

N极性GaN/AlGa<sub>N</sub>异质结二维电子气模拟\*王现彬<sup>1)2)</sup> 赵正平<sup>1)2)</sup> 冯志红<sup>2)†</sup>

1)(河北工业大学信息工程学院, 天津 300130)

2)(专用集成电路国家级重点实验室, 石家庄 050051)

(2013年12月30日收到; 2014年1月16日收到修改稿)

通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 较系统地研究了Ga<sub>N</sub>沟道层、AlGa<sub>N</sub>背势垒层、Si掺杂和Al<sub>N</sub>插入层对N极性Ga<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub>异质结中二维电子气(2DEG)的影响. 分析表明, Ga<sub>N</sub>沟道层厚度、AlGa<sub>N</sub>背势垒层厚度及Al组分变大都能一定程度上提高二维电子气面密度, AlGa<sub>N</sub>背势垒层的厚度和Al组分变大也可提高二维电子气限阈性, 且不同的Si掺杂形式对二维电子气的影响也有差异, 而Al<sub>N</sub>插入层在提高器件二维电子气面密度、限阈性等方面表现都较为突出. 在模拟中Ga<sub>N</sub>沟道层厚度小于5 nm时无法形成二维电子气, 超过20 nm后二维电子气面密度趋于饱和, 而AlGa<sub>N</sub>背势垒厚度超过40 nm后二维电子气也有饱和趋势. 对均匀掺杂和delta掺杂而言AlGa<sub>N</sub>背势垒层Si掺杂浓度超过 $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 后2DEG面密度开始饱和. 而厚度为2 nm Al<sub>N</sub>插入层的引入会使2DEG面密度从无Al<sub>N</sub>插入层时的 $0.93 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 提高到 $1.17 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ .

关键词: N极性, Ga<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub>异质结, 二维电子气, 限阈性

PACS: 02.70.Bf, 73.43.Cd, 73.61.Ey, 73.40.Kp

DOI: 10.7498/aps.63.080202

## 1 引言

AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>异质结材料特性极佳, 如具有高击穿电场( $5 \times 10^6 \text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}$ )、高热传导率( $1.3 \text{ W}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ )、高峰值速率( $3 \times 10^7 \text{ cm/s}$ )及高饱和速率( $2.5 \times 10^7 \text{ cm/s}$ )等特点, 同时由于AlGa<sub>N</sub>和Ga<sub>N</sub>具有很强的自发极化和压电极化效应, 非故意掺杂情况下可以在AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>异质结的三角形势阱中形成迁移率高达 $10^3 \text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ 及面密度为 $10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 数量级的二维电子气(2DEG), 促使Ga<sub>N</sub>基高电子迁移率晶体管(HEMT)以高频及大功率特性在微波频段越来越具有应用前景<sup>[1,2]</sup>. 2DEG面密度及势阱对沟道电子的限阈性直接决定了Ga<sub>N</sub>基HEMT器件的工作频率及其功率特性, 很多报道对此展开了相关研究<sup>[3-6]</sup>, 其中一部分是模拟研究. 通过模拟分析可以进一步研究影响2DEG的机理, 为器件仿真建

模及设计制造提供理论参考, 同时通过模拟研究也可以进一步优化器件结构及HEMT性能. 文献<sup>[3]</sup>通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 理论分析了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 势垒层中的Al组分 $x$ 对2DEG分布、面密度及子带中电子分布等特征的影响, 随后另文从理论角度研究了弛豫度及AlGa<sub>N</sub>势垒层掺杂对2DEG等相关特征的影响<sup>[4]</sup>, 此外势垒层厚度、插入层等都会对2DEG产生作用<sup>[5,6]</sup>. 这些相关文献中研究的对象都是Ga极性(Ga-polar, Ga-face) Ga<sub>N</sub>基HEMT, 而对N极性(N-polar, N-face) Ga<sub>N</sub>基HEMT的2DEG相关理论研究尚未见系统报道.

所谓N-polar Ga<sub>N</sub>是指沿着 $[000\bar{1}]$ 方向生长的Ga<sub>N</sub><sup>[6]</sup>. N-polar Ga<sub>N</sub>基HEMT中的自发极化( $P_{\text{sp}}$ )和压电极化( $P_{\text{pe}}$ )方向与Ga-polar Ga<sub>N</sub>基HEMT的极化方向相差 $180^\circ$ . 由于极性完全相反, 这为N-polar Ga<sub>N</sub>基HEMT带来了一些与Ga-polar HEMT完全不一样的特性, 如N-

\* 国家自然科学基金(批准号: 61306113)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: 917vv@163.com

polar HEMT 中 2DEG 位于 GaN/AlGa<sub>N</sub> 异质结中 AlGa<sub>N</sub> 之上的 GaN 中. 此外, 由于极性相反, N-polar GaN 基 HEMT 器件与 Ga-polar 器件相比具有更低的欧姆接触电阻、更好的 2DEG 限阈性及更强的短沟道效应抑制能力等天然优势<sup>[7-9]</sup>, 使之成为了一种极具发展潜力的半导体材料.

N-polar GaN 基 HEMT 研究起步较晚, 随着 N-polar 材料制备及器件工艺水平的逐步提高, 直到近年来才有一些 N-polar 材料与器件的研究报道. 在对 N-polar GaN 基材料进行优化的同时, 研究者采用一些先进的制作工艺技术, 如新型绝缘层、源漏凹槽、自对准与 InN/InGa<sub>N</sub> 欧姆再生、长颈 T 型栅、双凹栅槽等, 使 N-polar GaN 基 HEMT 器件性能达到了一个新水平. 最新报道的 N-polar GaN 基 HEMT 最大功率截止频率  $f_{\max}$  达到了 400 GHz<sup>[7]</sup>, 最大增益截止频率  $f_T$  为 275 GHz<sup>[8]</sup>, 但对 N-polar HEMT 的 2DEG 面密度、分布及沟道势阱对其限阈性缺少系统的理论研究. 本文通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 结合与 Ga-polar GaN 器件中极性方向完全相反的自发极化和压电极化效应, 利用能带图、异质结内电场、2DEG 面密度及体电子浓度等分析了 GaN 沟道层、AlGa<sub>N</sub> 背势垒层、Si 掺杂及 AlN 插入层对 N-polar GaN/AlGa<sub>N</sub> 异质结中的 2DEG 面密度及限阈性的影响. 研究结果为 N-polar GaN 基 HEMT 设计提供了重要的材料物理机制.

## 2 N-polar GaN/AlGa<sub>N</sub> 异质结的薛定谔方程和泊松方程自洽求解

N-polar GaN 材料沿  $[000\bar{1}]$  方向生长, 与常规 Ga-polar 材料方向正好相反, 造成 N-polar 材料与器件在物理及化学特性方面与 Ga-polar 材料与器件存在明显区别. Ga-polar 与 N-polar 材料不同的极性也引起了两类材料在自发极化效应和压电极化效应方面的差异, 即 N-polar 材料中  $P_{\text{sp}}$  及  $P_{\text{pe}}$  与 Ga-polar 材料相差  $180^\circ$ . 本文模拟中所用的 N-polar HEMT 结构如图 1 所示, 在图 1 中也标出了  $P_{\text{sp}}$  和  $P_{\text{pe}}$  的方向. 在未掺杂 GaN 和 AlGa<sub>N</sub> 的界面处由于极化突变, 从而在靠近 GaN/AlGa<sub>N</sub> 异质结的 AlGa<sub>N</sub> 中产生正的极化面电荷, 其密度为<sup>[6]</sup>

$$\begin{aligned} +\sigma &= P(\text{top}) - P(\text{bottom}) \\ &= [P_{\text{sp}}(\text{top}) + P_{\text{pe}}(\text{top})] \end{aligned}$$

$$- [P_{\text{sp}}(\text{bottom}) + P_{\text{pe}}(\text{bottom})], \quad (1)$$

其中  $P$  为  $P_{\text{sp}}$  和  $P_{\text{pe}}$  的和.

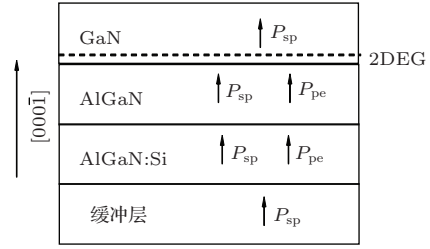


图 1 N-polar GaN 基 HEMT 器件材料结构

由于极化面电荷为正, 故在未掺杂的 GaN 中靠近异质结处会吸引负电荷累积, 从而形成 2DEG. 在分析不同参数对 2DEG 行为特性的影响时, 为了突出重点会对该结构进行不同的取舍.

为了分析 N-polar GaN 基 HEMT 的 2DEG 特性, 首先自洽求解了薛定谔方程和泊松方程. 在有效质量近似下的一维单电子薛定谔方程式为<sup>[3]</sup>

$$-\frac{\hbar}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m^*} \frac{d}{dz} \right) \psi(z) + [V(z) - E] \psi(z) = 0, \quad (2)$$

其中  $\hbar$ ,  $m^*$ ,  $\psi(z)$ ,  $E$ ,  $V(z)$  分别是归一化普朗克常量、电子有效质量、波函数、本征电子能量和本征电子势能.

一维泊松方程为<sup>[3]</sup>

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \left( \varepsilon(z) \frac{d}{dz} \right) \phi(z) \\ = \frac{-q[\sigma(z) + p(z) + N_D^+(z) - n(z) - N_A^-(z)]}{\varepsilon_0}, \quad (3) \end{aligned}$$

其中  $\varepsilon_0$  为真空介电常数;  $\varepsilon(z)$  为与位置有关的相对介电常数;  $\phi(z)$  为静电势;  $n(z)$ ,  $N_A^-(z)$ ,  $\sigma(z)$ ,  $p(z)$ ,  $N_D^+(z)$ ,  $q$  分别为自由电子浓度、电离受主浓度、极化电荷浓度、自由空穴密度、电离施主浓度和电子电荷.

$V(z)$  和  $\phi(z)$  的关系为

$$V(z) + q\phi(z) = \Delta E_c(z), \quad (4)$$

其中  $\Delta E_c(z)$  为导带阶, 即异质结两种材料的导带能量偏移值.

而  $\psi(z)$  和  $n(z)$  的关系为

$$\begin{aligned} n(z) &= \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^m \psi_i(z) \psi_i^*(z) \\ &\times \int_{E_i}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/(kT)}} dE, \quad (5) \end{aligned}$$

其中  $k$  为玻尔兹曼常数,  $T$  为温度,  $E_F$  为费米能级,  $E_i$  为第  $i$  个激发态能级,  $\psi_i(z)$  为第  $i$  个激发态的波

函数,  $\psi_i^*(z)$  是  $\psi_i(z)$  的共轭,  $m$  为阱内电子所占的激发态数.

模拟时采用未掺杂的 GaN 沟道层和  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  背势垒层或 AlN 插入层所形成的异质结界面的电位移矢量连续作为边界条件<sup>[5]</sup>, 即

$$P_1 - P_2 = \epsilon_2 E_2 - \epsilon_1 E_1, \quad (6)$$

其中  $P_1, P_2$  分别为异质结两侧各自的  $P_{\text{sp}}$  和  $P_{\text{pe}}$  的叠加, 而  $E_1$  和  $E_2$  则为异质结两侧的电场强度.

(2)–(6) 式为采用有限差分法自洽求解薛定谔方程和泊松方程所用到的公式. 先给定一个电子势能  $V(z)$ , 利用 (2) 式计算  $\psi(z)$  和  $E_i$ , 再利用 (5) 式计算电子浓度  $n(z)$ . 将  $n(z)$  及相应的电离受主浓度、极化电荷浓度、自由空穴密度、电离施主浓度及介电常数等参数代入 (3) 式计算出  $\phi(z)$ , 再利用 (4) 式计算出新的  $V(z)$ , 按照此方法进行迭代, 每次都可以得到一个新的  $V(z)$  和  $n(z)$ , 比较前后两次导带底能量之差  $\Delta E_c$  是否小于设定值, 若满足则迭代结束, 最终由  $V(z)$  和  $n(z)$  来确定能带图、2DEG 浓度等参数.

### 3 模拟结果与分析

#### 3.1 GaN 沟道层对 2DEG 特性的影响

N-polar 与 Ga-polar GaN 基 HEMT 相比较, 一个最大的结构特征是 2DEG 位于 AlGaN 背势垒层上面的 GaN 中, 这为器件特性带来了诸多好处, 如可以实现更小的欧姆接触, 更容易提高器件栅长与沟道的高宽比等. 基于此首先模拟研究了 N-polar GaN 基 HEMT 中 GaN 沟道层对 2DEG 的影响. 所用的 HEMT 材料结构为 GaN 沟道层/AlGaN 背势垒层/GaN 缓冲层, 在模拟中  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  势垒层设置成 30 nm, Al 组分  $x = 0.25$ .

图 2 给出了 N-polar HEMT 器件内部电场  $E$  及 GaN 沟道层中 2DEG 面密度随 GaN 沟道层厚度变化情况, 模拟时忽略了 GaN 沟道层的弛豫. 由图 2(a) 可以看出, 当 GaN 沟道层厚度为 5 nm 时 2DEG 沟道内的电场之差为 0, 随着 GaN 沟道层厚度增大, 电场之差也逐渐变大, 其原因是随着 GaN 厚度增大, 极化效应逐渐变强, 导致极化电场变大. 而在 AlGaN 背势垒层/GaN 缓冲层异质结中极化场没有发生变化, 原因是这两层在模拟中并未改变参数.

图 2(b) 给出了 2DEG 面密度随 GaN 沟道层厚度变化关系, 可以看出当 GaN 沟道层厚度小于 5 nm 时 2DEG 面密度为 0, 并未形成 2DEG, 随着 GaN 沟道层厚度变大, 2DEG 面密度也逐渐增大. 可以做如下解释: 2DEG 沟道内的极化电场会随 GaN 沟道层厚度变大而变大, 产生更多电子, 从而增加了 2DEG 面密度. 而当 GaN 厚度超过 20 nm 后, 2DEG 面密度增势变缓, 原因可以归结为表面态: 极化场随着 GaN 厚度变大会促使表面态能级逐渐高于费米能级并电离来为 2DEG 提供电子, 当表面态能级全部位于费米能级之上后, 电子全部释放, 从而导致 2DEG 面密度趋于稳定<sup>[10]</sup>. 若考虑弛豫情况, 则 2DEG 面密度会随 GaN 沟道层厚度增大而降低, 与此同时随着弛豫的产生致使异质结处线位错密度变大并影响 2DEG 的迁移率.

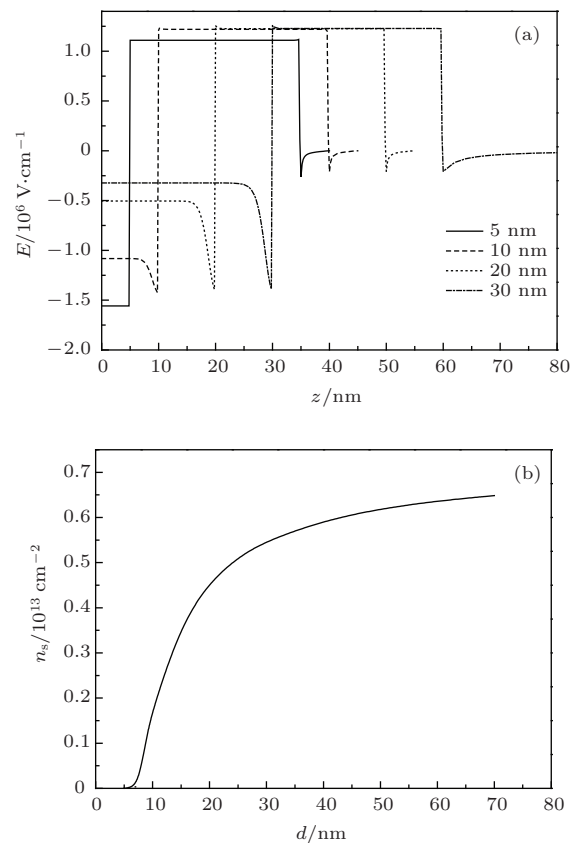


图 2 GaN 沟道层对 HEMT 内电场  $E$  及 2DEG 面密度的影响 (a) 电场  $E$  随 GaN 沟道层厚度变化; (b) 2DEG 面密度随 GaN 沟道层厚度变化

#### 3.2 背势垒层对 2DEG 特性的影响

N-polar GaN 基 HEMT 与传统的 Ga-polar HEMT 相比, 另一个显著特征是具有天然背势垒层. 文献<sup>[5]</sup> 仿真并实验验证了 Ga-polar GaN 基 HEMT 中背势垒对主沟道及寄生沟道内 2DEG 的

影响, 仿真与实验测试结果表明, AlGa<sub>N</sub>背势垒层Al组分及其厚度的增加确实可以提高主沟道2DEG限阈性, 但主沟道内的2DEG面密度却有所降低, 伴随而来的是寄生沟道内2DEG面密度增大, 这就需在设计具有AlGa<sub>N</sub>背势垒的双异质结Ga-polar GaN基HEMT时要折中考虑. 同时人为引入AlGa<sub>N</sub>背势垒也会提高Ga-polar GaN基HEMT器件结构的复杂度并导致器件导热性变差, 从而会降低器件性能, 而在N-polar GaN基HEMT中, AlGa<sub>N</sub>背势垒是天然存在的. 故深入研究N-polar GaN基HEMT中AlGa<sub>N</sub>天然背势垒层厚度及Al组分变化对2DEG限阈性及面密度的影响, 对实际N-polar HEMT器件设计具有指导意义.

在模拟中所用的HEMT结构为GaN沟道层/AlGa<sub>N</sub>背势垒层/GaN缓冲层, GaN沟道层设置成25 nm. 图3给出了能带图导带底及2DEG面密度随Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>N天然背势垒厚度的变化关系. 由图3(a)可见, 随着Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>N背势垒层厚度增加, 其极化效应增强, 导致三角形势阱变深, 提高了2DEG的限阈性; 同时极化效应增强引起固定极化电荷密度增大, 并吸引更多电子聚集在GaN沟道层的三角势阱中, 使2DEG面密度进一步提高, Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>N厚度为20 nm时其2DEG面密度为 $0.39 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , 而当Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>N厚度提高到60 nm后其2DEG面密度变为 $0.77 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , 提高了近一倍, 具体结果如图3(b)所示. 在图3(b)中还可以看出, 势垒层厚度在未达到40 nm之前2DEG面密度随背势垒厚度近乎线性增大, 而超过40 nm后2DEG面密度增势变缓. 原因是随着AlGa<sub>N</sub>背势垒厚度增加, 极化效应进一步变大, 但由表面态提供的电子逐渐趋于饱和, 导致2DEG面密度增势降低并出现饱和趋势.

图4给出了N-polar GaN基HEMT中Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N背势垒层的Al组分 $x$ 变化对体电子浓度分布及2DEG面密度的影响. 所用的器件结构为: GaN沟道层/AlGa<sub>N</sub>背势垒层/GaN缓冲层, GaN沟道层宽度为25 nm, AlGa<sub>N</sub>背势垒层设置成30 nm, Al组分 $x$ 在0.05—0.5范围内变化.

由图4(a)可以看出, 随着Al组分 $x$ 的变大, GaN沟道层内的体电子浓度逐渐变大, 其峰值位置也逐渐靠近GaN沟道层和AlGa<sub>N</sub>背势垒层所构成的异质界面. 当Al组分 $x$ 从0.15变化到0.45时, 体电子峰值浓度从 $0.59 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 增加到 $8.44 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , 而峰值的位置也从距表面

23.6 nm处移位到距表面24.2 nm处. 在图4(a)中不同Al组分所对应的体电子浓度分布图的半高宽(FWHM)随Al组分的增大而变小, 表明2DEG限阈性随Al组分的增大而增强, 并使体电子浓度的峰值逐渐靠近异质结, 这也会引起2DEG迁移率进一步提高, 同时一定程度上可以抑制电流崩塌[5].

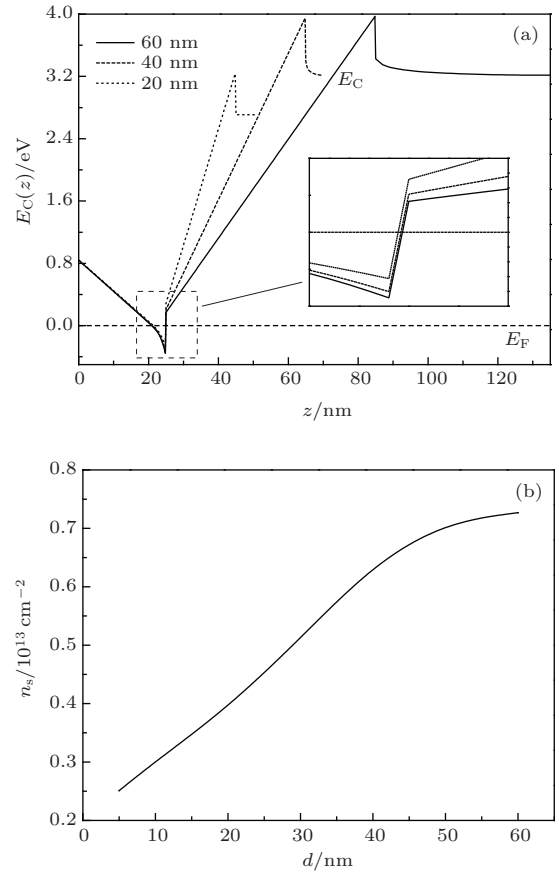


图3 能带图导带底和2DEG面密度随AlGa<sub>N</sub>天然背势垒厚度变换关系 (a) 能带图导带底与AlGa<sub>N</sub>背势垒厚度关系; (b)2DEG面密度与AlGa<sub>N</sub>背势垒厚度关系

图4(b)给出了Al组分 $x$ 变大时2DEG面密度变化情况. 由图可见, 随着 $x$ 的变大, 2DEG面密度逐渐增大, 原因在于Al组分变大使极化效应逐渐增强, 势阱变深并吸引更多电子, 从而提高了2DEG面密度. 实际中Al组分 $x$ 变大会引起GaN和AlGa<sub>N</sub>更大晶格失配, 造成异质结界面粗糙且材料缺陷变多, 严重影响2DEG的迁移率并限制器件的高频及大功率特性. 在Ga-polar GaN基HEMT中背势垒的引入会带来主沟道2DEG面密度减小而寄生沟道内2DEG面密度增大这一不利影响, 而N-polar GaN基HEMT存在一个天然的背势垒, 但只有主沟道而并无寄生沟道, 故不存在对2DEG面密度及限阈性的折中选择问题.

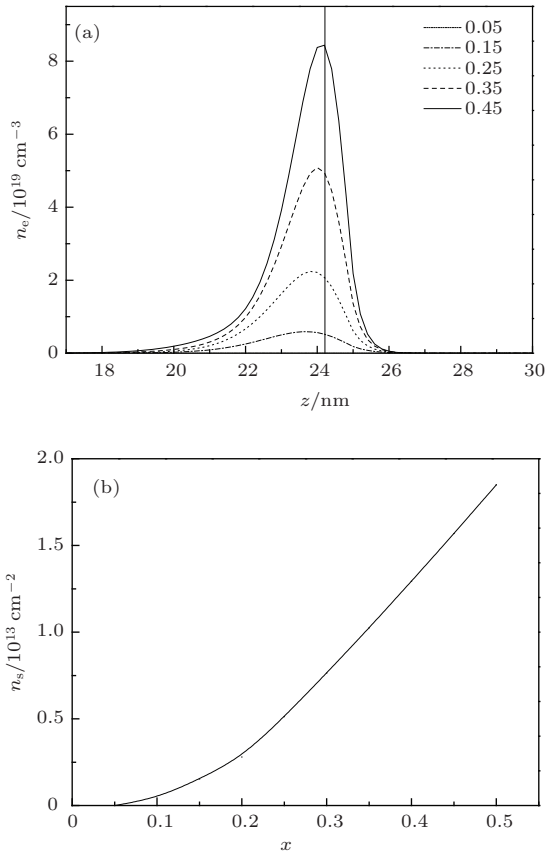


图4 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N背势垒Al组分x变化对2DEG限制性与2DEG面密度影响 (a) Al组分x对体电子浓度分布影响; (b) Al组分x对2DEG面密度的影响

### 3.3 AlGa<sub>N</sub>背势垒层Si掺杂对2DEG特性的影响

在制备N-polar HEMT器件时需要在异质衬底上生长缓冲层来保证材料质量, 同时为了给2DEG提供更多电子并保证Ga<sub>N</sub>沟道层中的2DEG不受环境和后续工艺干扰, 在N-polar Ga<sub>N</sub>基HEMT中一般都进行AlGa<sub>N</sub>背势垒Si掺杂<sup>[11]</sup>. 上述措施势必会影响材料体系中的极化效应等因素, 最终会对2DEG面密度产生影响. 当只考虑理想情况下的N-polar Ga<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub>异质结, 假设Ga<sub>N</sub>和AlGa<sub>N</sub>背势垒厚度都为30 nm, Al组分选为0.25, 通过自洽求解薛定谔和泊松方程, 其对应的2DEG面密度为 $1.11 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ; 若考虑缓冲层等的影响, 2DEG面密度变成 $0.55 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . 主要原因是缓冲层等因素弱化了极化效应, 从而降低了2DEG面密度, 而在实际器件中2DEG面密度会下降更多. 当对带有缓冲层的AlGa<sub>N</sub>背势垒进行 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 级Si掺杂时, 2DEG面密度达到 $0.702 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , 与考虑缓冲层影响且不进行Si掺杂的情况相比, 2DEG面密度提高了将近30%.

N-polar材料制备较为困难且影响因素较多, 从而使N-polar器件中背势垒Si掺杂成为提高2DEG面密度很关键的一个环节. 对背势垒掺杂中的均匀掺杂和delta掺杂对2DEG面密度的影响进行了对比研究. 所采用的N-polar HEMT结构为Ga<sub>N</sub>沟道层/AlGa<sub>N</sub>隔离层/AlGa<sub>N</sub>背势垒层/Ga<sub>N</sub>缓冲层. 其中Ga<sub>N</sub>沟道层为25 nm, Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>N隔离层和背势垒层分别为10和20 nm, 并分别对Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>N背势垒层进行均匀掺杂和delta掺杂. 在delta掺杂中共选择了4个周期, 每个周期由2 nm的Si掺杂层和3 nm的未掺杂层构成. 图5给出了均匀掺杂和delta掺杂在不同掺杂浓度下的2DEG面密度模拟结果. 由图5可以看出, 对两种掺杂形式而言, 当掺杂浓度低于 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时2DEG增势缓慢, 原因是背势垒层Si掺杂浓度的数量级太低, 其为2DEG提供的电子不足以引起2DEG面密度大幅度变化; 掺杂浓度高于 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 后2DEG面密度增势变快, 这是因为随着掺杂浓度数量级的进一步变大, 为2DEG提供的电子的数量级亦随之变大, 导致2DEG面密度增幅变快; 而当掺杂浓度高于 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 后, 2DEG整体有饱和趋势. 解释如下: 掺杂浓度增大可以为2DEG提供更多的电子来源, 但Ga<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub>异质结中的极化强度变化较小, 由极化效应所产生的2DEG面密度几乎为定值, 最终造成2DEG面密度趋于饱和. 再分析均匀掺杂和delta掺杂, 可以看出均匀掺杂时, 当掺杂浓度高于 $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 后2DEG面密度开始剧增, 当掺杂浓度高于 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 后2DEG面密度又趋于饱和; 而delta掺杂时两个相应拐点的值分别为 $1 \times 10^{18}$ 和 $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , 两者出现差别的原因在于对delta掺杂而言, 在一个掺杂周期内60%的部分是未掺杂层, 这造成delta掺杂时的整体掺杂浓度低于相同情况下的均匀掺杂, 从而出现了均匀掺杂时的早增长及早饱和现象. 而delta掺杂可以提高材料质量、抑制材料缺陷, 并能在一定程度上提高2DEG迁移率<sup>[12]</sup>.

### 3.4 AlN插入层对2DEG特性的影响

提高器件的2DEG面密度和迁移率是提高器件工作频率及功率特性的关键因素. 由前面分析可知, 在N-polar Ga<sub>N</sub>基HEMT中, 通过增大Ga<sub>N</sub>沟道层厚度、AlGa<sub>N</sub>背势垒Al组分x及其厚度可以一定程度上提高2DEG面密度, 但若超过一定限

度会影响器件性能: 若 GaN 沟道层厚度过大, 会严重影响器件的栅长与沟道的高宽比并弱化栅控能力, 从而使短沟道效应影响加剧; 若 AlGa<sub>x</sub>N 背势垒层的 Al 组分  $x$  过高, 虽然一定程度上可以提高 2DEG 面密度, 但会减小沟道迁移率; 同样 AlGa<sub>x</sub>N 背势垒变厚会对 2DEG 面密度有贡献, 但若过厚会造成应变弛豫, 从而减小极化效应, 最终会降低 2DEG 面密度. 故对于三者应有一个适度的选择. 在 Ga-polar GaN 基 HEMT 中引入 AlN 插入层能够提升器件性能, 而对于 N-polar GaN 基 HEMT 中 AlN 插入层的作用也是一个值得分析的问题.

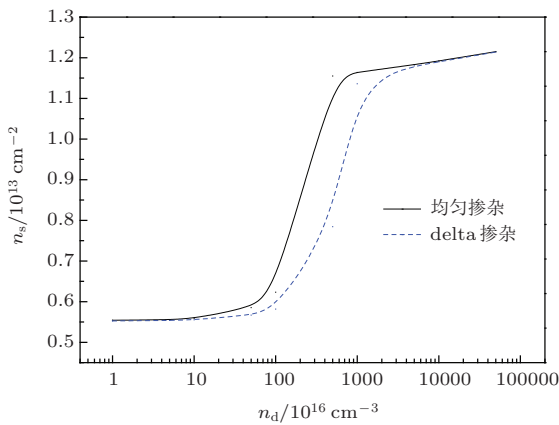


图5 均匀掺杂及 delta 掺杂时掺杂浓度与 2DEG 面密度关系

模拟研究了 N-polar GaN 基 HEMT 中 AlN 插入层的引入对器件的 2DEG 面密度、限阈性及沟道迁移率等的影响. 采用图 1 所示结构, 将 AlN 薄层插入到 GaN 沟道层和 AlGa<sub>x</sub>N 隔离层之间. 其中 GaN 沟道层厚度设置成 25 nm, AlN 插入层在 0—5 nm 间变化, Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 隔离层厚度为 10 nm, Al 组分  $x = 0.25$ , 20 nm 厚的 Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>N 背势垒层进行浓度为  $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  的 Si 均匀掺杂.

图 6(a) 给出了 AlN 插入层厚度从 0 增加到 5 nm 时 2DEG 面密度变化情况, 可以看出, 随着 AlN 插入薄层厚度变大, 2DEG 面密度也随之增加. 无 AlN 插入层时, 其 2DEG 面密度为  $0.93 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , 插入 2 nm 的 AlN 薄层后其对应的 2DEG 面密度变为  $1.17 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . 当 AlN 插入层厚度超过 3 nm 后 2DEG 面密度增势加快, 原因是随着 AlN 插入薄层的变厚, 极化效应随之变大, 最终导致 2DEG 面密度增势变快. 同时当 AlN 过厚时会导致应变弛豫及材料质量变差, 从而会降低 2DEG 面密度及迁移率, 故实际中都采用 1—2 nm 的 AlN 薄层作为插入层使用 [9].

图 6(b) 给出了无 AlN 插入层及 2 nm AlN 插入层的 N-polar HEMT 所对应的能带及体电子浓度分布, 可以看出, 插入 AlN 薄层后其体电子浓度略有增大, 对比两种情况下的体电子浓度分布图的 FWHM 可以看出, AlN 插入层的引入进一步提高了 2DEG 的限阈性. 在 25 nm 处是 GaN 沟道层和 AlN 插入层或 AlGa<sub>x</sub>N 隔离层所构成的 GaN/AlN(AlGa<sub>x</sub>N) 异质结的交界面, 对比图 6(b) 中两图在 25 nm 以上处的体电子浓度分布可以看出, 体电子分布向 AlN 插入层或 AlGa<sub>x</sub>N 隔离层都有一定的延伸, 但在 2 nm AlN 插入层存在的情况下其延伸距离更短. 表明 AlN 插入层会在一定程度上对体电子进行隔离, 该现象首先体现出了 AlN 插入层会提高 2DEG 限阈性, 其次避免体电子进入 AlGa<sub>x</sub>N 层, 从而可以降低由于电子波函数进入 AlGa<sub>x</sub>N 而引起的合金无序散射, 进一步提高 2DEG 电子迁移率.

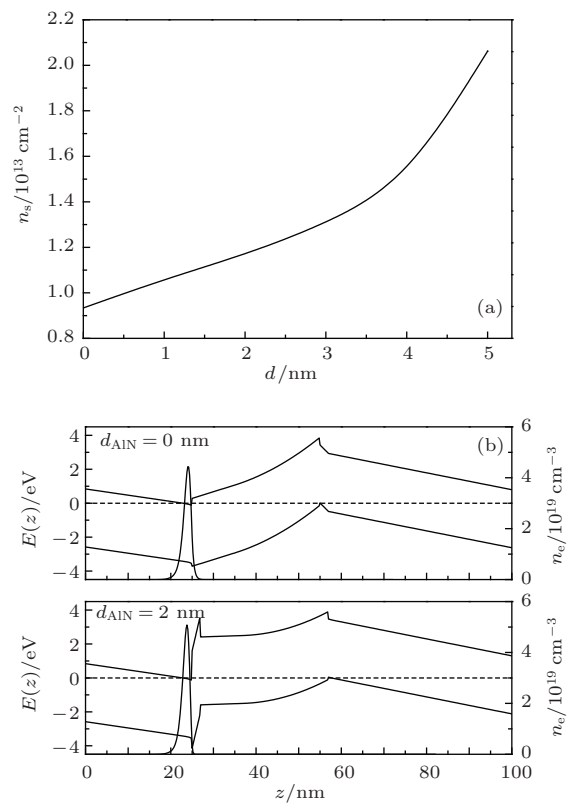


图6 AlN 插入层对 2DEG 面密度影响及对应的 N-polar HEMT 能带图和体电子浓度分布 (a) AlN 插入层厚度变化对 2DEG 面密度的影响; (b) 0 及 2 nm AlN 插入层时肖特基接触下的能带图和体电子浓度分布

## 4 结 论

本文通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 较系统地研究了 GaN 沟道层、AlGa<sub>x</sub>N 背势垒层、Si 掺

杂和 AlN 插入层对 N-polar GaN/AlGaIn 异质结中 2DEG 的影响. 分析表明, GaN 沟道层厚度、AlGaIn 背势垒层厚度及 Al 组分变大都能一定程度上提高二维电子气面密度, 且 AlGaIn 背势垒层的 Al 组分和厚度变大可提高 2DEG 限阈性, 同时不同的背势垒 Si 掺杂会对 2DEG 产生不同的影响, 而 AlN 插入层在提高器件 2DEG 面密度、限阈性及沟道迁移率等方面表现都较为突出. 但 GaN 沟道层厚度过大会降低器件栅长与沟道的高宽比, 引起短沟道效应, 而 AlGaIn 背势垒层 Al 组分及厚度超过限制会降低 2DEG 面密度及迁移率. 在模拟中当 GaN 沟道层厚度小于 5 nm 时无法形成 2DEG, 超过 20 nm 后 2DEG 面密度趋于饱和, 而 AlGaIn 背势垒厚度超过 40 nm 后也有饱和趋势, 对均匀掺杂和 delta 掺杂而言 AlGaIn 背势垒层 Si 掺杂浓度超过  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  后 2DEG 面密度开始饱和. 而厚度为 2 nm AlN 插入层的引入会使 2DEG 面密度从无 AlN 插入层时的  $0.93 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  提高到  $1.17 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . 该计算模拟结果为 N-polar GaN 基 HEMT 设计提供了重要的材料物理机制.

#### 参考文献

- [1] Xie G, Tang C, Wang T, Guo Q, Zhang B, Sheng K, Ng W T 2013 *Chin. Phys. B* **22** 026103
- [2] Kong X, Wei K, Liu G G, Liu X Y 2012 *Chin. Phys. B* **21** 128501
- [3] Kong Y C, Zheng Y D, Chu R M, Gu S L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1756 (in Chinese)[孔月婵, 郑有焘, 储荣明, 顾书林 2003 物理学报 **52** 1756]
- [4] 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, 郑有焘, 周春红, 邓永楨, 顾书林, 沈波, 张荣, 韩平, 江若璉, 施毅 2004 物理学报 **53** 2320]
- [5] Zhang J C, Zheng P T, Dong Z D, Duan H T, Ni J Y, Zhang J F, Hao Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3409 (in Chinese)[张进成, 郑鹏天, 董作典, 段焕涛, 倪金玉, 张金凤, 郝跃 2009 物理学报 **58** 3409]
- [6] Ambacher O, Smart J, Shealy J R, Weimann N G 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 3222
- [7] Denninghoff D, Lu J, Laurent M, Ahmadi E 2012 *Proceedings of the 70th Device Research Conference* University Park, TX, USA, June 18–20, 2012 p151
- [8] Nidhi, Dasgupta S, Lu J, Speck J S, Mishra U K 2012 *Elec. Dev. Lett.* **33** 961
- [9] Kolluri S, Keller S, Brown D, Gupta G 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 119902
- [10] Zhang Y, Gu S L, Ye J D, Huang S M, Gu R, Chen B, Zhu S M, Zheng Y D 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 150202 (in Chinese)[张阳, 顾书林, 叶建东, 黄时敏, 顾然, 陈斌, 朱顺明, 郑有焘 2013 物理学报 **62** 150202]
- [11] Rajan S, Chini A, Wong M H, Speck J S, Mishra U K 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 044501
- [12] Li T, Wang H B, Liu J P, Niu N H, Zhang N G, Xing Y H, Han J, Liu Y, Gao G, Shen G D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1036

# Simulation study of two-dimensional electron gas in N-polar GaN/AlGa<sub>N</sub> heterostructure\*

Wang Xian-Bin<sup>1)2)</sup> Zhao Zheng-Ping<sup>1)2)</sup> Feng Zhi-Hong<sup>2)†</sup>

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

2) (National Key Laboratory of ASIC, Shijiazhuang 050051, China)

( Received 30 December 2013; revised manuscript received 16 January 2014 )

## Abstract

By the self-consistent solution of the Schrödinger and poisson equations, the effects of GaN channel layer, AlGa<sub>N</sub> back barrier layer with and without Si doping and AlN interlayer on two-dimensional electron gas in N-polar GaN/AlGa<sub>N</sub> heterostructure are systematically studied. The results indicate that the increases of the thickness values of GaN channel layer and AlGa<sub>N</sub> back barrier layer and Al content value can improve the density of 2DEG to a certain degree, and the influences of different Si doping forms on 2DEG sheet density are not the same, also the confinement of 2DEG could be strengthened by increasing Al content value and thickness value of the AlGa<sub>N</sub> barrier layer. The AlN interlayer is a comparatively outstanding one in improving the performance of the 2DEG such as the 2DEG sheet density and confinement. When GaN channel layer thickness is less than 5 nm, there is no 2DEG in the simulation, when it exceeds 20 nm the 2DEG sheet density tends to be saturated. 2DEG has a tendency to be saturated when the thickness value of AlGa<sub>N</sub> back barrier is more than 40 nm. 2DEG sheet densities with uniform doping and delta doping in AlGa<sub>N</sub> back barrier are saturated when the doping concentration is more than  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . The 2DEG sheet density could be increased from  $0.93 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  without AlN interlayer to  $1.17 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  with 2 nm AlN interlayer.

**Keywords:** N-polar, GaN/AlGa<sub>N</sub> heterostructure, two-dimensional electron gas, confinement

**PACS:** 02.70.Bf, 73.43.Cd, 73.61.Ey, 73.40.Kp

**DOI:** [10.7498/aps.63.080202](https://doi.org/10.7498/aps.63.080202)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61306113).

† Corresponding author. E-mail: [917vv@163.com](mailto:917vv@163.com)