

# InP 基 HEMT 器件中二维电子气浓度及分布 与沟道层厚度关系的理论分析

李东临 曾一平

(中国科学院半导体研究所材料中心, 北京 100083)  
(2005 年 11 月 25 日收到 2006 年 2 月 14 日收到修改稿)

利用数值计算的方法研究了 InP 基高电子迁移率晶体管 (HEMT) 中沟道厚度对沟道中二维电子气 (2DEG) 性质的影响, 并对产生这种影响的原因进行了深入探讨. 计算结果表明, 当沟道层厚度从 10nm 增加到 40nm 时, 沟道中 2DEG 的密度几乎没有变化, 但激发态和基态上的电子密度之比 ( $R$ ) 先增加后减小. 当沟道层厚度在 20—25nm 之间时,  $R$  达到最大. 此结果可作为优化器件结构设计的依据.

关键词: HEMT, 异质结, 二维电子气, 自洽计算

PACC: 7360L, 0200

## 1. 引 言

高电子迁移率晶体管 (HEMT) 具有优异的输运特性, 从而使其在高频、低噪声方面的应用中表现了优越的性能, 促使人们对其进行了长期的研究<sup>[1-5]</sup>. 而如何最大限度地提高器件中二维电子气 (2DEG) 的浓度和迁移率一直是器件研究中的一个重要内容. InP 基 HEMT 在这两方面具有其他材料无法比拟的优势, 它具有更大的异质结导带偏移量、更小的电子有效质量和室温下更高的电子饱和速度<sup>[6-9]</sup>, 成为目前制作超高速器件的优先选择.

长期以来, 人们在实验上做了大量工作, 从经验角度探索合适的材料结构尺寸, 包括势垒区和沟道层的厚度大小, 以提高器件 2DEG 的浓度和迁移率<sup>[10]</sup>. 2DEG 的浓度主要受异质结材料的导带偏移量 ( $\Delta E_c$ ) 和杂质掺杂浓度以及电子转移效率的影响, 在材料确定的情况下,  $\Delta E_c$  也是确定的, 只有通过改变掺杂浓度和提高转移效率来提高 2DEG 浓度. 转移效率与空间隔离层和掺杂势垒层厚度有直接的关系, 而掺杂浓度的提高必须以不出现平行电导为限. 已经有人研究过这些参数之间的关系<sup>[11]</sup>. 但是沟道层厚度与 2DEG 密度和分布的关系迄今并无详细的理论研究, 其对于迁移率性能的提高可能有着潜在的影响. 根据近来迁移率谱的研究结果<sup>[12, 13]</sup>, 电子在第二子能级上的迁移率远大于第一

子能级上的迁移率. 如果能够提高第二子能级上的电子数, 将可以有效提高电子迁移率, 进而提高器件性能. 而沟道层厚度对电子在不同子能级之间的分布有一定关系, 迄今尚无人揭示.

本文利用数值计算方法研究了不同沟道宽度情况下的 2DEG 面密度, 计算了沟道中的电子子能级以及电子在不同子能级上的分布情况. 提出了通过改变沟道层厚度来控制电子在激发态和基态上密度比的方法, 为器件结构优化, 制作迁移率更高、性能更优良的 HEMT 材料和器件提供了一种新的设计方案.

## 2. 器件结构及理论分析模型

InP 基 HEMT 器件的材料结构包括 InP 衬底上的 InAlAs 缓冲层、InGaAs 沟道层、InAlAs 材料的空间隔离层、InAlAs 掺杂势垒层以及制作在势垒层上的 Schottky 接触. 结构如图 1. InGaAs 材料的禁带宽度小于 InAlAs 材料的禁带宽度, 并且由于沟道的尺寸很小 (约几十纳米的量级), 使得材料中形成量子阱的结构, 电子在沟道中做二维运动.

由于 Schottky 势垒和异质结的存在, 掺杂势垒区被完全耗尽, 杂质电离后的电子分别转移到 Schottky 接触的金属层和异质结的窄禁带半导体中. 势垒层电势分布满足 Poisson 方程

$$\frac{d^2 U(z)}{dz^2} = \frac{1}{\epsilon_r \epsilon_0} N_d(z), \quad (1)$$

式中  $N_d(z)$  为掺杂杂质浓度,  $\epsilon_r$  为 InAlAs 的介电常数,  $z$  为材料的生长方向,  $U(z)$  为势垒层中电势分布.

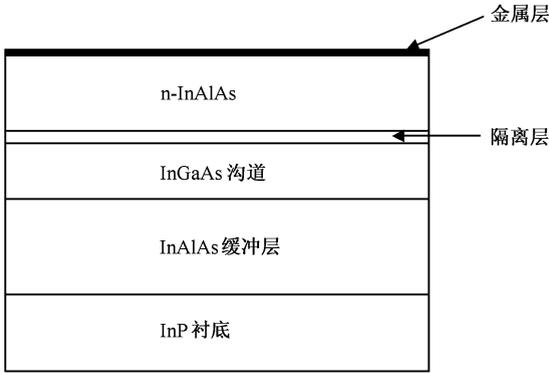


图 1 HEMT 器件剖面图

因此可以将耗尽区分为两部分,一部分为 Schottky 的耗尽区,另一部分为异质结的耗尽区.如图 2 所示, I 区和 II 区分别表示这两个耗尽区.  $d_i$  为掺杂势垒层的总厚度,  $w$  为异质结耗尽宽度,则  $(d_i - w)$  即为 Schottky 的耗尽宽度.转移到沟道中的电子形成二维电子气,其面密度应该等于异质结耗尽宽度与杂质掺杂浓度的乘积:

$$n_s = N_d \cdot w. \quad (2)$$

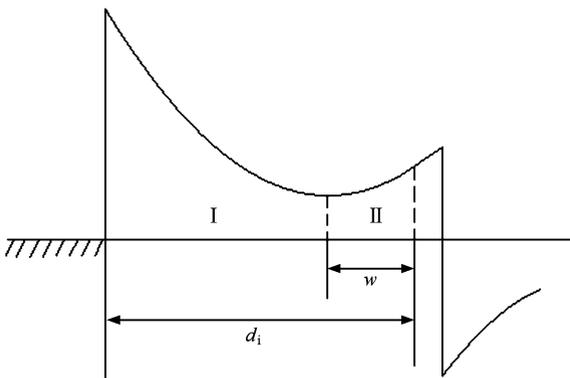


图 2 势垒区 Schottky 和异质结耗尽的示意图

沟道中二维电子气的态密度是个与能量无关的常数,为

$$D_i = \begin{cases} \frac{m^*}{\pi \hbar^2}, & E \geq E_i, \\ 0, & E < 0, \end{cases} \quad (3)$$

式中  $E_i$  代表势阱中第  $i$  个子能级.

电子在势阱中的分布状态满足 Fermi-Dirac 分布,第  $i$  个子能带中的电子面密度为

$$n_i = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right]. \quad (4)$$

总的电子面密度为

$$n_s = \sum_i n_i.$$

从(4)式可知,每个子能级上的电子数与该子能级和 Fermi 能级的相对位置有关,低于 Fermi 能级时,电子填充较多.而高于 Fermi 能级,则占据该子能级的电子数迅速减少.由于整个器件要有统一的 Fermi 能级, Fermi 能级的位置应由金属的 Fermi 能级确定.与半导体相比,金属容纳电子的能力可以认为是无限的,其 Fermi 能级的位置不随电子数的增加而改变.势阱中电子子能级  $E_i$  的位置与势阱的尺寸和阱底的形状密切相关.对于一定的 HEMT 结构,势阱宽度是确定的.阱底的形状则受阱中电子分布的影响,而阱底的形状又会反过来影响子能级的位置,进而影响电子的分布.通过自洽计算能够同时得到这些参数<sup>[14]</sup>.

势阱中电子波函数和子能级的位置可通过解 Schrödinger 方程得到,

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{d^2}{dz^2} + U(z) \right) \Psi_i = E_i \Psi_i, \quad (5)$$

其中势能  $U(z)$  由两部分组成:  $U(z) = U_b(z) + U_H(z)$ .  $U_b(z)$ ,  $U_H(z)$  分别是带边势和自洽势.电子密度空间分布函数  $n(z)$  与波函数的关系为

$$n(z) = \sum_i n_i |\Psi_i(z)|^2. \quad (6)$$

由电荷分布得电势分布可通过解 Poisson 方程得到,

$$\frac{d}{dz} \left[ \epsilon(z) \frac{d}{dz} U_H(z) \right] = \frac{e^2}{\epsilon_0} [N_d(z) - n(z)], \quad (7)$$

式中  $\epsilon(z)$  是与位置有关的介电常数,  $N_d(z)$  为电离施主的体电荷密度.

由于势阱为有限深势阱,界面处电子波函数不为零,将会有一部分波函数穿过阱壁进入势垒层.波函数在势垒层中呈指数衰减,并迅速趋近于零.因此在计算 2DEG 性质时不应仅局限于沟道部分,应包括势垒层在内.

通过对 Schrödinger 方程和 Poisson 方程的自洽计算可以得到导带带边的形状、电子的空间分布以及电子在不同子能级上的分布.对于这两个方程的求解只能应用数值计算的方法得到数值解,不能得到一个解析的表达式.

对于 Schrödinger 方程的处理采用有限差分法, 将方程离散化, 变为

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{p^2} \left[ \left( \frac{1}{m^*(z_{j-1}) + m^*(z_j)} \right) \Psi_i(z_{j-1}) \right. \\
 & - \left. \left( \frac{1}{m^*(z_{j-1}) + m^*(z_j)} + \frac{1}{m^*(z_j) + m^*(z_{j+1})} \right) \right. \\
 & \times \Psi_i(z_j) + \left. \left. \left( \frac{1}{m^*(z_j) + m^*(z_{j+1})} \right) \Psi_i(z_{j+1}) \right] \right. \\
 & + U(z_j) \cdot \Psi_i(z_j) = E_i \cdot \Psi_i(z_j), \\
 & 0 \leq j \leq M+1, \quad (8)
 \end{aligned}$$

边界条件  $\Psi_i(z_0) = \Psi_i(z_{M+1}) = 0$ .

由于波函数进入势垒层, 计算时所取的边界条件一侧取到 Schottky 界面处, 另一侧取到缓冲层中.

对 Poisson 方程应用四阶 Runge-Kutta 法进行数值计算,

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 U_H}{dz^2} &= \frac{1}{\epsilon_s} [N_d(z) - n(z)], \\
 U_H(0) &= \frac{\Phi_m}{e} \frac{dU_H}{dz} \Big|_{z=0} = -E. \quad (9)
 \end{aligned}$$

与 Schrödinger 方程相对应, 节点的取法和 Schrödinger 方程的步长一致, 而且计算范围也包括势阱和势垒两部分. 为此 Poisson 方程的边界条件取 Schottky 势垒的高度和界面处的电场强度. 由于转移到 Schottky 接触的金属区的电子面密度为  $(N_d \cdot d_i - n_s)$ , 根据 Gauss 定理, 界面处的电场强度为

$$E = \frac{N_d \cdot d_i - n_s}{\epsilon_r \epsilon_0}. \quad (10)$$

Poisson 方程数值解的结果与带边势相加, 得到势函数的修正值  $U(z)$ . 新的势函数取为  $U(z) = \alpha U'(z) + (1 - \alpha)U(z)$ . 将其代入 Schrödinger 方程就可进行第二次迭代计算. 重复上述过程, 每次循环过程中都能得到一个 2DEG 的数值  $n_s$ . 当两次循环中得到的  $n_s$  值的相对误差小于  $10^{-5}$  时, 循环终止.

### 3. 器件中 2DEG 性质的分析与讨论

根据上述理论分析, 可以通过自洽计算首先得到 HEMT 材料的能带图和势阱中的子能级分布. 将材料的各项参数代入, 取肖特基势垒高度  $\Phi_m$  的数值为 0.7 eV, 导带偏移  $\Delta E_C$  的数值为 0.51 eV<sup>[9]</sup>, InAlAs 势垒层和 InGaAs 沟道层中的电子有效质量分别取为  $0.0813m_0$  和  $0.041m_0$ ,  $m_0$  为静止电子质量. 计算得到如图 3 所示的能带和波函数的示意图.

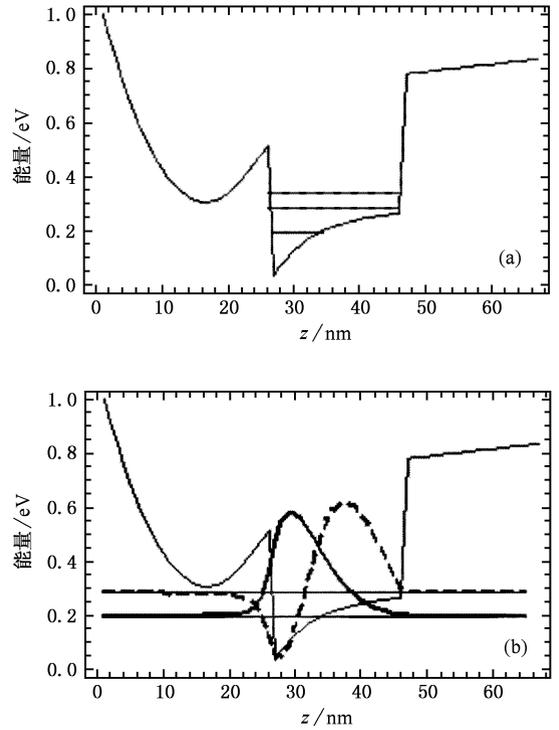


图 3 自洽计算得到的 HEMT 结构中子能级 (a) 和波函数 (b) 的示意图

由于势垒区均匀掺杂, 其能带应呈抛物线型弯曲, 数值计算结果与理论预期符合得很完美, 表明计算时所用理论模型是可靠的. 计算所得 2DEG 面密度数值约为  $2.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , 同文献 [10, 15] 的实验值比较,  $n_s$  数值基本符合, 进一步证明了理论模型和计算结果的可信. 为了比较不同沟道层厚度情况下转移到阱中的电子密度, 我们对从 10nm 到 40nm 的沟道层厚度每隔 5nm 分别进行了数值计算, 得到了同一掺杂情况下 ( $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) 势阱中总的 2DEG 面密度和分别分布在第一、第二、第三子能级上的电子面密度. 所得结果如图 4 所示.

图 4 中  $n_s, n_1, n_2, n_3$  分别表示总的 2DEG 面密度和第一、二、三子能级的电子面密度. 从图中的结果可以看到, 在 10nm—40nm 的范围内, 势阱宽度的变化对总的电子面密度的影响很小, 只在势阱很小 (10nm) 时, 电子面密度有轻微的降低. 从提高沟道中电子浓度的角度看, 增加势阱宽度没有太大意义.

虽然总的电子面密度没有明显变化, 但是分布于第一和第二子能级上的电子数还是有明显改变. 势阱只有 10nm 宽时, 第一子能级上的电子数最多, 15nm 时有所降低, 20nm 后变化趋缓. 在第二子能级上电子数变化又呈相反的趋势, 即阱宽 10nm 时电

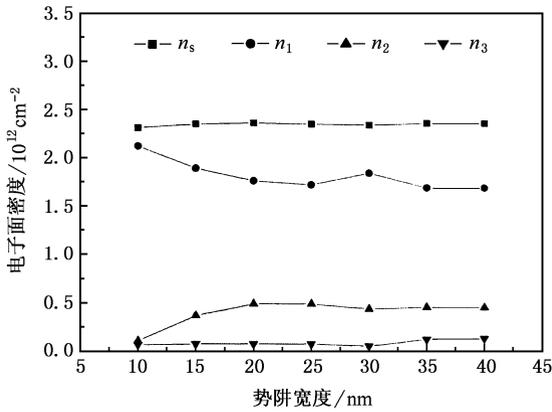


图 4 势阱中总的电子面密度以及各子能级上电子分布随阱宽的变化

子密度最小,其后随阱宽的增加电子密度也在增加.当阱宽在 20—25nm 之间时,第二子能级上电子数达到最大.再往后随着阱宽的增加,第二子能级上电子数开始减小.在图 5 给出了占据第二和第一子能级的电子数相对比值 ( $R$ ) 随阱宽的变化曲线,从中能够更明显地看出这种变化趋势.已经知道<sup>[12,13]</sup>,第二子能级的电子对沟道电子迁移率的贡献要远大于第一子能级的电子,因此增加第二子能级的电子数对于提高器件的电学性能有重要意义.从这个角度考虑,势阱宽度在 20—25nm 之间,器件的迁移率特性应该最好.

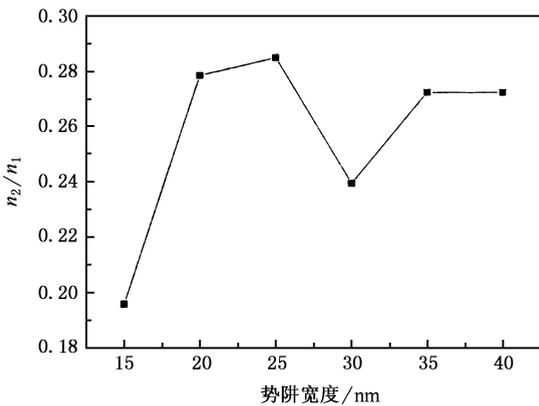


图 5 第二和第一子能级上的电子密度相对比值( $R$ )随阱宽的变化曲线

对于图 4 和图 5 中的现象以及产生的原因可以进行更深入的讨论.首先对沟道宽度为 10nm 的结构做详细分析.

图 6 为杂质掺杂  $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,势阱宽度 10nm 时的能带图.由于势阱很窄,使第二子能级与第一子

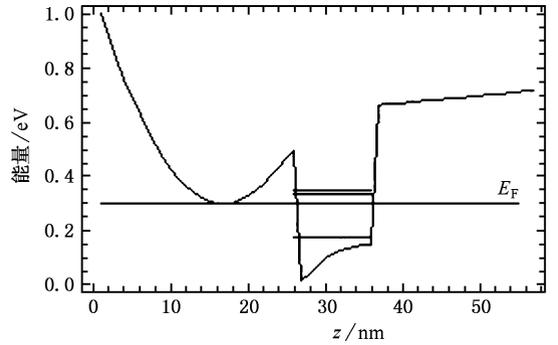


图 6 势阱宽度为 10nm 时计算得到的能级图

能级的位置间隔增大,第二子能级位于 Fermi 能级之上,从而降低了第二子能级的电子数.另外还发现在 10nm 宽度的势阱中,第二子能级已经高于势垒区导带底的最小值,表明位于第二子能级上的电子会导致平行电导的产生,这应是器件制作中必须避免的现象.

当势阱宽度超过 15nm 时第二子能级已经在 Fermi 能级以下,使得位于第二子能级的电子数目迅速增加.第二子能级的位置随阱宽的变化以及与 Fermi 能级的比较见图 7.

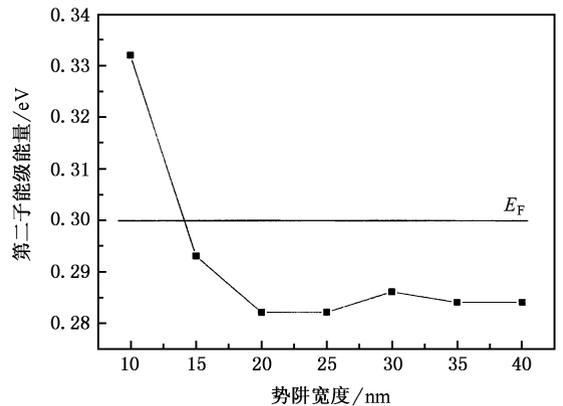


图 7 第二子能级的位置随阱宽的变化(图中长横线为 Fermi 能级)

图 7 中第二子能级的位置变化并不是随阱宽单调变化,图中显示阱宽 20—25nm 时第二子能级位置最低,在其他条件下都要高一些.这是因为阱中电子的存在使得阱底的倾斜影响了能级的位置.若不存在电子电荷的影响,阱底是平的,子能级位置将随阱宽的增加而下降.但由于阱底的倾斜,阱中能级有抬高的趋势,使得阱中能级不再随阱宽的增加而持续下降.阱宽 30nm 时第二子能级位置的提高正是阱底倾斜的结果,此结果带来的一个直接后果就是减

小了它与 Fermi 能级之间的距离,从而降低了占据第二子能级的电子数,造成了图 5 中 30nm 处第二与第一子能级上电子数比值急剧下降的现象.随着阱宽的增加,阱中子能级逐渐进入由于阱底倾斜而形成的三角阱中.阱宽 15nm 时,只有第一子能级进入三角阱.阱宽 25nm 时已有两个子能级进入三角阱.阱宽 35nm 以上时,三个子能级全部进入三角阱,表明继续增加阱宽已毫无意义.

在图 4 中同时列出了势阱中第三子能级上的电子密度,数值很小,几乎可以忽略.从能级位置上来看,在各种沟道厚度的材料中,第三子能级都在势垒层导带底的最小能量之上,因此这一能级的电子是同时存在于势垒层中,并形成了平行电导.从器件应用方面看,第三子能级上电子密度越低,对器件性能提高越有利.而当势阱宽度大于 35nm 时,从计算结果看第三子能级上的电子面密度有增加的趋势.从这一角度看沟道层过厚也不利于提高器件性能.

## 4. 结 论

对 InP 基 HEMT 的器件性能和沟道中 2DEG 的性质进行了详细的理论分析.通过引入数值计算的方法进行定量研究,发现沟道层厚度在 10nm—40nm 之间时,沟道中 2DEG 面密度不随沟道层厚度发生明显变化,表明增加沟道层厚度对提高 2DEG 面密度没有实际意义.但沟道层厚度的变化却对势阱中电子在不同子能级中的分布产生了影响.第二子能级和第一子能级上的电子密度之比( $R$ )先增加后减小.沟道层厚度为 20—25 nm 时电子在第一子能级的分布最少,而在第二子能级上的分布最多.计算得到的第二子能级与 Fermi 能级相对位置的比较也验证了这一结论.根据电子迁移率主要受第二子能级影响的结论,这一厚度应是制作 HEMT 器件的最佳选择.

- 
- [ 1 ] Delagebeaudeuf D , Linh N T 1982 *IEEE Trans Electron Dev.* **29** 955
- [ 2 ] Sen S , Pandey M K , Gupta R S 1999 *IEEE Trans Electron Dev.* **46** 1818
- [ 3 ] Agrawal A , Goswami A , Sen S , Gupta RS 1999 *Microwave Opt Technol Lett.* **23** 312
- [ 4 ] Qiu Z J , Jiang C P , Gui Y S , Shu X Z , Guo S L , Chu J H , Cui L J , Zeng Y P , Zhu Z P , Wang B Q 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2879 ( in Chinese ) [ 仇志军、蒋春萍、桂永胜、疏小舟、郭少令、褚君浩、崔利杰、曾一平、朱战平、王保强 2003 物理学报 **52** 2879 ]
- [ 5 ] Liu H X , Hao Y , Zhang T , Zheng X F , Ma X H . 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 984 ( in Chinese ) [ 刘红侠、郝跃、张涛、郑雪峰、马晓华 2003 物理学报 **52** 984 ]
- [ 6 ] Weslech D F , Wicks G W , Eastman L F 1984 *J. Appl. Phys.* **55** 3176
- [ 7 ] Suemitsu T , Yokoyama H , Umeda Y , Enoki T , Ishi Y 1999 *IEEE Trans Electron Dev.* **46** 1074
- [ 8 ] Nguyen L D , Brown A S , Thompson M A , Jelloian L M 1992 *IEEE Trans Electron Dev.* **39** 2007
- [ 9 ] Vurgaftman I , Meyer J R , Ram-Mohan L R 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 5815
- [ 10 ] Chen Y W , Hsu W C , Hsu R T , Wu Y H , Chen Y J 2004 *Solid-State Electronics* **48** 119
- [ 11 ] Jung M , Kim T W , Lee D U , Choo D C , Yoo K H , Kim D L , Kim M D , Lim H 2001 *Applied Surface Science* **177** 1
- [ 12 ] Gui Y S , Guo S L , Zheng G Z , Chu J H , Fan X H , Qin K , Wang X W 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 1309
- [ 13 ] Zheng Z W , Shen B , Gui Y S *et al* 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 1872
- [ 14 ] Bouzaiene L , Sfaxi L , Sghaieir H , Maaref H 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 8223
- [ 15 ] Ho P , Kao M Y , Chao P C *et al* 1990 *Electronics Letters* **27** 325

# Theoretical analysis about the influence of channel layer thickness on the 2D electron gas and its distribution in InP-based high-electron-mobility transistors

Li Dong-Lin Zeng Yi-Ping

(*Novel Materials Laboratory, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

(Received 25 November 2005; revised manuscript received 14 February 2006)

## Abstract

The principle of high-electron-mobility transistor (HEMT) and the property of two-dimensional electron gas (2DEG) have been analyzed theoretically. The concentration and distribution of 2DEG in various channel layers are calculated by numerical method. Variation of 2DEG concentration in different subband of the quantum well is discussed in detail. Calculated results show that sheet electron concentration of 2DEG in the channel is affected slightly by the thickness of the channel. But the proportion of electrons inhabited in different subbands can be affected by the thickness of the channel. When the size of channel lies between 20—25 nm, the number of electrons occupying the second subband reaches the maximum. This result can be used in parameter design of materials and devices.

**Keywords** : HEMT, heterojunction, two dimensional electron gas, self-consistent calculation

**PACC** : 7360L, 0200