

ZnMgO/ZnO 异质结构中二维电子气的研究*

张阳 顾书林[†] 叶建东 黄时敏 顾然 陈斌 朱顺明 郑有焘

(南京大学微结构国家实验室和电子科学与工程学院, 南京 210093)

(2012年12月11日收到; 2013年4月1日收到修改稿)

论文根据 ZnMgO/ZnO 异质结构二维电子气的能带结构及相关理论模型, 采用一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽求解, 模拟计算了 ZnMgO/ZnO 异质结构中二维电子气的分布及其对 ZnMgO 势垒层厚度及 Mg 组分的依赖关系. 研究发现该异质结构中 ZnMgO 势垒层厚度存在一最小临界值: 当垒层厚度小于该临界值时, 二维电子气消失, 当垒层厚度大于该临界值时, 其二维电子气密度随着该垒层厚度的增加而增大; 同时研究发现 ZnMgO 势垒层中 Mg 组分的增加将显著增强其二维电子气的行为, 导致二维电子气密度的明显增大; 论文对模拟计算获得的结果与相关文献报道的实验结果进行了比较, 并从极化效应和能带结构的角度进行了分析和讨论, 给出了合理的解释.

关键词: 氧化锌, 二维电子气, 异质结构, 理论计算

PACS: 02.70.Bf, 73.61.Ga, 77.55.hf

DOI: 10.7498/aps.62.150202

1 引言

与成熟的宽禁带 III 族氮化镓基半导体一样, 氧化锌基半导体具有与之极其相似的晶体结构和优越的光电性能, 并更具有较高的激子束缚能, 被认为是制备光电子器件特别是激光二极管器件的优选材料. 氧化锌基半导体同样具有较高的击穿电压、电子漂移速度和很强的抗辐射能力, 也是制作高温、大功率、高频电子器件的理想材料. 此外, 纳米结构的氧化锌由于其独特构型, 也引起了人们的极大兴趣^[1-3]. 尽管如此, 由于氧化锌导带底的电子有效质量比较大, 低场迁移率较低, 影响了由它们制作的器件的高频性能.

在具有纤锌矿结构的 GaN 晶胞中, Ga 和 N 的子晶格分别构成六方密堆结构, 各层交错形成的 GaN 晶体晶格对称性较低. 与之类似, ZnO 同样具有纤锌矿结构和 Zn 与 O 的子晶格的交错排列, 因此 ZnO 基异质结构材料也可以在其异质界面附近产生很强的自发极化和压电极化, 感生出极强的界面电荷和电场, 导致氧化锌基与氮化镓基异质

结构一样, 在其异质界面产生具有高迁移率的高浓度二维电子气. 应用该极化效应, Kawasaki 小组采用分子束外延技术成功制备出界面陡峭的高性能 ZnO/ZnMgO 异质结构, 观察到整数和分数量子霍尔效应^[4,5]. Ye 等人采用金属有机源化学气相外延技术制备出界面组分缓变的 ZnMgO/ZnO 异质结构, 并成功观测到 ZnMgO/ZnO 异质结构中的二维电子气, 揭示了二维电子气的磁输运行行为, 研究了相关参数对于二维电子气浓度的影响^[6,7].

目前关于氮化镓基异质结构中二维电子气的实验和理论计算方面均已有大量的研究报道^[8-13]. 氧化锌基异质结构中二维电子气的研究尽管如上所述在实验方面已有相关报道^[14-19], 但关于其理论计算的模拟研究却报道甚少, 这严重妨碍了人们对 ZnMgO/ZnO 异质结构中二维电子气行为和特性的深入认识, 也不利于人们利用其二维电子气行为开展高性能电子器件的应用研究及其电学性能的优化. 基于此, 本论文重点开展了 ZnMgO/ZnO 异质结构中二维电子气的理论计算研究, 计算探讨了二维电子气浓度对其异质结构参数的依赖关系, 并将理论计算结果与已报道的实验结果进行了分

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011302003)、国家自然科学基金 (批准号: 60990312, 61025020, 61274058)、江苏省自然科学基金 (批准号: BK2011437) 和江苏高校优势学科建设工程资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: slgu@nju.edu.cn

析比较.

2 能带结构与理论计算模型 [20,21]

ZnO 为六方纤锌矿结构. 由于 Zn 中 O 沿 c 轴的周期性层排列, 加上 Zn 与 O 本身电荷正负、极化能力的不同, ZnO 沿 c 轴方向存在着自发的极化. 同时, 纤锌矿型晶体结构沿 [0001] 方向缺少反演对称性, 当外力在该方向产生应力时, 晶格的形变会在其中产生感应电场, 从而产生压电极化. 这些极化电荷, 可以感应出浓度很高的电子 (或空穴), 因此, 即使在势垒层掺杂浓度很低的时候, 也能在界面处得到很高的二维电子气 (空穴气) 浓度. 如图 1 所示, 考虑在厚的 ZnO 层上异质外延薄的 ZnMgO 层, 由于两者的晶格常数不同, ZnMgO 层中将产生应变, 只要 ZnMgO 层的厚度小于其临界厚度, 它将构成赝配结构而不发生晶格弛豫.

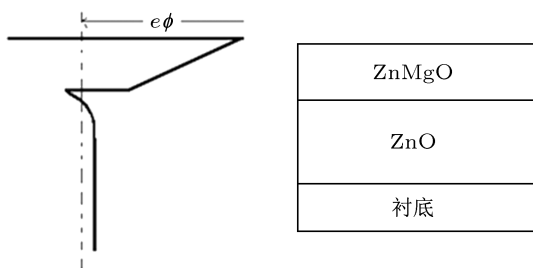


图 1 ZnMgO/ZnO 异质结构与能带结构示意图

ZnMgO 层临界厚度的大小与 Mg 含量有关, 一般小于 10 nm 量级, 如果进一步增加厚度会引起结构弛豫, 导致界面处的位错线密度大大增加, 从而会使器件特性退化. 根据 ZnO 层的生长方向, 表面形成的极化电荷可正可负. 研究表明, 沿 [0001] 方向生长的 ZnO 和 ZnMgO 的界面质量较好, 制作器件一般选择该方向. 这时表面的极化电荷为正, 将在界面沟道处感应出电子来屏蔽这些极化电荷. 而底部的 ZnO 层比较厚, 不考虑其中的压电极化效应.

因此, ZnMgO/ZnO 中存在自发极化以及压电极化, 总的极化效应表示为两者之和, $P = P_{SP} + P_{PE}$. 而由公式 $\nabla P = -\rho_p$ 知, 在 ZnMgO/ZnO 结构的接触面必定存在着极化电荷. 其浓度为

$$\sigma_{\text{ZnMgO/ZnO}} = \sigma_{\text{ZnMgO}} - \sigma_{\text{ZnO}} = P_{\text{ZnO}} - P_{\text{ZnMgO}}.$$

受极化电荷作用, 大量电子在异质结界面处积累, 电子运动在晶体生长方向 (即 c 轴方向) 受

到限制, 而在垂直于 c 轴的平面运动时不受限制. 这些电子群即为二维电子气. 如图 1 所示为蓝宝石衬底上生长的 ZnMgO/ZnO 异质结构, 其表面假设为 Zn 面.

我们将电子看作是 x 和 y 两个方向上的布鲁赫波与 z 方向上的一维波包的乘积, 其分布满足

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) \psi(z) = E \psi(z),$$

其中 \hbar 为普朗克常数, m^* 为量子阱中电子的有效质量, $V(z)$ 为电子势能, E 为电子的本征能量, ψ 为电子的本征波函数.

一维泊松方程为

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon \frac{d}{dz} \right) \phi(z) = -q [N_D(z) - n(z)],$$

其中, ϵ 为相对介电常数, $\phi(z)$ 为静电势, q 为电子电荷, $N_D(z)$ 为离化施主杂质浓度, $n(z)$ 为电子浓度. 电子势能与静电势满足

$$V(z) = \phi(z) + \zeta(z),$$

其中 $\zeta(z)$ 为异质界面处导带能量偏移值.

波函数 $\psi(z)$ 与电子浓度 $n(z)$ 关系为

$$\begin{aligned} n(z) &= \sum_i n_i |\psi_i(z)|^2 \\ &= \sum_i \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} |\psi_i(z)|^2 \\ &\quad \times \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_i}{kT} \right) \right]. \end{aligned}$$

需要采用迭代的方法得到电子浓度的解. 具体过程如下:

首先假定一个初始势能 $V_0(z)$, 代入薛定谔方程解得各个子带的波函数 $\psi_i(z)$ 和能量 E_i ; 将 $\psi_i(z)$ 和 E_i 代入电子浓度 $n(z)$ 的表达式得到 $n(z)$; 再将所得 $n(z)$ 代入泊松方程得到 $\phi(z)$, 从而得到 $V(z)$. 所得 $V(z)$ 可以进行下一次迭代. 每次迭代可以得到一个电子浓度, 将最后两次所得电子浓度相比较, 若相差小于 10^{-6} , 可认为迭代结束, 得到所求结果. 采用有限微分法可以计算得到结果 [22-24]. 本文采用的是 Gerg Snider 的 1D Poisson 软件求解.

3 模拟结果与分析

理论模拟可以用来解释与之相关的实验结果, 并以为之为基础进一步指导实验工作. 但理论模拟的应用首先必须依赖于其计算的可靠性和准确性. 因

此本文的理论模拟工作主要以目前已发表的相关的异质结构的材料与结构参数为基础,通过理论模拟的结果与文献报道的实验结果的分析,验证程序计算的准确性和可靠性,并对其存在的差异给予合适的分析和解释.

首先按照参考文献 [25] 中的相关材料与结构参数,该文献中 ZnO 表面 ZnMgO 垒层厚度为 30 nm, Mg 组分为 0.43, 其器件结构示意图如图 1 所示. 在进行模拟时异质结构表面设为欧姆接触,其异质结构界面量子阱中二维电子气分布的模拟结果如图 2 中实线所示. 与此同时,图中也给出了文献 [25] 中所报道的通过电容电压方法测量获得的二维电子气的浓度分布,如图 2 中的点线所示. 图中 ZnMgO 表面被取为模拟计算的坐标零点.

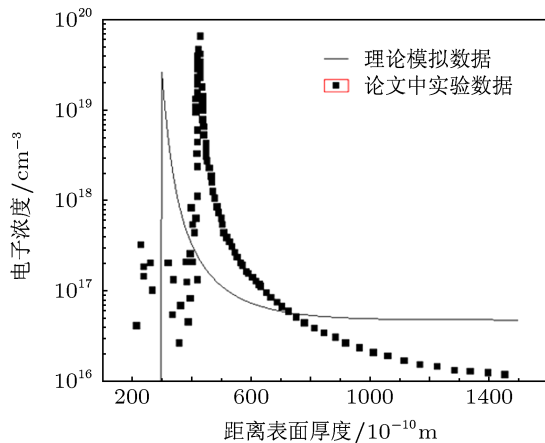


图 2 ZnMgO 厚度为 30 nm, Mg 组分为 0.43 的突变结 ZnMgO/ZnO 异质结构电子浓度分布图 (图中实线为模拟结果,点线为文献 [25] 中的实验结果,理论计算时表面取欧姆接触)

从图中可以看出该异质结构中二维电子气的理论模拟结果与文献报道的实验数据具有一定的相似性,但明显存在以下差别: 1) 二维电子气分布的峰值位置存在偏移; 2) 峰值大小有较大不同; 3) 体内 ZnO 的本征电子浓度也明显不同. 为此将理论计算模拟设定的初始条件和材料参数与文献 25 的相关参数进行比较分析,对理论模拟与实验数据之间的差异提出了如下解释: 1) 实验数据的峰值偏差是由测量手段造成的. 实际的 ZnMgO/ZnO 样品中,其电子浓度是通过 C-V 曲线获得. 而由 C-V 曲线获取电子浓度的过程中,作者简单的将 ZnMgO, ZnO 取相同的介电常数进行计算 [25], 导致 ZnMgO 介电常数偏小,从而增加了有效物理厚度. 2) 二维电子气分布的峰值大小不同可能与不同的表面接触情况有关. 由于文献 [25] 中所报道的实验所采用的表

面电势大小未知,所以这里模拟计算中采用了欧姆接触的假设. 理论模拟计算表明,与表面肖特基接触的假设相比,表面欧姆接触将显著减小异质结构中二维电子气分布的峰值大小. 3) 至于体内 ZnO 的电子浓度不同,这应该是理论模拟中采用的理想衬底 ZnO 的材料结构与电学参数和文献 [25] 中的实际的材料与结构参数不同所致. 由于在文献 [25] 中没有给出他们所生长 ZnO 薄膜的电学性质,因此无法准确设定计算的初始条件. 尽管理论的模拟结果与实际的测量结果之间存在一定的差异,但并不影响人们对理论模拟结果可靠性的认定,因为定性的变化规律依然符合较好. 如果能获得准确的初始条件将可以大幅度的降低这种差异,事实上,在后面的模拟计算中,我们将表面接触改为了肖特基接触后,模拟计算的结果与文献报道的实验结果符合得很好.

以此为基础,本文继续开展了 ZnMgO 势垒层厚度对 ZnMgO/ZnO 异质结构二维电子气分布的影响的理论模拟计算研究. 在该模拟计算过程中, ZnMgO/ZnO 异质结构的 Mg 组分始终为 0.37, 且异质结构表面假设为肖特基接触 (并设肖特基电势为 0.8 eV). 通过改变 ZnMgO 势垒层的厚度,模拟计算得到相应的二维电子气密度,其模拟结果如图 3 所示,其中图中的实心点为文献 [25] 中报道的实验数据.

从图 3 可以看出, ZnMgO 层存在一临界厚度. 当 ZnMgO 层厚度小于该厚度时,二维电子气密度随着 ZnMgO 层厚度的增加而增加. 当 ZnMgO 层厚度大于该厚度时,随着 ZnMgO 厚度的增加,二维电子气密度趋于不变. 整体上,理论数据与实验数据符合的很好,并且其临界厚度也基本相同,约为 10 nm.

图 3 显示,对于固定的 Mg 组分,当 ZnMgO 厚度小于一定值时,发现二维电子气密度趋近于零,这一结果与文献报道的 AlGaIn/GaN 基异质结构中的情形一致 [21]. 在 AlGaIn/GaN 基异质结构中,人们从二维电子气的起源表面态给予了较好的解释. 本文认为,这同样适用于 ZnMgO/ZnO 基异质结构体系,其基本原理如图 4 所示. 也就是说,当 ZnMgO 厚度小于一定值时,表面态位于费米能级之下,不发射电子,从而没有二维电子气的形成. 随着 ZnMgO 厚度的增加,极化电场随之增大,导致表面态能级相对于费米能级升高,从而发射电子,电子浓度增大. 当 ZnMgO 厚度增加到某一值时,表面

态电子全部发射, 二维电子气浓度达到极值. 此时若继续增大 ZnMgO 厚度, 由于表面态电子已全部发射完毕, 二维电子气浓度维持不变.

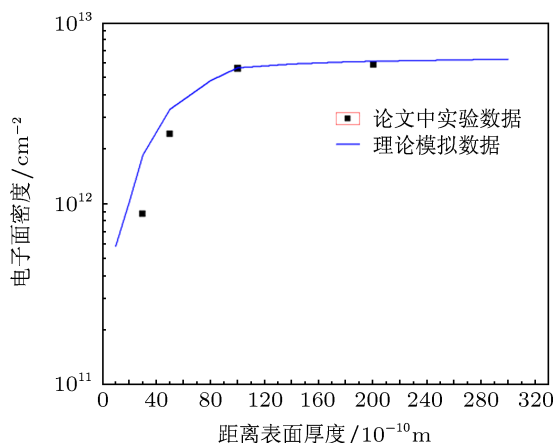


图3 ZnMgO 垒层的厚度对于 ZnMgO/ZnO 异质结构二维电子气密度的影响 (图中实线为计算结果, 实心点为文献 [25] 中的实验结果). 其中, Mg 组分均为 0.37. 材料表面假设为肖特基接触, 电势为 0.8 eV

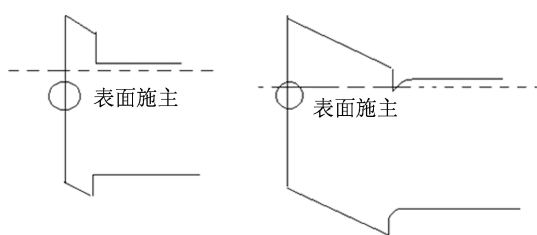


图4 表面态在二维电子气形成中的作用 [25,26]

进一步, 本文研究了 ZnMgO/ZnO 基异质结构的重要参数: Mg 组分对二维电子气分布的影响. 在该模拟计算过程中, 同样采用图 1 中的材料结构. ZnMgO 势垒层厚度始终为 30 nm, 材料表面假设为肖特基接触 (肖特基电势为 0.8 eV). 在不同的 Mg 组分情形下, 模拟计算了异质结构中二维电子气的浓度分布, 计算获得的二维电子气密度如图 5 中实线所示, 图中的实心点为文献 [25] 报道的实验数据.

从图 5 可以看出, 理论计算结果与实际结果 [25] 符合得很好. 两者均呈线性关系, 显示出 ZnMgO/ZnO 异质结构中的二维电子气密度随着 Mg 组分的增大而增大. 这一结果与文献报道的 AlGaIn/GaN 基异质结构中的理论模拟与实验结果也完全一致, 并从 Al 组分对极化效应和能带结构的调制获得了较好的解释 [21]. 类似的, 在 ZnMgO/ZnO 基异质结构中, Mg 组分的增大将导致 ZnMgO/ZnO 异质结构中自发极化和压电极化效应的显著增强, 同时由于 MgO 的禁带宽度大于 ZnO 的禁带宽度,

导致 ZnMgO/ZnO 异质界面处导带偏移量显著增大, 从而显著降低量子阱的阱底能量, 因此导致二维电子气浓度的显著增加.

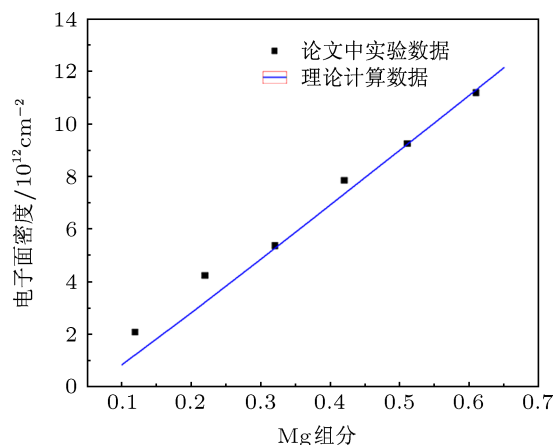


图5 不同 Mg 组分对 ZnMgO/ZnO 二维电子气密度影响 (图中实线为计算结果, 实心点为文献 [25] 中的实验结果). 其中, ZnMgO 势垒厚度为 30 nm, 材料表面为肖特基接触, 电势为 0.8 eV

以上模拟理论计算中并没有考虑 ZnMgO/ZnO 基异质结构中的一个重要参数, 即 ZnMgO 势垒层中的应变状态对计算结果的影响, 因为实际上, 即使不考虑应变的释放所导致材料结构与质量的变化对二维电子气性质的巨大影响, 压电极化的大小本身对整个极化电荷具有非常重要的贡献. 实际上, 在 AlGaIn/GaN 基异质结构中, 由于 GaN 衬底上 AlGaIn 垒层的应变临界厚度较小, 而实验中的实际薄膜生长厚度往往非常接近该临界值, 特别是对于较高 Al 组分的情形, 因此在 AlGaIn/GaN 基异质结构的二维电子气的模拟计算中其 AlGaIn 层的应变程度是一个非常重要的参数. 对 ZnMgO/ZnO 基异质结构而言, 应变的影响变得更为显著. 实际上, ZnMgO 中存在的巨大的压电极化效应导致了其 ZnMgO 垒层中的应变大小对二维电子气性能具有更为显著的影响 [16], 因此对 ZnMgO 垒层中应变大小的影响的研究具有更加重要的意义和价值, 也是研究组下一步需要继续开展的研究工作.

4 结论

论文采用一维 Poisson-Schrodinger 方程的自洽求解, 模拟计算了 ZnMgO/ZnO 异质结构中二维电子气的分布, 揭示了该二维电子气性质对 ZnMgO 势垒层厚度及 Mg 组分强烈的依赖关系. 研究发现该异质结构中 ZnMgO 势垒层厚度存在一最小临

界值: 当垒层厚度小于该临界值时, 二维电子气消失, 当其垒层厚度大于该临界值时, 其二维电子气密度随着该垒层厚度的增加而增大; 同时研究发现 ZnMgO 势垒层中 Mg 组分的增加将显著增强其二维电子气的行为, 导致二维电子气密度的明显增大;

论文对模拟计算获得的结果与相关文献报道的实验结果进行了比较, 从极化效应和能带结构的角度给出了合理的解释. 同时, 论文需要进一步的深化讨论 ZnMgO 势垒层应变大小等参数对二维电子气的影响, 以使理论计算模型更加接近实际的实情况.

- [1] Xia Y J, Guan Z S, Qin H C, Li W Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **40** 580 (in Chinese) [夏玉静, 管自生, 秦洪春, 李伟英 2011 物理学报 **40** 580]
- [2] Tang Z K 2005 *Acta Phys. Sin.* **34** 21 (in Chinese) [汤子康 2005 物理学报 **34** 21]
- [3] Chang Y Q, Ni S L, Long Y, Ye R C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5409 (in Chinese) [常永勤, 倪赛力, 龙毅, 叶荣昌 2006 物理学报 **55** 5409]
- [4] Sasa S, Hayafuji T, Kawasaki M, Koike K, Yano M, Inoue M 2007 *IEEE* **28** 543
- [5] Ohtomo A, Kawasaki M, Ohkubo, Koinuma H, Yasuda T, Segawa Y 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 980
- [6] Ye J D, Pannirselvam S, Lim S T, Bi J F, Sun X W, Lo G Q, Teo K L 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 111908
- [7] Ye J D, Lim S T, Michel B, Gu S L, Zheng Y D, Hark H T, Chennupati J, Sun X W, Kie L T 2012 *Scientific Reports* **2** 533
- [8] Kong Y C, Zheng Y D, Chu R M, Gu S L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1756 (in Chinese) [孔月婵, 郑有焯, 储荣明, 顾书林 2003 物理学报 **52** 1756]
- [9] Yu H T, Kevin F B 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 3730
- [10] Ma L, Wang Y, Yu Z P, Tian L L 2005 *Research & Progress of SSE Solid State Electronics* **25** 172 (in Chinese) [褚龙, 王燕, 余志平, 田立林 2005 固体电子学研究与进展 **25** 172]
- [11] Liu F, Wang T, Yao J Q 2006 *Science Technology and Engineering* **23** 4682 (in Chinese) [刘芳, 王涛, 姚建铨 2006 科学技术与工程 **23** 4682]
- [12] Zheng Z W, Shen B, Tang N, Zhang R, Shi Y, Zheng Y D, Gui Y S, Qiu Z J, Jiang C P, Guo S L, Chu Q H 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 596 (in Chinese) [郑泽伟, 沈波, 唐宁, 张荣, 施毅, 郑有焯, 桂永胜, 仇志军, 蒋春萍, 郭少令, 褚君浩 2004 物理学报 **53** 596]
- [13] Kong Y C, Zheng Y D, Zhou C H, Deng Y Z, Gu S L, Shen P, Zhang R, Han P, Jiang R L, Shi Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2320 (in Chinese) [孔月婵, 郑有焯, 周春红, 邓永楨, 顾书林, 沈波, 张荣, 韩平, 江若琏, 施毅 2004 物理学报 **53** 2320]
- [14] Liu H X, Lu F M, Wang Y H, Song D J, Wu Y 2011 *Journal of Xidian University (Natural Science Edition)* **38** 147 (in Chinese) [刘红侠, 卢凤铭, 王勇淮, 宋大建, 武毅 2011 西安电子科技大学学报(自然科学版) **38** 147]
- [15] Tampo H, Shibata H, Matsubara K, Yamada A, Fons P, Niki S 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 132113
- [16] Chen H, Gu S L, Liu J G, Ye J D, Tang K, Zhu S M, Zheng Y D 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 211906
- [17] Nakano M, Tsukazaki A, Ueno K, Gunji R Y, Ohtomo A, Fukumura T, Kawasaki M 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 052116
- [18] Park S H, Ahn D 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 253509
- [19] Chen X Y, Fang F, Ng A M C, Aleksandra B D, Cheah K W, Ling C C, Chan W K, Fong P W K, Lui H F, Surya C 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 084330
- [20] Wood C, Jena D 2008 *Polarization Effects in Semiconductors From Ab Initio Theory to Device Applications* (New York: Springer) p14–86
- [21] Kong Y C 2007 *Ph. D. Dissertation* (Nanjing: Nanjing University) (in Chinese) [孔月婵 2007 博士学位论文(南京: 南京大学)]
- [22] Tan I H, Snider G L, Chang L D, Hu E L 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 4071
- [23] Wang Y F, Tang L B 2010 *Infrared Technology* **32** 213 (in Chinese) [王忆锋, 唐利斌 2010 红外技术 **32** 213]
- [24] Yu D H, Tang H Z 2003 *Numerical Solution of Differential Equations* (Beijing: Science Press) p176–177 (in Chinese) [余德浩, 汤华中 2003 微分方程数值解法(北京: 北京科学出版社) 第 176—177 页]
- [25] Tampo H, Shibata H, Maejima K, Yamada A, Matsubara K 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 2104
- [26] Sasa S, Tamaki T, Koike K, Yano M, Inoue M 2008 *J. Phys.* **109** 012030

Two-dimensional electron Gas in ZnMgO/ZnO heterostructures*

Zhang Yang Gu Shu-Lin[†] Ye Jian-Dong Huang Shi-Min Gu Ran
Chen Bin Zhu Shun-Ming Zhen You-Dou

(Nanjing National Laboratory of Microstructures & Dept. of Electronic science and engineering, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

(Received 11 December 2012; revised manuscript received 1 April 2013)

Abstract

Based on the band structure and related theoretical model of two-dimensional electron gas (2DEG), the dependence of the distribution of 2DEG on the thickness of ZnMgO barrier and related Mg content in ZnMgO/ZnO heterostructures has been computed by self-consistently solving the coupled Schrodinger and Poisson equations. Computation results reveal a critical thickness of the ZnMgO barrier for 2DEG formation, with no 2DEG occurring as the barrier thickness is below the critical value. When the thickness is above the value, the density of the 2DEG increases linearly with the thickness of ZnMgO barrier and saturates finally. The density of the 2DEG also shows a strong dependence on the Mg content in the ZnMgO barrier, with an obvious increase obtained as the Mg content enhances. At the same time, we compare the computed results with experimental data reported in the references with a certain degree of consistence obtained. Explanations and discussions of the above comparison have been presented in the study from the views of polarization effects and band structure.

Keywords: ZnO, 2DEG, heterostructure, theoretical calculation

PACS: 02.70.Bf, 73.61.Ga, 77.55.hf

DOI: 10.7498/aps.62.150202

* Project Research supported by the State Key Program for Basic Research of China(Grant No. 2011CB302003), the National Natural Science Foundation of China(Grant Nos. 61025020, 60990312, 61274058), the Basic Research Program of Jiangsu Province, China (Grant No. BK2011437), and the Priority Academic Program Development of Jiangsu Higher Education Institutions.

[†] Corresponding author. E-mail: slgu@nju.edu.cn