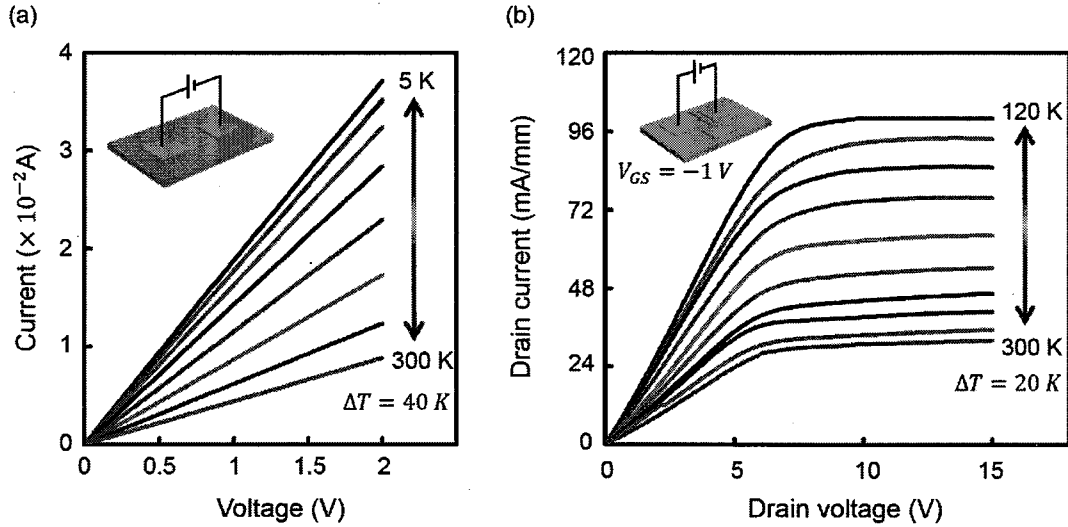


图 2.3 AlGaIn/GaN 异质结器件对温度的响应特性。(a) 在不同温度条件下两端器件的 $I-V$ 特性, 插图是器件的示意图; (b) 在 120 K 至 300 K 温度范围内, $V_{GS} = -1\text{ V}$ 时 HEMT 的 $I_{DS}-V_{DS}$ 特性。

Figure 2.3 Temperature dependence of the AlGaIn/GaN heterostructure devices. (a) $I-V$ characteristics of two-terminal device under each temperature condition, the inset is the schematic illustration of the device. (b) $I_{DS}-V_{DS}$ characteristics of the HEMT at $V_{GS} = -1\text{ V}$ at temperature ranging from 120 K to 300 K .

随着科学技术的发展, HEMT 器件在低温下的应用已经成为了未来器件发展的一个重要方向。所以, 我们对除了测试器件在常温下的直流特性外, 也同时测试了器件在变温下尤其是低温下的各项性能。如图 2.3 所示, 我们首先使用 4200 半导体分析仪在 $T = 5\text{ K}$ 和 300 K 不同温度之间的温度下测量 AlGaIn/GaN 异质结构结构的电流-电压特性。随着温度的降低, 电流-电压曲线逐渐升高, 如图 2.3 (a) 所示, 足以证明在 850°C 退火的样品在所有温度下都是欧姆接触。从图 2.3 (b) 中可以看出, 在 -1 V 的栅极电压下, 随着温度下降, HEMT 的输出电流增加, 且在 120 K 下, 电流远远高于常温下的数值。HEMT 器件基本原理认为, 源漏间饱和电流的数值与沟道中 2DEG 的浓度和电子的迁移率成正比。低温下, 界

面粗糙度和位错散射是主要的散射机制，而室温下电子与光学声子的相互作用限制了室温下电子漂移迁移率。因此低温下源漏饱和电流的增加是电子迁移率的提高引起的。

2.3.2 不同压缩应力下 AlGaIn/GaN HEMT 器件性能

第一章已经说明了 III-氮化物具有优异的压电极化特性和半导体特性，是作为压电电子学器件非常优异的材料。为了得到外加应力对 AlGaIn/GaN HEMT 器件性能的调制作用，我们将制备得到的 HEMT 器件用真空锁定在水平的样品台上，通过机械臂给 AlGaIn/GaN 异质结结构施加外部机械应变。如图 2.4 (a) 所示，所连接的应力计可以即时获得施加在样品上的应力的值。通过三维机械臂 Z 方向的螺旋，便可以在样品上施加压缩应变，并且应力计可以直接给出施加在样品上的应力值。当对样品施加一定的压缩应力时，大部分应变集中在 AlGaIn 层中产生。在静态力学平衡条件下，力能够穿透整个异质结结构，用有限元法计算可以得到 GaN 中的应变。

图 2.4 (b) 展示的是 $V_{GS} = -1\text{ V}$ 时，HEMT 的 $I_{DS} - V_{DS}$ 特性随外加应力的变化曲线。AlGaIn/GaN 界面施加压应力时，在器件中沿着 c 轴就会产生压缩应变，垂直于 c 轴方向相应的就会出现张应变。在栅极电压高于开启电压时，外部应力调制下器件的源极-漏极电流仍然表现出典型的 HFET 输运性质，包括准线性输运区域和非线性饱和电流区域。然而，随着外部应力从 0N 增加到 25N，源漏电流的绝对值增加，这时候外部应变可以作为控制载流子运输的“虚拟栅极”。通常，线性区域的电流呈线性是因为电子漂移速度随着漏极电压的增加而增加。在饱和区域，电子漂移速度逐渐达到电子饱和速度，电流逐渐饱和。因此，饱和电流由二维电子气浓度决定。

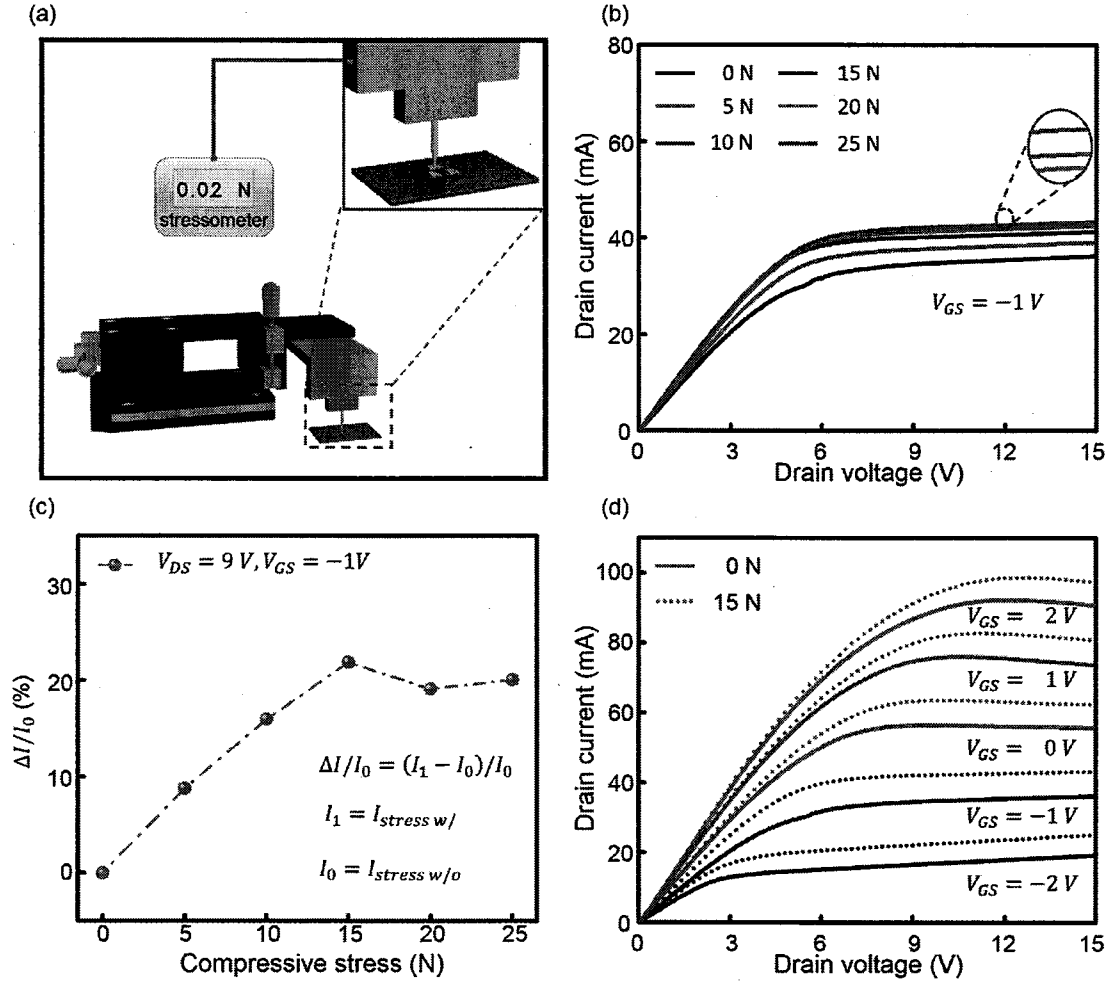


图 2.4 AlGaIn/GaN HEMT 在不同外加应力下的 $I_{DS} - V_{DS}$ 特性 (a) 实验原理示意图; (b) $V_{GS} = -1 V$ 时, HEMT 的 $I_{DS} - V_{DS}$ 特性随外加应力的变化曲线; (c) 室温下, $V_{DS} = 9 V$, $V_{GS} = -1 V$ 对应的电流值随与压应力的关系; (d) 在不同栅极电压下具有 15 N 应力(虚线)和没有应力(实线)的 AlGaIn/GaN HEMT 的 I-V 特性。

Figure 2.4 $I_{DS} - V_{DS}$ characteristics of the AlGaIn/GaN HEMT under different stress. (a) Schematic diagram of the experimental setup. (b) $I_{DS} - V_{DS}$ characteristics of the HEMT at $V_{GS} = -1 V$ under different stress. (c) At 300 K, the drain current at $V_{DS} = 9 V$, $V_{GS} = -1 V$ as a function of the stresses. (d) $I_{DS} - V_{DS}$ characteristics of the device with 15 N stress (dot line) and without stress (solid line) under different gate voltages.

为了更精确地理解外部应力对器件性能的调制作用, 图 2.4 (c) 绘出了在室温条件下 $V_{DS} = 9 V$, $V_{GS} = -1 V$ 时 I_{DS} 随外部应力的相对变化。我们将电流的相

对变化定义为 $\Delta I/I_0 = (I_1 - I_0)/I_0$, 这里 $I_0 = I_{stress\ w/o}$ 是无应力时的电流值, 而 $I_1 = I_{stress\ w}$ 指的是在不同外加应力时的电流值。从 0 N 到 15 N, 随着外部压应力的增加, 相对变化值迅速增加, 当外力超过 15 N 后, 该值逐渐饱和甚至略有下降。由于饱和电流和 2DEG 密度之间呈正相关, 因此, 我们可以推断 2DEG 密度随着外部应力呈对数函数变化。然而饱和区域的出现的饱和电流随应力轻微下降应该与晶格散射有关[76], 例如 2DEG 向 AlGaIn/GaN 界面的移动导致的界面粗糙度散射。图 2.4 (d) 中展示的是栅极电压从 -2 V 到 2 V, HEMT 器件在有无应力时的 I-V 特性曲线, 从图中可以看出, 在任何栅极偏压下都可观察到外部应力对饱和源漏电流增强的调制效应。在 $V_{DS} = 9\text{ V}$, $V_{GS} = -1\text{ V}$ 时, 饱和漏极电流的数值从 34.5 mA 增加到 42 mA, 增加了接近 21%。

2.4 AlGaIn/GaN 异质结构能带自洽计算模型

2.4.1 耦合原理机制的定性分析与解释

利用图 2.5 (a) 和 (b) 中所示的能量图, 我们提出了 AlGaIn/GaN 异质结构沿 c 轴方向有/无外部压应力时的物理机制。由于纤锌矿结构的 GaN 具有非中心对称的晶体结构, 在 AlGaIn/GaN 异质结中存在两种不同类型的本征极化: (i) 分别存在于 AlGaIn 和 GaN 中的自发极化 P_{sp}^{AlGaIn} 和 P_{sp}^{GaN} ; (ii) 存在于 AlGaIn 层中由于晶格失配引起的压电极化 (P_{lm}^{AlGaIn}) [77]。在 Ga 面的 HEMT 结构中, 由 P_{sp}^{AlGaIn} , P_{lm}^{AlGaIn} 和 P_{sp}^{GaN} 引起的电场将使得电子向 AlGaIn/GaN 异质界面的 GaN 中的三角形势阱靠近。当在器件的 -c 轴方向施加压缩应变时, AlGaIn (P_{sp}^{AlGaIn}) 和 GaN (P_{sp}^{GaN}) 中的由压电电子学产生的极化将从 Ga (或 Al) 原子指向沿着 -c 轴指向邻近的 N 原子。界面处垂直于 (0001) 面方向上的总的极化 P_{Tot} 由下式给出:

$$P_{Tot} = P_{sp} + P_{lm} + e_{33}\varepsilon_{\perp} + 2e_{31}\varepsilon_{\parallel} + e_{311}\varepsilon_{\parallel}^2 + e_{333}\varepsilon_{\perp}^2 + e_{313}\varepsilon_{\parallel}\varepsilon_{\perp} \quad (2.1)$$

其中, P_{sp} 是自发极化, P_{lm} 是晶格失配引起的压电极化, 而 e_{ijk} 是非线性压电系数, $\varepsilon_{\parallel}$ 和 $\varepsilon_{\perp}$ 分别是平行于 c 面和垂直于 c 面的外部应变。

如图 2.5 所示, 在外加压力应力下, 在 AlGaN 层的底部产生正压电电荷, 而在 GaN 的顶部相应的产生负压电电荷。然后在界面处就会有正的有效电荷积累, 这些正的压电电荷会使得界面处的能带向下弯曲, 界面处的三角形势阱会相应加深, 从而界面处 2DEG 浓度增加。

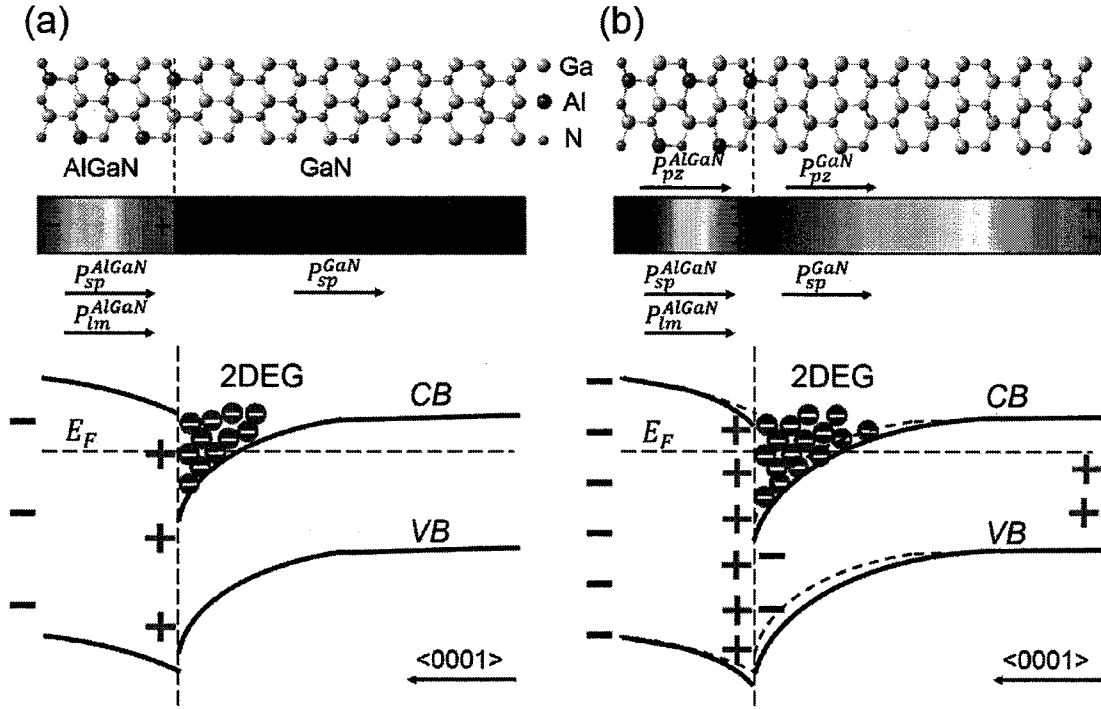


图 2.5 AlGaN/GaN 异质结构在沿 c 轴施加压力之前 (a) 和之后 (b) 的晶格结构、极化强度分布和能带示意图, 其中能带在界面处的弯曲由压电极化产生。

Figure 2.5 Schematic energy band diagram of AlGaN/GaN heterostructure (a) before and (b) after applying compressive stress along c-axis, where the bending at the interface is created by the piezoelectric polarization.

2.4.2 一维薛定谔方程和泊松方程的自洽数值分析方法

为了证明我们所提出的物理机制, 这里我们利用一维薛定谔方程和泊松方程的自洽数值分析方法[78-79]更进一步说明压电效应对 AlGaN/GaN 异质结处二维电子气的影响。

根据传统的压电理论, 氮化镓中的压电本构方程可写为:

$$\begin{cases} \sigma = c_E S - e^T E \\ D = e S + k E \end{cases} \quad (2.2)$$

其中, σ 是应力张量, c_E 是弹性张量, S 是机械应变, e^T 是压电张量, E 是电场, D 是电位移, k 是介电张量。

基于此理论, 我们使用 COMSOL 软件包计算不同压应力下器件结构的定量应变分布, 如图 2.6 所示。从应力场分布来看, 压电效应集中在机械臂施加应力的位置, 最大应力接近 0.18 GPa。由于沿着 GaN 材料的 c 轴的非对称性, 在 AlGaIn 和 GaN 的界面处产生压电电荷, 并且在这种外加应力下产生压电电势。

HEMT 是一种利用强烈局域在界面处的二维电子气来传输电荷的量子器件。在有效质量近似下, 在 AlGaIn/GaN 异质结生长方向的电子子带是静态薛定谔方程的解:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{m^*} \frac{d\psi_i(x)}{dx} \right] + [V(x) - E_i] \psi_i(x) = 0 \quad (2.3)$$

其中, $\hbar$ 是普朗克常数, m^* 与电子能量无关, 各向同性, 并且在 AlGaIn 和 GaN 之间的界面处会发生突变, 这里, GaN 和 AlN 中的电子有效质量数值我们在表格 2.1 中给出, $\psi_i(x)$ 是 c 轴方向第 i 个子能级的电子归一化波函数, E_i 是 c 轴方向第 i 个子能级的电子能量本征值, $V(x)$ 是电子波函数的势场, 由三部分组成, 如公式 (2.4) 所示:

$$V(x) = V_c(x) + V_h(x) + V_{xc}(x) \quad (2.4)$$

其中, $V_c(x)$ 表示与 AlGaIn/GaN 异质结处的导带偏移相关的阶跃函数形式的导带边缘电势, $V_h(x)$ 是波函数的哈特里势, $V_{xc}(x)$ 表示不包含在哈特里势中的多体相互作用的交换电势。

根据传统的半导体理论, 一维非线性泊松方程可写为:

$$\frac{d}{dx} \left[\varepsilon(x) \frac{dV_h(x)}{dx} \right] = -q\varphi(x) \quad (2.5)$$

其中, $\varepsilon(x)$ 是材料的介电常数, $V_h(x)$ 是波函数的哈特里势场, 是分布在材料体系中的移动和静止电荷间的静电相互作用的电场, q 是单位电荷的绝对值, 全部的电荷密度分布 $\varphi(x)$ 由下式给出:

$$\varphi(x) = \sum_{j=t,i,b} \sigma(x) \delta(x - x_i) + p(x) + N_D^+(x) - n(x) - N_A^- \quad (2.6)$$

其中, $\sigma(x)$ 是极化电荷的密度 (以电子电荷为单位), 与公式 (2.1) 所示的界面处总的极化强度 P_{Tot} 密切相关, $p(x)$ 和 $n(x)$ 分别为空穴的浓度和自由电子的浓度, $N_D^+(x)$ 是施主离子浓度, $N_A^-(x)$ 是受主离子浓度。对于单纯的 AlGaIn/GaN 异质结而言, 当表面区域处的费米能位于所述 AlGaIn 势垒的价带中时, 可以在 AlGaIn 的上边界之下诱导产生 P 沟道; 对于在 AlGaIn 上具有金属栅极的系统, 当在栅极和电子沟道之间施加偏置电压时, 可以在金属中感应出 P 沟道。

公式 (2.6) 中的施主离子浓度可以写为:

$$N_D^+(x) = N_D(x) f_D^+(x) \quad (2.7)$$

其中, $N_D(x)$ 表示施主杂质浓度, f_D^+ 表示电子占据简并度为 2 的施主能级 $E_D(x)$ 的几率,

$$f_D^+(x) = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp\left[\frac{E_D(x) - E_F}{k_B T}\right]} \quad (2.8)$$

其中, k_B 和 T 分别为玻尔兹曼常数和电子温度, E_F 是费米能级。在 AlGaIn 中, 我们已知 N 空位, Si 和 O 是作为施主杂质存在的, 所以, 我们假定对于任意 Al 组分而言, $E_D(x)$ 均取为比 AlGaIn 的导带能级低 0.2eV。相应的, 公式 (2.6) 中的受主离子浓度可以写为:

$$N_A^-(x) = N_A(x) f_A^-(x) \quad (2.9)$$

其中, $N_A(x)$ 表示受主杂质浓度, f_A^- 表示电子占据简并度为 4 的受主能级 $E_A(x)$ 的几率,

$$f_A^-(x) = \frac{1}{1 + 4 \exp\left[\frac{E_A(x) - E_F}{k_B T}\right]} \quad (2.10)$$

在 AlGaIn/GaN 单异质结中, GaN 缓冲层中受主态的电离或中和对缓冲区中的电势分布产生显著影响, 而 AlGaIn 层中的受主态在热力学平衡下不容易被中和。在本章节中, 我们假设受主杂质分布在 GaN 中, 并且 $E_A(x)$ 取比材料的导带低 3eV 的值。

为了满足电中性的条件，在模型计算的整个 AlGaIn/GaN 的异质结区间内必须满足：

$$\int_{x_t}^{x_p} \rho(x) dx = 0 \quad (2.11)$$

写成全部的电荷的和的形式，即：

$$\int_{x_t}^{x_p} [p(x) + N_D^+(x) - n(x) - N_A^-(x)] dx = 0 \quad (2.12)$$

考虑在 AlGaIn/GaN 异质结处存在一个二维电子气沟道， $n(x)$ 可以以下式给出：

$$n(x) = \sum_i n_i |\psi_i(x)|^2 \quad (2.13)$$

其中， n_i 是 c 轴方向第 i 个子能级的电子密度分布，具体由下式给出，

$$n_i = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right] \quad (2.14)$$

这里，

$$N_e = \int_{z_t}^{z_b} n(x) dx = \sum_i n_i \quad (2.15)$$

如之前公式 (2.7) - (2.10) 描述的那样，可以利用在边界处的费米级固定的两个边界条件以自洽的方式确定 N_e 。

公式 (2.4) 中的 $V_{xc}(x)$ 可以用密度泛函理论来表示。利用局域密度近似， $V_{xc}(x)$ 可以以参数化的形式表示：

$$V_{xc} = - \left[1 + \frac{0.7734 r_s}{21} \ln \left(1 + \frac{21}{r_s} \right) \right] \frac{2E_R}{\pi \alpha r_s} \quad (2.16)$$

这里， $\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$ ， r_s 是含有一个电子的球体的半径，如下式所示：

$$r_s = \left[\frac{4}{3} \pi a^3 n(x) \right]^{-1/3} \quad (2.17)$$

以有效波尔半径为单位，有效里德堡能量由下式给出，

$$E_R = \frac{e^2}{8\pi\kappa a^*} \quad (2.18)$$

随着电子密度的增加， $V_{xc}(x)$ 对电子子带状态和带隙的影响随之增加。

根据以上理论, 通过将应变耦合到 (2.5) 式的泊松方程中, 利用有限差分法求解泊松方程, 获得应力调制的电势分布, 然后利用此电势求解薛定谔方程, 获得电子波函数, 从而获得新的电荷分布。这个新的电荷分布反馈到泊松方程中, 直到泊松方程的解趋于收敛。利用这种差分方程求解有限差分方法, 得到了一系列应力下调制的能带、2DEG 浓度分布以及压电势分布。表格 2.1 给出了计算中所用到的各种参数。其中 AlGaIn 的各项参数通过 Vegard 定律得出:

$$A = x_1 A_1 + x_2 A_2 \quad (2.19)$$

A_1 和 A_2 分别为 AlN 和 GaN 的各项参数, x_1 和 x_2 分别为 AlN 和 GaN 的百分含量, A 为 AlGaIn 的晶格常数。

图 2.6 (a) 显示了没有外部压应力时沿着 c 轴方向的能带和载流子浓度的分布, 由于在纤锌矿结构中缺乏中心对称性, AlGaIn 薄膜和 GaN 薄膜沿 c 轴产生自发极化。而且, AlGaIn 和 GaN 之间的晶格失配会导致在 AlGaIn/GaN 界面处 AlGaIn 一侧和 GaN 一侧产生相反方向的压电极化, 从而在界面处累积极化电荷, 本例中为 $9.3 \times 10^{-3} \text{ C/m}^2$ 。在界面处形成一个三角形势阱。这个三角形很好地捕获了自由电子并限制了电子沿着 c 轴的运动以形成 2DEG。当在器件上施加外部压应力时, COMSOL 物理模拟显示在接触点感应出额外的压电场并感应到器件中, 如图 2.6 (b) - (c) 所示。将界面处的平均压电电荷放入泊松-薛定谔方程自洽模型中。计算结果表明, 附加压电极化能加深三角形势, 使得界面处价带的最低点从 -0.025 eV 降为 -0.053 eV 。这种势阱的降低会增加对自由电子的限制, 使通道中的二维电子气浓度从 0 N 时的 $0.92 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 增加到 15 N 时的 $1.19 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 提高了 29.3%, 二维电子气浓度与外部压力近似呈对数函数的关系。这将增强 HEMT 中的饱和源极-漏极电流, 从而器件性能得到改善。

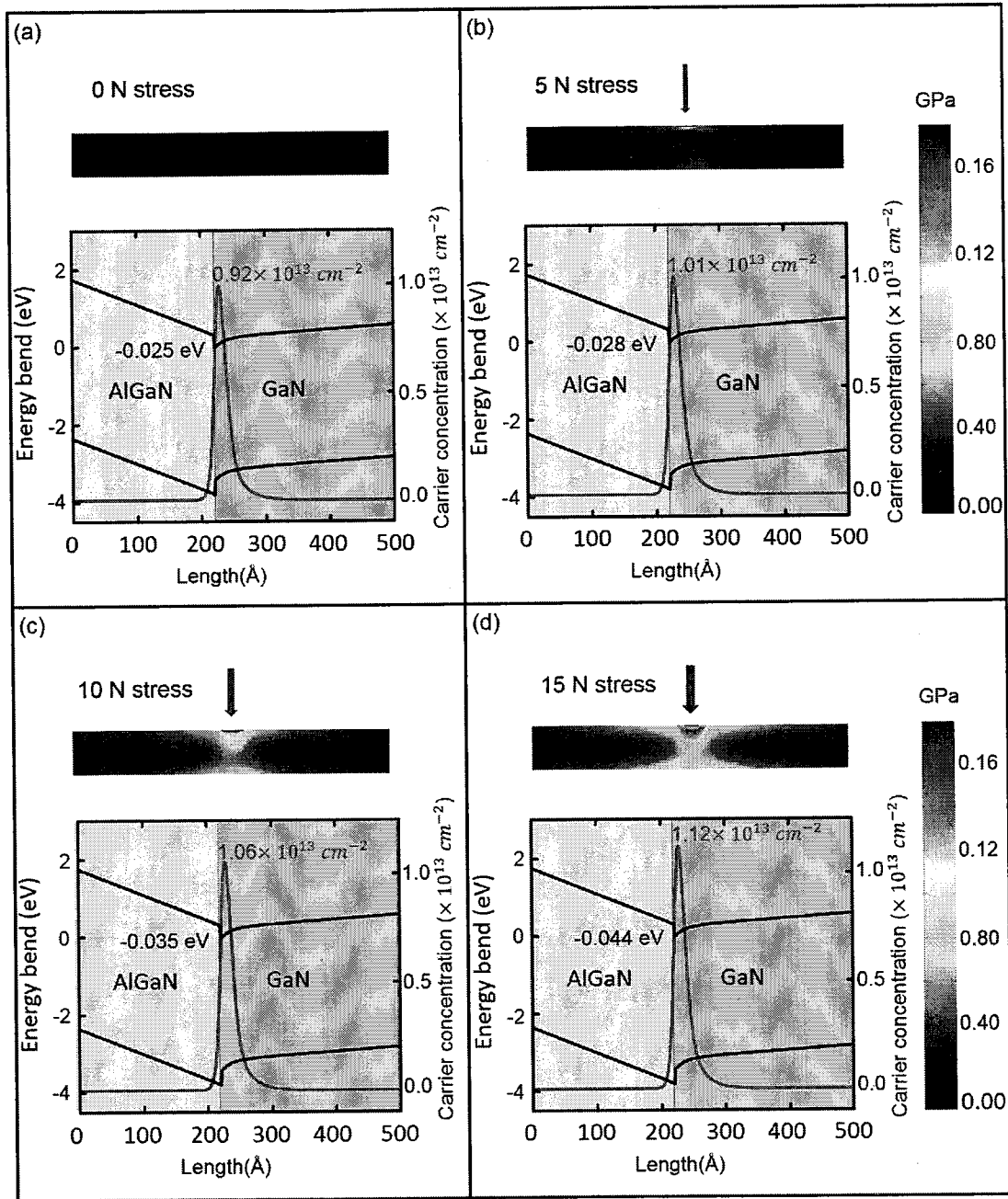


图 2.6 样品上施加不同的压缩应力: (a) 0 N; (b) 5 N; (c) 10 N; (d) 15 N; 时计算得到的 AlGaN/GaN 异质结构中的应变分布和相应的能带结构和载流子浓度分布。黑色的线对应 AlGaN/GaN 异质结构中的能带弯曲情况, 红线对应异质界面处的 2DEG 分布。

Figure 2.6 Calculated strain distribution (upper) and corresponding energy band structure and carrier concentration (lower) for the different applied strains: (a) 0 N; (b) 5 N; (c) 10 N; (d) 15 N. The dark lines refer to the energy bend in the AlGaN/GaN heterostructure. The red lines show the 2DEG distribution in the heterostructure.

表 2.1 纤锌矿结构 AlN 和 GaN 的物理参数

Table 2.1 Physical parameters of wurtzite structure AlN and GaN

参数	AlN	GaN	参考文献
晶格常数 a (nm)	0.311	0.319	[80]
晶格常数 c (nm)	0.498	0.519	[80]
室温下禁带宽度 E_g (eV)	6.25	3.510	[80]
电子有效质量 m_e	0.32	0.20	[80]
空穴有效质量 m_{hh}	3.53	1.56	[81]
相对介电常数	8.5	10.4	[81]
C_{11} (GPa)	396	390	[80]
C_{12} (GPa)	137	145	[80]
C_{13} (GPa)	108	106	[80]
C_{33} (GPa)	373	398	[80]
e_{31} (C/m ²)	-0.60	-0.49	[59]
e_{33} (C/m ²)	1.50	0.73	[59]
e_{311} (C/m ²)	5.850	6.185	[59]
e_{333} (C/m ²)	-10750	-8.090	[59]
e_{133} (C/m ²)	4.533	1.543	[59]
P_{sp} (C/m ²)	-0.081	-0.029	[59]

2.4.3 HEMT 器件 I-V 特性解析模型

我们已经根据自洽的薛定谔和泊松方程的耦合模型计算得到了 HEMT 器件沟道中的二维电子气随外加应力的变化，为了分析器件的电流-电压特性随外加应力变化的物理机制，我们建立了分析 HEMT 器件 I-V 特性的解析模型。图 2.7 给出的是 AlGaN/GaN HEMT 的结构示意图，其中 AlGaN 层的厚度是 d ，栅极长度为 L ，栅极宽度为 W 。

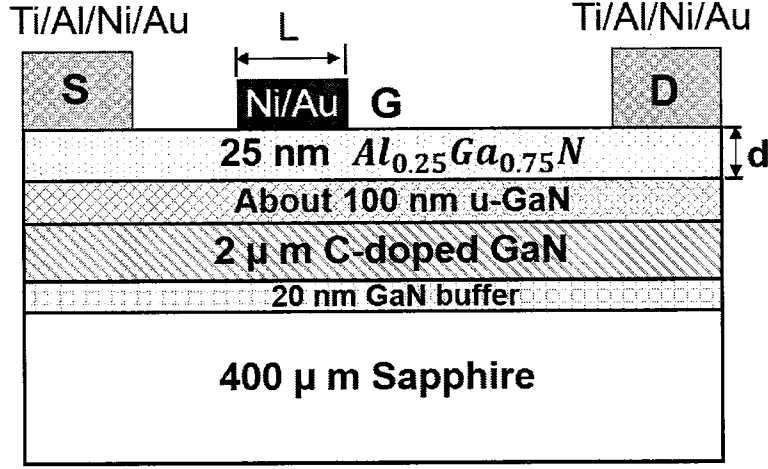


图 2.7 GaN HEMT 器件的结构示意图

Figure 2.7 Structure diagram of GaN HEMT device.

在线性区，我们忽略沟道中的扩散电流和内建电场对迁移率的影响，我们利用下式的边界条件：

$$V(x=0) = R_S \cdot I_{DS}, \quad V(x=L) = V_{DS} - R_{DS} I_{DS} \quad (2.20)$$

其中， R_S 和 R_D 分别是源极串联电阻和漏极串联电阻。因此，该区域的漏源电流表示为：

$$I_{DS} = \beta V_T [V_{DS} - (R_S + R_D) I_{DS}] \quad (2.21)$$

其中， β 是跨导系数， $\beta = W\mu\epsilon/(dL)$ 。

在非线性区域， I_{DS} 可以表示为：

$$I_{DS} = \beta \left(V_{GS} - V_T - \frac{1}{2} V_{DS} \right) V_{DS} \quad (2.22)$$

其中， V_T 是 HEMT 的阈值电压。漏极电流随着漏极电压的平方而变化[82-84]，

这与我们的实验结果非常吻合。

在饱和区，当偏置电压大于饱和电压时，电子速度开始饱和，沟道电流趋于饱和不再随着漏源电压增加。因此，漏源电流按下式表示：

$$I_{DS} = \beta V_L \left[\sqrt{V_L^2 + (V_T - R_S I_{DS})^2} - V_L \right] \quad (2.23)$$

其中， $V_L = F_s L$ ， F_s 表示速度饱和的临界电场。

以上简化模型主要是从工作原理的角度给出了 HEMT 器件在不同状态下的 $I-V$ 特性。当对样品施加作为“虚拟栅极”的外加应力时，耗尽区会加宽。在施加适当的外部应力的情况下，由压电极化效应调制的电子可以通过沟道从源极到达漏极，从而使得漏极电流增加。

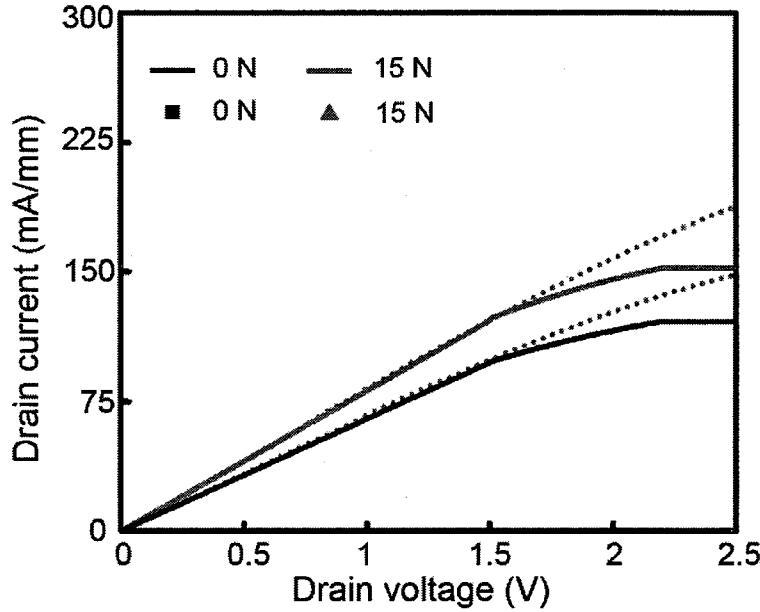


图 2.8 当 $V_G = -2V$ 时，模拟得到的 AlGaIn/GaN HEMT 在有无应力时的电流-电压特性曲线，图中的虚线是实验测得的数据。

Figure 2.8 Simulated $I_{DS} - V_{DS}$ characteristics of the AlGaIn/GaN HEMT with stress and without stress at $V_{GS} = -2V$. The scattered points are the experimental results.

如图 2.8 所示，我们计算了 $V_{GS} = -2V$ 时 15 N 和 0 N 应力下 HEMT 的电流-电压特性，在线性区和非线性区计算结果与实验测得的数据非常接近。由于

非线性压电效应在全部的压电极化强度中已经得到了体现,所以考虑了非线性压电效应的模拟结果与实验数据吻合较好[85-86]。只有在饱和区存在很小的差异,这可能是由于 Kink 效应引起的饱和区漏极电流的异常增加[87]。当施加 15 N 压应力时,计算得到的二维电子气密度值为 $1.19 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 因而饱和区电流比无应力时的电流值要大。虽然忽略了自发热效应的解析模型方程简单,但是计算得到的源漏电流趋势与实验结果吻合较好。这意味着,在我们的器件中,压电电子学效应主宰着运输性质。在 AlGaIn/GaN 异质结场效应晶体管中,关于二维电子气的来源仍然不明确,一些理论研究预测可能与自发/压电极化有关,但是没有得到实验上的证实。我们的研究为此提供了一个有力的证据,证明了压电电子学调制对电流运输的影响。HEMT 的重要应用之一是电力系统,这种应力调制技术为人机界面提供了可能的应用。

2.5 本章小结

本章在实验上和理论上证明了压电电子学效应对 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管的调制作用。当样品施加压应力时,源漏电流增加。在 15N 外加压力下以及 -1V 栅极电压下,饱和电流增加约 21%。薛定谔方程和泊松方程的自洽耦合解显示,它归因于压应力作用下加深三角形中 2DEG 密度的增加。将二维电子气密度放入经典器件方程中,计算出的源漏极电流图与实验结果吻合较好。这项研究很好地揭示了压电极化效应与 2DEG 起源之间的因果关系,为器件的性能增强提供了一个可行的解决方案。这种增强设备性能的创新方法将在许多实际应用中发挥重要作用,例如改进触摸灵敏度的人机界面,基于 HEMT 的传感器和安全控制电源系统。

第三章 压电光电子学在 LED 可见光通讯中的应用

3.1 引言

随着白光发光二极管 (LED) 技术的巨大进步, 被称为可见光通信的独特技术 (其同时实现一般照明和数据传输) 正在成为研究焦点[88-91]。由于室内/室外灯, 显示板, 交通信号灯, 电视机和汽车前灯/尾灯等发光装置随处可见, 因此可见光通信具有作为通信媒介的巨大的潜力。在光照区域内, 用户可以通过任何专门设计的终端进行实时数据通信。作为一种以白色光源为媒介的光无线通信, 可见光通信在红外和射频 (RF) 通信技术方面具有很多优势, 如安全性、环保性、免许可频谱、电磁干扰免疫等等[91]。可见光通信无需额外的发射器和接收器, 只需要使用现有的照明基础, 并且成本很低, 这是它具有非常广泛的应用, 比如视觉信号和通信 (船舶和汽车等), 信息显示和通信, 办公室互联[92]。美国, 欧洲和日本的标准组织研究机构为了寻求更好的通信质量, 更长的传输距离和更高的传输速率已经做出了巨大的努力[93-95]。据报道, 基于可见光通信的室内中川实验室的定位系统和迪士尼研究的基于可见光通信的玩具已经投入使用, 未来将会有很大的市场。

可见光通信的关键性能指标是误码率 (BER), 它直接反映通信中的信号质量[88]。由于可见光通信过程中的噪声主要来源于太阳光和人工照明, 光信号不可避免地会受到干扰, 基带频率范围内的信号质量下降, 会导致高的误码率。因此, 设计一种同时具有错误验证和错误消除的功能的可见光通信系统是非常必要的。另外, 传统的光通信系统中传输速度的大小通常从几十到几百 Mb/s, 人的眼睛根本无法区分。例如, 一长串 “0” 和 “1” 导致长时间的功率变化, 被认为是闪烁。这种闪烁对人的眼睛是有害的, 而一连串的 “0” 对照明是不利的。所以, 一种能够既保证 LED 始终处于低电平状态, 又能够精确避免通信中的光源的闪烁的编码方法是非常必要的。

压电光电子学效应是使用压电势控制载流子的生成, 传输, 分离/重组, 以改

善光电子器件的性能[44, 96-97]。由于压电光电子学效应在传感, 操纵和制动/响应等的应用潜力, 已经在传感器, 生物集成系统, 人机界面, MEMS, 能源以及与硅基 CMOS 技术的集成中有着非常重要的应用。利用 ZnO 纳米线 (NWs), CdS NWs 和 InGaN/GaN MQW 纳米柱, 开发并改进了一系列新型纳米/微器件, 如压电光电子纳米发生器[98], 压电光电子太阳能电池[99], 压电光电子逻辑器件[100], 压电光电子学光电探测器[101-104]和压电光电子发光二极管[53, 105]。

在本章的研究内容中, 设计并研究了基于 InGaN/GaN MQW 纳米柱的压电光电子学效应控制双通道可见光通信 (PVLC) 系统。采用应力编码方式, 将不同施加力下的光致发光 (PL) 强度输出定义为逻辑电平, 实现实时数据传输。此外, 来自 InGaN/GaN 纳米柱的双波长发射有效地消除了源自干涉光的误码率。这是首次将压电光子效应应用于可见光通信系统, 该系统提供了一种新颖、安全、低成本、有效和节能的通信方法。

3.2 基于压电光电子学效应的双通道可见光通信

3.2.1 压电光电子学可见光通信系统搭建

为了解决光通信系统中存在的不足, 我们设计了一种压电光电子学调制的应力编码可见光通信系统[106], 如图 3.1 所示, 此系统是基于拉曼测试系统改进的, 系统由 325 nm 的氩镓激光器、光学元件 (图中未显示)、光学物镜、CCD 探测系统、测试软件、固定板、应力控制系统等组成。其中应力控制系统由专门设计的夹具、顶丝和电动旋转台构成, 样品被固定在夹具的孔槽中, 夹具被固定板牢牢固定在拉曼系统的样品台上, 传输信号被计算机编译后通过电动旋转台周期性地施加到样品上, 激光其的发射波长为 325 nm, 光斑大小为 1 μm , 激光照射到样品表面后, 激发样品的光致发光, 出射光通过 CCD 探测系统探测并通过测试软件在电脑显示器显示出来。顶丝从 LED 芯片背面施加的外应力在纳米柱结构上产生了一个沿 c 轴的压应力, 因此在纳米柱两端产生了额外的压电电荷。外部应力的大小通过顶丝旋进深度值的大小表示, 如图 3.1 中的插图所示, 设置顶丝

旋进到刚刚接触到样品时的位置为 0，之后顶丝旋进的大小可以通过测量获得。这些压电电荷使得量子阱中的内建电场增大，改变了量子阱中电子和空穴波函数的空间交叠，因而引起了样品发光强度的变化。不同的发光状态承载不同的信息，因此可以通过应力编码系统实现信息传输。

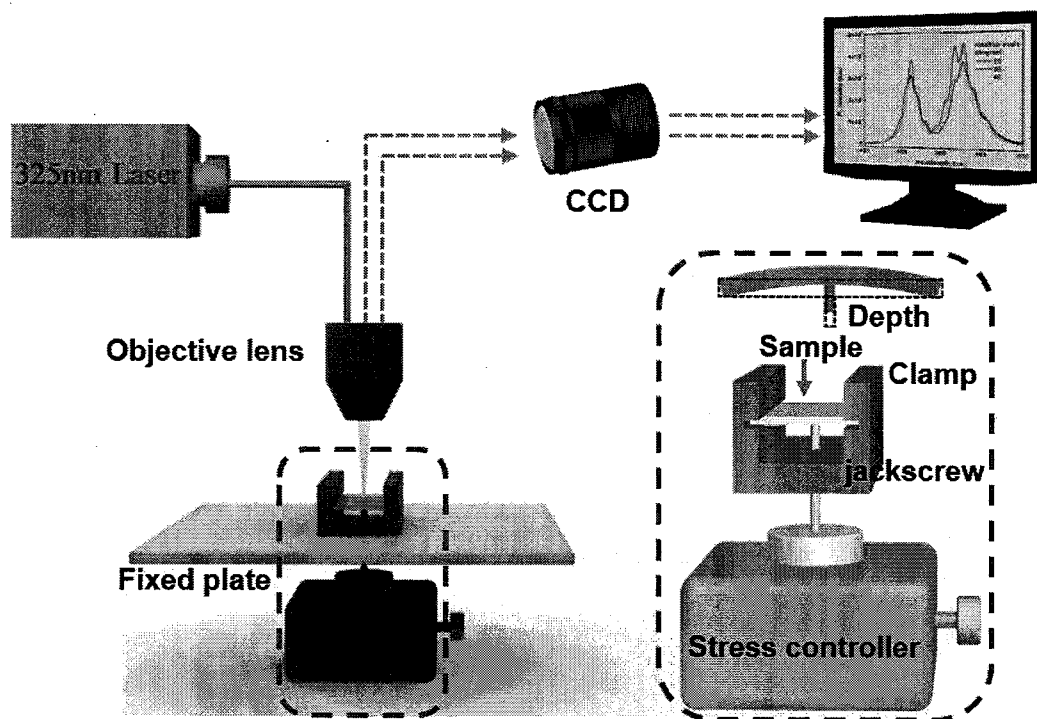


图 3.1 压电光电子学效应调制的可见光通讯系统示意图。

Figure 3.1 Schematic diagram of the Piezo-Phototronic Effect Controlled Dual-Channel Visible light Communication system.

3.2.2 LED 样品的结构表征和发光特性表征

实验中用到的样品的是利用 MOCVD 生长在蓝宝石衬底上的 InGaN/GaN MQW LED 样品，采用自上而下的方法制备得到纳米柱阵列形貌如图 3.2 (a) 所示，可以看出，纳米柱阵列分布均匀、整齐，每个纳米柱的高度约为 1100 nm，直径约为 900 nm。使用纳米柱阵列结构的样品的原因是相比于未刻蚀的 LED 外延片样品，这种经过刻蚀以后周期分布的纳米柱可以承受更大的机械形变和更大的压电系数，除此之外，也大大增加了光提取效率。这对于我们所提出压电光电子学效应调制的可见光通讯系统是非常有益的。为了进一步提高 InGaN/GaN MQW 纳米柱结构的机械韧性，我们在样品表面旋涂透明的 PMMA，然后用等离

子体清洗机在 300W 功率下去掉柱子顶部的 PMMA 以露出柱子的 p-GaN 部分，且 PMMA 不会影响量子阱区的发光。图 3.2 (b) 给出的是经过刻蚀后 InGaN/GaN MQW 纳米柱结构的高分辨 XRD 衍射图像，周期性的卫星峰出现在 GaN 峰的两侧，显示出样品的结晶质量非常高。

图 3.2 (c) 给出的是 PL 光谱测试示意图，激光从样品正上方入射，同时通过光学物镜收集样品出射的光信号，图中的插图表示单根纳米柱的结构，自下而上分别为：N-GaN、MQW、P-GaN。样品的 PL 谱具有两个发光峰位，这两个发光峰位对应的是压电光电子学调制的应力编码可见光通信系统传输信号的两个通道，如图 3.2 (d) 所示，是样品在不同激发光源下的 PL 光谱，PL 光谱的强度随激发光源功率的增加而增加，且峰位随激发光强度的增加出现蓝移的情况，这可能是由能带的填充效应引起的[107]。图 3.2 (e) 给出的是实验测得的 PL 谱与双峰拟合得到的 PL 谱的对比图，可见，两个峰位非常清晰，分别位于 452nm 和 510 nm 附近，它们分别来源于两个相邻的不同组分的量子阱。图 3.2 (f) 是用有效质量近似计算得到的 MQWs 结构的能带图。计算得到的两个不同量子阱的禁带宽度分别为 2.775eV 和 2.428eV，与实验测得的数据非常接近。计算中我们只考虑了价带中的重空穴的跃迁过程，而没有考虑晶格失配和自发极化效应引起的应力的影响，所以能带显示为平带[108-111]。计算中用到的所有结构参数均参照的是样品实际的生长过程，具体使用的部分参数如表格 3.1 所示。

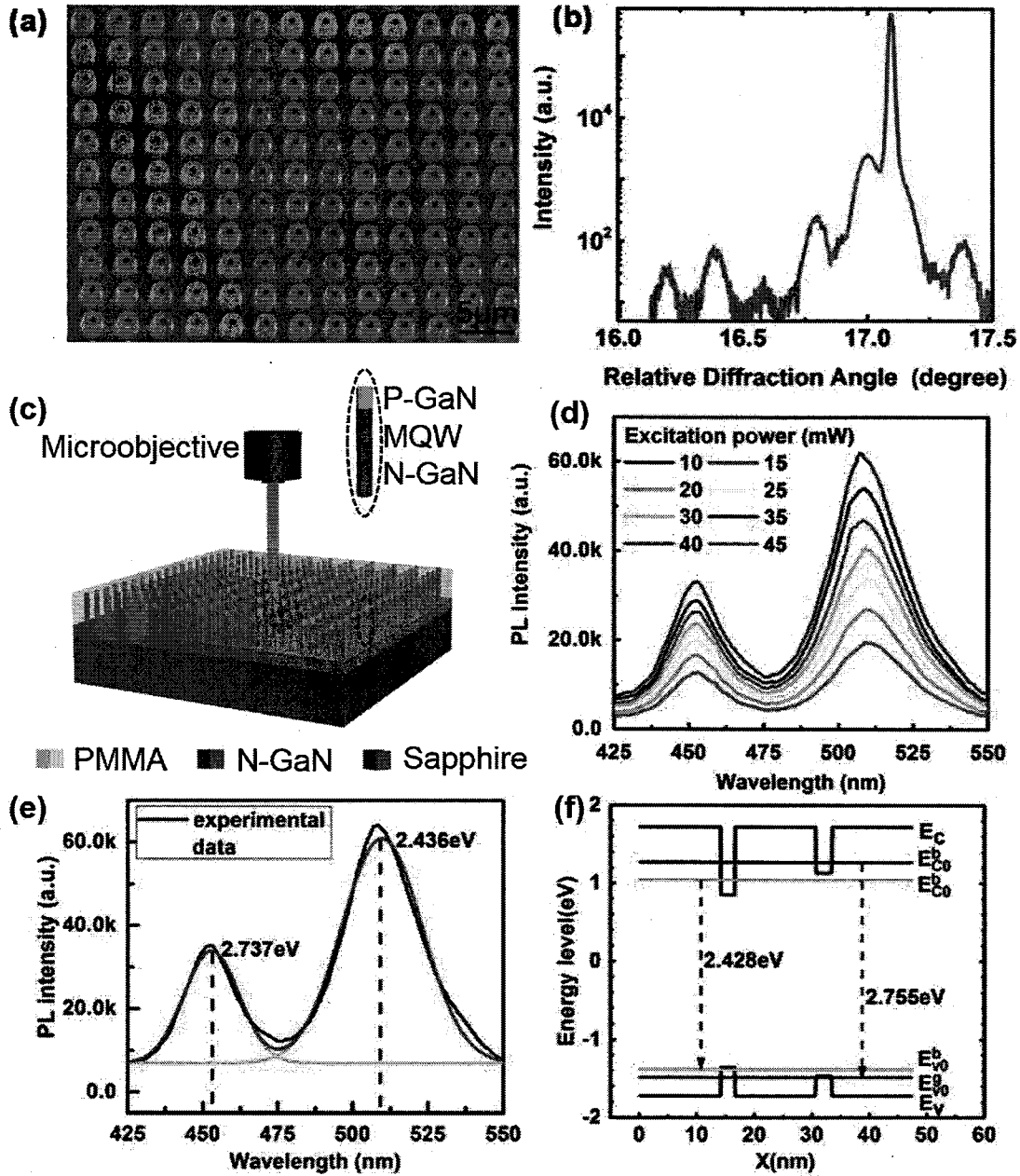


图 3.2 (a) $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}/\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}/\text{GaN}$ MQWs 纳米柱结构的 SEM 图; (b) MQW 支柱的摇摆曲线; (c) PL 光谱测试示意图, 插图表示单根纳米柱的结构; (d) 在不同的激发功率下 LED 样品的 PL 光谱; (e) 观察到两个不同量子阱发出的两个峰, 分别位于 2.737 eV 和 2.436 eV。 (f) 用有效质量近似计算得到的 MQWs 结构的能带图。

Figure 3.2 (a) SEM image of $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}/\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}/\text{GaN}$ MQWs nanopillars. (b) Rocking curve of MQW pillars. (c) Schematic diagram of the PL spectrum test. Inset: the structure of a single nanocolumn. (d) PL spectrum at different excitation powers from 10 to 45 mW. (e) Two peaks emitted from two different quantum wells were clearly observed, locating at 2.737 eV and

2.436 eV respectively. (f) Calculated energy band diagram of MQWs structure.

表 3.1 InN 和 GaN 的物理参数

Table 3.1 Physical parameters of InN and GaN

参数	InN	GaN	参考文献
晶格常数 a (nm)	0.355	0.319	[80]
晶格常数 c (nm)	0.570	0.519	[80]
室温下禁带宽度 Eg (eV)	6.41	3.510	[80]
电子有效质量 m_e	0.07 m_0	0.20 m_0	[80]
空穴有效质量 m_{hh}	1.27 m_0	1.56 m_0	[112]
相对介电常数	15.30	10.4	[6]

3.3 压电光电子学效应调制的可见光通讯系统

3.3.1 PVLC 的编码调制模式

进一步研究发现，在同一强度的激发光源照射下，纳米柱结构的 LED 样品在施加了不同外部应力下，PL 光谱强度不同，如图 3.3（a）所示。具体地说，随着外加应力增加，样品的两个发光峰的强度同时降低，这是由于纤锌矿结构的 GaN 是非中心对称的结构，对多层结构的纳米柱施加压力/应变时，将在其两端新产生压电极化电荷。相应地，PL 光谱的强度将受到界面处的压力/应变诱导的压电电荷的影响。图 3.3（b）给出的是两个发光峰的积分强度随顶丝旋进深度的变化关系，当顶丝位置在“0”时，蓝光和绿光的发光强度的积分分别在 18 和 7 个单位，随着顶丝旋进深度的增加，两个波长的发光强度的积分均呈线性降低，并且绿光降低得更快，以至于顶丝位置在 43.75 μm 时，蓝光和绿光的强度的积

分非常接近, 均在 4 个单位附近。这种 PL 光强随外加应变的变化在可见光通讯领域有非常大的优势, 且强度变化通过仪器测试非常明显, 而发光强度的变化不会引起眼睛的不适。

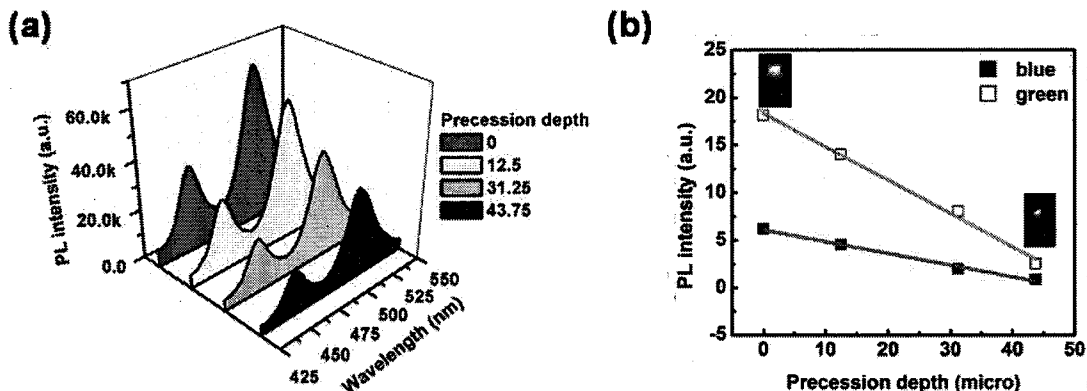


图 3.3 (a) 不同外力下的 PL 光谱图; (b) 蓝/绿光积分强度随外力增加变化图。插图分别对应旋进深度为 0 和 43.75 μm 时样品 PL 谱的照片。插图对应不同应力下样品实际发光的光学图像。

Figure 3.3 (a) PL spectra at different stress. (b) The force dependence of integrated emission light intensities of blue/green peak, which exhibits a good consistency. Inset: optical image of actual light emission under different stress.

基于不同外力下 PL 光谱强度的变化, 我们提出了一套可见光通信的编码调制模式, 如图 3.4 (a) 所示是在 45 个周期有/无应力的信号激励下, 波长为 452 nm 的蓝光发射峰的强度响应。为防止样品在反复施加应力的过程中断裂, 我们在图 3.1 的系统中设置的是顶丝的最大旋进深度为 43.75 μm , 此时施加在样品上的应力低于样品所能承受的最大值。样品的发光强度严格限制在 7700 和 6800, 这在一定程度上证明了我们的 PVLC 系统的稳定性。与此同时, 我们测得了波长为 510 nm 的绿光发射峰强度的相应特性, 如图 3.4 (b) 所示, 蓝光与绿光的响应完全一致, 我们依据此现象, 并结合可见光通信的基本原理, 定义发光强度高时为逻辑“1”, 强度低时为逻辑“0”, 通过周期性旋入和旋出由电动旋转台控制的顶丝, 周期性的应力便会被施加在样品上, 这就是 PVLC 系统的编码调制模式。通过这种方式, 编码通过 PVLC 系统实时传输和记录。

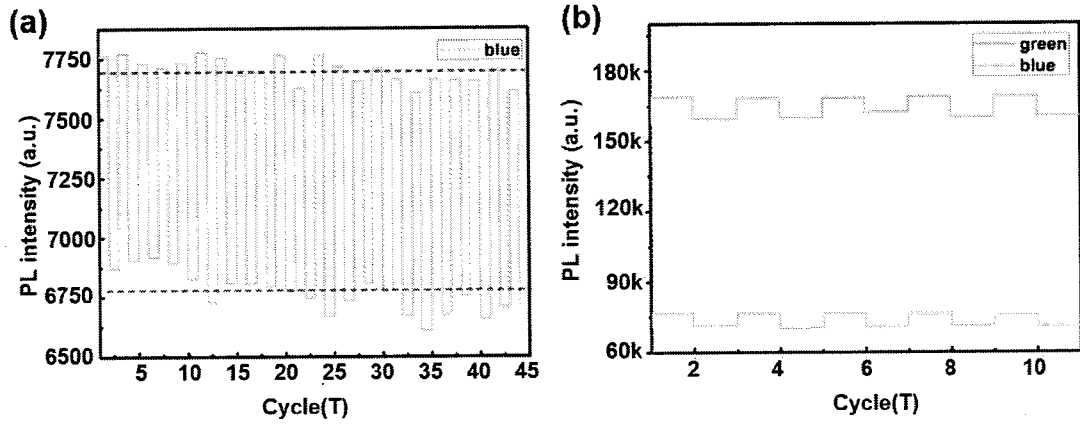


图 3.4 (a) 蓝光发光峰随外加应力周期性变化 45 个周期的强度变化；(b) 双波长发光峰强度随周期性应力的变化情况。

Figure 3.4 (a) Intensities of the blue light emission peak with periodic changes in the applied stress for 45 cycles; (b) The intensity of the double-wavelength light emission intensity under cyclic stress.

3.3.2 压电光电子学效应调制的可见光通讯系统实现误码校正

为验证 PVLC 系统传输的可靠性，我们采用最简单的二进制代码进行测试，图 3.5(a)-(c)分别是字符串“101010101010”，“110110110110”，“001001001001”对应编码的输出信号。显然，由“0”和“1”组成的代码非常明显，并且由两个通道传输的信号具有良好的准确性和一致性。表格 3.2 给出了三种信号的编码输出的统计结果，两通道编码输出的最大偏差不超过 4%，这意味着 PVLC 系统在传输可靠性方面具有良好的性能。图 3.5 (d) 是两个通道输出结果的叠加，实现了逻辑“与”，叠加后，两个通道原本存在的微小的偏差完全消失，使得 PVLC 系统传输的数据更加可靠。

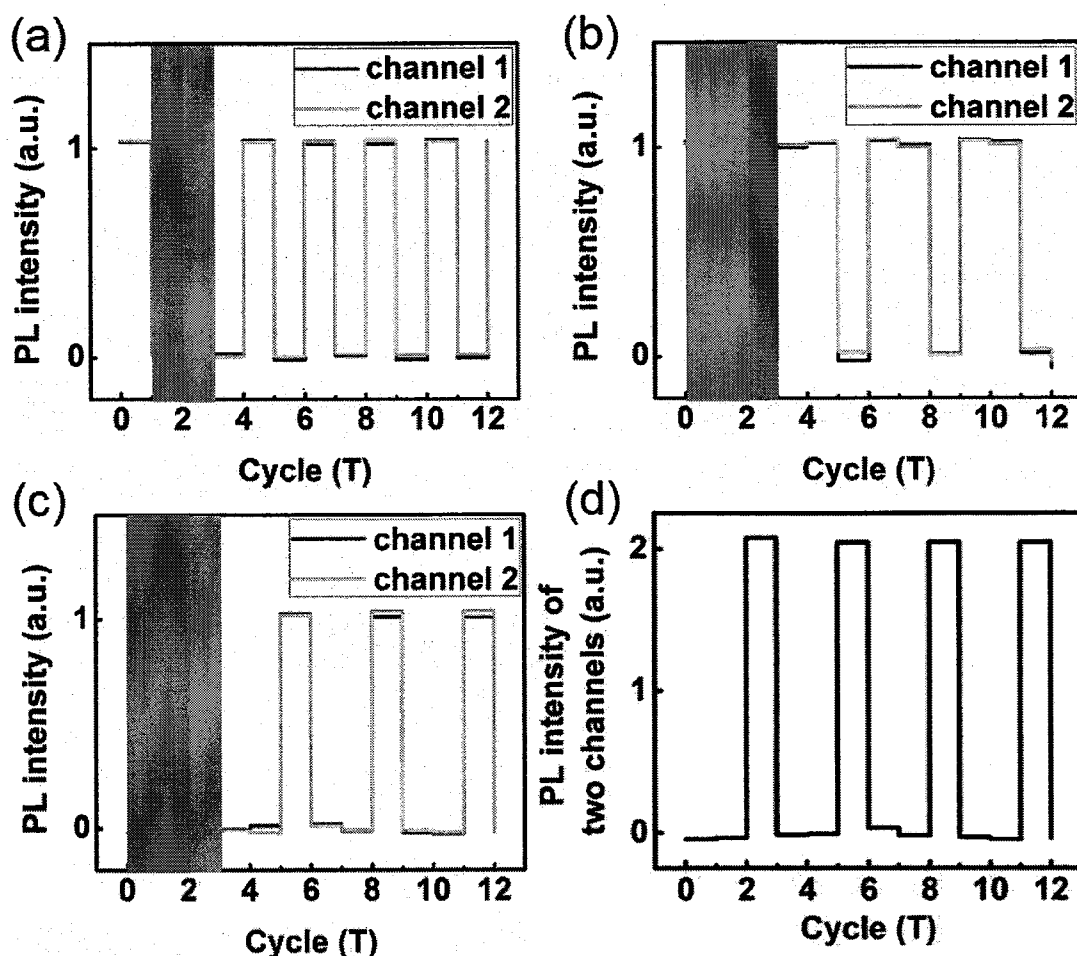


图 3.5 字符串 (a) “101010101010” (b) “110110110110” (c) “001001001001” 对应的编码信号; (d) 两个通道输出结果的叠加。

Figure 3.5 The outputs of different strings (a) “101010101010,” (b) “110110110110,” (c) “001001001001” by PVLC system. (d) The logical “AND” result of the two channel output.

PVLC 系统的双通道传输模式与传统 MIMO (多输入多输出) 技术中的空间分集技术类似, 有助于减少或消除某一个通道中的干扰信号[113-114]。这为 PVLC 系统提供了在复杂环境下提高通信质量和信道可靠性的能力。在可见光通讯系统中, 存在的强烈的背景光, 如日光和人造光源及电路固有噪声的干扰, 会对光信号造成干扰从而导致传输误差的出现, 而我们的 PVLC 系统具有验证和消除错误的功能。衡量可见光通讯系统准确性的一个非常重要的指标是误码率, 图 3.6 (a) 显示的是 PVLC 系统识别/消除误码方法的示意图, 系统内传输信号的是两个信道, 两个信道的信号经过传输后, 经过一个逻辑信号处理单元, 将两个信

道的信号处理成一个最终的信号，因此实现传输功能。实验中我们采用的是可见光信号作为干扰信号，当两个信道传输的信息均为“1010101010...”时，在其中一个信道引入误码，如图 3.6 (b) (c) 所示，可以看出，干扰信号对蓝光传输信息的通道几乎没有影响，但是在绿光传输信息的通道中产生了三个干扰信号，即原本应为“101”的信号被干扰后变成了“111”信号，(图 3.6(b)中标注为 ERROR)。经过逻辑信号处理单元，对信道 1 和信道 2 的信号进行布尔运算 (AND) [93, 115]，信号获得了调制，在输出端获得的信号仍然是“1010101010...”，如图 3.6 (d) 所示。这样，系统传输的信号便不会受到外来干扰信号的影响，即实现了误码的纠正/消除。

表 3.2 不同字符串通过两个信道的高光位 (HOL) 和低光位 (LOL) 输出值

Table 3.2 High-Lot (HOL) and Low-Lot (LOL) output values of the same signal through two channels

	信道 1		信道 2	
	HQL	LOL	HQL	LOL
101010101010	$1.039 \pm 0.9\%$	$0.0032 \pm 1.3\%$	$1.032 \pm 0.65\%$	$0.011 \pm 0.6\%$
110110110110	$1.005 \pm 1.91\%$	$-0.023 \pm 3.56\%$	$1.005 \pm 2.43\%$	$0.012 \pm 1.51\%$
001001001001	$1.032 \pm 0.31\%$	$-0.016 \pm 0.93\%$	$1.031 \pm 1.17\%$	$-0.02 \pm 0.59\%$

为了进一步验证 PVLC 系统在信息传输过程中的作用，我们利用此系统传输了包含“BINN”信息的一系列编码，在输出端收集到的结果如图 3.6 (e) 所示，字符“B”，“I”，“N”和“N”的二进制编码分别是“01000010”，“01001001”，“01001110”和“01001110”，经过 PVLC 系统传输后，信息准确无误。由于信息通常是多通道传输的，通过信息融合技术，我们所设计的压电光电子学效应调制的可见光通讯系统在拓展信号覆盖范围和消除误码率方面表现出了非常出色的能力。这对于各种复杂环境尤其是室外环境下的通信非常重要。

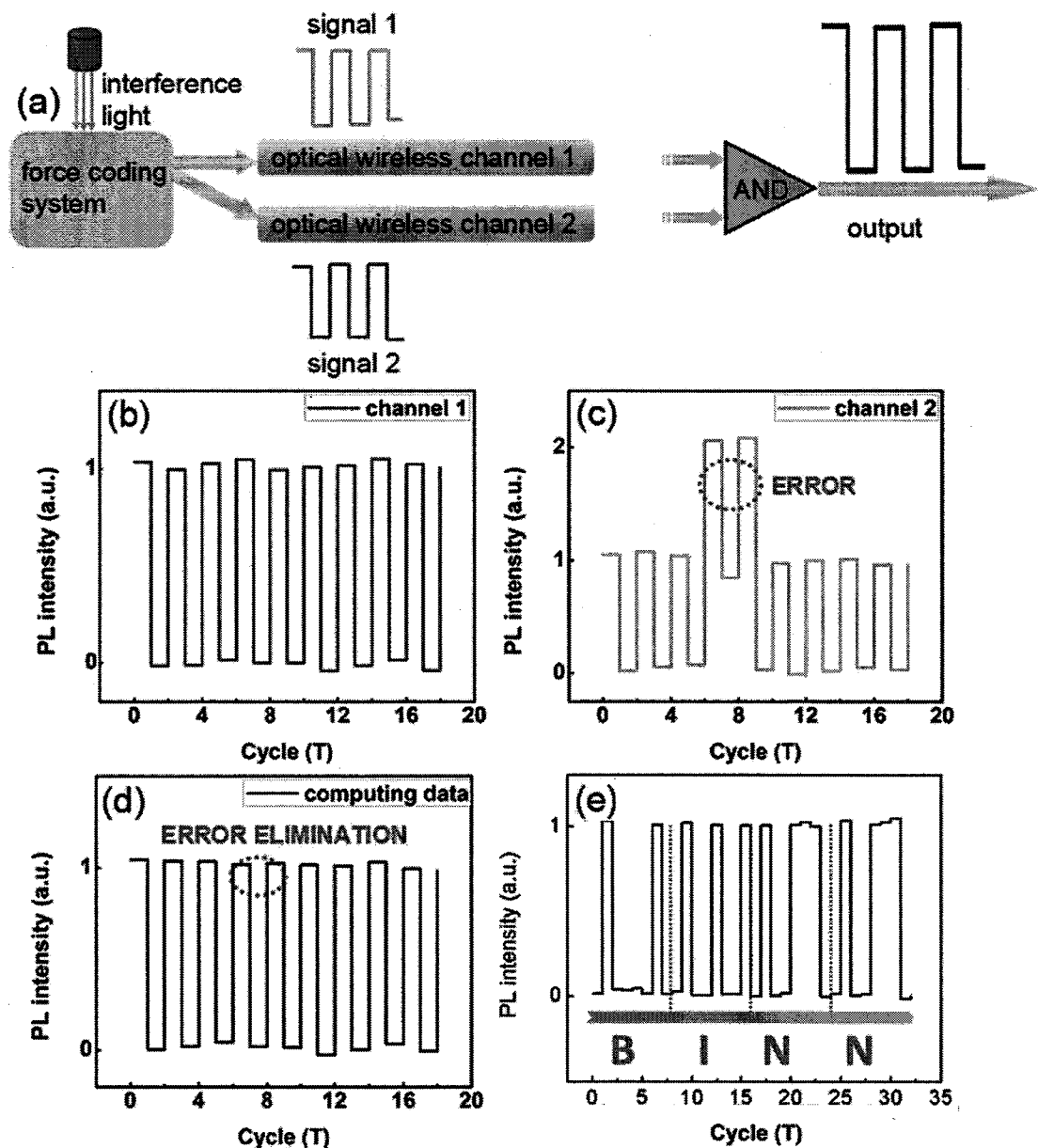


图 3.6 (a) PVLC 系统误码识别/消除示意图；(b) 通道 1 信号输出；(c) 通道 2 信号输出；虚线圆圈标出了信道 2 中的误码；(d) 两个通道输出的结果展示。通过通道 1 和通道 2 的布尔运算 (AND) 验证并消除了错误；(e) PVLC 系统输出的“BINN”刺激。字符“B”，“I”，“N”和“N”的二进制编码分别是“01000010”，“01001001”，“01001110”和“01001110”。

Figure 3.6 (a) Schematic diagram of error code identification/elimination by our PVLC system. The outputs of (b) channel 1 and (c) channel 2. The dot circle shows the errors in channel 2. (d) The communication output by PVLC. The errors were validated and eliminated with Boolean calculation (AND) of channel 1 and channel 2. (e) The output of the sting “BINN” by the PVLC system. The binary encodings for characters “B”, “I”, “N”, and “N” are “01000010”, “01001001”, “01001110”,

and “01001110”, respectively.

3.4 理论解释

为了从理论证明 PVLC 系统的可行性与可靠性, 我们利用 COMSOL 4.3a 分别模拟了整个器件和单根纳米线在应力调制下样品中的应力分布。如图 3.7 (a) 所示, 当在样品背部施加应力时, 在样品中心与顶丝接触的位置处应力的数量级在几十 MPa, 这并不会使样品断裂。相应地, 就会有应变施加到单根纳米柱上, 如图 3.7 (b) (c) 所示, 此时, 在 GaN/InGaN 的异质结界面处, 便会产生压电电荷, 在单根纳米柱上就会在顶端累积负的压电电荷, 另一端累积正的压电电荷 [108, 116]。图 3.7 (b) 是理论分析的单根 InGaN/GaN MQW 纳米线上的极化电荷分布示意图, 图 3.7 (c) 是模拟得到的极化电荷分布, 二者结果一致。

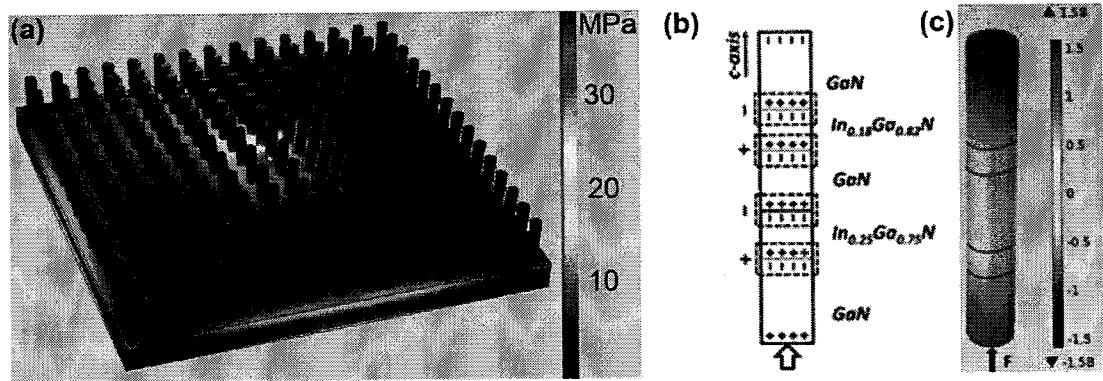


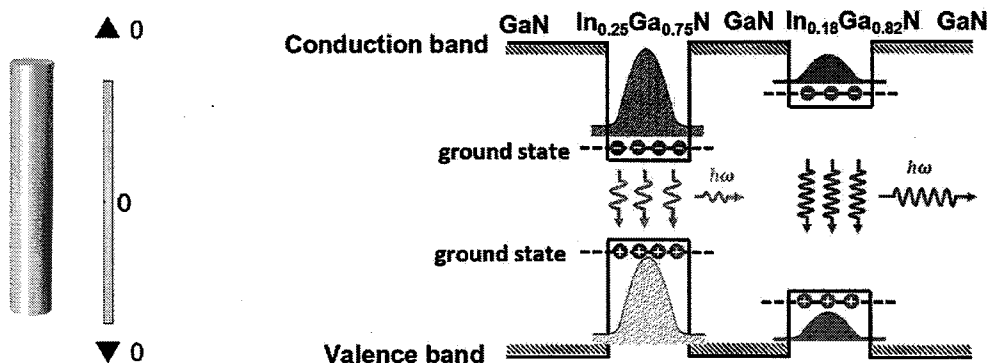
图 3.7 (a) 利用 COMSOL 4.3a 模拟得到的器件上应力分布图; (b) 单根 InGaN/GaN MQW 纳米线上的极化电荷分布示意图; (c) 模拟得到的单根纳米柱上的电荷分布。

Figure 3.7 (a) The stress distribution diagram on the device simulated by the COMSOL 4.3a. (b) The schematic diagram of the polarization charge distribution on a single InGaN/GaN MQW nanowire. (c) Simulated charge distribution on a single nanowire.

图 3.8 给出的是自洽理论计算得到的 (a) 无外力时 (b) 有外力时能带示意图和波函数分布图, 前面已经说过, 我们的模型不考虑晶格失配和自发极化效应引起的应力的影响, 所以不加外部应力时, 能带显示为平带, 电子在激发光的激发下, 由低能级向高能级跃迁并辐射出光子, 电子和空穴的波函数分布在各个量子阱中间。当有外部应力作用时, 随即产生的压电极化电荷导致能带发生倾斜,

电子空穴波函数分别向量子阱的两边移动[117]，波函数重叠变少，此时在同样的入射光激发下，量子阱中出射的光强就会变小。因此，可以通过给样品施加不同的应力来调节 PVLC 系统输出的信号，实现光通讯。

(a) Without external strain



(b) With external strain

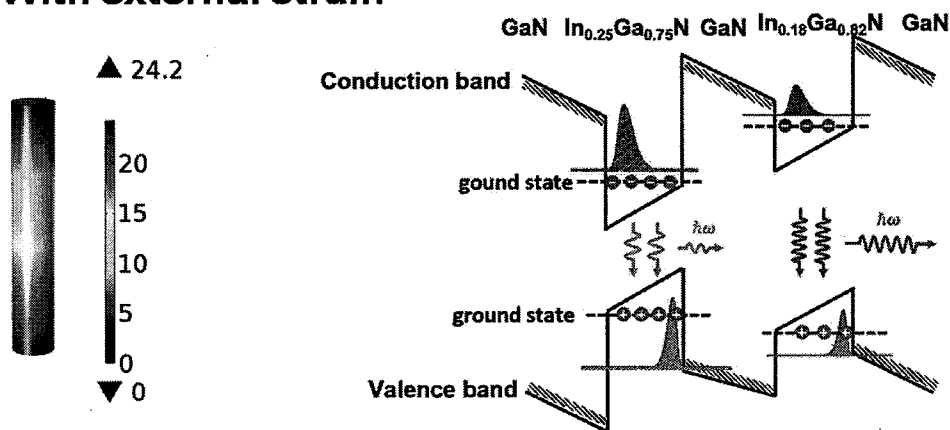


图 3.8 (a) 无外力时 (b) 有外力时能带示意图和波函数分布图。

Figure 3.8 Schematic diagram of the energy band and the distribution of wave function without external strain (a) and with external strain (b).

3.5 本章小结

总之，本章的研究内容主要是设计了一种基于双波长 InGaN/GaN MQW 纳米柱结构的压电光电子学效应调制的可见光通讯系统。器件的发光强度通过外加应力引起的极化电荷进行有效调制，实现了应力编码技术。与传统的可见光通信

相比,应力编码技术的双通道模式在优势在于误码自甄别/消除,保证了传递信息的准确性。另外,PVLC 对照明的影响很小,因此可以在一定程度上起到保护视力的作用。作为一种低成本、安全和环保的无线通讯技术,PVLC 系统将在高速连接、室内定位、联网玩具和灯光网络、人体传感器、私人网络和室外广告等领域具有非常广阔的应用前景。

第四章 压电光电子学效应增强 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池

4.1 引言

第一章已经提出过 III 族氮化物半导体材料在太阳电池领域中的重要作用, In 组分足够高时, InGaN 基的太阳电池的理论效率可以高达 50%[35]。但是, 在实际的实验中, 生长得到既满足高铟组分又能达到足够的厚度的 InGaN 薄膜是非常困难的[118], 由于 GaN 和 InGaN 之间存在晶格失配, In 组分的提高将导致非常高的位错密度, 因此造成较差的太阳能功率转换效率[37, 119]。传统的提高太阳能转换效率的方式通常为: 利用 MOCVD 在材料生长过程中改变器件的结构, 比如增加量子阱的数量来提高太阳能转换效率, Mukhtarova 等人研究表明, 将量子阱的数量从 5 个增加到 40 个, 器件总体的转换效率从 0.09% 提高至 0.85%, 然而, 当量子阱的数量进一步增加到 100 个时, 太阳能转换效率反而降低到了 0.78%[120]; 也有研究人员通过改变 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金中 In 的组分来优化太阳能转换效率[121]。但是这些提高太阳能电池转换效率的方法需要多次试验, 调控所需的周期长、性能不稳定, 因此亟需开发一种新的方式来提高 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 多量子阱太阳能电池的转换效率。

压电光电子学效应是应用压电势调节和控制界面或结区载流子的产生、分离和传输以及其他复合过程, 是基于同时具有半导体、光激发和压电性质的材料, 对半导体、光激发和压电特性三者之间耦合效应的研究[41, 43, 47, 64]。压电电子学效应已被用于提高各种生物/化学传感器的灵敏度[45, 53, 68, 70, 122], 光伏器件的性能[57, 123], 以及发光二极管(LED)的发光效率[71, 124-125]。这些器件可以通过施加外部机械应力/应变被有效调节, 这会产生一系列光电现象和科学应用。大多数压电光电子器件采用金属半导体(MS)或异质结结构, 例如 ZnO 微米/纳米线器件中的电输运特性的改进[126]以及 n-ZnO/p-SnS 光电池中的转换效率的提高[57]。随着纳米科学技术的发展, 压电电子学效应/压电光电子学效应和量子局域之间的耦合逐渐成为可能。并且已经在理论和实验上给出了由压电光

电子学效应调制的 InGaN/GaN MQW 的 PL 强度[53, 61]。

在这一章节中, 我们提出了压电光电子学效应增强的 InGaN/GaN MQWs 太阳能电池[127]。在外部应力作用下, 太阳能电池的短路电流从 1.05 mA/cm^2 增加到 1.17 mA/cm^2 , 最大转换效率由 1.12% 提高到 1.24%, 相对提高了 11%。此外, 我们建立了一个自洽的数值模型来说明压电光电子学效应对 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池中的调制作用, 并得到了许多重要的结论。总之, 本章节的研究内容表明压电光电子学效应为增强 InGaN/GaN MQW 太阳能电池的性能提供了一种新的可行的途径。我们的压电光电子学效应调制技术是一种非常简单, 可恢复的高效技术, 具有成本低廉、可回收、调控效果显著、性能可靠的优点, 可以提高常规效率, 这在氮化物太阳能电池的设计中具有巨大的潜力。

4.2 样品的材料表征与应力分析

4.2.1 样品的结构表征

InGaN/GaN MQW 太阳能电池器件中用到的多量子阱结构的外延片是通过金属有机化学气相沉积 (MOCVD) 系统在 (0001) 图案化蓝宝石衬底上生长得到的, InGaN 合金的 In 含量为 25%, MQW 的横截面示意图如图 4.1 (a) 所示。该多量子阱结构的外延片自下而上依次包含: 基底; $3 \mu\text{m}$ 厚的本征 GaN 缓冲层; $2 \mu\text{m}$ 厚的 N 型 GaN 层; 9 个周期的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 多量子阱吸收层; 以及 $0.2 \mu\text{m}$ P 型 GaN 层。GaN/InGaN/GaN 量子阱的相应原子结构模型和能带弯曲分别如图 4.1 (b) 和 4.1 (c) 所示。由于 GaN 和 InGaN 具有非中心对称的晶体结构, 晶格失配在 InGaN/GaN 界面上诱发的压电极化电荷就会导致界面处三角形势阱的形成, 从而影响器件对太阳光的吸收。

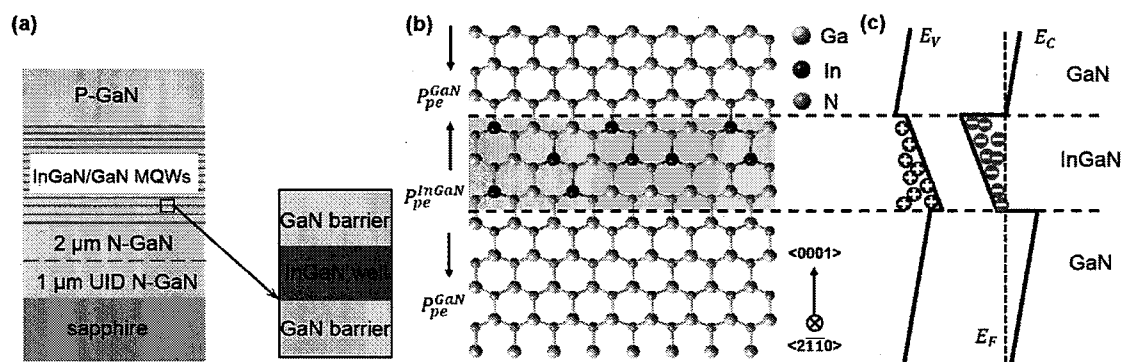


图 4.1 InGaN/GaN MQW 太阳能电池的结构示意图。(a) InGaN/GaN MQW 太阳能电池的横截面示意图，图中放大的部分是 GaN/InGaN/GaN 异质结构的横截面示意图；(b) 相应的原子结构模型；(c) 能带示意图。

Figure 4.1 Structural characterization of InGaN/GaN MQWs solar cell. (a) The cross-sectional schematic of the InGaN/GaN MQWs solar cell and magnified cross-sectional view of a highlighting GaN/InGaN/GaN heterostructure. (b) The atomic structure model and (c) energy band diagram of the GaN/InGaN/GaN heterostructure.

图 4.2 (a) 是样品的高分辨 XRD 衍射图，图中可以清晰地看到 GaN (0002) 面的衍射主峰和 InGaN 多量子阱的各级衍射峰。周期性的卫星峰（从-3 到+2）出现在 InGaN 零阶峰的两侧，显示出样品具有非常高的结晶质量。为了获得量子阱的更加具体的结构信息，我们利用扫描电子显微镜获得了样品的横截面图，如图 4.2 (b) 所示，从图中可以看出，InGaN/GaN 多量子阱总厚度约为 150 nm，单个周期的厚度约为 16 nm。

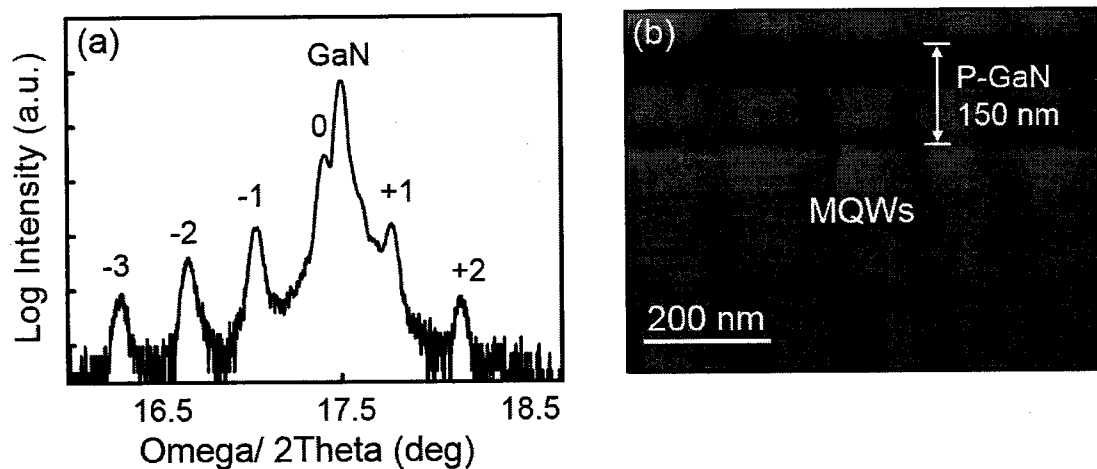


图 4.2 (a) InGaN/GaN 多量子阱结构的高分辨率 $\omega/2\theta$ 扫描图; (b) InGaN/GaN MQWs 结构横截面的 SEM 图。

Figure 4.2 (a) High-resolution omega/2theta scans of MQWs structures. (b) SEM images of InGaN/GaN multiple quantum wells structure.

4.2.2 光致发光 (PL) 谱

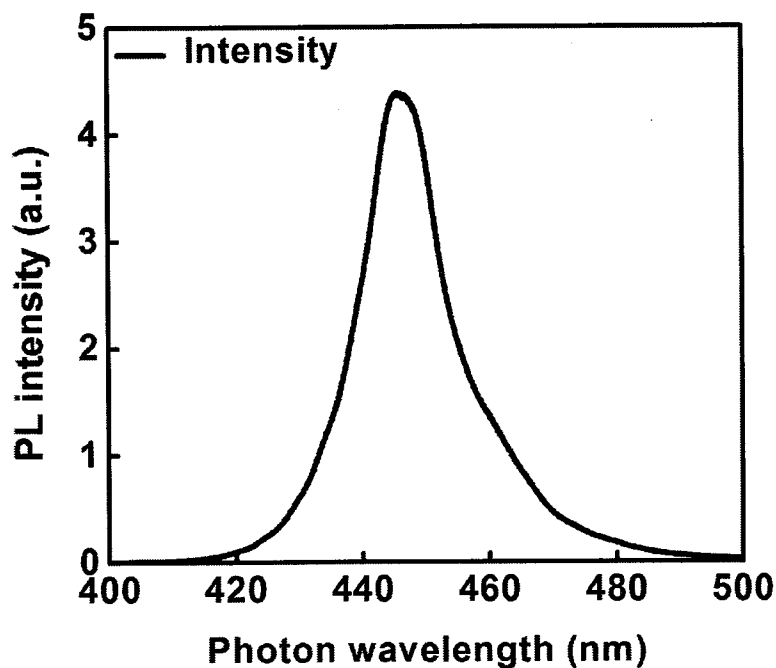


图 4.3 测量得到实验中所用到的样品的 PL 谱

Figure 4.3 The PL spectrum of the sample used in the experiment.

为了研究样品的光学特性，我们对样品进行了光致发光测试，采用的激发光源是 325 nm 氮镉激光器，激光从样品的正上方垂直入射到样品表面，所得到的谱线如图 4.3 所示。从图中可以看出，样品只有一个发光峰位，位于 445 nm，且并没有杂散峰出现，半高宽约为 15 nm，说明材料的平整度比较好，量子阱质量比较高。

4.2.3 拉曼光谱和应力分析

由于声子频率对应变的依赖性，拉曼光谱是研究 III-V 合金材料内部应变的非常有效的方法[128]。依旧线性弹性理论，我们首先给出拉曼光谱能够分析材料内部应力的基本理论。对于蓝宝石衬底上生长的 GaN，面内应变可以分解为沿两个方向的双轴应变，由于这两个方向平行于晶体的主轴，于是我们可以假定剪切应力分量为零。在线性弹性理论的极限中，广义胡克定律可以按照下式给出：

$$\sigma = c\varepsilon \quad (4.1)$$

其中， σ 为应力矩阵， c 为常数，称为弹性模量或杨氏模量， ε 为应变矩阵。具体写成矩阵的形式为：

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11}\varepsilon_1 + C_{12}\varepsilon_2 + C_{13}\varepsilon_3 \\ C_{12}\varepsilon_1 + C_{11}\varepsilon_2 + C_{13}\varepsilon_3 \\ C_{13}\varepsilon_1 + C_{13}\varepsilon_2 + C_{33}\varepsilon_3 \\ C_{44}\varepsilon_4 \\ C_{44}\varepsilon_5 \\ C_{66}\varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

其中 $\sigma_{1,2,3}$ 为应力在三个方向的分量， $\varepsilon_{1,2,3}$ 为应变在三个方向的分量。从方程 (4.2) 可以看出，剪切应变 $\varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6$ 均为零， σ_3 由于其方向沿着材料生长的方向，所以并不受局限，可以在此方向任意压缩或扩张，因此在平行于 c 轴方向的应力为零。由此，可以得出 c 轴方向的应变可以用面内的两个方向上的应变表示出来：

$$\varepsilon_3 = -\frac{C_{13}}{C_{33}}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \quad (4.3)$$

可以看出，面内应变的方向与 c 轴的应变方向相反，当沿着 c 轴为压缩应变时，面内应变表现为张应变；反之，当 c 轴方向为张应变时，面内应变则表现为压缩应变。假定面内两个方向的应变相等，即 $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ ，则 (4.3) 式即为：

$$\varepsilon_3 = -\frac{2C_{13}}{C_{33}}\varepsilon_1 \quad (4.4)$$

其中, $2C_{13}/C_{33}$ 表示双轴泊松比 R^{biax} , 将方程 (4.4) 代入到方程 (4.2), 面内应力就可以表示为应变的线性函数:

$$\sigma_1 = \sigma_2 = (C_{11} + C_{12} - \frac{2C_{12}^2}{C_{33}})\varepsilon_1 \quad (4.5)$$

其中, $C_{11} + C_{12} - \frac{2C_{12}^2}{C_{33}}$ 表示双轴弹性模量 Y^{biax} 。由此, 有外加应变时 GaN 晶体结构中的声子频率就会相对无外加应变时的声子频率发生移动, 具体表现为材料受张应变时, 声子频率减小, 材料受到压缩应变时, 声子频率增加。

在线性近似下, 不同拉曼活性的声子频率的相对移动量与外加应变的关系可以表示为:

$$\Delta\omega_{A1} = a_{A1}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + b_{A1}\varepsilon_3 \quad (4.6)$$

$$\Delta\omega_{E1} = a_{E1}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + b_{E1}\varepsilon_3 \pm c_{E1}[(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4\varepsilon_{12}^2]^{1/2} \quad (4.7)$$

$$\Delta\omega_{E2} = a_{E2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + b_{E2}\varepsilon_3 \pm c_{E2}[(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4\varepsilon_{12}^2]^{1/2} \quad (4.8)$$

其中, 简并态的 E_1 和 E_2 模式分裂成两种情况: (1) 各向异性的面内应变, 也就是 $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$ 的情况 (2) 非零的剪切应变 ε_{12} 。公式 (4.5) - (4.7) 中的 a,b,c 分别是对应声子模式的形变势。忽略声子模式的分裂, 并将公式 (4.4) 和 (4.5) 代入到上述三个公式, 则:

$$\begin{aligned} \Delta\omega_{Ph} &= \omega_{Ph} - \omega_0 = 2a_{Ph}\varepsilon_1 + b_{Ph}\left(-\frac{2C_{13}}{C_{33}}\right)\varepsilon_1 \\ &= \left(\frac{2a_{Ph}C_{33} - 2b_{Ph}C_{13}}{C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2}\right)\sigma_1 \\ &= K_{Ph}^{biax}\sigma_1 \end{aligned} \quad (4.9)$$

其中 Ph 表示对称模式的声子, K_{Ph}^{biax} 表示应力系数。

基于以上原理, 我们利用拉曼光谱分析 InGaN/GaN 量子阱中的应力分布, 图 4.4 (a) 是拉曼测试示意图, 样品固定在夹具中, 夹具底部有一个可以控制上下的螺丝, 外部应力通过底部的机械旋转台定量施加到样品上, 螺钉旋转的进动深度决定了外部应力的大小。样品内部受到的应力和应变我们利用有限元模拟软

件 COMSOL 4.3a 计算得到, 如图 4.4 (b) 所示。可以看出, 样品中的应力主要均匀分布在螺钉与样品接触的位置附近大约 $2 \times 2 \text{ mm}^2$ 的区域内, 此区域大小刚好与一个太阳能电池器件面积接近, 由此可以判断, 每个器件在受到外部应力的作用时, 器件内部的应变是均匀分布的。图 4.4 (b) 中示意图所示的器件中心应力的最大值为 0.15GPa, 这并没有超过材料本身可以承受的最大应力, 此时外部应力确实被施加到了器件中。

室温下测得的样品在有/无外加应力下的拉曼光谱如图 4.4 (c) 所示, 图中每条线对应的数字表示的是螺钉进动的深度, 单位是毫米, 初始位置是螺钉刚好与样品背部接触时的位置。在无应力状态, GaN 的 E_{2h} 模式拉曼光谱的峰位在 568.4cm^{-1} 。从图中可以明显观察到, 随着螺钉进动深度的增加, GaN 的 E_{2h} 模式和 InGaN 的 $A_1(\text{LO})$ 模式都向短波数方向移动。根据本小节前半部分的理论所述, 纤锌矿结构中残余压缩应力通过 E_{2h} 声子模式的波数的相对位移量得到[129-130], 双轴应力与拉曼活性声子模式的相对移动量之间的关系表示为 $\Delta\omega = \omega - \omega_0 = K_{ph}^{biax} \sigma_{xx}$, 其中 ω 是测量的峰值位置, ω_0 是 567.5cm^{-1} GaN 块体 E_{2h} 模式峰位的标准值[131], K_{ph}^{biax} 表示双轴应力的应力系数, σ_{xx} 是以 GPa 表示的残余应力。更具体地, 我们提取并绘制了 GaN 的 E_{2h} 模式拉曼光谱的峰位和 InGaN 的 $A_1(\text{LO})$ 模式拉曼光谱的峰位随不同外加应力的变化, 如图 4.4 (d) (e) 所示。随着外加应力的增加 E_{2h} 模式从 568.4cm^{-1} 移位到 567.7 cm^{-1} , 根据拉曼光谱的应力分析原理, 这对应于压缩残余应力从 0.35GPa 变化到 0.07GPa。图 4.4 (e) 显示的是 InGaN 的 $A_1(\text{LO})$ 模式与 InGaN 量子阱中的残余应力对进动深度的依赖性。随着进动深度从 0 增加到 $44 \mu\text{m}$, InGaN 的压缩残余应力从 5.30GPa 降低到 4.63GPa。它揭示了外部应力部分地补偿了 InGaN 外延层中晶格失配引起的内部应力[132]。基于线性弹性理论, InGaN 中的外部应变相应地从 0.000% 增加到 0.134%。

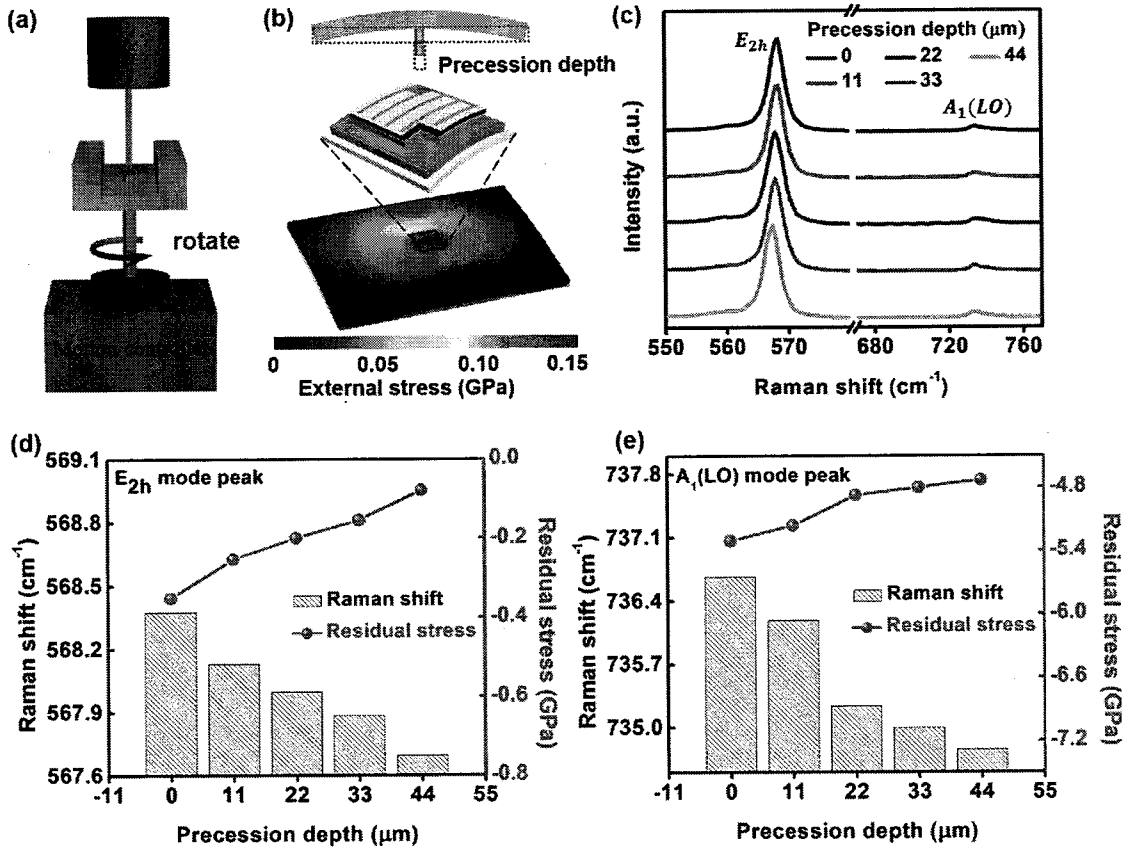


图 4.4 (a) 拉曼光谱测试的示意图; (b) 通过 COMSOL 计算由施加的应力诱发的样品的应力分布, 外力的大小以进动深度表示; (c) 拉曼位移对外部压力的依赖, 在不同进动深度下, InGaN/GaN MQWs 中残余应力的相对拉曼位移 E_{2h} 声子模式 (d) 和 $A_1(LO)$ 声子模式 (e)。

Figure 4.4 (a) Schematic diagram of the Raman spectroscopy setup. (b) The stress distribution of the sample induced by the applied stress was calculated by COMSOL. The magnitude of external force is expressed in terms of the precession depth. (c) The dependence of Raman shift on external stress. The relative Raman shift E_{2h} phonon mode (d) and $A_1(LO)$ phonon mode (e) of the residual stress in the InGaN/GaN MQWs under different precession depth.

4.3 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池的制备方法与测试手段

4.3.1 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池的制备方法

基于太阳电池的基本原理以及 InGaN/GaN 多量子阱的结构特点, 我们设计了太阳电池的工艺流程, 图 4.5 展示的是 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池制备过

程示意图,采用了五步光刻法,每一步工艺均由光刻、刻蚀和镀膜过程交叉进行,具体操作如下:

第一步:将多量子阱结构的外延片结构进行台面隔离,在同一基底上得到多个隔离开的器件区域。首先清洗样品。利用 PECVD 的方法,在 450 W 功率下, SiH₄、Ar 和 O₂ 的流量分别为 130.5 sccm, 126 sccm 和 13 sccm,反应室温度为 80℃,在 P 型 GaN 层的表面上沉积 1500 nm 的 SiO₂ 层,用于做刻蚀掩膜;然后通过光刻和 ICP 的组合,将 $2 \times 2 \text{ mm}^2$ 的正方形阵列图案转移到多量子阱结构的外延片结构上,实现台面隔离,即在同一基底上得到多个隔离开的器件区域。

第二步:在每个正方形区域中进行刻蚀,刻蚀到 N 型 GaN 层的内部,制作出每个样品的台面区域。首先清洗样品。对上一步骤残留的 SiO₂ 掩膜和量子阱结构进行刻蚀。刻蚀后,将样品浸入 HF 溶液中,以除去残留的 SiO₂ 掩模。

第三步:在刻蚀后暴露的 N 型 GaN 层上表面制作 N 型电极。首先清洗样品。采用光刻在刻蚀后暴露的 N 型 GaN 层表面制作环形图案,然后用电子束蒸发沉积 Ti/Al/Ti/Au (300 Å/1200 Å /450 Å /550 Å) 多层金属,然后在 N₂ 氛围中 850℃退火 30 秒[133]。

第四步:在 P 型 GaN 表面覆盖电流扩展层。首先清洗样品。在 P-GaN 表面光刻制作出图案后,通过 RF 磁控溅射 ITO 层[39],然后在 550℃的空气中退火 10 分钟。

第五步:在电流扩展层上制作 P 型电极。首先清洗样品。通过光刻将指状的图形转移到 ITO 表面,将 Ni/Au (30 nm/150 nm) 溅射到样品表面作为 P 型电极。

按照上述步骤,阵列式分布的器件就呈现在外延片上。在后续的处理工序中,可以通过裂片使得器件相互分离,然后各自封装。

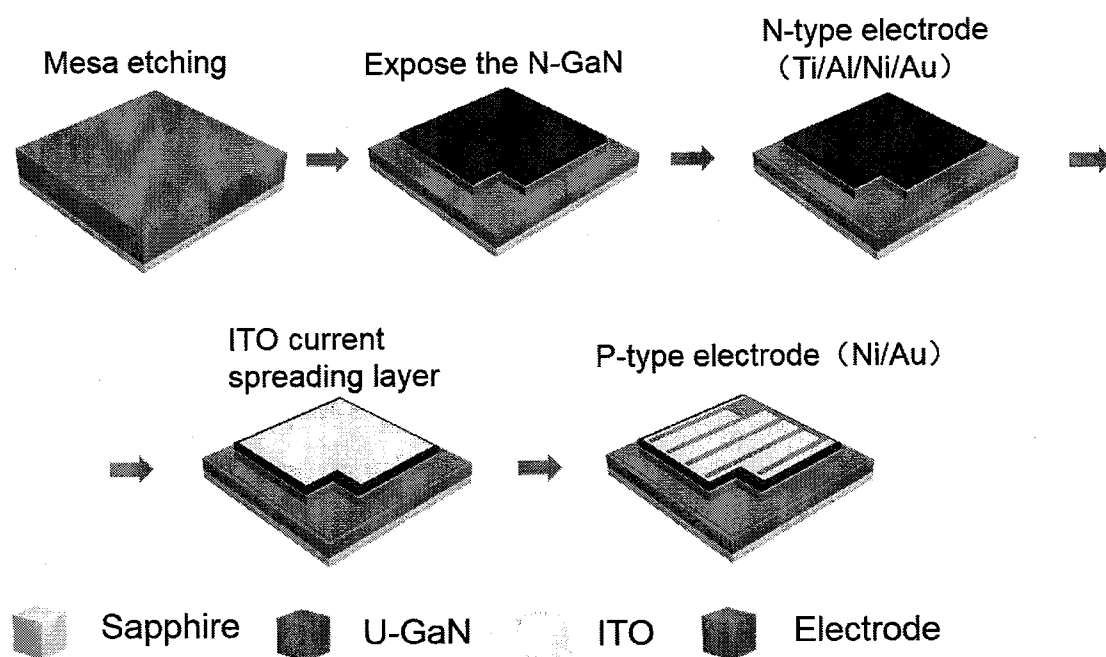


图 4.5 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池制备过程示意图

Figure 4.5 Schematic diagram of preparation of InGaN/GaN MQW solar cells.

太阳电池制作过程中样品表面的形貌通过扫描电镜照片被记录了下来,如图 4.6 所示。图 1.6 (a) - (d) 分别对应每一步工艺结束后器件的正视图, (e) - (h) 是相应的截面图。多量子阱外延片经过第一步工艺之后,刻蚀的台面高度为 5 微米,从 4.6 (e) 图可看出,已经刻蚀到了图形衬底。第二步刻蚀到 N 型 GaN 表面,实际刻蚀深度与预期相同,近似为 $1\text{ }\mu\text{m}$,如图 4.6 (f) 所示。溅射导电的氧化铟锡在 P-GaN 表面作为电流扩展层,是因为它在可见光谱区域具有高透明度并且其良好的导电性便于收集电流。在 ITO 上沉积指状电极 (Ni/Au),如图 4.6 (d) 所示这些设计可以有效降低结构的接触电阻或寄生电阻,这导致载流子收集的增强并获得高的填充因子 (FF)。

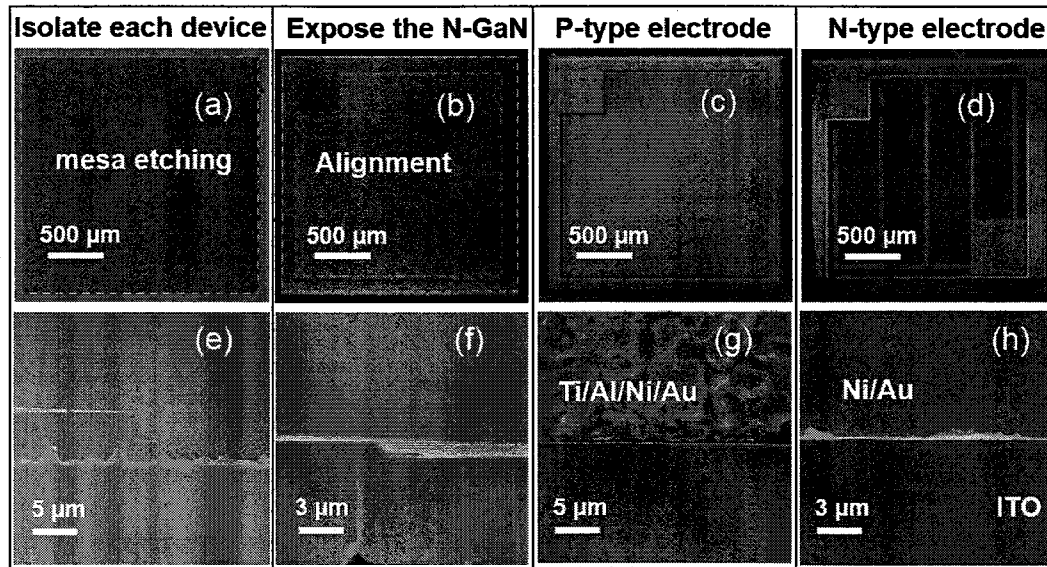


图 4.6 (a-d) 显示出了具有 $2 \times 2 \text{ mm}^2$ 的太阳能电池的制造过程的 SEM 图像；(e) 和 (f) 分别对应 (a) (b) 中由 ICP 蚀刻的实际器件的横截面视图，垂直深度分别为 5 和 1 微米。(g) 和 (h) 分别对应 (c) (d) 图中电极的 SEM 图。

Figure 4.6 (a-d) SEM images illustrating the fabrication process of the solar cell with $2 \times 2 \text{ mm}^2$ mesa size. (e, f) The cross-sectional view of the actual device etched by ICP in (a) and (b), the vertical depth is 5 μm and 1 μm , respectively. (g, h) Partial top views of the electrodes in (c) and (d), respectively.

4.3.2 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池的测试

HRXRD 测量使用的是 Bruker D8 discover 高分辨 X 射线衍射仪系统。用日立 SU8020 场发射扫描电子显微镜 (FESEM) 表征微观结构。在室温下用拉曼光谱仪 (LabRam HR Evolution) 进行拉曼测量，激光的发射波长为 532nm，光斑尺寸为 1 μm 。使用微探针台，具有 AM1.5G 光谱分布的太阳模拟器 (PT-SUN2S 型，Pharos Technology) 太阳能电池进行照射并同时用吉时利 2450 源表测量器件的电流-电压特性。该太阳能电池测试系统利用标准硅太阳能电池进行校准，以准确地输出 1 个太阳光强度 (100 mW/cm^2)。

4.4 压电电子学效应调制 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池

4.4.1 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池的性能分析

图 4.7 显示的是 InGaN/GaN MQWs 太阳能电池在光照下内部载流子分布示意图。当太阳光照射到样品表面, 电子就从 P 型 GaN 经 MQWs 区域流向 N 型 GaN, 同时空穴向 P 型 GaN 移动, 器件连接外部电路时, 就会驱动外部电路工作。这就是 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池的基本工作过程。

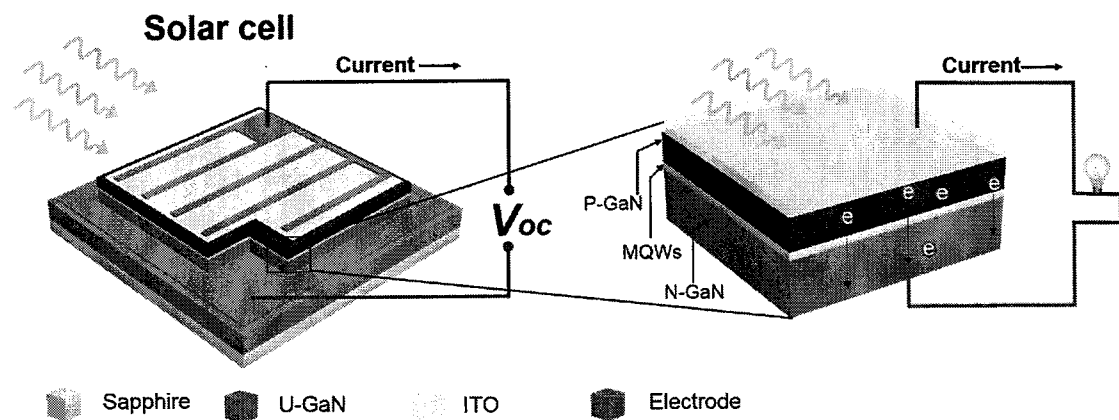


图 4.7 InGaN/GaN MQW 太阳能电池在光照下内部载流子分布示意图。

Figure 4.7 Internal carrier distribution of the InGaN/GaN MQW solar cell under light irradiation.

InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池的开路电压由带隙较宽的势垒材料决定, 而短路电流主要取决于量子阱的宽度和数量[134]。太阳电池器件特性对光照强度的依赖性如图 4.8 (a) (b) 所示, 从图中可以看出, 随着光照强度从 0 增加到 100 mW/cm^2 , 开路电压基本不变, 短路电流密度呈线性增加, 功率密度也呈增加的趋势。具体来说, 在 100 mW/cm^2 光照强度下, 测量得到器件的转换效率为 1.12%, 短路电流密度 $J_{\text{sc}} = 1.05 \text{ mA/cm}^2$, 开路电压 $V_{\text{oc}} = 1.9 \text{ V}$, 填充因子 $\text{FF} = 0.57$ 。为了更明确地说明这种依赖关系, 太阳能电池的各项性能被绘制为光照强度的函数, 如图 4.8 (c) (d)。短路电流 J_{sc} 表现出近似线性的强度依赖性, 这是因为光电流在此区域与光子通量或载流子生成速率成正比, 具有恒定的少数载流子寿命。而开路电压 V_{oc} 随着强度的增加而基本不变, 这是由于为 InGaN 材料的带隙和电极的质量决定了器件的 V_{oc} 。填充因子 FF 在光照强度为 19 mW/cm^2

时为 0.52, 并且随着光照强度的增加而略微增加, 在 100 mW/cm^2 时增加到 0.60。由于太阳能电池的功率转换效率可用公式表示为 $\eta = V_{OC} \times J_{SC} \times FF / P$, 其中 P 是每单位面积的辐射强度。如图 4.8 (d) 所示, 随着照度从 0.8% 增加到 1.12%, η 略微增加, 这表明在高光照强度下产生更多的光生载流子。

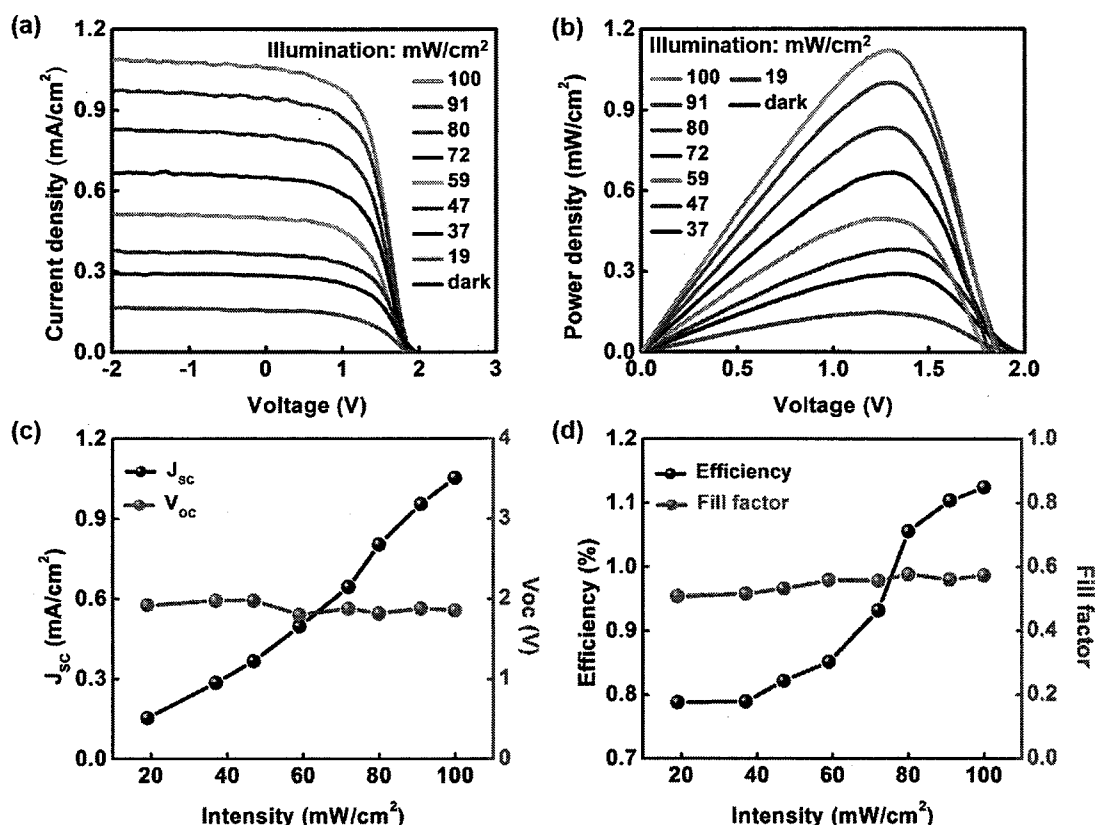


图 4.8 (a) 不同光照强度下太阳能电池的 J-V 特性; (b) 不同强度下太阳能电池的 P-V 特性; (c) 太阳电池的 J_{SC} 和 V_{OC} 对光照强度的依赖关系; (d) 器件的太阳能转换效率 (η) 和填充因子 (FF) 对光照强度的依赖关系。

Figure 4.8 (a) J-V characteristics of InGaN/GaN MQWs solar cell under different illumination intensities at 300 K. (b) P-V characteristics of the solar cell under different illumination intensities. (c) The J_{SC} and the V_{OC} of the solar cell as a function of illumination intensities. (d) The conversion efficiency (η) and the fill factor (FF) of the devices as a function of illumination intensities.

4.4.2 压电光电子学效应增强 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池

太阳电池对于实际的工业应用具有非常重要的意义, 为提高太阳电池的转换效率, 我们研究了压电光电子学对于 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池性能的影响,

太阳能电池在不同的外加应变下的 J-V 特性和 P-V 特性, 在 100 mW/cm^2 光照强度下测量, 测量结果如图 4.9 所示。这里, 我们给出了太阳电池器件在外部应力下的弯曲示意图, 当在器件底部施加压缩应变时, 量子阱中 InGaN 和 GaN 层也将受到不同程度的压缩; 同样, 样品若是被拉伸, InGaN 和 GaN 层也将遭受拉伸应变。随着外部施加的应变增加, 太阳能电池的电流密度增加。图 4.9 (b) 显示了器件在不同应变下的 P-V 曲线, 最大功率点的对应的电压基本不变, 而功率随外部应变从 0.000% 增加到 0.134% 而增加。为了更清楚地研究由压电光电子学效应调制的 J_{sc} , V_{oc} , FF 的变化, 我们提取不用应变下的器件性能参并绘制出对外加应变的依赖性, 如图 4.9 (c) (d) 所示。太阳能电池的开路电压 (V_{oc}) 在不同的外部应变下几乎相同, 这是因为压电电荷被限制在界面处而不会改变太阳能电池的准费米能级分裂。但 J_{sc} 从 1.05 mA/cm^2 提高到 1.17 mA/cm^2 , 我们推断这可能与外加应变增强的光吸收有关。人们花费很大力气优化 MOCVD 外延技术, 以生长出 In 含量更高, 量子阱更多的高质量 InGaN/GaN MQW。但是, 当量子阱数量大于 40 时, 转换效率增加困难甚至减小到 0.78%。此外, 高 In 含量 ($\text{In}_{0.28}\text{Ga}_{0.72}\text{N}$) MQW 太阳能电池的转换效率低于 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ MQW 太阳能电池的效率。而在我们的实验中, 尽管填充因子(FF)在外部应变的调制作用下从 0.573 降低到 0.567, InGaN/GaN MQW 太阳能电池的最大转换效率却从 1.12% 增加至 1.24%, 增加了 11%。如图 4.9 (d) 所示。也就是说, 太阳能电池器件的性能可以通过对器件施加外部应力有效地增强, 显示出压电电子学效应在量子阱太阳能电池领域中巨大的应用潜力。当外应变超过 0.117% 时, 效率开始略有下降, 这可能是由于晶体内部的晶格散射。这些变化趋势与压电光电子学模型的预期是一致的。因此, 我们的研究内容表明压电光子效应调制技术是一种非常简单高效的技术, 在 InGaN/GaN MQWs 太阳能电池的研究领域具有巨大潜力。

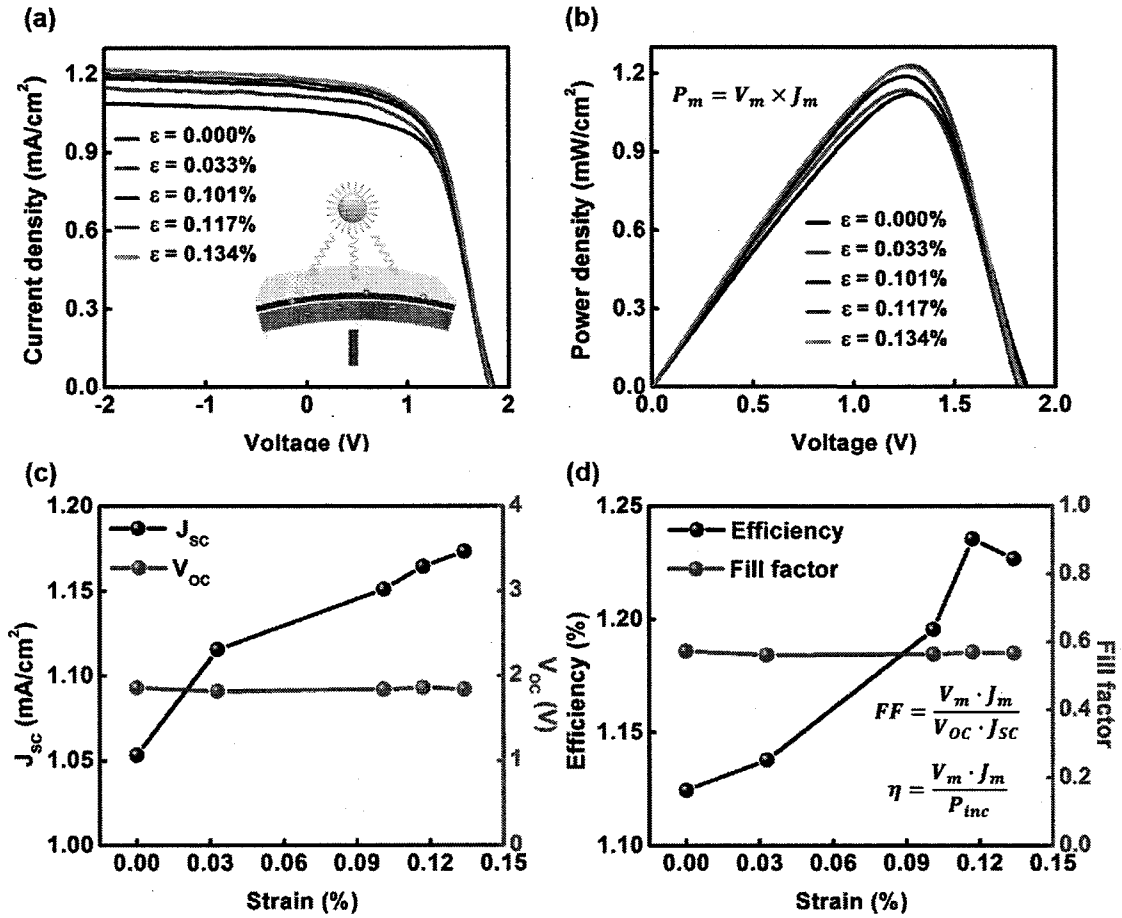


图 4.9 不同外加应变下 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池的性能。(a) 在不同的外加应变下，AM 1.5G 下的 InGaN/GaN MQWs 太阳能电池的 J-V 特性；(b) 太阳能电池在不同外加应变下的 P-V 特性；(c) 短路电流密度和开路电压对外加应变的依赖关系；(d) 太阳能转换效率 (η) 和填充因子 (FF) 对外加应变的依赖关系。

Figure 4.9 Performances of the solar cell with various external applied strains. (a) J-V characteristics of InGaN/GaN MQWs solar cell under AM 1.5G illumination at different external applied strains. (b) P-V characteristics of the solar cell at different external applied strains. (c) External strains dependence of the J_{sc} and the V_{oc} . (d) External strains dependence of the solar energy conversion efficiency (η) and the fill factor (FF).

4.5 压电电子学效应增强 InGaN/GaN MQW 太阳电池的机制

4.5.1 压电电子学效应增强太阳电池效率的定性解释

压电光电子学效应为改善 InGaN/GaN MQW 太阳能电池的转换效率提供了

解决方案，其机制如下所述。为了系统说明压电光电子学效应对 InGaN/GaN MQW 太阳能电池的影响作用，图 4.10 显示了有/无外加应力时材料多量子阱能带结构的不同和光生载流子数量的不同。当在 InGaN/GaN 多量子阱上施加外部应力时，外部应力引起的压电电荷将在势垒和阱的界面处产生。这些电荷部分地补偿了 InGaN 阱内部应力引起的电势差[61, 135]，InGaN 层中有效禁带宽度增加，从而使得量子阱对光的吸收发生变化；另外，这种补偿效应会使得量子阱的能带结构趋于平缓，阱中有效的电子空穴对数量增加，对光的吸收增强，因此，InGaN/GaN MQW 太阳能电池的能量转换效率在有外加应力时比无外加应力时高。

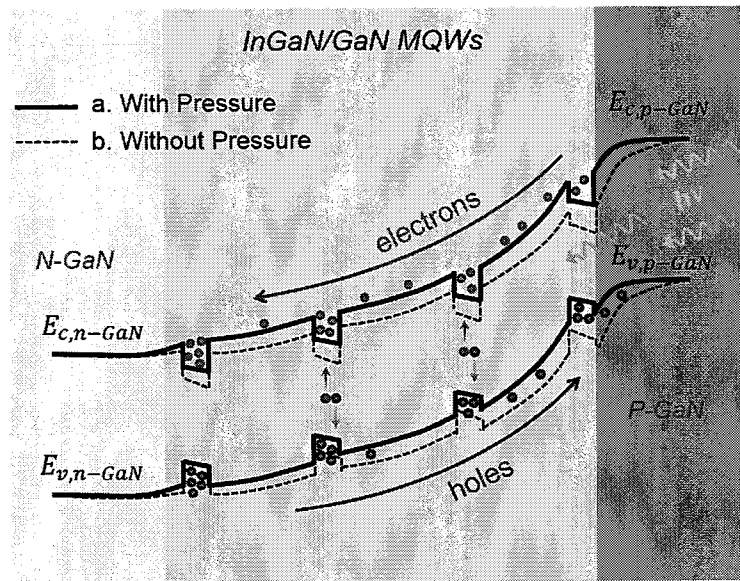


图 4.10 由压电光电子学效应调制的 InGaN/GaN MQW 太阳能电池的工作机制，虚线和实线分别指的是有外加应变和无外加应变下 InGaN/GaN MQW 结构的能带示意图。

Figure 4.10 Mechanism of the InGaN/GaN MQWs solar cell modulated by piezo-phototronic effect. The dashed line and solid line indicated schematic band diagram of the InGaN/GaN MQWs structure with and without strain/pressure, respectively.

4.5.2 基于有限元的数值计算分析

为了量化评估 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池中的压电光子效应，基于第一章所述的压电太阳能电池的基本理论，我们建立了一个自洽的数值模型来计算 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池的能带结构和跃迁速率。在无应变和应变条件

下, GaN/InGaN/GaN 异质结构的能带图如图 4.11 (a) 所示, 每个界面处价带和导带随外加应变的变化如图 4.11 (b) 和 (c) 所示。很明显, 随着外部应变的增加, GaN/InGaN 异质结界面的 E_v 降低, 而 InGaN/GaN 异质结界面的 E_c 向上倾斜。对于量子阱结构, 量子势垒与阱之间的晶格失配引起的应力部分地由外部应力补偿。此外, 图 4.11 (d) 和 (e) 绘制了有和没有应变时量子阱结构的电子和空穴波函数分布, 插图显示的是峰值的位置和大小随外加应力的变化情况, 清楚地表明在外加应变作用下电子和空穴波函数彼此朝着对方移动, 并且外加的应变越大, 移动量越大。光吸收系数与电子-空穴波函数的空间重叠平方 $I_{e-h,n}$ ($n=0, 1, 2, 3, 4$) 成正比, $n=0$ 对应于无应变下的器件, 而 1-4 是对应于不同外应变条件下的器件。图 4.11 (f) 中提取不同应变下计算得到的 $I_{e-h,n}$ 相对于 $I_{e-h,0}$ 的归一化数值随外加应变的变化情况, 图中可以看出波函数的空间重叠随着应变的增加而增加。同时, 给出了实验测得的 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池 η_n/η_0 ($n=0, 1, 2, 3, 4$) 的转换效率随外加应变的相对变化, 这与电子-空穴波函数空间重叠的计算结果一致。这表明 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池的转换效率可以通过压电光子效应来提高。

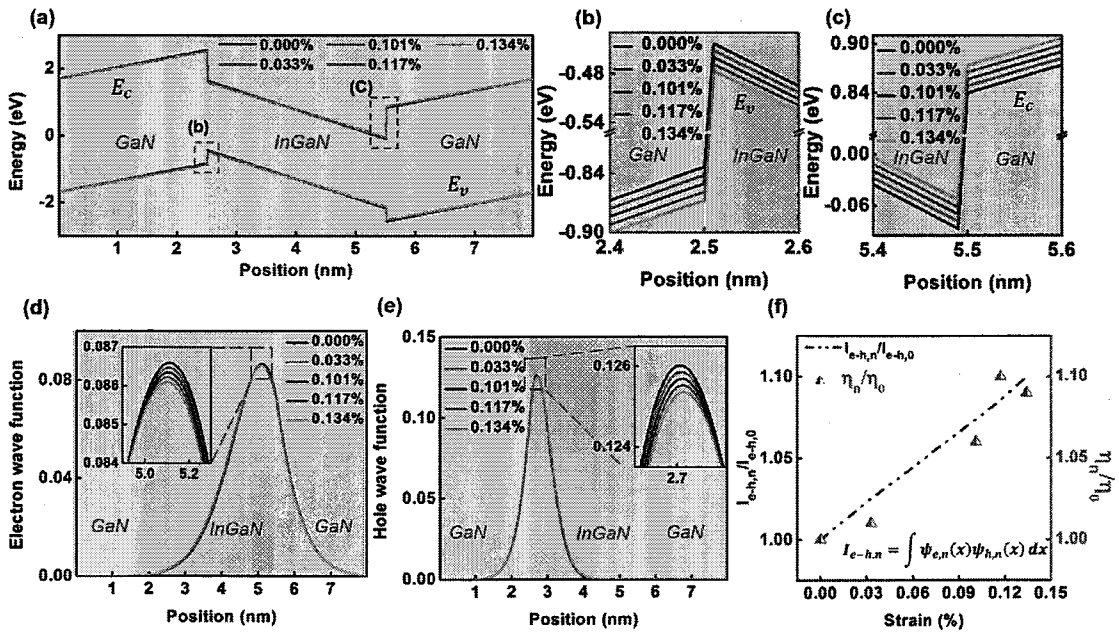


图 4.11 (a) 在无应变和各种应变条件下计算的 GaN/InGaN/GaN 异质结构的能带分布; (b) 在 (a) 中用矩形虚线框标出的 GaN/InGaN 异质结界面处的价带 E_v ; (c) 在 (a) 中用矩形标出的在 InGaN/GaN 异质结界面处的导带 E_c ; (d) 不同的外加应变情况下量子阱中电子波函

数的空间分布,插图显示的是波函数的峰值随外加应力的变化;(e)不同的外加应变情况下量子阱中空穴波函数的空间分布,插图显示的是波函数的峰值随外加应力的变化;(f)无应变和各种应变条件下电子-空穴波函数的空间重叠平方的归一化和太阳能电池的归一化转换效率的匹配情况。

Figure 4.11 (a) Calculated energy band profiles of GaN/InGaN/GaN heterostructure from top to bottom under strain free and various straining conditions. (b) The enlarged E_v at GaN/InGaN heterojunction interface as labeled in (a) with green rectangle. (c) The enlarged E_c at InGaN/GaN heterojunction interface as labeled in (a) with red rectangle. (d) The electron wave function distribution with and without strain (dark line), and the inset show the shifting peak position. (e) The hole wave function distribution with and without strain (dark line), and the inset show the shifting peak position. (f) The normalized square of spatial overlap of electron-hole wave functions and the normalized experimental conversion efficiency of the solar cell under strain free and various straining conditions.

4.6 本章小结

总之,本章使用五步光刻法制作了阵列式 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池,通过刻蚀方法,使得 P 电极和 N 电极完全隔离开。利用压电光电子学效应,太阳能电池的转换效率得到提高。外加应变在一定范围内时,太阳能电池效率随外加应力的增加而相应增加,并且在 0.134% 的外加应变下,太阳能电池的最大转换效率提高了 11%,短路电流从 1.05 mA/cm^2 增加到 1.17 mA/cm^2 。我们还提出了一个自洽的数值模型来压电光电子学增强太阳电池效率的物理机制进行了解释,理论模拟的到的结果与实验测量结果匹配度很高。这项研究不仅增加了压电光电子学效应提高太阳电池转换效率的理解,而且为改善 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池的性能提供了一个科学和便利的方案,并有望最大限度地利用太阳能。

第五章 总结与展望

5.1 主要结论

本论文主要研究了压电效应调制的 GaN 基的半导体器件, 利用各种微纳加工工艺制备了 GaN 基器件, 结合材料表征、电学测试系统、光学测试系统、光伏测试技术、应力表征技术等对器件性能进行研究。基于压电电子/光电子学原理, 通过外部应力对器件的性能进行了调制, 实现了压电电子学和压电光电子学在 GaN 基半导体器件中的应用。根据量子力学中的微扰理论, 解释了压电效应对异质结界面载流子输运的调制作用, 将二阶非线性压电效应引入完整器件模型, 进一步解释了复杂的外应力与晶格失配内应力极化电场相互补偿或增强机制。研究获得的主要结论如下:

1 压电电子学效应调制 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管

我们在实验上和理论上证明了压电电子学效应对 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管的调制作用。栅极电压为-1V 时, 在 15N 外加压力下, 饱和电流增加约 21%。薛定谔方程和泊松方程的自洽耦合解显示, 这种饱和电流的增加是由于压应力作用下 AlGaIn/GaN 异质结界面处的三角形势阱加深, 导致 2DEG 密度的增加。将经过压电效应调制的二维电子气密度放入经典器件方程中, 计算得到的源漏极电流图与实验结果吻合较好。这项研究很好地揭示了压电极化效应与 2DEG 起源之间的因果关系, 为器件的性能增强提供了一个可行的解决方案。这种增强器件性能的方法将在许多实际应用中发挥重要作用, 例如改进触摸灵敏度的人机界面, 基于 HEMT 的传感器和安全控制电源系统等等。

2 压电光电子学在 LED 可见光通讯中的应用

我们设计了一种基于双波长 InGaIn/GaN MQW 纳米柱结构的压电光电子学效应调制的可见光通讯系统。该系统通过外力调节器件的发光强度的变化, 实现了应力编码技术。与传统的可见光通信相比, 应力编码技术的双通道模式的优势

在于误码自甄别/消除,能够同时实现多通道信息的准确传输,保证了传递信息的准确性。作为一种低成本、安全和环保的无线通讯技术,PVLC 系统将在高速连接、室内定位、联网玩具和灯光网络、人体传感器、私人网络和室外广告等领域具有非常广阔的应用前景。

3 压电光电子学效应增强 InGaN/GaN 多量子阱太阳电池

采用 MOCVD 外延工艺和 TOP-DOWN 微纳加工工艺,研制了性能优异的 InGaN/GaN 多量子阱太阳能电池。在标准测试条件(1.5 AM)下,该太阳能电池的转换效率为 1.12%。由于氮化物材料的抗辐射性能好,带宽范围大且连续可调,因此,氮化物太阳能电池能够在太空领域有很好的应用前景。首次采用外加应力部分补偿晶格失配引起的内应力,抑制电子-空穴对空间分离,从而提高太阳能电池转换效率。并依据压电光电子学基本理论,结合光伏测试技术、应力表征技术,定量验证了该物理机制。在优化了的外部应力条件下,太阳电池的光电转化效率提高到了 1.24%,相对增强了 11%。这项技术为进一步提高的氮化物太阳能电池的转化效率,最大限度地利用太阳能,清洁能源开发等提供了新的思路。

5.2 有待进一步开展的工作

1. 由于能源短缺的威胁是世界范围内的重大挑战之一,提高太阳能电池的功率转换效率仍然是能源领域中非常重要的问题。通过等离子体增强太阳电池效率也已成为近几年的研究热点,因此,研究表面等离子体与压电效应的耦合作用对 GaN 基太阳电池器件的影响是我们未来的研究方向之一。

2. 在我们目前的研究工作中,压电效应主要是通过外部施加应力对器件进行调节,且器件性能均获得了改善,从而验证了压电电子学和压电光电子学对 GaN 基器件的调制作用。但是,目前我们的研究都是基于蓝宝石基的 GaN 材料,样品本身可以承受的应力有限,因此,如何将硬质基底上的 GaN 材料剥离,并制备 GaN 基的柔性器件是我们必须解决的问题。

附录

HFET	异质结场效应晶体管
HBT	异质结双极晶体管
BJT	双极结型晶体管
MOSFET	金属氧化物半导体场效应晶体管
HEMT	高电子迁移率晶体管
LED	发光二极管
EQE	外量子效率
SSL	固态照明
MOCVD	金属有机化合物化学气相沉淀
CSL	电流扩展层
ITO	氧化铟锡
HG	水热法
SMAG	连续微波辅助生长
TFT	薄膜晶体管
PL	光致发光
EL	电致发光
PMMA	聚甲基丙烯酸甲酯
QDSC	量子点太阳能电池
RF	射频
PVLC	压电光电子学效应调制双通道可见光通信
VLC	可见光通信技术
MQW	多量子阱
2DEG	二维电子气
PPMS	综合物性测量系统
BER	误码率

CMOS	互补金属氧化物半导体
MEMS	微机电系统
LCD	液晶显示
SNR	信噪比
FF	填充因子
FESEM	场发射扫描电子显微镜
HRXRD	高分辨 X 射线衍射仪
J_{sc}	短路电流
V_{oc}	开路电压
