

# 晶格匹配 InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料二维电子气输运特性研究\*

王平亚 张金凤<sup>†</sup> 薛军帅 周勇波 张进成 郝跃

(宽禁带半导体材料与器件重点实验室,西安电子科技大学微电子学院,西安 710071)

(2011年1月16日收到;2011年2月22日收到修改稿)

文章研究了 InAlN/GaN 和引入 AlN 界面插入层形成的 InAlN/AlN/GaN 材料的输运性质. 样品均在蓝宝石上以脉冲金属有机物化学气相淀积法生长,霍尔迁移率变温特性具有典型的二维电子气(2DEG)特征. 综合各种散射机理包括声学形变势散射、压电散射、极性光学声子散射、位错散射、合金无序散射和界面粗糙度散射,理论分析了温度对迁移率的影响,发现室温下两种材料中 2DEG 支配性的散射机理都是极性光学波散射和界面粗糙度散射;AlN 插入层对 InAlN/GaN 材料迁移率的改善作用一方面是免除 2DEG 的合金无序散射,另外还显著改善异质界面,抑制了界面粗糙度散射. 考虑到 2DEG 密度也是影响其迁移率的重要因素,结合实验数据给出了晶格匹配 InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料的 2DEG 迁移率随电子密度变化的理论上限.

**关键词:** InAlN/GaN, 二维电子气, 迁移率

**PACS:** 73.40.Kp, 73.40.-c

## 1. 引言

与 GaN 高电子迁移率晶体管 (HEMT) 器件目前的主流材料 AlGaIn/GaN 异质结相比,晶格匹配 InAlN/GaN 异质结材料能够以厚度仅约 5—20 nm<sup>[1,2]</sup> 的薄 InAlN 势垒层获得密度高于  $2.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  的二维电子气(2DEG)以及更高的电导;另一方面,与 GaN 晶格匹配的 InAlN 没有面内应力,基本消除了与材料的压电极化相关的器件可靠性问题<sup>[3,4]</sup>,在 GaN 高频功率 HEMT 器件方面具有很好的应用潜力.

然而,InAlN/GaN 材料的室温电子迁移率通常比较低( $70\text{--}260 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ )<sup>[5-8]</sup>,且其变温霍尔迁移率往往呈现为随温度降低先升高后降低的体电子特性<sup>[5,7]</sup>,呈现随温度降低先升高后逐渐饱和的 2DEG 特性的报告比较少<sup>[2]</sup>. 在 InAlN/GaN 界面引入薄层 AlN 插入层形成 InAlN/AlN/GaN 材料,则一般能够获得 2DEG 以及与 AlGaIn/GaN 材料相当的室

温电子迁移率 ( $812\text{--}1510 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ )<sup>[5-10]</sup>. 另外,2DEG 的电子密度对迁移率具有显著的影响,而已报告的 InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料的电子密度也相当分散( $0.6 \times 10^{13}\text{--}4.23 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ )<sup>[9,11]</sup>. 这些现象使得分析 InAlN/GaN 材料的输运性质以及 AlN 插入层改善 InAlN/GaN 电子迁移率的机理相当困难.

最近我们在蓝宝石上以脉冲金属有机物化学气相淀积法生长出了室温霍尔迁移率分别达到 949 和  $1437 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  的晶格匹配 InAlN/GaN 材料和 InAlN/AlN/GaN 材料(结构如图 1),其霍尔迁移率变温特性均具有典型的二维电子气(2DEG)特征(见图 2 和图 3). InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料的霍尔电子面密度基本不随温度变化,分别为  $1.65 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  和  $1.75 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . 材料生长和实验表征的细节参见文献[12]. 结合这些实验数据,本文考虑各种散射机理的作用对 InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 的 2DEG 迁移率变温特性进行深入研究,并结合其他已报告的 InAlN/GaN 材料和 InAlN/AlN/GaN 材料的霍尔数据对不同电子密度

\* 国家科技重大专项(批准号:2008ZX01002-002)、国家自然科学基金(批准号:60890191)、国家自然科学基金重点项目(批准号:60736033)和高等学校博士学科点新教师基金项目(批准号:200807011012)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: jfzhang@xidian.edu.cn

下的 2DEG 迁移率分析其上限,从而对 InAlN/GaN 材料的输运性质和 AlN 插入层改善 InAlN/GaN 材料电子迁移率的作用给出理论解释.



图1 InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料样品结构示意图

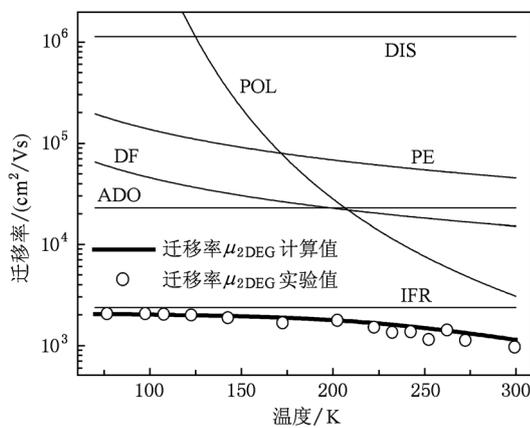


图2 InAlN/GaN 材料中各散射机理所限制的迁移率与 2DEG 总迁移率  $\mu_{2DEG}$  随温度的变化(其中 DIS 为位错散射、POL 为极性光学波散射、PE 为压电散射、DF 为声学形变势散射、ADO 为合金无序散射、IFR 为界面粗糙度散射,图3—5 中各散射机制的标称与这里相同)

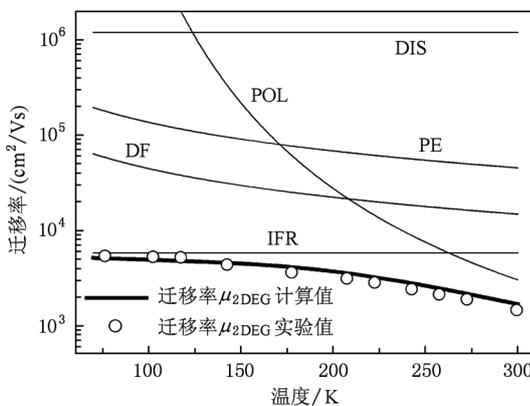


图3 InAlN/AlN/GaN 材料中各散射机理所限制的迁移率与 2DEG 总迁移率随温度的变化,没有考虑合金无序散射

## 2. 理论模型和参数

采用以下解析模型分析 2DEG 迁移率  $\mu_{2DEG}$ . 对 2DEG 的空间分布以 Fang-Howard 变分波函数<sup>[13]</sup> 来近似,能够获得 2DEG 的各种散射机理的动量弛豫率  $1/\tau_i$ ,单个散射机理决定的迁移率  $\mu_i$  与动量弛豫时间  $\tau_i$  满足

$$\mu_i = e\tau_i/m^*, \quad (1)$$

其中  $m^*$  为电子有效质量. 各种散射机制所限制的迁移率的联合作用以 Matheissen 定则表达,得到 2DEG 的迁移率  $\mu_{2DEG}$  为

$$\frac{1}{\mu_{2DEG}} = \sum_i \frac{1}{\mu_i}. \quad (2)$$

所考虑的散射机理包括声学形变势散射、压电散射、极性光学声子散射、合金无序散射、界面粗糙散射和位错散射,相应的动量弛豫率表达式和物理量含义参见文献[14, 15]. InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料通常不掺杂就能得到很高的电子密度,故而不考虑电离杂质的散射.

表1 计算中所采用的模型参数. 其中 2DEG 密度为样品实测值,位错密度由 X 射线衍射实验数据估算,合金无序散射势按照 AlN 和 InN 的导带偏移量估算<sup>[16]</sup>,In 组分  $x$  取 0.18

	InAlN/GaN	InAlN/AlN/GaN
2DEG 浓度/ $10^{13} \text{ cm}^{-2}$	1.650	1.750
界面粗糙度/nm	0.432	0.245
相关长度/nm	1.500	1.500
合金无序散射势/eV		3.848
极性光学声子能量/meV		92
位错密度/ $\text{cm}^{-2}$		$8.869 \times 10^8$
GaN 的 Thomas-Fermi 波矢/ $\text{m}^{-1}$		$8.4994 \times 10^8$ <sup>[14]</sup>
AlInN 的电子有效质量 $m_x^*/m_0$		(0.400 - 0.330x)
AlInN 禁带宽度/eV		$6.130(1-x) + 0.626x - 5.400x(1-x)$
AlInN 晶格常数/Å		$a(x) = 3.548x + 3.112(1-x)$ $c(x) = 5.760x + 4.982(1-x)$ <sup>[17]</sup>

注: $m_0$  为电子静止质量.

## 3. 结果和讨论

将表 1 中 InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料相应的参数分别代入以上理论模型,计算出各个散射机理限制的迁移率和总的 2DEG 迁移率. 图 2 和图 3 分别给出了温度从 77 K 到 300 K 范围内

InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料 2DEG 迁移率的计算值和实验测量值. 两图中迁移率的计算值和实验值都符合的比较好,说明我们所用的模型和参数较为合理,可以对 InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料的 2DEG 迁移率给出定量的解释.

这两个图当中,与晶格振动有关的散射机构包括声学形变势散射、压电散射和极性光学波散射,随着温度升高、晶格振动加剧,这些散射的作用增强. 定量而言<sup>[14,15]</sup>,声学形变势散射和压电散射所限制的迁移率均和温度  $T$  的倒数成正比 ( $\mu_{DF}, \mu_{PE} \propto T^{-1}$ );极性光学波散射的作用则随着温度的升高呈近指数式增强 ( $\mu_{POL}$  近似地正比于  $\exp(\hbar\omega_{POL}/k_B T)$ ,其中  $\hbar\omega_{POL}$  为 GaN 的极性光学声子能量 (92 meV),  $k_B$  为玻尔兹曼常数),成为室温条件下限制迁移率的主要散射机制之一. 位错散射由带电延伸位错的库仑散射作用引起,合金无序散射是 2DEG 渗入 InAlN 势垒层受到晶体势不同、随机无序排列的 Al、In 原子散射造成,界面粗糙度散射则是 2DEG 沿平行于异质界面的方向输运时界面的微观粗糙起伏的散射作用,这三种散射机理并不受温度的影响. 因此,在不同的温度下,各种散射机理对 2DEG 迁移率的限制作用的强弱是相对不同的. 对于 InAlN/GaN 材料(图 2),低温时限制 2DEG 迁移率的主要的散射机理为界面粗糙度散射和合金无序散射,升温时晶格振动增强,在室温下极性光学波散射和界面粗糙度散射占支配地位. InAlN/AlN/GaN 材料(图 3)中,在 GaN 和 InAlN 之间引入 AlN 插入层后 AlN/GaN 导带偏移量(约 1.86 eV)比晶格匹配 InAlN/GaN 的导带偏移量(约 1.18 eV)大,对 GaN 沟道中 2DEG 形成了很高的势垒,使 2DEG 向 InAlN 层的渗入作用可以忽略不计,因而合金无序散射被抑制. 在低温时主要的散射机理为界面粗糙度散射和声学形变势散射,室温下支配性的散射机理仍是极性光学波散射和界面粗糙度散射.

比较图 2 和图 3,可看到 InAlN/AlN/GaN 材料中 2DEG 迁移率相比 InAlN/GaN 材料明显提高,这主要是三种机理相互竞争的结果. 第一,AlN 插入层能够加深 GaN 中的量子阱、增大 2DEG 密度,这会使所有的散射机理的散射强度都发生变化,位错散射减弱,而晶格振动相关散射则增强,界面粗糙度不变时界面散射也会增强. 在我们的样品的

2DEG 密度范围内,这种作用会令 InAlN/AlN/GaN 材料中 2DEG 迁移率略微下降. 第二,前文的分析说明了 AlN 插入层抑制了 InAlN/AlN/GaN 材料中的合金无序散射,从而提高 2DEG 迁移率,这也是传统的 AlGaN/AlN/GaN 材料引入 AlN 插入层改善 2DEG 迁移率的主要机理<sup>[18]</sup>. 第三,图 2 和图 3 对比可见 InAlN/AlN/GaN 材料中界面粗糙度散射的作用比 InAlN/GaN 材料显著减弱,界面粗糙度参数由 0.432 nm 下降为 0.245 nm;而两种材料的生长除了 AlN 插入层外保持了严格一致的工艺条件,这说明是 AlN 插入层使得影响 2DEG 输运的界面微观起伏减小,界面更为平滑,从而削弱了界面粗糙度散射. 总体上,InAlN/AlN/GaN 材料 2DEG 迁移率的提高,说明 AlN 插入层引起的这三种变化中,合金无序散射的免除和界面粗糙度散射的抑制是占主导地位的作用.

2DEG 密度也是影响迁移率的重要因素. 由于势垒层厚度、合金组分、材料生长设备和生长条件等方面的差异,目前 InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料中电子密度的实验数据分散性很强. 为了深入地研究其 2DEG 密度影响迁移率的规律,我们分别对 In 组分取 0.18 的 InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料计算了室温下 2DEG 迁移率随密度的变化关系. 鉴于实际样品结晶质量和界面情况的差异,我们没有考虑位错散射而保留了模型中其他五种散射机理以简化分析,对界面粗糙度散射则取了一系列界面粗糙度值,这样得到的 2DEG 迁移率可以视为实际迁移率的理论上限,计算结果和实验数据如图 4 和图 5 所示.

图 4 中,InAlN/GaN 材料的室温迁移率和电子密度实验数据都比较分散. 根据样品的变温霍尔特性的相关报告,形成了 2DEG 的样品迁移率较高<sup>[2,11,19]</sup>,呈体电子特性(其低温迁移率比室温迁移率还要低)的样品迁移率较低<sup>[5,7]</sup>. 有些样品没有报告变温迁移率数据,但室温迁移率较低,接近于那些呈体电子特性的样品的室温迁移率<sup>[6,8]</sup>. 图 5 中 InAlN/AlN/GaN 材料的室温迁移率实验数据则普遍较高(除了 Dadgar 等<sup>[20]</sup>的报告是早期在 Si 衬底上的研究结果,因而迁移率较低),一般都形成了 2DEG. 因此,从这两图可看到,不论是 InAlN/GaN 还是 InAlN/AlN/GaN 材料, $\mu_{2DEG}$  理论曲线都能够较好的反映形成 2DEG 的样品中迁移率实验数据随电

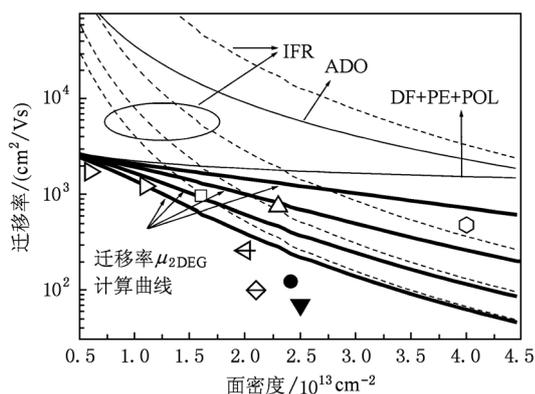


图4 室温下 InAlN/GaN 材料中各散射机理所限制的迁移率与 2DEG 总迁移率  $\mu_{2DEG}$  随面密度的变化. 未考虑位错散射, 界面粗糙度散射选取了一系列界面粗糙度  $\Delta = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  nm, 相关长度均为 1.5 nm, 以考虑不同样品的界面粗糙度分散性, 相应的界面散射迁移率曲线以及  $\mu_{2DEG}$  计算曲线均在图中由上向下依次排列, 说明  $\Delta$  越大迁移率越低. 空心符号  $\triangleright \square \triangleleft \diamond$  依次对应 Hiroki 等<sup>[11]</sup>、本文、刘波等<sup>[19]</sup>、Katz 等<sup>[2]</sup> 的实验数据, 样品中形成了 2DEG; 实心符号  $\bullet \blacktriangledown$  依次对应 Xie 等<sup>[7]</sup>、Gonschorek 等<sup>[5]</sup> 的实验数据, 样品的变温霍尔特性呈体电子特性; 符号  $\triangleleft \diamond$  依次对应 Kuzmik 等<sup>[6]</sup>、Miyoshi 等<sup>[8]</sup> 的实验数据, 相应样品的变温霍尔特性没有报告

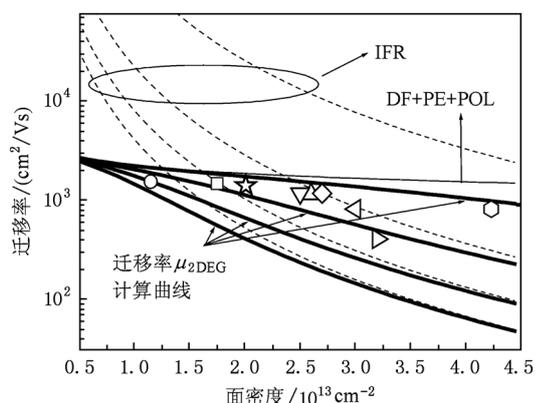


图5 室温下 InAlN/AlN/GaN 材料中各散射机理所限制的迁移率与 2DEG 总迁移率  $\mu_{2DEG}$  随面密度的变化. 未考虑位错散射以及合金无序散射, 界面粗糙度散射和 2DEG 总迁移率  $\mu_{2DEG}$  分别对应一族曲线, 按照界面粗糙度  $\Delta = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  nm (相关长度均为 1.5 nm) 在图中由上向下依次排列. 空心符号  $\circ \square \star \nabla \triangleleft \diamond \triangleleft \diamond$  依次对应 Xie 等<sup>[7]</sup>、本文、Xue 等<sup>[12]</sup>、Gonschorek 等<sup>[5]</sup>、刘波等<sup>[19]</sup>、Miyoshi 等<sup>[8]</sup>、Kuzmik 等<sup>[6]</sup>、Dadgar 等<sup>[20]</sup>、Tülek 等<sup>[21]</sup> 的实验数据

子密度变化的趋势, 说明了计算结果的有效性. 就各种散射机理的作用而言, 随着 2DEG 密度增大, 与晶格振动相关的迁移率变化较小, 合金无序散射和界面粗糙度散射则显著增强. 合金无序散射和界面粗糙度散射与 2DEG 密度的关系如此紧密, 这主要是由于密度增加时, 2DEG 与异质界面的距离将会减小. 对于 InAlN/GaN 材料, 这意味着 2DEG 渗入合金势垒层的比例增加, 从而增强合金无序散射. 同时, 不论是 InAlN/GaN 还是 InAlN/AlN/GaN 材料, 靠近异质界面也使得 2DEG 对界面粗糙度的敏感性增强, 受到散射的概率增大. 界面粗糙度的增加使界面散射所限制的迁移率随 2DEG 密度增加下降的更快, 也是这种机理. 对比两图实验数据的分布情况还可以发现, InAlN/GaN 材料中形成 2DEG 的样品的迁移率数据在界面粗糙度从 0.1 到 0.7 nm 的  $\mu_{2DEG}$  计算曲线之间都有分布, 而 InAlN/AlN/GaN 材料几乎所有的迁移率数据都很接近界面粗糙度仅 0.1 nm 的  $\mu_{2DEG}$  计算曲线, 这一点也充分说明了 AlN 插入层对 InAlN/GaN 界面的改善作用.

#### 4. 结 论

本文以 2DEG 迁移率解析模型对晶格匹配的 InAlN/GaN 和 InAlN/AlN/GaN 材料的输运特性进行了理论研究. 通过对变温霍尔迁移率的分析, 说明室温下两种材料中 2DEG 支配性的散射机理都是极性光学波散射和界面粗糙度散射. InAlN/AlN/GaN 材料与 InAlN/GaN 材料相比电子迁移率得到显著提高, 主要是由于 AlN 插入层不仅有效地抑制了合金无序散射, 而且改善了界面的平滑性, 削弱了界面粗糙度散射. 还结合大量实验数据对这两种材料分析了 2DEG 密度对迁移率的影响, 获得了 2DEG 迁移率的理论上限, 进一步说明了 AlN 插入层对 InAlN/GaN 界面的改善作用.

[1] Jeganathan K, Shimizu M, Okumura H, Yano Y, Akutsu N 2007 *J. Cryst. Growth* **304** 342

[2] Katz O, Mistele D, Meyler B, Bahir G, Salzman J 2004 *Electron. Lett.* **40** 1304

- [3] Kuzmik J, Pozzovivo G, Ostermaier C, Strasser G, Pogany D, Gornik E, Carlin J F, Gonschorek M, Feltin E, Grandjean N 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 124503
- [4] Li R F, Yang R X, Wu Y B, Zhang Z G, Xu N Y, Ma Y Q 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2450 (in Chinese)[李若凡、杨瑞霞、武一宾、张志国、许娜颖、马永强 2008 物理学报 **57** 2450]
- [5] Gonschorek M, Carlin J F, Feltin E, Py M A, Grandjean N 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 062106
- [6] Kuzmik J, Carlin J F, Gonschorek M, Kostopoulos A, Konstantinidis G, Pozzovivo G, Golka S, Georgakilas A, Grandjean N, Strasser G, Pogany D 2007 *Phys. Stat. Sol. (a)* **204** 2019
- [7] Xie J Q, Ni X F, Wu M, Leach J H, Özgür Ü, Morkoç H 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 132116
- [8] Miyoshi M, Kuraoka Y, Tanaka M, Egawa T 2008 *Appl. Phys. Express* **1** 081102
- [9] Tülek R, Ilgaz A, Gökden S, Teke A, Öztürk M K, Kasap M, Özçelik S, Arslan E, Özbay E 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 013707
- [10] Ni J Y, Hao Y, Zhang J C, Duan H T, Zhang J F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4925 (in Chinese)[倪金玉、郝跃、张进成、段焕涛、张金凤 2009 物理学报 **58** 4925]
- [11] Hiroki M, Yokoyama H, Watanabe N, Kobayashi T 2006 *Superlatt. Microstruc.* **40** 214
- [12] Xue J S, Hao Y, Zhou X W, Zhang J C, Yang C K, Ou X X, Shi L Y, Wang H, Yang L A, Zhang J F 2011 *J. Cryst. Growth* **314** 359
- [13] Fang F F, Howard W E 1966 *Phys. Rev. Lett.* **16** 797
- [14] Zhang J F, Hao Y, Zhang J C, Ni J Y 2008 *Sci. in China Ser. E* **38** 949 (in Chinese)[张金凤、郝跃、张进成、倪金玉 2008 中国科学 E 辑 **38** 949]
- [15] Zhang J F, Mao W, Zhang J C, Hao Y 2008 *Chin. Phys. B* **17** 2689
- [16] Jena D 2003 *Ph. D. Thesis* (University of California, Santa Barbara) p50
- [17] Bougrov V, Levinshtein M E, Rumyantsev S L, Zubrilov A 2001 *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe* (New York, John Wiley & Sons) p1—30
- [18] Smorchkova I P, Chen L, Mates T, Shen L, Heikman S, Moran B, Keller S, DenBaars S P, Speck J S, Mishra U K 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 5196
- [19] Liu B, Yin J Y, Li J, Feng Z H, Feng Z, Cai S J 2008 *15th National Conference on Compound Semiconductor Materials, Microwave Device and Optoelectronic Device* p54 (in Chinese)[刘波、尹甲运、李佳、冯志宏、冯震、蔡树军 2008 第十五届全国化合物半导体、微波器件和光电器件学术会议论文集第 54 页]
- [20] Dadgar A, Schulze F, Blasing J, Diez A, Krost A, Neuburger M, Kohn E, Daumiller I, Kunze M 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 5400
- [21] Tülek R, Ilgaz A, Gökden S, Teke A, Öztürk M K, Kasap M, Özçelik S, Arslan E, Özbay E 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 013707

# Transport properties of two-dimensional electron gas in lattice-matched InAlN/GaN and InAlN/AlN/GaN materials<sup>\*</sup>

Wang Ping-Ya Zhang Jin-Feng<sup>†</sup> Xue Jun-Shuai Zhou Yong-Bo Zhang Jin-Cheng Hao Yue

(Key Laboratory of Wide Band Gap Semiconductor Materials and Devices, School of Microelectronics, Xidian University, Xi'an 710071, China)

(Received 16 January 2011; revised manuscript received 22 February 2011)

## Abstract

The lattice-matched InAlN/GaN structure is one kind of emerging material with high conductivity and used in GaN-based high electron mobility transistors (HEMTs). The transport properties of lattice-matched InAlN/GaN structure and InAlN/AlN/GaN structure are studied. The samples are grown using pulsed metal organic chemical vapor deposition on sapphire substrates. Both structures show temperature-dependent Hall mobilities with a typical behavior of two-dimensional electron gas (2DEG). Theoretical analysis of the temperature dependence of mobility is carried out based on the comprehensive consideration of various scattering mechanisms such as acoustic deformation-potential, piezoelectric, polar optic phonon, dislocation, alloy disorder and interface roughness scattering. It is found that the dominant scattering mechanisms are the interface roughness scattering and the polar optic phonon scattering for both structures at room temperature. The insertion of AlN spacer layer into InAlN/GaN interface exempts 2DEG from alloy disorder scattering, more importantly results in a better interface, and restrains greatly interface roughness scattering. The influence of sheet density on 2DEG mobility is also considered, and the upper limit of density-dependent 2DEG mobility is given for lattice-matched InAlN/GaN and InAlN/AlN/GaN structures and compared with many reported experimental data.

**Keywords:** InAlN/GaN, two-dimensional electron gas, mobility

**PACS:** 73.40.Kp, 73.40.-c

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Key Science and Technology Special Project of China (Grant No. 2008ZX01002-002), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60890191), the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60736033), and the New Teacher Foundation for Doctoral Program of Ministry of Education of China (Grant No. 200807011012).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: jfzhang@xidian.edu.cn