

用逆压电极化模型对 AlGaIn/GaN 高电子迁移率 晶体管电流崩塌现象的研究^{*}

李若凡^{1)†} 杨瑞霞¹⁾ 武一宾²⁾ 张志国²⁾ 许娜颖¹⁾ 马永强^{1)‡B)}

1) 河北工业大学信息工程学院, 天津 300130)

2) 中国电子科技集团公司第十三研究所, 石家庄 050051)

3) 河北工程大学信息与电气工程学院, 邯郸 056038)

(2007 年 7 月 22 日收到, 2007 年 10 月 18 日收到修改稿)

通过自洽求解一维 Poisson-Schrödinger 方程, 模拟了 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管在工作时等效外电场对 AlGaIn/GaN 异质结构道处二维电子气(2DEG)浓度的影响. 分析了逆压电极化效应的作用, 从正-逆压电极化现象出发, 提出了逆压电极化模型. 计算结果显示, 逆压电极化明显影响 2DEG 性质, 当 Al 组分 $x = 0.3$, AlGaIn 层厚度为 20 nm 时, 不考虑逆压电极化, 2DEG 浓度为 $1.53 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$; 当等效外电压分别为 10 和 15 V 时, 2DEG 浓度降低至 $1.04 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 和 $0.789 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. 用该模型解释了 2DEG 退化及电流崩塌现象产生的原因, 并讨论了抑制电流崩塌的办法.

关键词: AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管, Poisson-Schrödinger 方程, 逆压电极化模型, 电流崩塌

PACC: 7280E, 7340L, 7320D

1. 引 言

GaN 是第三代化合物半导体材料的一个代表, 具有较高的击穿电压、电子漂移速度和很强的抗辐射能力, 是制作高温、大功率、高频电子器件的理想材料. 近几年来, III 族氮化物 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管 (HEMT) 已成为当前研究的一个新热点^[1-4]. 随着异质结外延技术的进展, 现今已经可以制备出二维电子气 (2DEG) 性能很好的 AlGaIn/GaN 异质结材料. AlGaIn/GaN 异质结构具有很强的极化效应, 即使未掺杂时, 也可获得高达 10^{13} cm^{-2} 面密度的 2DEG. 尽管如此, 人们对 AlGaIn/GaN 异质结构的认识还不够深入, 存在着诸如 2DEG 退化、电流崩塌现象产生的原因等这类问题, 这都制约了 AlGaIn/GaN HEMT 的发展.

Daumiller 等^[5]提出, 在栅-漏电极之间的势垒层表面堆积电子形成一个虚栅, 虚栅电场降低了沟道中的 2DEG 浓度, 减少了漏电流. 虽然虚栅上的电子充、放电过程仍未有统一的解释, 但虚栅模型却已被

广泛地用来描述电流崩塌效应^[6]. 文献 [5] 指出, 栅极上的电子注入势垒层后传入虚栅, 虚栅的充、放电过程仅仅取决于栅-漏之间的电势差, 与异质结构和沟道状态无关. 然而, Mizutani 等^[7]的研究证实, 只有外加负栅压使沟道夹断, 才有明显的电流崩塌现象, 而且采用不同异质结构制成的器件有着各自不同的电流崩塌现象, 这都无法用同一模型进行解释. Tarakji 等^[8]指出, 金属-氧化物-半导体场效应管的栅电流比 HEMT 栅电流小 4—6 个量级, 但两者的电流崩塌特性却很相似, 这都说明虚栅并不是产生电流崩塌的主要原因.

本文针对典型的 AlGaIn/GaN HEMT 材料结构进行分析, 对由极化诱发产生的 2DEG 进行研究. 通过对 AlGaIn/GaN 异质结构界面处自洽求解一维 Poisson-Schrödinger 方程, 计算了 AlGaIn/GaN HEMT 在工作状态下所存在的逆压电极化效应对 2DEG 浓度的影响, 指出由外电场对材料作用产生的逆压电极化效应是 AlGaIn/GaN 异质结 2DEG 浓度降低的主要原因, 并提出了逆压电极化模型. 用该模型解释了 AlGaIn/GaN HEMT 电流崩塌现象, 并进一步讨论了

^{*} 国家重点基础研究发展规划 (批准号 51327030402) 和天津市自然科学基金 (批准号 07JCZDJ06100) 资助的课题.

[†] E-mail: fantasy-lee@sohu.com

抑制电流崩塌的方法。

2. 2DEG 的形成与极化现象

GaN 和 AlN 通常有稳定的纤锌矿(六方)和亚稳的闪锌矿(立方)两种结构。由于晶体结构各自特有的对称性,形成异质结时晶格失配产生的应力会导致这两种结构的晶体因压电效应而产生极化。文献[9]报道,纤锌矿结构的 GaN 和 AlN 的自发极化强度和压电极化强度比传统的 III-V 族和 II-VI 族化合物高出 10 倍左右,其中 AlN 的自发极化更为显著,是典型铁电材料的 1/3 到 1/5。应变的 AlGaN 层中压电极化电场、自发极化电场分

别可达 2 和 3 MV/cm,可产生较高的界面电荷密度。

对 III-V 族氮化物中极化作用的大量研究显示,极化效应对 2DEG 浓度特性的影响是复杂的^[10],极化诱发电荷为 2DEG 的主要来源^[11]。图 1 给出了 Ga 面生长的异质结在 AlGaN 层受张应力、弛豫和受压应力情况下的自发极化和压电极化的方向。晶体结构的突变会引起极化电荷的积累,如果极化诱发的薄层电荷密度为正,自由电子将倾向于补偿这些极化诱发电荷。如果异质结能带弯曲产生的势垒足够高,并且界面状态良好,这些补偿的电子将被限制在一个很薄的势阱中运动,并形成 2DEG。

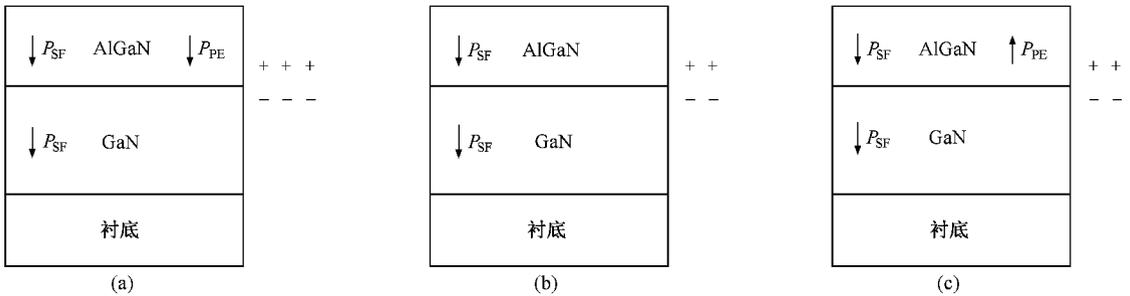


图 1 Ga 面 AlGaN/GaN 异质结中自发极化和压电极化的方向及极化电荷 (a)AlGaN 层受张应力 (b)AlGaN 层弛豫 (c)AlGaN 层受压应力

3. 逆压电极化现象与电流崩塌

以上提到纤锌矿结构的 GaN 和 AlN 的压电极化比传统的 III-V 族和 II-VI 族化合物高出 10 倍左右。如果在生长 GaAs 栅型 HEMT 结构材料时不掺杂,基本上不存在 2DEG,而且在制成的 GaAs 栅型 HEMT 中也观察不到明显的电流崩塌现象。这说明两种材料本身的差异是产生两种不同现象的重要原因。

压电极化效应是正、逆双向同时进行的。当 AlGaN/GaN HEMT 处于工作状态时(图 2),栅电极加负电压,源漏之间加正电压,且源漏之间的电压绝对值大于负栅压的绝对值。这样从整体上看,器件处在一个外电场方向 E_{out} 为垂直向下的环境中,如图 3 所示。由于外电场的方向与 AlGaN 层原本的压电极化电场 E_{PE} 方向相反,这将会减弱原有极化的程度,减弱程度与材料的弹性应变系数和栅电场持续时间有关。我们通过分析模拟外电场对 AlGaN 层的影

认为,逆压电极化效应是 2DEG 退化和 AlGaN/GaN HEMT 产生电流崩塌现象的主要原因。

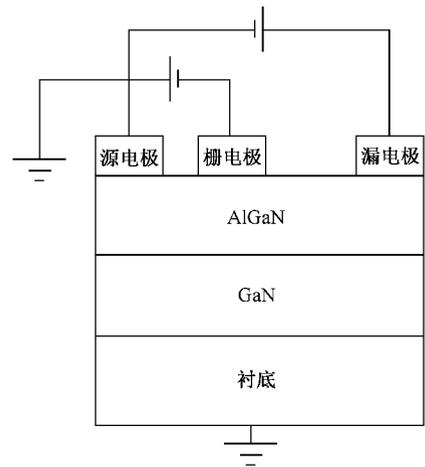


图 2 AlGaN/GaN HEMT 工作状态示意图

纤锌矿结构的 GaN 和 AlN 晶体属于 C_{6v}^4 (C_{6v}^4 点群), C_{6v}^4 点群压电晶体的压电模量 d 具有如下形式:

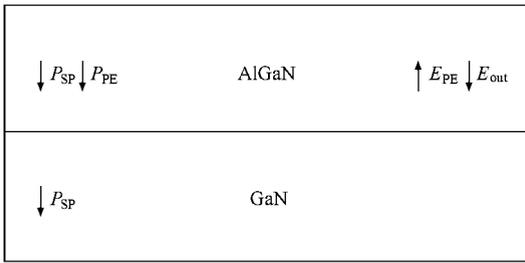


图 3 外加电场 E_{out} 对 AlGaIn 材料的影响

$$d = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (1)$$

弹性张量 c 可表示为

$$c = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\chi (c_{11} - c_{12}) \end{pmatrix}; \quad (2)$$

压电极化张量 e 可表示为

$$e = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

由 $e = d \cdot c$ 化简后得到

$$e_{31} = d_{31}(c_{11} + c_{12}) + d_{33}c_{13}, \quad (4)$$

$$e_{33} = 2c_{13}d_{31} + d_{33}c_{33}. \quad (5)$$

表 1 列出计算中使用的参量值,包括 GaN 和 AlN 材料的晶格常数 a 、压电常数 e 和弹性常数 C . 本文计算中 $Al_xGa_{1-x}N$ 所使用的参量值取 GaN 和 AlN 数值的线性组合. 将 $x = 0.3$ 时的 $Al_xGa_{1-x}N$ 材料各数值代入(4)(5)式中,经计算可得到压电模量 d_{31} 和 d_{33} 分别为 -0.00163 和 0.00326 .

表 1 用于计算的 GaN 和 AlN 的参量取值^[9,12]

参 量	GaN	AlN
a_0/nm	0.3189	0.3112
$e_{31}/\text{C} \cdot \text{m}^{-2}$	-0.49	-0.60
$e_{33}/\text{C} \cdot \text{m}^{-2}$	0.73	1.46
C_{11}/GPa	385	396
C_{12}/GPa	142	137
C_{13}/GPa	103	108
C_{33}/GPa	405	373

由逆压电效应知,晶格常数 a 的应变与外电压 U 的关系为

$$\Delta a = d_{31}U. \quad (6)$$

在图 3 中,我们近似认为等效外电场全部作用在 AlGaIn 层上,逆压电极化效应是由等效外电场作用在 AlGaIn 势垒层而引起.应变弛豫度 R 对极化的影响如下: $Al_xGa_{1-x}N$ 势垒层自发极化强度 P_{SP} 不随应变弛豫度改变,仅与组分 x 有关.当 Al 组分一定时,压电极化强度仅与 AlGaIn 势垒层的应变弛豫度 R 有关.当 $R = 0$ 时,AlGaIn 层完全应变,压电极化强度 $|P_{PE}|$ 为最大值,此时 2DEG 由自发极化和压电极化两部分贡献.当 $R = 1$ 时,AlGaIn 层完全弛豫, $P_{PE} = 0$ 2DEG 只由自发极化贡献.因此,在计算中以应变弛豫度 R 区分自发极化与压电极化.假设 AlGaIn/GaN 异质界面处为理想界面且 AlGaIn 完全应变,应变弛豫度 $R = 0$,有^[9]

$$P_{PE} = \chi(1 - R) \frac{\Delta a}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{c_{31}}{c_{33}} \right). \quad (7)$$

考虑逆压电极化效应的影响,则逆压电极化强度 P_{PE}^I 为

$$P_{PE}^I = \chi(1 - R) \frac{\Delta a'}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{c_{31}}{c_{33}} \right), \quad (8)$$

式中 a_0 为 AlGaIn 本征晶格常数, $\Delta a'$ 为由逆压电极化效应引起晶格常数的变化.

4. 自洽求解 Poisson-Schrödinger 方程

AlGaIn/GaN 异质结构道中的电子在与结平行的平面内做自由电子运动,这是量子化效应的结果,具有准二维运动的特性.所以,只需要对一维 Poisson-Schrödinger 方程进行求解即可.

由于 AlGaIn 和 GaN 层中均未做有意掺杂,背景载流子浓度相对于极化诱发电荷浓度非常小,受主杂质浓度和空穴浓度很低,计算中不考虑其对总电荷密度的贡献.一维 Poisson 方程为

$$\frac{d^2 V(z)}{dz^2} = - \frac{q[n(z) + \sigma]}{\epsilon}, \quad (9)$$

式中 ϵ 为介电常数, $V(z)$ 为静电势, σ 为由极化引起的电子浓度, $n(z)$ 为波函数引起的电子浓度.一维单电子 Schrödinger 方程为

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} [E - E_c(z)]\psi(z) &= 0 \quad (z > 0), \\ \psi(z) &= 0 \quad (z \leq 0), \end{aligned} \quad (10)$$

式中 m^* 为电子有效质量, h 为普朗克常数, $E_c(z)$ 为导带底能量, E 和 $\phi(z)$ 分别为波矢能量和波函数. $n(z)$ 由玻尔兹曼分布确定,

$$n(z) = \frac{m^* kT}{\pi h^2} \sum_L \left[|\phi_L(z)|^2 \ln \left(1 + \exp \frac{E_F - E_L}{kT} \right) \right], \quad (11)$$

式中 k 为玻尔兹曼常数, T 为温度, E_F 为费米能级, E_L 为激发态能级, L 为阱内电子所占据的激发态, 电子主要占据前三态, 故取 $L = 3$. 对于 Schrödinger 方程, 我们采用龙格-库塔 (R-K) 法进行求解, 模拟结果证实 R-K 法有更高的精确度.

计算过程首先假设一个初始的 $E_c(z)$ 代入 Schrödinger 方程, 求解得到本征能量 E 及对应的本征波函数, 然后将其一起代入玻尔兹曼分布, 得到 $n(z)$, 再将 $n(z)$ 代入 Poisson 方程, 得到一个新的 $E_c(z)$. 比较先后两次的 $E_c(z)$, 反复迭代直到最后 $E_c(z)$ 之差小于设定值^[13].

在计算时, 异质结边界处电荷守恒, 即

$$\begin{aligned} \epsilon_0 \epsilon_{\text{AlGaIn}} E_{\text{AlGaIn}} + [\sigma + n(z)] \\ = \epsilon_0 \epsilon_{\text{GaN}} E_{\text{GaN}}, \end{aligned} \quad (12)$$

式中 E_{AlGaIn} 和 E_{GaN} 为 AlGaIn 势垒层和 GaIn 沟道层在异质结界面处起始点的电场强度. 同时考虑逆压电极化效应对 2DEG 浓度的影响, 即

$$\sigma = |P_{\text{PK(AlGaIn)}} - P_{\text{PK(AlGaIn)}}^1 + P_{\text{SK(AlGaIn)}} - P_{\text{SK(GaN)}}|. \quad (13)$$

5. 模拟计算结果及分析

图 4 是使用 Matlab 软件进行 Poisson-Schrödinger 方程自洽求解的结果. 设定 $T = 300$ K, Al 组分 $x = 0.3$, AlGaIn 层厚度为 20 nm. 模拟计算结果显示: 在等效外电压 $U_{\text{out}} = 0$ V 时, 2DEG 浓度为 1.53×10^{13} cm^{-2} ; U_{out} 达到 10 V 时, 2DEG 浓度为 1.04×10^{13} cm^{-2} , 下降了 32%; 当 U_{out} 增大到 15 V 时, 对应的 2DEG 浓度为 0.789×10^{13} cm^{-2} , 2DEG 浓度下降了 48.4%, 仅为原来的 51.6%.

为了验证模拟结果的准确性, 将 $U_{\text{out}} = 15$ V 代入 (6) 式, 得到 $\Delta a' = -0.002445$ nm, 这里的负号代表压应变. 假设 AlGaIn/GaN 异质界面处为理想界面, 且 AlGaIn 层完全应变, 应变弛豫度 $R = 0$. 考虑逆压电极化效应的影响, 将 $\Delta a' = -0.002445$ nm 代入 (8) 式, 计算得到 $P_{\text{PE}}^1 = 1.195 \times 10^{-2}$ C/m², 再换算成

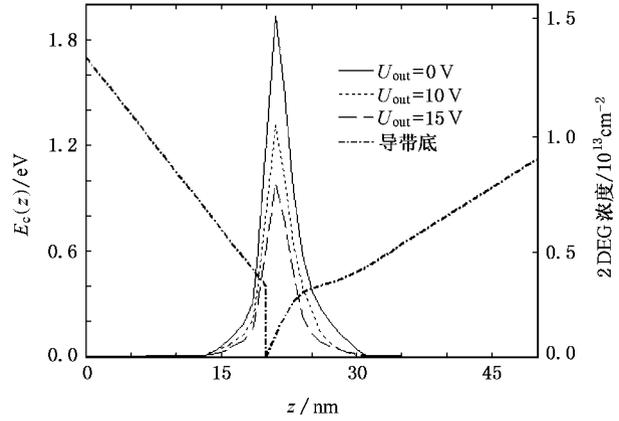


图 4 自洽求解 Poisson-Schrödinger 方程的模拟结果

电荷密度, 这相当于在 GaIn 沟道处 2DEG 面密度减小了 7.46×10^{12} cm^{-2} , 与模拟计算结果相符.

图 5 为 P_{PE}^1 随 U_{out} 的变化曲线. 从图 5 可以看到, 当 U_{out} 增大, P_{PE}^1 随之增大. 这说明 P_{PE}^1 受器件工作时外电场的影响会不断增大, 且影响越来越明显.

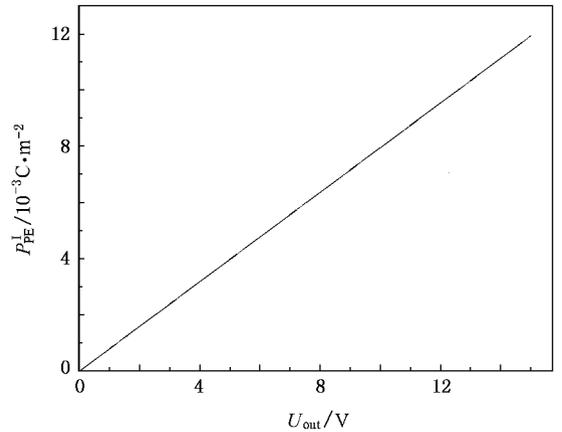
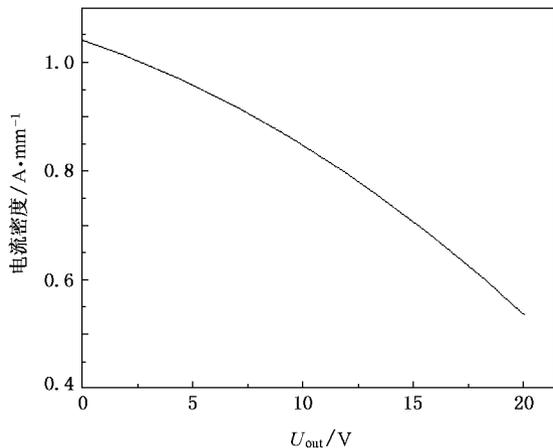
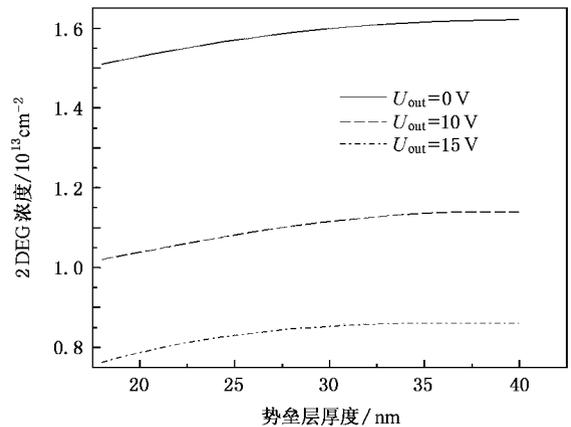


图 5 U_{out} 与 P_{PE}^1 的关系

图 6 为经计算得到的等效外电压 U_{out} 与 2DEG 沟道电流密度的关系. 由图 6 可知, 在外电场作用下, 器件 2DEG 沟道中的电流密度会随着 U_{out} 的增大而降低. 在 $U_{\text{out}} = 0$ 时, 沟道电流密度为 1.04 A·mm⁻¹. 当 $U_{\text{out}} = 10$ V 时, 沟道电流密度为 0.846 A·mm⁻¹, 电流密度下降了 18.7%. 而当 $U_{\text{out}} = 20$ V 时, 沟道电流密度为 0.536 A·mm⁻¹, 电流密度下降了 48.5%. 这表明, 随着 U_{out} 的增加, 2DEG 沟道中的电流密度也有很明显的下降趋势, 逆压电极化现象将会对器件性能造成很大的影响.

图 6 U_{out} 与沟道电流密度的关系图 7 2DEG 浓度与 U_{out} 和 AlGaIn 势垒层厚度的关系

2DEG 浓度与势垒层厚度也有关系. 在等效外电压变化的情况下, 本文计算了势垒层厚度对 2DEG 浓度的影响, 结果示于图 7. 从图 7 可以明显看出, 2DEG 浓度受到等效外电场的影响巨大, 而 2DEG 浓度受到势垒层厚度(厚度在 20—40 nm)的影响并不是很大.

在模拟中, 认为沟道中 2DEG 电子来源是极化诱发电荷, 而未将非主要因素(如背景载流子浓度等)考虑进去. 虽然模拟结果与实际情况存在一定的误差, 但仍可以清楚地看到逆压电极化效应对 AlGaIn/GaN 结构材料样品沟道中 2DEG 浓度的巨大影响. 我们认为, 在器件处于工作状态下外电场引发的逆压电极化效应很大程度上减弱了 2DEG 的浓度, 正是由于 2DEG 浓度降低而引起电流崩塌.

6. 结 论

本文采用逆压电极化模型来解释 AlGaIn/GaN HEMT 的电流崩塌现象, 指出引起电流崩塌的 2DEG 浓度降低主要是由于正向压电极化效应被减弱甚至被消除而导致极化诱发电荷减少. 如能设计适当的异质结构, 以减弱在器件工作时等效外电场对材料的逆压电极化效应, 消除负面影响, 就可以有效地抑制电流崩塌. 例如, 在势垒层外生长一层较厚的钝化层或增大势垒层厚度, 可以有效分担和减弱外电场对势垒层的作用, 使势垒层在外电场下的压电形变减弱, 2DEG 浓度将不再会有明显的降低. 对如何彻底消除 AlGaIn/GaN HEMT 电流崩塌现象还需做进一步研究.

- [1] Khan M A, Bhattarai A R, Kuznia J N, Olson D T 1993 *Appl. Phys. Lett.* **63** 1214
- [2] Hao Y, Zhang J F 2002 *Micronanoelectron. Techn.* **10** 1 (in Chinese) [郝 跃、张金凤 2002 微纳电子技术 **10** 1]
- [3] Majewski J A, Zandler G, Vogl P 2002 *J. Phys.* **14** 3511
- [4] Wu Y F, Keller B P, Kellers S, Kopolnek D, Denbaars S P, Mishra U K 1996 *IEEE Electron. Dev. Lett.* **17** 455
- [5] Daumiller I, Theron D, Gaquiere C, Vescan A, Dietrich R, Wieszt A, Leier H, Vetryu R, Mishra U K, Smorchkova I P, Keller S, Nguyen C, Kohn E 2001 *IEEE Electron. Dev. Lett.* **22** 62
- [6] Hasegawa H, Inagaki T, Otomo S, Hashizume T 2003 *J. Vac. Sci. Technol.* **21** 1844
- [7] Mizutani T, Ohno Y, Akita M, Kishimoto S, Maezawa K 2003 *IEEE Trans. Electron. Dev.* **50** 15
- [8] Tarakji A, Simin G, Ilinskaya N, Hu X, Kumar A, Koudymov A, Yang J, Asifkhan M 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 2169
- [9] Ambacher O, Smart J, Shealy J R, Weimann N G, Chu K, Murphy M, Schaff W J, Eastman L F, Dimitrov R, Wittmer L, Stutzmann M, Rieger W, Hilsenbeck J 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 3222
- [10] Kong Y C, Zheng Y D, Zhou C H, Deng Y Z, Gu S L, Shen B, Zhang R, Han P, Jiang R L, Shi Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2320 (in Chinese) [孔月婵、郑有、周春红、邓永桢、顾书林、沈波、张 荣、韩 平、江若璩、施 毅 2004 物理学报 **53** 2320]
- [11] Bykhovski A D, Gaska R, Shur M S 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 3577
- [12] Fonoberov V A, Balandin A A 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 7178
- [13] Zhang M 2007 *M. S. Dissertation* (Jinan: Shandong University) (in Chinese) [张 敏 2007 硕士学位论文(济南: 山东大学)]

Research on the current collapse in AlGaIn/GaN high-electron-mobility transistors through the inverse piezoelectric polarization model^{*}

Li Ruo-Fan^{1,2,†} Yang Rui-Xia¹⁾ Wu Yi-Bin²⁾ Zhang Zhi-Guo²⁾ Xu Na-Ying¹⁾ Ma Yong-Qiang^{1,2,3)}

¹⁾ School of Information Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China)

²⁾ 13th Research Institute, China Electronics Technology Group Corporation, Shijiazhuang 050051, China)

³⁾ School of Information and Electronic Engineering, Hebei University of Engineering, Handan 056038, China)

(Received 22 July 2007 ;revised manuscript received 18 October 2007)

Abstract

Current collapse in AlGaIn/GaN high-electron-mobility transistors was studied and the effect of effective external electrical field on the concentration of two-dimensional electron gas (2DEG) near the channel of hetero-junction of AlGaIn/GaN was simulated through the self-consistent implementation of the one-dimensional Poisson-Schrödinger equations. An inverse piezoelectric polarization model was proposed to analyze the degradation of 2DEG and the current collapse. It was found that the density of 2DEG was strongly dependent on the inverse polarization. When the voltage was 0, 10 and 15 V, the density was $1.53 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, $1.04 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ and $0.789 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, respectively. It was clear that the 2DEG density dropped 48.4% with voltage increasing from 0 to 15 V when the inverse piezoelectric polarization was considered. At last, the method of restraining current collapse was further discussed.

Keywords: AlGaIn/GaN high-electron-mobility transistors, Poisson-Schrödinger equations, inverse piezoelectric polarization model, current collapse

PACC: 7280E, 7340L, 7320D

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 51327030402) and the Natural Science Foundation of Tianjin, China (Grant No. 07JCZDJC06100).

[†] E-mail: fantasy-lee@sohu.com